



Сборник

работ студентов

НИУ ИТМО,
победителей конкурса грантов
Правительства Санкт-Петербурга

Санкт-Петербург
2013

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ,
МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

Сборник работ студентов НИУ ИТМО,
победителей конкурса грантов
Правительства Санкт-Петербурга

Санкт-Петербург
2013 г.

Сборник работ студентов НИУ ИТМО, победителей конкурса грантов правительства Санкт-Петербурга / Под. ред. В.О. Никифорова. – СПб.: НИУ ИТМО, 2013. – 239 с.

Сборник содержит работы студентов НИУ ИТМО, удостоенных премии правительства Санкт-Петербурга, победителей конкурса грантов для студентов и аспирантов вузов, отраслевых и академических институтов, расположенных на территории Санкт-Петербурга. Научные отчеты по результатам выполнения грантов издаются с целью демонстрации достижений студентов университета, стимулирования их участия в научных исследованиях, повышения качества подготовки специалистов с высшим образованием и формирования резерва для кадров высшей квалификации.

ISBN 978-5-7577-0438-8

Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет
информационных технологий, механики и оптики, 2013

Авторы, 2013

В 2009 г. нашему вузу по итогам всероссийского конкурсного отбора программ развития университетов была присвоена категория национального исследовательского университета (НИУ). Это высшее учебное заведение, одинаково эффективно осуществляющее образовательную и научную деятельность на основе принципов взаимной интеграции.

В университете действует система финансовой поддержки научных

достижений студентов и молодых ученых. По итогам научных мероприятий студенты университета регулярно публикуют свои работы в «Оптическом журнале», журнале «Известия вузов. Приборостроение», «Научно-техническом вестнике ИТМО», а также в зарубежных журналах и научных сборниках. Результаты своих исследований они докладывают на ежегодной Научно-технической и учебно-методической конференции НИУ ИТМО, ежегодном Всероссийском конгрессе молодых ученых (организуемом университетом), а также на научных конференциях и семинарах, проводимых факультетами и кафедрами университета.

В 2012 г. было организовано 120 конкурсов на лучшую научно-исследовательскую выпускную квалификационную работу, определены лучшие научные руководители. Общее число участников составило более полутора тысяч человек, из них победителями стали 56 студентов и лауреатами – 81.

На протяжении многих лет НИУ ИТМО участвует в конкурсах на получение грантов для студентов и аспирантов вузов и академических институтов, расположенных на территории Санкт-Петербурга, проводимых Комитетом по науке и высшей школе при правительстве Санкт-Петербурга. Университет входит в лидирующую тройку среди вузов Санкт-Петербурга по количеству поданных и выигранных заявок. В 2012 г. студентами и аспирантами нашего вуза было подано более 250 заявок, из них выиграно 55.

В настоящий сборник вошли работы студентов – победителей конкурса грантов 2012 г. Представленные статьи демонстрируют высокий уровень и широкий диапазон научных исследований, проводимых студентами НИУ ИТМО под руководством ведущих ученых вуза.



Ректор НИУ ИТМО В.Н. Васильев с победителями конкурса грантов на церемонии награждения

Проректор, д.т.н., проф. В.О. Никифоров

ОГЛАВЛЕНИЕ

Вейвлет-анализ сигналов в функциональной магнитно-резонансной томографии <i>А.А. Баранов</i>	6
Биотехническая система управления устройством реабилитации <i>А.С. Боргуль</i>	16
Обоснование необходимости очистки рек и каналов Санкт-Петербурга от донных отложений <i>Е.А. Быковская</i>	25
Алгоритмы адаптивной и робастной компенсации внешних возмущений <i>А.А. Ведяков</i>	36
Перенос энергии в системах на основе квантовых точек и молекул азокрасителей в полимерных трековых мембранах <i>Ю.А. Громова</i>	45
Математические модели для анализа напряженно-деформированного бесстыкового пути при статических и динамических нагрузках <i>Т.И. Зайцева</i>	54
Обработка сигналов электромиографической обратной связи <i>К.А. Зименко</i>	61
Метод построения конечных автоматов верхнего уровня для управления моделью беспилотного самолета на основе обучающих примеров <i>С.В. Казаков</i>	75
Разработка оптико-электронной системы контроля соосности положения элементов турбоагрегатов с дуплексным отражателем <i>М.А. Клещенко</i>	81
Разработка методов трехмерного моделирования печатной платы в САПР электронных устройств <i>О.В. Кузнецова</i>	93
Кинетика затухания люминесценции в квантовых точках сульфида свинца <i>А.П. Литвин</i>	104
Выявление оптимальных условий генерации высококогерентного спектрального суперконтинуума в областях нормальной, нулевой и аномальной дисперсии групповых скоростей <i>М.В. Мельник</i>	116
Исследование продольных дифракционных картин для видимого и терагерцового излучения <i>Т.Ю. Николаева</i>	128
Разработка источника излучения видимого диапазона для оптико-электронных систем цветового анализа объектов <i>В.С. Перетягин</i>	135
Нелинейное поглощение в кристаллах с глубокими примесями <i>А.А. Попов</i>	146
Исследование методов целевой обработки поверхности стеклянных и полимерных материалов в микрофлюидных устройствах <i>Я.С. Посмитная</i>	158
Исследование метода влажной лазерной очистки микрорельефных поверхностей <i>К.А. Савич</i>	175
Численное моделирование систем буровой установки для программно- аппаратного комплекса по подготовке специалистов по освоению Российского континентального шельфа <i>Р.И. Смирнов</i>	187
Исследование дифракционного метода контроля угловых и линейных величин <i>Ю.А. Соколов</i>	200

Идеологические истоки внешней политики Джорджа Буша-младшего <i>И.В. Терентьева</i>	215
Применение методов решения задачи о выполнимости булевой формулы для построения управляющих конечных автоматов по сценариям работы <i>В.И. Ульянов</i>	222
Исследование механических характеристик нанообъектов <i>Б.О. Щербин</i>	229
Разработка стандартного образца полихлорированных дибензо- <i>n</i> -диоксинов и дибензофуранов в свином жире <i>Е.А. Ясенко</i>	232



Баранов Алексей Александрович
Факультет точной механики и технологий
Кафедра измерительных технологий и компьютерной томографии
E-mail: alexeywka@yandex.ru

ВЕЙВЛЕТ-АНАЛИЗ СИГНАЛОВ В ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ МАГНИТНО-РЕЗОНАНСНОЙ ТОМОГРАФИИ

А.А. Баранов

Научный руководитель – доцент А.О. Казначеева

Введение

Работа направлена на повышение вероятности обнаружения активных областей головного мозга с помощью функциональной магнитно-резонансной томографии (фМРТ), оптимизацию выбора активирующих заданий (парадигм) и разработку алгоритма постобработки экспериментальных данных.

Задачи проекта:

- анализ возможностей методов функциональной визуализации;
- изучение возможностей и выявление оптимальных активирующих заданий – парадигм методики фМРТ;
- оптимизация протоколов выполнения;
- анализ существующих алгоритмов обработки данных в фМРТ, в том числе с использованием вейвлет-анализа;
- разработка алгоритма обработки исходных данных, использующего вейвлет-преобразование;
- построение карты активных областей головного мозга по результатам обработки экспериментальных данных.

Используемые методы исследования

Анализ методов функциональной визуализации (от простейших электро- и магнито-энцефалографии до современных позитронно-эмиссионной томографии (ПЭТ) и фМРТ) показал, что наиболее востребованная и часто применяемая ПЭТ, в конце XX – начале XXI веков была потеснена новым методом функциональной визуализации – фМРТ.

Он имеет ряд значимых достоинств, позволивших ему выйти на первое место в области функциональных исследований. Главное – введение пациенту инъекции радиоактивных изотопов. Из физических свойств фМРТ на основе BOLD-контрастности вытекают как достоинства данной методики, так и ее недостатки, ограничивающие широкое внедрение фМРТ в клиническую практику [2]. Достоинствами фМРТ являются:

- высокая чувствительность метода к минимальным изменениям локальной гемодинамики;
- высокое пространственное и временное разрешение;
- возможность выполнения на МР-томографах с полем от 1,5 Тл и выше;
- размер функционального изображения в плоскости разрешения, составляющий, как правило, около 1,5×1,5 мм.

К недостаткам фМРТ можно отнести:

- подверженность изображений к возникновению артефактов;
- вероятность ложноположительных результатов, связанных с произвольными движениями пациента и наличием разного рода металлических объектов или наложением сигнала от венул и вен;
- трудность или даже невозможность стандартизации активирующих заданий.

Неразрешимую проблему представляют собой артефакты от микрочастиц металла, возникающие после выполнения краниотомии. Это связано с тем, что эхо-планарные

последовательности, используемые в фМРТ, высокочувствительны к их проявлению. Противопоказания к фМРТ стандартны для МРТ в целом.

На сегодняшний день фМРТ – метод, прочно вошедший в практику современной медицины [8]. Особенно велика ее роль при обследовании пациентов с неврологической и нейрохирургической патологией [6]. МРТ постоянно развивается, что приводит к появлению новых вариантов ее применения. Практика нейрорадиологии обогатилась такими методиками, как магнитно-резонансная спектроскопия, фМРТ на основе BOLD-контрастности и т. д.

Последняя позволяет исследовать деятельность коры головного мозга, осуществлять картирование его функционально-специализированных зон. Основными характеристиками фМРТ, отличающими ее от других методик картирования коры, таких как электроэнцефалография, однофотонная эмиссионная компьютерная томография, ПЭТ являются безопасность, неинвазивность, высокое пространственное и временное разрешение и применимость в клинических условиях [3].

В настоящее время процесс разработки клинического использования данного метода продолжается. Однако некоторые варианты его практического применения уже можно перечислить:

- оценка очаговых поражений головного мозга и планирование нейрохирургических вмешательств с максимальным сохранением функций коры головного мозга;
- локализация эпилептических очагов;
- определение доминантного полушария при лечении эпилепсии;
- мониторинг компенсации и восстановления функций коры головного мозга;
- нейропсихиатрические исследования, в том числе при болезни Альцгеймера.

Наибольшее распространение получило использование фМРТ в нейрохирургии. При этом в целом ряде исследований было показано, что ее результаты в значительной степени коррелируют с результатами прямой стимуляции коры головного мозга электродами [5].

Импульсные последовательности

В МРТ используются различные импульсные последовательности (ИП), параметры которых определяют интенсивность изображения исследуемых структур [1]. Самой импульсной последовательностью называют выбранный набор определенных радиочастот и градиентных импульсов, обычно неоднократно повторяемых во время сканирования. Интервал между ними, их амплитуда и форма определяют характеристики изображений.

Все импульсные последовательности делятся на три основных группы [7]:

1. Спин-эхо последовательности (спин-эхо, быстрое спин-эхо, быстрое спин-эхо с быстрым восстановлением), основанный на обнаружении спинового эха. Полученные изображения менее чувствительны к неоднородностям магнитного поля и парамагнетикам. Они характеризуются меньшими геометрическими искажениями и более резкими контурами. Недостатком является большое время сканирования.

2. Градиент-эхо последовательности (градиент-эхо, градиент-эхо с очищением), основанный на обнаружении градиентного эха. Полученные изображения более чувствительны к неоднородностям магнитного поля и парамагнетикам. Однако время сканирования значительно меньше, чем при использовании спин-эхо.

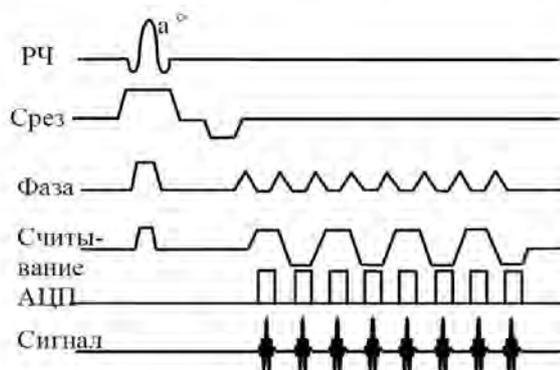
3. Последовательности с выборочным подавлением сигналов.

Первые функциональные МР-исследования проводились при использовании ИП градиент-эхо. Это приводило к плохой локализации зон активации. В настоящее время применяется эхо-планарные ИП, которые нацелены на снижение T1-компоненты.

Эхо-планарное отображение (EPI) (рис. 1) (Echo Planar Imaging, EPI) – это быстрая ИП для отображения градиентного или спинового эха, получающего полный набор двумерных данных в декартовом k -пространстве после единичного возбуждения в режиме «фильма». Его главным достоинством для фМРТ является то, что он дает превосходную T2-контрастность, которая делает его чувствительным к BOLD-эффектам. К тому же невысокое время сканирования (время сбора данных одного среза составляет 100 мс) позволяет значительно снизить влияние движений внутри одного среза. Но EPI-отображение имеет недостатки. Оно

накладывает требования на аппаратуру, в частности на силу градиентов, время переключения градиентов и полосу пропускания приемника [2].

Рис. 1. Схема EPI отображения



Методика выполнения фМРТ

Ход обычного обследования с использованием методики фМРТ значительно отличается от стандартной МРТ головного мозга. В процессе получения изображений пациенту необходимо выполнять так называемые активирующие задания, парадигмы, в соответствии с командами проводящего обследование, подаваемыми через переговорное устройство. В общем случае это чередование периодов стимуляций (задач) и периодов отдыха. Они направлены на получение более точных клинических результатов.

В связи с этим принципиальное значение имеют тщательное объяснение задания и тренировка пациента до начала обследования и после помещения в МР-томограф.

Далее производится регистрация анатомических изображений (обычно T1-взвешенных) и функциональных (T2-взвешенных) изображений во время выполнения обследуемым активирующего задания, которое заключается в чередовании фаз активности и покоя. После окончания обследования производится статистическая обработка «сырых» данных (от 500 до 2 500 изображений с динамическим изменением интенсивности сигнала) путем расчета корреляционных коэффициентов, отражающих вероятность соответствия динамики интенсивности сигнала в каждом вокселе. Такое количество снимков обуславливает появление ложноположительных результатов, которые затрудняют трактовку полученных данных и требуют дополнительной постобработки.

В качестве примера проведения стандартной серии заданий, была взята методика предложенная компанией General Electric [5] (Табл. 1). В ней один слой сканируется 104 раза. Первые четыре раза, или 12 с, отбрасываются в качестве погрешности. Оставшиеся 100 – выполняются в течение 5 мин = 300 с, по 3 с на один срез, с чередованием периодов отдыха и заданий (парадигм). Временные границы выбираются таким образом, чтобы за одну минуту на каждом цикле было сделано по 10 кадров. В результате общее время сканирования будет составлять 5 мин 12 с = 312 с.

Таким образом, этот общий цикл повторится пять раз, что повысит вероятность различия зон активации. Во время проведения циклов пациент должен слышать только конкретные и понятные инструкции:

- 5:12 – делаются четыре снимка, которые впоследствии отбрасываются (4 по 3 с = 12 с);
- 5:00 – пациент ничего не делает, находится в состоянии покоя;
- 4:30 – оператор громко и четко произносит команду: «Начать выполнение задания».

Пациент выполняет задачи;

- 4:00 – звучит команда: «Закончить задание!»;
- 3:30 – команда: «Начать выполнение задания!» Пациент выполняет задачи;
- 3:00 – команда: «Закончить задание!» Пациент отдыхает;
- 2:30 – звучит команда: «Начать выполнение задания!»

Таблица 1

Методика проведения серий заданий компанией GE

Пробные попытки				Один полный цикл = 60 с = 1 мин																			
Погрешность – 12 с				Период отдыха – 30 с										Период решения заданий – 30 с									
Фаза 1	Фаза 2	Фаза 3	Фаза 4	Фаза 1	Фаза 2	Фаза 3	Фаза 4	Фаза 5	Фаза 6	Фаза 7	Фаза 8	Фаза 9	Фаза 10	Фаза 1	Фаза 2	Фаза 3	Фаза 4	Фаза 5	Фаза 6	Фаза 7	Фаза 8	Фаза 9	Фаза 10

Так продолжается до момента пока время не станет равным 0. Такое разбиение цикла очень важно: и для пациента, он будет знать, когда пора выполнять те или иные действия, и для врача, проводящего томографию, чтобы точно повторять задачи.

В итоге по этой методике парадигма представляет собой:

- 4 отбрасываемых кадра;
- 5 общих циклов;
- 10 кадров на включение / выключение периодов;
- 104 снимка;
- 1 срез;
- 104 кадра / серия.

Основные этапы-шаги построения функциональных карт головного мозга показаны на рис. 2 [1].

Полученные сначала «сырые» изображения нужно перестроить, поскольку даже самые маленькие сдвиги вокселей могут привести к существенным искажениям полученных данных. К тому же требуется время на насыщение кислородом крови. Именно поэтому первые несколько снимков, как правило, отбрасываются в качестве погрешности.

Следующий шаг должен нормализовать пространственное разрешение изображения. Это позволяет упростить неврологическую интерпретацию активационных зон и усреднить данные по группам. В результате будут получены шаблоны изображения головного мозга.

На третьем шаге проводится сглаживание полученных данных. Это повышает соотношение сигнал/шум – SNR, однако чрезмерное сглаживание может вызвать ухудшение временного разрешения, что ведет к потере вокселей с положительной информацией.

Четвертый шаг заключается в применении временной фильтрации. Он предназначен для удаления каких-либо неточностей (дефектов) в полученных данных.

Далее в соответствии с выполненными парадигмами (различным уровнем насыщения) выполняются статические методы обработки. После чего строится функциональная карта активации головного мозга, которая объединена с основной анатомической информацией.

Полученная карта выводит на экран только те воксели, которые имеют статистический параметр, больший по величине, чем пороговое значение. Иногда статическая обработка выполняется так, чтобы исключить изолированные воксели; отображаются только кластеры активации.

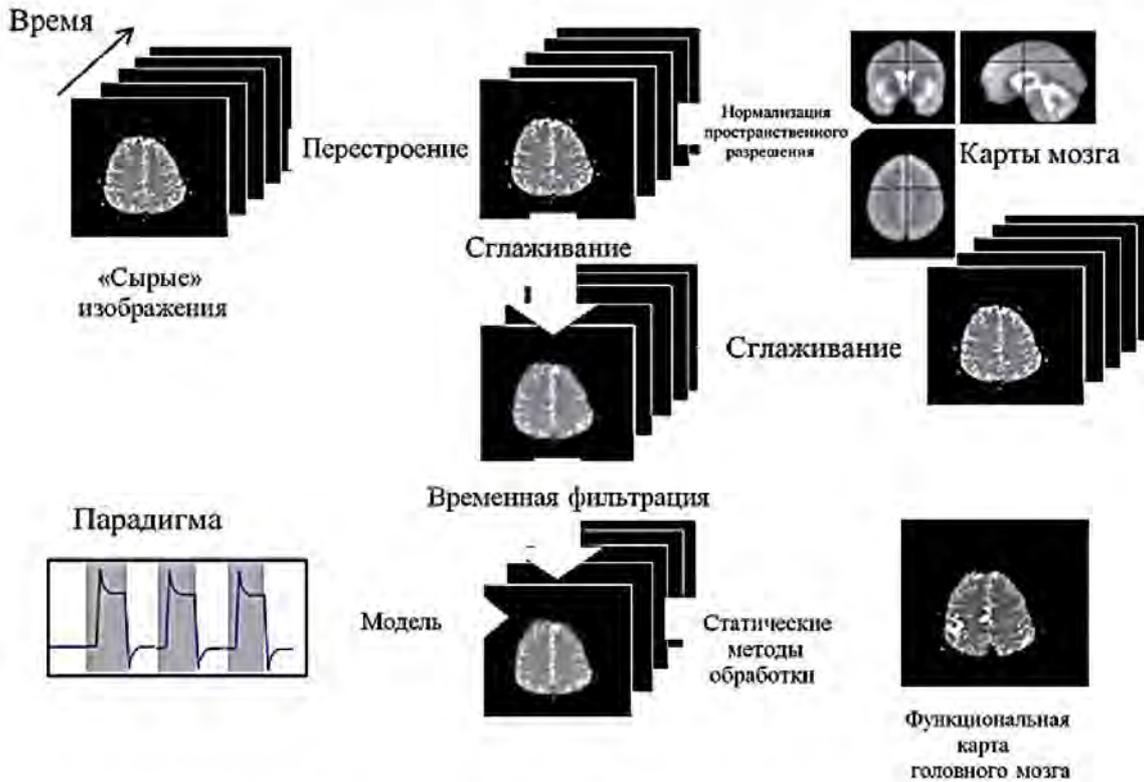


Рис. 2. Схема построения функциональных карт

Образование расхождений в BOLD-моделях обусловлено тем, что реакция мозга при повышенном уровне кислорода в крови при выполнении парадигм происходит не мгновенно, а с задержкой. Таким образом, BOLD-сигнал от «активированного» участка не совпадает с парадигмой. В течение первых нескольких сотен миллисекунд присутствует даже небольшое снижение оксигенации крови из-за увеличения потребления нейронами кислорода. Поэтому необходимо контролировать задержку между сбором данных и выполнением парадигм.

Существует несколько способов синхронизации. Технология инициирования парадигмы сканером – наиболее часто используемый способ. При детекции первого РЧ-импульса МР-томографа синхронизирующий сигнал пересылается на аппаратное обеспечение представления парадигмы. При этом необходимо чтобы импульс формировался только после прохождения данных «отбрасываемых» серий.

Передача синхронизирующего импульса самим МР-томографом – более точный метод. В настройках указывается, когда именно следует запускать парадигму и она запускается сразу после получения синхронизирующего сигнала. Использование внешнего источника синхронизирующих импульсов на каждом промежутке времени TR (время повторения импульсной последовательности) – самый точный метод для всего процесса сканирования.

Есть различие и в способах регулирования оксигенации крови [4]. Оно связано с различным потреблением количества кислорода разными участками мозга (из-за выполняемых функций, размеров участка и т. д.). Чтобы учесть и обработать данные нюансы, была создана «пространственная» модель (рис. 3). В ней реконструкция изображения основывается на двух или более сигналах, которые необходимы для охвата линейных подпространств в реакции при построении BOLD-модели. То есть предполагается, что любая реакция при выполнении парадигм может быть выражена как линейная функция от нескольких сигналов.

По теореме Тейлора, линейные комбинации этих сигналов аппроксимируются с очень малыми задержками, благодаря чему BOLD-модель будет выполнена с высокой точностью.

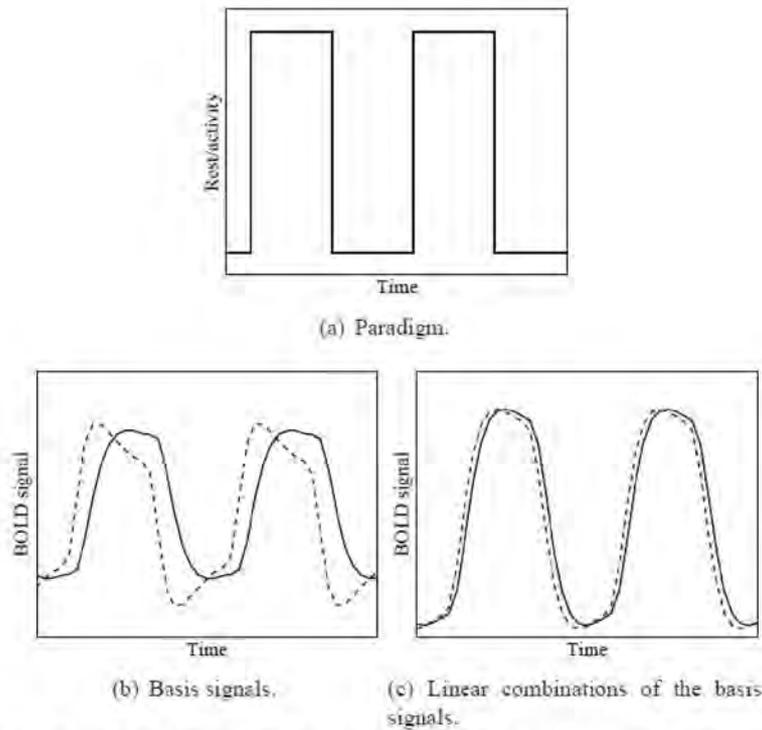


Рис. 3. а – часть парадигмы; б – результат обработки модели, на основании одного сигнала; с – двух

Описание экспериментальных данных

Экспериментальные данные в работе представлены в виде двух примеров: первый – исследования пациентов с тревожным синдромом (нестандартная парадигма); второй – исследование моторной активности, в частности движения кистью правой руки (стандартная парадигма).

Для проведения фМРТ пациентам с тревожным синдромом разрабатываются специальные парадигмы, заключающиеся в отсутствии каких-либо заданий. Здесь присутствует только фаза отдыха. Соответственно, выявление тревожного синдрома производится при сравнении томограмм здорового и заболевшего пациентов. В качестве второго примера взяты изображения, полученные при выполнении пациентом стандартной моторной парадигмы, приведенной в Табл. 2. Активационное задание – это движение кистью правой руки.

Таблица 2

Пример стандартной моторной парадигмы

Выполняется пять полных циклов = 300 с = 5 мин																			
Один полный цикл = 60 с = 1 мин																			
Период отдыха – 30 с										Период выполнения задания – 30 с									
Фаза 1	Фаза 2	Фаза 3	Фаза 4	Фаза 5	Фаза 6	Фаза 7	Фаза 8	Фаза 9	Фаза 10	Фаза 1	Фаза 2	Фаза 3	Фаза 4	Фаза 5	Фаза 6	Фаза 7	Фаза 8	Фаза 9	Фаза 10
Каждая фаза – 15 изображений																			

Обработка экспериментальных данных

Для анализа временных рядов традиционно используется преобразование Фурье, дающее разложение исследуемого временного процесса $y(t)$:

$$Y(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} y(t) e^{i\omega t} dt . \quad (1)$$

Аппарат Фурье-преобразований дает достаточно простые для расчетов формулы и прозрачную интерпретацию результатов. Однако он не лишен и недостатков, которые отодвигают его на второй план. Например, не дает информации о преимущественном распределении частот во времени и, следовательно, результаты для сигналов с участками резкого изменения будут не верны [10]. Исследуемые ряды также далеко не всегда удовлетворяют требованию периодичности и более того, как правило, заданы на ограниченном отрезке времени.

Поэтому на первый план стали выходить новые технологии, дающие более точные характеристики сигнала. Одной из них является аппарат вейвлет-анализа.

В отличие от преобразования Фурье, локализирующего частоты, но не дающего временного разрешения процесса, и от аппарата дельта-функций, локализирующего моменты времени, но не имеющего частотного разрешения, вейвлет-преобразование, обладающее самонастраивающимся подвижным частотно-временным окном, одинаково хорошо выявляет как низкочастотные, так и высокочастотные характеристики сигнала на разных временных масштабах.

Применение вейвлет-преобразования дает хорошие результаты особенно для высокочастотных сигналов с небольшой длительностью и низкочастотных – с достаточно большой длительностью. Практически все биологические сигналы имеют такую структуру.

Вейвлет-преобразования позволяют выявлять все локальные особенности функций, сигналов и изображений с привязкой их ко времени или координатам пространства и заключаются в разложении сигнала $s(t)$ по базису, сконструированному из обладающей определенными свойствами функции (вейвлета) $\psi_k(t)$ посредством масштабных изменений и переносов [9]:

$$\sum_k C_k \psi_k(t) = s(t) . \quad (2)$$

Выбор того или иного типа определяется спецификой задачи, тем, какую информацию нужно извлечь из сигнала и сохранить. В ряде случаев с помощью различных вейвлетов можно более полно выявить особенности анализируемого сигнала.

Каждая из функций базиса характеризует как определенную пространственную (временную) частоту, так и ее локализацию в физическом пространстве (времени).

В основе непрерывного вейвлет-преобразования лежит использование двух непрерывных и интегрируемых по всей оси t функций:

– вейвлет-функции $\psi(t)$, $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_k(t) dt = 0$, определяющей детали сигнала и детализирующие коэффициенты;

– аппроксимирующей функции $\phi(t)$ с единичным значением интеграла, $\int_{-\infty}^{\infty} \psi(t) dt = 1$, определяющей грубое приближение сигнала и коэффициенты аппроксимации.

Функции $\psi(t)$ и $\phi(t)$ уточняются итерационным методом, каждый шаг которого соответствует определенному уровню декомпозиции и восстановлению сигнала. Аппроксимирующие функции $\phi(t)$ присущи не всем вейвлетам, а только тем, которые относятся к ортогональным. Детализирующая функция $\psi(t)$ создается на основе базисной функции $\psi_0(t)$, которая также определяет тип вейвлета. Базисная функция должна обеспечивать выполнение двух основных операций: смещение по оси времени и масштабирование.

В общем случае вейвлет-коррекция для выбранного базиса (например вейвлетов Хаара, Добеши, симлетов и др.) включает выбор уровня аппроксимации j и глубины разложения N ; а также поиск коэффициентов разложения, определяющих приближение функции $f(x)$ в заданном масштабе. По этим причинам был предложен алгоритм обработки сигналов от активных областей головного мозга по данным МРТ на основании вейвлет-преобразования и реализуемый в пакете MatLab.

На основе анализа публикаций других авторов [2] выбор типа применяемого вейвлета был остановлен на вейвлете Хаара, Добеши и Симметричном, с глубиной разложения от одного до пяти, уровнем аппроксимации один и два. Коэффициенты разложения, определяющие приближение функции $f(x)$ в заданном масштабе подбирались таким образом, чтобы их значения были максимально близки друг к другу и в тоже время не очень велики.

Выбор базисной функции осуществлен по результатам обработки серии томограмм (1 500 изображений) с помощью 15 вейвлетов. Оценка результатов выполнялась на основе следующих параметров:

– среднеквадратическое отклонение (СКО):

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{m \cdot n} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (x_{i,j} - \bar{x}_{i,j})^2}, \quad (3)$$

где m и n – количество строк и столбцов матрицы изображения; $x_{i,j}$, $\bar{x}_{i,j}$ – интенсивность пиксела оцениваемого и эталонного изображения. Большое значение СКО указывает на большой разброс значений со средней величиной множества; маленькое значение говорит о том, что показатели во множестве сгруппированы вокруг среднего значения. Для достижения наилучшего результата обработки, необходимо выбрать вейвлет с наименьшим СКО;

– контрастность изображения:

$$J_{cp} = \frac{\sum_i^n \frac{L_{\max i} - L_{\min i}}{L_{\max i} + L_{\min i}}}{n}, \quad (4)$$

где L_{\max} , L_{\min} – значения яркости i -ой области, i – номер области, n – количество областей. Контрастность является важным фактором при описании данных, так как играет большую роль при получении визуальной оценки;

– фрактальная оценка (показатель Херста) – (δ).

Это оценка геометрической формы кривой, обладающей свойством самоподобия, то есть составленной из нескольких частей, каждая из которых подобна всей форме целиком. Она позволяет оценить правильность выбора области активации и изменение формы сигнала после вейвлет обработки. Существует множество способов расчета фрактальной оценки, но они все громоздки и достаточно сложны. Поэтому для ее определения использовалась программа Fractan.

Из рассмотренных 15 типов вейвлетов для алгоритма был выбран вейвлет Добеши-5 с уровнем разложения равным одному. В результате его применения были обработаны сигналы от активных областей и построена функциональная карта головного мозга (рис. 4).

Предложенный алгоритм (при использовании вейвлета Добеши-5) позволяет повысить соотношение сигнал / шум в 4,5 раза. Использование других типов вейвлетов, меняет это соотношение в пределах 25 % как в сторону увеличения, так и в сторону уменьшения. Контрастность активных / неактивных областей при использовании алгоритма также повышается в среднем на 1,5 %–2 %. На основе анализа других работ можно сказать, что такое повышение контрастности – хороший результат.

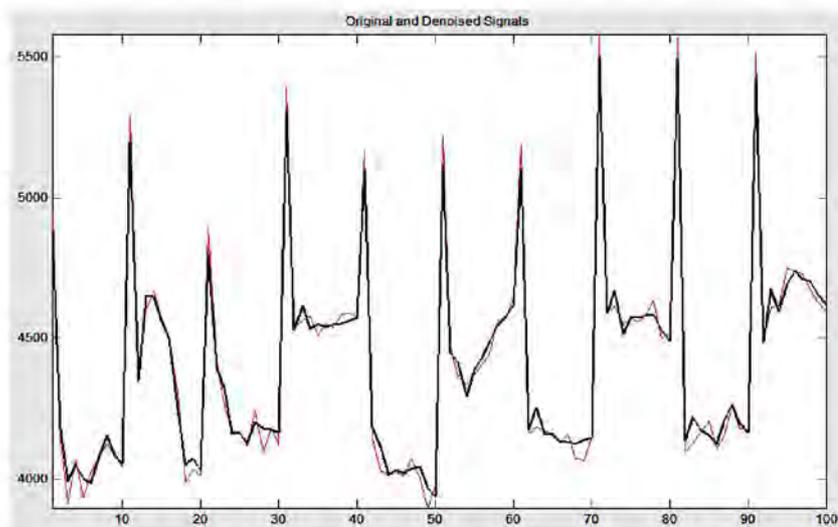


Рис. 4. Результат применения алгоритма. Черным цветом показан исходный сигнал, красным – обработанный

Построение функциональных карт

По данным обработанного сигнала была построена общая функциональная карта головного мозга (рис. 5).

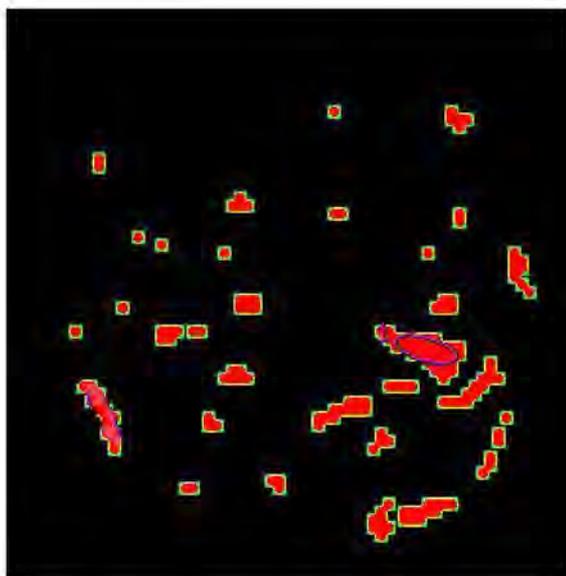


Рис. 5. Функциональная карта головного мозга

Для получения итоговой фМРТ карта была наложена на анатомические снимки головного мозга. Результатом обработки исходных данных является построенная фМРТ (рис. 6) с отмеченной активной областью – реакцией на выполнение парадигмы. На ней также присутствуют ложноположительные активные области, связанные с произвольными движениями пациента, мыслительными процессами, зрительным восприятием и т. д.

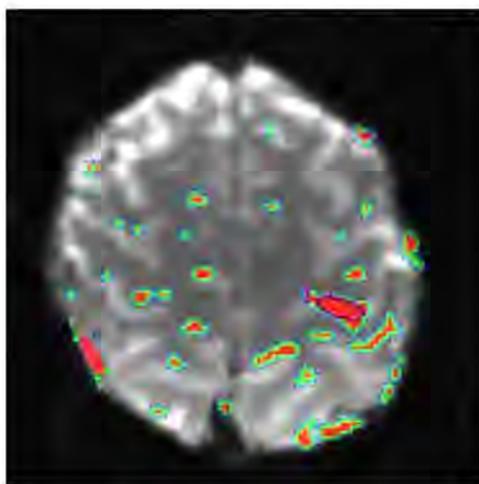


Рис. 6. Наложение функциональной карты на анатомические снимки

Основные результаты проекта

Предложен и реализован в пакете MATLAB алгоритм, позволяющий снизить шум данных фМРТ и выявить активные участки головного мозга, в том числе при отсутствии дополнительных команд.

Апробация предлагаемого алгоритма выполнена для экспериментальных данных, полученных при подаче пациентам команд, которые воздействуют на моторные центры мозга, а также при их отсутствии. Полученные результаты свидетельствуют о возможности выявления областей, активность которых непрерывна в течение исследования.

Точность построения функциональных МР-томограмм и качество полученных изображений зависит от аппаратного обеспечения – типа используемого томографа, выбора вида парадигмы, от метода постобработки данных и т. д. Для достижения наилучшего результата обработки данных алгоритмом, предложенным в работе, необходимо соблюдать представленные ниже рекомендации:

- использовать простые и точные парадигмы;
- необходимо, чтобы пациент понял, что от него требуется при обследовании;
- стоит пользоваться точными и новейшими анатомическими атласами для поиска активационных областей;
- производить подбор аппроксимирующих и детализирующих коэффициентов таким образом, чтобы их значения были не очень велики, но содержали как можно больше участков функции;
- при построении откорректированных функциональных карт также необходимо сверяться с анатомическими атласами;
- для трактовки результатов обследования с использованием методики фМРТ необходимо знание не только структурной, но и функциональной организации головного мозга.

Области возможного использования результатов проекта

Практическая значимость исследования определяется возможностью использования ее результатов в деятельности медучебреждения: коррекции протокола получения экспериментальных данных (сокращение времени), планировании нейрохирургических вмешательств с максимальным сохранением функций коры головного мозга для упрощения процесса неврологической интерпретации активационных зон у пациентов.

Публикации

1. Баранов А.А., Казначеева А.О. Обработка сигналов в функциональной магнитно-резонансной томографии // Сб. тезисов докладов международной научно-практической конференции «Неделя науки СПбГПУ». СПб., 2012. С. 136–137.

2. Баранов А.А. Вейвлет-анализ сигналов в функциональной магнитно-резонансной томографии // Аннотируемый сборник ВКР среди бакалавров СПб НИУ ИТМО. СПб., 2012. С. 51–52.

Литература

1. Bullmore E. et al. Wavelet and statistic analysis of functional magnetic resonance images of human brain // Statistical Methods in Medical Research. 2003. Vol. 12. P. 375–399.
2. McRobbie D.W., Moore E.A., Graves M.J., Prince M.R. MRI: From Picture to Proton. Cambridge, 2006. – 393 p.
3. Pizzi N. et al. Evident: A functional magnetic resonance image analysis system // Artificial Intelligence in Medicine. 2001. Vol. 21. P. 263–269.
4. Zaroubi S., Goelman G. Complex denoising of MR data via wavelet analysis: Application for functional MRI // Magnetic Resonance Imaging. 2000. Vol. 18. P. 59–68.
5. Wauksha W. Signal Field Notes // General Electric Healthcare. 2006. Vol. 2. P. 1–12.
6. Дуус П. Топический диагноз в неврологии. Анатомия. Физиология. Клиника. М., 1997. – 295 с.
7. Казначеева А.О. Молекулярная визуализация в МРТ с помощью методики EPI-отображения // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. 2009. Вып. 1 (59). С. 56–61.
8. Трофимова Т.Н. (гл. ред.). Лучевая диагностика и терапия: Научно-практический рецензируемый журнал. 2010. № 1. – 111 с.
9. Яковлев А.Н. Введение в вейвлет-преобразования: Учеб. пособие. Новосибирск, 2003. – 104 с.
10. Яне Б. Цифровая обработка изображений. М., 2007. – 584 с.



Боргуль Александр Сергеевич
 Факультет компьютерных технологий и управления
 Кафедра систем управления и информатики
 E-mail: borqulalexandr@gmail.com

БИОТЕХНИЧЕСКАЯ СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ УСТРОЙСТВОМ РЕАБИЛИТАЦИИ

А.С. Боргуль

Научный руководитель – профессор А.А. Бобцов

Введение

Данный проект ориентирован на фундаментальные теоретические исследования: анализ современных методов управления в условиях неопределенности, возмущений и запаздывания; разработку систем интеллектуального управления (анализ окружающей среды, принятие решений, расчет и отработка управляющих воздействий); обеспечение желаемых показателей качества для систем управления роботами и мехатронными объектами.

Актуальность работы определяется необходимостью создания систем управления роботами и мехатронными объектами для реабилитации людей с ограниченными возможностями. В настоящее время активно развивается направление по созданию и применению разнообразных робототехнических устройств (экзоскелетов), предназначенных для увеличения мускульной силы человека за счет внешнего каркаса, например для

реабилитации инвалидов и социальной адаптации пожилых людей, а также уменьшения времени восстановления функциональных способностей организма человека после травм.

Проект по созданию адаптивных и робастных системам управления шагающих роботов в совокупности с интеллектуальными человеко-машинными интерфейсами (в будущем они станут незаменимы для скорейшей реабилитации людей, повредивших опорно-двигательный аппарат), – фундамент для дальнейшего развития этого направления медицины. Если реализация проекта поможет эффективно заменить инвалидные коляски и даже костыли, инвалиды станут гораздо более самостоятельными членами общества.

Многие фирмы по всему миру занимаются созданием медицинских роботизированных каркасов: компания REX Bionics из Окленда (Новая Зеландия), фирма «Беркли Бионикс» из Калифорнии, Honda и др. [1]. Задача у них одна – реабилитация людей с параличом конечностей. Экзоскелет позволяет достаточно точно повторять движения отдельных конечностей человека. Данное свойство применяется при реабилитации пациентов после различных травм и переломов костей, в том числе и позвоночника, разрывах связок и мышц.

С помощью экзоскелета организм обучают «забытым» либо трудно выполнимым движениям, которые легко выполнялись до травмы. Однако каждый человек уникален и имеет различные массо-инерционные характеристики (вес, рост, походку и т. д.). Поэтому для каждого пациента настройка экзоскелета индивидуальна, что и определяет его длительную подготовку к использованию, а также высокую стоимость.

В данном исследовании, основываясь на методах адаптивного и робастного управления, разрабатываемых в рамках проекта, предложены новые интеллектуальные алгоритмы управления роботами и мехатронными объектами. Они существенно сокращают время настройки и делают ее простотой с точки зрения технической реализации.

Научная значимость настоящего проекта заключается в разработке новых принципов построения роботов и мехатронных объектов для реабилитации людей с ограниченными возможностями. При этом исследуемые положения имеют инженерную привлекательность.

Существует острая необходимость создания систем интеллектуального управления сложными техническими объектами: космического, надводного и подводного оборудования и аппаратов, прецизионных электромеханических систем, инжекторных двигателей внутреннего сгорания, химических реакторов, транспортных систем, многозвенных и подвижных манипуляторов, вибрационных стендов, многоколесных и шагающих механизмов.

Проектирование или модернизация систем управления реальных объектов осложняются рядом проблем: уникальностью самого объекта, большой стоимостью и опасностью его поломки, а также отсутствием возможности проведения эксперимента во взаимодействии с другими подсистемами в условиях, приближенных к реальным.

Создание шагающих мехатронных и робототехнических исследовательских комплексов, являющихся прототипами реальных технических объектов, обеспечивает необходимую платформу для разработки систем, получения новых методов и апробации алгоритмов интеллектуального управления на базе простейших аналогов.

Проведен анализ патентной информации о системах управления роботами и мехатронными объектами для реабилитации людей с ограниченными возможностями. Он выявил следующее:

- существует множество прототипов роботов и мехатронных объектов, используемых для реабилитации людей с ограниченными возможностями;
- существует широкое разнообразие самих мехатронных объектов и роботов. Это объясняется тем, что каждое конкретное устройство имеет определенные задачи, что естественным образом отражается на его модели и на наборе комплектующих, необходимых для выполнения задачи;
- большое разнообразие систем управления для различных прототипов экзоскелетов.

Проведенные патентные исследования показали, что задача по разработке систем управления роботов и мехатронных объектов для реабилитации людей с ограниченными

возможностями является очень важной, а исследования в данном направлении не прекращаются.

Постановка задачи

Экзоскелеты имеют большой спрос, но, несмотря на это, в России они серийно не производятся, а в перспективе планируется выпуск лишь военных образцов. Зарубежные модели имеют высокую стоимость. Конструкции экзоскелетов, как правило, конструктивно исполнены практически одинаково, а отличаются системами управления. Поэтому в рамках данного проекта планируется разработать конкурентоспособную систему управления для экзоскелетов. Полученный задел позволит начать их серийное производство не только для медицины, но и для других сфер народного хозяйства.

Результатом проекта должен стать работающий макет мехатронного (робототехнического) исследовательского комплекса, экзоскелета, обеспечивающий увеличение мышечных усилий. Самой важной является разработка системы управления движениями звеньев экзоскелета. На этом этапе необходимо обеспечить набор режимов и траекторий, в которых экзоскелет может двигаться в пространстве и выполнять задачи более высокого уровня.

Далее необходимо разработать измерительную систему, размещенную на экзоскелете как полезный груз. Исследовав существующие датчики, необходимо выработать рекомендации по конфигурированию экзоскелета набором измерительных устройств так, чтобы он мог перемещаться в пространстве в течение заданного времени с назначенным полезным грузом.

Третий шаг развития проекта – разработка системы интеллектуального управления экзоскелетом, решающая сложные траекторные задачи управления в условиях внешних возмущений и запаздывания на базе более простых задач: вращение суставных частей с заданной скоростью, ускорением и с заданной точностью по позиционированию.

Итак, основная задача проекта – разработка эффективной системы управления, встроенной в экзоскелет. Сложность управления таким робототехническим устройством заключается в том, что необходимо разрабатывать методы и алгоритмы согласованного управления несколькими исполнительными органами для решения совместных задач.

Цель проекта

На сегодняшний день большое количество людей страдают заболеваниями опорно-двигательного аппарата. Экзоскелет повторяет биомеханику человека и используется для пропорционального увеличения усилий при движениях. Самыми главными проблемами существующих моделей являются большое энергопотребление, ограниченность движений оператора, высокая стоимость, сложность управления.

Цель работы – разработка простой и интуитивно-понятной системы управления для устройств реабилитации, позволяющей считывать большое количество команд и обладающей коротким временем обучения оператора. Разрабатываемый человеко-машинный интерфейс, преобразующий мысленные и мускульные усилия в движение, позволит больным успешно использовать такие средства реабилитации, как экзоскелеты и другие мехатронные восстановительные комплексы.

Главная задача – разработка человеко-машинного интерфейса, позволяющего управлять не только примитивными системами, но и сложными мехатронными комплексами с большим количеством степеней свободы предназначенными для решения различных задач. Для этого необходимо рассчитать математическую модель и синтезировать регуляторы систем интеллектуального управления роботами и мехатронными комплексами, а также произвести апробацию различных методов классификации и обработки снимаемых сигналов и выявить лучшие.

По завершению данных этапов можно собрать полноразмерный макет экзоскелета и встроить разработанную систему управления. Отличие разрабатываемого человеко-

машинного интерфейса от уже существующих состоит в высокой скорости идентификации команд оператора.

Дополнительно научная значимость настоящей работы заключается в разработке новых методов интеллектуального управления сложными нелинейными объектами в условиях параметрической и функциональной неопределенностей, структурных и внешних возмущающих воздействий, запаздывания и неустойчивых состояний равновесия, а также методов обработки сигналов биопотенциалов, снимаемых в реальном времени и повышении точности классификации.

Используемые методы

На рис. 1 представлена разработанная система интуитивного управления экзоскелетом верхней конечности с помощью сигналов электромиограммы (ЭМГ) и электроэнцефалограммы (ЭЭГ) для людей с различной степенью повреждения опорно-двигательного аппарата.

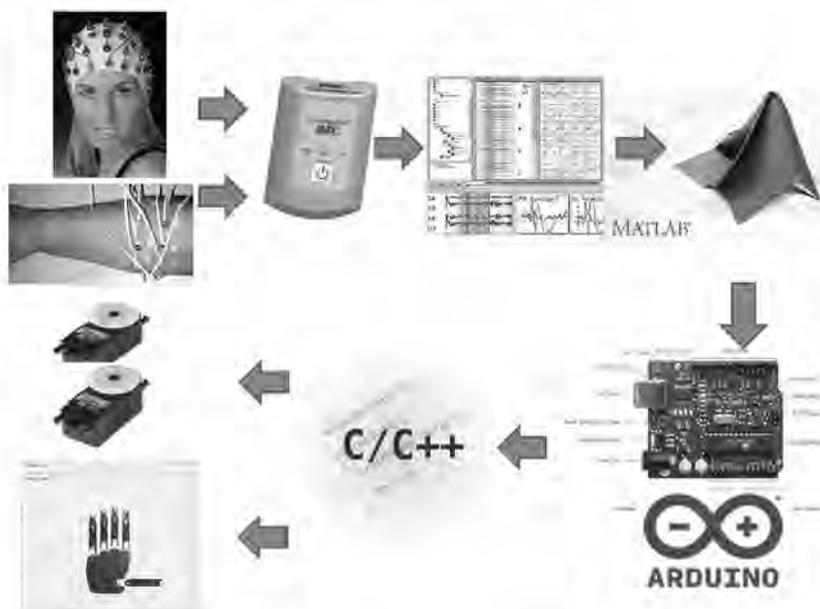


Рис. 1. Принцип построения биотехнической системы управления

Представленная система отличается от российских и зарубежных аналогов скоростью идентификации нейросигналов и биопотенциалов, а также скоростью распознавания управляющих команд. Используемый метод частично описан в статьях знаменитого физиолога Николая Бернштейна [2]. Длительные управляющие команды, такие как изменение положения всей руки экзоскелета или движение вперед/назад кресла-каталки получаются путем распознавания сигнала ЭЭГ. Приоритет имеет управление, получаемое с сигналов ЭМГ, так как изменение разности потенциалов при сжатии мышцы происходит гораздо быстрее. Таким образом можно управлять быстро изменяемыми командами, такими как поворот кресла-каталки или схват кистью предмета. Задержки при получении сигналов с ЭМГ минимальны, так как достаточно просто напрячь мышцу, а чтобы получить сигнал из головного мозга требуется длительная тренировка и время для достижения устойчивого психофизического состояния.

Благодаря возможности использования для коротких команд сигналов ЭМГ, а для длительных – сигналов ЭЭГ реализуется оптимальное по скорости, т. е. интуитивное, управление механическими устройствами.

Система управления разработана с использованием не инвазивных способов снятия данных. Подобного рода устройства регистрации биологической активности человека основаны на распознавании психофизических состояний и биопотенциалов мышц [3]. Сложность управления состоит в быстром переходе из одного психофизического состояния в другое с помощью мысли оператора.

Принцип работы данной системы представляет собой получение управляющих команд от человека-оператора, предварительную обработку во встроенной программе системы регистрации биопотенциалов Нейробелт, передачу данных в среду MATLAB для обработки и классификации команд [4]. После этого происходит пакетная передача обработанных и выделенных команд управления на микроконтроллер, запрограммированный (C/C++) на прием данных и управление приводами с учетом информации, получаемой с датчиков либо управление программным симулятором.

Достоинством системы является мобильность, так как используются беспроводные протоколы передачи данных. Так система регистрации биопотенциалов Нейробелт связана с компьютером через интерфейс Wi-Fi, а компьютер с микроконтроллером через интерфейс ZigBee посредством плат-адаптеров. Из данной схемы связи можно исключить компьютер, если оставить высокопроизводительный контроллер, способный вести обработку больших массивов данных в реальном времени.

Таким образом, разработанная система позволяет управлять не только примитивными системами, но и сложными мехатронными комплексами с большим количеством степеней свободы для решения различных задач. Отличие разработанного человеко-машинного интерфейса от уже существующих состоит в высокой скорости идентификации команд оператора.

Сигнал электроэнцефалограммы снимается с помощью эластичной шапки, расположенной на голове оператора, к которой подсоединены электроды, установленные по референтным схемам. Для снятия электромиографических сигналов электроды устанавливаются на поверхности кожи оператора (не инвазивный метод). Получаемые данные передаются на устройство управления средством реабилитации.

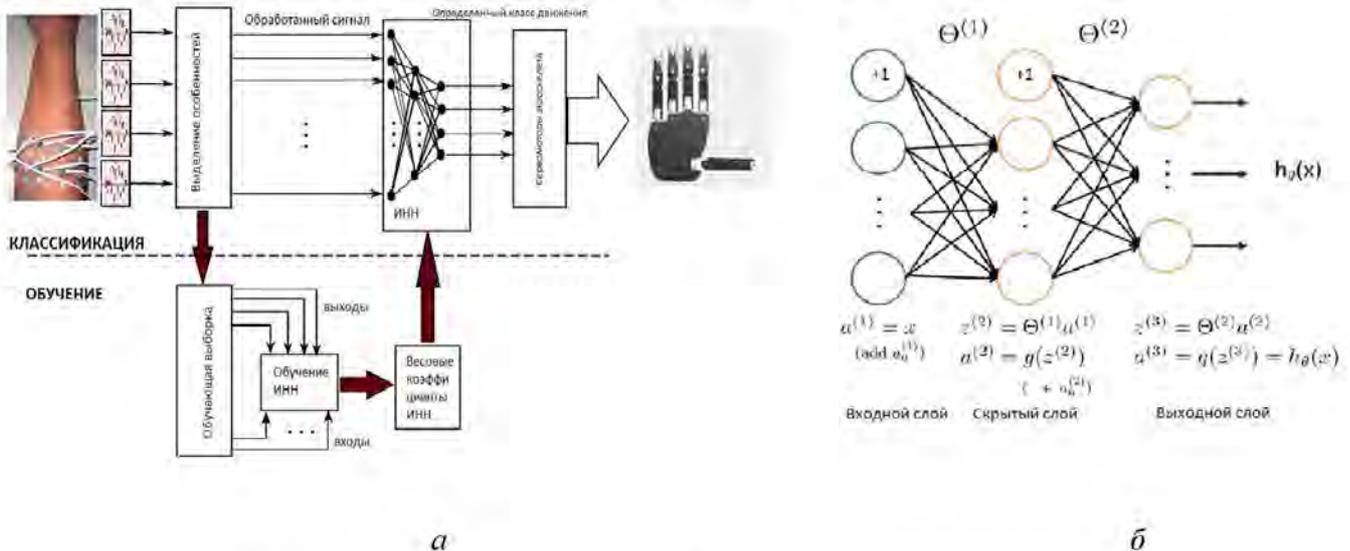


Рис. 2. Схема многофункционального управления экзоскелетом руки:
 а – перцептрон с одним скрытым слоем; б – перцептрон с использованием метода обратного распространения ошибки

Для распознавания на основе сигнала ЭМГ дискретных движений была выбрана искусственная нейронная сеть [5] с регуляризуемой функцией издержек (рис. 2а). Из различных нейронных сетей наилучший результат показал однослойный перцептрон (рис. 2б). Для выбранной нейронной сети применена регуляризуемая функция издержек, при нахождении минимума которой использовался метод сопряженных градиентов с алгоритмом Полоака-Рибери для нахождения направления поиска [6]. Суть алгоритма Полоака-Рибери состоит в следующем: генерируется последовательность, так называемых, рабочих векторов g и направлений поиска h , таких, что они взаимно сопряжены. Причем доказано, что если функция издержек, которую необходимо минимизировать, может быть выражена

квадратичной формой, то минимизация вдоль первых n направлений приведет к точному минимуму.

Прежде чем сигнал ЭМГ поступает на входной слой перцептрона, он проходит предварительную обработку для уменьшения влияния шумов [7]. Так как большинство из этих шумов высокочастотны, то сигнал ЭМГ в первую очередь обрабатывается фильтром низких частот. Затем используется вейвлетное преобразование. При представлении сигнала на первом уровне декомпозиции получаем аппроксимирующую и детализирующую составляющие, где коэффициенты детализации не содержат информации об изменениях биопотенциалов на референте и уменьшено влияние шумов. При этом размерность сигнала снижается вдвое, что позволяет избавиться от его избыточности. После описанной процедуры точность определения дискретного движения нейронной сетью превысила 94 %, причем качество работы системы практически не сказалось на ее быстродействии. Разработано приложение в программной среде MATLAB.

Полученный алгоритм был апробирован при управлении мобильным роботом Voe-Bot, который представляет собой уменьшенную копию кресла-каталки, что может быть использовано при реализации управления инвалидным креслом. Основываясь на сигналах ЭМГ и ЭЭГ, распознавалось четыре вида движений кисти: вперед, назад и повороты вправо и влево. Для определения продолжительных движений вперед и назад использовался сигнал ЭЭГ, а для дискретных движений вправо и влево – сигнал ЭМГ.



Рис. 3. а – мобильный робот Voe-Bot; б – симулятор кисти со схватами

На данном этапе было разработано приложение – симулятор руки – позволяющее через протоколы доступа Wi-Fi и TCP/IP снимать показания с усилителя биосигналов Карди 3/9 и визуализировать их, а также обрабатывать и корректировать данные. Визуальное приложение написано в программе Qtcreator. В ней присутствует как общее управление ориентацией кисти, так и определенное количество самых распространенных ее состояний (схватов). Работа с протоколами и непосредственный код снятия биопотенциалов, преобразования в вид, приемлемый микроконтроллером и передача на управление кистью реализовано в программе C#. Каждая фаланга пальцев кисти рук представлена в случае технической реализации сервоприводом с энкодером и закрепленным датчиком силы. Таким образом, есть возможность максимально точной идентификации параметров руки и апробации сложных регуляторов с целью повышения точности отработки управления.

В качестве имитации верхних конечностей человека может рассматриваться модель шестизвенного манипулятора [8]. Были решены прямая и обратная задачи кинематики для различных конфигураций антропоморфного манипулятора с использованием представления Денавита-Хартенберга [9]. Проверка конфигурации манипулятора при изменении обобщенных координат подтвердила правильность проведенных расчетов.

Было получено уравнение динамики манипулятора с шестью вращательными степенями свободы с использованием метода Эйлера-Лагранжа. Используя полученные уравнения можно рассчитать динамику любого антропоморфного манипулятора. Был разработан алгоритм независимого управления сочленениями робота и проведено сравнение пропорционально-дифференциального и пропорционально-интегрально-дифференциального регуляторов

аналитически и на основании данных, полученных в результате моделирования. Синтезированы оптимальные линейно-квадратичный и дискретный линейно-квадратичный и адаптивные регуляторы. Наилучшие показатели качества были получены при использовании дискретного линейно-квадратичного регулятора.

На основе метода «последовательный компенсатор» предлагается разработать метод управления по выходу, ориентированный на линейные и нелинейные, стационарные и нестационарные модели объектов управления, а также с запаздыванием и без запаздывания, с инвариантной структурой по отношению к модели. С его помощью будут решены сложные задачи, а сам регулятор будет очень прост в реализации.

В данном методе используется измерение только выходного сигнала объекта управления, а не его производных. Однако ранее полагалось, что относительная степень объекта управления известна и, следовательно, не анализировались различные неточности в определении размерности объекта управления, такие как неучтенная динамика или сингулярные возмущения. Например, описание объекта управления может содержать малоинерционные звенья, слабым влиянием которых на динамику основного процесса пренебрегают на этапе синтеза регулятора.

Проблема анализа систем с неучтенной динамикой или сингулярными возмущениями не является новой и ей посвящено достаточно большое число публикаций. Предварительные исследования показали эффективность данного метода для управления объектом с неучтенной паразитной динамикой. Все это говорит только о его преимуществах в сравнении с известными мировыми аналогами.

Достаточно большое число исследований посвящено управлению в условиях работы неизвестного возмущающего воздействия по измерениям только выходной переменной и сигнала управления. Однако, несмотря на большое разнообразие методов решения и моделей объектов, задача компенсации смещенных гармонических возмущающих воздействий для случая, когда канал управления характеризуется запаздыванием, не рассматривалась.

Результаты данной работы могут применяться для расчета системы управления антропоморфными манипуляторами и использоваться в устройствах управления экзоскелетами верхних конечностей человекоподобных роботов.

Заключение

В проекте реализована биотехническая система управления устройством реабилитации; произведен поиск и анализ существующих моделей устройств реабилитации и систем управления ими, в том числе патентный поиск. Исследования доказали актуальность данной работы. Была разработана схема построения устройств с человеко-машинным интерфейсом. Выбрана компонентная база для создания готового технического комплекса. Были рассмотрены способы анализа сигнала электромиографии для системы управления экзоскелетом руки. Выбран наиболее подходящий метод для разработки системы управления экзоскелетом по состоянию биопотенциалов на мышцах человека, который позволяет использовать ее в условиях, приближенных к режиму реального времени и получать точность классификации данных более 94 %.

Для определения вида планируемого движения построен классификатор, основанный на искусственной нейронной сети. Наилучший результат показал однослойный перцептрон, на входной слой которого поступал предварительно обработанный сигнал ЭМГ. В программной среде MATLAB была написана программа, производящая обработку сигнала поверхностной электромиографии, полученного от устройства регистрации биопотенциалов, и идентифицирующая вид планируемого движения.

Полученные алгоритмы были апробированы на разработанном симуляторе кисти, в частности для задания большого количества схватов кисти. Также апробация проводилась на мобильном роботе Voe-Bot, моделирующем управление креслом-каталкой посредством движений кисти.

Были решены прямая и обратная задачи кинематики для различных конфигураций антропоморфного манипулятора с использованием представления Денавита-Хартенберга. Проверка конфигурации манипулятора при изменении обобщенных координат подтвердила правильность проведенных расчетов.

Было получено уравнение динамики манипулятора с шестью вращательными степенями свободы с использованием метода Эйлера-Лагранжа. Применяя полученные уравнения можно рассчитать динамику любого антропоморфного манипулятора. Разработан алгоритм независимого управления сочленениями робота и проведено сравнение регуляторов аналитически и на основании данных, полученных в результате моделирования.

Результаты данной работы могут применяться для расчета системы управления антропоморфными манипуляторами и использоваться в устройствах управления экзоскелетами верхних конечностей человекоподобных роботов.

В перспективе дальнейших исследований стоят задачи повышения точности идентификации сигналов мышечной активности человека и создания полноразмерного макета экзоскелета, управляемого с помощью разработанной системы.

Были частично устранены существовавшие недостатки и созданы следующие условия успешного распространения экзоскелетов:

- Снижение стоимости. Всего в России, по экспертным оценкам, постоянно или временно на инвалидных колясках передвигается около 100 тыс. человек. Около 0,5 млн людей с нарушениями опорно-двигательного аппарата имеют ограничения возможности передвижения различной степени и около 1,5 млн детей имеют диагноз «детский церебральный паралич». В связи с этим стоимость экзоскелетов не должна препятствовать их доступности. Подобранная элементная база позволяет сделать выпуск экзоскелетов дешевле в несколько раз.

- Минимизация массогабаритных показателей. Вес и габариты конструкции также не должны служить поводом ограничения использования экзоскелета, полученные результаты позволили исправить этот недостаток.

- Повышение автономности за счет меньшего энергопотребления. Среднее время работы экзоскелета 4–6 ч. (по текущим расчетам возможно увеличение времени работы до 12 ч.).

- Увеличение функциональности за счет «интеллектуализации» систем. Наряду с развитием в локомоционном (компактные актюаторы), энергетическом (элементы питания высокой емкости) и сенсорном оснащении существующих технических решений, они характеризуются недостаточной гибкостью со стороны управляющей системы. Использование адаптивных алгоритмов управления позволяет исправить существовавший недостаток и сделать систему готовой к реальному применению.

Таким образом, в рамках данной работы разработана конкурентоспособная система управления для экзоскелетов.

Области возможного использования результатов проекта

Применение разработанной системы управления устройствами реабилитации может помочь существенно улучшить ситуацию и ускорить процесс реабилитации инвалидов и их социальной адаптации.

Результаты данной работы могут быть использованы на практике в различных технических и физических системах. В частности, в системах управления роботами, манипуляторами, мехатронными комплексами для реабилитации людей с ограниченными возможностями, космическим оборудованием, шагающими роботами, маятниковыми системами и т. п.

Можно выделить следующие сферы возможного применения экзоскелетов с разработанной биотехнической системой управления:

- военная и правоохранительная – для увеличения мышечной силы солдат при ношении тяжелой амуниции, брони и оружия;

- медицина – при реабилитации больных после травм опорно-двигательного аппарата. Экзоскелеты могут выполнять и функции протезов для инвалидов;

- сферы, связанные с тяжелым физическим трудом, – как для уменьшения вероятности травмирования рук, ног и спины, так и для увеличения мышечной силы.

В то же время разработанный человеко-машинный интерфейс может быть внедрен в область развлечений и интерактивный образовательный процесс, так как ориентирован на популярное направление взаимодействия с роботами и внедрение их в повседневную жизнь. Например, можно будет влиять на домашнего телеуправляемого робота-ассистента только с помощью силы мысли.

Следует отметить значимость данного исследования в образовательном процессе. Полученные результаты могут быть использованы в широко распространенных мехатронных учебно-исследовательских комплексах, которые входят в лабораторное оборудование многих отечественных и иностранных вузов, для проведения научных исследований и учебного процесса в области мехатроники, систем автоматического управления, а также биомедицинских исследований.

Публикации

1. *Borgul A.S., Zimenko K.A., Margun A.A., Kremlev A.S., Krasnov A.Y.* Intuitive Control for Robotic Rehabilitation Devices by Human-Machine Interface with EMG and EEG Signals // 17th International conference on Methods and Models in Automation and Robotics (MMAR 2012) (IEEE, 27–30 August 2012, Międzyzdroje, Poland): Abstracts. 2012. P. 308–311.
2. *Bobtsov A.A., Kolyubin S.A., Pyrkin A.A., Borgul A.S., Zimenko K.A., Rabysh E.Y.* Mechatronic and Robotic Setups for Modern Control Theory Workshops // Preprints of the 9th IFAC Symposium on Advances in Control Education (ACE 2012) (Nizhny Novgorod, Russia, 2012). 2012. P. 348–353.
3. *Боргуль А.С., Зименко К.А., Маргун А.А.* Биоинформационные технологии в управлении техническими системами // Сб. тезисов докладов XIX Всероссийской научно-методической конференции «Телематика'2012». СПб., 2012. С. 147.
4. *Боргуль А.С., Зименко К.А., Маргун А.А.* Биотехническая система управления устройством реабилитации // Сб. тезисов докладов I Всероссийского конгресса молодых ученых. СПб., 2012. С. 197.
5. Свидетельство № 2012615103 от 07.06.2012 о государственной регистрации программы для ЭВМ «Управление биотехническим устройством реабилитации: Идентификация и классификация сигналов обратной связи».
6. Свидетельство № 2012615104 от 07.06.2012 о государственной регистрации программы для ЭВМ «Система стабилизации робота в неустойчивом положении».
7. Заявка № 2012132879 от 10.07.2012 на получение патента РФ на полезную модель «Многофункциональный активный протез руки».

Литература

1. <http://www.biodex.com>: сайт организации Biodex – разработчика медицинского оборудования.
2. *Бернштейн Н.А.* Физиология движений и активность. М., 1990. – 689 с.
3. *Parker P., Englehart K., Hudgins B.* Myoelectric signal processing for control of powered limb prostheses // Journal of Electromyography and Kinesiology. 2006. Vol. 16. Issue 6. P. 541–548.
4. *Englehart K., Hudgins B.* A robust, real-time control scheme for multifunction myoelectric control // IEEE Transactions on Biomedical Engineering. 2003. Vol. 50. № 7. P. 848–854.
5. *Herle S., Man S.* Processing surface electromyographical signals for myoelectric control // Rehabilitation Engineering / Tan Yen Kheng (ed.). Vukovar, 2009. P. 223–244.
6. *Chaiyaratana N., Zalzal A.M., Datta D.* Myoelectric signal pattern recognition for functional operation of upper-limb prosthesis // Proceeding of International Conference on Disability, Virtual Reality and Associated Technologies. Maidenhead, UK, 1996. P. 151–160.
7. *Akay M.* Detection and Estimation Methods for Biomedical Signals. Orlando, 1996. – 268 p.

8. *Kuiken T.A. et al.* Targeted muscle reinnervation for real-time myoelectric control of multifunction artificial arms // *Journal of the American Medical Association*. 2009. Vol. 301. № 6. P. 619–628.
9. *Шаньгин Е.С.* Управление роботами и робототехническими системами. Уфа, 2005. – 188 с.



Быковская Елена Александровна
Факультет естественнонаучный
Кафедра экологического приборостроения и мониторинга
E-mail: brownies@mail.ru

ОБОСНОВАНИЕ НЕОБХОДИМОСТИ ОЧИСТКИ РЕК И КАНАЛОВ САНКТ-ПЕТЕРБУРГА ОТ ДОННЫХ ОТЛОЖЕНИЙ

Е.А. Быковская

Научный руководитель – профессор Л.А. Конопелько

Введение

Санкт-Петербург – крупнейший мегаполис, имеющий уникальную водную систему, площадь акватории которой достигает 840 км². Этот сложный водохозяйственный комплекс требует постоянных мероприятий по его очистке, содержанию и благоустройству. В черте города в общей сумме протекает около 93 рек, их рукавов, каналов и протоков. Петербург также называют Северной Венецией. Благодаря своему географическому расположению город не только окно в Европу, но и крупнейший промышленный центр страны.

Многолетнее использование водных ресурсов и сброс неочищенных производственных вод привели к нарушению экологического баланса водных артерий города. Все изменения в водных экосистемах прежде всего отражаются на сообществах организмов, населяющих их. За последние десятилетия в Невской губе сократились запасы и уловы рыб с длительным жизненным циклом, таких как лещ и щука, ценных объектов лова.

Дельта реки Невы и побережье Невской губы – пример разительных изменений, которые человек вносит в окружающую его природную среду. В течение многих лет они аккумулируют огромную массу загрязняющих веществ города и северо-западного региона, поступающих с твердым и растворенным речным стоком. Ситуация с экологическим состоянием рек в настоящее время очень напряженная. Необходимо сохранить и максимально восстановить биосферу водного бассейна Невы.

На территории Санкт-Петербурга расположено 652 водоема и 396 водотоков. Водные объекты города характеризуются как «загрязненные» и «умеренно загрязненные». Основной источник загрязнения поверхностных вод – сброс сточных и ливневых вод без очистки. В настоящее время на очистные сооружения поступает 94 % городских стоков, при этом очистку они проходят в соответствии с последними рекомендациями Хельсинской комиссии по защите Балтики (ХЕЛКОМ). Таким образом, проблема с очисткой воды сейчас стоит не так остро. Однако первая очередь продолжения строительства Главного канализационного коллектора города была запущена только осенью 2008 г. (начато оно было еще в 1970-е гг. XX в.), а до 2011 г. в Неву и другие водные объекты города поступало 11 млн м³ загрязненных стоков.

Одной из актуальных экологических проблем до сих пор остается предотвращение загрязнения природных вод и почвы токсичными тяжелыми металлами (ТМ). Они попадают в окружающую среду со сточными водами различных промышленных предприятий. Например, химических предприятий, с отработанными красильными растворами, из

гальванических цехов машиностроительных производств и т. д. Сильно загрязняют окружающую среду тяжелыми металлами и твердые промышленные и бытовые отходы.

Процесс накопления тяжелых металлов в донных отложениях (ДО) внутренних водоемов, рек и каналов обусловлен достаточно высоким содержанием в водах фосфат-ионов. Они, связывая тяжелые металлы в труднорастворимые соединения, приводят к их переходу в ДО. Водоемы, особенно бессточные и слабопроточные, превратились в накопители многообразных городских отходов.

Возникает вероятность вторичного загрязнения водоемов по причине выноса загрязняющих веществ из ДО в иловую природную воду и далее по схеме: «вода – донные отложения – вода». Вынос загрязняющих веществ может происходить и в результате проведения дноуглубительных работ, намыва территорий, а также являться последствием наводнений, характерных для нашего города.

Необходимо проводить постоянный мониторинг ДО (особенно в промышленных зонах города) и очистку от них наиболее загрязненных рек и каналов Петербурга, учитывая многолетние влияния промышленных предприятий и постоянный водооборот.

В настоящее время существует множество способов контроля и мониторинга загрязняющих веществ в природных средах. Наиболее часто для определения токсичных металлов применяются спектральные методы: фотометрический, спектрофотометрический, рентгено-флуоресцентный, атомно-абсорбционный, атомно-эмиссионный с индуктивно-связанной плазмой (АЭС-ИСП), масс-спектрометрический с индуктивно-связанной плазмой [1].

Цель работы – обоснование необходимости очистки рек и каналов Санкт-Петербурга и мониторинга содержания тяжелых металлов в ДО и в водной среде, а также применение метода атомно-эмиссионной спектроскопии с генерацией гидридов как приоритетного.

Совершенствование метода АЭС-ИСП за счет использования его совместно с методом генерации гидридов позволит увеличить чувствительность метода при определении гидридообразующих элементов в десятки раз; снизить уровень мешающих влияний матрицы раствора; исключить потери пробы в распылительной камере при вводе ее в пламя в газообразной форме; увеличить селективность; снизить фоновый сигнал; при верном подборе скорости расхода и подачи реагентов почти полностью исключить матричные помехи. Разрабатываемая методика на основе метода АЭС-ИСП с генерацией гидридов позволит проводить постоянный мониторинг водного бассейна Санкт-Петербурга по контролю наличия в нем тяжелых металлов.

В задачи проекта входят: изучение экологической обстановки рек и каналов Санкт-Петербурга; обоснование необходимости контроля и проведения очистных мероприятий, с изучением международного опыта; определение приоритетных загрязнителей (ПХБ, ХОП, СПАВ, нефтепродукты, ТМ) как наиболее стойких и токсичных; выбор опаснейших ТМ; обзор существующих методов анализа ТМ; изучение метода атомно-эмиссионной спектроскопии; изучение метода генерации гидридов; обоснование выбора метода атомно-эмиссионной спектроскопии с генерацией гидридов; разработка методики выполнения измерений ТМ в донных отложениях, установление метрологических характеристик методики.

Определение приоритетных загрязнителей

Антропогенное влияние на качество вод Санкт-Петербурга наиболее заметно проявляется в повышенном содержании в них ТМ, нефтепродуктов (НП), полихлорированных бифенилов (ПХБ), хлорорганических пестицидов (ХОП), синтетических поверхностно-активных веществ (СПАВ), полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) и ряда других техногенных поллютантов.

Одно из сильнейших по действию и наиболее распространенное – химическое загрязнение неорганическими поллютантами, а именно ТМ. Они вызывают наибольший интерес не только из-за своей высокой токсичности, но и из-за стабильности в водной среде. Попав в экосистему, ТМ совершают круговорот, никуда не исчезая, а лишь мигрируя по различным ее звеньям (фитопланктон – рыба – человек), вызывая мутации и гибель организмов. Например, в организме ТМ чаще всего не подвергаются существенным

превращениям, как это происходит с органическими токсикантами, и, включившись в биохимический цикл, крайне медленно покидают его.

В настоящее время антропогенное загрязнение окружающей среды ТМ намного превышает естественные источники их появления, такие как магматические и осадочные породы, а также породообразующие минералы.

Прежде всего, представляют интерес те металлы, которые широко применяются в различных промышленных производствах. Несмотря на очистные мероприятия, содержание соединений ТМ в промышленных сточных водах довольно высокое. Большие массы этих соединений поступают в водную среду через атмосферу и в результате накопления во внешней среде и представляют серьезную опасность с точки зрения их биологической активности и токсических свойств. К ним относятся: свинец, ртуть, кадмий, цинк, висмут, кобальт, никель, медь, олово, сурьма, ванадий, марганец, хром, молибден и мышьяк.

Как токсичные вещества ТМ обладают высокой способностью активно проникать в самые разнокачественные субстанции гидросистем: в больших количествах они обнаруживаются в воде, грунтах, внутренних органах и костях рыб и их паразитах, в мягких тканях моллюсков, других водных беспозвоночных, а также в растениях [2].

Одними из самых токсичных металлов, попадающих в окружающую среду, являются мышьяк и сурьма. При повышенных концентрациях они обладают сильным токсическим действием и могут вызывать кишечные отравления. А по своим отдаленным последствиям опасны для человека, употребляющего в пищу водные организмы (рыбу, моллюски, водоросли и др.).

- **Мышьяк (As).** Ядовитое вещество, ингибирующее различные ферменты, оказывает отрицательное действие на метаболизм. Возможно канцерогенное действие (ГН 2.1.7.020-94). Соединения мышьяка в повышенных концентрациях являются токсичными для организма животных и человека: они тормозят окислительные процессы, угнетают снабжение кислородом органов и тканей. В окружающей среде мышьяк находится в виде разнообразных химически устойчивых форм. Его два главных состояния окисления: As(III) и As(V). Соединения пятивалентного мышьяка в организме превращаются в более токсичные соединения трехвалентного мышьяка [3]. Мышьяк включен в группу безусловных канцерогенов для человека, поскольку вызывает рак легких и кожи. В случае сильного отравления основной признак – нарушение работы желудочно-кишечного тракта, сопровождаемое спазмами и диареей, который проявляется почти немедленно. Выделение мышьяка из организма происходит медленно, чем и обусловлена возможность его кумуляции.

Предельно допустимая концентрация (ПДК) мышьяка в воде составляет 0,05 мг/дм³ (лимитирующий показатель вредности – санитарно-токсикологический) по СанПин 2.1.4.1074-01 и 0,01 мг/л по ВОЗ и ПДК рыбохозяйственная – 0,05 мг/дм³. ПДК в почвах 2,0 мг/кг по ГН 2.1.7.2041-06. Согласно государственному стандарту (СанПин 2.1.7.1287-03), мышьяк – химическое загрязняющее вещество первого класса опасности.

- **Сурьма (Sb).** Сурьма раздражает слизистые оболочки, ткани и центральную нервную систему, вызывает гемолиз (распад красных кровяных тел). Как и мышьяк, имеет два главных состояния окисления: Sb(III) и Sb(V). Соединения трехвалентной сурьмы более токсичны, чем пятивалентной.

ПДК сурьмы в воде составляет 0,05 мг/дм³ (лимитирующий показатель вредности – санитарно-токсикологический), и 0,005 мг/л по ВОЗ, ПДК рыбохозяйственная – 0,01 мг/дм³. ПДК в почвах 4,5 мг/кг по ГН 2.1.7.2041-06. Согласно государственному стандарту (СанПин 2.1.7.1287-03), сурьма – химическое загрязняющее вещество второго класса опасности.

Проблема загрязнения ТМ поверхностных вод приобретает все большую актуальность ввиду их высокой опасности и способности в течение длительного периода накапливаться в компонентах экосистем и передаваться по пищевым цепям.

ТМ – один из основных загрязнителей ДО:

- в отличие от органических загрязняющих веществ, подвергающихся процессам разложения, металлы способны лишь к перераспределению между отдельными компонентами географической оболочки;
- сравнительно легко накапливаются в ДО, но трудно и медленно из них удаляются;

- хорошо аккумулируются органами и тканями человека, теплокровных животных и гидробионтов;
- высокотоксичны для различных биологических объектов.

В настоящее время особое внимание уделено изучению влияния нагрузок на водные объекты тяжелыми металлами, являющимися приоритетными загрязняющими веществами урбанизированных ландшафтов. Однако данные по комплексному загрязнению ДО рек и каналов Невской дельты, которые основаны на результатах работ ФГУП «ВСЕГЕИ», ГНПП «Севморгео», а также материалах ОАО «Ленморниипроекта», содержат сведения лишь о таких металлах, как серебро (Ag), ванадий (V), хром (Cr), никель (Ni), медь (Cu), свинец (Pb), кадмий (Cd) и ртуть (Hg) [4].

Учитывая приведенные ранее в краткой форме токсикологические характеристики сурьмы и мышьяка, необходимо включить данные ТМ в перечень исследуемых загрязнителей. Поэтому они как наиболее опасные и токсичные для живых организмов были выбраны в качестве определяемых металлов-загрязнителей.

Обоснование выбора метода анализа для определения содержания металлов в донных отложениях

Правильное количественное определение мышьяка и сурьмы в окружающей среде играет большую роль, так как опасны они даже в малых концентрациях. Атомно-эмиссионный спектральный анализ – практически самый распространенный экспрессный высокочувствительный метод идентификации и количественного определения малых содержаний этих элементов.

Метод основан на термическом возбуждении атомов (плазменные источники) и регистрации их оптического спектра. Интенсивность излучения I зависит от значения массовой концентрации элемента в растворе анализируемой пробы и выражается формулой [5]:

$$I = BN_o \exp(-E_m/kT), \quad (1)$$

где B – константа; N_o – число невозбужденных атомов (пропорциональное их концентрации); E_m – энергия возбужденного уровня; k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура.

Каждый элемент имеет свой собственный характеристический ряд энергетических уровней и, таким образом, уникальный ряд длин волн поглощения и эмиссии.

Современные анализаторы на основе этого метода содержат полихроматор с решеткой и приемники с зарядовой связью. Такая оптическая схема позволяет одновременно регистрировать все спектральные линии в ультрафиолетовом и видимом диапазонах. Программное обеспечение современных АЭС-ИСП-анализаторов способно автоматически рассчитывать концентрацию определяемых элементов по интенсивности их спектральных линий с коррекцией фона и возможных спектральных наложений.

Таким образом, основными критериями выбора метода атомно-эмиссионной спектроскопии с термическими источниками возбуждения атомов являются:

- многоэлементность (высокотемпературный источник возбуждения электронов в атомах, позволяющий порождать одновременно большое число энергетических уровней для всех выбранных элементов и совместно измерять эмиссию нескольких из них);
- высокая чувствительность и низкие пределы обнаружения;
- линейность градуировочных графиков;
- низкий уровень матричных влияний;
- небольшие количества пробы, необходимые для анализа содержания металлов.

Обоснование необходимости использования метода генерации гидридов совместно с АЭС-ИСП

Несмотря на некоторые преимущества метода АЭС-ИСП, существует ряд трудностей, возникающих при определении отдельных элементов, например, таких как мышьяк и сурьма. Эти металлы могут попадать в объекты окружающей среды как от естественных, так и от антропогенных источников. При этом токсичность этих элементов зависит от степени их окисления и вида соединения.

Так как мышьяк и сурьма слабовозбуждаемые в плазме элементы, то энергии необходимой для полного их возбуждения в жидкой пробе не достаточно в связи с тем, что большая ее часть расходуется на нагрев и распад воды. Кроме того, в процессе спектрального анализа проявляются ошибки, обусловленные влиянием других элементов раствора, спектральными помехами, потерями в распылительной камере.

Метод генерации гидридов – определение элементов, способных образовывать летучие газообразные гидриды, решит перечисленные проблемы и позволит достичь большей точности количественного определения различных форм или фаз, в которых присутствуют As и Sb (рис. 1).

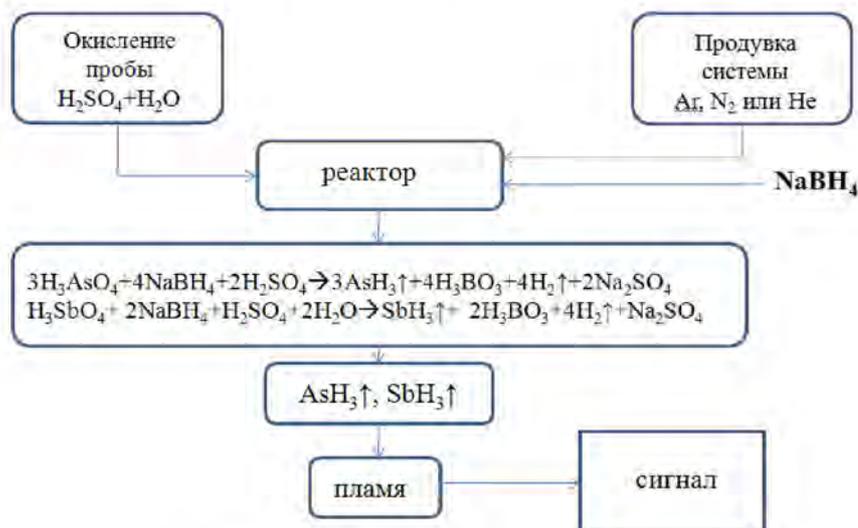


Рис. 1. Схема гидридной системы

В настоящее время генераторы гидридов в основном применяются совместно с атомно-абсорбционными спектрометрами и анализаторами ртути. Недостатками такого анализа являются одноэлементность и трудоемкость (для выполнения измерений выбранных металлов требуется смена источника излучения).

Использование генератора гидридов совместно с АЭС-ИСП даст ряд преимуществ:

- увеличение чувствительности для гидридообразующих элементов в десятки раз;
- уменьшение уровня влияния матрицы раствора, так как неисследуемые компоненты остаются в жидкой фазе;
- исключение потерь пробы, при вводе ее в газообразной форме в пламя распылительной камеры;
- увеличение селективности;
- снижение фонового сигнала;
- практически полное исключение матричных помех при верном подборе скорости расхода и подачи реагентов.

Анализ существующих методик измерений As и Sb в донных отложениях

Мышьяк и сурьма являются одними из приоритетных загрязняющих веществ урбанизированных ландшафтов. Выявление их – одна из важнейших задач при проведении экологических и санитарно-гигиенических оценок уровня загрязнения донных отложений.

Из сравнения двух изученных методик измерения (Табл. 1) концентраций As и Sb в ДО можно сделать вывод о том, что при использовании метода инверсионной вольтамперометрии наблюдается большая погрешность при определении низких концентраций исследуемых элементов. Предел обнаружения находится ниже порога допустимых концентраций As и Sb (ПДК(As) – 2,0 мг/дм³, ПДК(Sb) – 4,5 мг/дм³), что является достаточным. Методика, основанная на методе атомно-абсорбционной спектрометрии с предварительной генерацией гидридов, позволяет определять различные формы или фазы элементов [6, 7]. Однако для

качественного экологического мониторинга требуются более низкие пределы обнаружения, которые дадут возможность определить фоновые концентрации искомых элементов.

Таблица 1

Нормативная документация на методы определения As и Sb в почвах и донных отложениях

Параметры сравнения	Инверсионная вольтамперометрия		ААС с предварительной генерацией гидридов	АЭС-ИСП с предварительной генерацией гидридов	
	МВИ ФР.1.31.2002.00594		ПНД Ф 16.1:2.2:3.17-98	Разрабатываемая методика	
	As	Sb	As и Sb	As	Sb
Диапазон измеряемых концентраций, мг/кг	от 0,1 до 10, Св.10	от 1 до 10, Св.10	0,2 до 20	от 0,05 до 100	от 5,0 до 100
Погрешность $\pm\delta$, %	0,1-1,0 – 40 1,0-10 – 25 Св.10 – 18	1,0-10 – 35 Св. 10 – 21	60	25	25

Из вышесказанного можно сделать вывод о необходимости совершенствования методов определения ТМ (за счет применения метода АЭС-ИСП совместно с методом генерации гидридов), а также разработки новой методики измерения (МИ) для определения токсичных металлов в ДО, которая позволит:

- достичь большей точности при определении As и Sb на низких уровнях и повысить метрологические характеристики при определении низких концентраций;
- количественно определять различные формы или фазы, в которых As и Sb присутствуют в исследуемой среде, без смены источников возбуждения атомов.

Описание экспериментальных исследований

При внедрении в практику совместного применения методов генерации гидридов и АЭС-ИСП был использован генератор гидридов HGX-200 фирмы СЕТАС.

На первом этапе исследования с использованием государственных стандартных образцов (ГСО) растворов металлов были оценены режимы работы спектрометра напрямую и с подключением генератора гидридов. При анализе приготовленных растворов с содержанием As (0,005 мг/дм³; 0,01 мг/дм³; 0,05 мг/дм³; 0,1 мг/дм³; 0,5 мг/дм³; 1,0 мг/дм³) при двух режимах работы спектрометра были получены следующие градуировочные графики (рис. 2).

При концентрации в растворе As менее 0,5 мг/дм³ его обнаружение без использования генератора гидридов невозможно.

На втором этапе была оценена работа комплекса в зависимости от скорости подачи инертного газа-носителя (аргона Ar) (рис. 3). Исследовались ГСО (№ 7143-95) с концентрацией мышьяка 0,1 мг/дм³.

При увеличении скорости подачи газа (от 0,05 л/мин до 0,1 л/мин) увеличивается количество ионов, прошедших в единицу времени через аналитическую зону плазмы. Наибольший сигнал получен при скорости подачи газа 0,1-0,15 л/мин. Это свидетельствует о том, что количество ионов образовавшихся в единицу времени равно количеству ионов прошедших через плазму. Оптимальная скорость расхода газа 0,15 л/мин, так как при меньшей скорости подачи реакции восстановления протекают нестабильно, а при большей – реакция восстановления может пройти не полностью.

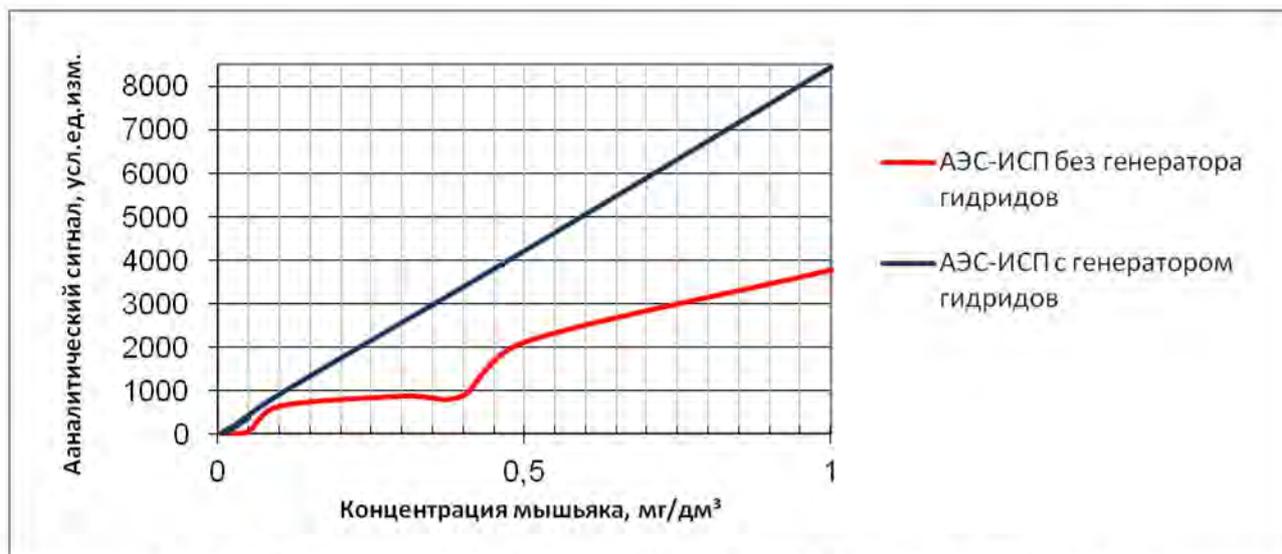


Рис. 2. Градуировочные графики двух режимов работы спектрометра

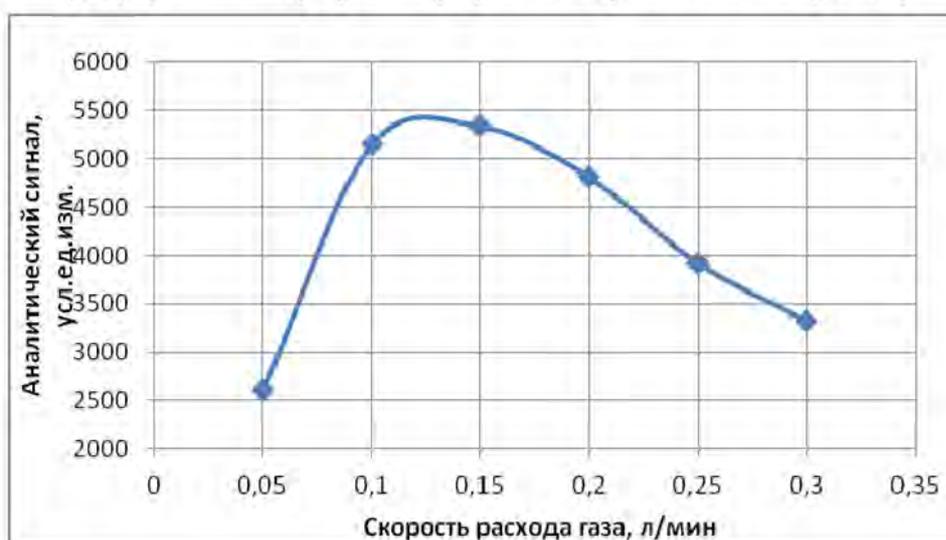


Рис. 3. Зависимость аналитического сигнала от скорости расхода газа-носителя

Разработана МИ в точном соответствии с требованиями ГОСТ Р 8.563-2009 «Методики (методы) измерений». Методика предназначена для определения массовой доли мышьяка и сурьмы в пробах (образцах) донных отложений при содержании от 0,05 до 100 мг/кг. Пробы, анализируемые по настоящей методике, отбираются и подготавливаются к анализу в соответствии с нормативными документами, распространяющимися на ДО согласно ГОСТ 17.1.5.01, ГОСТ 5180 и др. Погрешность измерений $\pm 25\%$.

Полученные данные, характеризующие содержание ТМ в пробах, сравниваются с ПДК почв, так как для донных отложений ПДК не разработано [8]. Сравнение значения массовой концентрации мышьяка в исследуемых реках и каналах Санкт-Петербурга с ПДК для почв представлено в Табл. 2.

Из Табл. 2 видно, что для внутригородских водотоков техногенное загрязнение донных отложений тяжелыми металлами очень высоко и составляет, например, для реки Волковка – 12 ПДК, а для реки Охта – 18 ПДК. Это легко объяснить, поскольку данные водотоки протекают по сильно загрязненным промышленным районам.

Таблица 2

Сравнение значения массовой концентрации мышьяка в исследуемых реках и каналах Санкт-Петербурга с ПДК для почв

Исследуемые реки и каналы Санкт-Петербурга	Массовая концентрация As, мг/кг	ПДК As для почв, мг/кг	Кратность превышения ПДК
Река Старожиловка	6,4	2	3,2
Река Красненькая	8,3		4,1
Река Монастырка	1,5		-
Река Охта	36,8		18,4
Река Пряжка	10,4		5,2
Шкиперский канал	1,5		-
Дудергофский канал	7,5		3,7
Река Волковка	24,7		12,4

Кроме того, было отмечено, что на значительные содержания мышьяка в пробах ДО непосредственно влияет расход воды. Чем он больше, тем больше и скорость течения [9]. С уменьшением расхода воды ослабевает стоковое течение в водотоке, расширяются зоны обратных и водоворотных течений. А это ведет к ухудшению санитарного состояния. Например, средний многолетний расход воды у реки Охта составляет 7,2 м³/с, а у реки Большая Нева 1370 м³/с. Следовательно, река Охта относится к слабопроточным водоемам, что непосредственно сказывается на уровне аккумуляции ТМ донными отложениями. Река Охта фактически превратилась в накопитель многообразных городских отходов.

Главными источниками загрязнения рек Охта и Волковка являются природопользователи, осуществляющие сбросы неочищенных сточных вод и не выполняющие требования Федерального Закона «Об отходах производства и потребления». Территория таких предприятий находится в захлапленном состоянии, а в водоохраных зонах складываются промышленные отходы. После попадания в водную среду опасные вещества оседают в ДО.

В настоящее время мониторинг состояния большинства водоемов города не проводится, за исключением систематических научно-исследовательских работ, проводимых различными институтами. Например, Институтом озераведения РАН, кафедрой экологической геологии геологического факультета СПбГУ и НИИ ЗК СПбГУ. Анализ содержания загрязняющих веществ в ДО проводится в основном перед началом дноуглубительных работ. Большинство данных о ДО содержат информацию только об их объемном содержании в водоемах [10, 11, 12].

Из сказанного выше можно сделать вывод о необходимости увеличения количества водотоков, подлежащих постоянному мониторингу. Также целесообразно внедрить в систему мониторинга водных объектов экосистемный мониторинг, который будет направлен на восполнение недостающей информации о структурно-функциональных особенностях водных экосистем. Это необходимо для составления надежных прогнозов изменения качества воды и состояния экосистем. В данном случае экосистемный мониторинг даст возможность прогнозирования вторичного загрязнения водных объектов вследствие вымывания токсичных веществ из ДО и получения оценки состояния водоема по соотношению внешней и внутренней нагрузок.

Анализ современной системы мониторинга донных отложений в Санкт-Петербурге и обоснование необходимости очистки рек и каналов города от донных отложений

Существует ряд научных и организационных проблем, которые необходимо принять во внимание при разработке программы экосистемного мониторинга:

- существующая в России система контроля качества водной среды, основанная на системе ПДК для рыбохозяйственных водоемов, не учитывает процессы аккумуляции веществ в ДО, что не отражает в полной мере токсикологическую нагрузку на экосистему;
- из-за отсутствия контроля процессов попадания загрязняющих веществ в поверхностные воды из ДО (это источники вторичного загрязнения водных масс) возможно

наличие высоких концентраций загрязняющих веществ в водных объектах, в которых сброс сточных вод нормировался и концентрации были допустимыми.

- не существует ПДК токсичных водорастворимых ионных форм ТМ в воде и донных отложениях;
- имеющиеся химико-аналитические методы не позволяют разделить загрязняющие вещества на природные (эрозия и другие природные процессы) или появившиеся от антропогенных источников;
- отсутствие финансирования научных, природоохранных и контролирующих учреждений со стороны государства и городской администрации.

ДО депонируют поступающие в водотоки загрязняющие вещества, а вследствие характерных для многих водоемов города малых глубин они могут поступать в водную массу в результате взмучивания (наводнений, судоходства, дноуглубительных работ). Следовательно, состояние ДО является одним из факторов, определяющих качество воды в водоеме, в связи с чем, подлежит обязательному изучению. Необходимо контролировать внутригодовую и многолетнюю динамику состояния ДО, для составления плана мероприятий по проведению дноочистительных работ. В качестве индикаторов состояния водных объектов важно учитывать степень загрязнения ДО водоемов, являющуюся показателем уровня внешней нагрузки за значительные интервалы времени и истории техногенного загрязнения урбанизированных территорий. Также целесообразно определять соотношение внешней и внутренней нагрузки, отражающее уровень вторичного загрязнения водоема за счет поступления токсичных веществ из ДО, значимость которого возрастает по мере ухудшения экологического состояния водоема.

Экологическое состояние водотоков определяется не только качеством толщи воды, но и в значительной мере процессами массопереноса на границе «вода – дно». Для водотоков, испытывающих постоянную антропогенную нагрузку, например рек Волковка и Охта, они могут приводить не только к ускоренному накоплению загрязняющих веществ в ДО, но и к вторичному загрязнению водных объектов. В донных осадках происходит активная аккумуляция тяжелых металлов, нефтепродуктов и других поллютантов.

В результате длительного антропогенного воздействия внутренняя нагрузка металлами может достичь величин соизмеримых с внешним их поступлением и стать значимой составляющей в формировании суммарной нагрузки. Даже если внешний источник загрязнения устранен, то в дальнейшем становится возможна обратная миграция металла из ДО в воду. Исключение влияния токсичных ДО – одна из первоначальных задач для обеспечения экологической безопасности водоемов Санкт-Петербурга. В этом случае необходимо оценить реальные возможности для изъятия загрязненных ДО или проведения их захоронения за счет подсыпки песка или грунта.

- При захоронении ТМ в ДО существует опасность залпового выброса в результате изменения условий захоронения. Их причинами могут стать изменение рН среды, а также взмучивание ДО в результате наводнений характерных для Санкт-Петербурга. Так как большое количество рек и каналов являются судоходными, в городе часто проводятся дноуглубительные работы, которые также влияют на взмучивание ДО и переход из них ТМ в толщу воды.

- При очистке рек и каналов может возникнуть ряд трудностей, связанных с наличием многочисленных низких мостов и незначительной глубиной некоторых водотоков, которая ограничивает возможность прохождения судов. Однако в настоящее время технологии, применяемые ГУП «Ленводхоз», позволяют проводить дноуглубительные работы в самых труднодоступных местах с обилием проложенных под водой кабелей, трубопроводов и коммуникаций [13].

Работы по очистке рек и каналов от ДО ведутся с момента постройки города. На реке Охта они проводились в 2006–2008 гг. В связи с высокой антропогенной нагрузкой на реку их необходимо продолжить. Стоит проводить постоянный мониторинг ДО (особенно в промышленных зонах города, а не только в центральной части) и очистку от них наиболее

загрязненных рек, например реки Волковки, и каналов Петербурга, учитывая многолетние влияния промышленных предприятий и постоянный водооборот.

Области возможного использования результатов проекта

Долговременные перспективы комплексного использования водоемов и водотоков требуют изучения их современного экологического состояния и оценку уровней загрязнения с целью прогнозирования качества воды. Одним из наиболее объективных и надежных показателей состояния загрязнения водного объекта и общего уровня техногенной нагрузки на него является содержание тяжелых металлов в ДО, которые отражают многолетние процессы накопления и трансформации вещества в водном объекте.

Изучение современного состояния загрязнения ДО тяжелыми металлами, анализ особенностей их накопления на различных участках – необходимые составляющие оценки эколого-токсикологического состояния рек и каналов Санкт-Петербурга.

Результаты исследования позволят с высокой точностью определять качественное и количественное содержание токсичных металлов в пробах ДО, выявлять их наличие на низких уровнях содержания и отделять от природных компонентов с большей чувствительностью и точностью.

Исследование обладает научной новизной, так как до настоящего времени в Санкт-Петербурге не проводилось постоянного мониторинга ДО. Практическое значение научно-технического исследования заключено в возможности разработки постоянной системы мониторинга ДО в водотоках Санкт-Петербурга.

Заключение

В соответствии с поставленными задачами в процессе выполнения исследования была изучена экологическая обстановка рек и каналов Санкт-Петербурга; определены приоритетные загрязнители акватории города, дана их краткая характеристика.

В работе представлено описание метода атомно-эмиссионной спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой и метода генерации гидридов, используемых для определения содержания металлов в ДО.

В ходе исследования были получены значения массовых концентраций тяжелых металлов в пробах ДО, отобранных в районах повышенной техногенной нагрузки; проведен анализ степени их загрязненности; рассчитана кратность превышения ПДК в анализируемых пробах; построены диаграммы, характеризующие изменение концентрации исследуемых металлов в ДО по мере удаления от мест повышенной техногенной нагрузки.

По экспериментальным данным определены оптимальные режимы работы спектрометра «Эридан-500» и генератора гидридов «HGХ-200». Разработана методика измерений массовой концентрации токсичных металлов мышьяка и сурьмы в ДО методом атомно-эмиссионной спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой совместно с генерацией гидридов и подготовлена для дальнейшей аттестации.

Проведен анализ современной системы мониторинга ДО в Санкт-Петербурге, даны рекомендации по ее совершенствованию. В работе представлены данные, обосновывающие необходимость очистки рек и каналов Санкт-Петербурга от ДО.

Публикации

1. *Быковская Е.А.* Обоснование необходимости очистки рек и каналов Санкт-Петербурга от донных отложений (Substantiation of necessity for cleaning of rivers and canals Saint-Petersburg from bottom sediments) // Сб. материалов VI Международной конференции «ЭКОГИДРОМЕТ – 2012». Экология больших городов и промышленных зон (РГТМУ, Санкт-Петербург). СПб., 2012. С. 251–253.
2. Подготовлена к печати статья в Сборник трудов I Всероссийского конгресса молодых ученых.

Литература

1. Линник Р.П., Линник П.Н., Запорожец О.А. Методы исследования сосуществующих форм металлов в природных водах (Обзор): <http://www.nbuu.gov.ua/portal/>.
2. Перевозников М.А., Богданова Е.А. Тяжелые металлы в пресноводных экосистемах. СПб., 1999. – 228 с.
3. *Niedzielski P., Siepak M.* Determination of different forms of arsenic, antimony, and selenium in water samples using hydride generation // *Polish Journal of Environment Studies*. 2006. Vol. 11. P. 219–224.
4. Водные объекты Санкт-Петербурга / Под ред. С.А. Кондратьева, Г.Т. Фрумина. СПб., 2002. – 348 с.
5. Томпсон М., Уолш Д.Н. Руководство по спектрометрическому анализу с индуктивно-связанной плазмой. М., 1988. – 288 с.
6. МВИ ФР.1.31.2002.00594. Методика выполнения измерений массовой концентрации кислоторастворимых форм тяжелых металлов токсичных элементов (Cd, Pb, Cu, Zn, Bi, Tl, Ag, Fe, Se, Co, Ni, As, Sb, Hg, Mn) в почвах, грунтах, донных отложениях, осадках сточных вод методом инверсионной вольтамперометрии. «НПКФ АКВИЛОН», 2002 г.
7. ПНД Ф 16.1:2.2:3.17-98. Методика выполнения измерений массовой доли (валового содержания) мышьяка и сурьмы в твердых сыпучих материалах атомно-абсорбционным методом с предварительной генерацией гидридов. «ВИМС им. Н.М. Федоровского», 2004 г.
8. Перечень предельно допустимых концентраций (ПДК) и ориентировочно допустимых концентраций (ОДК) химических веществ в почве (утв. Минздравом СССР 19.11.1991 № 6229-91).
9. *Нежиковский Р.А.* Река Нева и Невская губа. Л., 1981. – 112 с.
10. Экологическая обстановка в Санкт-Петербурге / Под ред. Д.А. Голубева, Н.Д. Сорокина. СПб., 2004. – 784 с.
11. Охрана окружающей среды, природопользование и обеспечение экологической безопасности в Санкт-Петербурге в 2009 году / Под ред. Д.А. Голубева, Н.Д. Сорокина. СПб., 2010. – 440 с.
12. Охрана окружающей среды, природопользование и обеспечение экологической безопасности в Санкт-Петербурге в 2010 году / Под ред. Д.А. Голубева, Н.Д. Сорокина. СПб., 2011. – 434 с.
13. *Корнеев О.Ю., Рыбалко А.Е., Федорова Н.К. и др.* Результаты мониторинга природной среды Финского залива: уровень антропогенного загрязнения природных вод и донных отложений // Сб. материалов XII Международного экологического форума «День Балтийского моря». СПб., 2005. С. 116–117.



Ведяков Алексей Алексеевич
 Факультет компьютерных технологий и управления
 Кафедра систем управления и информации
 E-mail: vedyakov@gmail.com

АЛГОРИТМЫ АДАПТИВНОЙ И РОБАСТНОЙ КОМПЕНСАЦИИ ВНЕШНИХ ВОЗМУЩЕНИЙ

А.А. Ведяков

Научный руководитель – профессор А.А. Бобцов

Введение

Цель работы – разработка адаптивного алгоритма управления динамическими объектами в подвижной внешней среде с учетом наличия запаздывания в каналах управления и измерения, робастного по отношению к аддитивным составляющим в возмущающем воздействии, помехам в канале связи и погрешностям измерения.

Рассматривался удаленный объект управления, подверженный влиянию внешнего возмущения:

$$\dot{x}(t) = Ax(t) + Bu(t - h_1) + \Delta(t),$$

$$y(t) = Cx(t),$$

$$\hat{y}(t - h_2) = y(t) + \gamma(t),$$

$$u(t) = g(t) + u_c(t),$$

где $x \in \mathbb{R}^n$ – вектор переменных состояния, $y \in \mathbb{R}$ – выходная регулируемая переменная, $u \in \mathbb{R}^n$ – результирующее управляющее воздействие, h_1 и h_2 – известные постоянные запаздывания, $A_{n \times n}$ – матрица состояния, B и C^T – n -мерные вектор-столбцы, $\Delta \in \mathbb{R}^n$ – векторное возмущающее воздействие, $\hat{y}(t) \in \mathbb{R}$ – оценка выходной переменной, полученная в результате измерения, $\gamma(t) \in \mathbb{R}$ – ограниченная помеха, рассматриваемая в качестве ошибки измерения, $g(t) \in \mathbb{R}^n$ – задающее воздействие, определяющее выполнение объектом управления своей цели функционирования, $u_c(t) \in \mathbb{R}^n$ – управление, вырабатываемое регулятором для компенсации эффекта возмущающего воздействия на выходе объекта.

В качестве возмущающего воздействия в работе рассматривался периодический сигнал, который может быть представлен в виде суммы мультигармонического сигнала и некоторой аддитивной составляющей:

$$\Delta(t) = E + \delta(t) + \sum_{i=0}^l G_i \sin(\omega_i t) + H_i \cos(\omega_i t), \quad (1)$$

где E , G_i и H_i – неизвестные постоянные n -мерные вектор-столбцы, ω и ω_i – неизвестные частоты, l – количество гармоник в мультигармоническом возмущающем воздействии, $\delta(t)$ – аддитивная составляющая в возмущающем воздействии, характеризующая отличие сигнала от гармонического.

Допущение 1. Матрица A гурвицева.

Допущение 2. Подпространства управляемости P_c и наблюдаемости P_o объекта управления являются линейно зависимыми, т. е. их пересечение $P_c \cap P_o$ не является нулевым вектором.

Допущение 3. Передаточная функция системы $W(s)$ по управляющему воздействию не обращается в нуль для частот возмущающего воздействия.

Допущение 4. Частота возмущающего воздействия не меньше некоторого известного числа ω_0 , т. е. $\omega \geq \omega_0$.

Требовалось синтезировать закон управления $u(t)$ по выходу, обеспечивающий ограниченность всех траекторий системы относительно траекторий невозмущенной системы:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |y(t) - y_0(t)| \leq b,$$

где b – некоторая константа, $y_0(t)$ – выход системы в отсутствии внешнего возмущения. В случае отсутствия помех измерения закон управления должен гарантировать сходимость невязки выходной переменной возмущенной и не возмущенной систем к нулю:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |y(t) - y_0(t)| = 0.$$

Задачи проекта

- Теоретическое обоснование предлагаемого подхода, формализация условия реализуемости инвариантности выхода объекта управления по отношению к внешнему возмущающему воздействию средствами адаптивного управления.

- Построение устройства оценивания частоты, начальной фазы, амплитуды и общего смещения для мульти- и квазигармонического сигналов. В этой части работы были рассмотрены сигналы, имеющие линейчатый спектр. Синтез алгоритма осуществлялся при условии полной параметрической неопределенности. Априорными данными о сигнале являлось лишь количество его компонент. В данной части работы была проанализирована эффективность алгоритма в условиях помех, выявлено влияние нерегулярной составляющей во входном сигнале на скорость и точность оценки его параметров. Отдельно была рассмотрена проблема сохранения работоспособности алгоритма при изменении количества гармоник во входном сигнале. Кроме этого, было уделено внимание вопросу повышения скорости и точности оценивания параметров имеющихся типов сигналов.

- Синтез адаптивного закона управления позволяющего компенсировать эффект возмущающего воздействия на выходе объекта при наличии запаздывания и помех в каналах связи, погрешностей измерения и аддитивных составляющих в возмущении.

- Получение основных соотношений для показателей качества работы алгоритма.

- Рассмотрение проблемы настройки и использования полученной системы на практике.

- Выработка основных критериев и рекомендаций по выбору параметров алгоритма.

Методы исследования

При решении поставленных задач использовались современные методы адаптивного управления, управления в условиях запаздывания и методы нелинейной теории управления. В работе развивался подход, при котором закон управления строится на основе непрерывных оценок возмущающего воздействия. Алгоритм их получения основан на интегральных методах идентификации, а также разработанных ранее методах оценивания параметров гармонических и квазигармонических сигналов [1–4]. При разработке схемы компенсации с учетом запаздывания в каналах управления и измерения использовалась гипотеза о периодичности сигнальной среды функционирования системы.

В итоге был создан оригинальный метод управления, позволяющий скомпенсировать внешнее возмущение в условиях запаздывания. При формировании закона управления использовались частотные методы исследования систем автоматического управления, а также свойства амплитудно-фазовой частотной характеристики линейных динамических звеньев.

При доказательстве положений проекта использовался аппарат функций Ляпунова, метод пространства состояний, преобразования Лапласа и Фурье. Проверка работоспособности

полученного алгоритма производилась численным моделированием в программной среде MATLAB, а также на мехатронном маятниковом комплексе.

Достигнутые результаты

В результате исследования был разработан новый адаптивный и робастный алгоритм управления для объектов в подвижной внешней среде при условии наличия запаздываний в канале управления и измерения. Система компенсации характеризуется следующими свойствами:

- малой динамической размерностью;
- низкой вычислительной сложностью;
- использованием минимума априорной информации о внешней среде (требуется знать только количество главных гармоник в сигнале возмущения и его форму с точностью до аддитивной составляющей. Нижняя граница частоты, используемая при доказательстве, может быть сколь угодно малой при условии ее положительности);
- повышенной скоростью и точностью стабилизации;
- робастностью по отношению к помехам в каналах связи, аддитивных составляющих в возмущающем воздействии, а также ошибок измерения;
- работоспособностью при наличии запаздывания в каналах управления и измерения.

Было получено теоретическое обоснование предлагаемого подхода и условие реализуемости инвариантности выхода объекта управления по отношению к внешнему возмущающему воздействию средствами адаптивного управления, сформулированное в виде утверждения. Построено устройство оценивания частоты, начальной фазы, амплитуды и общего смещения для мульти- и квазигармонического сигнала. Синтезирован адаптивный закон управления, сформулированный в виде теоремы, позволяющий компенсировать эффект возмущающего воздействия на выходе объекта при наличии запаздывания и помех в каналах связи, погрешностей измерения и аддитивных составляющих в возмущении. Для поставленных задач было найдено решение.

Теоретическое обоснование предлагаемого подхода

При рассмотрении возможностей адаптивных методов управления, обеспечивающих инвариантность состояний системы относительно внешних возмущающих воздействий, может быть сформулировано алгебраическое условие их реализуемости. Этим условием является включение матрицы B_f в образ матрицы B_u :

$$B_f \in \text{Im}(B_u), \quad (2)$$

где B_f – матрица входа возмущающих воздействий, B_u – матрица входа управляющих воздействий.

В данной работе ставится цель синтеза адаптивного управления, обеспечивающего инвариантность выхода системы относительно возмущающего воздействия. Другим важным моментом является то, что управление синтезируется для систем, для которых в общем случае условие (2) не выполняется. Более того рассматриваются не полностью управляемые системы, в которых возмущение может действовать на неуправляемые состояния.

Рассмотрим линейную систему следующего вида:

$$\dot{x}_a(t) = A_a x_a(t) + B_{au} u_a(t) + B_{af} f_a(t), \quad (3)$$

$$y_a(t) = C_a x_a(t), \quad (4)$$

где $x_a \in \mathbb{R}^{n_a}$ – вектор переменных состояния; $y_a \in \mathbb{R}$ – скалярный выход объекта управления; $u_a \in \mathbb{R}^{m_a}$ – вектор управляющих воздействий; $f_a \in \mathbb{R}^{r_a}$ – вектор возмущающих воздействий; A_a – матрица, определяющая динамические свойства объекта управления, размерности

$n_a \times n_a$; B_{au} – матрица входа управляющих воздействий размерности $n_a \times m_a$; B_{af} – матрица входа возмущающих воздействий размерности $n_a \times r_a$; C_a – матрица выхода размерности $1 \times n_a$; n_a – порядок объекта управления.

Возмущающее воздействие предполагается известным и доступным для измерения. В противном случае может быть построен его наблюдатель, и справедливость положений, описываемых в данном подразделе, будет зависеть от точности его работы. Случай наличия запаздывания в канале управления и/или измерения также не требует отдельного рассмотрения.

Для простоты исследования берется система в отсутствии задающего воздействия. Все приводимые положения можно без труда расширить на случай наличия генератора задающего воздействия, сводя задачу слежения к задаче стабилизации. При этом желаемым выходом системы будет ее реакция на задающее воздействие в отсутствии возмущения, а стабилизироваться будет невязка между желаемым и реальным выходом системы относительно ее нулевого значения.

Утверждение: для систем вида (3), (4), удовлетворяющих условиям допущений 1–4, возможно построение адаптивного закона управления, обеспечивающего инвариантность выхода объекта управления относительно возмущающего воздействия с абсолютной точностью.

Алгоритм оценивания параметров периодического сигнала

Алгоритм оценивания частот, обеспечивающий ограниченность ошибки оценивания частот гармоник, выглядит следующим образом:

$$\hat{\omega}_i(t) = \sqrt{|\hat{\theta}_i(t)|},$$

$$\hat{\Theta}(t) = \Upsilon(t) + K\Omega(t)\xi^{(2k)}(t),$$

$$\dot{\Upsilon}(t) = -K\Omega(t)\Omega^T(t)\hat{\Theta}(t) - K\dot{\Omega}(t)\xi^{(2k)}(t),$$

где $\Omega^T(t) = [\xi^{(2k-1)}(t) \dots \xi^{(3)}(t) \xi^{(1)}(t)]$ – регрессор, K – диагональная матрица параметров

$diag\{k_i > 0\}$, $\hat{\Theta}^T$ – оценка вектора неизвестных параметров $\bar{\Theta}^T = [\bar{\theta}_1 \dots \bar{\theta}_{k-1} \bar{\theta}_k]$,

связанного с параметрами $\theta_i = -\omega_i^2$ по теореме Виета:

$$\begin{cases} \bar{\theta}_1 = \theta_1 + \theta_2 + \dots + \theta_k, \\ \bar{\theta}_2 = -\theta_1\theta_2 - \theta_1\theta_3 - \dots - \theta_{k-1}\theta_k \\ \vdots \\ \bar{\theta}_k = (-1)^{k+1}\theta_1\theta_2 \dots \theta_k, \end{cases}$$

где $\xi^{(2k-1)}(t) \dots \xi^{(3)}(t) \xi^{(1)}(t)$ – соответствующие производные выхода линейного фильтра:

$$\xi(s) = \frac{\lambda^{2k}}{(s + \lambda)^{2k}} y(s), \tag{5}$$

$y(s)$ – образ Лапласа переменной $y(t)$.

Алгоритм оценивания амплитуд μ_i и фаз ϕ_i имеет вид:

$$\hat{\mu}_i(t) = \frac{\hat{\mu}_{\xi_i}(t)}{\hat{L}_{\xi_i}(t)},$$

$$\hat{\phi}_i = (-\hat{\phi}_{\xi_i}(t) + \hat{\phi}_{\xi_i}(t)) \bmod 2\pi,$$

$$\hat{\mu}_{\xi_i}(t) = \sqrt{\hat{\xi}_i^2(t) + \left(\frac{\hat{\xi}_i(t)}{\eta_i(t)}\right)^2},$$

$$\hat{\phi}_{\xi_i}(t) = \left(\text{sign}(\hat{\xi}_i(t)) \arccos\left(\frac{\hat{\xi}_i(t)}{\hat{\mu}_{\xi_i}(t)\eta_i(t)}\right) - \hat{\omega}_i(t) \right) \bmod 2\pi,$$

$$\hat{L}_{\xi_i}(t) = \left| \frac{\lambda^{2k}}{(\lambda + j\hat{\omega}_i(t))^{2k}} \right|,$$

$$\hat{\varphi}_{\xi_i}(t) = \arg \frac{\lambda^{2k}}{(\lambda + j\hat{\omega}_i(t))^{2k}},$$

где $\hat{\mu}_{\xi_i}(t)$ – оценка амплитуды i -й гармоники на выходе линейного фильтра (5), $\hat{L}_{\xi_i}(t)$ – оценка передаточного коэффициента линейного фильтра (5) для i -й гармоники, $\hat{\phi}_{\xi_i}(t)$ – оценка фазового сдвига вносимого фильтром (5) для i -й гармоники, $\hat{\varphi}_{\xi_i}(t)$ – фаза i -й гармоники на выходе фильтра (5), переменные $\hat{\xi}_i$ и $\hat{\xi}_i^k$ определяются согласно выражениям:

$$\begin{bmatrix} \hat{\xi}_1(t) \\ \hat{\xi}_2(t) \\ \vdots \\ \hat{\xi}_k(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\theta}_1 & \hat{\theta}_1 & \cdots & \hat{\theta}_k \\ \hat{\theta}_1^2 & \hat{\theta}_2^2 & \cdots & \hat{\theta}_k^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\theta}_1^k & \hat{\theta}_2^k & \cdots & \hat{\theta}_k^k \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \xi^{(2)}(t) \\ \xi^{(4)}(t) \\ \vdots \\ \xi^{(2k)}(t) \end{bmatrix}, \quad (6)$$

$$\begin{bmatrix} \hat{\xi}_1^k(t) \\ \hat{\xi}_2^k(t) \\ \vdots \\ \hat{\xi}_k^k(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \hat{\theta}_1 & \hat{\theta}_2 & \cdots & \hat{\theta}_k \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\theta}_1^{k-1} & \hat{\theta}_2^{k-1} & \cdots & \hat{\theta}_k^{k-1} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \xi^{(1)}(t) \\ \xi^{(3)}(t) \\ \vdots \\ \xi^{(2k-1)}(t) \end{bmatrix}, \quad (7)$$

параметр $\eta_i(t)$ определяется согласно правилу:

$$\eta_i(t) = \begin{cases} \hat{\omega}_i(t), & \hat{\omega}_i(t) \geq \omega_0 \\ \omega_0, & \hat{\omega}_i(t) < \omega_0 \end{cases}. \quad (8)$$

Общее смещение определяется соотношением:

$$\hat{\xi}_0(t) = \xi(t) - \sum_{i=1}^k \hat{\xi}_i(t).$$

Данный алгоритм обеспечивает асимптотическую сходимость ошибок оценивания параметров к нулю. В случае наличия нерегулярной составляющей во входном сигнале ошибка оценивания ограничена константой, зависящей от параметров входного сигнала и алгоритма. Изменяя параметры k_i матрицы K и параметр λ линейного фильтра (5), можно изменять скорость и точность сходимости получаемых оценок.

В случае, когда количество гармоник во входном сигнале меньше, чем заложено при синтезе устройства оценивания, нахождение обратной матрицы в уравнениях (6), (7) может быть невозможно в силу вырожденности исходной матрицы. Для разрешения проблемы следует ввести ограничение снизу на значение ее определителя. На выходе устройства

оценивания, кроме оценки гармоник исходного сигнала, будут наблюдаться побочные оценки с частотами равными ω_0 .

Если количество гармоник во входном сигнале больше, чем заложено при синтезе устройства оценивания, оцениваются гармоники с наибольшей мощностью. Неоцениваемые гармоники проходят на выход идентификатора, вследствие чего для дальнейшего использования получаемые оценки требуют предварительной фильтрации.

Схема компенсации эффекта возмущающего воздействия

Для удобства рассмотрения исходная задача слежения сводится к задаче стабилизации. Для этого в качестве выхода системы $y_r(t)$ рассматривается разность между желаемым выходом системы $y^*(t)$, определяемым генератором задающего воздействия в отсутствие помех, и реальным выходом системы $y(t)$:

$$y_r(t) = y^*(t) - y(t).$$

Управляющим сигналом в данном случае будет $u_c(t)$. Редуцированная система выглядит следующим образом:

$$\dot{x}_r(t) = A_r x_r(t) + B_r u_c(t - h_1 - h_2) + \Delta_r(t), \quad (9)$$

$$y_r(t) = C_r x_r(t), \quad (10)$$

$$\hat{y}_r(t - h_2) = y_r(t) + \gamma(t), \quad (11)$$

где $y_r \in \mathbb{R}$ – выходная регулируемая переменная редуцированной системы, $u_c \in \mathbb{R}^n$ – управляющее воздействие, h_1 и h_2 – известные постоянные запаздывания, A_r – матрица состояния, B_r и C_r^T – n_r -мерные вектор-столбцы, $\hat{y}_r(t) \in \mathbb{R}$ – оценка выходной переменной, полученная в результате измерения, $\gamma(t) \in \mathbb{R}$ – ограниченная помеха, рассматриваемая в качестве ошибки измерения.

Далее формулируется эквивалентная постановка задачи. Для системы (9)–(11), удовлетворяющей допущениям 1–4, требуется синтезировать закон управления $u_c(t)$ по выходу, обеспечивающий ограниченность всех траекторий системы:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |y_r(t)| \leq b, \quad (12)$$

где b – некоторая константа. В случае отсутствия помех измерения закон управления должен гарантировать сходимость выходной переменной к нулю:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |y_r(t)| = 0.$$

Для удобства введем новые обозначения без использования индексов:

$$\dot{X}(t) = AX(t) + BU(t - h) + \Delta(t),$$

$$Y(t) = CX(t),$$

$$\hat{Y}(t) = CX(t) + \gamma(t),$$

где $X \in \mathbb{R}^n$ – вектор переменных состояния, $Y \in \mathbb{R}$ – выходная регулируемая переменная, доступная для измерения, $U \in \mathbb{R}$ – управляющее воздействие, h – известное постоянное запаздывание, $A_{n \times n}$ – матрица состояния, B и C^T – n -мерные вектор-столбцы, $\Delta \in \mathbb{R}^n$ – векторное возмущающее воздействие вида, определенное ранее.

Так как полином $(s + \lambda)^{2l}$ гурвицев, то для входного сигнала (1) выходная переменная фильтра (5) имеет вид:

$$\xi(t) = \sigma_\xi + \delta_\xi(t) + \sum_{i=1}^l \mu_{\xi_i} \sin(\omega_i t + \phi_{\xi_i}) + \gamma(t) + \varepsilon_\xi(t),$$

где σ_ξ – смещение, $\delta_\xi(t)$ – реакция линейного фильтра на аддитивную составляющую на выходе объекта управления, μ_{ξ_i} – амплитуда i -ой гармоники, ϕ_{ξ_i} – фазовый сдвиг i -ой гармоники и $\varepsilon_\xi(t)$ – экспоненциально затухающая функция с экспоненциально затухающими производными.

Теорема. Закон управления вида:

$$U(t) = -\frac{1}{L_0} \hat{\xi}_0(t) - \sum_{i=1}^l \frac{1}{\hat{L}_{ui}(t)} k_{pi}(t) \hat{\xi}_i(t) + \frac{1}{\hat{L}_{ui}(t)} k_{di}(t) \dot{\hat{\xi}}_i(t)$$

обеспечивает выполнение цели управления (12), где

$$k_{pi}(t) = \cos(h\hat{\omega}_i(t) - \hat{\phi}_{ui}(t)),$$

$$k_{di}(t) = \frac{\sin(h\hat{\omega}_i(t) - \hat{\phi}_{ui}(t))}{\eta_i(t)},$$

$$\hat{L}_{ui}(t) = \left| \frac{b(j\hat{\omega}_i(t))\lambda^{2l}}{a(j\hat{\omega}_i(t))(j\hat{\omega}_i(t) + \lambda)^{2l}} \right|,$$

$$\hat{\phi}_{ui}(t) = \arg \frac{b(j\hat{\omega}_i(t))\lambda^{2l}}{a(j\hat{\omega}_i(t))(j\hat{\omega}_i(t) + \lambda)^{2l}},$$

оценка частоты $\hat{\omega}_i(t)$ определяется адаптивным алгоритмом оценивания, функции $\hat{\xi}_0(t)$, $\hat{\xi}_i(t)$, $\dot{\hat{\xi}}_i(t)$ являются выходными переменными наблюдателя эффекта возмущающего воздействия, а переменные $\eta_i(t)$ вводятся согласно (8).

Адаптивная схема оценивания

Динамические и статические свойства алгоритмов зависят от параметров λ и k . Так как параметр λ определяет также частотную характеристику линейного фильтра, для адаптивной настройки изменения точности и скорости используется только параметр k . Алгоритм адаптации состоит из двух шагов.

Шаг 1. Сначала параметр k выбирается достаточно большим для быстрого получения предварительной оценки.

Шаг 2. Далее параметр k постепенно уменьшается для увеличения точности оценивания.

Адаптивно настраивая параметр k , можно добиться существенного ускорения процесса оценивания при сохранении высокой точности. Было доказано, что при изменении параметра k по гиперболе

$$\dot{k}(t) = -\alpha k(t) + c,$$

где α – положительный параметр, определяющий скорость убывания функции $k(t)$, c – положительный параметр, определяющий желаемое значение параметра k после завершения переходного процесса, оценка частоты сходится к своему истинному значению.

Схема оценивания с использованием дополнительного фильтра

Известен подход фильтрации получаемой оценки частоты, выполняемый с помощью нелинейного блока [5], выходная переменная $\hat{\omega}_f$ которого определяется соотношением:

$$\hat{\omega}_f(t) = \int_0^t \vartheta(\tau) d\tau, \quad (13)$$

где сигнал $\vartheta(t)$ является выходом нелинейного звена типа «насыщение»:

$$\vartheta = \begin{cases} \frac{c}{d}(\hat{\omega} - \hat{\omega}_f), & |\hat{\omega} - \hat{\omega}_f| \leq d, \\ c \operatorname{sign}(\hat{\omega} - \hat{\omega}_f), & |\hat{\omega} - \hat{\omega}_f| > d, \end{cases} \quad (14)$$

где c , d – константы. На вход нелинейного блока поступает сигнал оценки частоты $\hat{\omega}$. Коэффициент передачи нелинейного звена «насыщение» понижается с ростом дисперсии входного сигнала: чем больше амплитуда на входе, тем меньше коэффициент передачи звена.

Нелинейное звено (13) ограничивает скорость роста переменной $\hat{\omega}_f$ благодаря константам c и d . Настройка блока сводится к определению этих констант, которые в свою очередь являются максимальной скоростью изменения градиента полезного сигнала. Исходя из этого, процедура настройки блока (13) должна учитывать динамические свойства входного процесса.

Если во входном сигнале присутствует компонента с заведомо большей скоростью, чем в полезном сигнале, то она не пройдет через блок (13).

Результат работы алгоритма оценивания частоты без нелинейного блока (13) зависит только от выбора параметров k и λ . С ростом значений этих параметров увеличится скорость сходимости оценки частоты в установившуюся область, но при этом размер этой области, как и дисперсия сигнала, будет увеличиваться. Наличие нелинейного блока (13) обеспечивает существенное повышение точности при сохранении быстродействия алгоритма оценивания частоты.

В данной работе предлагается подход, основанный на использовании в качестве нелинейного блока операции взятия корня со знаком, применяемой для значений производной по модулю больше единицы:

$$\vartheta = \begin{cases} \hat{\omega}(\tau) - \hat{\omega}_f(\tau), & |\hat{\omega} - \hat{\omega}_f| \leq 1, \\ \operatorname{sign}(\hat{\omega}(\tau) - \hat{\omega}_f(\tau)) \sqrt[\beta]{|\hat{\omega}(\tau) - \hat{\omega}_f(\tau)|}, & |\hat{\omega} - \hat{\omega}_f| > 1, \end{cases}$$

где параметр β – определяет полосу пропускания фильтра. Для быстрого и точного оценивания предлагается выбирать $\beta = 2$.

Этот подход не требует априорных данных об измеряемом сигнале. При прочих равных условиях данный нелинейный блок позволяет быстрее и точнее оценивать частоту зашумленного гармонического сигнала.

Кроме этого, предлагается рассмотреть модификацию данного подхода, обеспечивающую получение еще более точной оценки:

$$\vartheta = \begin{cases} \operatorname{sign}(\hat{\omega}(\tau) - \hat{\omega}_f(\tau)) (\hat{\omega}(\tau) - \hat{\omega}_f(\tau))^\beta, & |\hat{\omega} - \hat{\omega}_f| \leq 1, \\ \operatorname{sign}(\hat{\omega}(\tau) - \hat{\omega}_f(\tau)) \sqrt[\beta]{|\hat{\omega}(\tau) - \hat{\omega}_f(\tau)|}, & |\hat{\omega} - \hat{\omega}_f| > 1. \end{cases}$$

Области возможного использования результатов проекта

Разработанная схема компенсации внешнего возмущающего воздействия может быть применена в различных телемеханических системах контроля технологического процесса, где возмущения создаются как рядом расположенными устройствами и установками (вибрации, возникающие вследствие циклической деятельности какого-либо органа, или электромагнитные наводки от соседних устройств), так и самой внешней средой (колебания температуры или другого требующего учета параметра среды). В силу тотальной телемеханизации под данное определение попадают предприятия любой отрасли промышленности.

Алгоритм планируется применять в системах удаленного управления роботами, роботами-манипуляторами различного рода, например спасательных и разведывательных. Ведь если робот не находится в закрытом помещении, то на него так или иначе действует внешняя среда и для его работы требуется компенсировать это влияние. Особенно сильно это

сказывается на летающих роботах, которые имеют известные проблемы в управлении на открытом воздухе.

На данный момент роботы находят применение в различных областях, например в космической. Использование дистанционно управляемых марсоходов позволит небольшому экипажу в сжатый срок выполнить широкий спектр задач по изучению поверхности планеты. Использование именно удаленного управления, а не полностью автономного, экономически целесообразно, в силу того что позволяет делать роботов максимально простыми.

Ценностью также обладает факт того, что алгоритм управления строится на измерении только выходной переменной объекта. Это позволит применять его в различных технических объектах, значительно снизив при этом издержки на изготовление датчиков всех переменных состояния или производных выходной переменной. В силу адаптивности закона управления снижаются требования к объему априорной информации о свойствах среды функционирования объекта, а значит, снижаются затраты на изготовление различного рода сенсорной техники и увеличиваются границы применимости разрабатываемого алгоритма.

Сегодня в мировом научном сообществе особенную популярность имеют задачи адаптивного и робастного управления по выходу при условии запаздывания и внешних возмущающих воздействий, и данная работа, посвященная решению этой проблемы, является вкладом в усиление научного потенциала Санкт-Петербурга в России и за рубежом.

Публикации

Часть результатов исследования изложена на международной конференции 2012 IEEE Multi-conference on Systems and Control (October 3–5, 2012, Dubrovnik Palace Hotel, Dubrovnik, Croatia) и опубликована в сборнике трудов по ее итогам: *Pyrkin A., Bobtsov A., Kolyubin S., Vedyakov A. Precise Frequency Estimator for Noised Periodical Signals // 2012 IEEE Multi-conference on Systems and Control. Dubrovnik, 2012. P. 92–97.*

Полные результаты исследования планируется опубликовать в журнале «Автоматика и телемеханика» или в журнале «Известия высших учебных заведений. Приборостроение».

Литература

1. *Бобцов А.А., Пыркин А.А.* Компенсация гармонического возмущения в условиях запаздывания по управлению // Известия РАН. Теория и системы управления. 2008. № 4. С. 19–23.
2. *Бобцов А.А., Пыркин А.А.* Компенсация неизвестного синусоидального возмущения для линейного объекта любой относительной степени // Автоматика и телемеханика. 2009. № 3. С. 114–122.
3. *Vedyakov A.A., Pyrkin A.A.* Adaptive control of Remote Plants in the Non-stationary Environment // 13th International Student Olympiad on Automatic Control BOAC. Saint Petersburg, 2010. P. 54–58.
4. *Pyrkin A., Bobtsov A., Kapitanyuk Y., Vedyakov A., Titov A., Shadzhe I.* Adaptive Cancellation of Unknown Multiharmonic Disturbance for Nonlinear Plant with Input Delay // Proc. of the 19th Mediterranean Conference on Control and Automation (IEEE). Corfu, 2011. P. 874–879.
5. *Бобцов А.А., Крылов А.В., Пыркин А.А.* Повышение точности оценки частоты синусоидального сигнала с использованием нелинейного фильтра // Известия высших учебных заведений. Приборостроение. 2011. Т. 54. № 6. С. 7–12.



Громова Юлия Александровна
Факультет фотоники и оптоинформатики
Кафедра оптической физики и современного естествознания
E-mail: gromova42@gmail.com

ПЕРЕНОС ЭНЕРГИИ В СИСТЕМАХ НА ОСНОВЕ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК И МОЛЕКУЛ АЗОКРАСИТЕЛЕЙ В ПОЛИМЕРНЫХ ТРЕКОВЫХ МЕМБРАНАХ

Ю.А. Громова

Научный руководитель – доцент А.О. Орлова

Введение

На протяжении последних двух десятилетий ведутся интенсивные работы по изучению фотофизических свойств коллоидных полупроводниковых нанокристаллов (НК), а также по созданию на их основе различного типа структур с участием органических молекул [1]. Это значительно расширяет возможности практического применения НК. Комплексы на их основе могут использоваться в сенсорных и каталитических системах, электронных устройствах, а также существенно повысить эффективность неинвазивных, терапевтических методов в диагностике и лечении ряда заболеваний [2–5].

Полупроводниковые НК сферической формы, в которых наблюдается квантоворазмерный эффект (квантовые точки), обладают рядом уникальных свойств. Так спектры поглощения и люминесценции НК одного химического состава определяются их размером. Наряду с этим полупроводниковые НК характеризуются протяженным спектром поглощения, имеют высокий коэффициент экстинкции, высокий квантовый выход люминесценции и обладают высокой химической устойчивостью и фотостабильностью [6]. Благодаря этим свойствам широко распространено использование квантовых точек в качестве доноров энергии в комплексах с органическими молекулами.

Существует большое число работ, посвященных созданию и исследованию комплексов квантовых точек и органических молекул. Особое внимание уделяется изучению процессов передачи энергии в таких системах от НК к молекулам [7, 8]. Одним из наиболее распространенных механизмов передачи энергии в системах НК / органическая молекула является безызлучательный перенос энергии по механизму Ферстера. Однако следует отметить, что в работах, посвященных созданию структур на основе НК и органических молекул, обычно исследуются свойства индивидуальных комплексов, причем достаточно часто исследования таких систем носят прикладной характер. Это приводит к тому, что изучению особенностей переноса энергии в ансамблях НК уделяется недостаточно внимания.

Интерес вызывает исследование переноса энергии в структурах на основе полупроводниковых НК и органических молекул в различных матрицах, так как в этом случае появляется возможность исследовать структуры, не опасаясь спонтанной агломерации или выпадения в осадок НК из-за негативного влияния различных примесей, что характерно для растворов. Удобной матрицей для создания комплексов на основе НК являются, например, полимерные трековые мембраны (ТМ), допускающие внедрение НК в пристеночные слои пор без образования макроагрегатов и снижения квантового выхода люминесценции [9].

Цель проекта – исследование особенностей переноса энергии в структурах на основе полупроводниковых НК и органических молекул, внедренных в полимерные ТМ.

Для создания комплексов с НК нами были выбраны азокрасители 1-(2-пиридилазо)-2-нафтол и 4-(2-пиридилазо)-резорцинол. Данные соединения обладают способностью адсорбироваться на атомы цинка на поверхности оболочки НК с переходом в спектральную

форму удовлетворяющую условиям безызлучательного переноса энергии с НК на металлокомплекс азокрасителя.

В ходе выполнения работы было необходимо решить следующие задачи:

- создать комплексы НК / азокраситель в ТМ;
- провести сравнение эффективности безызлучательного резонансного переноса энергии от НК к молекулам в структурах, полученных последовательным внедрением в мембраны НК и молекул азокрасителей и комплексов НК / азокраситель, внедренных в полимерную матрицу из раствора;

- исследовать изменение кинетики затухания люминесценции НК при создании комплексов с органическими молекулами.

Исследования переноса энергии в системах НК / азокраситель в трековых мембранах

Используемые материалы и методы исследования

Гидрофобные НК CdSe/ZnS сферической формы были синтезированы согласно методике высокотемпературного металлоорганического синтеза, предложенной в работе [10]. Они обладали следующими фотофизическими характеристиками: положение длинноволнового максимума поглощения ~ 515 нм, коэффициент экстинкции $\varepsilon_{515} = 4,6 \cdot 10^4$ моль⁻¹см⁻¹/литр, положение максимума люминесценции ~ 530 нм, квантовый выход люминесценции ~ 13 %.

Для формирования гибридных структур использовались азокрасители 1-(2-пиридилазо)-2-нафтол (ПАН) и 4-(2-пиридилазо)-резорцинол (ПАР) фирмы Fluka. Структурные формулы азокрасителей представлены на рис. 1. Принципиальное различие данных соединений заключается в том, что молекула ПАН – гидрофобная, а ПАР – гидрофильная. Данные красители традиционно применяются в качестве фотометрических металоиндикаторов [11, 12]. Они образуют хелатные комплексы с рядом металлов, в том числе и с ионами Zn, поэтому данные красители способны координироваться на терминальные атомы цинка на поверхности оболочки нанокристаллов CdSe/ZnS.

В качестве матрицы использовалась полиэтилентерафталатная (ПЭТФ) ТМ с толщиной 12 мкм и с диаметром пор 500 нм, поры цилиндрической формы располагались перпендикулярно поверхности, плотность пор $4 \cdot 10^7$ см⁻², мембраны были изготовлены в Дубне (Россия).

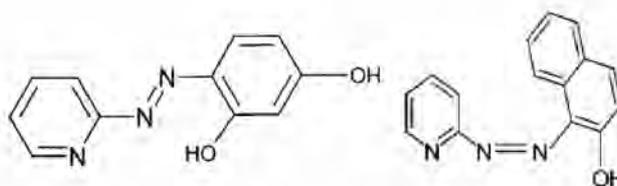


Рис. 1. Структурные формулы азокрасителей: слева 1-(2-пиридилазо)-2-нафтол; справа 4-(2-пиридилазо)-резорцин

Спектры поглощения образцов регистрировались на спектрофотометре UV-Probe (Shimadzu, Japan), оснащенный интегрирующей сферой, которая позволяет регистрировать спектры сильно рассеивающих, неоднородных, тонких образцов. Спектры люминесценции регистрировались с помощью спектрофлуориметра Cary Eclipse (Varian, Australia). Для регистрации времен затухания люминесценции образцов использовался сканирующий люминесцентный микроскоп Micro Time 100 (PicoQuant, Germany). Для возбуждения люминесценции образцов использовался полупроводниковый импульсный лазер с частотой следования импульсов 10 МГц с длиной волны 409 нм. Среднее время затухания люминесценции рассчитывалось по формуле: $\langle \tau \rangle = \sum A_i \tau_i^2 / \sum A_i \tau_i$, где A_i и τ_i амплитуда и время затухания i -той компоненты.

Внедрение гидрофобных нанокристаллов CdSe/ZnS в трековые мембраны и методика создания комплексов НК / азокраситель

В работе [9] было установлено, что при пропитывании ПЭТФ ТМ раствором гидрофобных нанокристаллов CdSe/ZnS происходит внедрение НК в пристеночные слои трековых пор. Важно, что при этом поры остаются свободными, а мембрана водопроницаема.

Для внедрения НК образцы ПЭТФ ТМ на пять суток погружались в коллоидный раствор НК в толуоле, после чего образцы тщательно промывались гидрофобным растворителем и высушивались естественным путем. Оценка локальных концентраций квантовых точек в пристеночном слое пор ТМ оценивалась по формуле:

$$C_{QD} = \frac{D_{\lambda} \cos \phi}{\pi((r_p + r_l)^2 - r_p^2)n\varepsilon_{\lambda}l},$$

где D_{λ} – оптическая плотность в спектре поглощения образца на длине волны λ , ε_{λ} – коэффициент экстинкции квантовых точек на длине волны λ , l – толщина мембраны, ϕ – угол наклона пор к нормали поверхности мембраны, n – удельная плотность пор, r_p – радиус пор, r_l – толщина пристеночного слоя трековых пор, в который внедряются нанокристаллы. Для мембран с порами диаметром 500 нм в работе [9] параметр r_l был оценен в 200 нм.

Комплексы НК с органическими молекулами создавались в растворе и в ТМ. Для создания комплексов НК/ПАН в растворе готовились толуольные растворы известных концентраций НК и азокрасителя, а затем смешивались в необходимых пропорциях. Для создания комплексов НК/ПАР в растворе была применена техника микродобавок: к раствору НК в толуоле добавлялись процентные доли высококонцентрированного раствора ПАН. Комплексы в ТМ создавались двумя способами.

В одном случае образцы ТМ с предварительно внедренными НК пропитывались или раствором ПАН в толуоле, или раствором ПАР в дистиллированной воде. Во втором – на пять суток погружались в растворы с предварительно созданными комплексами. После чего они промывались соответствующим растворителем и высушивались. Методика создания комплексов в ТМ пояснена на рис. 2.

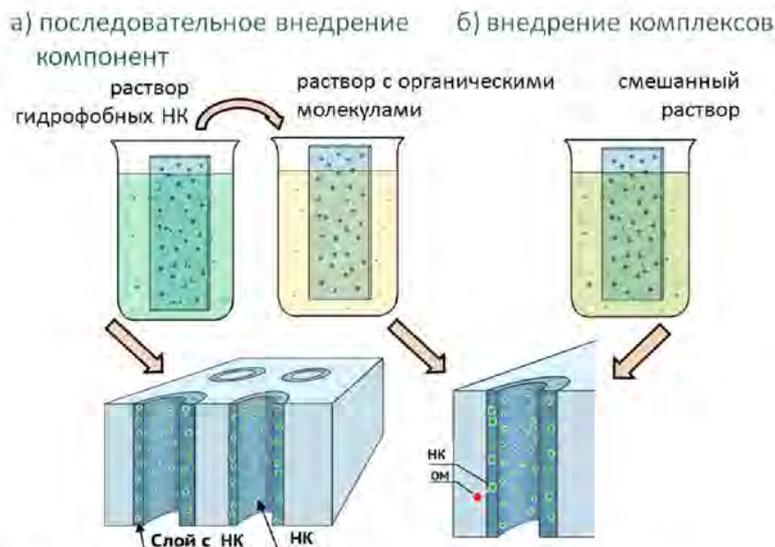


Рис. 2. Графическое представление двух методик создания комплексов гидрофобных НК с молекулами азокрасителей в ПЭТФ ТМ и схематическое изображение ТМ с внедренными НК и комплексами на основе комплексов НК – органические молекулы

Для изучения свойств комплексов НК / азокраситель в ТМ мембраны с внедренными квантовыми точками пропитывались растворами азокрасителя различных концентраций в течение пяти суток для установления химического равновесия между комплексами

НК / азокраситель и свободными частицами. Также отдельно были приготовлены растворы смеси КТ и молекул азокрасителей в толуоле с тем же соотношением компонент в смеси. Через пять суток после приготовления смешанных растворов в них были помещены образцы ТМ.

Формирование комплексов НК / азокраситель в трековых мембранах

Свойства комплексов НК/ПАН в растворе и в полиуретановой пленке были подробно рассмотрены в работе [13]. Наши исследования показали, что спектральные характеристики комплексов в мембране и в растворе аналогичны. Образование комплексов молекул ПАН с атомами Zn на поверхности оболочки нанокристаллов CdSe/ZnS приводит к появлению полосы поглощения на 560 нм [14] и тушению люминесценции НК (рис. 3)

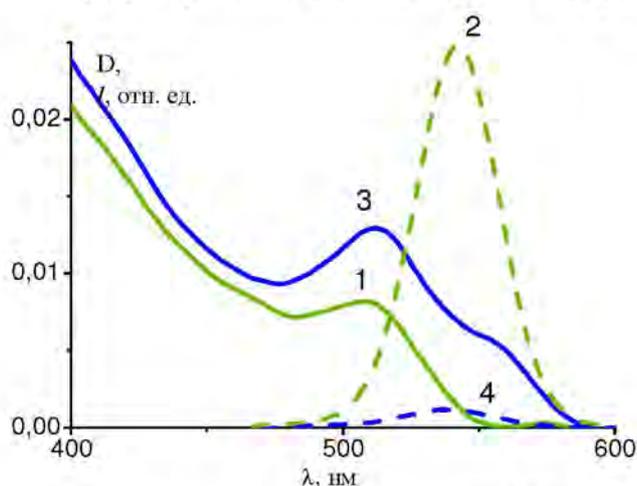


Рис. 3. Спектры поглощения и люминесценции НК CdSe/ZnS внедренных в ПЭТФ ТМ до и после пропитывания образцов раствором ПАН: 1, 2 – спектры люминесценции НК внедренных в ТМ; 3, 4 – спектр люминесценции НК после пропитывания образца раствором красителя

Молекула ПАР является гидрофильным аналогом молекулы ПАН, следовательно, механизм комплексообразования и свойства комплексов НК/ПАР должны подчиняться тем же закономерностям, что и комплексы НК/ПАН. Нами также было установлено совпадение спектральных характеристик комплексов НК/ПАР, созданных в растворе при помощи техники микродобавок и комплексов НК/ПАР, последовательно полученных в ПЭТФ ТМ.

Анализ спектров поглощения образцов ТМ с внедренными квантовыми точками после пропитывания водным раствором ПАР (рис. 4) показал, что в области 350–600 нм наблюдается увеличение оптической плотности. Вычитанием из спектра поглощения мембраны с НК после пропитки ПАР спектра поглощения НК в ТМ нами был получен разностный спектр, представленный на рис. 4б (кривая 2).

В спектре хорошо различимы две полосы поглощения – на 410 нм и 520 нм. Полоса поглощения на 410 нм соответствует поглощению свободной формы ПАР, вторая полоса в работе [15] была отнесена авторами к поглощению цинкового комплекса ПАР в желатине. Появление в спектре поглощения образца ТМ с внедренными КТ полосы поглощения с максимумом 520 нм, которое сопровождается симбатным уменьшением люминесценции НК, свидетельствует об образовании поверхностных комплексов CdSe/ZnS НК с молекулами ПАР.

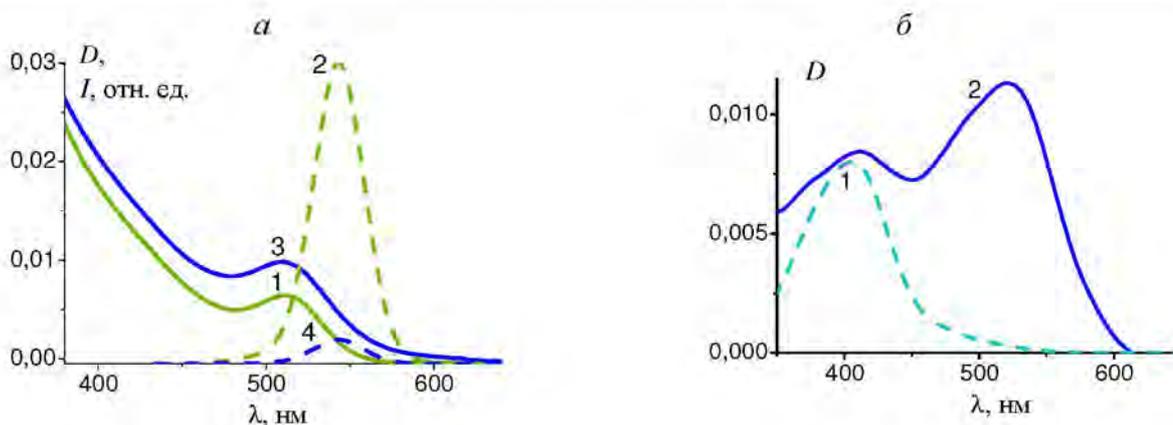


Рис. 4. а – спектры поглощения и люминесценции НК, внедренных в ТМ до и после протитывания образца мембраны раствором ПАР (1, 2 – спектры поглощения и люминесценции НК, внедренных в ТМ; 3, 4 – спектры поглощения и люминесценции НК после протитывания образца раствором азокрасителя); б – спектры поглощения (1 – раствор ПАР в дистиллированной воде, 2 – разностный спектр соответствующий поглощению комплексов CdSe/ZnS НК с ПАР в ТМ)

Фотофизические свойства комплексов НК / азокраситель

На рис. 5 приведены зависимости относительной интенсивности люминесценции НК CdSe/ZnS от отношения молярных концентраций НК и азокрасителей для смешанных растворов (кривая 1), образцов ТМ, в которых последовательно создавались комплексы НК / азокраситель (кривая 2) и образцов ТМ, в которых внедрялись комплексы НК / азокраситель из смешанных растворов (кривая 3). Видно, что во всех случаях при увеличении относительной концентрации молекул в растворе наблюдается эффективное тушение люминесценции НК.

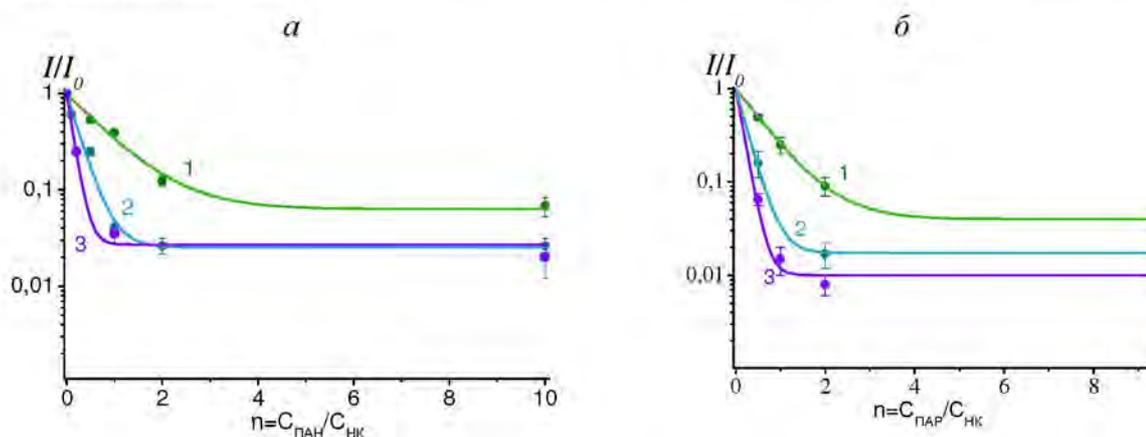


Рис. 5. Кривые тушения люминесценции НК CdSe/ZnS в зависимости от относительной концентрации молекул ПАМ-2 (а) и ПАР (б): 1 – комплексы НК / азокраситель в растворе-2 и ПАР, 2 – последовательное внедрение НК и молекул азокрасителя в ТМ; 3 – внедрение комплексов НК / азокраситель в ТМ из раствора

Если полагать, что число молекул азокрасителя, приходящихся на один НК подчиняется распределению Пуассона [16] и образование хотя бы одного поверхностного комплекса НК / азокраситель полностью тушит люминесценцию НК, то относительная интенсивность люминесценции НК в смеси с молекулами будет определяться выражением:

$$I/I_0 = A \exp(-C_{OM}/BC_{NC}) + (1-A), \quad (2)$$

где I – интенсивность люминесценции НК после образования комплексов, I_0 – исходный сигнал люминесценции НК, A ($0 < A < 1$) – часть нанокристаллов, которые образуют комплексы с молекулами азокрасителя. Соответственно $(1-A)$ – часть НК, не вступающих в процесс комплексообразования. Выражение $C_{OM}/B \cdot C_{QD}$ определяет среднее число молекул тушителя, приходящихся на один НК, где C_{OM} – концентрация молекул азокрасителя в смеси, а C_{NC} – концентрация НК.

Анализ тушения люминесценции НК при добавлении молекул азокрасителей показал, что во всех случаях зависимость относительной интенсивности люминесценции квантовых точек I/I_0 от n ($n=C_{AD}/C_{QD}$) близка к экспоненциальной: $I/I_0=A \exp(-n/B)+(1-A)$ с коэффициентами $1/B$ и A представленными в Табл. Параметр $1/B$ определяет число НК, люминесценция которых тушится при добавлении одной молекулы азокрасителя, а коэффициент A определяет число НК, связанных в комплекс после установления химического равновесия в системе.

Таблица

Коэффициенты уравнения, аппроксимирующего зависимость относительной интенсивности люминесценции НК от отношения молярных концентраций НК и азокрасителей

Обозначение кривой тушения	1/B	A
НК/ПАН в растворе	0,9	0,90
НК/ПАН в ТМ (последовательное создание комплексов)	3,7	0,95
НК/ПАН в ТМ (внедрение комплексов из раствора)	6,2	0,95
НК/ПАР в растворе	1,2	0,94
НК/ПАР в ТМ (последовательное создание комплексов)	5,6	0,96
НК/ПАР в ТМ (внедрение комплексов из раствора)	7,2	0,98

Из Табл. видно, что в растворах в комплексообразовании участвуют 90 % НК и на начальном участке кривых при относительно низких значениях n на один НК приходится в среднем одна молекула азокрасителя.

Если предположить, что НК, внедренные в ТМ, находятся в приповерхностном слое трековых пор в квазиизолированном состоянии и взаимодействие между НК отсутствует, то возможно получить аналогичную зависимость тушения люминесценции от соотношения концентраций красителя в растворе и локальных концентраций НК в ТМ. При переходе от раствора к ТМ значение коэффициента A увеличивается, что означает смещение равновесия системы в сторону комплексообразования. Но при этом добавление одной молекулы азокрасителя приводит к тушению люминесценции сразу нескольких НК.

Так, в случае последовательного создания комплексов, один комплекс КТ / азокраситель в случае ПАН и ПАР приводит к тушению люминесценции четырех и шести НК соответственно. При внедрении комплексов из раствора наблюдается еще более эффективное тушение люминесценции НК – комплексы ПАН и ПАР тушат люминесценцию шести и семи НК, соответственно. В растворах такой ход кривой тушения обычно объясняется образованием макроагрегатов, однако в ТМ внедрение молекул азокрасителя не должно приводить к агрегации НК.

Следует отметить, что в ТМ, в отличие от растворов, локальные концентрации НК достаточно высоки ($\sim 10^{-3}M$), что обуславливает небольшие расстояния между НК (менее 10 нм). В данных условиях комплекс Zn/азокраситель может приводить к тушению люминесценции не только НК, на поверхности которого он образован, но и за счет эффективного безызлучательного переноса энергии по механизму Ферстера (FRET – Förster Resonant Energy Transfer) между комплексами и соседними НК – к тушению люминесценции последних.

Исследование кинетики затухания люминесценции нанокристаллов при создании комплексов с молекулами азокрасителей

Было проведено исследование зависимости среднего времени затухания люминесценции НК в системах с азокрасителями с учетом относительной концентрации их молекул (n).

На рис. 6 приведена зависимость относительного времени затухания люминесценции квантовых точек от относительной концентрации азокрасителя. Видно, что в мембранах при увеличении числа молекул, приходящихся в среднем на один НК, происходит сокращение времени затухания люминесценции НК, в то время как в растворах такой зависимости не наблюдается. Такое поведение в растворе может быть объяснено тем, что присоединение молекулы азокрасителя приводит к полному тушению люминесценции НК, и в этом случае в системе регистрируется люминесценция только свободных НК. Сокращение среднего времени затухания люминесценции НК свидетельствует о частичном тушении люминесценции НК.

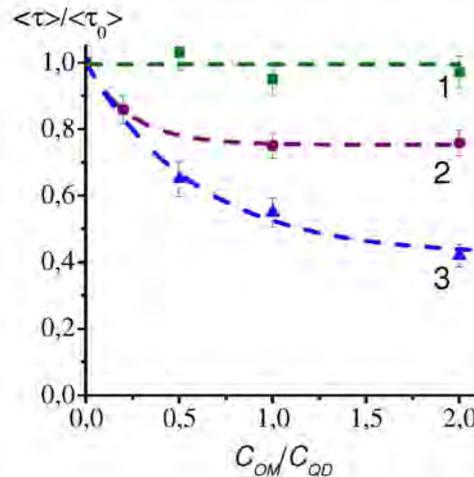


Рис. 6. Нормированное среднее время затухания люминесценции НК: 1 – в растворе в зависимости от концентрации молекул ПАН; 2, 3 – в ТМ для комплексов созданных последовательно в зависимости от концентрации ПАН и ПАР соответственно

Таким образом, сокращение $\langle \tau \rangle$ подтверждает наше предположение того, что комплексы Zn / азокраситель на поверхности НК частично тушат люминесценцию свободных НК.

Разница в эффективности переноса энергии по механизму FRET от НК к комплексам Zn / азокраситель, выступающими в качестве донора и акцептора энергии соответственно при условии, что средние расстояния между НК и концентрации комплексов НК/ПАР и НК/ПАН в образцах одинаковы, будет определяться различием интегралов перекрытия в этих двух системах. Интеграл перекрытия определяется следующим выражением [17]:

$$J = \int I_D^H(\nu) \cdot \varepsilon_A(\nu) \cdot \nu^{-4} \cdot d\nu, \quad (3)$$

где $I_D^H(\nu)$ – нормированный спектр люминесценции донора; $\varepsilon_A(\nu)$ – спектр поглощения акцептора; ν – волновое число. Интеграл перекрытия в свою очередь определяет критический радиус (расстояние между донором и акцептором, на котором эффективность переноса энергии составляет 50 %):

$$R_0^6 = \frac{9000 \cdot \ln 10 \cdot \Phi^2 \cdot q_{OD}}{128 \cdot \pi^5 \cdot n^4 \cdot N_A} \cdot J, \quad (4)$$

где Φ – ориентационный фактор; q_{OD} – квантовый выход донора в отсутствии тушителя; n – показатель преломления среды; N_A – число Авогадро.

По формулам (3) и (4) нами были получены следующие интегралы перекрытия и критические радиусы для НК с металлокомплексами ПАН и ПАР соответственно: $J_{PAN} = 5 \cdot 10^{-14} \text{ М}^{-1} \text{ см}^4$ ($R_{0(PAN)} = 31 \text{ \AA}$) и $J_{PAR} = 7 \cdot 10^{-13} \text{ М}^{-1} \text{ см}^4$ ($R_{0(PAR)} = 48 \text{ \AA}$). Таким образом, металлокомплексы Zn/ПАР будут более эффективно тушить люминесценцию НК.

Предположение того, что металлокомплексы азокрасителей с атомом цинка на поверхности НК выступают в роли тушителей люминесценции НК, также объясняет разный ход зависимостей интенсивности люминесценции НК от отношения молярных концентраций

НК и азокрасителей в трековых мембранах для разных способов создания комплексов (рис. 5, кривые 2 и 3).

Очевидно, что распределение молекул азокрасителей в приповерхностном слое трековых пор для комплексов, созданных последовательным пропитыванием образцов мембран, неравномерно и глубина проникновения азокрасителя в пристеночный слой определяется скоростью диффузии и длительностью пропитки образца. При этом большее число молекул будет присоединяться к НК, расположенным ближе к поверхности поры. В то время как для комплексов, внедренных в ТМ из раствора, распределение красителя в пристеночном слое пор трековых мембран определяется распределением нанокристаллов в этом слое (рис. 7).

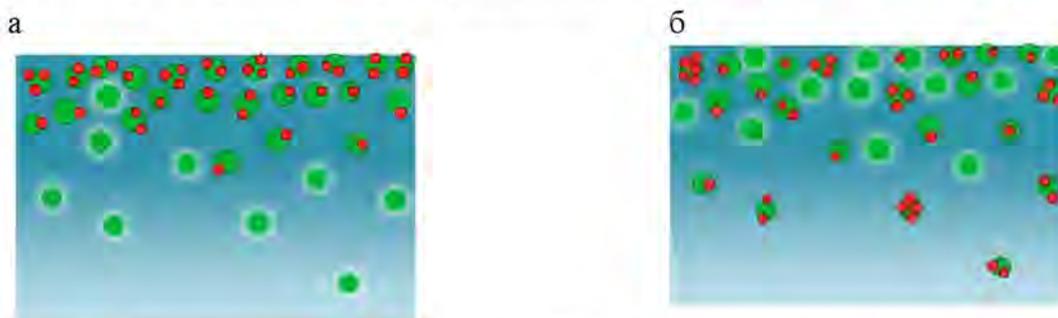


Рис.7. Схематическое распределение НК и молекул азокрасителя в пристеночном слое пор ТМ: а – последовательное создание комплексов; б – внедрение комплексов из раствора

Отсюда следует, что в образцах с комплексами, внедренными из раствора, уже при малых концентрациях тушителя свободные НК с большей вероятностью окажутся на расстоянии, меньшем величины критического радиуса от комплексов НК/азокраситель, чем в образцах с комплексами созданными последовательно.

Заключение

Нами было установлено, что высокие локальные концентрации нанокристаллов в приповерхностных слоях пор ТМ приводят к частичному тушению люминесценции свободных НК комплексами НК / азокраситель по механизму FRET. Вследствие этого в ТМ наблюдается эффективное тушение люминесценции нанокристаллов уже при малых концентрациях азокрасителя. Была обнаружена зависимость степени тушения люминесценции НК от способа создания комплексов.

Полученные результаты являются новыми. Они могут быть использованы в создании различных микрофлюидных устройств. Перспективно создание тонкопленочных диссоциативных люминесцентных сенсоров на основе ТМ с комплексами НК / азокраситель, так как удаление из системы одной молекулы тушителя приводит к увеличению интенсивности люминесценции нескольких НК, что может существенно повысить чувствительность сенсорных элементов.

Публикации

Результаты работы изложены в статье, направленной для публикации в реферируемый научный журнал («Journal of Membrane Science») и двух докладах на международной конференции «15th International conference on laser optics (LO-2012)» (Санкт-Петербург, Россия, 25–29 июня 2012 г.).

На основе проведенных исследований была подана заявка на изобретение № 2012128605 от 05.07.2012 «Способ создания структур на основе полупроводниковых нанокристаллов и органических молекул».

Литература

1. Frasco M., Chaniotakis N. Semiconductor Quantum Dots in Chemical Sensors and Biosensors // Sensors. 2009. Vol. 9. № 9. P. 7266–7286.
2. Kniprath R. et al. Hybrid photovoltaic cells with II–VI quantum dot sensitizers fabricated by layer-by-layer deposition of water-soluble components // Thin Solid Films. 2009. Vol. 518. № 1. P. 295–298.
3. Li F. et al. Memory effect of CdSe / ZnS nanoparticles embedded in a conducting poly[2-methoxy-5-(2-ethylhexyloxy)-1,4-phenylene-vinylene] polymer layer // Applied Physics Letters. 2007. Vol. 90. № 22. P. 222109-3.
4. Yun D. et al. Efficient conjugated polymer-ZnSe and -PbSe nanocrystals hybrid photovoltaic cells through full solar spectrum utilization // Solar Energy Materials and Solar Cells. 2009. Vol. 93. № 8. P. 1208–1213.
5. Weaver J.E. et al. Investigating Photoinduced Charge Transfer in Carbon Nanotube-Perylene-Quantum Dot Hybrid Nanocomposites // ACS Nano. 2010. Vol. 4. № 11. P. 6883–6893.
6. Resch-Genger U. et al. Quantum dots versus organic dyes as fluorescent labels // Nature Methods. 2008. Vol. 5. № 9. P. 763–775.
7. Gorbatsevich S.K. et al. Fluorescence of CdSe / ZnS quantum dots in solid solutions in the presence of organic molecules DODCI // Journal of Luminescence. 2004. Vol. 110. № 1–2. P. 23–29.
8. Artemyev M., Ustinovich E., Nabiev I. Efficiency of Energy Transfer from Organic Dye Molecules to CdSe-ZnS Nanocrystals: Nanorods versus Nanodots // Journal of the American Chemical Society. 2009. Vol. 131. № 23. P. 8061–8065.
9. Orlova A.O. et al. Track membranes with embedded semiconductor nanocrystals: structural and optical examinations // Nanotechnology. 2011. Vol. 22. № 45. P. 455201.
10. Talapin D.V. et al. Highly Luminescent Monodisperse CdSe and CdSe / ZnS Nanocrystals Synthesized in a Hexadecylamine-Trioctylphosphine Oxide-Trioctylphosphine Mixture // Nano Letters. 2001. Vol. 1. № 4. P. 207–211.
11. Corsini A. et al. Potentiometric Investigation of the Metal Complexes of 1-(2-Pyridylazo)-2-naphthol and 4-(2-Pyridylazo)resorcinol // Analytical Chemistry. 1962. Vol. 34. № 9. P. 1090–1093.
12. Abu-Zuhri A.Z. Pyridylazo compounds as analytical reagents // An-Najah University Journal for Research – Natural Sciences. 1987. Vol. 4. P. 30–40.
13. Baranov A.V. et al. Dissociative CdSe / ZnS quantum dot-molecule complex for luminescent sensing of metal ions in aqueous solutions // Journal of Applied Physics. 2010. Vol. 108. № 7. P. 074306-5.
14. Орлова А.О., Маслов В.Г., Топорова Ю.А. и др. Пленочный люминесцентный наносенсор на основе комплекса квантовая точка – органическая молекула // Российские нанотехнологии. 2010. Т. 5. № 1–2. С. 61–66.
15. Решетняк Е.А. и др. Протолитические и комплексообразующие свойства индикаторов в среде желатинового геля // Вісник Харківського національного університету. 2005. Вип. 13 (36). С. 67–82.
16. Infelta P.P. Fluorescence quenching in micellar solutions and its application to the determination of aggregation numbers // Chemical Physics Letters. 1979. Vol. 61. № 1. P. 88–91.
17. Брмолаев В.Л., Бодунов Е.Н., Свешникова Е.Б., Шахвердов Т.А. Безызлучательный перенос энергии электронного возбуждения. М., 1977. – 311 с.



Зайцева Татьяна Игоревна
Факультет естественнонаучный
Кафедра высшей математики
E-mail: tania.zai1010@gmail.com

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ДЛЯ АНАЛИЗА НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО БЕССТЫКОВОГО ПУТИ ПРИ СТАТИЧЕСКИХ И ДИНАМИЧЕСКИХ НАГРУЗКАХ

Т.И. Зайцева

Научный руководитель – профессор А.М. Уздин (ПГУПС, Санкт-Петербург)

Цель и задачи проекта

Цель работы – построение математических моделей для оценки напряженно-деформированного состояния (НДС) рельсовых плетей при изменении температуры и определение величины смещения рельса в месте его случайного излома. Для этого в работе должны быть решены две задачи.

Одна из них предполагает составление уравнения для оценки НДС плети при статической температурной нагрузке и получение его решения. При этом необходимо учитывать неоднородность подрельсового основания по длине плети.

Другая задача связана с построением математической модели и решением соответствующих уравнений колебаний плети при разрыве с учетом жесткости и демпфирования в подрельсовом основании [1]. Известно, что реальные свойства балласта меняются в широких пределах в зависимости от того является ли он свежеложенным или слежавшимся; происходит ли разрыв летом или в зимнее время, когда балласт смерзся.

Методы исследования

Для построения математических моделей и решения уравнений будут использованы классические методы строительной механики и теории дифференциальных уравнений. Для решения задачи динамики – преобразования Лапласа, а для оценки величины зазора предполагается рассмотреть колебания полубесконечного стержня, лежащего на сплошном упруго-демпфирующем основании (рис. 1). К концу стержня мгновенно прикладываются напряжения σ , равные напряжениям разрыва в рельсе. Для термоупрочненных рельсов бесстыкового пути напряжение разрыва составляет 400 МПа.

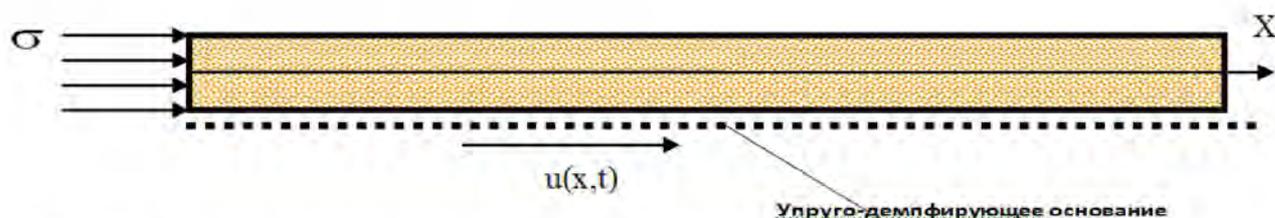


Рис. 1. Расчетная модель рельса на упруго-демпфирующем основании (балласте)

Рассматриваемая задача до настоящего времени не решена. Считается, что при превышении зазором величины 6–7 см возможен сход поезда с рельсов – это статическая величина зазора [2]. Решение поставленной задачи стало особенно актуально с развитием высокоскоростного движения. Высокоскоростные магистрали имеют бесстыковой путь, а сход высокоскоростного поезда с рельсов приводит к многочисленным жертвам.

Сборник работ студентов НИУ ИТМО, победителей конкурса грантов Правительства Санкт-Петербурга

Уравнение колебаний рассматриваемой системы имеет вид [3]:

$$\rho \cdot F \cdot u_{tt} = E \cdot F \cdot u_{xx} - \kappa \cdot u - \beta \cdot u_t, \quad (1)$$

где $\kappa = \sqrt{\frac{K}{F \cdot \rho}}$ – погонная жесткость, $\beta = \frac{\gamma \cdot K}{\omega}$ – погонная вязкость, E – модуль упругости рельса, ρ – плотность стали, F – площадь поперечного сечения рельса, γ – коэффициент неупругого сопротивления, ω – частота колебаний, u – смещение, u_t – скорость, u_{tt} – ускорение, K – жесткость балласта.

Уравнение (1) рассматривается при нулевых начальных условиях и следующих граничных:

$$u_x = \frac{\sigma}{E} \cdot \eta(t),$$

где σ – напряжение при разрыве рельсовой плети, η – единичная функция Хэвисайда; $u(\infty, t) = 0$.

Для решения задачи использован операционный метод. Если принять, что $u(t)$ имеет изображение Up , т. е. $u(t) \Rightarrow Up$, то уравнение в изображениях примет вид:

$$Up^2 = s^2 \cdot U_{xx} - \kappa \cdot U_x - \beta \cdot Up,$$

где s – скорость волны.

Полученное выражение представляет собой дифференциальное уравнение второго порядка по x . Его решение имеет вид:

$$U(x, p) = C_1 \cdot e^{-\frac{x}{s} \sqrt{(p+v)^2 + \alpha^2}} + C_2 \cdot e^{\frac{x}{s} \sqrt{(p+v)^2 + \alpha^2}},$$

где $\alpha = \kappa - \frac{\beta^2}{4}$, $v = \frac{\beta}{2}$.

Из условия равенства нулю смещения на бесконечности получаем $C_2 = 0$. Тогда

$$U(x, p) = C_1 \cdot e^{-\frac{x}{s} \sqrt{(p+v)^2 + \alpha^2}}.$$

Граничное условие $u(\infty, t) = 0$ в изображениях представимо в виде:

$$U_x(x, p)|_{x=0} = C \cdot \left[-\frac{\sqrt{(p+v)^2 + \alpha^2}}{s} \right] = \frac{\sigma_0}{E} \cdot \frac{1}{p},$$

где σ_0 – величина напряжения.

Откуда

$$C = \frac{\sigma_0}{E} \cdot \frac{1}{p} \cdot \frac{1}{\left[-\frac{\sqrt{(p+v)^2 + \alpha^2}}{s} \right]} = U(0, p) \Leftarrow u(0, t)$$

Переход от изображения к оригиналу позволяет записать искомое решение в виде:

$$u(0, t) = \frac{\sigma_0}{E} \cdot s \cdot \int_0^t e^{-vt} \cdot J_0(\alpha \cdot t) dt, \quad (2)$$

где J_0 – функция Бесселя.

Для оценки коэффициента динамики рассмотрим статическую задачу разрыва рельса. При этом уравнение для оценки смещения при разрыве рельса имеет вид:

$$E \cdot F \cdot u_{xx} - Ku = 0$$

Это дифференциальное уравнение второго порядка по x . Его решение выглядит следующим образом:

$$u(x) = \frac{\sigma}{\sqrt{\frac{K}{E \cdot F}} \cdot E} \cdot e^{-\sqrt{\frac{K}{E \cdot F}} \cdot x}$$

При $x=0$, на торце стержня

$$u_{cm.}(0) = \frac{\sigma}{\lambda \cdot E}, \quad (3)$$

где $\lambda = -\sqrt{\frac{K}{E \cdot F}}$.

Если поделить выражение (2) на (3), то получим формулу для вычисления коэффициента динамичности $\mu(t)$:

$$\mu(t) = \lambda \cdot s \cdot \int_0^t e^{-\nu \cdot t} \cdot J_0(\alpha \cdot t) dt.$$

На рис. 2 приведены зависимости изменения коэффициента динамичности во времени при различных значениях жесткости балласта K и коэффициента затухания b .

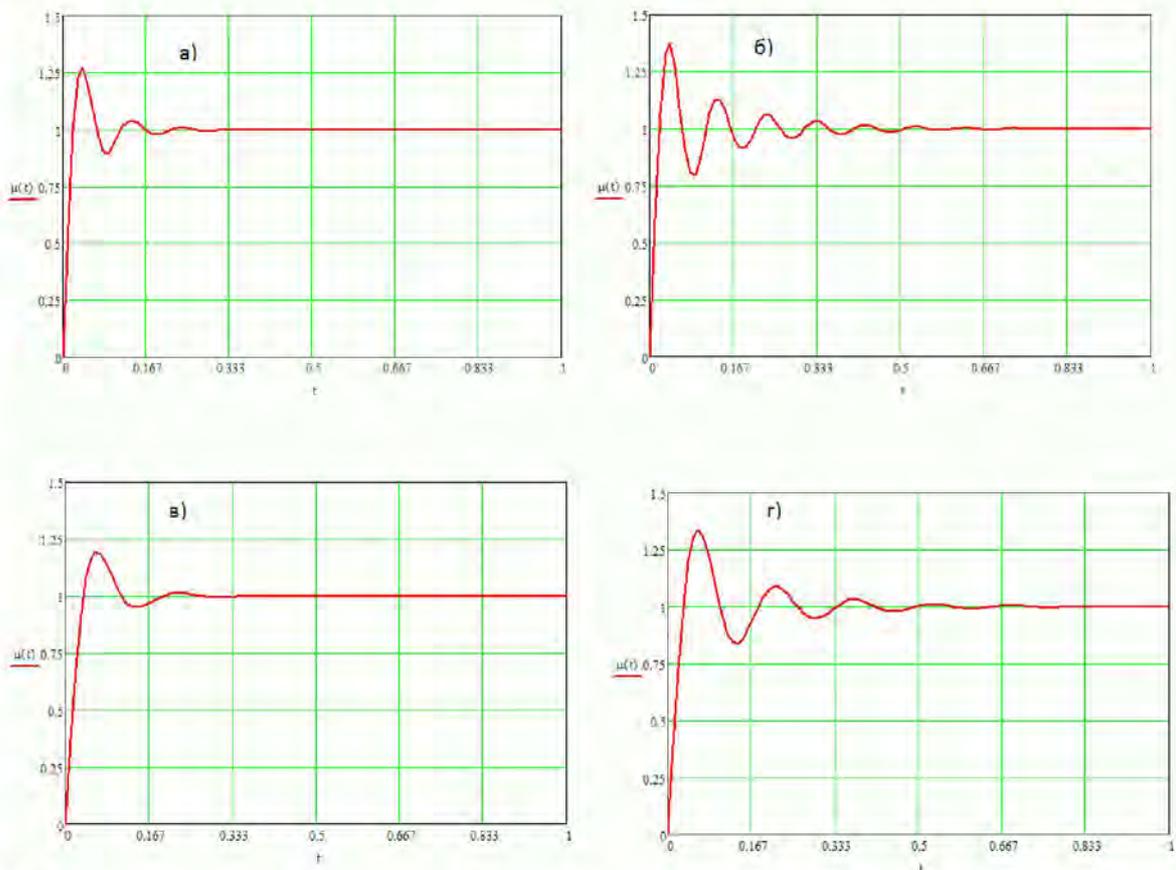


Рис.2. Изменение коэффициента динамики во времени при различных значениях K и b :
 а – $K_{max}=2500 \text{ кН/м}^2$, $b_{max}=25 \text{ с}^{-1}$; б – $K_{max}=2500 \text{ кН/м}^2$, $b_{min}=10 \text{ с}^{-1}$;
 в – $K_{min}=1000 \text{ кН/м}^2$, $b_{min}=25 \text{ с}^{-1}$; г – $K_{min}=1000 \text{ кН/м}^2$, $b_{min}=10 \text{ с}^{-1}$

Из рис. 2 видно, что во всех случаях коэффициент динамики не превосходит 1,5. Причем наибольшее его значение имеет место для старого смерзшегося балласта.

Далее исследуем влияние неоднородности подрельсового основания на работу рельсового пути. Запишем уравнение температурной деформации рельсовой плети бесстыкового пути на упругом основании при наличии вставки в него с другой характеристикой жесткости. При укладке бесстыкового пути на отдельных участках происходит изменение жесткости подрельсового основания. Это может быть связано с наличием искусственных сооружений в теле насыпи, смерзанием балласта и т. п. В данной задаче рассматривается влияние указанного фактора на НДС рельсовой плети при изменении ее температуры.

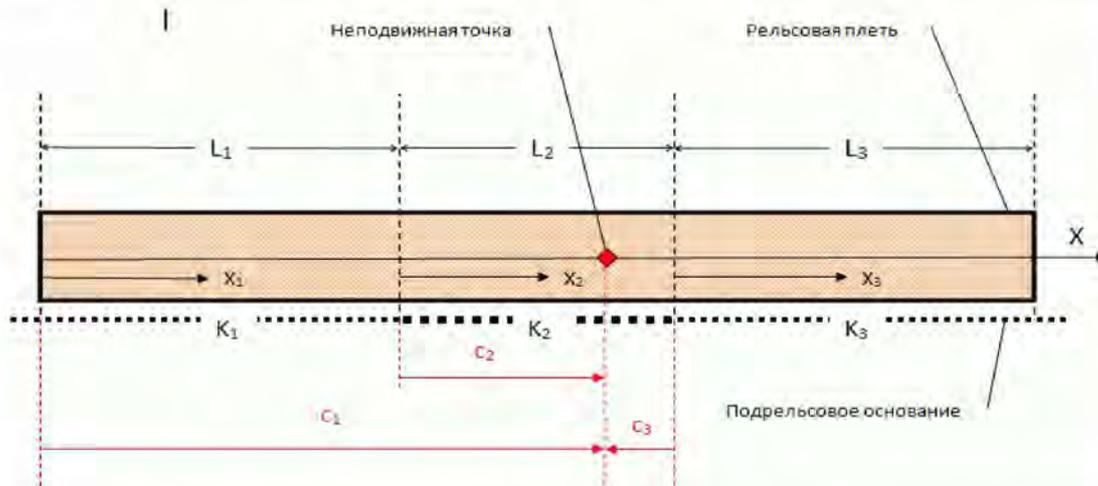


Рис.3. Схема участка рельсовой плети при наличии вставки в подрельсовое основание

Схема для расчета температурной деформации фрагмента рельсовой плети показана на рис. 3. Плеть имеет общую длину L , равную обычно 850 м, которая лежит на упругом основании жесткостью k , причем внутри плети имеется участок иной жесткости. В результате плеть оказывается разбитой на три участка длиной L_1 , L_2 и L_3 ; $L_1 + L_2 + L_3 = L$.

Уравнение НДС рельсовой плети записывается в виде [3]:

$$EFw'' - kw = k\alpha t(x - c) \quad (4)$$

Здесь: EF – продольная жесткость пути; k – погонная жесткость подрельсового основания; $\alpha = 1,1 \cdot 10^{-5}$ м/град – коэффициент температурного удлинения плети; t – температура нагрева рельса; x – координата рассматриваемой точки в принятой системе координат; c – координата неподвижной точки; $k\alpha t(x - c)$ – реакция подрельсового основания на нагрев рельсовой плети; w – смещение рельса $w = -\alpha t x + w_0$

Уравнение (4) рассматривается для каждого участка рельсовой плети в местной системе координат x_1 , x_2 и x_3 соответственно. Положение точки « c » фиксировано, а c_i – соответствующие значения c при записи уравнений для каждого участка.

Температурное удлинение рельса происходит в разные стороны относительно точки $x = c$. Положение точки « c » определяется из условия равновесия рельсовой плети. Для однородного основания это условие имеет вид:

$$\int_0^L k\alpha t(x - c) dx = 0 \quad (5)$$

Для плети, имеющей более жесткую или более податливую вставку в основании, уравнение (5) усложнится следующим образом:

$$\sum_{i=1}^3 \int_0^{L_i} k_i \alpha t (x_i - c_i) dx_i = 0. \quad (6)$$

Здесь интегрирование ведется для каждого участка в местной системе координат. В связи с этим координата неподвижной точки для каждого участка имеет свое значение, но они связаны соотношением:

$$c_2 = c_1 - L_1; \quad c_3 = c_2 - L_2.$$

Проинтегрировав уравнение (5) с условиями c_2 и c_3 , можно получить координату неподвижной точки «с» относительно начала основания:

$$c_1 = \frac{L_1 + 2 \cdot L_1 \cdot \psi + L_2 \cdot \psi + 2 \cdot L_1 \cdot \chi + 2 \cdot L_2 \cdot \chi + L_3 \cdot \chi}{2 + 2 \cdot \psi + 2 \cdot \chi}. \quad (7)$$

Здесь: $\psi = \frac{L_2 \cdot k_2}{L_1 \cdot k_1}$ – безразмерная жесткость основания; $\chi = \frac{L_3 \cdot k_3}{L_1 \cdot k_1}$ – параметр

безразмерной координаты.

Из уравнения (6), поделив обе части на длину плети на первом участке L_1 , получим безразмерную координату неподвижной точки z на первом участке, зависящую от параметров Ψ и χ :

$$z(\chi, \Psi) = \frac{1 + 2 \cdot \Psi + \nu \cdot \Psi + 2 \cdot \chi + 2 \cdot \nu \cdot \chi + \mu \cdot \chi}{2 + 2 \cdot \Psi + 2 \cdot \chi}.$$

$$\text{Здесь } \nu = \frac{L_2}{L_1}, \quad \mu = \frac{L_3}{L_1}.$$

Полученная безразмерная координата неподвижной точки зависит от четырех параметров ν , μ , Ψ и χ . Приведем графики зависимости функции z от безразмерной жесткости основания Ψ при разных значениях χ , ν и μ (рис. 4). Из рисунка видно, что во всех случаях при увеличении относительной жесткости вставки функция z стремится к одному значению – середине жесткой вставки.

Для дальнейшего анализа представим уравнение (4) следующим образом:

$$w'' - kw = k\alpha t (x - c), \quad (8)$$

где $k = \frac{\kappa}{EF}$, w – смещение рельса $w = -\alpha t x + w_0$

Решение уравнения (8) имеет вид:

$$w = C_1 e^{kx} + C_2 e^{-kx} - \alpha t (x - c).$$

Напряжение рельсовой плети представимо в виде:

$$\sigma = ((C_1 e^{kx} - C_2 e^{-kx})k - \alpha t)E = 0.$$

На рис. 5, 6 и 7 приведены эпюры смещений и напряжений в рельсовой плети при различных значениях жесткости балласта и при нагреве рельса на 40°C . Рис. 5 – эталонный. На нем иллюстрируется изменение смещений и напряжений при отсутствии вставки в основание рельсовой плети, на каждом из участков которой жесткости равны $k_1 = k_2 = k_3 = 0,02$.

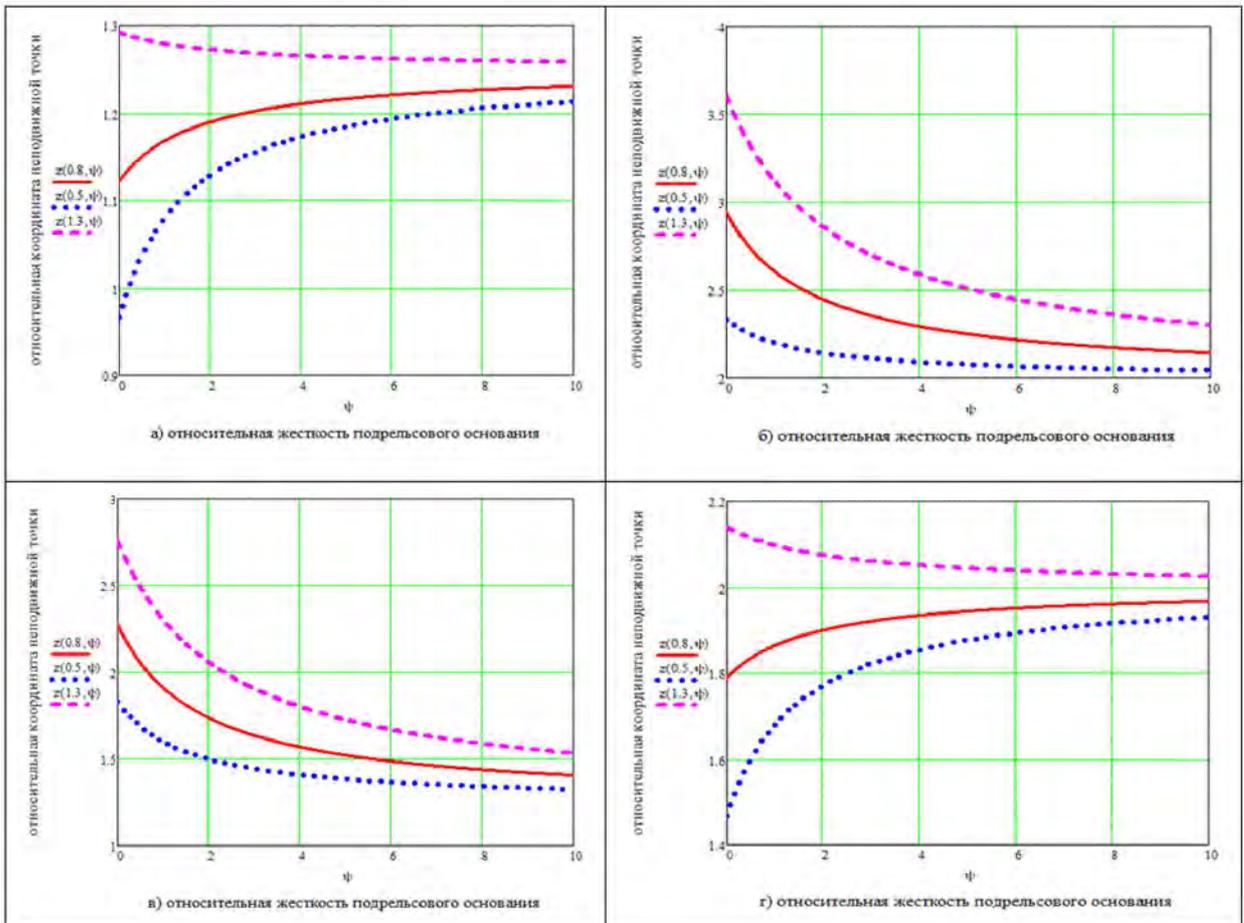


Рис.4. Зависимости функции z , от Ψ в зоне вставки при различных значениях ν , μ и χ : пунктирная линия – $\chi=1,3$; сплошная – $\chi=0,8$; точечная – $\chi=0,5$; а – $\nu=0,5$ м; $\mu=0,8$ м; б – $\nu=2$ м; $\mu=6$ м; в – $\nu=0,5$ м; $\mu=6$ м; г – $\nu=2$ м; $\mu=0,8$ м

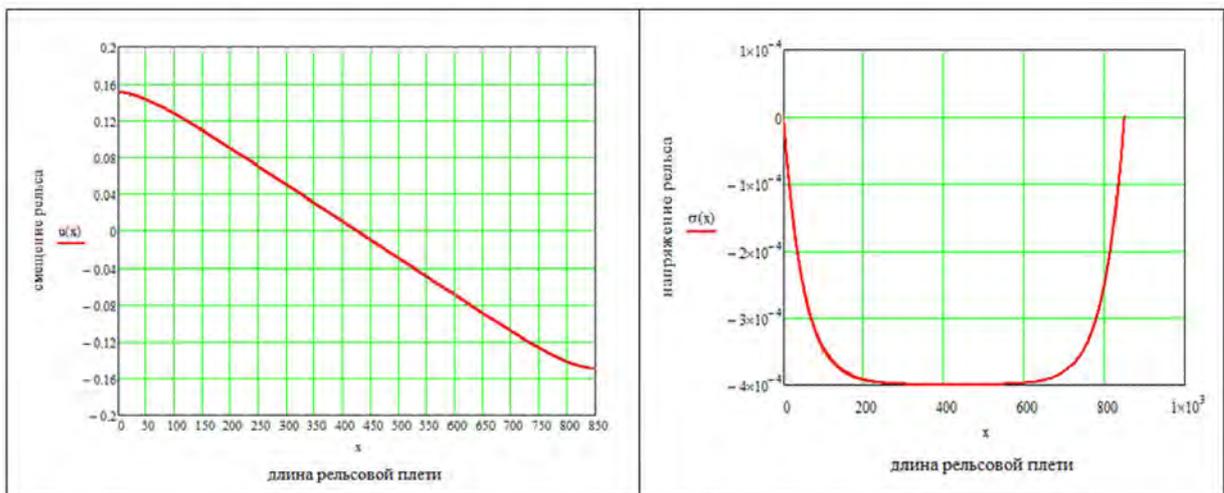


Рис.5. Изменение смещений рельса и напряжений в нем по длине рельсовой плети при $k_1=k_2=k_3=0,02$ (отсутствие вставки)

Рис. 6 иллюстрирует изменение смещений и напряжений в рельсе при несимметричной жесткой вставке в подрельсовое основание. С увеличением жесткости зона «больших» напряжений несколько уменьшается, а смещение одного из краев плети увеличивается. Полученный эффект связан с тем, что неподвижная точка смещается в сторону жесткой вставки и длина плети с односторонними перемещениями увеличивается.

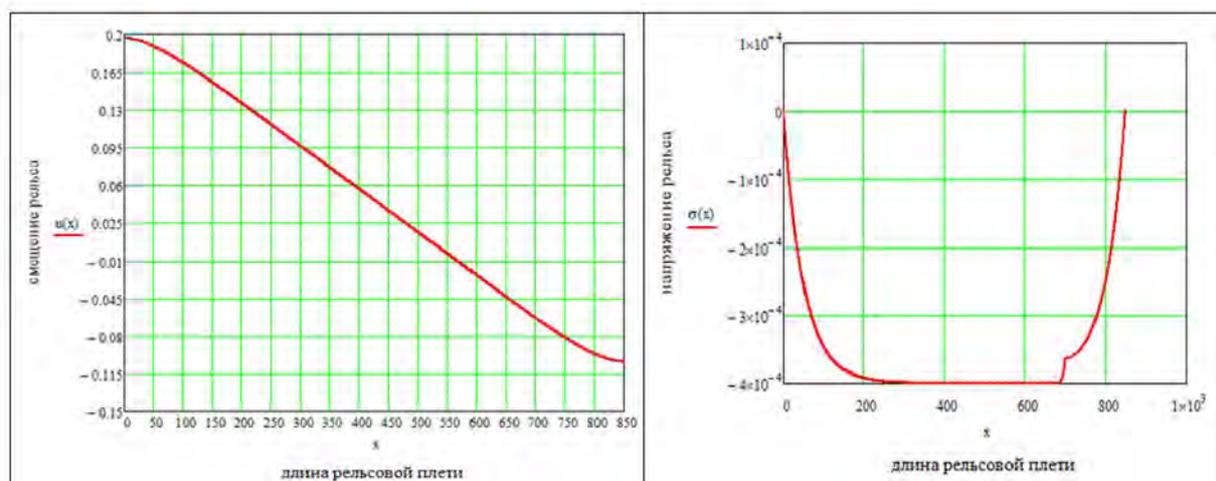


Рис.6. Изменение смещений рельса и напряжений в нем по длине рельсовой плиты при $k_1 = k_3 = 0,02$, $k_2 = 0,2$

На рис. 7 иллюстрируется изменение смещения и напряжения в рельсе при гибкой вставке в подрельсовое основание. С уменьшением жесткости зона «больших» напряжений увеличивается примерно на длину вставки, а левый и правый края смещения незначительно уменьшаются в сравнении с графиком на рис. 5.

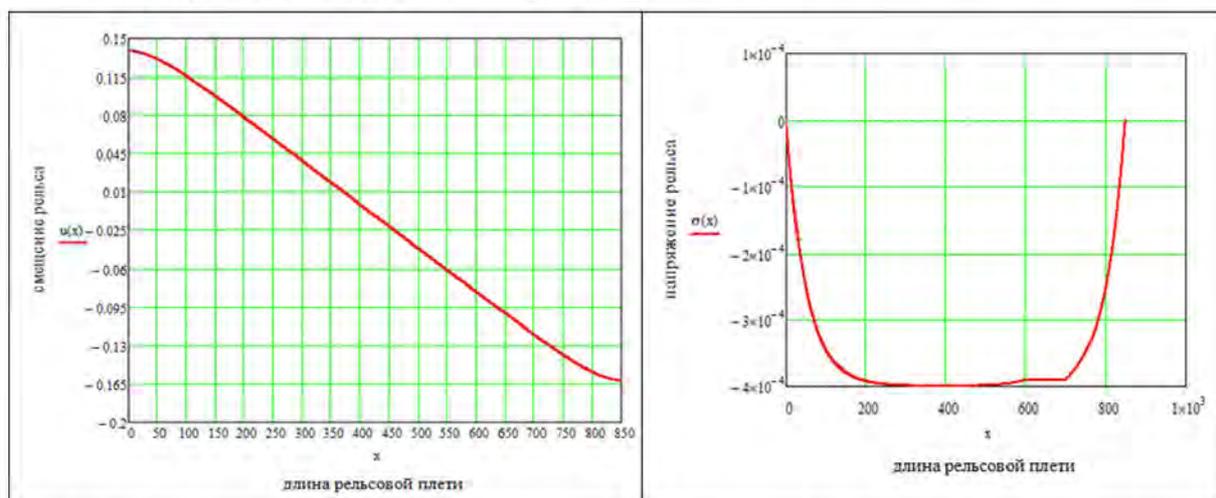


Рис.7. Изменение смещений рельса и напряжений в нем по длине рельсовой плиты при $k_1 = k_3 = 0,02$; $k_2 = 0,0000002$

Достигнутые результаты

- На основе анализа решения о колебаниях конца рельсовой плиты в момент ее разрыва возможная величина зазора составляет 10–12 см при случайном изломе рельса.
- Анализ НДС рельсовой плиты на неоднородном упругом основании позволяет утверждать, что наличие ограниченной зоны изменения жесткости подрельсового основания не приводит к существенному изменению НДС рельсовых плит, но может приводить к росту зазора при разрыве рельсовой плиты.
- Разработанные программные средства могут быть использованы при проектировании рельсового пути.

Области возможного использования результатов проекта

Результаты работы могут быть использованы при проектировании высокоскоростных магистралей, в частности Хельсинки – Санкт-Петербург – Москва.

Публикации

1. *Зайцева Т.И.* Оценка величины зазора при разрыве бесстыкового пути // Сб. статей кафедры высшей математики. Труды студенческого центра прикладных математических исследований. СПб. 2011. С. 19–22.
2. *Зайцева Т.И., Жгутова Т.В., Самойлова А.В., Уздин А.М.* Оценка безопасности бесстыкового пути по величине зазора при его разрыве // Научно-технический журнал. Природные и техногенные риски. Безопасность сооружений. 2011. № 4. С. 53–55.
3. *Зайцева Т.И., Уздин А.М.* Влияние изменения жесткости подрельсового основания на напряженно-деформированное состояние рельсовой плети // Научно-технический журнал. Природные и техногенные риски. Безопасность сооружений. 2012. № 3. С. 53–55.

Литература

1. *Боченков М.С.* Зазоры при изломе рельсовой плети // Труды ЦНИИ МПС. Вып. 244. М., 1962. С. 164–172.
2. *Цирулев В.А.* О возможности применения бесстыкового пути в условиях БАМа // Проблемы проектирования и внедрения рациональных строительных конструкций и сооружений в условиях Дальнего Востока и БАМа: Тезисы докладов Зональной научно-технической конференции. Хабаровск, 1976. С. 53–56.
3. *Крюков Е.П.* Брус в упругой среде, сопротивляющийся продольным смещениям // Сообщение ЦНИИСа. № 137. М., 1958. С. 86.



Зименко Константин Александрович
Факультет компьютерных технологий и управления
Кафедра систем управления и информатики
E-mail: kostyazimenko@gmail.com

ОБРАБОТКА СИГНАЛОВ ЭЛЕКТРОМИОГРАФИЧЕСКОЙ ОБРАТНОЙ СВЯЗИ

К.А. Зименко

Научный руководитель – профессор А.А. Бобцов

Введение

Поверхностная электромиограмма (ПЭМГ) – сигнал биоэлектрических потенциалов, возникающих в скелетных мышцах человека при возбуждении мышечных волокон, снимаемый с помощью накожных электродов.

Информация, содержащаяся в сигнале ЭМГ, может использоваться при создании / использовании активных протезов, средств реабилитации (в том числе и экзоскелетов) и других устройств, управление которыми происходит посредством изменения биопотенциалов мышц [1]. Такое управление называется миоэлектрическим (myoelectric control).

Сигнал электромиограммы (рис. 1) анализируется, преобразуется и поступает на исполнительные механизмы (например электродвигатели протеза или экзоскелета). Виды анализа ПЭМГ можно разделить на две части:

- декомпозиция сигнала на составляющие потенциальные движения: сначала происходит обнаружение искомого артефакта, а затем поиск условий его выполнения;
- выделение явных общих параметров (особенностей) сигнала, которые подаются к классификатору, чтобы различить предлагаемые движения.

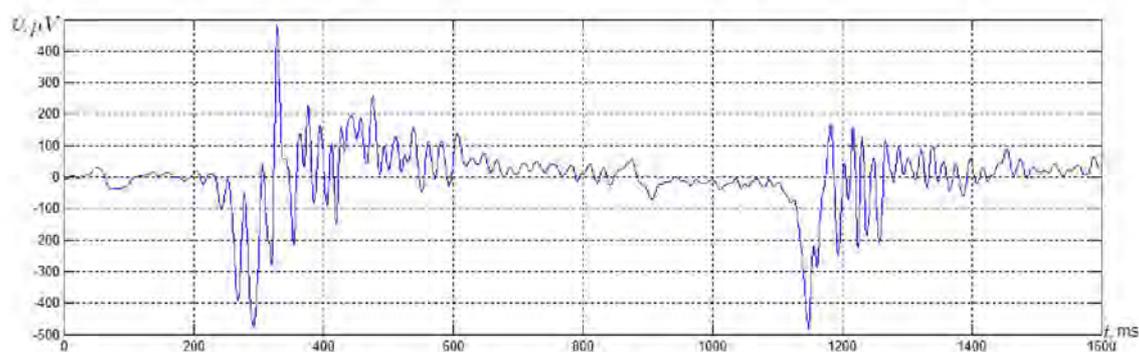


Рис. 1. Сигнал электромиограммы

Точному определению совершенного движения препятствуют следующие параметры: отношение сигнал/шум и искажение сигнала. Чтобы улучшить качество работы системы распознавания движений, необходимо понимать происхождение шумов и искажений в сигнале ЭМГ. Поэтому рассмотрим основные виды шумов и искажений, а также их особенности [2]:

- шумы от электронных устройств. Любая электроника производит шум, который может быть лишь уменьшен за счет использования более качественного оборудования;
- окружающий шум, источником которого является электромагнитное излучение. Поверхность наших тел постоянно находится под влиянием электромагнитных волн;
- влияние посторонних артефактов: при введении их в систему искажается информация. Существует три основных причины возникновения посторонних артефактов: сдвиги электрода от назначенного места, взаимодействие кабелей электродов между собой или с другими устройствами и искажения сигнала при изменении биопотенциалов на референте при использовании референтной схемы;

- искажения вследствие нестабильности сигнала. Амплитуда сигнала ПЭМГ нестабильна по своей природе, так как зависит от скорости возбуждения мышечных волокон. При этом в большинстве случаев частота сигнала колеблется в диапазоне до 20 Гц.

При анализе сигнала ЭМГ следует учитывать, что его амплитуда лежит в диапазоне от 0 до 10 мВ при частоте до 500 Гц. Так как большинство из рассмотренных шумов, высокочастотны, то наименее искаженный сигнал ПЭМГ находится в диапазоне 15–150 Гц. Чтобы получить такой сигнал, его нужно предварительно пропустить через фильтр низких частот или полосовой фильтр, как на аппаратном уровне, так и на уровне программного обеспечения.

Перед определением планируемого движения сигнал может быть предварительно обработан с использованием различных методов, таких как преобразование Фурье, оконное преобразование Фурье, вейвлет-анализ, анализ независимых компонент (ICA, FastICA) и др.

Существует несколько возможных способов классификации планируемых движений [3]: нечеткая логика, искусственные нейронные сети, поддерживающая векторная машина (Support Vector Machine (SVM)), классификатор минимальных расстояний, слепое разделение источников или использование генетических алгоритмов.

Таким образом, можно сказать, что задача анализа сигнала ПЭМГ для определения планируемых движений человека при всем многообразии подходов не имеет конкретного решения, способного обеспечить максимальную точность.

В работе рассматривается задача создания экзоскелета верхней конечности посредством анализа сигнала ПЭМГ с мышц предплечья (рис. 2а). Ведется распознавание четырех движений кистью: наклоны вперед-назад и вращательные движения вправо-влево. Для регистрации сигнала ПЭМГ использовался прибор Kardi3/9 (рис. 2б).

Для уменьшения влияния шумов используется референтная схема подключения электродов, причем референт располагается либо на плече, либо на мизинце.



Рис. 2. а – снятие сигнала электромиограммы с мышц предплечья руки;
б – система регистрации электромиограммы Kardi3/9

Распознавание движений и их классификация

Задача классификации множества объектов (ситуаций) – формализованная задача разделения их некоторым образом на классы. Задано конечное множество объектов, называемое выборкой, для которых известно, к каким классам они относятся. Классовая принадлежность остальных объектов не известна. Требуется построить алгоритм, способный классифицировать произвольный объект (в нашем случае фрагмент сигнала ЭМГ) из исходного множества. Классифицировать объект – значит указать номер (или наименование) класса (в исследуемом случае – вид движения), к которому он относится.

Постановка задачи

Математическая постановка задачи. Пусть X – множество описаний объектов, Y – множество номеров (или наименований) классов. Существует неизвестная целевая зависимость – отображение $y^*: X \rightarrow Y$, значения которой известны только на объектах конечной обучающей выборки $X^m = \{(x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m)\}$. Требуется построить алгоритм $a: X \rightarrow Y$, способный классифицировать произвольный объект $x \in X$.

Вероятностная постановка задачи. Более общей считается вероятностная постановка задачи. Предполагается, что множество пар «объект, класс» $X \times Y$ являются вероятностным пространством с неизвестной вероятностной мерой P . Имеется конечная обучающая выборка наблюдений $X^m = \{(x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m)\}$, сгенерированная согласно вероятностной мере P . Требуется построить алгоритм $a: X \rightarrow Y$, способный классифицировать произвольный объект $x \in X$.

Признаковое пространство. Признаком называется отображение $f: X \rightarrow D_f$, где D_f – множество допустимых значений признака. Если заданы признаки f_1, \dots, f_n , то вектор $X = (f_1(x), \dots, f_n(x))$ называется признаковым описанием объекта $x \in X$. Признаковые описания допустимо отождествлять с самими объектами. При этом множество $X = D_{f_1} \times \dots \times D_{f_n}$ называют признаковым пространством. В случае распознавания движений по ПЭМГ сигналу используется порядковый признак D_f – конечное упорядоченное множество. Часто встречаются прикладные задачи с разнотипными признаками. Для их решения подходят далеко не все методы, в связи с чем, выбор метода классификации является важным аспектом.

Выбор подходящего метода классификации

Из всех возможных вариантов классификации в связи с поставленной задачей и с необходимостью использования алгоритмов обучения с учителем, безусловно, необходимо использовать методы машинного обучения. Машинное обучение (Machine Learning), или обучение по прецедентам, – обширный подраздел искусственного интеллекта, исследующий методы построения алгоритмов, способных обучаться. Оно находится на стыке математической статистики, методов оптимизации и дискретной математики, но имеет также

и собственную специфику, связанную с проблемами вычислительной эффективности и переобучения.

Общая постановка задачи обучения по прецедентам. Имеется множество объектов (ситуаций) и множество возможных ответов (откликов, реакций). Существует некоторая неизвестная зависимость между ответами и объектами. Известна только конечная совокупность прецедентов – пар «объект-ответ», – называемая обучающей выборкой. На основе этих данных требуется построить алгоритм, способный для любого объекта выдать достаточно точный ответ. Для измерения точности ответов определенным образом вводится функционал качества.

Способы машинного обучения. Раздел машинного обучения, с одной стороны, образовался в результате разделения науки о нейросетях на методы обучения сетей и виды топологий архитектуры сетей, а с другой, вообрал в себя методы математической статистики. В рамках поставленной задачи с учетом того, что разрабатываемый экзоскелет должен быть универсальным, а сигналы ЭМГ у каждого человека разные, необходимо применять алгоритмы, использующие обучение с учителем, когда для каждого прецедента задается пара «ситуация – требуемое решение» [4], например:

- метод коррекции ошибки, представляющий собой такой метод обучения, при котором вес связи не изменяется до тех пор, пока текущая реакция перцептрона остается правильной;
- метод обратного распространения ошибки (Backpropagation) – метод обучения многослойного перцептрона. Для этого метода передаточная функция нейронов должна быть дифференцируема.

Так как в ходе работы для классификации применялись как однослойные, так и многослойные перцептроны, то за основу был взят метод обратного распространения ошибки.

Построение нейронной сети и ее практическая реализация

Искусственные нейронные сети (ИНС) – это математические модели, а также их программные или аппаратные реализации, построенные по принципу организации и функционирования биологических нейронных сетей – сетей нервных клеток живого организма. ИНС представляют собой систему соединенных и взаимодействующих между собой простых процессоров (искусственных нейронов). Такие процессоры обычно довольно просты, особенно в сравнении с процессорами, используемыми в персональных компьютерах, тем не менее, будучи соединенными в достаточно большую сеть с управляемым взаимодействием, они способны выполнять сложные задачи.

Функция активации (возбуждения) – функция, вычисляющая выходной сигнал искусственного нейрона. В качестве аргумента принимает сигнал Y , получаемый на выходе входного сумматора Σ . Из всего разнообразия функций активации была выбрана функция

сигмоид: $\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$, которая имеет простое выражение производной через саму функцию:

$\sigma'(x) = \sigma(x)(1 - \sigma(x))$. Это позволило существенно сократить вычислительную сложность метода обратного распространения ошибки, сделав его применимым на практике.

Не менее важной причиной введения нелинейности является математически доказанная возможность получить сколь угодно точное приближение любой непрерывной функции многих переменных, используя операции сложения и умножения на число, суперпозицию функций, линейные функции, а также одну произвольную непрерывную нелинейную функцию одной переменной (обобщенная аппроксимационная теорема).

Перцептрон – математическая и компьютерная модель восприятия информации мозгом (кибернетическая модель мозга). Основная математическая задача, с которой он справляется, – это линейное разделение любых нелинейных множеств (обеспечение линейной сепарабельности).

Перцептрон состоит из трех типов элементов: поступающие от сенсоров (рецепторов) сигналы передаются ассоциативным элементам, а затем реагирующим. Таким образом, перцептроны позволяют создать набор «ассоциаций» между входными стимулами и необходимой реакцией на выходе. Исследования перцептронов показали, что они способны обучаться. Справедлива теорема о сходимости перцептрона, согласно которой независимо от начальных значений коэффициентов и порядка показа образцов при обучении, перцептрон за конечное число шагов научится различать два класса объектов, если только существует такая классификация.

Существует большое число разных конфигураций нейронных сетей с различными принципами функционирования, которые ориентированы на решение всевозможных задач. Поэтому для классификации планируемых движений использовались как многослойные перцептроны различных вариаций, так и однослойные. Наилучший результат показал однослойный перцептрон. Это связано с тем, что на работу многослойного перцептрона большее влияние оказывал высокий уровень шума сигнала. К тому же использование однослойного перцептрона существенно снизило время обучения системы. В итоге используется перцептрон, изображенный на рис. 3, где к входному и среднему слоям добавлено по единичному элементу (bias term).

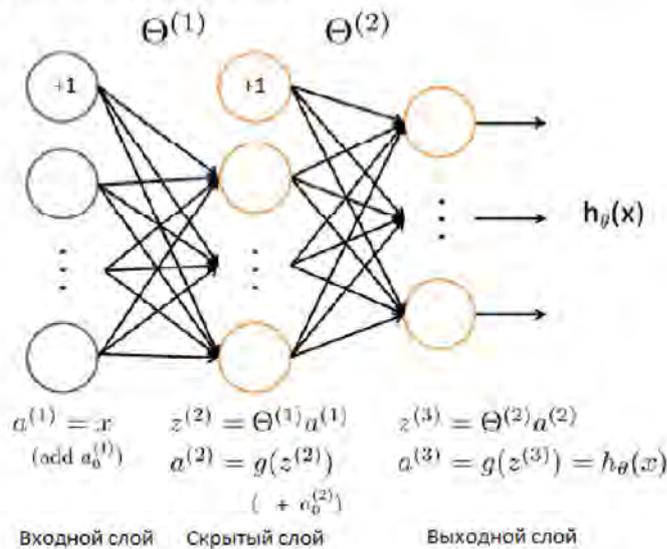


Рис. 3. Перцептрон с одним скрытым слоем

Обучение нейронной сети. Под обучением искусственных нейронных сетей понимается процесс настройки архитектуры сети (структуры связей между нейронами) и весов синаптических связей (влияющих на сигналы коэффициентов) для эффективного решения поставленной задачи. Обычно обучение нейронной сети осуществляется на некоторой выборке. По мере процесса обучения, который происходит по некоторому алгоритму, сеть должна все лучше и лучше (правильнее) реагировать на входные сигналы. При обучении нейронной сети нет уверенности, что она обучилась наилучшим образом, поскольку всегда существует возможность попадания алгоритма в локальный минимум. Для этого используются специальные приемы, позволяющие «выбить» найденное решение из локального экстремума. Если после нескольких таких действий нейронная сеть сходится к тому же решению, то можно сделать вывод о том, что найденное решение, скорее всего, оптимально.

Функция издержек (cost function, или feedforward). В качестве такой функции при нахождении глобального минимума, используется регуляризируемая функция:

$$J(\theta) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^{out-l} \left[-y_k^{(i)} \log((h_{\theta}(x^{(i)}))_k) - (1 - y_k^{(i)}) \log(1 - (h_{\theta}(x^{(i)}))_k) \right] + \frac{\lambda}{2m} \left[\sum_{j=1}^{hid-l} \sum_{k=1}^{inp-l} (\Theta_{j,k}^{(1)})^2 + \sum_{j=1}^{out-l} \sum_{k=1}^{hid-l} (\Theta_{j,k}^{(2)})^2 \right], \quad (1)$$

где $inp-l$ – размер входного слоя, $hid-l$ – размер скрытого (среднего) слоя, $out-l$ – размер выходного слоя (количество классифицируемых движений), $h_{\theta}(x)$ – функция выхода

(гипотеза), m – размер обучающей подборки, y – значение обучающей выборки (номер планируемого движения), λ – коэффициент регуляризации (выбирается эмпирически: слишком большой ведет к ненасыщению сети (underfit), слишком малый – к переполнению сети (overfit)), Θ – матрицы весов. Заметим, что первые строки матриц Θ состоят из единиц.

Произвольная инициализация (random initialization). Когда нейронная сеть тренируется, важно предварительно произвести произвольную инициализацию для матриц Θ , чтобы избежать симметричности весов сети. Одна из наиболее эффективных стратегий – произвольно выбрать значения для Θ^l в диапазоне $[-\epsilon_{init}, \epsilon_{init}]$. Один из способов выбрать ϵ_{init} основан на размерах смежных слоев по отношению к Θ^l :

$$\epsilon_{init} = \frac{\sqrt{6}}{\sqrt{L_{in} + L_{out}}},$$

где $L_{in} = s_l$, $L_{out} = s_{l+1}$ – количество элементов в слоях смежных Θ^l . Такой выбор элементов в диапазоне $[-\epsilon_{init}, \epsilon_{init}]$ позволяет сохранять параметры малыми (то есть время на обучение сети не увеличится) и делает обучение более эффективным за счет избавления от симметричности весов.

Метод обратного распространения ошибки. Это итеративный градиентный алгоритм, который используется с целью минимизации ошибки работы многослойного перцептрона и получения желаемого выхода. Основная идея этого метода состоит в распространении сигналов ошибки от выходов сети к ее входам в направлении, обратном прямому распространению сигналов в обычном режиме работы.

Для выбранной сети метод обратного распространения ошибки выглядит следующим образом (рис. 4):

- для каждого элемента выходного слоя 3 найдем ошибку $\delta_k^{(3)} = (a_k^{(3)} - y_k)$, где $y_k \in \{0,1\}$ обозначает принадлежность текущего тренировочного примера к классу k ($y_k = 1$) или другому классу ($y_k = 0$);

- для скрытого (среднего) слоя 2 обозначим: $\delta^{(2)} = (\Theta^{(2)})^T \delta^{(3)} .* g'(z^{(2)})$, где $.*$ – поэлементное умножение матриц, g' – производная сигмоид функции;

- рассчитаем градиент этого примера по следующей формуле: $\Delta^{(l)} = \Delta^{(l)} + \delta^{(l+1)} (a^{(l)})^T$. Отметим, что предварительно необходимо удалить $\delta_0^{(2)}$;

- получим градиент для функции издержек нейронной сети (без регуляризации) путем деления полученного градиента на m : $\frac{\partial}{\partial \Theta_{ij}^{(l)}} J(\Theta) = D_{ij}^{(l)} = \frac{1}{m} \Delta_{ij}^{(l)}$.

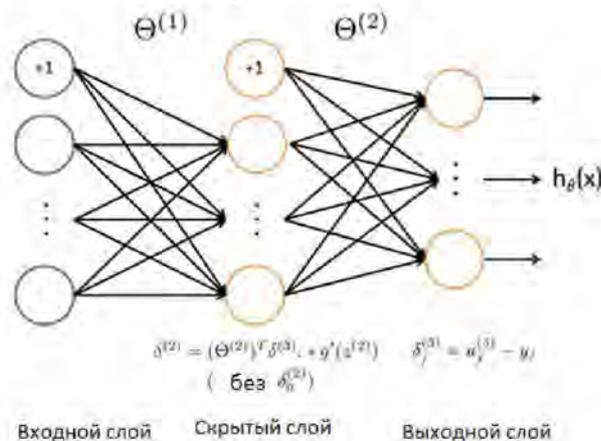


Рис. 4. Метод обратного распространения ошибки

Нейронная сеть с регуляризацией. После выполнения алгоритма обратного распространения ошибки необходимо добавить регуляризацию к градиенту. То есть после вычисления $\Delta_{ij}^{(l)}$ следует добавить регуляризацию в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial \Theta_{ij}^{(l)}} J(\Theta) = D_{ij}^{(l)} = \frac{1}{m} \Delta_{ij}^{(l)} \text{ при } j = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial \Theta_{ij}^{(l)}} J(\Theta) = D_{ij}^{(l)} = \frac{1}{m} \Delta_{ij}^{(l)} + \frac{\lambda}{m} \Theta_{ij}^{(l)} \text{ при } j \geq 1. \quad (3)$$

Заметим, что не нужно регуляризовать первый столбец матрицы Θ^l , относящийся к единичным элементам. Кроме того, для Θ^l параметр i начинается с 0, параметр j начинается с 1:

$$\Theta^{(l)} = \begin{bmatrix} \Theta_{1,0}^{(l)} & \Theta_{1,1}^{(l)} & \dots \\ \Theta_{2,0}^{(l)} & \Theta_{2,1}^{(l)} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}. \quad (4)$$

Нахождение минимума функции издержек. Необходимо найти глобальный минимум непрерывно дифференцируемой многомерной функции издержек. Опишем лишь общий принцип поиска минимума. Используется метод сопряженных градиентов Полака-Рибери для вычисления направления поиска и линейного поиска с использованием уравнений аппроксимации второго и третьего порядков. Критерий Вольфа-Пауэлла применяется вместе с методом движения по склону, чтобы определить первоначальный размер шага. Кроме того, имеют место множество проверок, чтобы убедиться, что изучение происходит и что экстраполяция не будет неограниченно большой. Если длина шага больше 0, то его величина определяет максимальное число линейных поисков, если отрицательна – дает максимально допустимое число оценки функции.

Чтобы повысить точность работы сети, необходимо увеличить количество итераций работы функции поиска минимума (что приведет, конечно же, к увеличению времени обучения) и / или варьировать значения коэффициента регуляризации λ [5]. Также качество работы искусственной нейронной сети можно увеличить за счет увеличения обучающей выборки.

Программная реализация нейронной сети

Тренировочная выборка. На входной слой нейронной сети, как и говорилось ранее, должны поступать данные с четырех электродов. Элемент сигнала одного из них изображен на рис. 5, где выделены два тренировочных примера для одного электрода. В среднем длительность движения, где соотношение сигнал / шум сравнительно велико, составляет около 200 мс, что при частоте дискретного сигнала в 1000 Гц составляет 200 отсчетов. Тогда матрица X (матрица обучающей выборки, где в каждой строке содержатся данные по одному определяемому планируемому движению), составляется следующим образом:

$$X = \begin{bmatrix} (x_1^{(1)})^T & (x_2^{(1)})^T & (x_3^{(1)})^T & (x_4^{(1)})^T \\ (x_1^{(2)})^T & (x_2^{(2)})^T & (x_3^{(2)})^T & (x_4^{(2)})^T \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ (x_1^{(n)})^T & (x_2^{(n)})^T & (x_3^{(n)})^T & (x_4^{(n)})^T \end{bmatrix}, \quad (5)$$

где $(x_l^{(k)})^T$ – 200 отсчетов от момента начала активности мышц по электроду l для k -го тренировочного примера.

Проверка вычисления градиента. Чтобы убедиться в правильности вычисления градиента, для начала развернем параметры $\Theta^{(1)}, \Theta^{(2)}$ в один вектор θ . Допустим, что есть

функция $f_i(\theta)$, которая предположительно вычисляет $\frac{\partial}{\partial \theta_i} J(\theta)$; необходимо оценить ее верность. Пусть $\theta^{(i+)} = \theta + [0 \ 0 \ \dots \ \varepsilon \ \dots \ 0]^T$; $\theta^{(i-)} = \theta - [0 \ 0 \ \dots \ \varepsilon \ \dots \ 0]^T$, тогда можно проверить корректность вычисления функции $f_i(\theta)$ для каждого i :

$$f_i(\theta) \approx \frac{J(\theta^{(i+)}) - J(\theta^{(i-)})}{2\varepsilon}.$$

Степень, в которой эти два значения должны сблизиться, зависит от деталей J , но если предположить $\varepsilon = 10^{-4}$, то значения приведенных выше выражений будут совпадать, как минимум до четвертого знака.

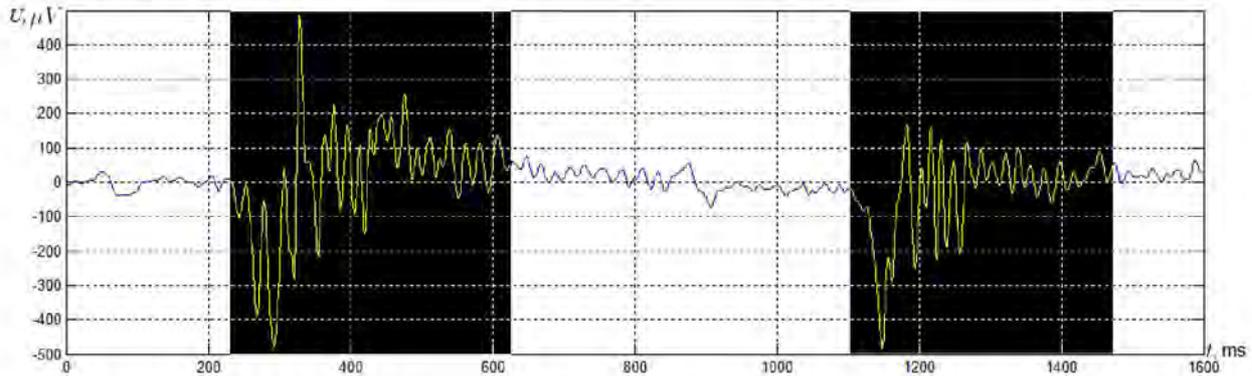


Рис. 5. Два тренировочных примера для одного из электродов

Необходимо провести проверку на правильность выполнения алгоритма обратного распространения ошибки непосредственно перед началом обучения сети. Отметим, что данный способ проверки можно использовать для любого градиентного метода поиска минимума.

Была выполнена программная реализация классификации движения (построение нейронной сети и т. д.) в среде Matlab. Точность построенной системы классификации составила $87 \pm 2\%$ ($\pm 2\%$ вызвано произвольной инициализацией).

Особенности сигнала электромиограммы

Постановка задачи

Сигнал ПЭМГ представляет богатую информацию о нейромускульной активности, о намерении выполнения определенного движения. Цель его обработки состоит в нахождении значимых особенностей, которые могут применяться в системах управления. Существует два вида систем с управлением по сигналу ЭМГ: управление, основанное на распознавании образов (выбранное в нашем случае), и пропорциональное управление по пороговому значению (управление на основе конечных автоматов и др.). Этот вид управления более эффективен для экзоскелетов и активных протезов, обладающих меньшей функциональностью, чем экзоскелет руки, например экзоскелет локтевого сустава.

Управление на основе распознавания образов заключается в определении класса движения из имеющихся образов, которое выполняет классификатор, построенный на основе искусственной нейронной сети. Один из способов улучшить работу классификатора – выполнить предварительную обработку сигнала, основанную на нахождении и «извлечении» его особенностей, несущих важную информацию о движении, которое планируется сделать.

Сегментация данных

Для реализации управления на основе сигнала ЭМГ в режиме реального времени, обычно применяют сегментирование данных. Сегмент – временной промежуток ПЭМГ, используемый для обработки и нахождения его особенностей. Для сегментации данных применяют различные оконные методы, например накладываются (рис. 6а) и граничащих окон

(рис. 6б). При этом размер окна не должен превышать 300 мс [6]. Важно, чтобы время обработки сигнала сегмента было меньше, чем допустимая задержка системы.

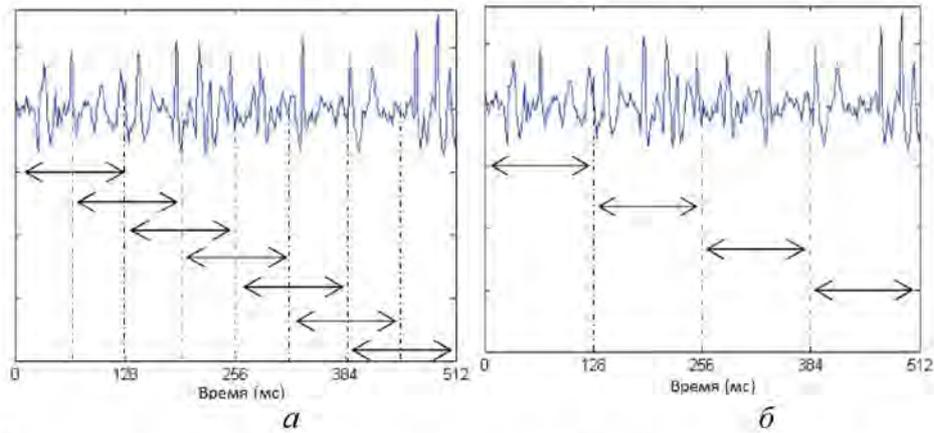


Рис. 6. а – метод накладывающихся окон; б – метод граничащих окон

Временные особенности сигнала

Временные особенности сигнала ЭМГ несут информацию о мощности и продолжительности планируемого движения. Выделим четыре наиболее значимых из них:

– среднее абсолютное значение сегмента сигнала: $\bar{x}_i = \frac{1}{S} \sum_{m=1}^S |x_m|$,

где i – номер сегмента, S – количество значений в сегменте данных;

– разность средних абсолютных значений: $\Delta x_i = \bar{x}_{i+1} - \bar{x}_i$,

где i и $i+1$ – два накладываемых сегмента;

– измерение частоты, которое может быть получено подсчетом количества пересечений значения нуля сигналом (Zero Crossing). При этом вводится некий порог, чтобы уменьшить число пересечений нулевого значения сигналом, вызванных шумами:

$$\begin{cases} x_m > 0 \text{ и } x_{m+1} < 0 \text{ или } x_m < 0 \text{ и } x_{m+1} > 0 \\ |x_m - x_{m+1}| \geq \varepsilon \end{cases} \quad (6)$$

– количество изменений знака разности двух соседних значений (Slope Sign Changes). Как и в предыдущем случае, используется некий порог, чтобы уменьшить влияние шумов:

$$\begin{cases} x_m > x_{m-1} \text{ и } x_m > x_{m+1} \text{ или } x_m < x_{m-1} \text{ и } x_m < x_{m+1} \\ |x_m - x_{m+1}| \geq \varepsilon \text{ или } |x_m - x_{m-1}| \geq \varepsilon \end{cases} \quad (7)$$

Обозначенные параметры сигнала часто используются вместе с другими с целью увеличения скорости классификации.

Частотные особенности сигнала

Спектр мощности сигнала представляет собой вклад, который вносит каждая частота в мощность всего сигнала. Частотное содержание стационарного сигнала можно получить в результате преобразования Фурье, определяемое как:

$$FT_x(f) = \int x(t) e^{-2\pi jft} dt, \quad X(t) = \int FT(f) e^{2\pi jft} df.$$

Однако при нахождении спектральной плотности теряется информация о времени совершения каждого события. Поэтому возникает необходимость использовать спектральный анализ совместно с другими параметрами сигнала, например относящимися к его временным особенностям.

Временно-частотные особенности сигнала

Коэффициенты $X(t)$ из преобразования Фурье обозначают частотное распределение сигнала без временного разрешения и, как следствие, не отражают его переходные особенности. Временно-частотное преобразование сохраняет информацию как о временной, так и о частотной структурах сигнала. Оно объединяет упомянутые выше методы анализа и приводит к более ясной спектральной характеристике сигнала с точной временной локализацией. Временно-частотное преобразование можно поделить на две группы: линейное (оконное преобразование Фурье и вейвлет-преобразование) и квадратичное (распределение Уайнера-Вилла).

Особое внимание следует уделить линейно-частотному преобразованию, так как его использование возможно в условиях режима реального времени. Квадратичное временно-частотное преобразование основано на комплексной обработке сигнала и алгоритмах, требующих значительных затрат времени на обработку. Основная концепция линейных методов заключается в декомпозиции сигнала на временно-частотные составляющие:

$$x(t) = \sum_{i=1}^N c_i \beta_i(t),$$

где $\beta_i(t)$ – основная функция, c_i – соответствующие коэффициенты.

Оконное преобразование Фурье

Оконное преобразование Фурье – двумерная функция времени и частоты. Основная идея его заключается в разделении оси времени на ограниченные окна, при этом сигнал считается стационарным на протяжении каждого промежутка времени. Если $\omega(\tau - t)$ – оконная функция, то оконное преобразование Фурье выглядит следующим образом:

$$STFT(t, f) = \int x(\tau) \omega^*(\tau - t) e^{-2\pi j f \tau} d\tau.$$

Важно заметить, что информация, получаемая с помощью оконного преобразования Фурье, ограничивается размером окна. Выбор $\omega(t)$ – основной фактор, от которого зависят временное и частотное разрешения. Результат между временным и частотным разрешениями должен быть также ограничен снизу на $1/4\pi$ вследствие действия принципа неопределенности времени и пропускной способности.

Вейвлет-преобразование

Одна из самых плодотворных идей вейвлетного представления сигналов на различных уровнях декомпозиции (разложения) заключается в разделении функций приближения к сигналу на две группы: аппроксимирующую, грубую, с достаточно медленной временной динамикой изменений и детализирующую – с локальной и быстрой динамикой изменений на фоне плавной динамики с последующим их дроблением и детализацией на других уровнях декомпозиции сигналов. Это возможно как во временной, так и в частотной областях представления сигналов вейвлетами. Также вейвлет-анализ может удалять / уменьшать шумы сигнала без значительного снижения производительности [7]. Вейвлет-анализ можно определить следующим образом:

$$CVT(a, t) = \frac{1}{\sqrt{a}} \int x(\tau) \psi^* \left(\frac{\tau - t}{a} \right) d\tau,$$

что определяет корреляцию сигнала путем изменения размеров основного вейвлета.

Пакетное вейвлет-преобразование

Пакетное вейвлет-преобразование является адаптивным и широко используется для компрессии сигналов и их очистки от шумов. Оно позволяет более точно приспособиваться к особенностям сигналов путем выбора соответствующей оптимальной формы дерева разложения, которая обеспечивает минимальное количество вейвлет-коэффициентов при

заданной точности реконструкции сигнала и тем самым целенаправленно исключает из обратного БВП незначимые, информационно избыточные или ненужные детали сигналов. Мерой оптимальности обычно служит концентрация числа вейвлет-коэффициентов для реконструкции сигнала с заданной точностью (погрешностью). Оценка информативности набора коэффициентов выполняется по энтропии сигнала. Любое усреднение коэффициентов увеличивает энтропию. При анализе дерева вычисляется энтропия узлов и его разделенных аппроксимирующей и детализирующей частей. Если при разделении узла энтропия не уменьшается, то дальнейшее ветвление с этого узла не имеет смысла. Главное отличие пакетного вейвлет-преобразования заключается в способе «расщепления» сигнала (рис. 7).

Уменьшение размерности

Методы, рассмотренные выше, преобразуют сигнал в более удобный для классификатора, но не уменьшают его размерность. Роль уменьшения размерности заключается в сохранении наиболее важной информации для определения планируемого движения и исключении информации, не соответствующей целям классификации. Построение классификатора с меньшим количеством входных данных проще, и процесс обработки такого сигнала существенно облегчится. Выбор такой информации может быть достигнут за счет определения оптимального набора параметров. Для этого могут использоваться такие техники, как анализ основных компонентов (Principal component analysis) или анализ линейных отличий (Linear discriminate analysis). Для получения лучшего результата можно комбинировать различные техники, например, использовать комбинацию вышеупомянутых техник вместе с вейвлет-преобразованием сигнала (WTP/PCA/LDA).

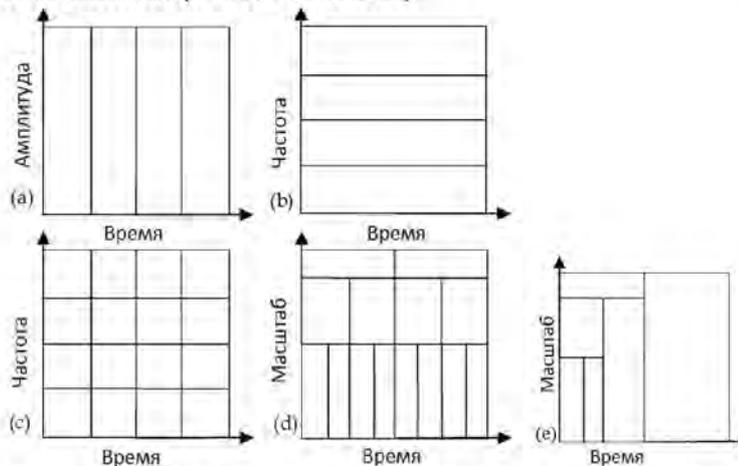


Рис.7. Четыре метода разделения сигнала: а – метод Шенона (разделение на временные области);
 б – преобразование Фурье; с – оконное преобразование Фурье;
 д – пакетное вейвлет-преобразование; е – вейвлет-преобразование

Обработка сигнала электромиограммы

Постановка задачи

Существует несколько способов для улучшения качества работы искусственной нейронной сети. Рассмотрим основные из них:

– увеличение количества электродов. В этом случае увеличивается точность определения движений планируемых классификатором [8]. Так при использовании 16 каналов (электродов) точность определения составляет приблизительно 94 %. При использовании восьми и четырех каналов – 93 % и 87 % соответственно. Однако следует понимать, что при увеличении числа каналов, обучение и работа нейронной сети существенно замедляются. Поэтому будем считать четыре канала наилучшим выбором, так как существенного различия качества работы нейронной сети по сравнению с 16 каналами не наблюдается, а время обучения и работы остается малым;

– предварительная обработка сигнала электромиограммы более четко выделяет особенности сигналов планируемых движений, уменьшает размерность и влияние шумов, улучшает качество работы нейронной сети. Например, частота дискретизации исследуемого сигнала в 1000 Гц, делает его чрезмерно избыточным; поэтому целесообразно уменьшить его размерность. Это позволит снизить влияние высокочастотных шумов, более четко выделить особенности планируемых движений, уменьшить время обработки сигнала и размерность входного и среднего слоев нейронной сети (рис. 8).



Рис. 8. Схема работы системы с отображением возможных способов классификации и обработки сигнала электромиограмм

Обработка сигнала может вестись с использованием вейвлет-преобразования, быстрого оконного преобразования Фурье, пакетного вейвлет-преобразования, фильтрации (использования фильтров низких частот или полосовых фильтров для уменьшения шумов). Таким образом, работу разрабатываемой системы можно представить так, как это показано на рис. 9 [9].

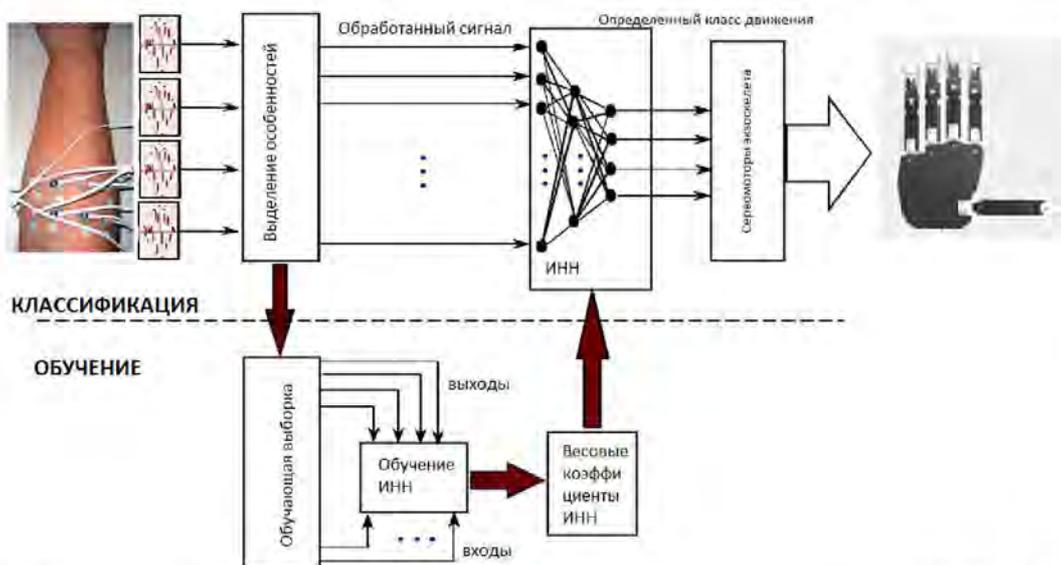


Рис. 9. Схема многофункционального управления экзоскелетом руки по ПЭМГ сигналу на базе искусственной нейронной сети с предварительной его обработкой

Программная реализация

Для вейвлет-преобразования сигнала ЭМГ можно воспользоваться пакетом расширения Wavelet Toolbox системы Matlab. Программное обеспечение пакета позволяет выполнять вейвлет-преобразования как в командном режиме, так и в диалоговом режиме по интерфейсу GUI. Главным достоинством дискретного вейвлет-преобразования (ДВП) является возможность быстрого вейвлет-преобразования (БВП) с пирамидальным алгоритмом вычислений, что позволяет выполнять анализ больших выборок данных. Однако возможности БВП реализуются не для всех типов вейвлетов. Тем не менее при обработке данных БВП используется весьма интенсивно и в пакете Wavelet Toolbox представлено большим количеством специальных функций [10].

При представлении сигнала ЭМГ на первом уровне декомпозиции с использованием вейвлета Хаара можно получить аппроксимирующую и детализирующую составляющие, где коэффициенты детализации уже не содержат информации об изменениях биопотенциалов на референте, а влияние шумов вида 2,4 (как указывалось ранее) значительно уменьшено. Помимо этого, размерность уменьшается вдвое, что позволяет избавиться от избыточности сигнала (рис. 10).

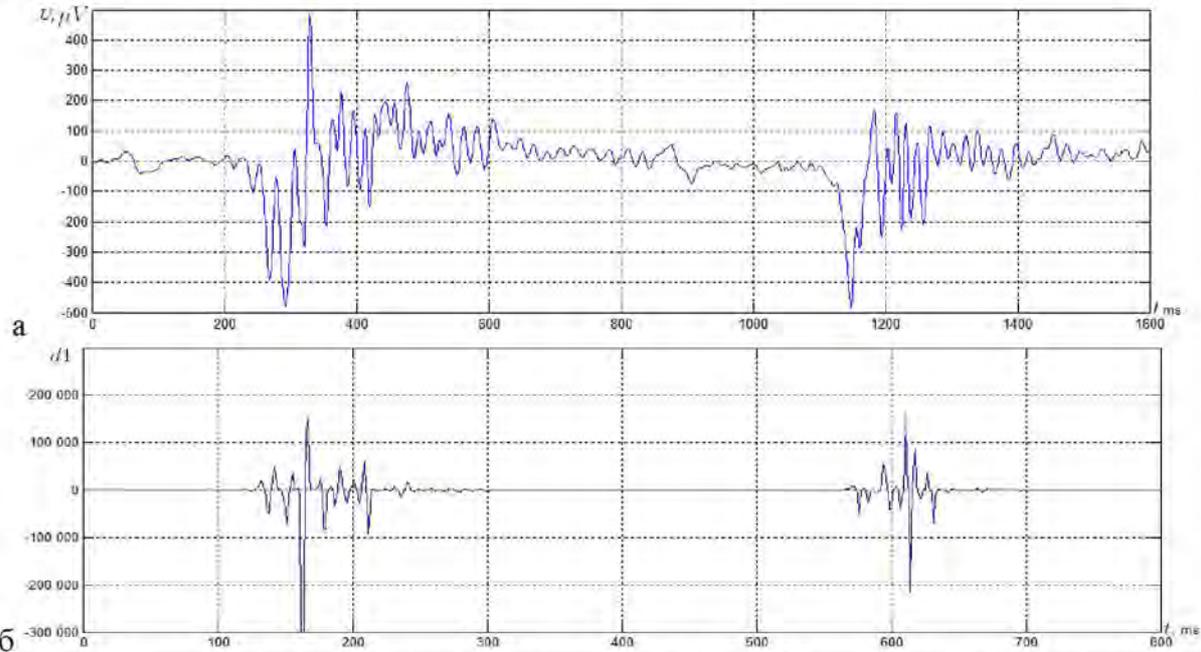


Рис. 10. а – фрагмент сигнала электромиограммы; б – коэффициенты детализации сигнала

После описанной выше обработки сигнала точность определения планируемого движения нейронной сетью составила $94 \pm 2\%$. При этом время на обработку сигнала уменьшилось за счет уменьшения размерности и, соответственно, входного слоя нейронной сети. В итоге точность идентификации четырех видов планируемых движений кистью (Табл. 3) улучшилась приблизительно на 7%, что сделало анализ сигнала электромиографии применимым для системы управления экзоскелетом.

Таблица 3

Идентификация четырех видов планируемых движений кистью

Выход нейронной сети	Планируемые движения			
	Наклон кисти вперед	Наклон кисти назад	Вращательное движение вправо	Вращательное движение влево
1	1	0	0	0
2	0	1	0	0
3	0	0	1	0
4	0	0	0	1

Заключение

В данной работе были рассмотрены способы анализа сигнала ЭМГ для системы управления экзоскелетом руки. Наряду с теоретическими обоснованиями были также рассмотрены практические аспекты внедрения и применения анализа сигнала ПЭМГ. Из всего разнообразия способов анализа сигналов был выбран наиболее подходящий для системы управления экзоскелетом по состоянию биопотенциалов на мышцах человека. При этом выбор

способа анализа сигнала осуществлялся с учетом времени его обработки, приближенного к режиму реального времени.

В программной среде Matlab была написана программа, производящая обработку сигнала ПЭМГ, полученного от устройства регистрации биопотенциалов, и идентифицирующая вид планируемого движения. Она была апробирована для идентификации четырех видов планируемых движений кистью: наклоны вперед и назад, повороты вправо и влево. Регистрация электромиограммы проводилась регистратором Kardi3/9. Точность определения вида планируемого движения составила $94 \pm 2\%$.

Определение вида планируемого движения производилось с помощью классификатора, основанного на искусственной нейронной сети. Наилучший результат показал однослойный перцептрон, на входной слой которого поступал предварительно обработанный сигнал электромиограммы. В качестве предварительной обработки сигнал проходил через фильтр низких частот, организованных на аппаратном уровне, что позволило избавиться от высокочастотных шумов. Далее проходило вейвлет-преобразование сигнала, способствующее более четкому обозначению особенностей, присущих каждому виду планируемых движений, и уменьшению его размерности, что положительно сказывается на быстроте действия системы и повышает качество работы.

Таким образом, был определен метод идентификации планируемых движений для системы управления экзоскелетом верхних конечностей. Выбранный метод был апробирован, и точность идентификации превысила 92 %.

Публикации

1. *Zimenko K.A., Borgul A.S., Margun A.A., Kremlev A.S., Krasnov A.Y.* Intuitive Control for Robotic Rehabilitation Devices by Human-Machine Interface with EMG and EEG Signals // 17th International conference on Methods and Models in Automation and Robotics (MMAR 2012) (27–30 August 2012, Międzyzdroje, Poland): Abstracts. Międzyzdroje, 2012. P. 308–311.
2. *Bobtsov A.A., Kolyubin S.A., Pyrkin A.A., Borgul A.S., Zimenko K.A., Rabysh E.Y.* Mechatronic and Robotic Setups for Modern Control Theory Workshops // Preprints of the 9th IFAC Symposium on Advances in Control Education (ACE 2012). Nizhny Novgorod, 2012. P. 348–353.
3. *Боргуль А.С., Зименко К.А., Маргун А.А.* Биоинформационные технологии в управлении техническими системами // Сб. тезисов докладов XIX Всероссийской научно-методической конференции «Телематика'2012». СПб., 2012. С. 147.
4. *Боргуль А.С., Зименко К.А., Маргун А.А.* Биотехническая система управления устройством реабилитации // Сб. тезисов докладов I Всероссийского конгресса молодых ученых. СПб., 2012. С. 197.

Литература

1. *Carmena J.* Becoming Bionic // IEEE Spectrum. 2012. Vol. 49. № 3. P. 24–29.
2. *Mr. Rohtash Dhiman et al.* Detecting the useful electromyogram signals – extracting, conditioning and classification // International Journal on Computer Science and Engineering. 2011. Vol. 2. № 4. P. 634–637.
3. *Kuiken T.A., Li G., Lock B.A. et al.* Targeted muscle reinnervation for real-time myoelectric control of multifunction artificial arms // Journal of the American Medical Association. 2009. Vol. 301. № 6. P. 619–628.
4. *Subasi A., Yilmaz M., Ozcalik H.R.* Classification of EMG signals using wavelet neural network // Journal of Neuroscience Methods. 2006. Vol. 156. № 1–2. P. 360–367.
5. <https://class.coursera.org/ml/class/index> – сайт онлайн-курса университета Стэнфорда по машинному обучению.
6. *Oskoei M., Hu H.* Myoelectric control systems – A survey // Biomedical Signal Processing and Control. 2007. Vol. 2. № 4. P. 275–294.
7. <http://www.dsplib.ru/content.html> – статьи о теории и практике цифровой обработки сигналов.

8. Parker P., Englehart K., Hudgins B. Myoelectric signal processing for control of powered limb prostheses // Journal of Electromyography and Kinesiology. 2006. Vol. 16. № 6. P. 541–548.
9. Zimenko K.A., Borgul A.S., Margun A.A., Kremlev A.S., Krasnov A.Y. Intuitive Control for Robotic Rehabilitation Devices by Human-Machine Interface with EMG and EEG Signals // 17th international conference on Methods and Models in Automation and Robotics (MMAR 2012) : 27–30 August 2012, Międzyzdroje, Poland: IEEE, cop. 2012., pp. 308–311. Abstr. – ISBN: 978-1-4673-2123-5;
10. Дьяконов В., Абраменкова И. MATLAB. Обработка сигналов и изображений. Специальный справочник. СПб., 2002. – 608 с.



Казаков Сергей Владимирович
Факультет информационных технологий и программирования
Кафедра компьютерных технологий
E-mail: kazakov_serгей_v@mail.ru

МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ КОНЕЧНЫХ АВТОМАТОВ ВЕРХНЕГО УРОВНЯ ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ МОДЕЛЬЮ БЕСПИЛОТНОГО САМОЛЕТА НА ОСНОВЕ ОБУЧАЮЩИХ ПРИМЕРОВ

С.В. Казаков

Научный руководитель – профессор А.А. Шальто

Введение

В настоящее время одной из самых актуальных является задача построения программного средства для управления объектом со сложным поведением. При этом для некоторых из них такая задача является чрезвычайно сложной и трудно решаемой. Объектом управления может быть, например техника для передвижения (автомобили, самолеты, вертолеты, космические корабли) или другие сложные устройства (роботы, техника на производстве).

Рассмотрим подробнее задачу управления беспилотным самолетом. Существует несколько подходов к ее решению. Один из них состоит в выделении «идеальной» траектории из нескольких полетов, выполненных человеком, и последующее следование ей [1].

Другой подход – использование для управления конечных автоматов. В современной литературе чаще всего рассматриваются два возможных вида средств управления с использованием автоматов: обычный автомат, который осуществляет весь процесс управления, и система автоматов. Обычно она состоит из головного (автомата верхнего уровня), необходимого для переключения между режимами управления, и автоматов нижнего уровня, каждый из которых может непосредственно управлять объектом в одном режиме. Головной автомат взаимодействует с автоматами нижнего уровня за счет вложенности.

Построение автоматов нижнего уровня чаще всего происходит с помощью алгоритма генетического программирования. Некоторые из них описаны в работах [2–5]. Автоматы верхнего уровня можно строить аналогично. В одном из них [6] вычисление функции приспособленности базируется на моделировании поведения самолета во внешней среде, что занимает около пяти минут для одной особи на одном ядре современного компьютера. При этом весь процесс построения занимает несколько недель, что является существенной проблемой такого подхода.

С целью устранения указанного недостатка в работе [7] было предложено использовать обучающие примеры как замену моделированию. Такой подход также основан на алгоритме генетического программирования, однако в отличие от предыдущего состоит в построении автоматов нижнего уровня для управления в одном режиме. Время необходимое для всего процесса в этом случае составило уже 5–20 часов. Это исследование является развитием метода построения автоматов, основанного на обучающих примерах и изложенного в работе [8].

Для обеспечения всего процесса полета самолета одновременно с построением автоматов нижних уровней необходимо построение автомата верхнего уровня, каждое состояние которого соответствует одному из режимов полета, а затраченное на это время должно быть меньше или сравнимо со временем получения управляющих автоматов нижнего уровня. Также имеет смысл использовать обучающие примеры, которые будут включать в себя весь процесс полета самолета. При этом процессы построения управляющих автоматов можно будет объединить в один и строить двухуровневую систему, задавая только обучающие примеры. Если задавать большое число обучающих примеров, то можно, как и в работе [1], избавиться от неточностей в них, допускаемых человеком при управлении транспортным средством.

Используемый в данной работе объект со сложным поведением – беспилотный самолет – в дальнейшем может быть заменен на любой другой, который может быть управляем в нескольких режимах работы.

Взаимодействие системы автоматов с беспилотным самолетом

Самолет характеризуется множеством приборов и набором органов управления. Будем называть параметры, которые характеризуют приборы самолета, входными, а параметры, характеризующие органы управления, – управляющими. На орган управления можно воздействовать, изменяя его параметр, что обеспечивает управление самолетом. Такие воздействия будем называть выходными, так как они являются результатом работы системы автоматов.

Взаимодействие между системой автоматов и объектом управления выполняется следующим образом: каждый такт работы система автоматов получает набор значений входных параметров, на основании которых она вычисляет значения предикатов, используя их, генерирует воздействия и, возможно, меняет свое состояние. Схема взаимодействия показана на рис. 1.



Рис. 1. Схема взаимодействия

Предикат о состоянии самолета – это булева формула, которая вычисляется с использованием всех (не только последних пришедших) входных параметров самолета. При этом в формуле может участвовать один параметр, значение которого задается при инициализации предиката. Например, предикат «прошло заданное время» или «высота больше заданной» являются предикатами с параметром.

Структура обучающего примера

Исходными данными для построения системы управляющих автоматов является набор обучающих примеров, задающих эталонное поведение. Они создаются человеком.

Обучающий пример состоит из входных и управляющих параметров для каждого такта работы, а также содержит разделение всего примера на области, соответствующие разным режимам.

Автомат верхнего уровня

Напомним, что автомат верхнего уровня необходим для переключения между режимами полета самолета и что каждое состояние автомата соответствует одному такому режиму, который однозначно задается автоматом нижнего уровня. Он представляется в виде обычного конечного автомата с ребрами, которые возможны между любыми состояниями.

Ввиду того что такой автомат необходим для переключения между режимами полета самолета, а не для непосредственного управления (эту задачу решают автоматы нижнего уровня), ребра в нем содержат только условия перехода и не содержат действий. Для перехода используются условия следующего вида: « $[!]x_1 \& [!]x_2 \& \dots \& [!]x_k$ ». Здесь x_i – предикаты о состоянии самолета. Более сложное условие перехода выбирать не целесообразно из-за трудностей его автоматического построения.

Построение автомата верхнего уровня

Разработанный метод построения управляющего автомата верхнего уровня использует обучающие примеры, а также построенные (заданные) автоматы нижнего уровня для каждого из режимов полета, которые приведены в обучающих примерах.

Задача построения автомата верхнего уровня разбивается на две подзадачи:

- определение используемых режимов в каждом обучающем примере;
- определение ребер и условий переходов по ним.

Ввиду того что режим полета однозначно задается автоматом нижнего уровня, для каждой области каждого обучающего примера необходимо выбрать наиболее подходящий автомат нижнего уровня. Этот выбор осуществляется благодаря вычислению редакционного расстояния между двумя последовательностями входных параметров – тех, которые записаны в области обучающего примера, и параметров, которые задаются вместе с каждым автоматом нижнего уровня. Считается, что такая последовательность параметров для автомата нижнего уровня задает поведение беспилотного самолета под управлением данного автомата.

Используя эти результаты, каждой области обучающего примера можно поставить в соответствие состояние автомата верхнего уровня.

Уже после этого легко определить, какие переходы обязательно должны быть между состояниями автомата верхнего уровня для удовлетворения обучающему примеру. Для таких переходов можно выделить из обучающего примера свой обучающий набор, который состоит из нескольких последовательностей входных параметров, каждая из которых разделена на две части. На первой – условие перехода по ребру не должно выполняться, а на второй – должно.

Задача поиска условия перехода осуществляется в два этапа:

- поиск условия, различающего параметры при переходе по данному ребру от параметров при переходе по другим ребрам из того же состояния;
- поиск дополнительного условия, которое будет удовлетворять требованиям обучающего набора самого ребра.

Поиск осуществляется с помощью перебора всевозможных условий разрешенного вида с проверкой поставленных требований. При этом предпочтение отдается предикатам без параметров. Если же подходящее условие не найдено, то осуществляется поиск условия с возможностью выбора подходящего параметра из обучающего набора.

Экспериментальная проверка

Для проверки эффективности и работоспособности предложенного метода была выбрана задача построения системы автоматов управляющей беспилотным самолетом, который должен взлететь, набрать высоту, далее выполнять команды, которые приходят с Земли, и в конечном итоге приземлиться. При этом возможен приход трех команд:

- выполнить мертвую петлю;
- начать снижаться, для того чтобы приземлиться;
- начать набирать высоту до необходимой для выполнения трюка.

Последние две команды могут отменять друг друга, но команду выполнения мертвой петли отменить нельзя, пока она не будет осуществлена.

Для записи обучающих примеров и для проверки построенной системы автоматов был выбран свободный кроссплатформенный симулятор *FlightGear* (<http://www.flightgear.org>), который в нашей работе позволяет осуществлять как ручное, так и автоматное управление моделью самолета.

Построение автоматов нижнего уровня

Для выполнения поставленной задачи было необходимо осуществлять управление в следующих режимах: запуск двигателя; разгон; набор высоты (взлет); сбалансированный полет; мертвая петля; снижение; приземление; торможение.

Автомат нижнего уровня для выполнения мертвой петли был получен с помощью подхода построения автоматов нижнего уровня, основанного на генетическом алгоритме с использованием обучающих примеров, описанного в работе [7]. Автоматы нижнего уровня для всех остальных режимов были построены вручную.

Построение автомата верхнего уровня

Было записано 13 обучающих примеров с четырьмя сценариями работы самолета, под которыми подразумевается последовательность используемых режимов. После этого был сформирован достаточный набор предикатов, которые программное средство могло использовать для построения условий перехода. Затем был запущен алгоритм построения автомата верхнего уровня. Построенный автомат приведен на рис. 2. В нем используются следующие предикаты:

- x_0 – двигатель работает длительное время;
- x_1 – высота меньше нулевого порога;
- x_2 – мертвая петля была выполнена;
- x_3 – пришла команда на выполнение мертвой петли;
- x_4 / x_5 – пришла команда начать набирать высоту / снижаться;
- x_6 – скорость относительно земли больше 59 км/ч;
- x_7 – высота больше 1381 футов \approx 400 метров;
- x_8 – прошло 50 с после переключения в данный режим;
- x_9 – прошло 28 с после переключения в данный режим;
- x_{10} – высота больше 196 футов \approx 60 метров.

Отметим, что предикаты x_0 – x_5 являются предикатами без параметра. Остальные имеют параметр, значения которого для каждого предиката были выбраны разработанным программным средством с использованием обучающих примеров.

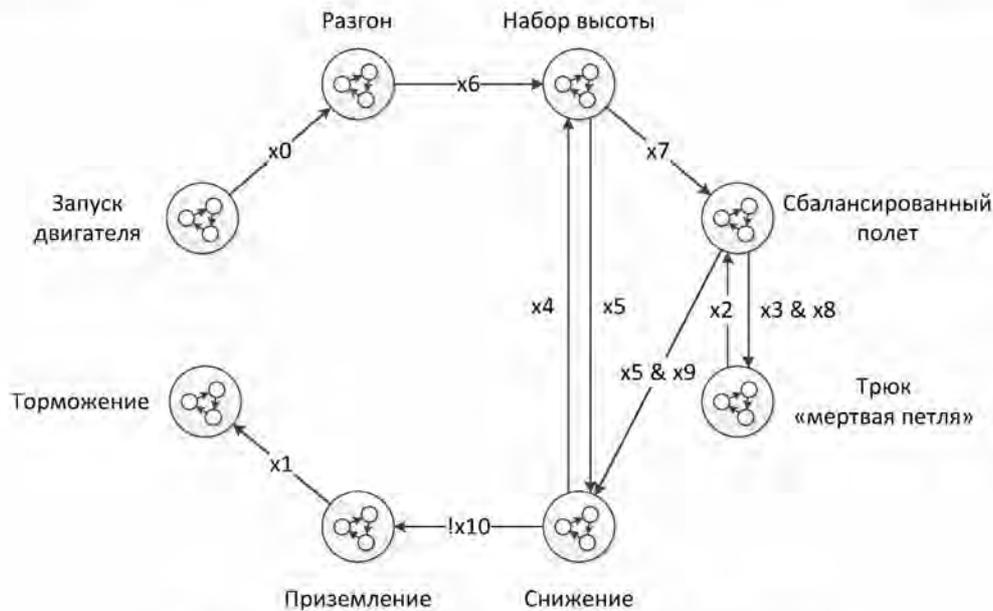


Рис. 2. Построенный автомат верхнего уровня

Оценка эффективности процесса построения

Вычисления производились на одном ядре компьютера с процессором *Intel Core 2 Duo T7250* с тактовой частотой 2 ГГц под управлением операционной системы *Microsoft Windows 7*. Программное средство полностью написано на языке программирования *Java*.

Время построения автомата верхнего уровня с использованием 13 обучающих примеров составляло менее двух минут. Сравнение времени построения управляющих автоматов предложенного метода и других схожих методов представлено в Табл. 1.

Таблица 1

Сравнение времени работы методов

Метод/работа	Построение автоматов нижнего уровня?	На чем основан метод? (обучающие примеры / моделирование)	Время построения
Предлагаемый	Нет	13 обучающих примеров	2 мин
Александров А.В., Казаков С.В., Сергушичев А.А., Царев Ф.Н., Шалыто А.А. [7]	Да	10–15 обучающих примеров	5–20 ч
Поликарпова Н.И., Точилин В.Н., Шалыто А.А. [6]	Нет	Моделирование	2–4 месяца

Анализ пригодности построенного автомата

Видеозапись одного из полетов самолета под управлением построенного автомата доступна по адресу: <http://www.youtube.com/watch?v=dq5AVzqXug0>.

В результате многократного наблюдения за полетом самолета в авиационном симуляторе не было обнаружено странностей в его поведении. В большинстве случаев полет проходил гладко без каких-либо больших отклонений от идеальной траектории на всех его этапах. На основании этого был сделан вывод о пригодности построенного автомата верхнего уровня для решения поставленной экспериментальной задачи.

Области возможного использования результатов

Результаты данной работы могут быть использованы непосредственно для построения системы управления беспилотным самолетом. Для этого необходимо для начала построить

автоматы нижнего уровня для управления в одном режиме. После чего – записать тесты для всего полета.

Данный подход можно обобщить до построения автомата управления любым объектом со сложным поведением. Обобщение построения автоматов нижнего уровня сделано в работе [5]. Таким образом, появляется возможность строить систему управляющих автоматов, которая сможет управлять объектом в нескольких режимах его работы и переключаться между ними, с помощью задания обучающих примеров.

Заключение

В работе предложен метод построения автомата верхнего уровня на основе обучающих примеров и построенных автоматов нижнего уровня для каждого режима.

Благодаря использованию обучающих примеров появилась возможность отказаться от применения моделирования для оценки построенного автомата, которое требует больших вычислительных ресурсов.

Предложенный метод был апробирован на задаче построения системы автоматов для управления беспилотным самолетом во время выполнения всего процесса полета. Результаты экспериментального исследования подтвердили применимость предлагаемого метода.

Публикации

1. По методу построения, описанному в данной работе, был сделан доклад на межвузовской научной конференции по проблемам информатики «СПИСОК-2011», проходившей в СПбГУ в 2011 г.
2. Результаты работы были опубликованы в работе: *Казаков С.В., Царев Ф.Н., Шалыто А.А.* Метод построения конечных автоматов верхнего уровня для управления моделью беспилотного самолета на основе обучающих примеров // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. 2011. № 6. С. 64–68.

Литература

1. *Coates A., Abbeel P., Ng A.Y.* Learning for Control from Multiple Demonstrations // Proceedings of the 25th International Conference on Machine Learning. Helsinki, 2008. P. 144–151.
2. *Гладков Л.А., Курейчик В.В., Курейчик В.М.* Генетические алгоритмы. М., 2006. – 320 с.
3. *Рассел С., Норвиг П.* Искусственный интеллект: современный подход. М., 2006. – 1408 с.
4. *Koza J.R.* Genetic programming: on the programming of computers by means of natural selection. Cambridge, 1992. – 819 p.
5. *Курейчик В.М.* Генетические алгоритмы. Состояние. Проблемы. Перспективы // Известия РАН. Теория и системы управления. 1999. № 1. С. 144–160.
6. *Поликарпова Н.И., Точилин В.Н., Шалыто А.А.* Метод сокращенных таблиц для генерации автоматов с большим числом входных переменных на основе генетического программирования // Известия РАН. Теория и системы управления. 2010. № 2. С. 100–117.
7. *Александров А.В., Казаков С.В., Сергушичев А.А., Царев Ф.Н., Шалыто А.А.* Применение генетического программирования на основе обучающих примеров для генерации конечных автоматов, управляющих объектами со сложным поведением // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. 2011. № 2. С. 3–11.
8. *Царев Ф.Н.* Метод построения управляющих конечных автоматов на основе тестовых примеров с помощью генетического программирования // Информационно-управляющие системы. 2010. № 5. С. 31–36.



Клещенок Максим Андреевич
Факультет оптико-информационных систем и технологий
Кафедра оптико-электронных приборов и систем
E-mail: shadowklesh@gmail.com

РАЗРАБОТКА ОПТИКО-ЭЛЕКТРОННОЙ СИСТЕМЫ КОНТРОЛЯ СООСНОСТИ ПОЛОЖЕНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ ТУРБОАГРЕГАТОВ С ДУПЛЕКСНЫМ ОТРАЖАТЕЛЕМ

М.А. Клещенок

Научный руководитель – ст. научный сотрудник. А.Н. Тимофеев

Введение

В настоящее время оптико-электронные приборы и системы играют все более важную роль при измерениях угловых и линейных смещений, позиционировании и управлении движением рабочими органами в промышленных системах управления технологическими процессами. Это обусловлено тем, что бурное развитие новой более совершенной электронной элементной базы позволяет повысить качество бесконтактного контроля за счет новых принципиальных схем. Требуемое повышение качества (точность, диапазон измерения, уровень надежности) может быть также обеспечено применением новых алгоритмов при цифровой обработке информации, что обуславливает актуальность исследования и разработки соответствующих многофункциональных измерительных преобразователей, приборов и комплексов.

Выверка соосности – одна из самых сложных и ответственных операций, выполняемых в период ремонта турбоагрегата и других механизмов. Центровочные работы во многом определяют длительность и трудоемкость капитальных ремонтов. От качества выполнения этих работ в значительной степени зависит продолжительность пуско-наладки, а также надежность и экономичность отремонтированных турбоагрегатов.

Обзор существующих разработок по данному классу приборов

Проведенный обзор разработок данного класса показал что, применяемые в качестве измерительной базы позиционно-чувствительные датчики на основе фоточувствительного прибора с зарядовой связью (ФПЗС) или комплементарного металлооксидного полупроводника (КМОП) позволяют использовать унифицированные оптические, электронные блоки и стандартные средства программного обеспечения персональных компьютеров. При этом достигается высокая чувствительность и точность в достаточно широком диапазоне измерений. Типовым примером данной схемы является разработка НИУ ИТМО кафедры ОЭПиС «Оптико-электронная система контроля деформаций» (ОЭСКД) [1].

В этой системе на матричном фотоприемнике (МФП) 1 (рис. 1а), находящемся в приемно-передающем блоке 2, через телеобъектив 3 и светофильтр 4 посредством отражателя 8 проецируются изображения двух полупроводниковых излучающих диодов (ПИД). Для обеспечения требуемого диапазона смещений по дистанции в измерительном канале используются две пары ПИД 5 и 6, закрепленных на плоскопараллельной пластинке. Трипельпризма 8 закрепляется в центроискателе 9, который устанавливается на объект контроля (ОК). Особенностью центроискателя является возможность замены микрометрических нутромеров 10 (набор проставок различной длины и микрометрических головок). Это позволяет производить измерения на турбоагрегатах различного диаметра и типа, что является необходимым требованием по унификации системы контроля.

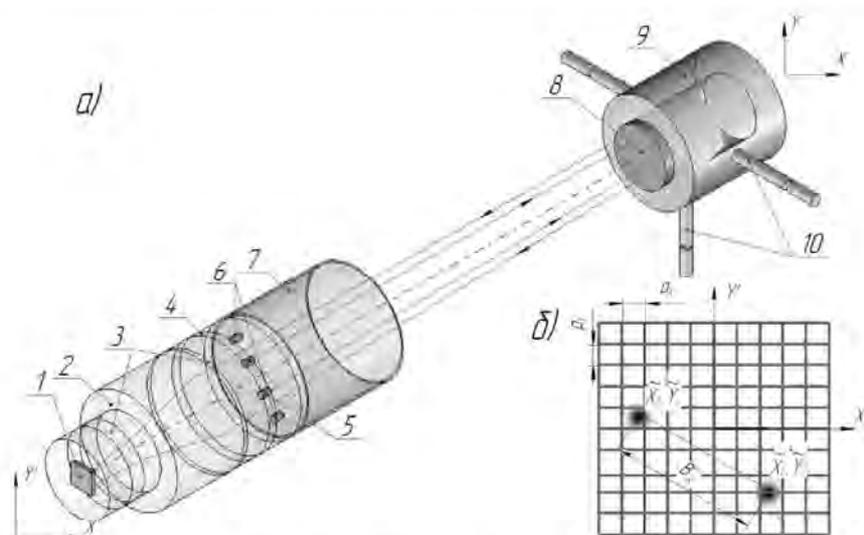


Рис. 1. Принцип работы ОЭСКД

Выбор и обоснование структурной схемы устройства

В работе предлагается модифицировать известную внутрибазовую схему системы [2], путем выноса измерительной базы на контрольный элемент (КЭ). Известно что линейный размер базы B является основным критерием, влияющим на погрешность определения дистанции. В известной схеме [2, 14], где измерительная база располагается непосредственно в системе, размер базы ограничен диаметром объектива и конструктивными требованиями к самой системе. Однако ограничение размера базы, размещенной на КЭ, слабее, что предполагает ее независимое увеличение до оптимальных значений.

В предлагаемой схеме данное преимущество имеет еще больший вес, так как «регистрируемая» база, соответствует двойной в аналогичной схеме, что пояснено на рис. 2 (верхнее изображение – известная схема [2], нижнее – предлагаемое).

Во-вторых, отсутствует необходимость в электропитании и управлении контрольными элементами (КЭ), что освобождает систему от дополнительных проводов.

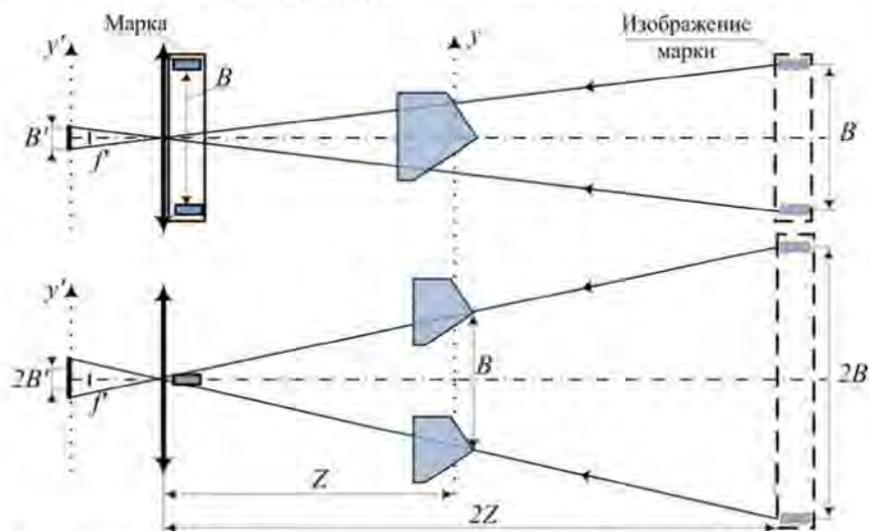


Рис. 2. Сравнительный ход лучей в авторефлексионных схемах

Структурная схема системы

В авторефлексионной схеме регистрация изображения тест-объекта осуществляется с помощью матричного фотоприемника, расположенного в плоскости объектива перпендикулярно к его оси. Это изображение создается объективом после отражения тест-объекта в ОЭ (трипельпризме). При смещении КЭ регистрируется смещение вдвое большее.

Исследуемый канал (рис. 3) и (рис. 4а) строится по внешнебазной авторефлексионной схеме с единым матричным фотоприемным полем анализа. КЭ реализован в виде двух трипельпризм, каждая из которых симметрично смещена с визирной линии системы.

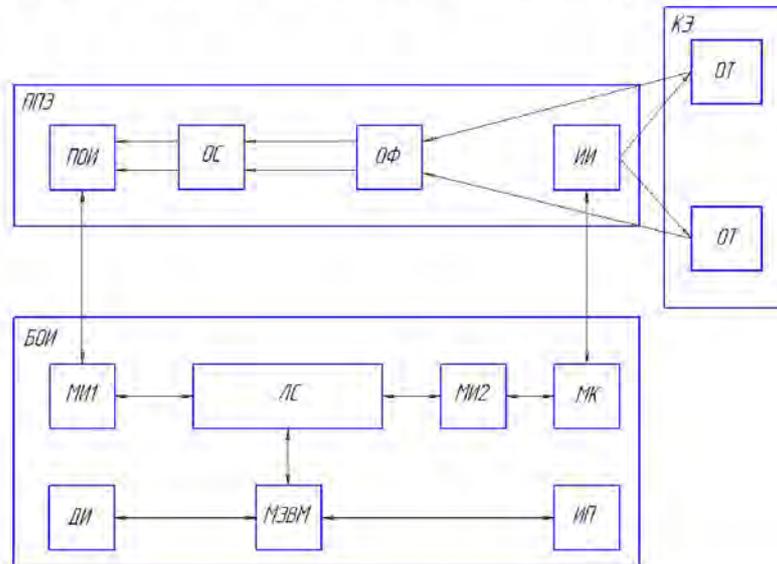


Рис. 4. Структурная схема оптико-электронной системы контроля положения элементов турбоагрегатов (ОЭСКСПЭТ)

Приемно-передающий элемент (ППЭ) 1 (рис. 3) и (рис. 4а) содержит приемник оптического излучения (ПОИ) 2, оптическую систему (ОС) 3, оптический фильтр (ОФ), полупроводниковый излучающий диод (ПИД) 4; контрольный элемент КЭ 5, содержащий два отражателя (ОТ). Полученные данные обрабатываются в блоке обработки информации, включающем в себя два модуля интерфейса (МИ1) и (МИ2), микроконтроллер (МК), линию связи (ЛС), дисплей (ДИ), микро-ЭВМ (МЭВМ) и источник питания (ИП).

Координаты (x_1, y_1) и (x_2, y_2) (рис. 4б) двух изображений ПИД (4), полученные на ПОИ (2) с помощью ОФ и ОС (3), служат основой для вычисления контролируемых смещений КЭ 5 по трем осям ОХ, ОУ, ОZ. Они передаются через МИ1 и ЛС для обработки на микроЭВМ и дальнейший вывод на ДИ. Момент включения и выключения ПИД (4) управляется с МЭВМ посредством ЛС и МИ2 с МК, подключаемого к ПИД (4).

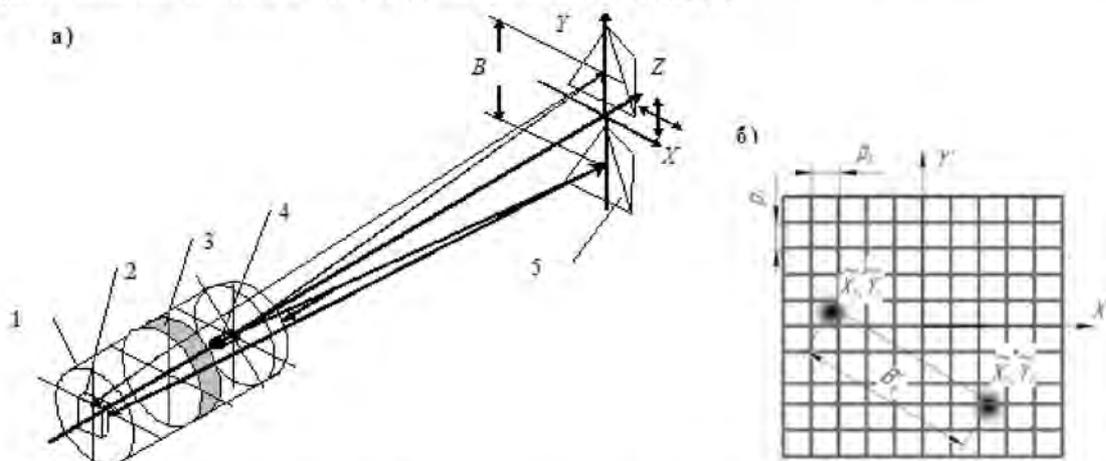


Рис. 5. Принцип действия ОЭСКСПЭТ

К достоинствам такой системы можно отнести:

- большую гибкость за счет выноса измерительной базы за КЭ;
- отсутствие необходимости в электропитании и управлении КЭ;
- возможность модернизации.

Определение параметров и характеристик элементов системы Сравнение приемников оптического излучения (ПЗС и КМОП)

В качестве приемников оптического излучения в современных измерительных системах широкое применение получили два основных типа МФП: ПЗС и КМОП. Из сравнительный анализ широко представлен в литературе [3–8]. В Табл. 1 отражены основные параметры приемников, играющие решающую роль при проектировании систем подобного класса.

Основными преимуществами ПЗС-приемников стоит считать высокий коэффициент заполнения, низкий темновой шум и высокое отношение сигнал/шум, в то время как КМОП-приемники обладают высокой разрешающей способностью с цифровым выходным сигналом и низким энергопотреблением ввиду возможности исполнения «на одном кристалле».

Таблица 1
Сравнение ПЗС и КМОП-приемников

Параметр	ПЗС	КМОП
Разрешающая способность	среднее	высокое
Выходной сигнал	аналоговый	цифровой
Коэффициент заполнения	высокий	средний
Темновой шум	низкий	средний
Отношение сигнал/шум	высокое	среднее
Динамический диапазон	средний	высокий
Скорость считывания	средняя	высокая
Спектральная характеристика	близка к кремнию	
Блуминг и смаз изображения (smear)	есть	меньше выражен
Область считывания	фиксированная	выборочная
Энергопотребление	высокое	низкое

Выбор источника и приемника оптического излучения

Для решения задач пространственного контроля, выполняемых ОЭСКСПЭТ, актуальным стоит считать использование КМОП-матрицы фирмы OmniVision OV5620 (Табл. 3) [9]. Элементы выбранного ПОИ имеют спектральную характеристику чувствительности близкую к области длин волн инфракрасного излучения. Поэтому в качестве источника целесообразно выбрать полупроводниковый инфракрасный излучающий диод (ПИД) АЛ107Б, работающий на длине волны 950 нм. Характеристики выбранного ИОИ приведены в Табл. 2.

Таблица 2
Технические характеристики источника АЛ107Б

Параметры	Значения
Рабочий температурный диапазон	-60..+85 °С
Напряжение пробоя	2 В
Потребляемый ток	100 мА
Мощность потока излучения	10 мВт
Угловое поле 2ω	40°
Диаметр светящейся площадки, Q	2,4 мм
Основные длины волн излучения	940..960 нм
Спектральный диапазон излучения при 50 % от $I_{\max}=100$ мА, $\Delta\lambda$	30 нм

Данный ПИД обладает широким рабочим температурным диапазоном, небольшим потреблением тока, что повышает функциональность его применения.

Таблица 3

Характеристики КМОП-матрицы фирмы OmniVision OV5620

	Array Size	2592 x 1944
Power Supply	Analog	2.6 ~ 3.0V
	Digital	1.3V ± 5%
	I/O	1.7 ~ 3.3V
Power Requirements	Active	75 mA
	Standby	350 µA
Electronics Exposure	1 T _{LINE} to 1/F where F = frame rate	
Shutter	Electronic rolling shutter, snapshot	
Output Format	10-bit digital RGB Raw data	
Lens Size	1/2.5"	
Lens Chief Ray Angle	12.5°	
Input Clock	6 - 27 MHz	
Maximum System Clock	48 MHz	
Maximum Data Rate	48 MHz	
Max Image Transfer Rate	Full	7.5 fps
	1.3Mpixel	30 fps
	D1MD	60 fps
	VGA	60 fps
	QVGA	120 fps
Sensitivity	500 mV/(Lux · sec)	
S/N Ratio	40 dB	
Dynamic Range	54 dB	
Scan Mode	Progressive	
Pixel Size	2.2 µm x 2.2 µm	
Dark Current	3 mV/sec @ 60°C	
Fixed Pattern Noise	< 1% of V _{PEAK-TO-PEAK}	
Image Area	5.808 mm x 4.294 mm	
Package Dimensions	14.22 mm x 14.22 mm	

На рис. 5 представлена относительная спектральная характеристика чувствительности элементов матрицы OV5620.

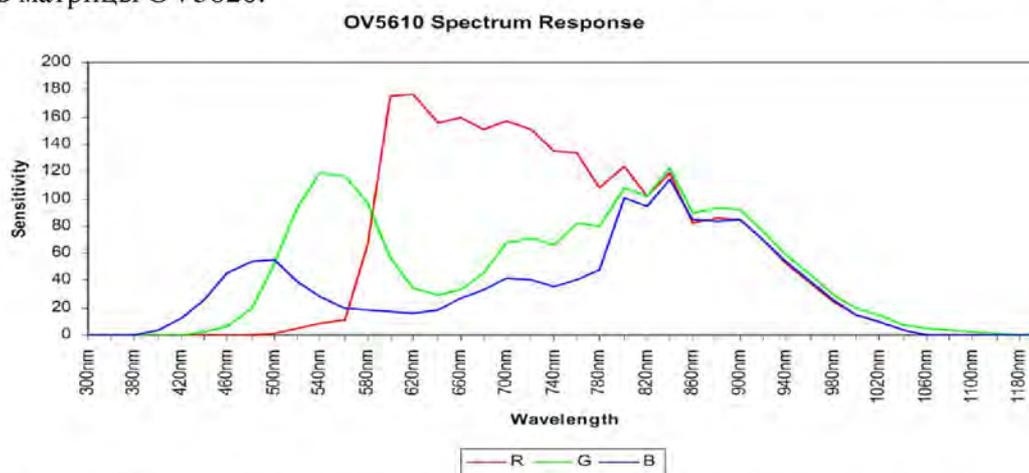


Рис. 5. Относительная спектральная характеристика чувствительности элементов матрицы OV5620

Данная матрица обладает следующими достоинствами:

- имеет высокое разрешение и большой формат;
- все электронные компоненты, а также матрица, цепи усиления и коррекции, АЦП – выполнены на единой плате размером 42x42 мм;
- на выходе платы создается 24-битный цифровой видеосигнал, поступающий по USB-интерфейсу в компьютер;
- питание и управление матрицей осуществляется по USB-интерфейсу (изменение частоты кадров, разрешения, возможность в режиме «окна» считывать информацию с части матрицы);

– в матрице применена технология активных пикселей, что существенно повышает отношение сигнал/шум.

Габаритный расчет

Целью габаритного расчета является определение заднего фокусного расстояния f' оптической системы. Согласно схеме измерений на минимальной дистанции определим f' оптической системы как:

$$f' = \frac{2L_{MIN}}{\vartheta + \frac{1}{\vartheta'}} \quad (1)$$

где ϑ и ϑ' – взаимносопряженные линейные величины в пространстве предметов и изображений соответственно. Максимальному смещению на расстоянии $L_{MIN} = 1$ м соответствует $Y_{MAX} = 5$ мм, на дистанции $2L_{MIN} - 2Y_{MAX}$. Однако стоит учесть, что смещение регистрируется относительно середины базового расстояния между КЭ, ввиду чего в поле зрения ОЭСКСПЭТ должна находиться и половина базового расстояния. Так как измерения проводятся на дистанции $L > 2,5$ м, используется внешний ПИД.

Таким образом, получаем:

$$f' = \frac{2L_{MIN}}{\left(1 + \frac{2Y_{MAX} + \frac{L_{баз}}{2} \cdot \sin 45^\circ}{Y'_{MAX}}\right) \cdot \mu} \quad (2)$$

где $\mu=1,1$ – коэффициент, характеризующий запас в 10 %, необходимый для обеспечения свободной наводки ОЭСКСПЭТ и выполнения измерения при незначительном выходе КЭ за заданные пределы диапазона измерений, $Y_{MAX} = \frac{1944 \cdot 0,002}{2} = 1,9$ мм – половина вертикального размера используемого кадра в ПОИ. Дополнительный множитель – $\sin(45^\circ)$ объясняется тем, что пара КЭ расположена под углом 45° в пространстве. Тогда

$$f' = \frac{2 \cdot 1000}{\left(1 + \frac{2 \cdot 5 + \frac{40}{2} \cdot \sin 45^\circ}{1,9}\right) \cdot 1,1} = 132,65 \approx 125 \text{ мм}, \quad (3)$$

Для удобства возьмем объектив со стандартным фокусным расстоянием 125 мм, что экономически выгодней, а также даст нам некоторую свободу при юстировке.

Габаритно-энергетический расчет

Чтобы определить относительное отверстие объектива, требуется провести габаритно-энергетический расчет.

Требуемая освещенность на ПОИ (E_M), рассчитывается по формуле:

$$E_M = m \cdot E_{нас} \quad (4)$$

где коэффициент $m = 0,9$; $E_{нас}$ – максимально допустимая освещенность матрицы.

Минимальная пороговая освещенность матрицы определяется по формуле:

$$E_{пор} = \frac{i}{S_u} \quad (5)$$

где $E_{пор}$ – минимально допустимая (пороговая) освещенность матрицы; S_u – чувствительность матрицы, равная 500 мВ/(лк·с); i – темновой ток, равный 3 мВ/с [9]. Тогда $E_{пор} = 0,006$ лк.

Далее требуется перевести полученную пороговую освещенность из световых величин в энергетические по формуле [10]:

$$E_{пор, \Gamma} = E_{пор} \frac{\kappa^A}{\kappa_{\Gamma}^A \kappa^{CD} 683} \tag{6}$$

где $\kappa = 683$ лм/Вт – максимальная спектральная световая эффективность монохроматического излучения при длине волны $\lambda = 0,555$ мкм; κ_{Γ}^A – коэффициент использования глазом

источника типа А; κ^{CD} – коэффициент использования приемником излучения ИОИ; κ^A – коэффициент использования приемником излучения источника типа А.

Коэффициенты рассчитываются по следующим формулам [10]:

$$\kappa_{\Gamma}^A = \frac{\int_0^{0,78} m_{e,\lambda}^A(\lambda) V(\lambda) d\lambda}{\int_0^{\infty} m_{e,\lambda}^A(\lambda) d\lambda}, \quad \kappa^A = \frac{\int_0^{\infty} m_{e,\lambda}^A(\lambda) S(\lambda) d\lambda}{\int_0^{\infty} m_{e,\lambda}^A(\lambda) d\lambda}, \quad \kappa^{CD} = \frac{\int_0^{\infty} m_{e,\lambda}^{CD}(\lambda) S(\lambda) d\lambda}{\int_0^{\infty} m_{e,\lambda}^{CD}(\lambda) d\lambda},$$

где $m_{e,\lambda}^A(\lambda)$ – относительное спектральное распределение энергетической светимости источника типа А; $m_{e,\lambda}^{CD}(\lambda)$ – относительное спектральное распределение энергетической светимости ИОИ; $V(\lambda)$ – относительная спектральная световая эффективность монохроматического излучения для дневного зрения; $S(\lambda)$ – относительная спектральная характеристика чувствительности МПОИ.

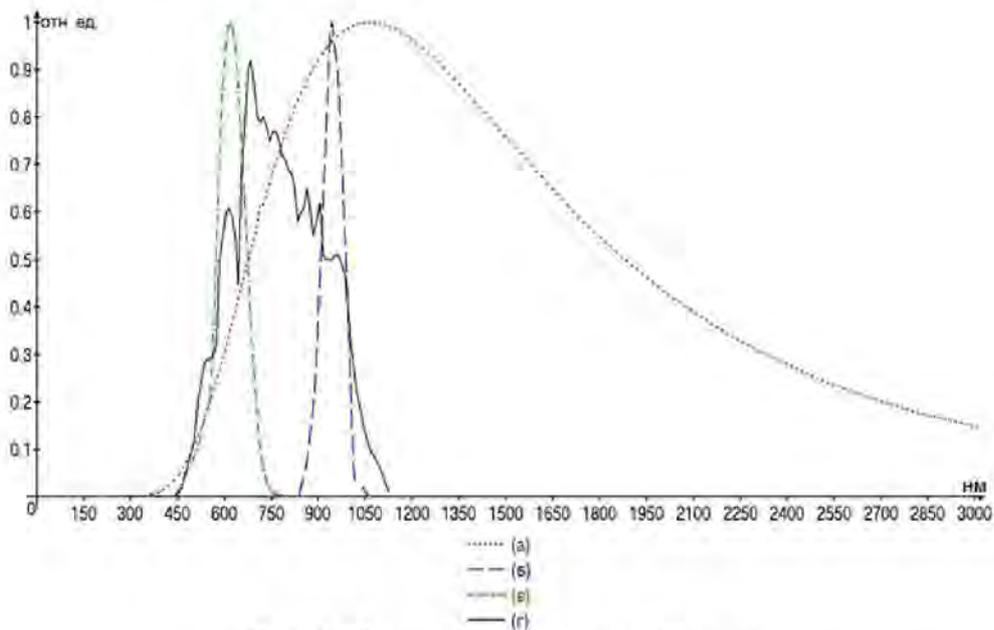


Рис. 6. Спектральные распределения

На рис. 6 представлены графики следующих зависимостей от длины волны: *а* – относительного спектрального распределения энергетической светимости $m_{e\lambda}^I(\lambda)$ паспортного ИИ в диапазоне от 0 до $3\lambda_{max}$; *б* – относительного спектрального распределения энергетической светимости $m_{e\lambda}^{II}(\lambda)$ заданного ИОИ – ПИД АЛ107Б; *в* – относительной спектральной световой эффективности монохроматического излучения для дневного зрения $V(\lambda)$; *г* – относительной спектральной характеристики чувствительности заданного ПОИ $S(\lambda)$.

В результате расчетов и данных (рис. 6) были получены следующие значения:

$$K_{\Gamma}^A = 0,0243; K^{CD} = 0,40; K^A = 0,15.$$

Тогда пороговое значение освещенности:

$$E_{пор} = E_{пор} \frac{K^A}{K_{\Gamma}^A K^{CD} 683} = 0,006 \cdot \frac{0,15}{0,0243 \cdot 0,40 \cdot 683} = 0,0002 \text{ Вт/м}^2$$

Выражение, определяющее соотношение между максимальной и пороговой освещенностями МПОИ, имеет вид:

$$D = 201g \frac{E_{нас}}{E_{пор}}, \quad (7)$$

где D – динамический диапазон матрицы (в нашем случае он равен 54 дБ). На основании формулы (7) была определена величина освещенности насыщения $E_{нас}$, которая составила 0,15 Вт/м².

Освещенность на ПОИ – E_M вычисляется с помощью выражения:

$$E_M = \frac{\Phi_{об}}{Q'_{ист}}, \quad (8)$$

где $\Phi_{об}$ – поток излучения, проходящий через объектив, $Q'_{ист}$ – площадь изображения ИОИ в плоскости матрицы. Считая форму ИОИ круглой, $Q'_{ист}$ можно вычислить по следующему выражению:

$$Q'_{ист} = \frac{Q_{ист} \cdot (f')^2}{a^2}, \quad (9)$$

где $Q_{ист}$ – размер излучающей площадки, равный 9 мм²; f' – фокусное расстояние объектива, равное 125 мм; a – расстояние от реперной метки (РМ) до объектива приемного блока (ПБ).

$$\Phi_{об} = E_{осв} \cdot \frac{D^2 \cdot \pi}{4}, \quad (10)$$

где D – размер апертурной диафрагмы, $E_{осв}$ – освещенность, создаваемая источником в объективе, рассчитываемая по формуле:

$$E_{осв} = L \cdot \frac{Q_{ист}}{a^2}, \quad (11)$$

где $Q_{ист}$ – площадь излучающей площадки ПИД; a – расстояние от РМ до объектива ПБ; L – яркость источника оптического излучения, рассчитываемая следующим образом:

$$L = \frac{P_e}{\pi \cdot Q_{ист} \cdot (\sin \theta)^2}, \quad (12)$$

где P_e – мощность потока излучения ПИД, равная 10 мВт, θ – телесный угол излучения ПИД, составляющий 80°.

На основании формул (8)–(12) получим выражение для вычисления размера апертурной диафрагмы:

$$D' = \sqrt{\frac{4m \cdot E_{нас} \cdot \pi \cdot \sin^2 \theta \cdot Q_{ист} \cdot f'^2}{P_e}}. \quad (13)$$

Подставляя полученные ранее значения: $m = 0,9$, $E_{нас} = 0,15$ Вт/м², $Q_{ист} = 9$ мм², $P_e = 10$ мВт, $f' = 125$ мм, $\theta = 80^\circ$ в выражение (13), получим

$$D' = 4,25 \text{ мм}. \quad (14)$$

Относительное отверстие объектива определяется следующим соотношением:

$$\frac{D'}{f'} = \frac{4,25}{125} \approx \frac{1}{29}. \quad (15)$$

Таким образом, требуется объектив с относительным отверстием не менее чем 1/29.

Разработка элементов конструкции системы

Выбор объектива приемного блока

В качестве объектива приемного блока на основании приведенных выше выбран объектив со следующими характеристиками: $f^* = 125$ мм, $2\omega = 45^\circ$, $D/f^* = 1:6$. Конструктивные характеристики объектива приведены в Табл. 4, а ход лучей – на рис. 7.

Таблица 4

Конструктивные характеристики объектива, рассчитанные в программе «ОПАЛ»

Номер поверхности	Радиус кривизны	Осевое расстояние	Марка стекла
			Воздух
1	-30,54		
		4,97	К8
2	57,87		
		3,22	ТК14
3	0		
		54,59	Воздух
4	-137,69		
		6,16	ТК14
5	137,69		
		1,54	Воздух
6	137,69		
		9,24	ГФ1
7	-115,45		
		1,54	Воздух
8	-137,69		
		10	Ф1
9	-99,67		
			Воздух

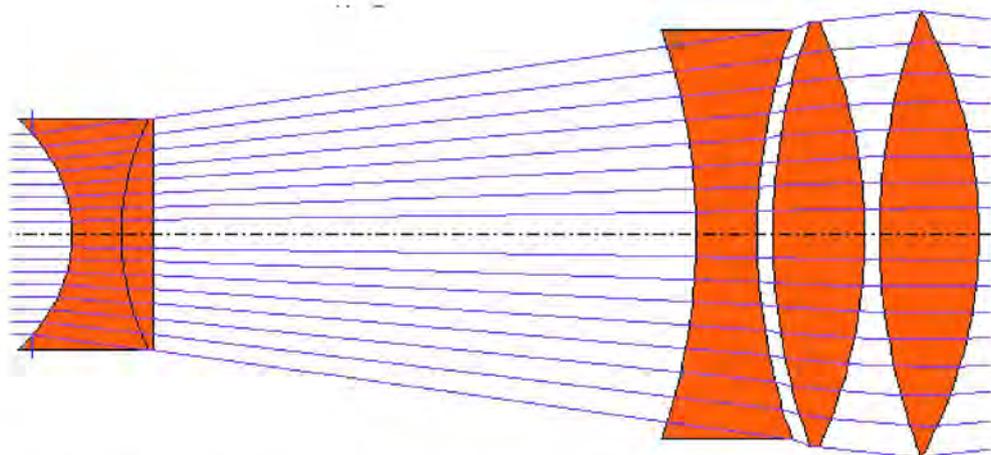


Рис. 7. Ход лучей в объективе на основе расчетов, выполненных в программе «ОПАЛ»

Выбор оптической схемы

На основании габаритно-энергетического расчета выбранного источника и приемника оптического излучения сформирована оптическая схема системы, представленная на рис. 8.

В фокальной плоскости объектива расположена фоточувствительная плоскость ФПЗС, определяющая координаты (x_1', y_1') и (x_2', y_2') (рис. 4б) двух изображений ПИД. Они служат основой для вычисления контролируемых смещений КЭ (8) по трем осям ОХ, ОУ, ОZ. КЭ реализован в виде двух трипелъпризм, каждая из которых симметрично смещена с визирной

линией системы. В общем случае возможно использование большего количества трипельпризм. При смещении КЭ, матрица регистрирует смещение вдвое больше.

Изображение ПИД должно находиться в плоскости ПОИ с точностью $\pm 0,05$ мм.

Диапазон изменения величины L варьируется от 1 до 10 м в зависимости от контролируемого объекта. ПИД 7 закреплен в оптическом светофильтре 6, применяемом для устранения спектра фонового излучения.

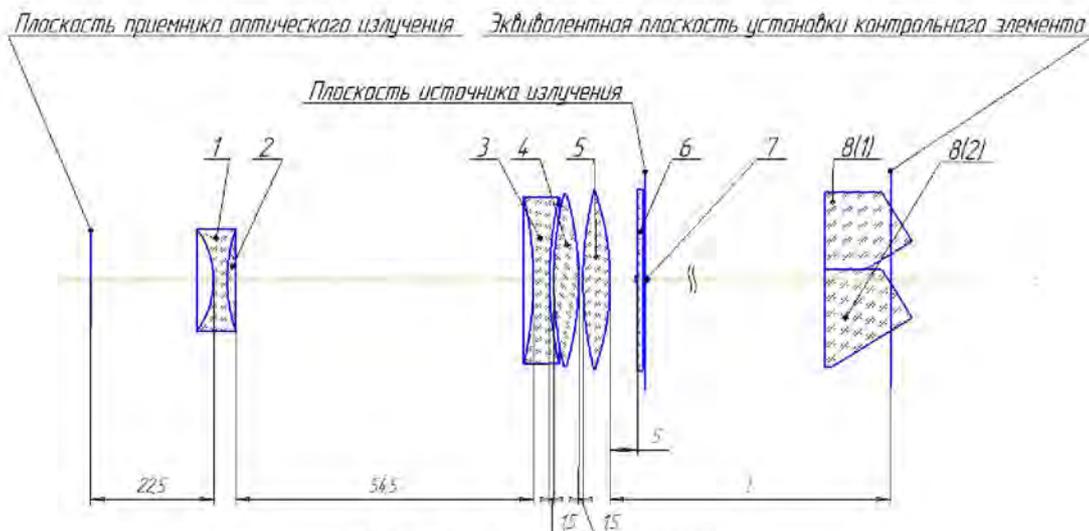


Рис. 8. Оптическая схема

Описание отражательной части системы

Оптико-электронная система контроля соосности положения элементов турбоагрегатов состоит из двух основных частей: отражательной и приемной. Рассмотрим отражательную часть устройства, представленную на рис. 9.

В корпус 4 насыпным методом установлены трипельпризмы 3. Воздушные промежутки выдерживаются при помощи промежуточных колец 6. Крепление осуществляется резьбовым кольцом 1. Трипельпризмы 3 установлены и зафиксированы прижимными кольцами 2. Специальные выемки на корпусе служат для установки отражательной части в центроискатель, находящийся на заданном расстоянии от приемно-передающего блока.

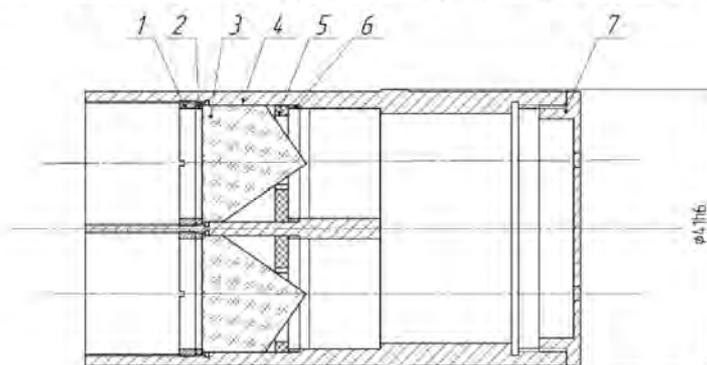


Рис. 9. Конструкция отражателя (разрез)

Исследование погрешностей, влияющих на точность измерений системы

Характер проявления и причины возникновения погрешностей ОЭСКСПЭТ весьма разнообразны. В установившейся к настоящему времени терминологии существуют различные принципы их классификации [11]. Например:

- искривление ВЛ;
- погрешности, связанные с установкой излучателей;
- погрешности базирования отражателя;
- погрешности метода определения координат ПИД;

- погрешности, связанные с эффектом блюминга;
 - погрешности установки центрискателя;
 - погрешности, возникающие при перефокусировке системы.
- Рассчитаем наиболее существенные из них.

Погрешности, возникающие при перефокусировке системы

В ОЭКСКПЭТ фокусировка изображения производится визуально оператором. При многократной фокусировке на различных дистанциях погрешность составляет $\delta h_1 = 0,02$ мм. Подробное исследование проблемы опубликовано в литературе [2, 12].

Погрешности метода определения координат ПИД

Существуют погрешности, вызванные неточностью метода определения энергетического центра изображения тест-объектов. С теоретическим обоснованием данного рода погрешностей можно ознакомиться в работе [13]. При проведении практических расчетов следует пользоваться следующим выражением, обеспечивающим достаточно хорошую сходимость с теоретическими расчетами:

$$\delta h_2 = sm\delta c_1 / f' \quad (16)$$

где $m = 2,2$ мкм – линейный размер пиксела МФУ, δc_1 – погрешность определения энергетического центра, $\delta c_1 = 0,1$ пкс., S – расстояние до контролируемого объекта (1–10 м). На максимальной дистанции 10 м погрешность составляет 0,0176 мм.

Погрешности влияния среды

На заводах и в сборочно-проверочных цехах возможны нелинейные температурные среды, что приводит к некоторой погрешности вызванной рефракцией. На основании материала [13] для ее расчета следует пользоваться формулой:

$$\delta h_3 = -\frac{n-1}{T} \cdot \text{grad}_z T \cdot \frac{S^2}{2}, \quad (17)$$

где $T = 293$ К – нормальная температура, $n = 1,000261$ – показатель преломления среды, $\text{grad}_z T = -0,05$ – градиент температуры и S – расстояние до контролируемого объекта (1–10 м). На максимальной дистанции 10 м погрешность составляет 0,0089 мм (рис. 10).

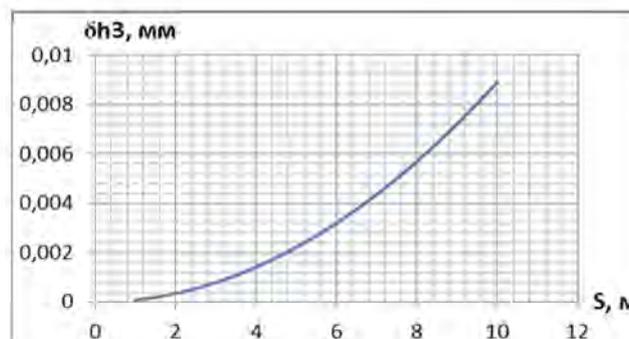


Рис. 10. График зависимости погрешности от температуры в зависимости от расстояния до объекта

Суммарная погрешность

Суммарная погрешность определяется формулой:

$$\delta h = \delta h_1 + \sqrt{\delta h_2^2 + \delta h_3^2} \quad (18)$$

Полученные значения приведены на графике (рис. 11).

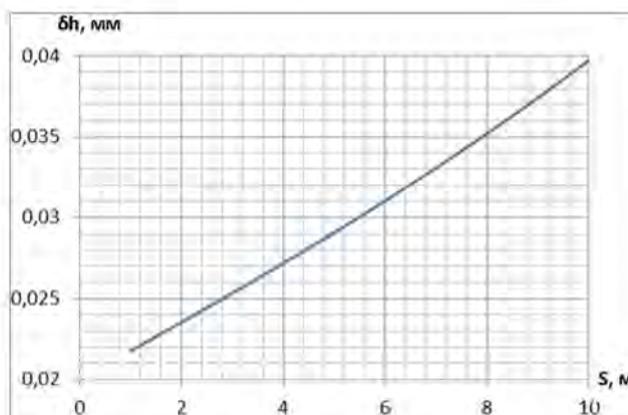


Рис. 11. Зависимость суммарной погрешности от расстояния до объекта

На максимальной дистанции 10 м погрешность составляет 0,0397 мм, что полностью удовлетворяет требованиям технического задания.

Заключение

На основании проведенного обзора существующих разработок подобного класса, предлагается использовать метод построения оптико-электронных измерительных систем, реализованный на основе автоколлимации сходящихся пучков и авторефлексии.

Разработанная обобщенная структурная схема ОЭСКСПЭТ на основе МФП позволяет производить дальнейшее проектирование системы. Предложена структурная схема ОЭСКСПЭТ на базе КМОП-приемника, описаны основные задачи и функции узлов системы, ее составные части.

Проведенное обобщенное сравнение ПОИ на основе ПЗС и КМОП-технологий, говорит о преимуществе КМОП-приемников для построения систем подобного класса.

Результатом габаритно-энергетического расчета являются выбранные источник оптического излучения (ПВД АЛ107Б) и приемник оптического излучения (КМОП OV5620), объектив с относительным отверстием 1/29, оптическая система, уникальностью которой является размещение трипельпризм относительно вертикали под 45°. Описана конструкция отражательного элемента, особенность которой – закрепление трипельпризм прижимными кольцами.

Исследование погрешностей системы показало, что она соответствует требованиям технического задания. Суммарная погрешность составляет 0,0397 мм.

Публикации

1. Анисимов А.Г., Клеценко М.А., Тимофеев А.Н., Исследование схемы внешнебазного оптико-электронного канала для контроля соосности. / IX международная конференция «Прикладная оптика – 2010».
2. Клеценко М.А., Тимофеев А.Н. Разработка оптико-электронной системы контроля соосности с дуплексным отражателем. / XLI научная и учебно-методическая конференция НИУ ИТМО, 2012.
3. Клеценко М.А., Тимофеев А.Н. Разработка оптико-электронной системы контроля соосности с дуплексным отражателем. // X Международная конференция «Прикладная оптика – 2012».
4. Клеценко М.А. Разработка оптико-электронной системы контроля соосности положения элементов турбоагрегатов с дуплексным внешнебазным отражателем. // XLII научная и учебно-методическая конференция НИУ ИТМО, 2013.
5. Клеценко М.А., Тимофеев А.Н. Исследование методических погрешностей работу оптико-электронной системы контроля соосности с дуплексным отражателем. // XLII научная и учебно-методическая конференция НИУ ИТМО, 2013.

Литература

1. Электронный ресурс: <http://oeps.ifmo.ru/lab/sks>.
2. Анисимов А.Г., Горбачев А.А., Краснящих А.В., Пантюшин А.В. Оптико-электронная система контроля соосности элементов турбоагрегатов // Известия высших учебных заведений. Приборостроение. 2008. Т. 51. № 9. С. 22–26.
3. Пресс Ф.П. Фоточувствительные приборы с зарядовой связью. М., 1991. – 270 с.
4. Носов Ю.Р., Шилин В.А. Основы физики приборов с зарядовой связью. М., 1986. – 320 с.
5. Blanc N. CCD versus CMOS – has CCD imaging come to an end? // D. Fritsch, R. Spiller (eds.). Photogrammetric Week'01. Heidelberg, 2001. P. 131–137.
6. Janesick J.R. Dueling detectors – CMOS or CCD? // SPIE's OE Magazine. 2002. Vol. 2(2). P. 30–33.
7. Litwiller D. CCD vs. CMOS: facts and fiction // Photonics Spectra. January 2001. P. 154–158.
8. Kozlowski L.J., Stanley D., Luo J. et al. Theoretical basis and experimental confirmation: why a CMOS imager is superior to a CCD // Proceedings of the SPIE. Vol. 3698. Orlando, Florida, 1999. P. 388–396.
9. Электронный ресурс: http://www.zhopper.narod.ru/mobile/ov5620_full.pdf.
10. Ишанин Г.Г., Панков Э.Д., Челибанов В.П. Приемники излучения. СПб., 2003. – 527 с.
11. Анисимов А.Г., Алев А.М., Пантюшин А.В., Тимофеев А.Н. Основные погрешности контроля соосности с помощью авторефлексионной оптико-электронной системы // Оптический журнал. 2009. Т. 76. № 1. С. 3–8.
12. Соломатин В.А., Якушенков Ю.Г. Сравнение некоторых способов определения координат изображений, осуществляемых с помощью многоэлементных приемников излучения // Известия высших учебных заведений. Приборостроение. 1986. № 9. С. 62–69.
13. Неумывакин Ю.К. Автоматизация геодезических измерений в мелиоративном строительстве. М., 1984. – 126 с.
14. Анисимов А.Г., Клещенок М.А., Тимофеев А.Н. Исследование схемы внешнебазного оптико-электронного канала для контроля соосности // IX Международная конференция «Прикладная оптика – 2010»: Сб. трудов (Т. 1. Ч. 2) (Санкт-Петербург, ГОИ им. С.И. Вавилова, 18–22 октября 2010 г.). СПб., 2010. С. 243–246.



Кузнецова Ольга Валерьевна
Факультет компьютерных технологий и управления
Кафедра проектирования и безопасности компьютерных систем
E-mail: olunchik_1989@mail.ru

РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ ТРЕХМЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЕЧАТНОЙ ПЛАТЫ В САПР ЭЛЕКТРОННЫХ УСТРОЙСТВ

О.В. Кузнецова

Научный руководитель – доцент Е.Б. Романова

В последнее время трехмерное моделирование (3D-моделирование) приобретает все большее значение. В современных системах автоматизированного проектирования (САПР) трехмерная модель электронного устройства играет особую роль. Она дает более полную, по сравнению с двухмерной моделью (2D-модель), картину в отношении конструкции изделия и его работы [1]. К преимуществам можно отнести наглядность, удобство разработки и быстроту модернизации, автоматизированные инженерные расчеты, автоматическое

внесение изменений во все составляющие электронного описания изделия при изменении какого-либо из его компонентов, возможность многократного использования спроектированной детали или узла для создания целого семейства аналогичных объектов, создание прототипа изделия по Rapid Prototyping технологии [2].

На сегодняшний день при проектировании электронных устройств стандартом предусмотрено использование 2D-модели печатной платы (ПП). В этом режиме удобнее выполнять трассировку проводников на плате. Однако размещение электронных компонентов (ЭК) целесообразнее выполнять в 3D-представлении, что позволяет контролировать их положение друг над другом (компонент поверхностного монтажа можно расположить под штыревым, устанавливаемым на печатную плату с зазором), а также проверять возможность установки высоких (как правило, штыревых) ЭК, определив ограничительные (запретные) зоны, зависящие от формы корпуса (секции).

В ходе работы были проведены исследования различных САПР, используемых при 3D-моделировании печатных плат (ПП), проанализированы методы современного моделирования корпусов ЭК, разработаны методы 3D-моделирования ПП, а также созданы 3D-модели основной платы весового дозатора, составлены рекомендации по их применению.

В результате проведенного анализа САПР электронных устройств были выбраны две, в которых производилась разработка 3D-моделей ПП. Из машиностроительных САПР мной выбрана система КОМПАС-3D V12 компании АСКОН, а из САПР печатных плат система Altium Designer-10 компании Altium. Данные системы наиболее популярны в нашей стране, обладают удобным интерфейсом и у меня есть опыт работы с ними.

В этих системах разработаны оригинальные методы трехмерного моделирования ПП, основанные на:

- формировании 3D-модели посредством экструзии,
- использовании готовых 3D-моделей корпусов в формате STEP,
- создании персональной библиотеки 3D-моделей корпусов электронных компонентов.

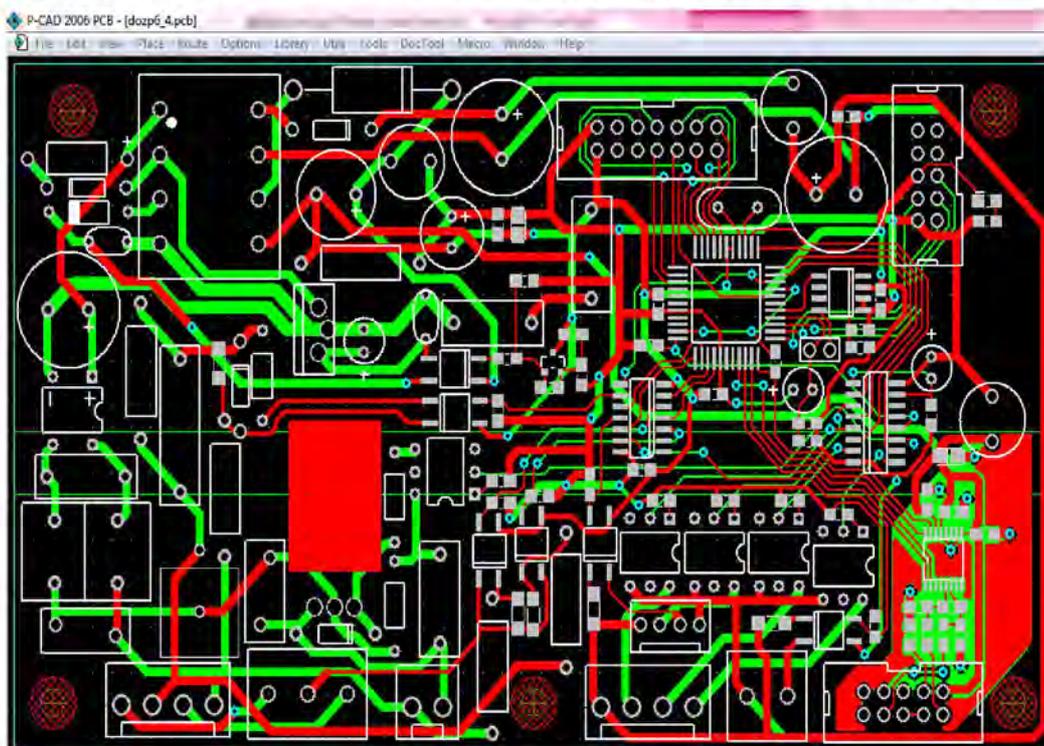


Рис. 1. Топология основной платы весового дозатора, разработанная в системе P-CAD

В качестве образца ПП использована 2D-модель основной платы весового дозатора, разработанная в САПР P-CAD (рис. 1). Весовой дозатор – это устройство, предназначенное для дозировки сыпучих продуктов (используется в пищевой промышленности).

В системе Altium Designer разработаны два метода 3D-моделирования основной платы весового дозатора: посредством экструзии и с использованием готовых 3D-моделей корпусов в формате STEP. Получены упрощенная и реалистичная 3D-модели ПП.

Для построения упрощенной 3D-модели ПП был использован метод формирования габаритных моделей в виде параллелепипедов по заданной высоте компонента. Метод экструзии осуществлялся из посадочного места с помощью команды «Manage 3D Bodies for Components on Board» на примере формирования 3D-модели конденсатора.

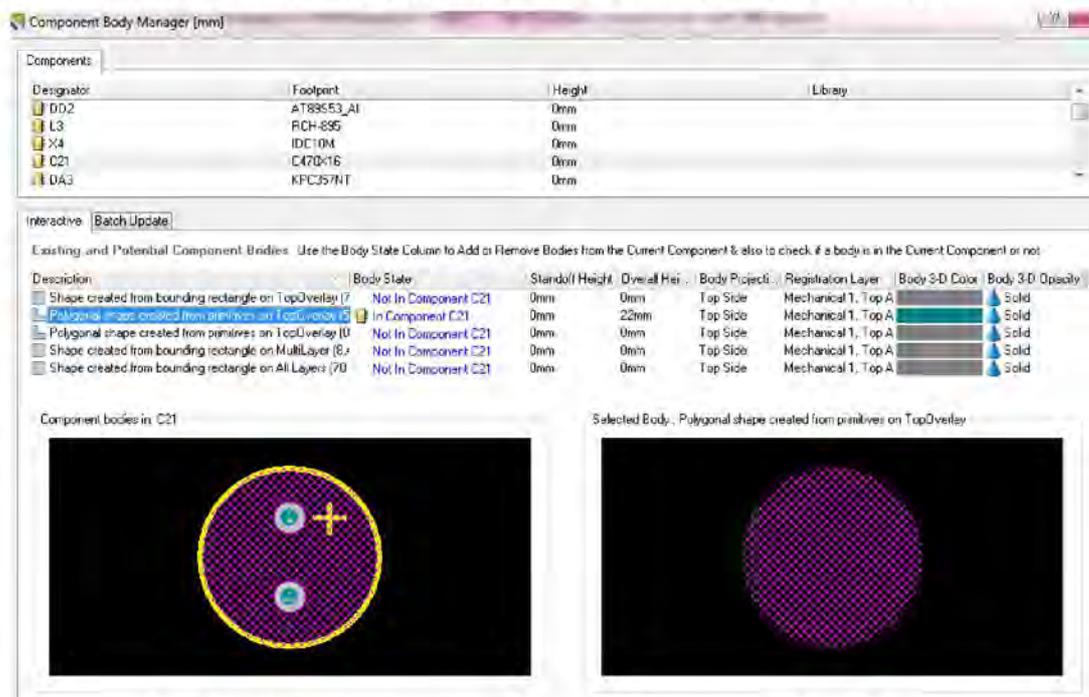


Рис. 2. Диалоговое окно команды «Component Body Manager»

Выбрав команду «Tools/Manage 3D Bodies for Components on Board», в диалоговом окне «Component Body Manager» надо указать компонент и установить необходимые опции (рис. 2). В свойствах «Interactive/Description» выбирается команда «Polygonal shape created from primitives on TopOverlay» (создание многоугольной формы из примитивов в слое TopOverlay). В свойствах «Body State» – команда «In Component C21», а в свойствах «Overall Height» задается высота модели равная 22 мм. В свойствах «Body 3-D Color» выбирается цвет модели. После завершения необходимых настроек диалоговое окно закрывается с помощью кнопки «Close». В итоге получается 3D-модель конденсатора (рис. 3). Для того чтобы ее посмотреть, нужно переключиться в режим 3D-просмотра, нажав на клавиатуре клавишу «3».

Таким же образом создаются 3D-модели всех электронных компонентов ПП с указанием их реальных высот. Трехмерная модель конструкции ПП в системе Altium Designer формируется автоматически по заданной толщине платы (по умолчанию 1,5 мм). В результате получается упрощенная 3D-модель ПП (рис. 4).

Для построения реалистичного изображения 3D-модели ПП был использован метод добавления к посадочному месту готовых 3D-моделей корпусов в формате STEP. Эта возможность рассмотрена на примере добавления 3D-модели корпуса разъема «IDC10M» к посадочному месту на плате. Оно осуществляется в библиотеке посадочных мест (в данном случае «SW_CONN.PCBLib») с помощью панели «PCB Library». В списке компонентов библиотеки выбирается нужный разъем, в данном случае «IDC10M». Нажатием клавиши «3» переходим в режим 3D-просмотра. Приближается компонент командой «View/Fit Document».



Рис. 3. Трехмерная модель конденсатора

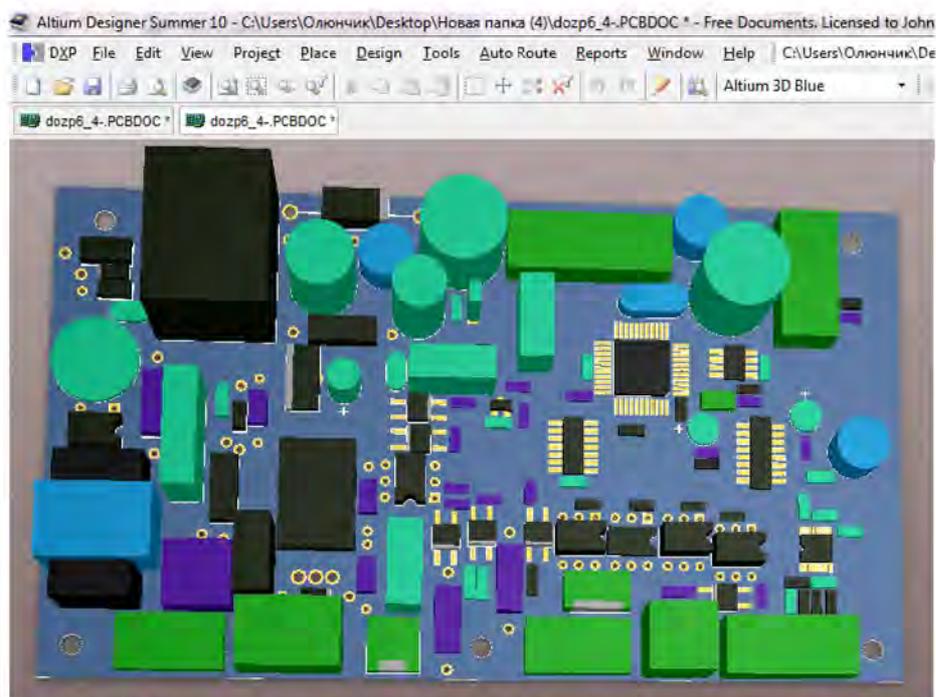


Рис. 4. Упрощенная 3D-модель ПП в системе Altium Designer

Выбрав команду «Place/3D Body» в диалоговом окне «3D Body» устанавливаем следующие опции: в верхней части окна в области «3D Model Type» выбираем «Generic STEP Model». В поле «Properties» в качестве стороны и слоя расположения модели указывается «Top Side и Mechanical 1». В области «Snap Points» необходимо нажать кнопку «Add», тем самым добавив нулевую точку привязки на модели (рис. 5).

Для добавления 3D-модели в формате STEP нужно нажать кнопку «Embed STEP Model» в поле «Generic STEP Model» и выбрать файл модели (в данном случае «IDC-10MS.STEP»), затем закрыть окно кнопкой «Ok». Разместить модель на поле рабочей области и кнопкой «Cancel» выйти из режима.

Двойным щелчком по модели снова вызвать окно свойств «3D Body», указать угол поворота вокруг оси X (Rotation X) 90° , нажать OK. Выполнить команду «Tools/3D Body Placement/Position 3D Body». Мышкой указать модель, после этого курсор станет трехмерным. Подвести его к точке привязки, которая расположена в центре верхней плоскости модели, и щелкнуть левой кнопкой мыши – курсор «прилипнет» к точке привязки. После последовательного нажатия клавиш J, R, курсор переместится в начало координат. Для фиксации расположения модели нужно нажать на клавиатуре ENTER.



Рис. 5. Диалоговое окно команды «3D Body»

В итоге получается 3D-модель, правильно расположенная относительно посадочного места (рис. 6). Командой «File/Save» надо сохранить изменения в библиотеке.

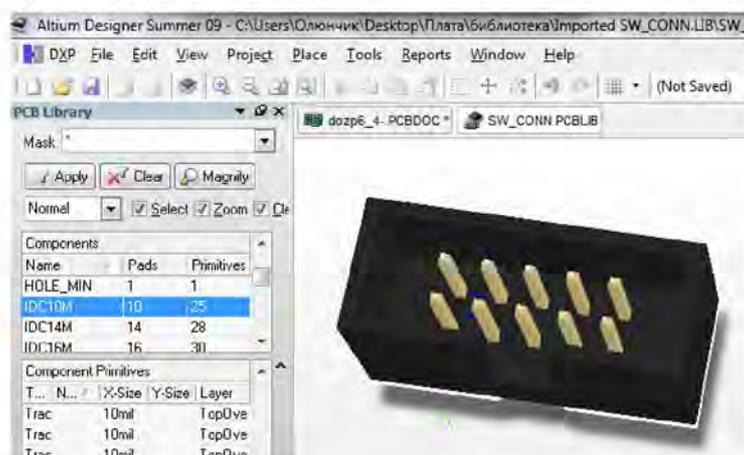


Рис. 6. 3D-модель корпуса разъема

Таким же образом в библиотеке посадочных мест с расширением *.PCBLib выбираются все нужные компоненты и подключаются к посадочным местам 3D-моделей компонентов в формате STEP.

Для того чтобы обновить 3D-модель ПП, нужно на панели «PCB Library» нажать правой кнопкой «мыши» и выбрать команду «Update PCB With All». Теперь все изменения, внесенные

в библиотеке «SW_CONN.PCBLib», отразятся на 3D-модели ПП. 3D-модели резисторов, конденсаторов и микросхем с типами корпусов «SO8, SO14, SO16, TSSOP-16» в формате STEP были найдены мной в интернете, а 3D-модели разъемов – созданы вручную в машиностроительной САПР КОМПАС-3D и сохранены в формате STEP. Итак, добавив все имеющиеся 3D-модели компонентов в формате STEP, сохранив изменения и обновив 3D-модель ПП, получим реалистичную 3D-модель печатной платы (рис. 7).

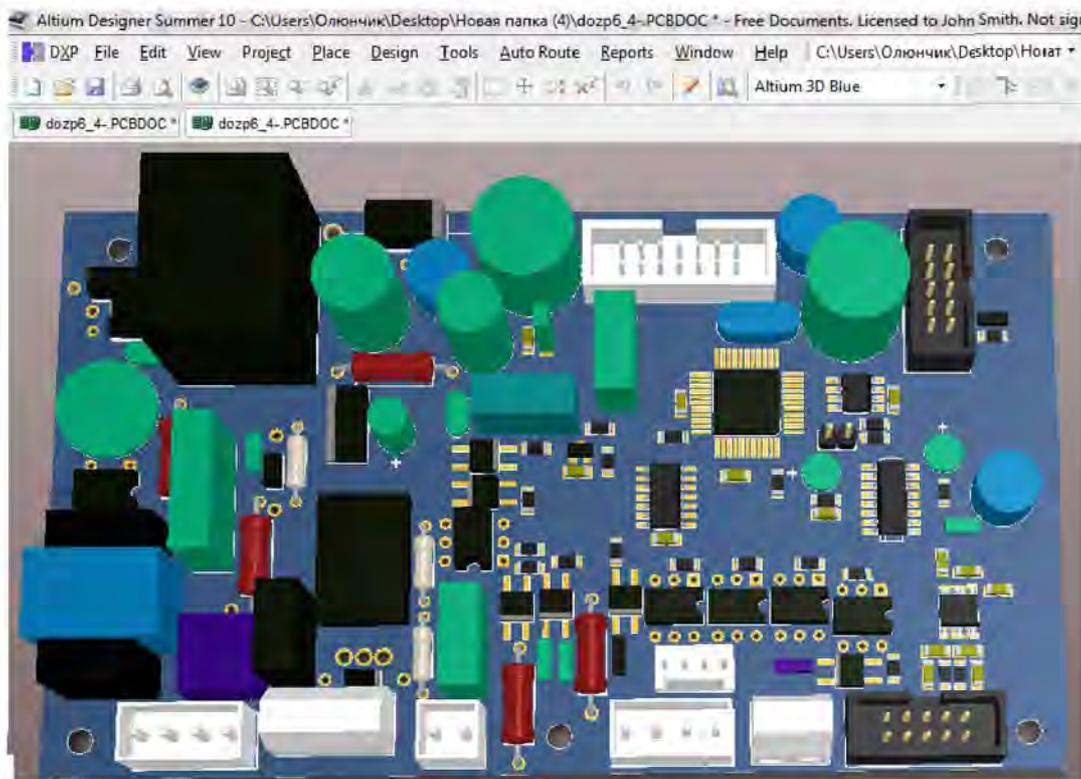


Рис. 7. Реалистичная 3D-модель ПП в системе Altium Designer

В системе КОМПАС-3D разработаны методы 3D-моделирования основной платы весового дозатора посредством экструзии и с использованием готовых 3D-моделей корпусов в формате STEP и персональной библиотеки 3D-моделей корпусов электронных компонентов. Результатом разработки являются две 3D-модели основной платы весового дозатора: упрощенная и более реалистичная.

При построении упрощенной 3D-модели ПП посредством экструзии из посадочного места габаритные модели формируются в виде параллелепипедов по заданной высоте компонента. В системе КОМПАС метод экструзии осуществляется в результате работы с «библиотекой конвертеров данных eCAD-КОМПАС» и непосредственно в процессе работы с «3D-конвертером P-CAD-КОМПАС» («3D-конвертер»), который обеспечивает автоматизированное 3D-моделирование ПП.

Для корректной передачи данных в «3D-конвертер» при создании 3D-модели ПП необходимо обеспечить наличие в библиотеке ЭК значения «Высота компонента» (ComponentHeight). Если параметр высоты отсутствует, то задать его необходимо вручную. Эта операция выполняется в процессе работы «3D-конвертера». В системе КОМПАС-3D необходимо совершить следующую последовательность команд: «Менеджер библиотек» – «Электрика и Электроника» – «Библиотека конвертеров данных в eCAD-КОМПАС» – «3D-конвертеры eCAD-КОМПАС» – «3D-конвертер P-CAD-КОМПАС». В открывшемся диалоговом окне «3D-конвертеры eCAD-КОМПАС» нажать кнопку «Файл» и выбрать brd-файл.

Для получения 3D-модели ПП с расположенными на ней ЭК необходимо сформировать в плате все отверстия (монтажные и для установки компонентов). Для этого опцию «Только монтажные отверстия» отключают. Если в файлах обмена имеются все необходимые данные, система сразу начнет формирование 3D-модели ПП и размещенных на ней элементов.

В данном случае у большинства ЭК отсутствует параметр высоты, поэтому она задается вручную.

Формирование 3D-модели занимает несколько минут в зависимости от производительности компьютера и количества компонентов на плате. Процесс формирования модели контролируется в окне «3D-конвертера». Система может выдать сообщение о том, что в сборке какие-либо элементы находятся за пределами платы. Подобные сообщения не являются следствием ошибок в работе «3D-конвертера», а «наследуются» из промежуточных файлов обмена через IDF-формат. Они являются неизбежным следствием проблем построения трехмерных образов на основе преобразования *.pcb проектов, созданных с помощью операций «плоского» или двумерного представления.

В данном случае система не выдавала никаких сообщений и в результате конвертации получилась упрощенная 3D-модель ПП (рис. 8).

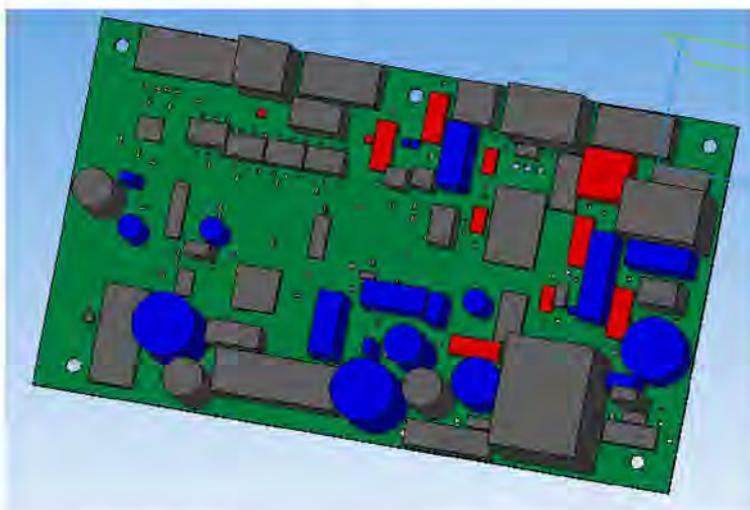


Рис.8. Упрощенная 3D-модель ПП в системе КОМПАС-3D

Для построения реалистичного изображения 3D-модели ПП в системе КОМПАС-3D использовались два метода: готовых 3D-моделей корпусов в формате STEP и персональной библиотеки 3D-моделей корпусов электронных компонентов.

В поисковой сети интернет мной были найдены готовые 3D-модели корпусов некоторых элементов в формате STEP: резисторов, конденсаторов и микросхем с типами корпусов «SO8, SO14, SO16, TSSOP-16». Данные модели были импортированы в систему КОМПАС-3D и сохранены в системе с расширением *.m3d.

Трехмерные модели разъемов, используемых на печатной плате, были созданы непосредственно в системе КОМПАС-3D и использовались для трехмерного моделирования ПП. На рис. 9 показан пример 3D-модели разъема «WF-4» (*.m3d).

Для создания библиотеки 3D-моделей корпусов разъемов в окне «Менеджер библиотек» нужно воспользоваться командой контекстного меню «Добавить описание / библиотеки документов». В появившемся диалоговом окне для открытия библиотеки следует выбрать тип файла: «КОМПАС – Библиотеки моделей» (*.l3d). Затем нужно ввести имя библиотеки, под которым она будет отображаться в «Менеджере библиотек». Если ввести имя файла, которого нет в выбранной папке, то он будет создан.

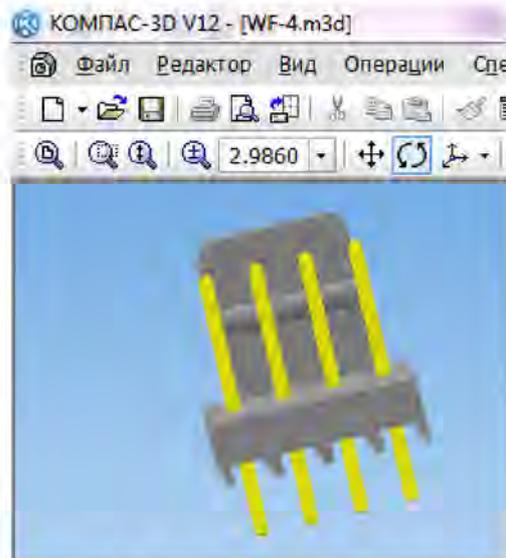


Рис. 9. 3D-модель разъема WF-4

Библиотека «Разъемы» отображается в окне прикладных библиотек, но пока не содержит ни одной модели. Для добавления в нее моделей нужно в контекстном меню выбрать «Добавить модель в библиотеку». Можно добавлять и сборки (*.a3d), и модели (*.m3d). Для последующего использования библиотеки имя модели в ней должно совпадать с именем посадочного места («Pattern») детали, для которой эта модель предназначена.

Для загрузки 3D-моделей в сборку печатной платы в системе КОМПАС-3D существует несколько способов:

- конвертирование данных из формата STEP в формат m3d и добавление на плату моделей в формате m3d посредством замены;
- использование библиотеки *.l3d, в которой находятся модели в формате m3d;
- посредством встроенной утилиты менеджера библиотек системы КОМПАС-3D «Редактирование модели платы».

В данном случае был использован первый метод, так как второй связан с трудоемкостью формирования библиотеки *.l3d, а третий – с предварительной подготовкой моделей в формате m3d (приведение в соответствие параметров 3D-модели с параметрами компонента на плате).

Готовые 3D-модели в формате STEP были открыты в системе КОМПАС-3D и сохранены как модели (m3d). После проведения операции конвертирования часть простых моделей была заменена на готовые 3D-модели с расширением *.m3d. Для замены необходимо в окне «Дерево построения» КОМПАС-3D на нужном элементе кликнуть правой кнопкой мыши. В появившемся контекстном меню выбрать пункт «Свойства компонента» используя «Панель Свойств», выбрать файл-источник. Далее 3D-модель компонента можно заменить на реалистичную. Средствами системы КОМПАС-3D происходит дальнейшая корректировка изображения.

Для получения реалистичного изображения платы, использовался «3D-конвертер» и созданная библиотека «Разъемы». Разъемы были добавлены на плату в ходе процесса конвертации, а другая часть компонентов была заменена на готовые 3D-модели.

После проведения процессов конвертации и замены получилась реалистичная 3D-модель основной платы весового дозатора (рис. 10).

Разработанные методы формирования 3D-модели ПП посредством экструзии в системах Altium Designer и КОМПАС-3D иллюстрируют базовые результаты, приводящие к построению упрощенной 3D-модели ПП.

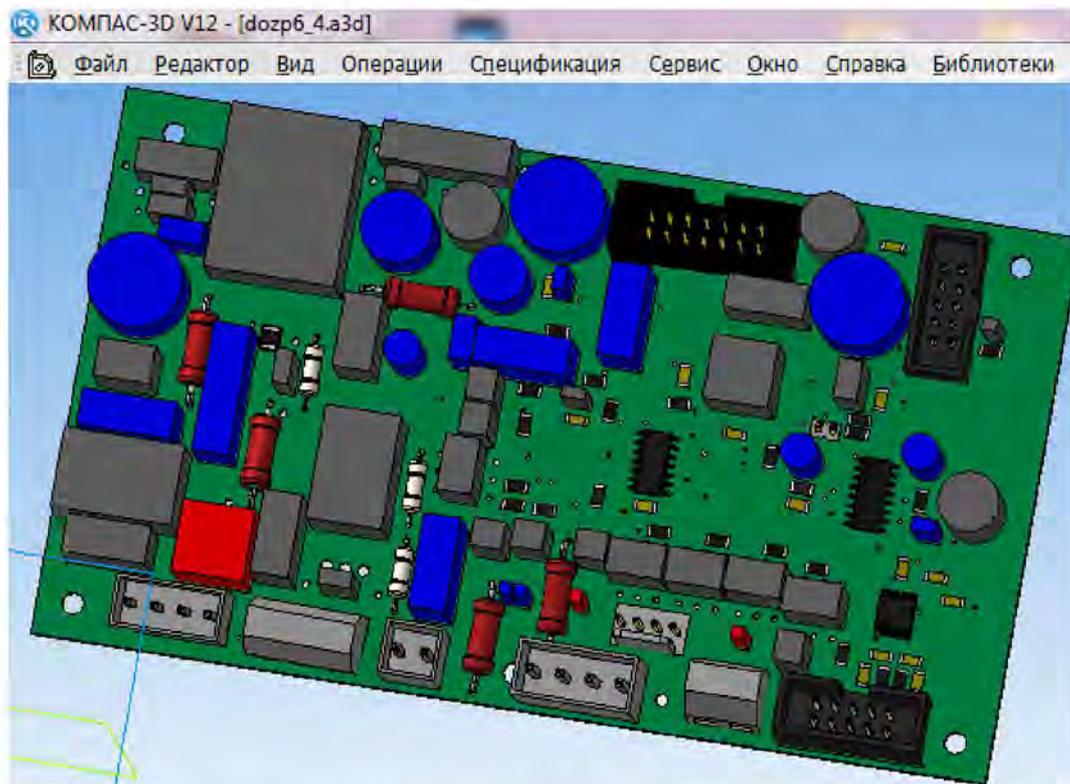


Рис. 10. Реалистичная 3D-модель платы в системе КОМПАС-3D

Реалистичная 3D-модель ПП является результатом применения в системе Altium Designer метода использования готовых 3D-моделей корпусов в формате STEP, а в системе КОМПАС-3D методов использования готовых 3D-моделей корпусов в формате STEP и использования персональной библиотеки 3D-моделей корпусов ЭК в формате *.m3d.

Трехмерные модели платы включают 3D-модели корпусов ЭК, многие из которых представлены упрощенно (в виде параллелепипедов), но их общие очертания и габаритные размеры соблюдаются. Высоты параллелепипедов соответствуют реальным высотам компонентов. Часть же корпусов электронных компонентов имеет реалистичное 3D-представление, что повышает наглядность и общее восприятие 3D-представления платы. Разъемы на плате изображены реалистичными моделями, для того чтобы можно было использовать готовую модель для трехмерного проектирования кабелей и жгутов.

Метод формирования упрощенной 3D-модели ПП в системе Altium Designer занимает больше времени и является менее удобным по сравнению с методом разработки упрощенной 3D-модели ПП в системе КОМПАС-3D. Метод разработки реалистичной 3D-модели ПП в системе Altium Designer является более удобным и быстрым по сравнению с методами разработки реалистичной 3D-модели ПП в системе КОМПАС-3D.

Данные методы формирования 3D-модели ПП в системе КОМПАС-3D могут также использоваться при создании 3D-модели ПП в других MCAD, таких как Solid Works, Pro/Engineer, T-FLEX CAD, AutoCAD. Разработанные методы формирования 3D-модели ПП в системе Altium Designer, могут также использоваться при создании 3D-модели ПП в других EDA-системах, таких как Cadstar-3D и KiCad.

Рекомендации по применению разработанных методов 3D-моделирования в системе Altium Designer:

- в большинстве случаев для формирования 3D-моделей корпусов ЭК посредством экструзии можно применить: «Shape created from bounding rectangle on TopOverlay» – создание формы по границам прямоугольника в слое TopOverlay (для резисторов, диодов и др.).

- в случаях если графика корпуса имеет пазы, фаски, скругления, то для формирования 3D-моделей корпусов ЭК посредством экструзии рекомендуется применить: «Polygonal shape created from primitives on TopOverlay» – создание многоугольной формы из примитивов в слое TopOverlay (для разъемов, микросхем и др.).

– в случаях, если в посадочном месте отсутствует графика корпуса, для формирования 3D-моделей корпусов ЭК посредством экструзии нужно применить: «Shape created from bounding rectangle on All Layers» – создание прямоугольной формы из примитивов во всех слоях (для резисторов, конденсаторов, диодов поверхностного монтажа, и др.).

– для формирования 3D-моделей элементов управления, средств индикации и соединителей рекомендуется использовать модели в формате STEP (для кнопок, переключателей, ЖК-индикаторов, светодиодов, разъемов и др.).

– для формирования трехмерных ограничительных зон, которые необходимы при установке платы в корпус ступенчатой формы, рекомендуется применять метод экструзии (команда «3D Body»).

Рекомендации по применению разработанных методов 3D-моделирования в системе КОМПАС-3D:

– для трехмерного моделирования большинства корпусов электронных компонентов можно применить метод экструзии;

– для трехмерного моделирования элементов управления, средств индикации и соединителей (кнопок, переключателей, ЖК-индикаторов, светодиодов, разъемов и др.) рекомендуется использовать 3D-модели в формате STEP или m3d.

Применение на практике 3D-моделей ПП, полученных в результате использования разработанных методов, позволит значительно увеличить скорость разработки изделий, а также повысить качество электронных устройств (ЭУ). 3D-модель платы можно использовать при виртуальной компоновке ЭУ (для локализации критических мест пересечения или сближения помеченных поверхностей), а также для последующего его анализа.

Полученные 3D-модели ПП разработанными методами 3D-моделирования несут не только реальную пространственно-объемную информацию, но и позволяют производить в среде, используемой САПР всевозможные манипуляции, которые определяются производственной необходимостью и возможностями САПР (различные расчеты и автоматизированную подготовку производства).

Реалистичное изображение 3D-модели ПП можно использовать при монтаже компонентов, то есть для установки их друг под другом (компонент поверхностного монтажа можно расположить под штыревым, устанавливаемым на печатную плату с зазором). При использовании разработанных методов в Altium Designer появляется возможность автоматизированного контроля высоты установки компонентов друг под другом и высоких электронных компонентов в корпус.

Разработанные методы могут быть использованы для формирования 3D-моделей ПП, которые можно применять для 3D-компоновки изделий в машиностроительных САПР и для 3D-моделирования кабелей и жгутов в электротехнических САПР (это необходимо для соединения плат между собой и с внешними устройствами). 3D-модели ПП, полученные с помощью разработанных методов, могут быть использованы при решении таких задач, как сквозное проектирование ЭУ в едином информационном пространстве и при формировании прототипов деталей и конструкций ЭУ [3].

Использование данных методов 3D-моделирования ПП позволит значительно увеличить скорость и качество выполнения и реализации проекта любой продукции. Разработанные методы могут быть использованы для оптимизации различных САПР, используемых при проектировании электронных устройств.

Публикации

1. Кузнецова О.В., Фам Куанг Тунг, Халецкий Р.А. Исследование дефектов системы Si / SiO₂, индуцированных лазерным воздействием // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. 2010. № 5 (69). 131 с.
2. Кузнецова О.В., Романова Е.Б. Метод проектирования трехмерного печатного узла // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. 2011. № 3 (73). С. 105–111.

3. Кузнецова О.В., Романова Е.Б. Трехмерное моделирование печатного узла // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. 2011. № 6 (76). 139 с.
4. Кузнецова О.В., Халецкий Р.А. Исследование методом катодolumинесценции структурных особенностей системы Si / SiO₂ после лазерного облучения // Сб. тезисов VII Всероссийской межвузовской конференции молодых ученых. Информационная безопасность, проектирование, технология элементов и узлов компьютерных систем. СПб., 2010. 193 с.
5. Кузнецова О.В. Анализ методов формирования трехмерной модели печатной платы // Сб. тезисов VIII Всероссийской межвузовской конференции. Информационные технологии. СПб., 2011. 62 с.
6. Кузнецова О.В. Анализ методов формирования трехмерной модели печатной платы в системах T-FLEX и CADSTAR // Сб. трудов молодых ученых, аспирантов и студентов научно-педагогической школы кафедры проектирования и безопасности компьютерных систем «Информационная безопасность, проектирование и технология элементов и узлов компьютерных систем» (СПбГУ ИТМО). Ч. 2. СПб., 2011. С. 16–18.
7. Кузнецова О.В. Разработка 3D-модели печатной платы в системе Altium Designer // Информационная безопасность, проектирование и технология элементов и узлов компьютерных систем: Сб. тезисов докладов I Всероссийского конгресса молодых ученых. Вып. 1. Труды молодых ученых. СПб., 2012. 132 с.
8. Кузнецова О.В., Романова Е.Б. Методика разработки 3D-модели печатной платы в КОМПАС // Альманах научных работ молодых ученых НИУ ИТМО. СПб., 2012. С. 128–131.
9. Кузнецова О.В., Романова Е.Б. Методика трехмерного моделирования печатной платы в Altium Designer // Сб. трудов молодых ученых, аспирантов и студентов научно-педагогической школы кафедры проектирования и безопасности компьютерных систем «Информационная безопасность, проектирование и технология элементов и узлов компьютерных систем» (СПбГУ ИТМО). Ч. 2. СПб., 2012. С. 72–75.
10. Кузнецова О.В. Разработка методов трехмерного моделирования печатной платы в САПР электронных устройств // Сб. XVII Санкт-Петербургской ассамблеи молодых ученых и специалистов: Автоматика, телемеханика. Вычислительная техника. СПб., 2012. 177 с.
11. Кузнецова О.В., Романова Е.Б. Рекомендации по применению методики 3D-моделирования печатной платы в КОМПАС-3D // Современные информационные технологии в науке, образовании и практике: Сб. X Всероссийской научно-практической конференции. Информационные технологии в научно-технических приложениях. Оренбург, 2012. С. 271–273.

Литература

1. Bao Z. Rechnerunterstützte Kollisionsprüfung auf der Basis eines B-rep / Polytree / CSG-Hybridmodells in einem integrierten CAD / CAM-System. Düsseldorf, 2000. – 187 p.
2. Gatchin Y.A., Romanova E.B., Korobeynikova M.A. RP-technologies in designing the radio-electronic equipment // Proceedings of the International Scientific Conferences «Intelligent Systems (IEEE AIS'04)» and «Intelligent CAD's (CAD-2004)»: Scientific publication in 3 volumes. M., 2004. Vol. 3. P. 127–128.
3. Романова Е.Б. Разработка методов повышения эффективности САПР электронных устройств на основе использования трехмерной модели: Автореф. дис. ... канд. техн. наук. СПб., 2009. – 19 с.



Литвин Александр Петрович
Факультет фотоники и оптоинформатики
Кафедра оптической физики и современного естествознания
Лаборатория «Оптика квантовых наноструктур»
E-mail: litvin88@gmail.com

КИНЕТИКА ЗАТУХАНИЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ СУЛЬФИДА СВИНЦА

А.П. Литвин

Научный руководитель – профессор А.В. Баранов

Введение

В последнее десятилетие одним из наиболее перспективных материалов для ближнего ИК-диапазона становятся квантовые точки (КТ) узкозонных полупроводников, такие как КТ сульфида свинца (PbS). КТ PbS характеризуются большим радиусом Бора и диэлектрической проницаемостью, а также малыми и практически равными значениями эффективных масс электронов и дырок, что позволяет исследовать режим сильного квантового конфайнмента уже при относительно больших размерах нанокристалла (НК).

Одной из важнейших на сегодняшний день проблем, связанных с изучением КТ PbS, является отсутствие единой физической модели энергетической релаксации. В дипольном приближении даже с учетом эффекта диэлектрического экранирования времена жизни люминесценции в КТ PbS не должны превышать ~ 250 нс. В то же время рядом исследовательских групп зарегистрированы необычно большие (вплоть до ~ 2 мкс) времена жизни. Для объяснения этого эффекта рассматривалась модель энергетического уровня ниже границы запрещенной зоны [1], на существование которого также указывают эксперименты по наведенному поглощению и значительный стоксов сдвиг [2]. Однако все эти исследования ограничивались изучением свойств отдельных НК диаметром не более нескольких нанометров, пик люминесценции которых находится в диапазоне $0,8\text{--}1,2$ мкм. В первую очередь, это связано с трудностью проведения прецизионных спектральных измерений в ИК-области спектра. Созданное автором проекта в ходе работы экспериментальное оборудование позволяет проводить исследования стационарных и кинетических параметров люминесценции наноструктур в диапазоне $0,7\text{--}2$ мкм, что открывает возможность установить общие закономерности процессов люминесценции в КТ сульфида свинца.

Системы плотно упакованных НК также представляют интерес как с точки зрения изучения фундаментальных процессов взаимодействия между отдельными частицами (например безизлучательного переноса энергии фотовозбуждения [2, 3]), так и с точки зрения использования таких систем для создания нового поколения фотовольтаических устройств [4], приемников и источников оптического излучения. Эффективность использования КТ сульфида свинца при создании подобных устройств была показана в работах [5–7]. Однако для дальнейшего развития этого направления также необходима детальная информация о процессах энергетической релаксации отдельных КТ и процессах их люминесценции.

Уже сегодня КТ находят широкое применение в системах телекоммуникаций (источники и приемники оптического излучения [8–10], усилители [11], насыщающиеся поглотители [12]), биомедицинских исследованиях (фотодинамическая терапия рака [13], визуализация и мониторинг [14], контроль уровня аденозинтрифосфата [15]), FRET-микроскопии [16] и солнечной энергетике [17–22]).

Цель данного проекта – выявление размерных закономерностей динамики электронных возбуждений путем получения и анализа данных о процессах, протекающих в квантовых точках, размеры которых меняются в широких пределах. В рамках сформулированной цели проекта должны быть решены следующие задачи:

- проведены экспериментальные исследования спектральных и кинетических параметров люминесценции КТ сульфида свинца в спектральном диапазоне, достаточном для выявления общих закономерностей процессов, протекающих в них;
- установлены размерные зависимости спектральных и кинетических параметров люминесценции (положение полос люминесценции, стоксов сдвиг, квантовый выход, время жизни люминесценции);
- построена модель, объясняющая наблюдаемые экспериментально результаты;
- проведено моделирование процессов, основанное на предложенной модели;
- сделаны выводы об общих механизмах энергетической релаксации в КТ сульфида свинца.

Экспериментальное исследование спектральных и кинетических параметров люминесценции КТ сульфида свинца

Получение и характеристика образцов

Для изготовления НК диаметром 2,5–9 нм, люминесцирующих в спектральной области 0,8–1,9 мкм, был применен высокотемпературный органометаллический синтез – метод горячей инъекции. Реакция проводилась при температурах 150–300 °С в атмосфере аргона. Характеризация образцов проводилась методами абсорбционной спектроскопии (спектрофотометр Shimadzu UV-3600), рентгенофазового анализа (Ultima IV, Rigaku) и электронной микроскопии (Merlin, Zeiss). Так было получено соответствие между размером НК и энергией фундаментального перехода [23].

Образцы КТ сульфида свинца были приготовлены в виде растворов в тетрахлорметане различной концентрации. Использование других стандартных для КТ PbS растворителей, таких как толуол, хлороформ и гексан, оказалось невозможным в интересующем спектральном диапазоне. Это связано с тем, что указанные растворители имеют собственные полосы поглощения в ближнем ИК-диапазоне, а именно обертона колебательных переходов связей С–Н в области 1300–1700 нм [24]. Это значительно осложняет анализ спектров поглощения и люминесценции или делает его вовсе невозможным.

Комплексы для исследования спектров и кинетики люминесценции

Основная трудность спектрального анализа в ИК-диапазоне связана с недостатком высокочувствительного оборудования. Существующая коммерческая техника для ИК-области не удовлетворяет высоким требованиям, предъявляемым к прецизионным люминесцентным измерениям. Выпускаемые спектрофлуориметры с высокой спектральной селективностью и чувствительностью работают в основном до 1,4 мкм. Это связано с использованием кремниевых или германиевых фотоприемников. Поэтому для проведения спектрофлуориметрических и кинетических измерений были использованы оригинальные экспериментальные комплексы для исследования люминесценции наноструктур в ближнем ИК-диапазоне.

Оригинальный комплекс для получения спектров люминесценции [24] построен на основе монохроматора Acton SP-2558 с апертурой $f/6,5$, фокусным расстоянием 500 мм и дифракционной решеткой 150 штр/мм. При минимальной ширине щелей спектральное разрешение составляет 0,4 нм. Возбуждение осуществляется с помощью гелий-неонового лазера с длиной волны 633 нм и твердотельного лазера с длиной волны 532 нм. В качестве приемника используется InGaAs-фотодиод фирмы Hamamatsu G5852–21 расширенного (0,9–2,1 мкм) спектрального диапазона, охлаждаемый до -20 °С и включенный в фотогальваническом режиме. Наличие в приемном тракте оптического сигнала различных элементов, параметры которых сильно зависят от длины волны (спектральная чувствительность детектора, эффективность дифракции решетки монохроматора, отражение зеркал, пропускание линз и призм) требует проведения прецизионной калибровки спектральной чувствительности измерений.

В ходе выполнения проекта был разработан способ калибровки чувствительности приборов в ближней ИК-области по спектру абсолютно черного тела с ослаблением светового

потока с помощью ультрафиолетового и пурпурного оптических стекол и проведена прецизионная калибровка оригинального спектрофлуориметрического комплекса для работы в ИК-диапазоне [25]. Получена калибровочная кривая, учитывающая поглощение водяными парами и аппаратные особенности установки, позволяющая работать с истинными спектрами люминесценции.

Для изучения кинетики люминесценции использован созданный автором измерительный комплекс, построенный на основе высокоскоростного фотоприемника Femto HCA-S-200M-IN со встроенным InGaAs-фотодиодом, высокочастотного усилителя Stanford Research SR455A (полоса пропускания 350 МГц) и высокочастотного цифрового осциллографа Tektronix TDS-2002 (полоса пропускания 200 МГц, частота дискретизации 2 Гвыб/с) и аппаратное усреднение по 128 измерениям [26]. В качестве источников возбуждающего излучения использованы два импульсных лазера фирмы PicoQuant с волоконным выводом излучения с длиной волны 640 нм (модель LDH-P-C-640B) и 965 нм (LDH-P-965) с длительностью импульсов 100 пс и максимальной энергией в импульсе 0,4 и 0,3 нДж соответственно (интенсивность излучения в импульсе на образце 50 кВт/см²). Для достижения отношения сигнал/шум, необходимого для уверенного измерения времен затухания вплоть до нескольких микросекунд, в среде программирования LabView разработана программа, позволяющая проводить процедуру дополнительного накопления сигналов вплоть до 10⁶ измерений.

Исследование спектров поглощения и люминесценции

Репрезентативная выборка спектров поглощения и люминесценции образцов КТ PbS разного размера представлена на рис. 1. Для всех образцов по спектрам поглощения и люминесценции определялся стоксов сдвиг. Наблюдалась характерная зависимость: значительный стоксов сдвиг вплоть до 350 мэВ для наименьших КТ и незначительный стоксов сдвиг (5–7 мэВ) для самых больших КТ. Значительный стоксов сдвиг наблюдался ранее в работах [2, 27–29], однако не было никакой информации о том, что существует зависимость стоксового сдвига от величины НК.

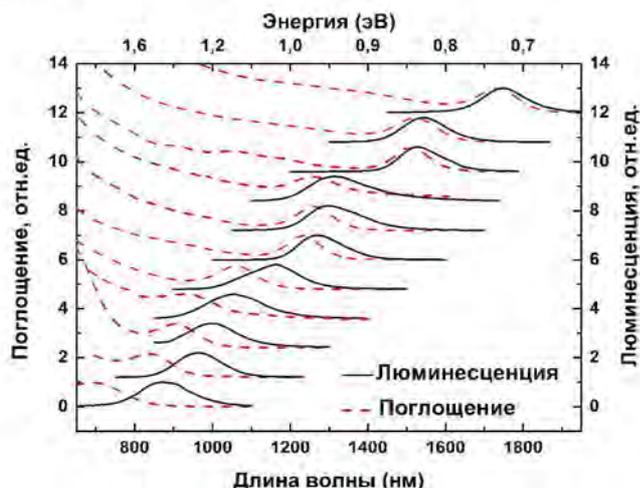


Рис. 1. Спектры поглощения и люминесценции КТ сульфида свинца разного размера

Измерение квантового выхода

Измерение относительного квантового выхода КТ сульфида свинца проводилось путем сравнения с красителем IR-1061 (Aldrich) с известным квантовым выходом (1,7 %). Образцы красителя были приготовлены в виде растворов в дихлорметане. Спектр поглощения и люминесценции красителя представлен на рис. 2.

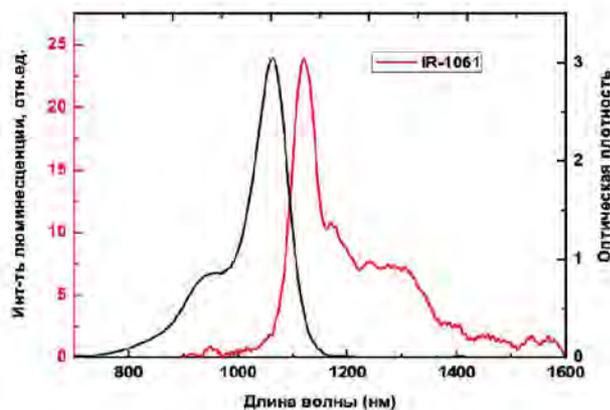


Рис. 2. Спектр поглощения и люминесценции красителя IR-1061

Использовалась стандартная процедура, описанная, например в [30], и заключающаяся в вычислении отношений между площадями под исправленными спектрами люминесценции и значениями оптической плотности на длине волны возбуждения. Для компенсации разности углов, под которыми лучи покидают кювету, были учтены показатели преломления растворителей. Относительный квантовый выход образца будет тогда определяться:

$$\varphi_s = \varphi_r \cdot \frac{S_s \cdot D_r}{D_s \cdot S_r} \cdot \left(\frac{n_s}{n_r} \right)^2,$$

где φ_r – квантовый выход эталона, $S_{r,s}$ – площади под исправленными спектрами люминесценции эталона и образца, $D_{r,s}$ – оптическая плотность эталона и образца на длине волны возбуждения, $n_{r,s}$ – показатель преломления эталона и образца.

Для того чтобы избежать ошибок измерений, вызванных перепоглощением вторичного свечения и нарушением линейности интенсивности возбуждающего излучения на всей толщине кюветы, концентрация растворов подбиралась таким образом, чтобы оптическая плотность образцов на длинах волн возбуждения и в максимуме люминесценции не превышала 0,1. Кроме того, люминесценция собиралась с переднего края кюветы, куда было сфокусировано и возбуждающее излучение. Таким образом сокращался оптический путь лучей в кювете.

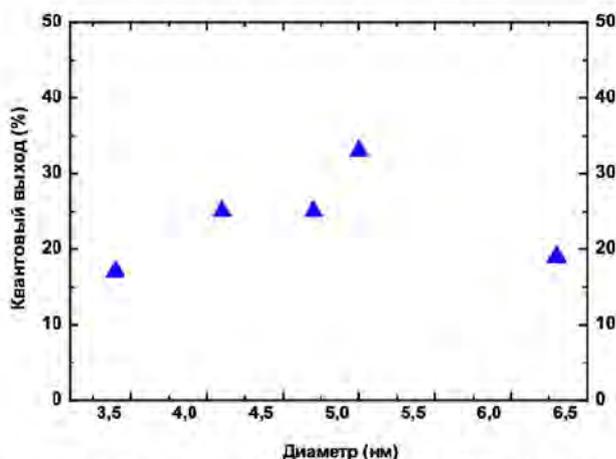


Рис. 3. Квантовый выход образцов КТ PbS разного размера

Квантовый выход был измерен для ряда образцов КТ разного размера. При этом какой-либо зависимости квантового выхода от размера НК не наблюдалось, а среднее значение составляло ~ 25 % (рис. 3).

Измерение времен затухания люминесценции

Для измерения времен затухания люминесценции образцы КТ РbS были приготовлены в виде растворов в тетрахлорметане с концентрацией $\sim 10^{-6}$ М, чтобы обеспечить отсутствие межчастичного взаимодействия. В связи с тем, что средняя плотность мощности возбуждающего излучения не превышала 200 мкВ/см^2 , что необходимо для обеспечения одноэлектронного режима возбуждения, запись кривых затухания осуществлялась на предельной чувствительности измерительного комплекса, а усреднение проводилось по 1 млн. измерений. Записанные кривые затухания люминесценции для нескольких образцов КТ РbS представлены на рис. 4а. Кривые затухания аппроксимировались затем одноэкспоненциальной зависимостью (рис. 4б). Измеренные времена жизни люминесценции КТ сульфида свинца лежат в диапазоне 0,25–2,7 мкс, что на порядок превышает предсказываемые теорией. Кроме того, наблюдается аномальная зависимость уменьшения времени жизни люминесценции с увеличением размера КТ (увеличением длины волны соответствующего энергетического перехода). Такое поведение времен жизни не совпадает с предсказанным на основании золотого правила Ферми для излучения диполя ни количественно, ни качественно.

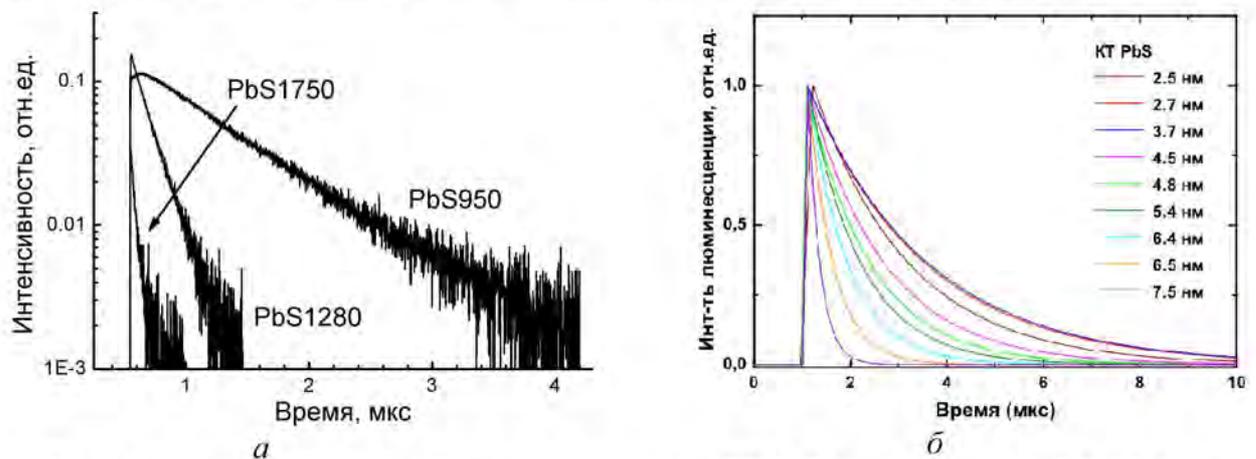


Рис. 4. а – кривые затухания люминесценции для КТ РbS диаметром 7,5, 4,8 и 3,6 нм; б – кривые затухания люминесценции КТ РbS, аппроксимированные одноэкспоненциальным законом

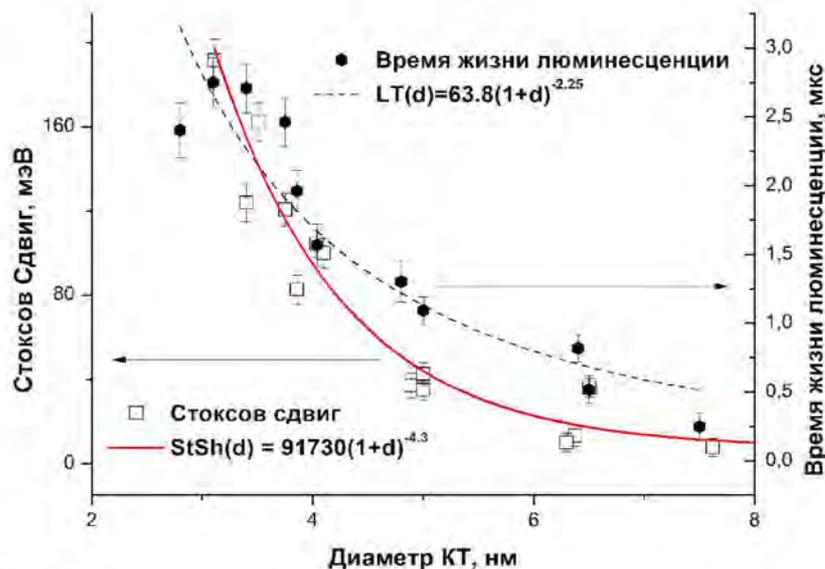


Рис. 5. Размерные зависимости и их аппроксимации для стоксового сдвига (пустые квадраты, сплошная линия соответственно) и времен жизни люминесценции (заполненные круги, прерывистая линия соответственно)

Размерная зависимость времен жизни люминесценции значительно коррелирует с зависимостью для стокового сдвига. Обе зависимости представлены на рис. 5. Большие величины стокового сдвига могут свидетельствовать о том, что люминесценция протекает не с первого возбужденного состояния, а с некоторого энергетического уровня, располагающегося внутри запрещенной зоны (below-gap state). Положение этого уровня находится в зависимости от величины энергии конфайнмента и, следовательно, размера КТ. Большие времена жизни люминесценции могут быть связаны именно с этим энергетическим состоянием, собственное время жизни которого может намного превышать время жизни фундаментального перехода.

Моделирование процессов люминесценции

Моделирование относительных эффективностей люминесценции

Для объяснения наблюдаемых экспериментально результатов предложена модель трехуровневой системы, в которой излучательная рекомбинация может происходить с уровней S_1 и S_2 . Собственное время жизни уровня S_1 предполагается соответствующим расчетному для фундаментального перехода (~ 100 – 250 нс для КТ диаметром 2,5–9 нм), уровня S_2 – на порядок больше, что связано с регистрацией микросекундных времен жизни люминесценции для КТ малого размера. Схематически модель трехуровневой системы изображена на рис. 6 а. Уровни S_1 и S_2 связаны скоростями безызлучательных переходов k_{12} и k_{21} . Поскольку измерения проводились при комнатной температуре, следует учитывать переходы как с понижением, так и с повышением энергии. Другими словами, при малой величине энергетического зазора может иметь место обратное термическое возбуждение электрона на уровень S_1 . Так, скорость k_{21} может быть выражена в виде:

$$k_{21} = A \cdot \exp\left(-\frac{dE}{kT}\right),$$

где A – константа; dE – величина энергетического зазора; k – постоянная Больцмана; T – температура в Кельвинах. Можно получить выражение, описывающее отношение эффективностей люминесценции с каждого из уровней S_1 и S_2 :

$$\frac{\phi_{S1}}{\phi_{S2}} = \frac{k_{10}}{k_{12}} + A \cdot \exp\left(-\frac{dE}{kT}\right) \cdot \frac{k_{10} \cdot (2k_{12} + k_{10})}{k_{20} \cdot k_{12} \cdot (k_{10} + k_{12})},$$

где $\phi_{S1,2}$ – эффективность люминесценции с уровней S_1 и S_2 соответственно; $k_{10,20}$ – скорости излучательной рекомбинации с уровней S_1 и S_2 соответственно. Здесь ϕ_{S1} включает в себя как «собственную» люминесценцию, так и люминесценцию, связанную с термической активацией электронов с уровня S_2 . При этом под эффективностью люминесценции понимается величина

$\phi = \frac{\tau}{\tau_r}$, где τ – время жизни; τ_r – радиационное время жизни данного энергетического

уровня, то есть фактически квантовый выход с данного энергетического состояния. Эффективность этих процессов во многом зависит от скоростей безызлучательных переходов k_{12} и k_{21} , при расчете положено $A = k_{12} = 10^{10} \text{ c}^{-1}$. На основании экспериментальных данных о стоковом сдвиге можно сделать предположение об относительном положении энергетических уровней S_1 и S_2 и построить зависимость эффективностей люминесценции с них от размера НК (рис. 6б).

Как видно на рис. 6, для КТ малого размера будет превалировать люминесценция с нижнего энергетического состояния, для КТ большого размера – с верхнего. С учетом того, что время жизни энергетического уровня S_2 на порядок больше, нежели время жизни основного уровня S_1 , полученный результат согласуется с наблюдаемой экспериментально размерной зависимостью времен жизни люминесценции КТ сульфида свинца. Наличие двух каналов люминесценции должно проявляться в спектрах люминесценции в виде уширения и асимметрии полос люминесценции. Однако, как видно на рис. 6б, отношения

эффективностей имеют очень резкие зависимости, поэтому заметный вклад обе компоненты могут вносить лишь для КТ среднего размера, что и наблюдается в эксперименте (рис. 7).

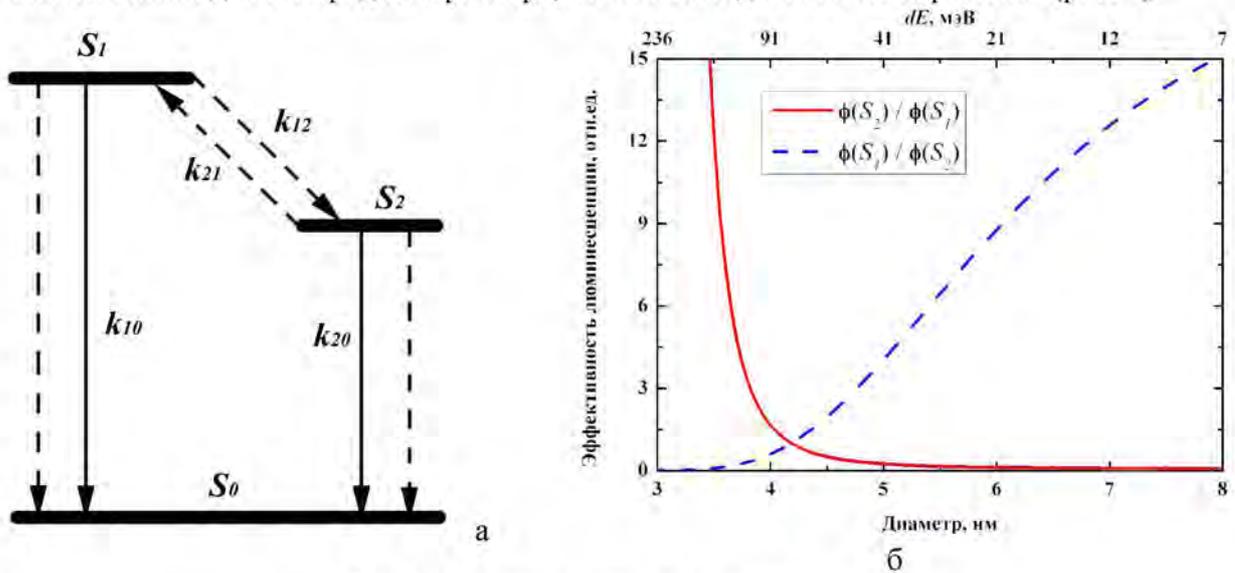


Рис. 6. а – трехуровневая система;
б – отношения эффективностей люминесценции с уровнями S_1 и S_2

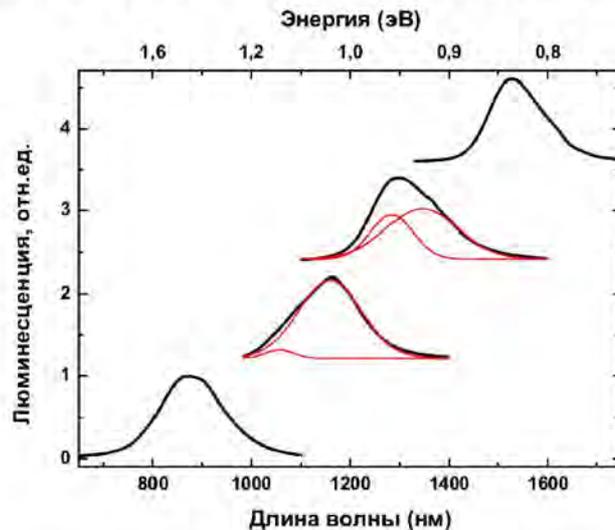


Рис. 7. Аппроксимация спектров люминесценции КТ PbS диаметром 2,5–6,3 нм суперпозицией двух гауссовых функций

Моделирование кинетики люминесценции

Измерение времен затухания люминесценции проводилось при комнатной температуре и с использованием нерезонансного возбуждения, поэтому возможно описание кинетических процессов без применения строгого квантового формализма. Кроме того, многократно наблюдается ансамбль идентичных (за исключением дисперсии по размерам) КТ. По этой причине возможно введение населенностей состояния и составление скоростных уравнений [31]. Уравнения для населенностей в данной системе могут быть представлены в виде:

$$\begin{cases} \frac{dN_1}{dt} = -k_1 \cdot N_1 + k_{21} \cdot N_2 \\ \frac{dN_2}{dt} = k_{12} \cdot N_1 - k_2 \cdot N_2 \end{cases},$$

причем $k_1 = k_{10} + k_{12}$, $k_2 = k_{20} + k_{21}$.

Система имеет точное решение:

$$N_{1,2}(t) = N_{1,2}(t_0) \cdot \exp(s_{1,2}t) + N_{2,1}(t_0) \frac{k_2 - k_1 \pm \sqrt{(k_1 - k_2)^2 + 4k_{12}k_{21}}}{2k_{12}} \cdot \exp(s_{2,1}t),$$

где $N_{1,2}(t_0)$ – населенность энергетических уровней S_1 и S_2 в начальный момент времени.

Видно, что в общем случае для каждого уровня наблюдается биэкспоненциальная зависимость распада населенности, однако скорости совпадают, и закон затухания фотолюминесценции может быть представлен как:

$$PL(t) = A_1 \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right) + A_2 \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau_2}\right),$$

$$\tau_{1,2} = 2 \cdot \left[k_1 + k_2 \pm \sqrt{(k_1 - k_2)^2 + 4k_{12}k_{21}} \right]^{-1}.$$

Для того чтобы выразить собственные времена жизни для уровней S_1 и S_2 , используем золотое правило Ферми и учтем также эффект диэлектрического экранирования:

$$k_{10} = \tau_0(S_1)^{-1} = \frac{2e^2 \sqrt{\epsilon_1} \omega}{3mc^3 \hbar} \cdot \frac{2P^2}{m} \cdot \left(\frac{3\epsilon_1}{\epsilon_2 + 2\epsilon_1} \right)^{-2},$$

$$k_{20} = \tau_0(S_2)^{-1} = C \cdot \frac{2e^2 \sqrt{\epsilon_1} \frac{E - dE}{\hbar}}{3mc^3 \hbar} \cdot \frac{2P^2}{m} \cdot \left(\frac{3\epsilon_1}{\epsilon_2 + 2\epsilon_1} \right)^{-2},$$

где e и m – заряд и масса электрона; ϵ_1 и ϵ_2 – диэлектрические проницаемости PbS (17,2) и CsCl₄ (2,2); ω – частота фундаментального перехода; c – скорость света; \hbar – постоянная Планка;

$\frac{E - dE}{\hbar}$ соответствует частоте перехода с уровня S_2 ; параметр $\frac{2P^2}{m}$ равен 3 эВ для PbS; C –

константа. Время компоненты τ_1 оказывается малым и может быть не зарегистрировано в эксперименте. С другой стороны, при моделировании скорость интеркомбинационного перехода k_{12} составляла 10^{10} с^{-1} . При ее уменьшении компонента времени τ_1 значительно растет (однако все же не превышает нескольких наносекунд), в то время как компонента τ_2 практически не зависит от k_{12} и меняется в широких пределах. На рис. 8а приведено сравнение размерных зависимостей компонент времени жизни τ_2 : черная кривая получена при учете золотого правила Ферми, эффекта диэлектрического экранирования, а также кинетических процессов в трехуровневой системе; красная кривая – только при учете золотого правила и эффекта экранирования. Видно, что при слишком большом энергетическом зазоре между уровнями (КТ наименьшего диаметра) трансфер электронов обратно на уровень S_1 с уровня S_2 практически не происходит, поэтому время жизни τ_2 определяется в основном естественной зависимостью от частоты перехода (кривые совпадают). Затем при сокращении энергетического зазора термическая активация носителей становится более вероятной, и появляется дополнительный канал для снижения населенности уровня S_2 , что приводит к перепутыванию двух этих энергетических состояний, биэкспоненциальному распаду и плавному уменьшению времени жизни τ_2 . Сравнение экспериментальных данных и рассчитанной компоненты времени τ_2 представлено на рис. 8б.

Видно, что моделирование при выбранных параметрах согласуется и с экспериментальными данными, и с результатами других исследовательских групп [15, 27, 32]. Кроме того, наблюдаемая в эксперименте аномальная размерная зависимость времен жизни люминесценции может быть связана с процессами трансфера электронов между уровнями при комнатной температуре. Рассчитанные сверхкороткие времена жизни для компоненты τ_1 в КТ PbS также не противоречат литературным данным: наносекундные и субнаносекундные времена жизни люминесценции в КТ сульфид свинца наблюдались в работе [33].

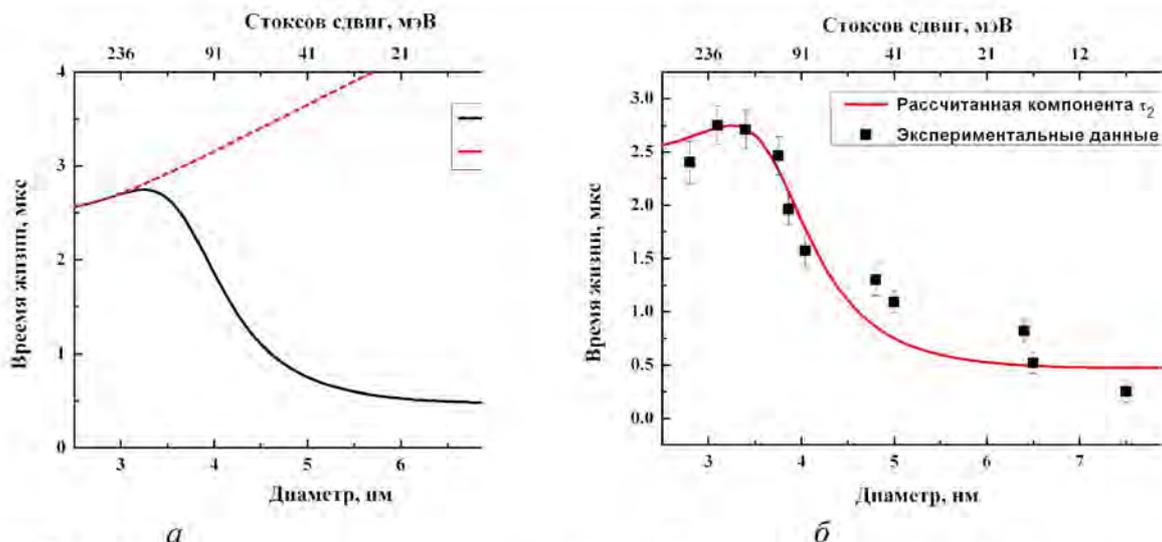


Рис. 8. а – сравнение размерных зависимостей компонент времени жизни τ_2 ; б – сравнение экспериментальных данных и рассчитанной медленной компоненты

Поверхностные состояния Шокли

Из теории молекулярной спектроскопии известно, что присутствие атомов тяжелых металлов, например свинца, может частично снимать запрет по спину для процесса интеркомбинационной конверсии и повышать эффективность процесса фосфоресценции [34]. Поэтому в органических средах с атомами свинца может реализовываться описанная выше ситуация. Возможным объяснением природы наблюдаемой трехуровневой системы в КТ является существование поверхностных состояний и излучательная рекомбинация с их участием. Неспаренные химические связи атомов, находящихся на поверхности, могут приводить к возникновению поверхностных состояний Шокли. Их концентрация может быть сопоставима по величине с концентрацией поверхностных атомов [35]. В КТ доля атомов, связанных с поверхностью, становится существенной и играет все большую роль с уменьшением размера КТ.

Поверхностные состояния Шокли могут образовывать дискретные или квазинепрерывные энергетические уровни в запрещенной зоне. При наличии примесей, дефектов или поверхностных состояний, составляющих энергетические уровни в запрещенной зоне, может наблюдаться рекомбинация Шокли-Рида-Холла. Частота, с которой носители захватываются энергетическим уровнем в запрещенной зоне, зависит от удаления этого уровня от краев зон. Поэтому, если уровень находится поблизости от края зоны проводимости, рекомбинация менее вероятна, так как электрон с большей вероятностью возвратится в зону проводимости, чем рекомбинирует с дыркой, которой нужно подняться на этот же уровень.

Таким образом, наиболее вероятна рекомбинация через уровни, находящиеся в центре запрещенной зоны. Это согласуется с расчетами эффективностей люминесценции и экспериментальными данными. На возможность существования поверхностных состояний в КТ сульфида свинца и связанной с ними излучательной рекомбинации указывается в ряде работ [29, 36, 37]. Поэтому захват одного из носителей заряда поверхностной ловушкой может являться причиной наблюдаемых экспериментально зависимостей времен жизни люминесценции и стоксового сдвига.

Заключение

В работе впервые исследованы размерные зависимости спектральных и кинетических параметров люминесценции КТ сульфида свинца в широком спектральном диапазоне. Методами люминесцентной и абсорбционной спектроскопии определена зависимость величины стоксового сдвига от размера НК и относительный квантовый выход. Наблюдаемая зависимость может свидетельствовать о существовании энергетического уровня, располагающегося внутри запрещенной зоны. Получена размерная зависимость времен жизни

люминесценции КТ сульфида свинца с оптическими переходами в диапазоне 0,9–2 мкм; зарегистрированные времена жизни лежат в диапазоне 0,25–2,7 мкс и намного превышают предсказанные теорией. Кроме того, наблюдается увеличение времени жизни люминесценции с увеличением частоты соответствующего энергетического перехода.

Для объяснения экспериментальных данных о временах затухания люминесценции рассмотрена модель трехуровневой системы. На основе теоретических представлений о процессе замедленной флуоресценции и формализме кинетических уравнений для населенностей уровней и экспериментальных данных о размерных зависимостях энергетических переходов, времен жизни и стоксового сдвига проведено моделирование кинетики и относительных эффективностей люминесценции КТ сульфида свинца в широком диапазоне размеров НК.

Моделирование показало, что при существовании энергетического уровня внутри запрещенной зоны излучательная релаксация с него будет доминирующей для КТ малого размера. Показано, что существование этого энергетического уровня и трансфера носителей заряда между уровнями как с понижением, так и повышением энергии, что возможно при комнатной и более высоких температурах, приводит к тому, что закон затухания люминесценции должен описываться суммой двух экспонент с соответствующими коэффициентами. При этом одна компонента времени лежит в субнаносекундном диапазоне, а вторая может меняться в широких пределах и хорошо описывает экспериментальные и литературные данные.

Сделано предположение, что существование данного энергетического уровня может быть связано с наличием поверхностных состояний Шокли, которые приводят к захвату одного из носителей заряда в поверхностную ловушку. Результаты численного моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными.

В результате работы над проектом впервые показано существование эффективно люминесцирующего энергетического уровня внутри запрещенной зоны в КТ халькогенидов свинца, что вносит существенный вклад в понимание физических процессов в одном из наиболее перспективных сегодня материалов для ИК-области спектра.

Полученные данные могут быть использованы для создания нового поколения фотовольтаических устройств; источников и приемников оптического излучения; широкополосных усилителей; ИК-матриц для визуализации изображений; наносенсоров; а также в экспериментальных и теоретических исследованиях в области физики наноструктур и биомедицинских приложений.

Публикации

1. Парфенов П.С., Литвин А.П., Баранов А.В., Ушакова Е.В., Федоров А.В., Прудников А.В., Артемьев М.В. Измерение времен затухания люминесценции квантовых точек PbS в ближнем инфракрасном диапазоне // *Оптика и спектроскопия*. 2012. № 6. С. 939–944.
2. Литвин А.П., Парфенов П.С., Ушакова Е.В., Баранов А.В. Исследование кинетики люминесценции квантовых точек сульфида свинца // *Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики*. 2012. № 5. Т. 81. С. 32–38.
3. Ushakova E.V., Litvin A.P., Parfenov P.S. et al. Anomalous Size-Dependent Decay of Low-Energy Luminescence from PbS Quantum Dots in Colloidal Solution // *ACS Nano*. 2012. Vol. 6. № 10. P. 8913–8921.
4. Rukhlenko I. D., Leonov M.Yu., Turkov V.K., Litvin A.P. et al. Kinetics of pulse-induced photoluminescence from a semiconductor quantum dot // *Physical Review B (in press)*.

Результаты работы изложены на международной конференции (15th International conference «LaserOptics 2012» (25–29 June 2012, St. Petersburg, Russia)) и приняты для доклада на двух международных конференциях: «Фундаментальные проблемы оптики ФПО-2012» (15–19 октября, Санкт-Петербург, Россия), «PhotonicsAsia 2012» (5–7 November, Beijing, China).

Литература

1. *Sargent E.H.* Infrared quantum dots // *Advanced Materials*. 2005. Vol. 17. № 5. P. 515–522.
2. *Clark S.W., Harbold J.M., Wise F.W. et al.* Resonant energy transfer in PbS quantum dots // *Journal of Physical Chemistry C*. 2007. Vol. 111. P. 7302–7305.
3. *Lunz M., Bradley L., Chen W.Y. et al.* Influence of quantum dots concentration on Forster resonant energy transfer in monodispersed nanocrystal quantum dot monolayers // *Physical Review B*. 2010. Vol. 81. P. 205316.
4. *Rogach A.L., Klar T.A., Lupton J.M. et al.* Energy transfer with semiconductor nanocrystals // *Journal of Materials Chemistry*. 2009. Vol. 19. P. 1208–1221.
5. *Kramer I.J., Pattantyus-Abraham A.G., Barkhouse A.R. et al.* Advances in colloidal quantum dot solar cells: The depleted-heterojunction device // *Thin solid films*. 2011. Vol. 17. № 519. P. 7351–7355.
6. *Emin S., Singh S.P., Han L.* Colloidal quantum dot solar cells // *Solar Energy*. 2011. Vol. 85. P. 1264–1282.
7. *Nozik A.J.* Quantum dot solar cells // *Physica E: Low-dimensional systems and nanostructures*. 2002. Vol. 14. P. 115–120.
8. *Федоров А.В., Рухленко И.Д., Баранов А.В., Кручинин С.Ю.* Оптические свойства полупроводниковых квантовых точек. СПб., 2011. – 188 с.
9. *Oh D.K., Kim J.S., Lee J.H. et al.* The progress of QD lasers in the near IR wavelength region // *Proceedings of SPIE*. 2011. Vol. 7945. № 3. P. 794501–794507.
10. *Stiff-Roberts A.D.* Quantum-dot infrared photodetectors: a review // *Journal of nanophotonics*. 2009. Vol. 3. P. 031607.
11. *Dong G., Wu B., Zhang F. et al.* Broadband near-infrared luminescence and tunable optical amplification around 1.55 μm and 1.33 μm of PbS quantum dots in glasses // *Journal of Alloys and Compounds*. 2011. Vol. 509. P. 9335–9339.
12. *Wundke K., Potting S., Auxier J. et al.* PbS quantum-dot-doped glasses for ultrashort-pulse generation // *Applied Physics Letters*. 2000. Vol. 76. № 1. P. 10–12.
13. *Biju V., Mundayoor S., Omkumar R.V. et al.* Bioconjugates quantum dots for cancer research: present status, prospects and remaining issues // *Biotechnology Advances*. 2010. Vol. 28. P. 199–213.
14. *Cintezza L.O.* Quantum dots in biomedical applications: advances and challenges // *Journal of nanophotonics*. 2010. Vol. 4. P. 042503.
15. *Rao J., Dragulescu-Andrasi A., Yao H.* Fluorescence imaging *in vivo*: recent advances // *Current opinion in biotechnology*. 2007. Vol. 18. P. 17–25.
16. *Periasamy A.* Fluorescence resonance energy transfer microscopy: a mini review // *Journal of biomedical optics*. 2001. Vol. 6. № 3. P. 287–291.
17. *Watt A.A.R., Meredith P., Riches J.D. et al.* A PbS quantum cube: conducting polymer composite for photovoltaic applications // *Current Applied Physics*. 2004. Vol. 4. P. 320–322.
18. *McDonald S.A., Konstantatos G., Zhang S. et al.* Solution-processed PbS quantum dot infrared photodetectors and photovoltaics // *Nature materials*. 2005. Vol. 4. P. 138–142.
19. *Konstantatos G., Sargent E.H.* Colloidal quantum dot photodetectors // *Infrared physics and technology*. 2011. Vol. 54. P. 278–282.
20. *Plass R., Pelet S., Krueger J.* Quantum dot sensitization of organic-inorganic hybrid solar cells // *Journal of Physical Chemistry B*. 2002. Vol. 106. № 31. P. 7578–7580.
21. *Gunes S., Fritz K.P., Neugebauer H. et al.* Hybrid solar cells using PbS nanoparticles // *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2007. Vol. 91. P. 420–423.
22. *Pan A.C., del Canizo C., Canovas E. et al.* Enhancement of up-conversion efficiency by combining rare earth-doped phosphors with PbS quantum dots // *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2010. Vol. 94. P. 1923–1926.
23. *Ushakova E.V., Litvin A.P., Parfenov P.S. et al.* Anomalous Size-Dependent Decay of Low-Energy Luminescence from PbS Quantum Dots in Colloidal Solution // *ACS Nano*. 2012. Vol. 6. № 10. P. 8913–8921.

24. Парфенов П.С., Баранов А.В., Вениаминов А.В., Орлова А.О. Комплекс для люминесцентного анализа макро- и микрообразцов в ближнем инфракрасном диапазоне // Оптический журнал. 2011. Т. 78. С. 48–52.
25. Парфенов П.С., Литвин А.П., Баранов А.В. и др. Калибровка спектральной чувствительности приборов в ближней инфракрасной области // Журнал прикладной спектроскопии. 2011. Т. 78. № 3. С. 460–466.
26. Парфенов П.С., Литвин А.П., Баранов А.В. и др. Измерение времен затухания люминесценции квантовых точек PbS в ближнем инфракрасном диапазоне // Оптика и спектроскопия. 2012. Т. 6. С. 939–944.
27. Warner J.H., Thomsen E., Watt A.R. et al. Time-resolved photoluminescence spectroscopy of ligand-capped PbS nanocrystals // Nanotechnology. 2005. Vol. 16. P. 175–179.
28. Fernée M.J., Thomsen E., Jensen P., Rubinsztein-Dunlop H. Highly efficient luminescence from a hybrid state found in strongly quantum confined PbS nanocrystals // Nanotechnology. 2006. Vol. 17. P. 956–962.
29. Kim D., Kuwabara T., Nakayama M. Photoluminescence properties related to localized states in colloidal PbS quantum dots // Journal of luminescence. 2006. Vol. 119–120. P. 214–218.
30. Parker C.A. Photoluminescence of solutions: With applications to photochemistry and analytical chemistry. Amsterdam; London; New York, 1968. – 544 p.
31. Новотный Л., Хехт Б. Основы нанооптики. М., 2009. – 484 с.
32. Moreels I., Lambert K., Smeets D. et al. Size-dependent optical properties of colloidal PbS quantum dots // ACS Nano. 2009. Vol. 3. № 10. P. 3023–3030.
33. Rinnerbauer V., Egelhaaf H.J., Hingerl K. et al. Energy transfer in closepacked PbS nanocrystal films // Physical Review B. 2008. Vol. 77. P. 085322.
34. Мак-Глинн С., Адзуми Т., Киносита М. Молекулярная спектроскопия триплетного состояния. М., 1972. – 448 с.
35. Зеегер К. Физика полупроводников. М., 1977. – 615 с.
36. Lifshitz E., Sirota M., Porteanu H. Continuous and time-resolved photoluminescence study of lead sulfide nanocrystals, embedded in polymer film // Journal of crystal growth. 1999. Vol. 196. P. 126–134.
37. Barkhouse D.A.R., Pattantyus-Abraham A.G., Levina L., Sargent E. Thiols passivate recombination centers in colloidal quantum dots leading to enhanced photovoltaic device efficiency // ACS Nano. 2008. Vol. 2. P. 2356–2362.



Мельник Максим Владимирович
 Факультет фотоники и оптоинформатики
 Кафедра фотоники и оптоинформатики
 НОЦ «Фемтосекундная оптика и фемтотехнологии»
 E-mail: gil92@list.ru

ВЫЯВЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ ГЕНЕРАЦИИ ВЫСОКОКОГЕРЕНТНОГО СПЕКТРАЛЬНОГО СУПЕРКОНТИНУУМА В ОБЛАСТЯХ НОРМАЛЬНОЙ, НУЛЕВОЙ И АНОМАЛЬНОЙ ДИСПЕРСИИ ГРУППОВЫХ СКОРОСТЕЙ

М.В. Мельник

Научный руководитель – профессор С.А. Козлов

Введение

В настоящее время вопрос когерентности считается полностью проработанным. Однако в связи с тем, что сейчас активно изучаются возможности применения излучения спектрального суперконтинуума в оптических системах сверхбыстрой передачи информации, стал актуальным вопрос об изучении временной когерентности фемтосекундных спектральных суперконтинуумов [1–3]. Для повышения эффективности такого способа важен вопрос о когерентности такого излучения. Исследование времени когерентности спектрального суперконтинуума также может быть использовано для расчета разрешения оптической когерентной томографии [4–6].

В данной работе были проведены исследования временной когерентности спектрального суперконтинуума в зависимости от длительности импульса на входе в оптическое волокно. Было показано, что с увеличением длительности импульса на входе в микроструктурированное оптическое волокно уменьшается время когерентности импульса на выходе из него.

Экспериментальная реализация генерации высококогерентного спектрального суперконтинуума

Используемая в работе лазерная система генерации фемтосекундного спектрального суперконтинуума приведена на рис. 1. Основой экспериментальной установки является лазер на кристаллах титан-сапфира, накачиваемый второй гармоникой неодимового непрерывного твердотельного лазера с диодной накачкой. Для компенсации chirpa используется внешний компенсатор дисперсии.

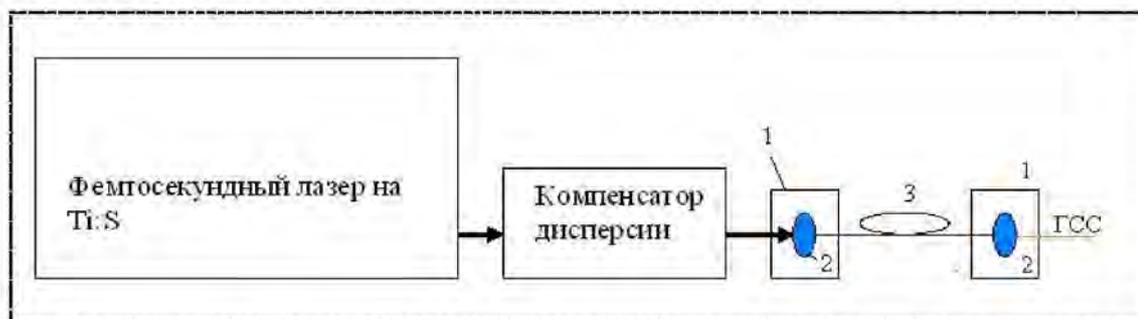


Рис. 1. Лазерная система генерации фемтосекундного спектрального суперконтинуума:
 1 – трехкоординатная подвижка, 2 – объектив ЛОМО-20,
 3 – генератор спектрального суперконтинуума (MC Super1, MC Super2, MC Super3).
 На выходе ГСС – генерация спектрального суперконтинуума

В наших экспериментах длительность оптических импульсов с центральной длиной волны 780 нм, частотой следования импульсов – 100 МГц на выходе лазерной системы

составляла 20 фс, средняя мощность лазерного излучения – 350 мВт. Для ввода и вывода лазерного излучения в микроструктурированное оптическое волокно использовались два трехкоординатных столика и два микрообъектива ЛОМО-20. В качестве генератора спектрального суперконтинуума использовалось волокно MC Super2 длиной 30 см. Измерения спектра производились с помощью спектрометра ASP100 в диапазоне длин волн 190–1100 нм.

Характерный спектр излучения генерируемого спектрального суперконтинуума для импульса длительностью 20 фс титан-сапфирового фемтосекундного лазера находится в области от 500 до 950 нм (рис. 2).

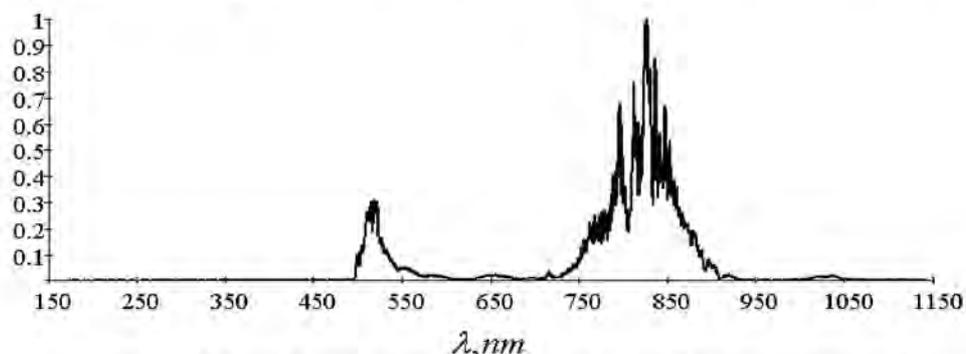


Рис. 2. Спектр излучения спектрального суперконтинуума в микроструктурированном оптическом волокне; MC Super2

Для исследования когерентных свойств спектрального суперконтинуума использовался интерферометр Майкельсона, оптическая схема и ход лучей в котором показаны на рис. 3. Лазерный импульс попадает в светоделительный куб BS, далее на опорное зеркало M1 и сканирующее зеркало M2, перемещение которого обеспечивает микрометрическая подвижка Standa и рычаг с соотношением плеч 1:3. Шаг сканирования составлял 1,333 фс. Далее результирующее поле регистрируется фотоприемником PD, сигнал с которого передается на ПК. Настройка и юстировка интерферометра осуществляется продольным и угловым смещением зеркала M1 вплоть до получения минимальной (нулевой) разности хода в плечах интерферометра. В этом случае регистрируемое фотоприемником излучение является интерференционным сигналом. Типичный интерференционный сигнал приведен на рис. 4. Его аппроксимация для определения полуширины импульса приведена на рис. 5.

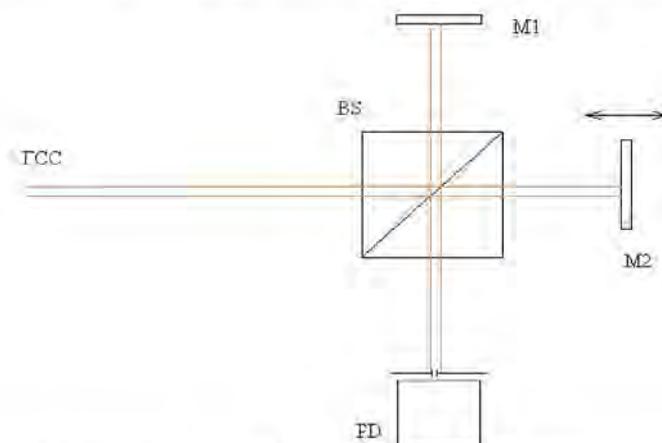


Рис. 3 Интерферометр Майкельсона: ГСС – генерация спектрального суперконтинуума, BS – светоделительный куб, M1 – опорное зеркало, M2 – предметное зеркало, смещаемое вдоль оптической оси, PD – фотоприемник

Данная схема определения интерферограммы является также оптическим коррелятором первого порядка, поэтому полуширина интерференционного сигнала – это длительность импульса на выходе из волокна. Она является оценкой времени когерентности (Табл. 1).

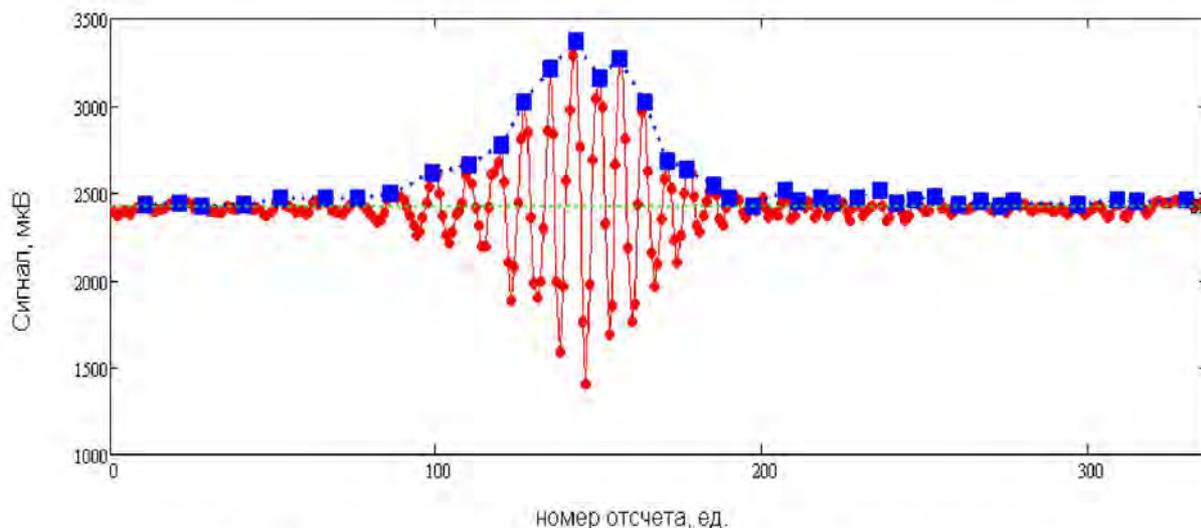


Рис. 4. Интерференционный сигнал на выходе фотоприемника.
Длительность импульса на входе 20 фс

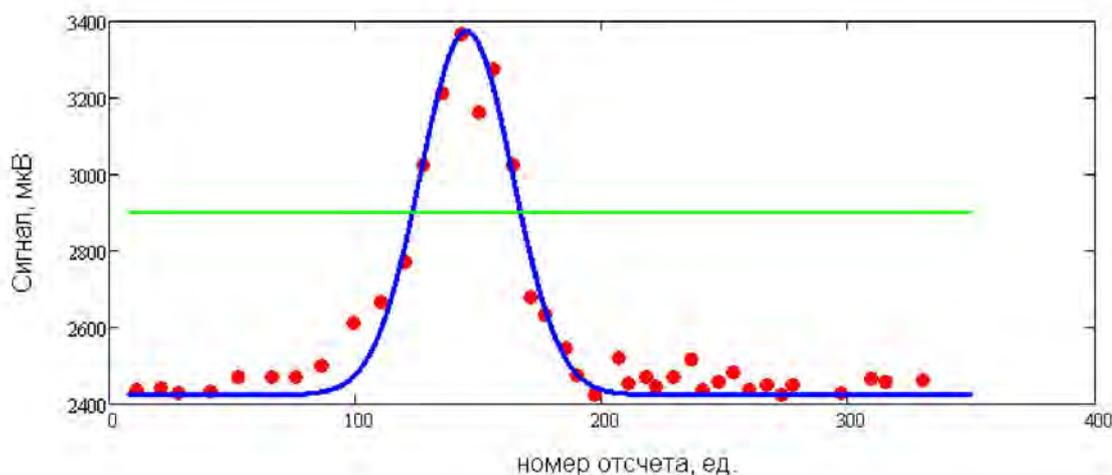


Рис. 5. Аппроксимация гауссовой функцией (синяя линия); линия на полувысоте (зеленая линия).
Длительность импульса на входе 20 фс

Таблица 1

Зависимость времени когерентности от длительности импульса на входе в оптическое волокно

Длительность, фс	20 фс	30 фс	40 фс	50 фс
МС волокно				
МС – Super 2	63,7	59,5	53,1	48,5

Из приведенных экспериментальных данных следует, что источник спектрального суперконтинуума на основе МС-Super2 является высококогерентным. Результаты исследования показывают, что при увеличении длительности импульса на входе в волокно время когерентности уменьшается.

Определение оптимальных условий генерации высококогерентного спектрального суперконтинуума в областях нормальной, нулевой и аномальной дисперсии групповых скоростей

Область нормальной дисперсии

Модель рассматриваемой нами оптической среды учитывает только безынерционную кубическую по полю нелинейность поляризационного отклика среды. В таких условиях

динамика электрического поля светового импульса может быть описана следующим уравнением [7]:

$$\frac{\partial E}{\partial z} + \frac{N_0}{c} \frac{\partial E}{\partial t} - a \frac{\partial^3 E}{\partial t^3} + gE^2 \frac{\partial E}{\partial t} = 0, \quad (1)$$

где z – расстояние вдоль направления распространения, t – время, c – скорость света в вакууме. Параметры N_0 , a – параметры, описывающие линейный показатель преломления диэлектрической среды и его дисперсию. Коэффициент g характеризует кубическую по полю нелинейность среды.

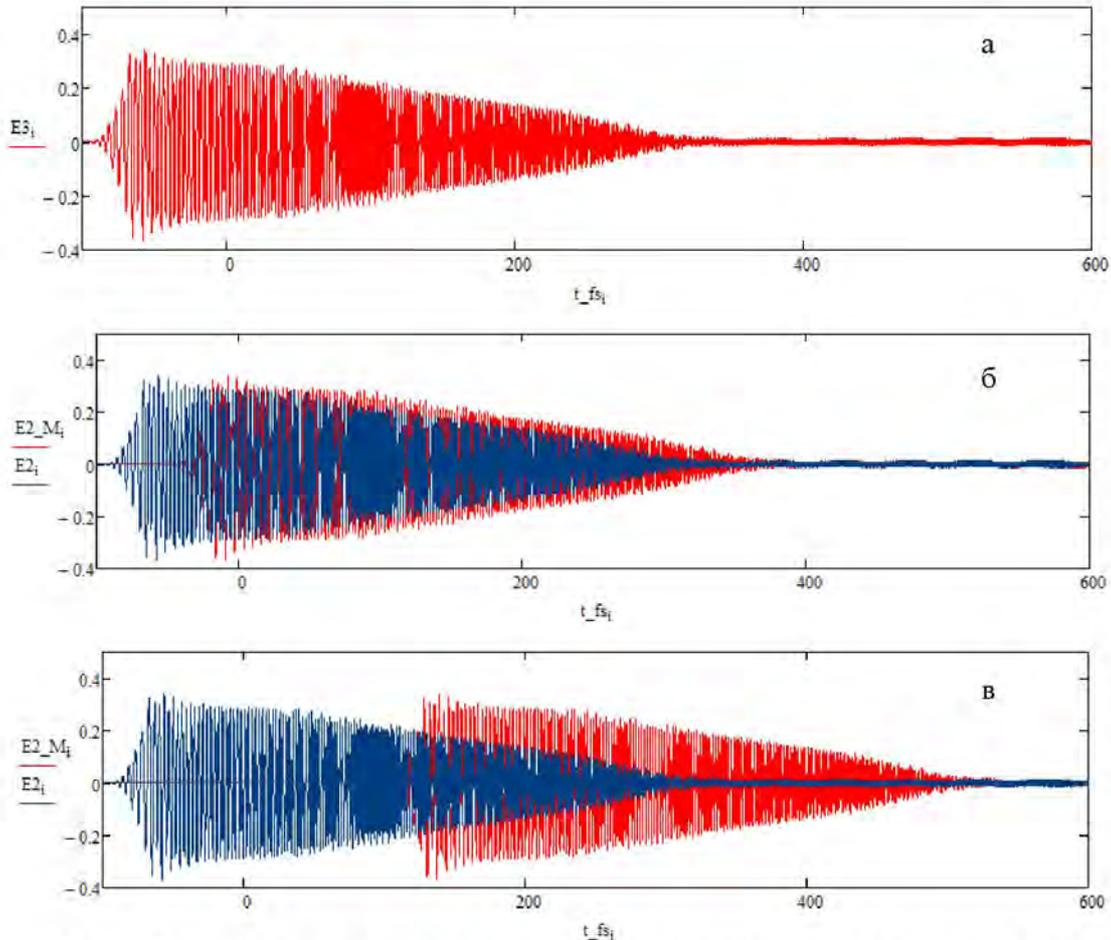
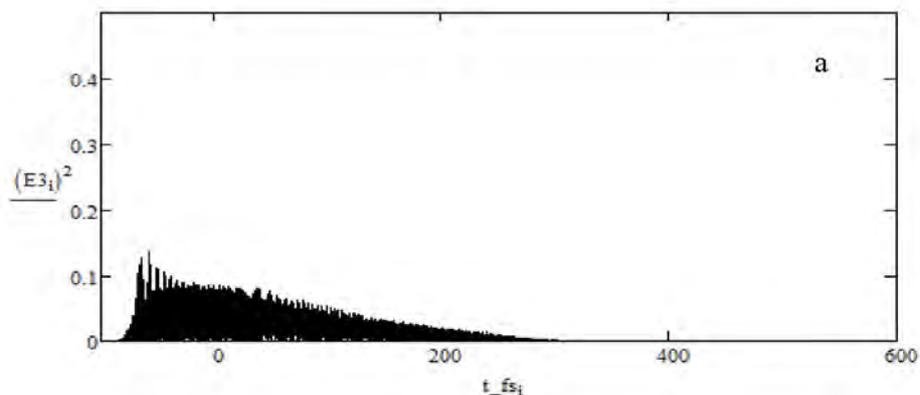


Рис. 6. Электрическое поле фемтосекундного импульса: а – исходный импульс; б – задержка 50 фс; в – задержка 200 фс



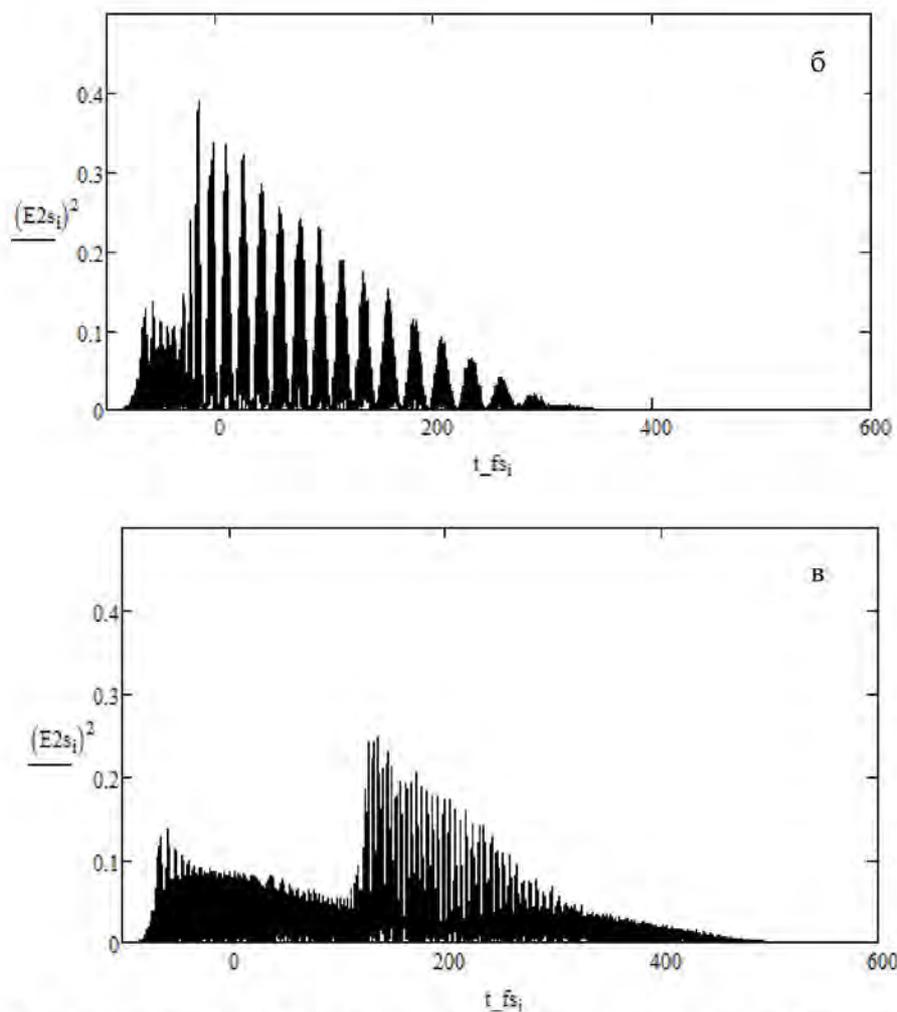
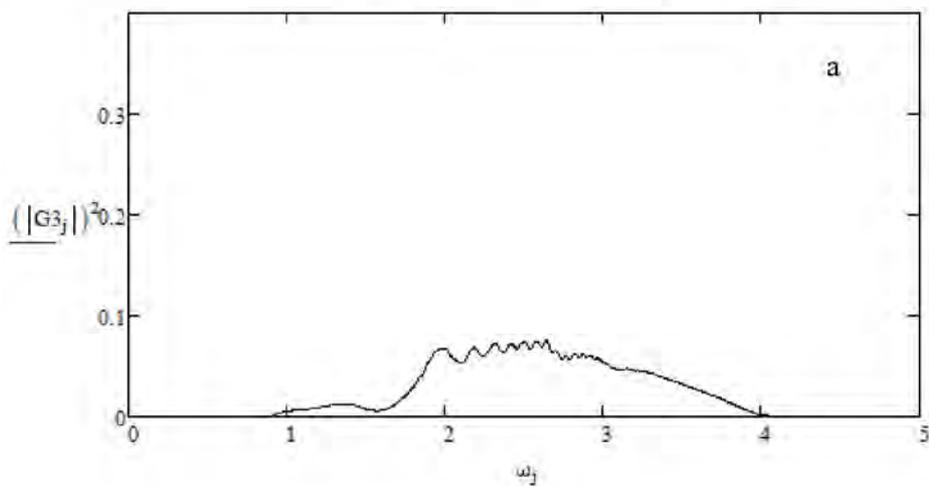


Рис. 7. Интенсивность фемтосекундного импульса: а – исходный импульс; б – задержка 50 фс; в – задержка 200 фс



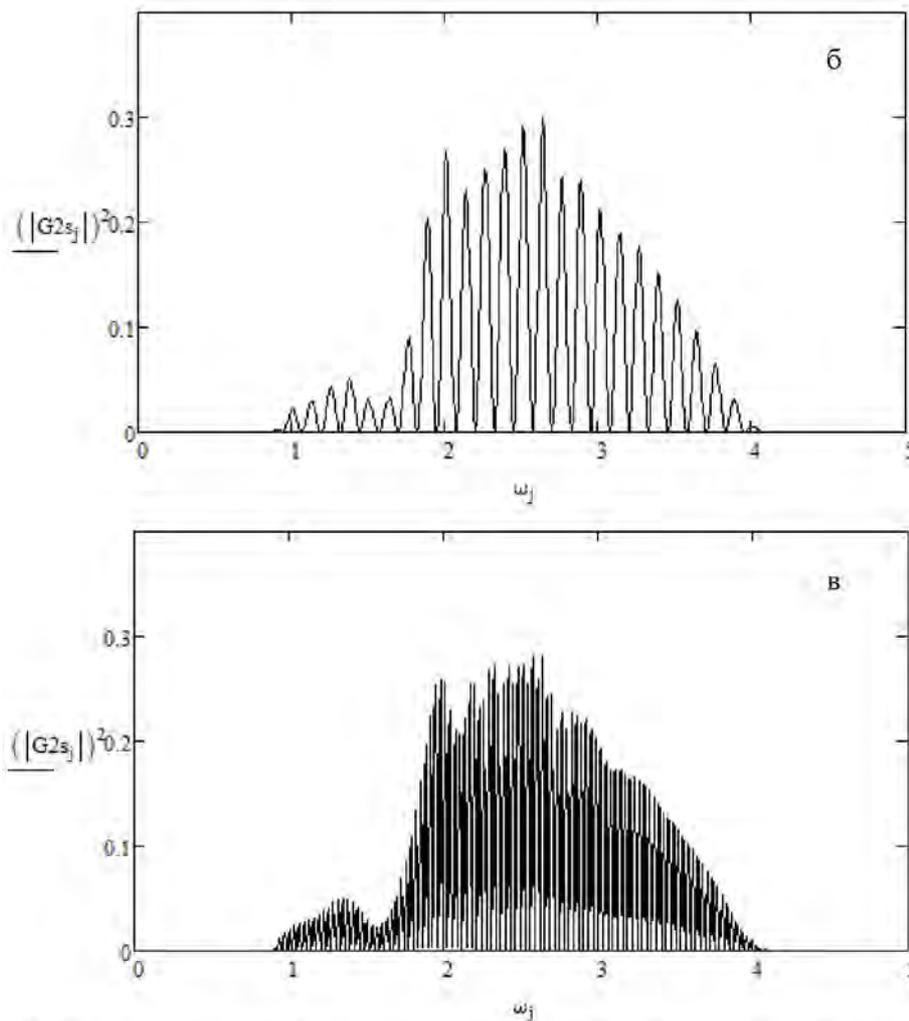


Рис. 8. Модуль спектра фемтосекундного импульса: а – исходный импульс; б – задержка 50 фс; в – задержка 200 фс

Из рис. 6, 7 и 8 видно, что в области нормальной дисперсии при временной задержке 200 фс еще наблюдается корреляция между электрическим полем и спектром импульса. Временной последовательности импульсов соответствует квазидискретный спектральный суперконтинуум. Минимальная ширина спектральной линии при таком соответствии составляет 23,8 нм. Область нормальной дисперсии групповых скоростей является оптимальной для генерации квазидискретного спектрального суперконтинуума, используемого в системе передачи информации последовательностью сверхкоротких импульсов со скоростями свыше 10 Тб/с.

Область нулевой дисперсии

В отличие от области нормальной дисперсии в области нулевой дисперсии динамика линейно поляризованного светового импульса в гомогенной и изотропной прозрачной среде с дисперсией и нерезонансной электрической нелинейностью описывается следующим образом [7]:

$$\frac{\partial E}{\partial z} + \frac{N_0}{c} \frac{\partial E}{\partial t} - a \frac{\partial^3 E}{\partial t^3} + b \int_{-\infty}^t E dt' + g E^2 \frac{\partial E}{\partial t} = \frac{c}{2N_0} \Delta_{\perp} \int_{-\infty}^t E dt' \quad (2)$$

где E – амплитуда электрического поля световой волны; N_0 , a , b – параметры, описывающие линейный показатель преломления диэлектрической среды и его дисперсию, g – характеризует кубическую по полю нелинейность среды.

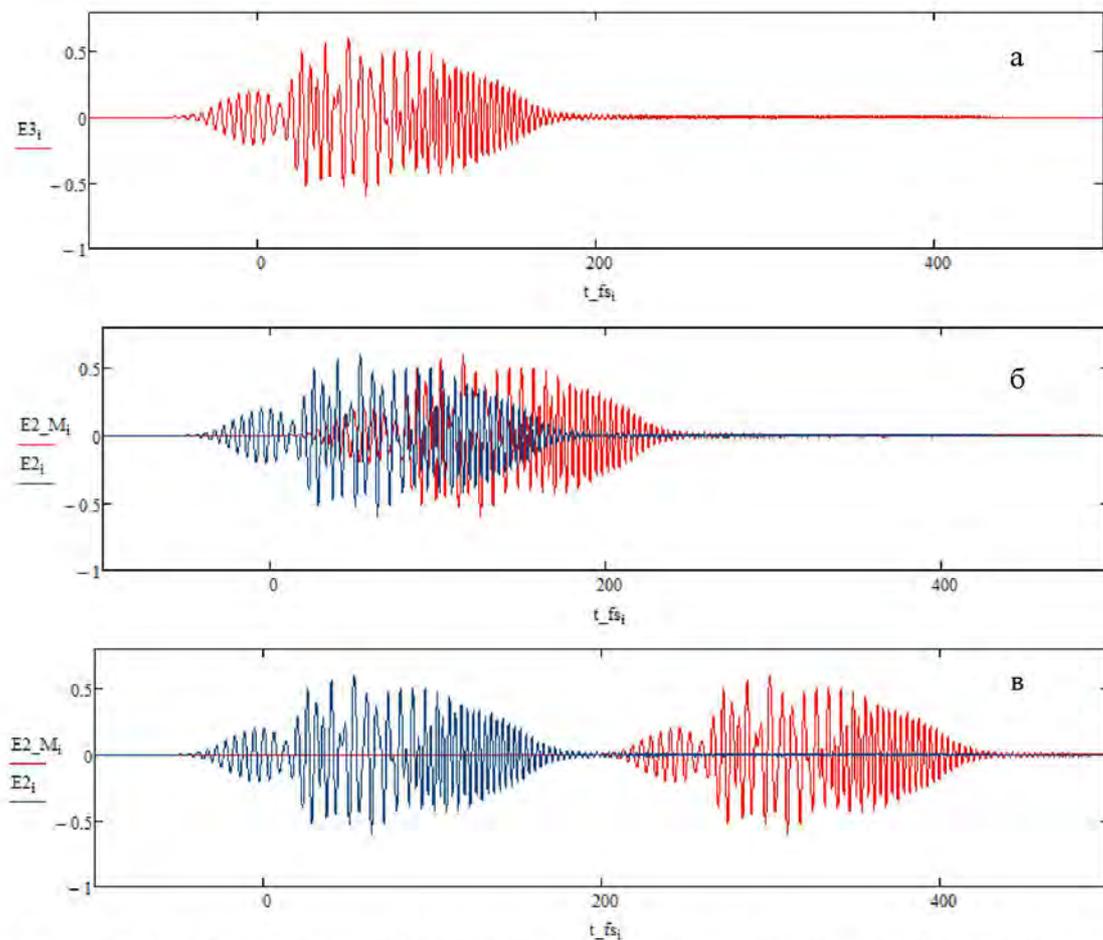
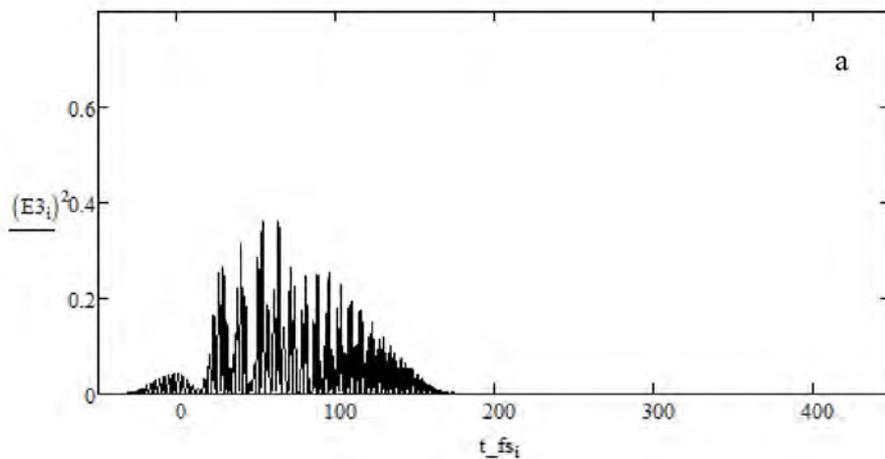


Рис. 9. Электрическое поле фемтосекундного импульса: а – исходный импульс; б – задержка 50 фс; в – задержка 200 фс



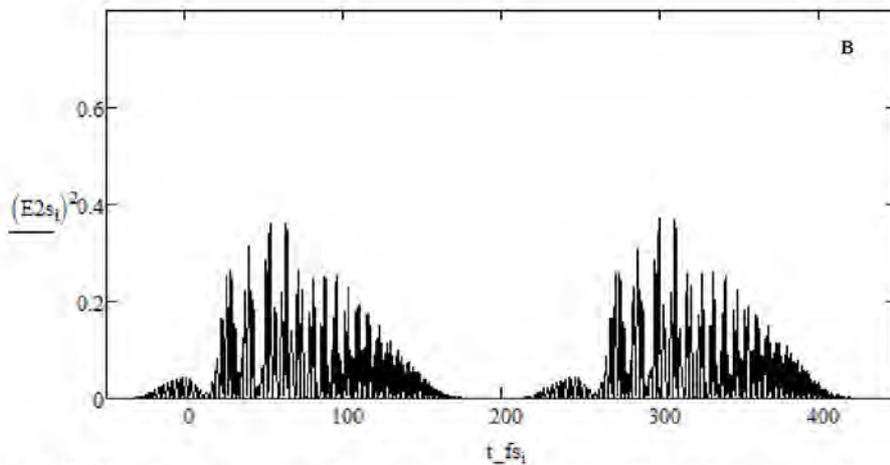
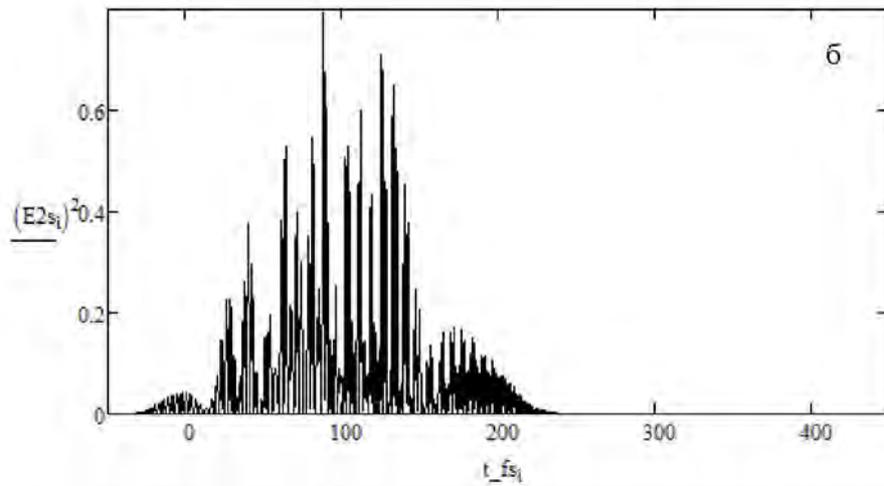
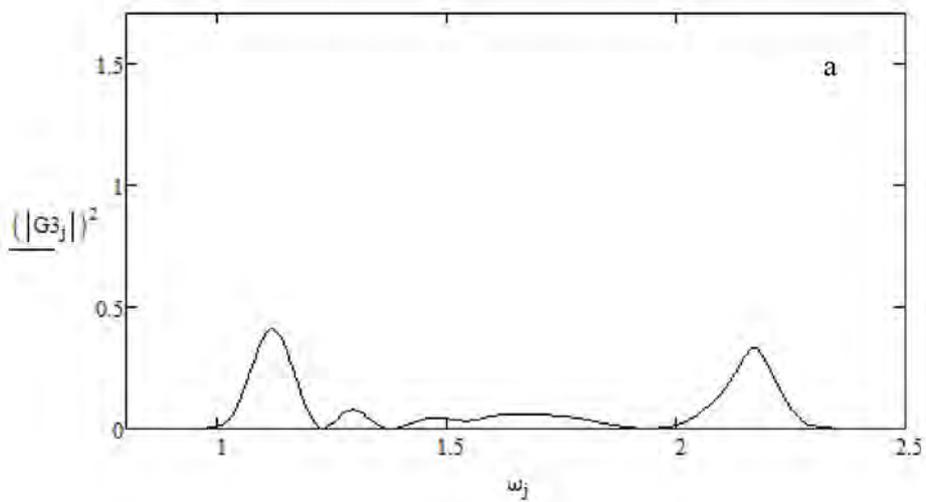


Рис. 10. Интенсивность фемтосекундного импульса: а – исходный импульс; б – задержка 50 фс; в – задержка 200 фс



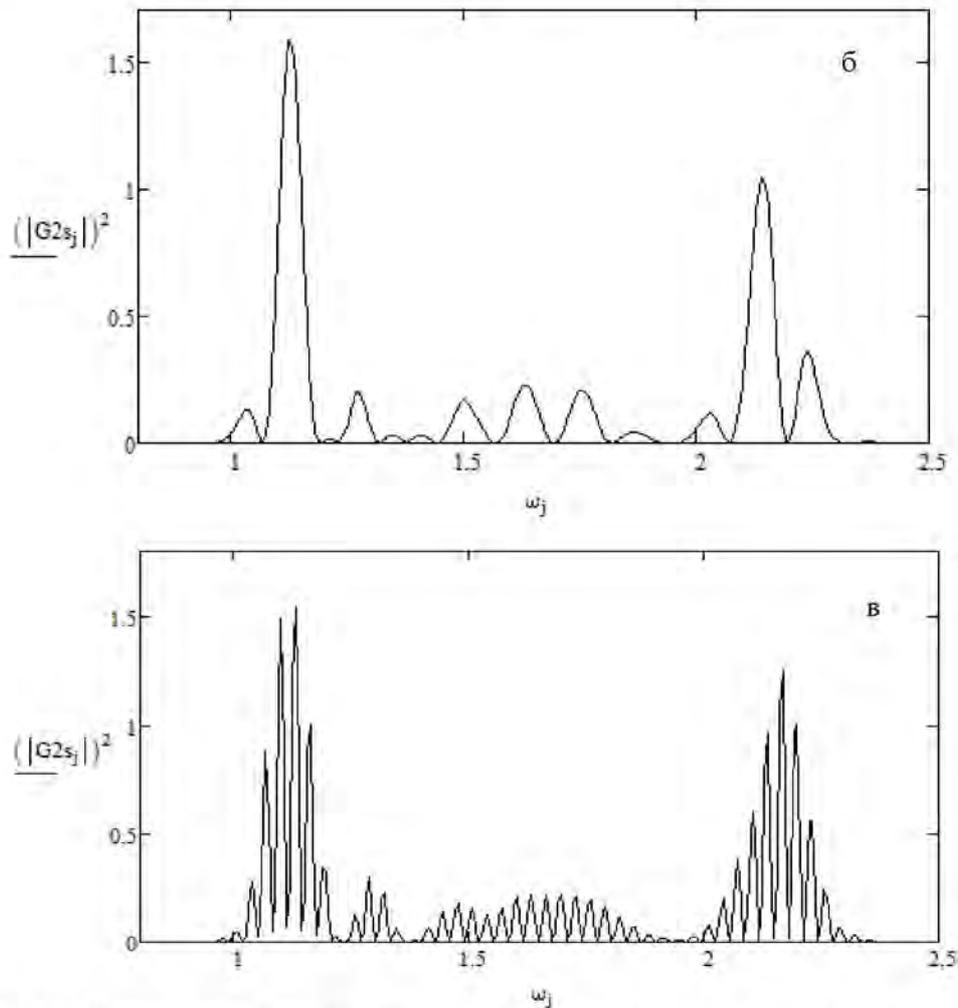


Рис. 11. Модуль спектра фемтосекундного импульса: а – исходный импульс; б – задержка 50 фс; в – задержка 200 фс

Из рис. 9, 10 и 11 видно, что в области нулевой дисперсии, как и в области нормальной дисперсии, при временной задержке 100 фс наблюдается корреляция между электрическим полем и квазидискретным спектром импульса. Минимальная ширина спектральной линии при таком соответствии составляет 90,7 нм. Область нулевой дисперсии групповых скоростей является оптимальной для генерации квазидискретного спектрального суперконтинуума, используемого в системе передачи информации последовательностью сверхкоротких импульсов со скоростями свыше 10 Тб/с.

Область аномальной дисперсии

В области аномальной дисперсии динамика электрического поля светового импульса, так же, как и в области нулевой дисперсии, описывается следующим уравнением [7]:

$$\frac{\partial E}{\partial z} + \frac{N_0}{c} \frac{\partial E}{\partial t} - a \frac{\partial^3 E}{\partial t^3} + b \int_{-\infty}^t E dt' + gE^2 \frac{\partial E}{\partial t} = \frac{c}{2N_0} \Delta_{\perp} \int_{-\infty}^t E dt' \quad (3)$$

где E – амплитуда электрического поля световой волны; N_0 , a , b – параметры, описывающие линейный показатель преломления диэлектрической среды и его дисперсию, g – характеризует кубическую по полю нелинейность среды.

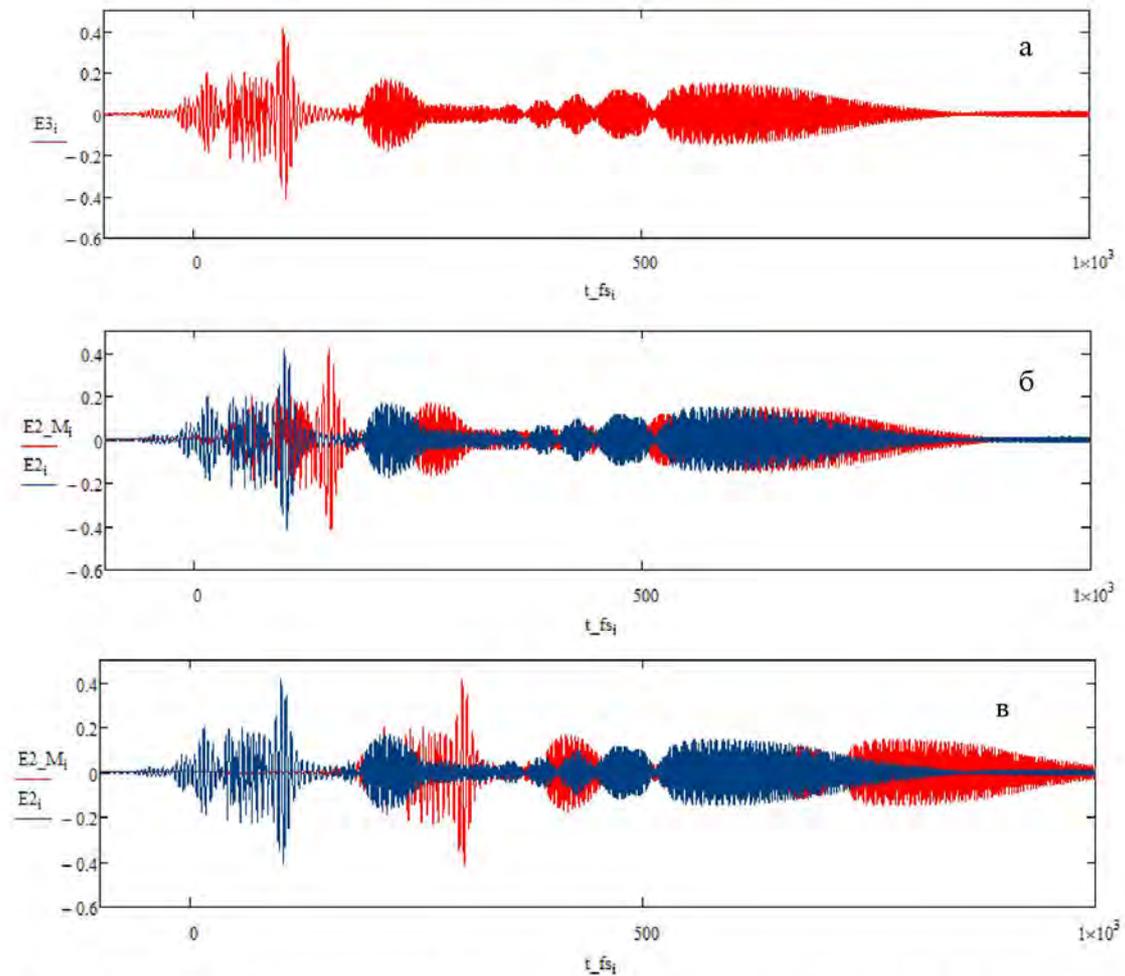
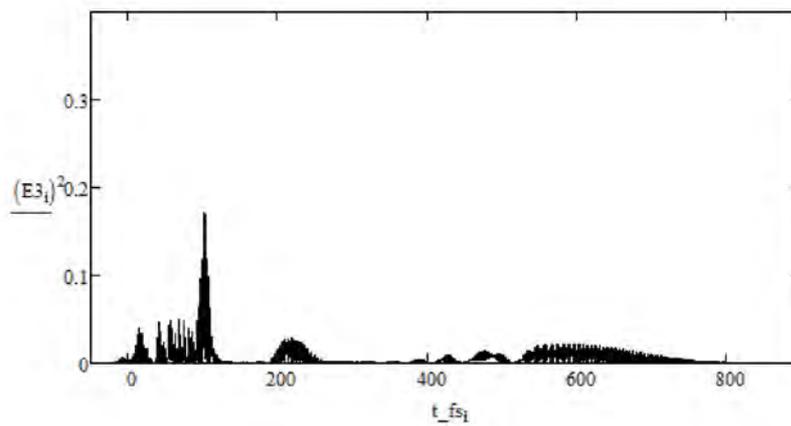


Рис. 12. Электрическое поле фемтосекундного импульса: а – исходный импульс; б – задержка 50 фс; в – задержка 200 фс



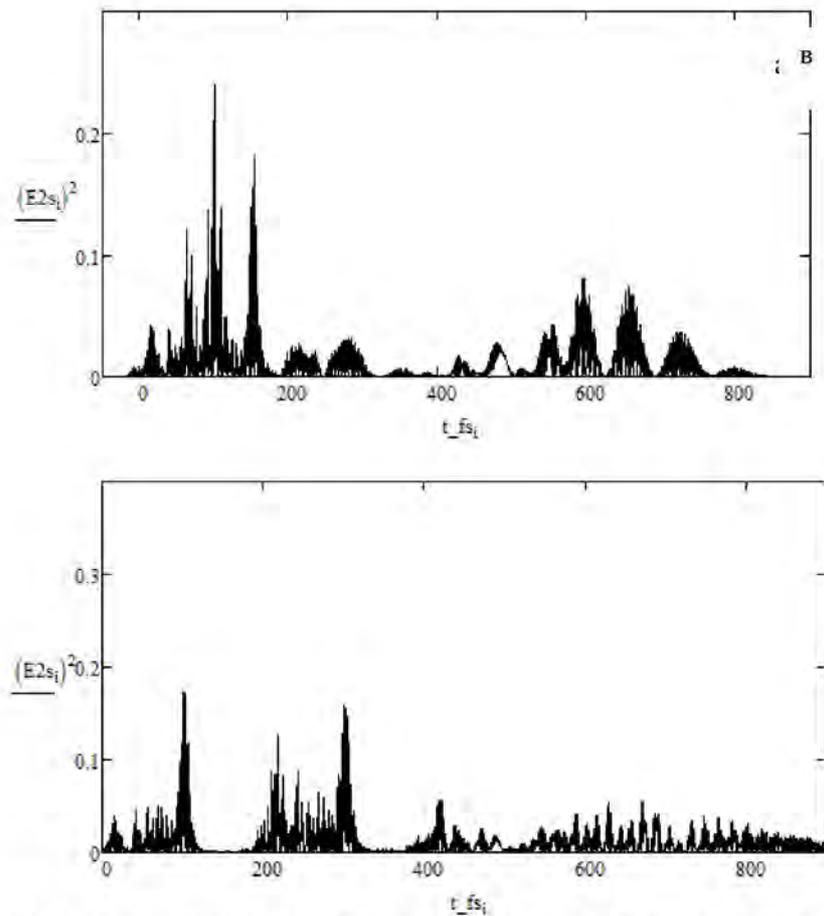
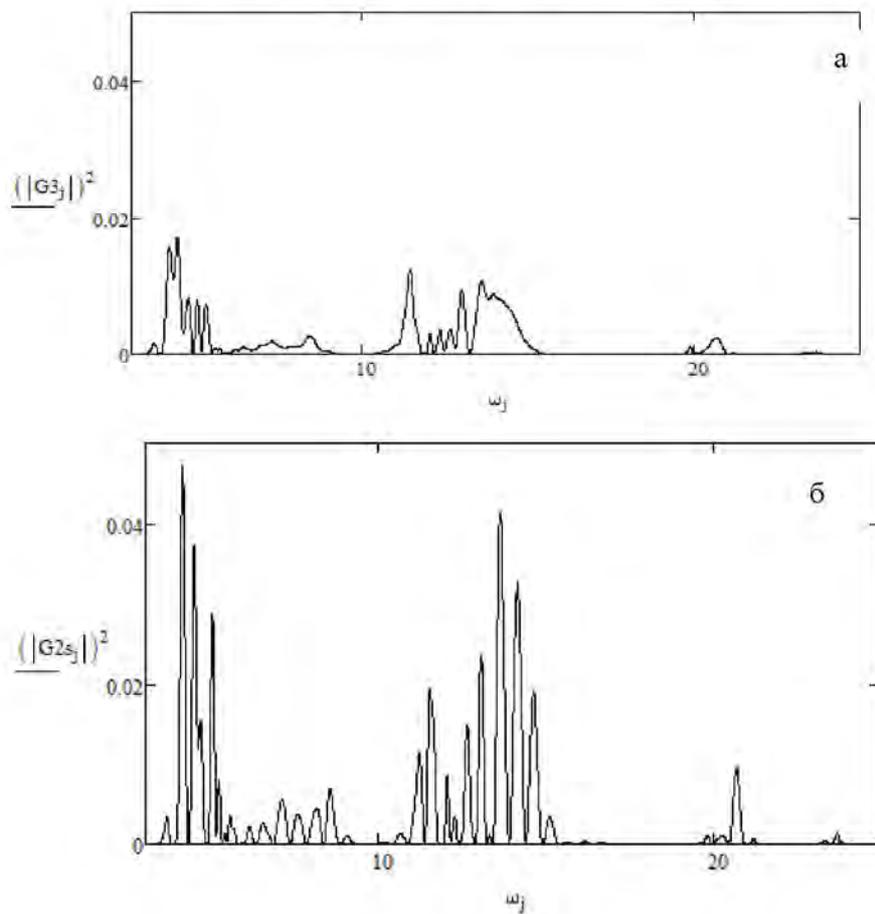


Рис. 13. Интенсивность фемтосекундного импульса: а – исходный импульс; б – задержка 50 фс; в – задержка 200 фс



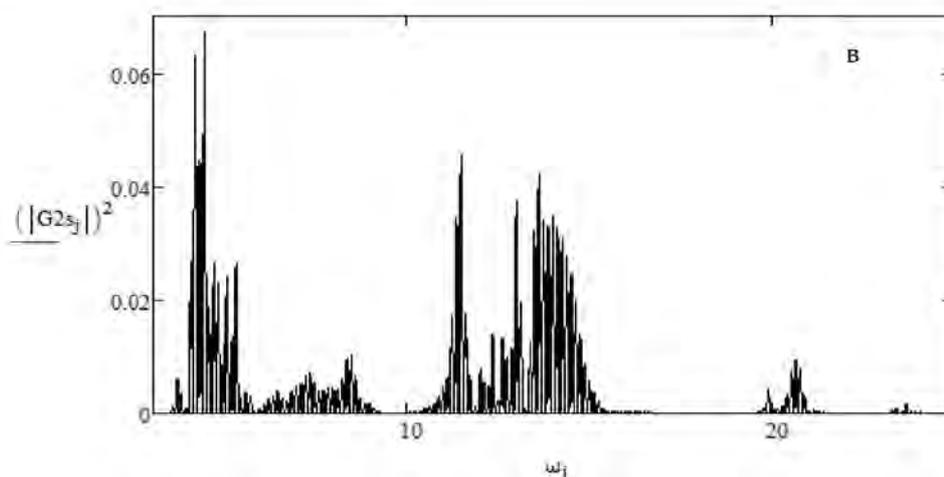


Рис. 14. Модуль спектра фемтосекундного импульса: а – исходный импульс; б – задержка 50 фс; в – задержка 200 фс

В области аномальной дисперсии, в отличие от областей нормальной и нулевой дисперсии, в результате генерации спектрального суперконтинуума на выходе излучения (рис. 12, 13, 14) из нелинейной среды спектру соответствуют три разных временных структуры. Показано, что при интерференции такого излучения каждая временная структура взаимодействует только сама с собой. Поэтому в квазидискретном спектральном суперконтинууме выделяются три области с различной шириной спектральных линий, независимых друг от друга. Это указывает на то, что излучение является некогерентным, то есть не происходит согласованности временной структуры всего излучения при их интерференции.

Заключение

Исходя из результатов проделанной работы, можно сделать следующие выводы:

- временной аспект когерентности имеет большое значение при рассмотрении явлений взаимодействия электромагнитных волн и их интерференции;
- время когерентности показывает максимальную временную задержку между импульсами, в течение которой еще возможно наблюдение интерференции. Чем больше временная задержка, тем меньше ширина спектральной линии в квазидискретном спектральном суперконтинууме. В тоже время, чем она меньше, тем большее количество информации кодируется в спектре;
- области нормальной и нулевой дисперсии групповых скоростей являются оптимальными для генерации квазидискретного спектрального суперконтинуума, используемого в системе передачи информации последовательностью сверхкоротких импульсов со скоростями свыше 10 Тб/с.
- область аномальной дисперсии групповых скоростей нерентабельно использовать для генерации квазидискретного спектрального суперконтинуума из-за соответствия спектру трех разных временных структур. Следовательно, излучение в данной области является некогерентным.

Области возможного использования

Полученные результаты могут определить оптимальный выбор источника для систем сверхбыстрой передачи информации квазидискретным спектральным суперконтинуумом в оптических линиях связи, который позволяет передавать информацию со скоростями свыше 10 Тб/с.

Исследованный в эксперименте генератор спектрального суперконтинуума может использоваться в качестве источника излучения в когерентном томографе, применяемом в офтальмологии [3–5].

Публикации

Мельник М.В. Выявление оптимальных условий генерации высококогерентного спектрального суперконтинуума в областях нормальной, нулевой и аномальной дисперсии групповых скоростей // Сб. трудов VII Международной конференции «Фундаментальные проблемы оптики» (ФПО-2012) (в печати).

Литература

1. Dudley J.M., Coen S. Coherence properties of supercontinuum spectra generated in photonic crystal and tapered optical fibers // Optics Letters, 2002. Vol. 27. Issue 13. P. 1180–1182.
2. Hooper L.E., Mosley P.J., Muir A.C., Wadsworth W.J., Knight J.C. Coherent supercontinuum generation in photonic crystal fiber with all-normal group velocity dispersion // Optics Express, 2011. Vol. 19. Issue 6. P. 4902–4907.
3. Paulsen H.N., Hilligse K.M., Thøgersen J., Keiding S.R., Larsen J.J. Coherent anti-Stokes Raman scattering microscopy with a photonic crystal fiber based light source // Optics Letters. 2003. Vol. 28. Issue 13. P. 1123–1125.
4. Humbert G. et al. Supercontinuum generation system for optical coherence tomography based on tapered photonic crystal fibre // Optics Express, 2006. Vol. 14. Issue 4. P. 1596–1603.
5. Marks D.L., Oldenburg A.L., Reynolds J.J., Boppart S.A. Study of an ultrahigh-numerical-aperture fiber continuum generation source for optical coherence tomography // Optics Letters, 2002. Vol. 27. Issue 22. P. 2010–2012.
6. Hartl I. et al. Ultrahigh-resolution optical coherence tomography using continuum generation in an air-silica microstructure optical fiber // Optics Letters, 2008. Vol. 26. Issue 9. P. 608–610.
7. Шполянский Ю.А. Сценарии развития фемтосекундного спектрального суперконтинуума // Проблемы когерентной и нелинейной оптики / Под ред. И.П. Гурова и С.А. Козлова. СПб., 2000.



Николаева Татьяна Юрьевна
Факультет фотоники и оптоинформатики
Кафедра фотоники и оптоинформатики
E-mail: paltanya@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОДОЛЬНЫХ ДИФРАКЦИОННЫХ КАРТИН ДЛЯ ВИДИМОГО И ТЕРАГЕРЦОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Т.Ю. Николаева

Научный руководитель – старший научный сотрудник Н.В. Петров

Введение

Задача восстановления фазы излучения представляет большой интерес в различных областях науки, ввиду того что информация о фазе рассеянной или прошедшей объект волны позволяет полностью восстановить волновой фронт, и тем самым получить более полную информацию о параметрах исследуемого объекта. В настоящее время связи с увеличением вычислительных мощностей методы восстановления фазы волнового фронта получили интенсивное развитие. Одним из наиболее перспективных можно назвать использование итерационной процедуры на основе распределений интенсивности, полученных по мере удаления от объекта вдоль оптической оси и уравнения распространения волн. Возможно расширение данной технологии на случай использования нескольких длин волн. При этом

возникла необходимость исследования продольных распределений интенсивности, образованных при дифракции на различных объектах. Это полезно при решении обратной задачи дифракции в видимом и терагерцовом диапазонах частот, так как позволяет судить о целесообразности использования конкретных поперечных распределений интенсивности для восстановления волнового фронта.

Целью данной работы является систематическое изучение продольных распределений интенсивности, возникающих в результате дифракции на различных объектах, и выявление присущих им характерных особенностей.

Разработка программного обеспечения для моделирования продольных распределений интенсивности

Численные расчеты в рамках проекта были реализованы в специально разработанном программном обеспечении в программной среде National Instruments LabVIEW. LabVIEW – это среда графического программирования, которую используют для быстрого создания комплексных приложений в задачах измерения, тестирования, управления, автоматизации научного эксперимента и образования. В основе LabVIEW лежит концепция графического программирования – последовательное соединение функциональных блоков на блок-диаграмме.

В данной работе для моделирования и обработки полученных данных использовались численные методы, основанные на уравнениях скалярной теории дифракции. Традиционно при рассмотрении явления дифракции в рамках скалярной теории используют два приближения: Френеля, подразумевая дифракцию в ближней зоне, и Фраунгофера для дальней зоны дифракции. Особенности дифракционной картины, образованной произвольным плоским объектом довольно точно описываются соответствующими уравнениями: преобразованиями Френеля и Фурье. Кроме того, существует множество альтернативных способов расчета поля на некотором расстоянии от объекта. Большое количество литературы посвящено анализу поперечной структуры дифрагировавшего поля. Хорошо известны решения типовых задач дифракции на различных апертурах.

В рамках данной работы процесс моделирования производился с использованием выражения для описания распространения углового спектра плоских волн:

$$U(x, y) = \hat{F}^{-1} \{ H(f_x, f_y, l) \cdot \hat{F} [u(x', y')] \}, \quad (1)$$

где $H(f_x, f_y, l)$ – передаточная функция, \hat{F} и \hat{F}^{-1} – операторы прямого и обратного преобразования Фурье, $u(x', y')$ – волновое поле в плоскости с координатами (x', y') ;

а также с помощью преобразования Френеля:

$$U(x, y, l) = \frac{\exp(ikl)}{i\lambda l} \iint u(x', y', 0) \exp\left(i \frac{\pi}{\lambda l} [(x' - x)^2 + (y' - y)^2]\right) dx' dy', \quad (2)$$

где $U(x, y, l)$ – амплитуда поля в точке (x, y, l) , k – волновой вектор, $u(x, y, 0)$ – поле в плоскости (x, y) с координатой $l = 0$.

Использование уравнения (1), по сравнению с преобразованием Френеля, является более предпочтительным, так как для параметров установки, работающей в терагерцовом диапазоне частот, оно удовлетворяет ограничениям на расчет в ближней зоне, а расчет в дальней зоне может быть выполнен с помощью процедуры заполнения нулями.

Внутри всей области дифракции Френеля для различных объектов с небольшим шагом строились и изучались дифракционные картины (перпендикулярные оптической оси распределения интенсивности). Из каждого распределения интенсивности впоследствии вырезался центральный столбец значений интенсивности и склеивался с центральным столбцом следующего рассчитанного распределения. Таким образом, получалась структура, которая на практике может быть получена при регистрации распределений интенсивности при передвижении линейки фотоприемников вдоль оптической оси.

Моделирование продольных распределений интенсивности для различных оптических транспарантов

Моделирование процесса дифракции проводилось на различных транспарантах. Транспарантами называются оптические объекты, которые имеют очень малую протяженность вдоль оптической оси. Подобные объекты могут изменять как амплитуду, так и фазу проходящей через них световой волны. В первом случае транспарант называют амплитудным, а во втором – фазовым. При прохождении плоской электромагнитной волны через оптический транспарант происходит изменение ее амплитуды и / или фазы, и ее поле можно записать в виде:

$$U(x, y) = |U(x, y)| \exp(i\phi(x, y)), \quad (3)$$

где $U(x, y)$ – амплитуда поля в точке (x, y) , $\phi(x, y)$ – фаза поля в точке (x, y) .

В качестве амплитудных объектов могут быть использованы круглое или квадратное отверстия, щель, кольцевая диафрагма, зонная пластинка и др. К числу фазовых транспарантов можно отнести собирающую, рассеивающую и цилиндрическую линзы, случайный рассеивающий экран.

Известно, что вид картины дифракции можно охарактеризовать с помощью числа Френеля:

$$F^{\#} = \frac{D^2}{\lambda l}, \quad (4)$$

где D – апертура, λ – длина волны, l – расстояние от плоскости объекта до плоскости регистрации. При $F^{\#} \geq 1$ используется приближение Френеля, при $F^{\#} \ll 1$ – приближение Фраунгофера. Интересным фактом является инвариантность числа Френеля относительно произведения λl . Это позволяет получать одинаковые идентичные распределения интенсивностей, уменьшив в определенное число раз длину волны и увеличив в это же число раз расстояние l [1]. Максимальное расстояние, на котором может быть рассчитано распределение волнового поля методом распространения углового спектра без искажений при равных размерах пикселя в плоскости объекта и в плоскости регистрации, может быть определено как:

$$l_{\max} = \frac{\Delta x D}{\lambda}, \quad (5)$$

где D – апертура, λ – длина волны, Δx – размер пикселя.

На рис. 1 представлены примеры продольных распределений интенсивности за щелью, круглым и квадратным отверстиями. Использованные параметры для расчета: $\lambda = 300$ мкм, $\Delta x = 0,3$ мм, $D = 38,4$ мм. Дифракция на резких границах отверстия приводит к образованию минимумов и максимумов в продольном распределении интенсивности электромагнитного поля, которые по мере удаления от объекта достигают оптической оси, где начинают пересекаться, если границы расположены симметрично. В месте пересечения дифрагировавшие на краях волны интерферируют, образуя продолговатые пятна, аналогичные продольным спеклам. В случае фазовых неоднородностей на объекте, к ним примешивается еще и спекл-структура, которая начинает доминировать при разбросе фазовых величин более 2π . Однако изначально их появление вызвано только дифракцией на резких границах отверстия.

На рис. 2 показано продольное распределение интенсивности за круглой диафрагмой, диаметр которой 9,6 мм, (что в четыре раза меньше чем нижняя диафрагма на рис. 1), $\lambda = 300$ мкм, $\Delta x = 0,3$ мм. Удалось проследить плавное изменение поперечной структуры волнового поля: по мере распространения излучения вдоль оптической оси происходит его постепенная фокусировка, сопровождаемая уменьшением числа поперечных максимумов. В итоге остается лишь один, главный максимум, обладающий максимальной интенсивностью в районе $F^{\#} \approx 4$ для круглой апертуры и чуть меньшей для квадратной. На этом расстоянии

пинхол-камера обладает наилучшим разрешением [2]. На рис. 3 представлены поперечные распределения интенсивности в трех максимумах продольной дифракционной картины, изображенной на рис. 2.

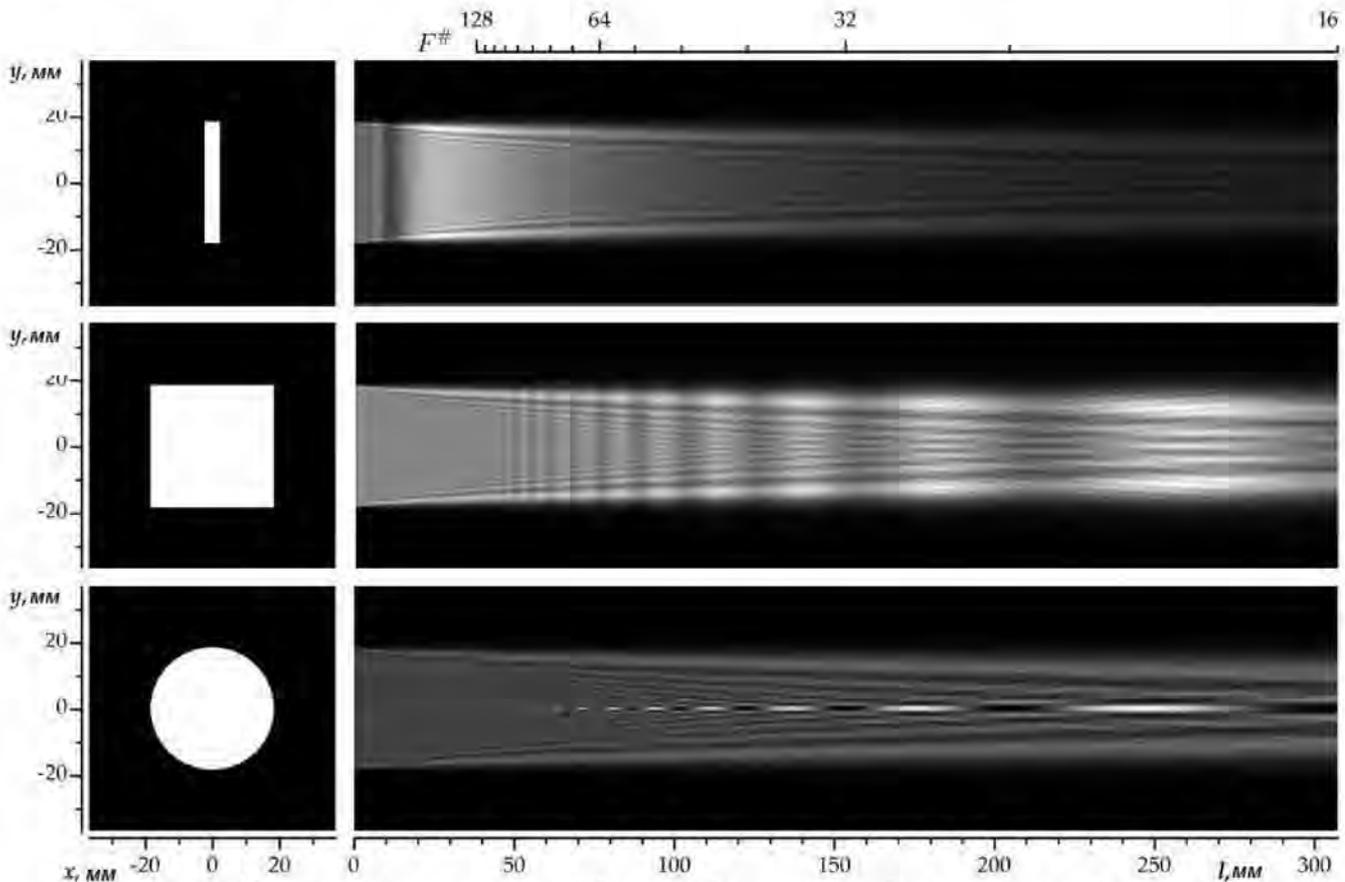


Рис. 1. Исходные амплитудные объекты (слева) и продольные распределения интенсивности дифрагировавшего на них излучения (справа)



Рис. 2. Продольное распределение интенсивности за круглой диафрагмой, диаметр которой в четыре раза меньше исходной (рис. 1)

Таким образом, дифракция на резких границах отверстия приводит к образованию минимумов и максимумов в продольном распределении интенсивности электромагнитного поля, которые по мере удаления от объекта достигают оптической оси, где начинают пересекаться, если границы расположены симметрично. По мере распространения излучения вдоль оптической оси происходит его небольшая фокусировка, сопровождаемая уменьшением числа поперечных максимумов.

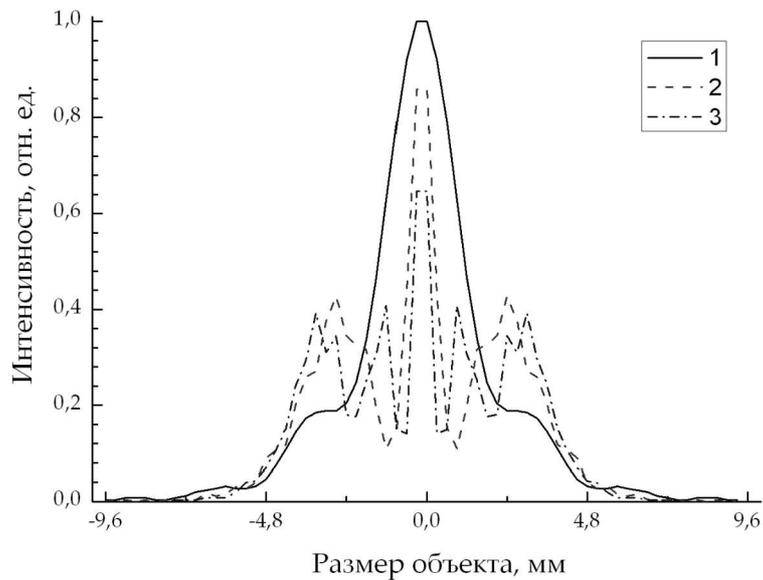
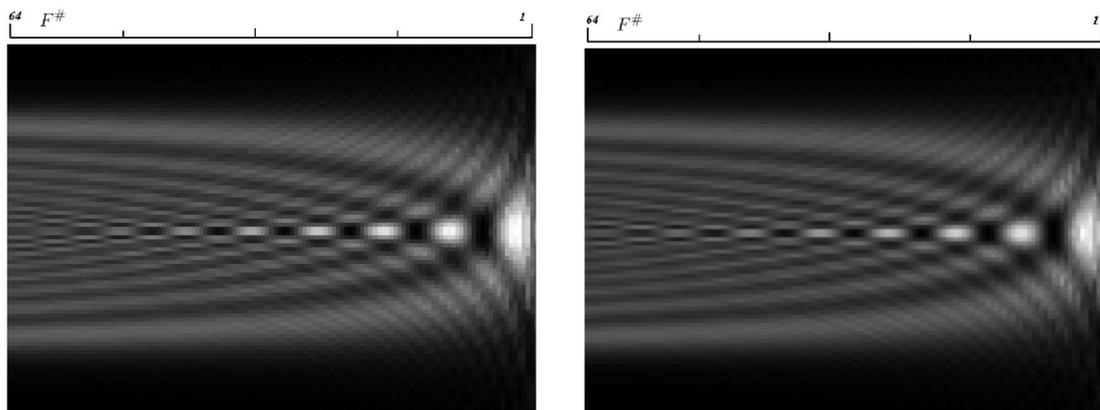


Рис. 3. Поперечные распределения интенсивности в трех максимумах:
 1 – главный максимум, на границе зоны Френеля и Фраунгофера;
 2 – стоящий перед ним максимум; 3 – и т. д.

Моделирование и исследование продольного распределения интенсивности за круглой диафрагмой в видимом и терагерцовом диапазонах

В качестве амплитудного объекта для исследования была выбрана круглая диафрагма. В разработанном программном обеспечении проводилось моделирование продольных распределений интенсивности за круглым отверстием. На рис. 4 представлены результаты моделирования для видимого и терагерцового диапазона. Продольные распределения строились для объектов, размеры которых составляют 64x64, 128x128, 256x256 и 512x512 пикселя. Интервал между соседними плоскостями выбирался линейно по числам Френеля. Таким образом, удалось компактно представить результаты расчета для всей области дифракции Френеля.



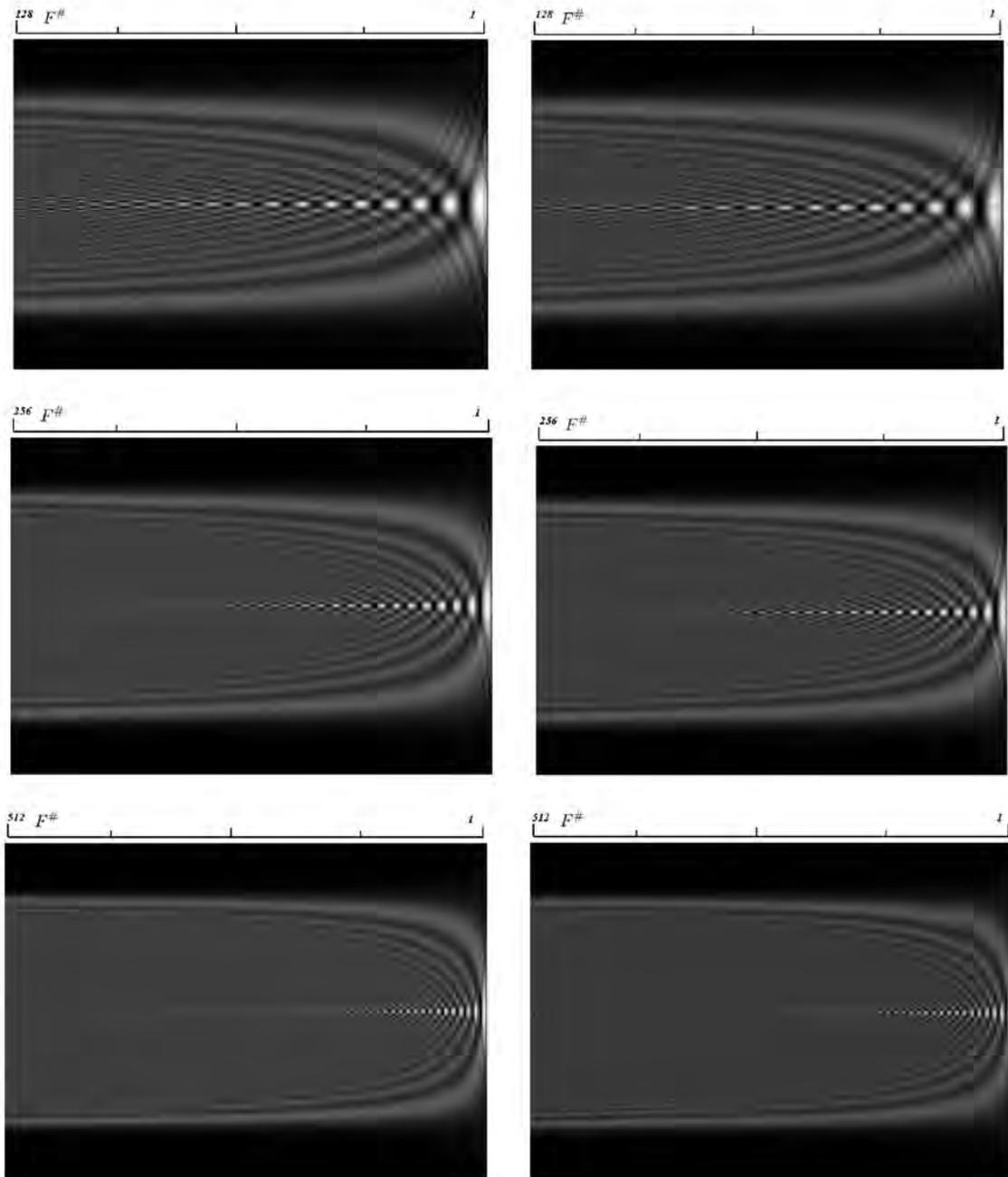


Рис. 4. Результаты моделирования продольного распределения интенсивности. Правая колонка – видимый диапазон ($\lambda = 600$ нм); левая – терагерцовый ($\lambda = 300$ мкм)

Продольные распределения при использовании излучения видимого и терагерцового диапазонов являются практически идентичными. Несущественные различия обусловлены нарушением параксиального приближения в терагерцовом диапазоне, однако они не превышают 3% [3]. Можно заметить увеличение количества максимумов интенсивности с увеличением количества пикселей, приходящихся на апертуру объекта. Удалось проследить, что зависимость количества максимумов интенсивности от количества пикселей линейна и может быть описана следующим образом:

$$Q_{\max} = \frac{N_{\text{pixels}}}{8}, \quad (6)$$

где Q_{\max} – количество максимумов интенсивности, N_{pixels} – количество пикселей. Таким образом, при дифракции на круглой апертуре главный максимум может быть уже построен, если на диаметр апертуры D приходится 8 пикселей.

На рис. 5 представлено продольное распределение интенсивности для фазового объекта. В качестве фазового объекта была взята собирающая линза. Изображение представлено в логарифмическом масштабе и откорректировано по гамме $\gamma = 0,25$ ввиду большого различия в интенсивностях в фокусе и на периферии. Продемонстрировано возможное применение разработанного программного обеспечения для дальнейшего исследования фазовых объектов.

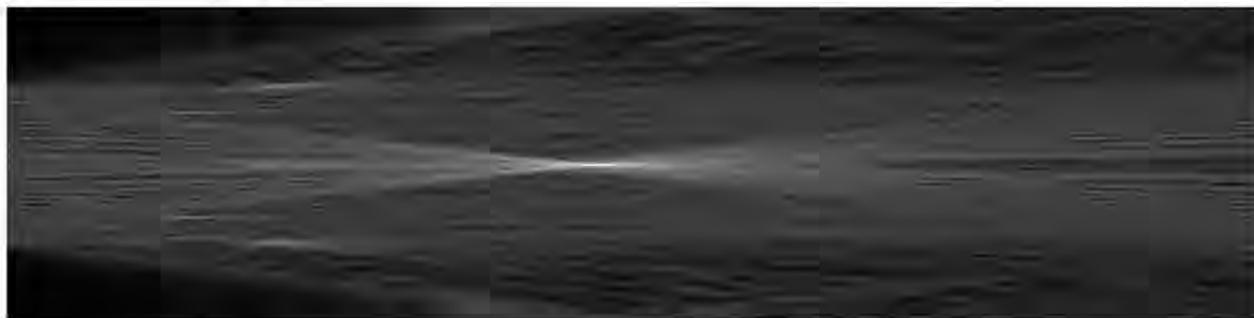


Рис. 5. Продольное распределение интенсивности для фазового объекта

Заключение

В ходе выполнения работ по проекту были выявлены и исследованы следующие особенности продольных распределений интенсивности для круглой диафрагмы видимого и терагерцового диапазонов излучения:

- число разрешенных максимумов зависит от числа точек, приходящихся на диафрагму;
- при уменьшении размера апертуры происходит постепенная фокусировка волнового поля, сопровождаемая уменьшением числа поперечных максимумов;
- удалось показать, что зависимость количества максимумов интенсивности от количества пикселей линейна.

Также продемонстрирована возможность исследования продольных распределений интенсивности (в том числе для фазовых объектов). Их изучение обеспечит более глубокое понимание явления дифракции и его свойств и найдет применение при развитии новых методов голографии и голографической интерферометрии. Рассмотрение особенностей продольной структуры дифрагировавшего на объекте электромагнитного поля позволяет определить наилучшие условия для восстановления оптических характеристик объекта. Кроме этого, изучение продольных распределений интенсивности дает возможность разработать новые более эффективные фазовые анализаторы и внедрить их в образовательный процесс в виде виртуальных лабораторных работ.

Публикации

1. Petrov N.V., Galiaskarov A.N., Nikolaeva T.Yu., Bespalov V.G. The features of optimization of a phase retrieval technique in THz frequency range // V International conference on Speckle Metrology (10–12 September, 2012). Proceedings of SPIE. 2012. Vol. 8413. P. 84131T.

Литература

1. Петров Н., Беспалов В., Волков М. Восстановление волнового фронта при безопорной цифровой ПЗС-регистрации мультиспектральных спекл-картин // Наносистемы: Физика, химия, математика. 2011. Т. 2. № 1. С. 82–90.
2. Alonso M.A. Wigner functions in optics: describing beams as ray bundles and pulses as particle ensembles // Advances in Optics and Photonics, 2011. Vol. 3. Issue 4. P. 272–365.
3. Petrov N.V., Bespalov V.G., Volkov M.V. Phase retrieval of THz radiation using set of 2D spatial intensity measurements with different wavelengths // Proceedings of SPIE. 2012. Vol. 8281. P. 82810J.
4. Harvey J.E., Forgham J.L. The spot of Arago: New relevance for an old phenomenon // American Journal of Physics. 1984. Vol. 55. № 1. P. 243–247.



Перетягин Владимир Сергеевич
Факультет оптико-информационных систем и технологий
Кафедра оптико-электронных приборов и систем
E-mail: peretyagin@mail.ru

РАЗРАБОТКА ИСТОЧНИКА ИЗЛУЧЕНИЯ ВИДИМОГО ДИАПАЗОНА ДЛЯ ОПТИКО-ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ ЦВЕТОВОГО АНАЛИЗА ОБЪЕКТОВ

В.С. Перетягин

Научный руководитель – доцент А.Н. Чертов

Цель и задачи работы

Цель работы – разработка источника оптического излучения видимого диапазона для использования в цветowych оптико-электронных системах контроля объектов, а также поиск путей по оптимизации параметров его цветопередачи.

Для достижения указанной цели необходимо решить следующие задачи:

– изучить требования к источникам излучения, используемым при решении задач колориметрии;

– провести критический анализ выбранных источников;

– создать математическую модель источника света;

– провести энергетический расчет;

– разработать электрическую схему питания и управления источником света;

– разработать конструкцию источника света;

– провести расчета надежности;

– создать экспериментальный макет многокомпонентного источника света.

В работе применены следующие методы исследования:

– элементы классической теории цвета и его измерения, в том числе модели представления и методы преобразования цвета;

– компьютерные методы моделирования многоэлементных источников и формируемой ими в зоне анализа цветовой картины;

– методы теории оптических измерений, в том числе требований к созданию схем и методик оптических измерений согласно поставленным задачам.

Основные достигнутые результаты

На сегодняшний день существует несколько типов источников излучения, которые можно использовать для решения задач цветовой картины. Однако в большинстве областей цветовой контроль до сих пор не автоматизирован. Одной из ключевых причин сложившейся ситуации является недостаточная изученность как процессов анализа цветовой картины, так и особенностей ее формирования [1]. Таким образом, актуальным является разработка источника излучения видимого диапазона для использования в цветowych оптико-электронных системах контроля объектов. В настоящей работе приведены диаграммы пространственного распределения освещенности и цветowych картины источника оптического излучения в зоне анализа, разработан и исследован физический макет источника излучения, обеспечивающего равномерную засветку зоны анализа.

Освещенностью называют физическую величину, определяемую отношением светового потока, падающего на малый угол поверхности, содержащий рассматриваемую точку, к площади этого участка [2].

$$E(r, \theta, \varphi) = \frac{I(\theta, \varphi) \cos \theta}{r^2}, \quad (1)$$

где r – расстояние от источника до зоны анализа, θ – угол падения, $I(\theta, \varphi)$ – сила света по направлению к зоне анализа.

Данное уравнения описывает идеальный случай, когда форма распределения освещенности имеет вид «колокола». Однако действительное (реальное) излучение светодиода имеет сложные по форме пространственные характеристики, которые различаются в зависимости от способа производства (изготовления), формы линзы, наличия люминофора и т. д. Поэтому для представления таких форм были написаны (разработаны) два уравнения.

Для классического случая, когда распределение освещенности в зоне анализа имеет форму «колокола», была написана функция (2), за основу которой была взята модель Ламбертовского излучения:

$$E(x, y) = \sum_n \sum_k E_0 \cos^2 \left[\arctg \left[\frac{\sqrt{(x-na)^2 + (y-ka)^2}}{z} \right] \right], \quad (2)$$

где n и k – числа элементов в матрице, E_0 – константа, z – расстояние от источника до зоны анализа, a – расстояние между излучающими элементами.

При разработке данной модели спектральные и энергетические особенности отдельных элементов матрицы не учитывались и считались одинаковыми. С использованием функции (2) были построены модели пространственного распределения освещенности зоны анализа для точечного источника (рис. 1а, 1б) и матрицы, образованной из точечных источников (рис. 1в, 1г). Данные модели были созданы в среде MathCad.

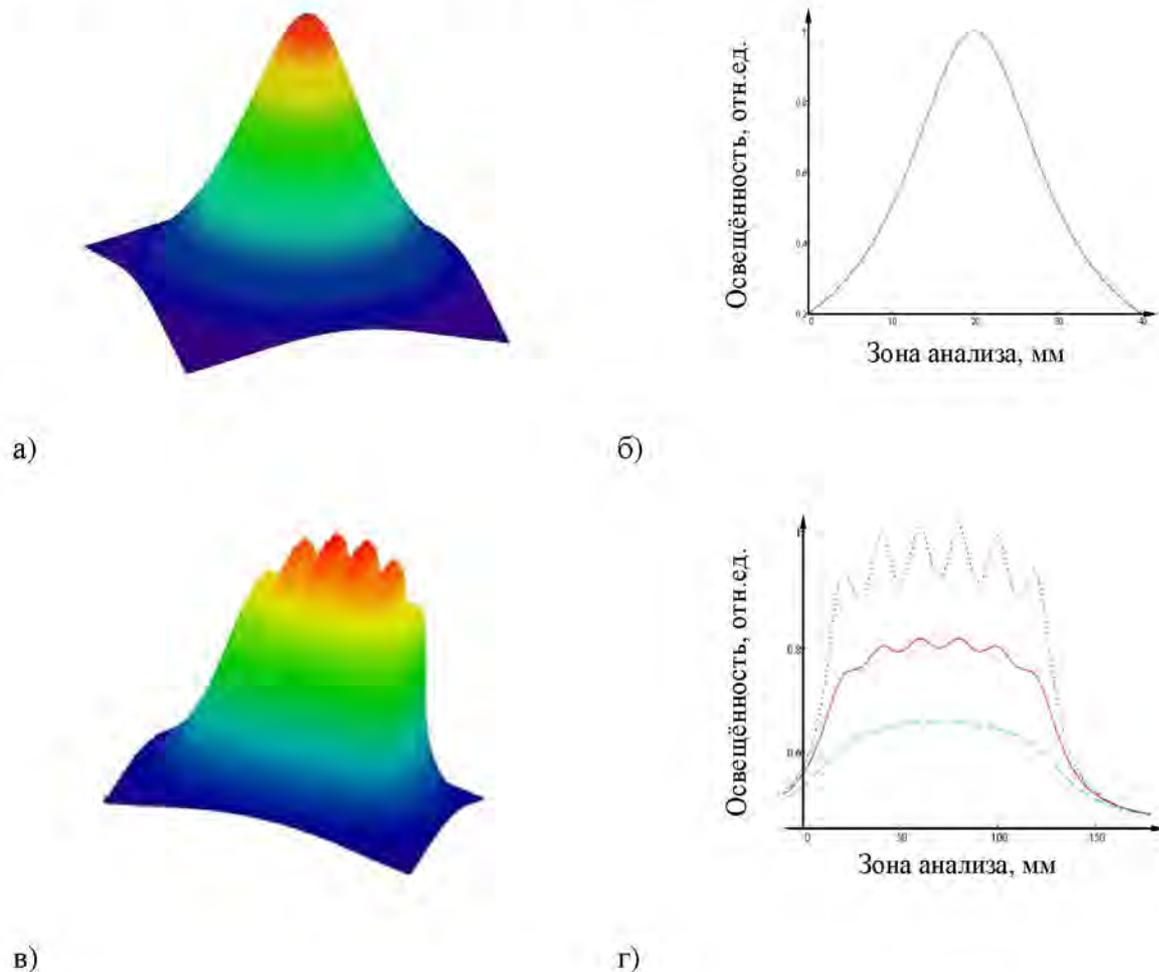


Рис. 1. Диаграммы пространственного распределения освещенности, образованные функцией Ламберта

Для более наглядного представления пространственного распределения освещенности трехмерных моделей были построены сечения в нескольких плоскостях (рис. 1б, 1г). Из рис. 1г

видно, что при суммировании излучения, образованного несколькими точечными источниками одинаковой мощности, в центральной части явно выражен рост освещенности над граничными значениями, что не соответствует поставленной цели.

Чтобы учесть провал, который образуется в центре излучения, была разработана аппроксимирующая функция косинусов:

$$E_{од}(x, y) = \frac{I(x, y)}{z^2},$$

где $I(x, y)$ – сила света, образованная функциями косинуса:

$$I(x, y) = \begin{cases} 0,95 - 0,05 \cdot \cos(12 \cdot \arctg[\frac{\sqrt{(x-na)^2 + (y-ka)^2}}{z}]) \\ \cos(\arctg[\frac{\sqrt{(x-na)^2 + (y-ka)^2}}{z}] - 15 \frac{\pi}{180}) \\ \cos(\arctg[\frac{\sqrt{(x-na)^2 + (y-ka)^2}}{z}] + 15 \frac{\pi}{180}) \end{cases}$$

Уравнение освещенности для источника, состоящего из $n \times k$ излучающих элементов, имеет вид:

$$E(x, y) = \sum_n \sum_k E_{од}(x-na, y-na), \quad (3)$$

где n и k – число элементов в матрице, $E_{од}$ – отношение силы света к квадрату расстояния от источника до зоны анализа, a – расстояние между излучателями (светодиодами).

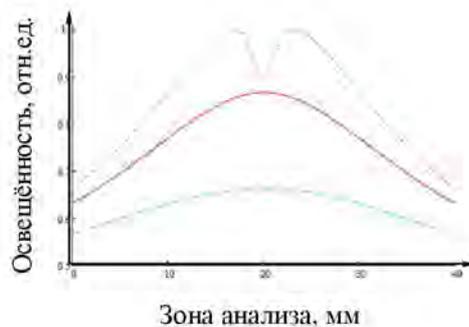
Результатом решения уравнения (3) являются модели для точечного источника (рис. 2а, 2б) и матрицы, образованной из точечных источников (рис. 2в, 2г). При разработке данной модели также, как и для классического случая, спектральные и энергетические особенности отдельных элементов матрицы считались одинаковыми и не учитывались.

Результаты моделирования, представленные на рис. 2в, 2г, похожи на результаты для источника, образованного функцией Ламберта: при суммировании излучения от нескольких точечных источников одинаковой мощности распределение освещенности имеет не равномерный характер по всей освещаемой поверхности.

Как было показано выше, данные модели были построены без учета спектральных и энергетических особенностей отдельных элементов излучающей матрицы. Поэтому для правильного моделирования зоны равно-энергетической засветки и цветовой картины необходимо в уравнения (1) и (2) внести поправочные коэффициенты, учитывающие спектральные и энергетические особенности каждого излучающего элемента в матрице.



а



б

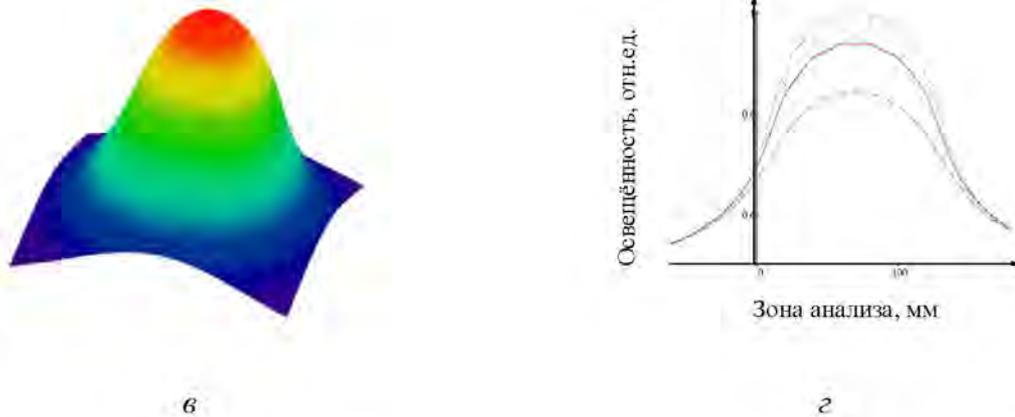


Рис. 2. Диаграммы пространственного распределения освещенности, образованные функцией косинуса

Для получения цветовой картины необходимо вывести уравнения для координат цветности трех основных цветов: красного, зеленого и синего. Из теории колориметрии известно, что выражения для определения цветовых составляющих освещенности экрана $R(x,y)$, $G(x,y)$ и $B(x,y)$ от многоэлементного RGB источника имеют следующий вид:

$$\begin{cases} R(x,y) = r(x,y) + a_1 g(x,y) \\ G(x,y) = g(x,y) + a_2 r(x,y) + a_3 b(x,y), \\ B(x,y) = b(x,y) + a_4 g(x,y) \end{cases} \quad (4)$$

где $r(x,y) = \sum_i E_{R_i}(x,y)$ – суммарное распределение освещенности от всех источников света красного цвета; $g(x,y) = \sum_i E_{G_i}(x,y)$ – суммарное распределение освещенности от всех источников света зеленого цвета; $b(x,y) = \sum_i E_{B_i}(x,y)$ – суммарное распределение освещенности от всех источников света синего цвета; a_1 , a_2 , a_3 и a_4 – коэффициенты влияния переналожения спектров светодиодных источников света красного, зеленого и синего цвета на цветовые составляющие $R(x,y)$, $G(x,y)$, $B(x,y)$.

Результатом моделирования являются цветные картины от RGB-источника света с регулярным (рис. 3) и с сотовым расположением цветов (рис. 4). Они показывают, как формируется итоговая засветка экрана белым светом (при этом цвета рассчитывались без применения поправочных коэффициентов к величинам напряжений, питающих светодиодные источники света). Модели цветовой картины зоны анализа, представленные на рис. 3а, 3б, 4а, 4в, были построены в среде MatLAB.

Цветовые картины зоны анализа (рис. 3) построены для источника, включающего 25 элементов, расстояние между которыми составляет 5 мм, а на рис. 4 – для источника, включающего 33 элемента с расстояниями между ними 5 мм. Расстояние между источником и зоной анализа для обоих случаев составляет 100 мм.

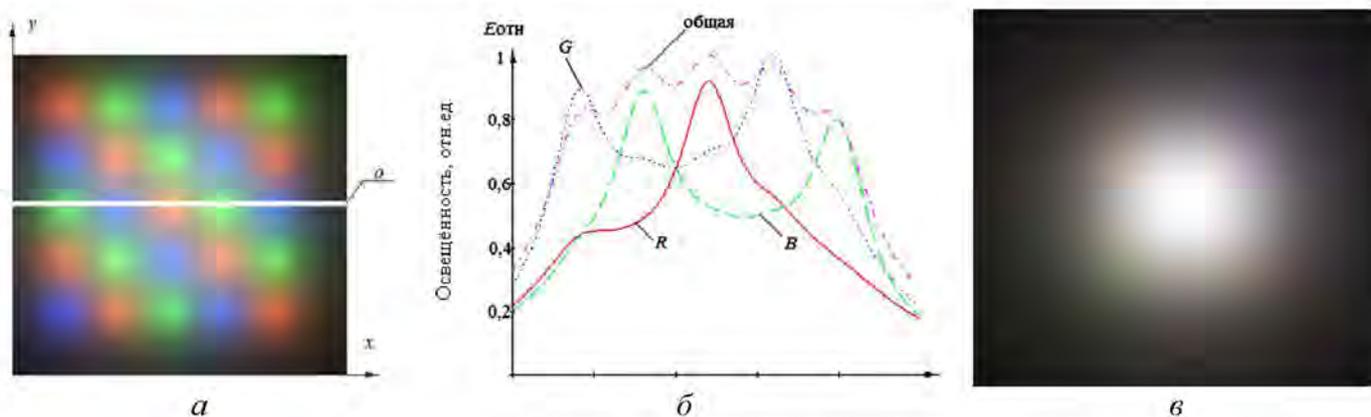


Рис. 3. Цветовые картины зоны анализа, создаваемые источником с регулярной структурой: а – сечение освещения зоны анализа; б – общая освещенность экрана без поправочных коэффициентов; в – цветная картина от RGB-источника с регулярной структурой

Из рис. 3в видно, что при смешивании трех хроматических унитарных цветов в центральной части зоны анализа образуется белый свет. Это соответствует теории аддитивного смешивания. Однако из-за того что энергетические особенности каждого излучателя расположенного на матрице не были учтены, на краях зоны анализа заметны различные цветовые оттенки. То есть данная модель не формирует равно-энергетическую засветку зоны анализа, а этот результат не подходит для решения поставленных задач. Рис. 3б наглядно демонстрирует данную проблему. На нем изображена освещенность каждого цветового канала и общая, образованная ими.

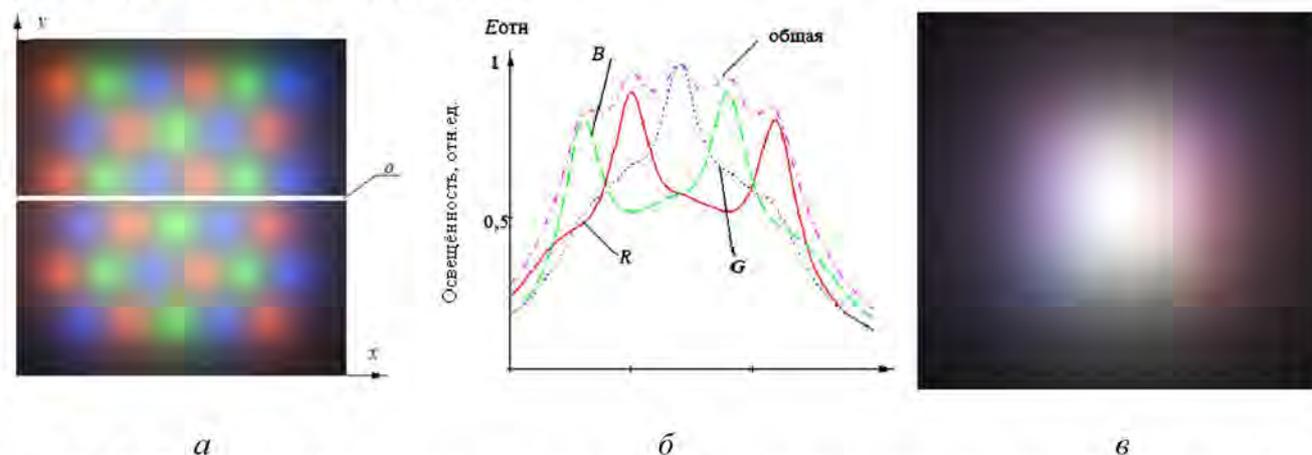


Рис. 4. Цветовые картины зоны анализа, создаваемые источником сотовой структурой

Рис. 4 аналогично рис. 3 показывает все недочеты моделирования. Однако сотовая структура источника создает большую зону цветовых оттенков по краям зоны анализа, чем регулярная. Это говорит о более сложной энергетической особенности источника такого типа.

Модели являлись базовым инструментом при разработке физического макета источника, обеспечивающего равномерную засветку зоны анализа. Поэтому по итогу проделанного первичного моделирования, было решено, что для создания равно-энергетической засветки зоны анализа будут рассматриваться (разрабатываться) более подробно матрицы с сотовой и регулярной структурой, поскольку при смешивании трех цветов они выдают белый цвет в зоне анализа.

Для создания равномерной засветки (величина энергетических «провалов» по поверхности экрана не должна превышать 2-3 %) зоны анализа в данной работе рассматривались два примера расположения светодиодных источников света красного, зеленого и синего цветов по поверхности излучающей площадки многоэлементного цветного источника излучения, представленные на рис. 5. При этом зона анализа находится на расстоянии 100 мм от светодиодной матрицы размером $7 \times 5 \text{ см}^2$, содержащей 81 светодиодный источник света красного, зеленого и синего цветов, расположенных по сотовой схеме (рис. 5а),

или светодиодной матрицы такого же размера, содержащей 63 светодиода источника света красного, зеленого и синего цветов, расположенных по регулярной схеме (рис. 5б). При этом расстояние между соседними источниками составляет 5 мм.

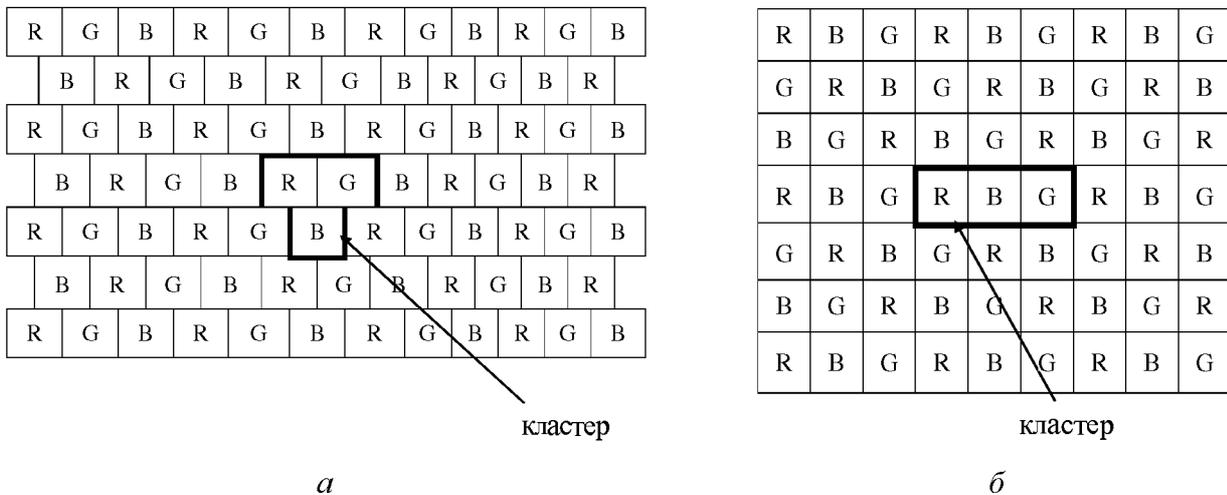


Рис. 5. Примеры расположения светодиодных источников света:
а – сотовая структура; б – регулярная

Для цветовых составляющих освещенности зоны анализа $R(x,y)$, $G(x,y)$ и $B(x,y)$ от многоэлементного RGB источника были написаны следующие уравнения, учитывающие поправочные коэффициенты:

$$\begin{cases} R(x, y) = (r(x, y) + a_1 g(x, y)) \cdot R \\ G(x, y) = (g(x, y) + a_2 r(x, y) + a_3 b(x, y)) \cdot G \\ B(x, y) = (b(x, y) + a_4 g(x, y)) \cdot B \end{cases}$$

где R , G и B – координаты цвета (поправочные коэффициенты), рассчитанные с использованием ГОСТированных колориметрических соотношений.

Поправочные коэффициенты для трех цветов рассчитываются по выражению:

$$k(x, y, z) = \begin{cases} \frac{\sum_i w(\lambda) \cdot \bar{x}(\lambda)}{\sum_i w(\lambda) \cdot \bar{x}(\lambda) + \sum_i w(\lambda) \cdot \bar{y}(\lambda) + \sum_i w(\lambda) \cdot \bar{z}(\lambda)} \\ \frac{\sum_i w(\lambda) \cdot \bar{y}(\lambda)}{\sum_i w(\lambda) \cdot \bar{x}(\lambda) + \sum_i w(\lambda) \cdot \bar{y}(\lambda) + \sum_i w(\lambda) \cdot \bar{z}(\lambda)} \\ \frac{\sum_i w(\lambda) \cdot \bar{z}(\lambda)}{\sum_i w(\lambda) \cdot \bar{x}(\lambda) + \sum_i w(\lambda) \cdot \bar{y}(\lambda) + \sum_i w(\lambda) \cdot \bar{z}(\lambda)} \end{cases}$$

В результате внесенных поправок в уравнения (3) и (4) были получены модели пространственного распределения освещенности, и модели цветных картин в зоне анализа для случаев, представленных на рис. 5. Модели, представленные на рис. 6б, 6в, 7б, 7в были построенные в среде MatLAB.

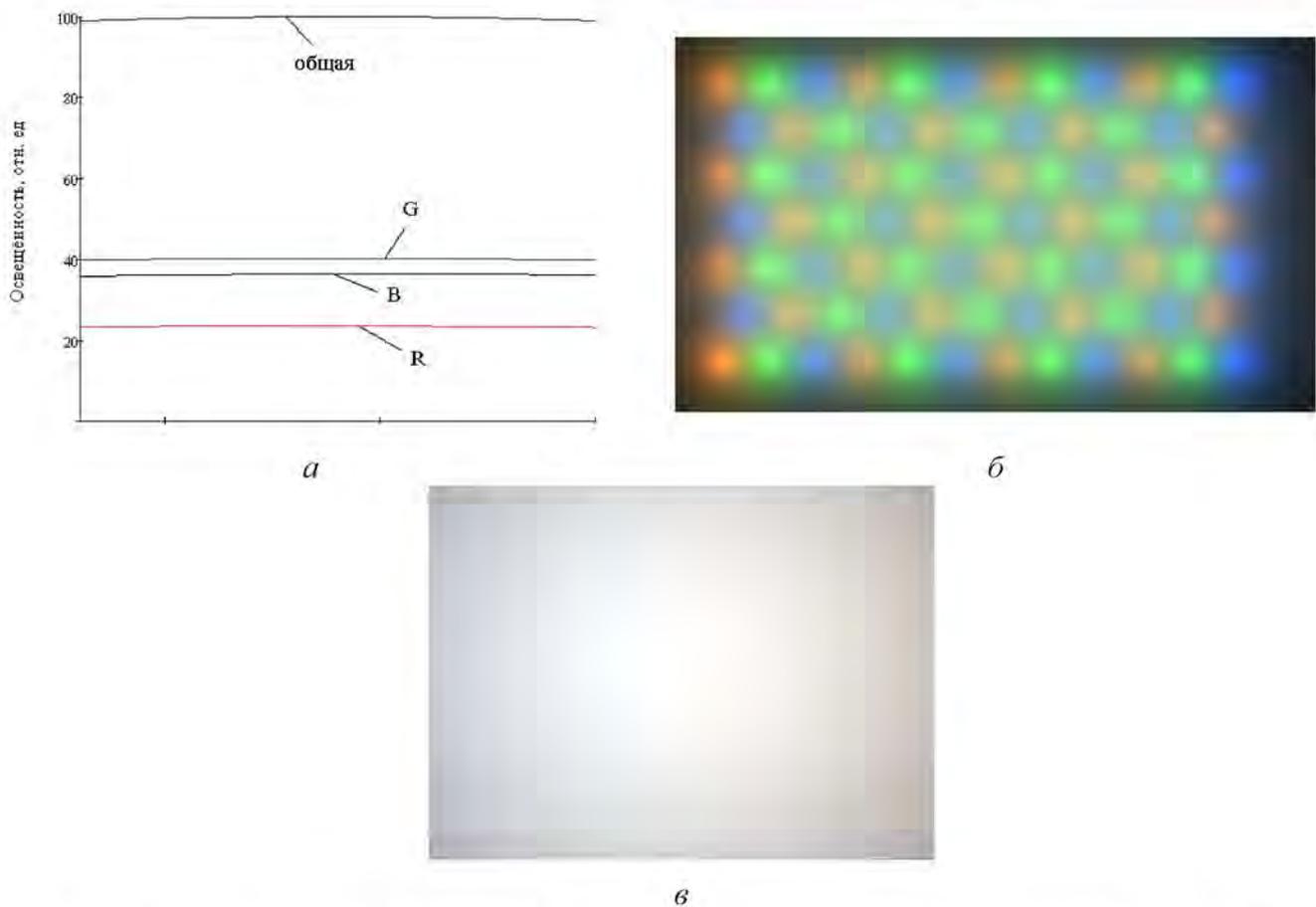


Рис. 6. Модели освещенности, создаваемые источником света с сотовой структурой: а – диаграмма пространственного распределения освещенности; б – сечение освещения зоны анализа; в – цветная картина от RGB-источника

Из рис. 6а видно, что при добавлении поправочных коэффициентов пространственное распределение освещенности по зоне анализа имеет равномерный характер. Изображение на рис. 6в показывает, что при смешивании цветов излучателей с правильно рассчитанной энергетикой вся область зоны анализа имеет белый цвет.

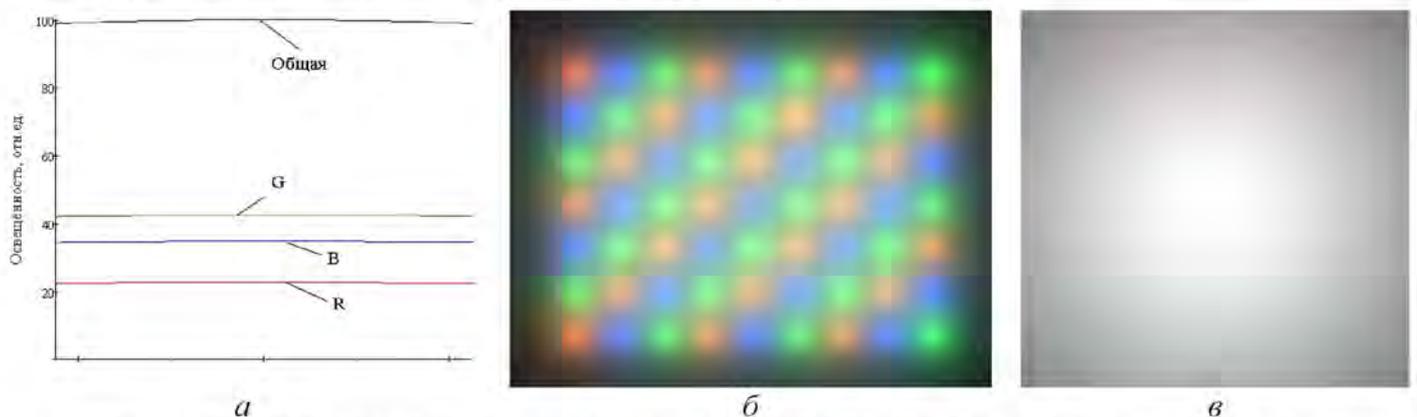


Рис. 7. Модели освещенности, создаваемые источником света с регулярной структурой: а – диаграмма пространственного распределения освещенности; б – сечение освещения зоны анализа; в – цветная картина от RGB-источника

Результаты, полученные при моделировании источника с регулярной структурой, аналогичны результатам моделирования источника с сотовой структурой.

Итак, для описания реального пространственного распределения освещенности источника излучения были разработаны математические модели, представленные уравнениями (1) и (2). На их основе разработаны модели цветных картин, образующихся в зоне анализа от

многокомпонентных источников излучения видимого диапазона регулярной и сотовой многокомпонентной структуры.

Основным назначением разрабатываемого многокомпонентного светодиодного источника с сотовой структурой является реализация равномерной энергетической засветки экрана с возможностью изменения цвета засветки зоны анализа в широком диапазоне цветов посредством управления каждым светодиодом в источнике.

Разрабатываемый светодиодный источник предназначен для промышленного применения, например для оценки по цвету пищевой, текстильной, горнодобывающей или строительной продукции.

Конструкция источника представлена на рис. 8 и представляет собой излучающую матрицу размером 70×36 мм, образованную 28 красными (7), 28 синими (8) и 25 зелеными (9) светодиодами, закрепленными винтами в корпус.

Каждый светодиод управляется компьютером через микроконтроллеры TLC5940NT и платформу Arduino UNO R3. Светодиодный источник подключается к блоку управления через разъем IDC-30MS (BH-30) (5).

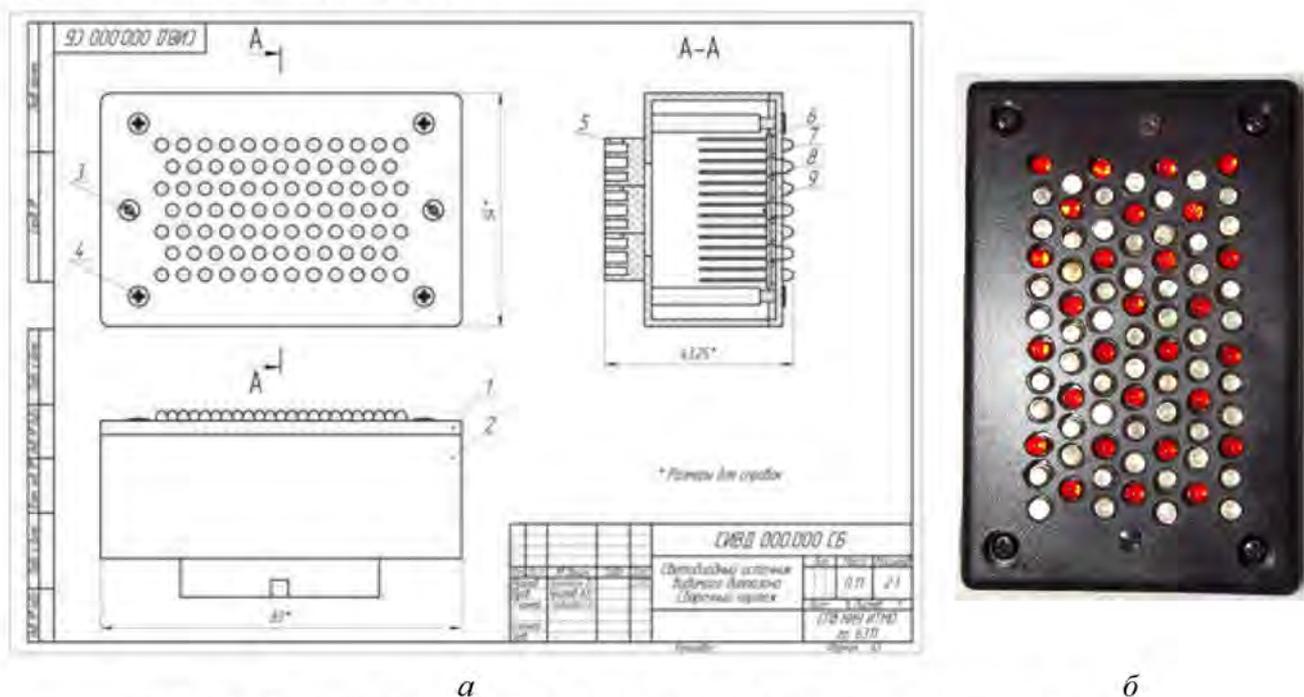


Рис. 8. Многокомпонентный светодиодный источник видимого диапазона

Для исследования характеристик светодиода была собрана установка (рис. 9).

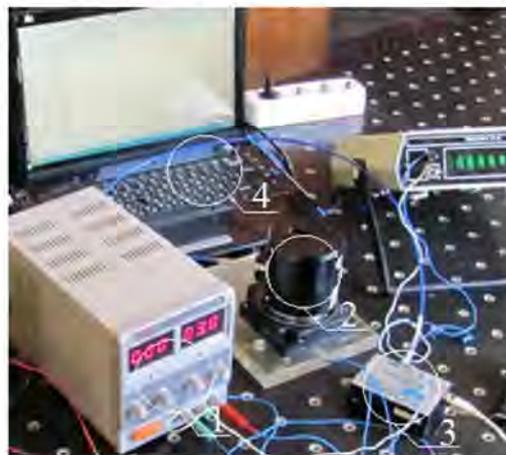


Рис. 9. Экспериментальная установка для определения зависимости силы света светодиода от подаваемого напряжения: 1 – блок питания; 2 – интегрирующая сфера фирмы «Ocean Optics»; 3 – спектрометр фирмы «Ocean Optics»; 4 – персональный компьютер

По данным, полученным и обработанным компьютером, для трех видов светодиодов была построена общая, усредненная зависимость силы излучения от напряжения (рис. 10).

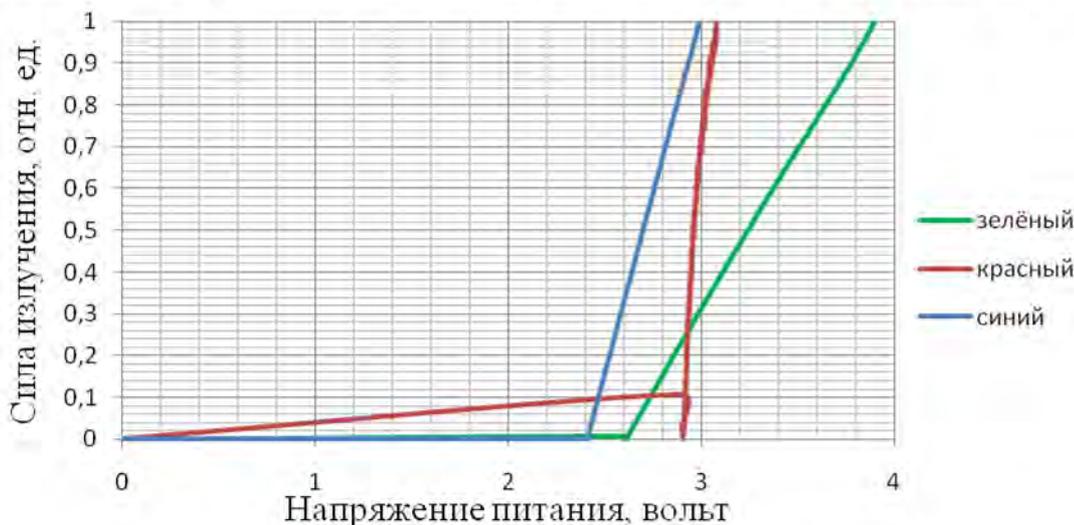


Рис. 10. Усредненные зависимости силы излучения от напряжения, подаваемого на светодиод

Из этого рисунка видно, что усредненная ватт-вольтная характеристика красных светодиодов имеет резкий спад и скачок при значении напряжения питания примерно 2,85 В, по сравнению синими и зелеными светодиодами, которые зажигаются с 2,4 В (синие) и 2,6 В (зеленые). Для исследования индикатрисы излучения светодиода была разработана установка, представленная на рис. 11.



Рис. 11. Экспериментальная установка для исследования индикатрисы реального излучения светодиода: 1 – спектрометр фирмы «Ocean Optics»; 2 – блок питания; 3 – исследуемый светодиод; 4 – моторизованная подвижка фирмы «Standa»; 5 – персональный компьютер

Данные, полученные компьютером, обрабатывались в системе MatLAB. В результате были построены трехмерные модели индикатрисы, представленные на рис. 12. Из рисунка видно, что индикатриса, создаваемая красными светодиодами, имеет неравномерную форму (структуру), то есть образует «перчатку». Это может быть связано со способом их производства, а именно с линзой, которая фокусирует излучение. Зеленые светодиоды, помимо неравномерного освещения, имеют еще и искаженную траекторию освещения. Причины аналогичны. Индикатриса, создаваемая синими светодиодами, в отличие от предыдущих моделей, имеет более равномерный и направленный вид.

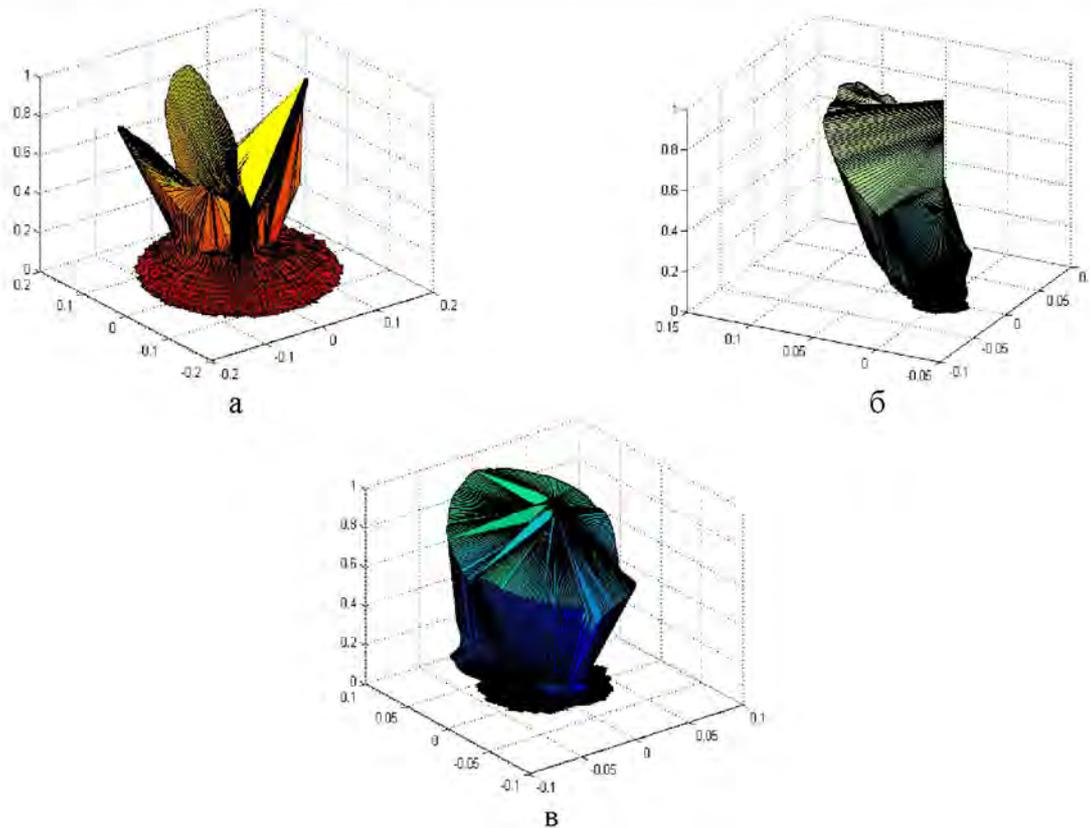


Рис. 12. Трехмерные модели индикатрис: а – красного светодиода марки «L-934SRC-J»; б – зеленого светодиода марки «BL-L324PGC»; в – синего светодиода марки «HB3b-448ABD»

Полученные результаты подтверждают, что данные модели можно аппроксимировать выражениями (2) и (3), а именно синие и зеленые светодиоды – моделью Ламберта («классический» случай), а красные – функциями косинуса.

Выбранные в результате эксперимента, связанного с исследованием индикатрис реального излучения, светодиоды использовались для создания макета многокомпонентного источника света, который в свою очередь проходил исследования, связанные с пространственным распределением освещенности (при этом освещалась зона размером 160×120мм). Для этого была разработана установка, представленная на рис. 13.



Рис. 13. Экспериментальная установка для определения степени освещения зоны анализа: 1 – макет многокомпонентного источника излучения; 2 – блок управления; 3 – персональный компьютер; 4 – приемник оптического излучения фирма «ТКА»; 5 – люксметр фирма «ТКА»

По окончании эксперимента значения освещения, полученные для разработанного макета источника, были занесены в Табл.

Таблица

Распределение излучения по исследуемой поверхности

Расположение приемника излучения, мм	0	40	80	120	160
0	580,3лк	853,1лк	923,8лк	757,4лк	494,8лк
60	630,1лк	861,6лк	951,3лк	821,3лк	597,6лк
120	494,5лк	729,3лк	851,8лк	795,5лк	443,6лк

Из полученных результатов следует, что при освещении зоны анализа, (экрана) размером 160×120 мм, центральная область освещаемой зоны имеет «примерно» одинаковую освещенность, так как прибор, которым проводилось измерение (люксметр фирмы ТКА) имеет погрешность 8 %. Также были получены спектральные и цветовые характеристики, представленные на рис. 14.

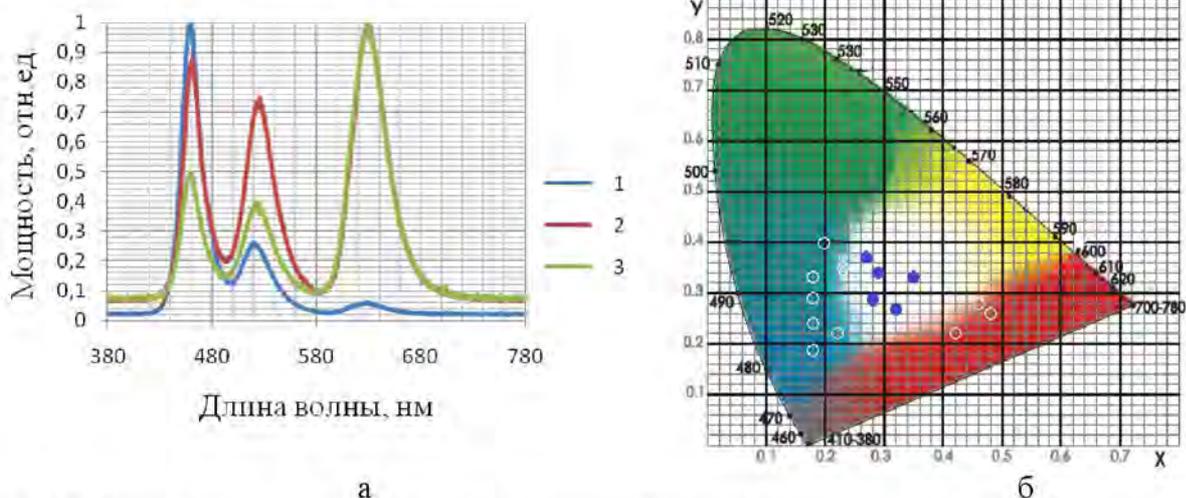


Рис. 14. Результаты экспериментальных исследований спектрального состава и «цветности» излучения узла освещения: а – спектральная характеристика; б – координаты цвета (локус)

На рис. 14а представлена спектральная характеристика излучения, образованного разработанным макетом источника света, которая измерялась в нескольких точках экрана. При этом экран был разделен на три равные области: первая и третья иллюстрируют спектральные характеристики, которые получаются по краям (справа и слева) освещенного экрана, а вторая – в центральной его области.

На рис. 14б – результаты исследования «цветности» излучения узла освещения. Измерения проводились аналогично. При этом видно, что не все значения, представленные на локусе, соответствуют белому цвету. Возможно, это связано с мощностью синих светодиодов, которая превышает мощности светодиодов другого типа.

Области возможного использования

Основной областью применения результатов проекта являются оптико-электронные приборы и комплексы цветового анализа промышленного назначения, в том числе автоматизированные. Также представленные результаты работы могут использоваться при разработке и контроле качества источников оптического излучения:

- ламповых;
- многоэлементных (линейных, круговых и т. д.) для высокоточных оптико-электронных измерительных систем;
- адаптивных (меняющих спектральные и цветовые характеристики), которые могут найти применение, например при цветовом анализе различных объектов.

Публикации

1. *Перетягин В.С.* Комплексное моделирование многокомпонентного источника излучения с управляемой цветностью // Сб. трудов VII Международной конференции молодых ученых и специалистов «Оптика-2011». Т. 1. СПб., 2011. С. 462–464.
2. *Перетягин В.С.* Об особенностях организации освещения рабочей зоны при решении задач цветового анализа // Сб. тезисов докладов конференции молодых ученых. Вып. 2: Труды молодых ученых. СПб., 2011. С. 11–12.
3. *Перетягин В.С.* Макетирование многоэлементного цветного источника излучения, создающего равномерную энергетическую засветку зоны анализа // Сб. тезисов докладов I Всероссийского конгресса молодых ученых. Вып. 2. 2012. С. 88.
4. *Горбунова Е.В., Перетягин В.С., Чертов А.Н.* Организация освещения рабочей зоны опико-электронных систем цветового анализа промышленного назначения // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. 2011. № 3 (73). С. 140.
5. *Chertov A.N., Gorbunova E.V., Korotaev V.V., Peretyagin V.S., Serikova M.G.* Simulation of the multicomponent radiation source with the required irradiance and color distribution on the flat illuminated surface (2012): <http://dx.doi.org/10.1117/12.922104>.

Литература

1. *Домасев М.В., Гнатюк С.П.* Цвет. Управление цветом, цветовые расчеты и измерения. – СПб.: Питер, 2009. – 224 с.
2. *Ишатиш Г.Г., Козлов В.В.* Источники оптического излучения. – СПб.: Политехника, 2009. – 415 с.



Попов Алексей Алексеевич
Факультет фотоники и оптоинформатики
Кафедра оптической физики и современного естествознания
Email: grumbleralex@gmail.com

НЕЛИНЕЙНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ В КРИСТАЛЛАХ С ГЛУБОКИМИ ПРИМЕСЯМИ

А.А. Попов

Научный руководитель – профессор Е.Ю. Перлин

Цели и задачи проекта

Целью проекта является исследование роли глубоких примесей в процессе предпробойного возбуждения широкозонных диэлектриков и полупроводников.

В рамках поставленной цели сформулированы следующие задачи работы:

- вычисление матричных элементов оператора взаимодействия электронов с полем электромагнитной волны;
- выбор основных каналов процессов второго порядка и вычисление составных матричных элементов процессов;
- получение аналитических выражений и численных оценок для вероятностей двухфотонных переходов «примесь – зона» и «зона – примесь»;
- расчет кинетики фотопереходов в двухзонной модели кристалла с одноуровневыми и двухуровневыми глубокими примесными центрами;

– оценка роли исследованных процессов в предпробойном возбуждении электронной системы кристалла.

Двухфотонные переходы «зона – примесь» и «примесь – зона»

Теория возмущений

Точное решение уравнения Шредингера может быть найдено лишь в сравнительно небольшом числе простейших случаев. Большинство задач квантовой механики приводит к слишком сложным уравнениям, которые не могут быть решены точным образом. Часто, однако, в условиях задачи фигурируют величины разного порядка; среди них могут оказаться малые величины, после пренебрежения которыми задача упрощается настолько, что появляется возможность найти точное ее решение. В таком случае первый шаг состоит в точном решении упрощенного варианта поставленной физической задачи, а второй – в приближенном вычислении поправок, обусловленных малыми членами, отброшенными в упрощенной задаче. Общий метод для вычисления этих поправок называется теорией возмущений.

Предположим, что гамильтониан данной физической системы имеет вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (1)$$

где \hat{V} представляет собой малую поправку (возмущение) к «невозмущенному» оператору \hat{H}_0 .

Задача теории возмущений для дискретного спектра может быть сформулирована следующим образом. Предполагается, что собственные функции $\psi_n^{(0)}$ и собственные значения оператора \hat{H}_0 известны, то есть известны точные решения уравнения:

$$\hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}. \quad (2)$$

Требуется найти приближенные решения уравнения:

$$\hat{H} \psi = (\hat{H}_0 + \hat{V}) \psi = E \psi, \quad (3)$$

то есть приближенные выражения для собственных функций ψ_n и значений E_n возмущенного оператора \hat{H} . Значения ψ_n и E_n ищутся в виде рядов:

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots, \quad (4)$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)} + \psi_n^{(2)} + \dots = \sum_m (c_m^{(0)} + c_m^{(1)} + c_m^{(2)} + \dots) \psi_m^{(0)}. \quad (5)$$

Одним из важнейших применений теории возмущений является вычисление вероятности перехода квантовых систем из одного состояния в другое. Рассмотрим случай переходов под действием периодического возмущения. Предположим, что система находится в i -м стационарном состоянии дискретного спектра. Возмущение будем рассматривать в виде:

$$\hat{V} = \hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{G} e^{i\omega t}, \quad (6)$$

где \hat{F} и \hat{G} – операторы, не зависящие от времени. Можно показать [1] что, вероятность перехода в течение единицы времени из состояния i в состояние f равна

$$W_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{if}|^2 \delta(E_f - E_i^{(0)} - \hbar\omega). \quad (7)$$

Она отлична от нуля только для переходов в состояния с энергией $E_f = E_i^{(0)} + \hbar\omega$. Выражение (7) соответствует первому приближению теории возмущений. Для второго приближения справедлива формула:

$$W_{if} = \frac{2\pi}{h} \left| \sum_j \frac{V_{ij}V_{jf}}{E_i^{(0)} - E_j + h\omega} \right|^2 \delta(E_f - E_i^{(0)} - 2h\omega). \quad (8)$$

Модель кристалла и волновые функции

Рассмотрим диэлектрик или полупроводник с широкой запрещенной зоной. Пусть в кристалле имеется достаточно высокая концентрация одноуровневых (Рис. 1) или двухуровневых (Рис. 2) глубоких примесных центров.

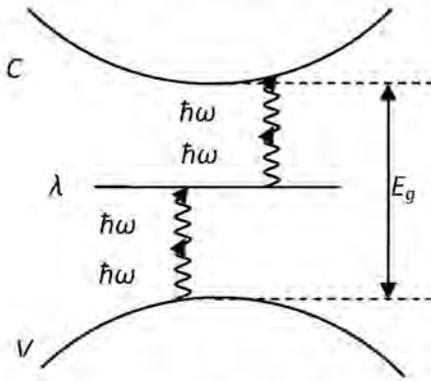


Рис. 1. Модель кристалла с одноуровневым примесным центром в запрещенной зоне

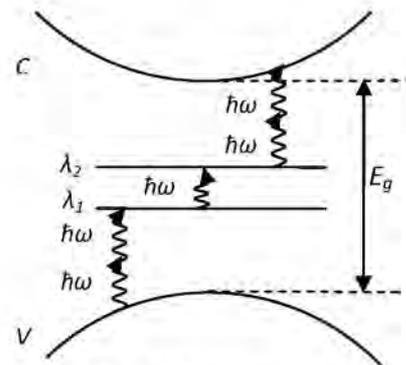


Рис. 2. Модель кристалла с двухуровневым примесным центром в запрещенной зоне

Для определенности предположим, что расстояния от состояний примеси до дна зоны проводимости c и потолка валентной зоны v составляют чуть меньше энергии $2h\omega$ двух фотонов. Энергию будем отсчитывать от дна зоны проводимости. Гамильтониан электрона в кристалле имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}), \quad (9)$$

где $U(\mathbf{r})$ – эффективный периодический потенциал решетки. В присутствии поля электромагнитной волны импульс электрона $\hat{\mathbf{p}}$ заменяется на обобщенный импульс:

$$\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}). \quad (10)$$

В формуле (10) $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ обозначает векторный потенциал электромагнитного поля:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \text{Re} \left[A_0 \mathbf{e}_{\mathbf{k}} e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} \right], \quad (11)$$

где $\mathbf{e}_{\mathbf{k}}$ – единичный вектор поляризации световой волны, \mathbf{k} – волновой вектор фотона [2]. Для излучения оптического диапазона волновой вектор фотона мал по сравнению с волновыми векторами участвующих в процессе электронов, следовательно, можно положить, что $\mathbf{k} = 0$.

Подставляя (10) в (9) и учитывая, что в пренебрежении волновым вектором фотона оператор импульса коммутирует с векторным потенциалом, получаем выражение для линейного по \mathbf{A} оператора взаимодействия электрона с электромагнитным полем:

$$\hat{V} = -\frac{e}{mc} \mathbf{A} \hat{\mathbf{p}}. \quad (12)$$

Для оценки вероятностей оптических переходов между электронными состояниями непрерывного спектра (в валентной зоне или зоне проводимости) и дискретными состояниями глубокой примеси в области энергий запрещенной зоны воспользуемся моделью потенциала

нулевого радиуса [3, 4]. Искомая волновая функция примесного состояния электрона ψ_λ определяется из уравнения Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_\lambda + U(\mathbf{r})\psi_\lambda + V(\mathbf{r})\psi_\lambda = E_\lambda\psi_\lambda, \quad (13)$$

где m – масса свободного электрона; $U(\mathbf{r})$ – эффективный периодический потенциал решетки; λ – совокупность квантовых чисел, характеризующих состояние электрона; $V(\mathbf{r})$ – потенциальная энергия электрона в поле примесного центра. Считая, что характерная длина волны свободного носителя заряда велика по сравнению с постоянной решетки, а также по сравнению с радиусом примеси, можно аппроксимировать потенциальную энергию в поле примесного центра:

$$V(\mathbf{r}) = -V_0\delta(\mathbf{r}), \quad (14)$$

где V_0 – положительная постоянная. При этом собственные значения E_λ находятся из соотношения:

$$1 = V_0 \sum_{\mathbf{k}, l} \frac{|\psi_{\mathbf{k}l}(0)|^2}{\hbar\omega_{\mathbf{k}l} - E_\lambda}. \quad (15)$$

Тогда волновую функцию ψ_λ можно представить в следующем виде:

$$\psi_\lambda(\mathbf{r}) = N_\lambda \sum_{\mathbf{k}, l} \frac{\psi_{\mathbf{k}l}^*(0)\psi_{\mathbf{k}l}(\mathbf{r})}{\hbar\omega_{\mathbf{k}l} - E_\lambda}, \quad (16)$$

где $\psi_{\mathbf{k}, l}(\mathbf{r})$ – блоховская волновая функция l -й зоны, $\hbar\omega_{\mathbf{k}l}$ – соответствующая блоховская энергия, E_λ – энергия дискретного уровня, N – нормировочная константа. Функции $\psi_{\mathbf{k}, l}$ будем нормировать на единицу в объеме Ω . У края зоны воспользуемся простейшей аппроксимацией, полагая в рассматриваемой зоне $\hbar\omega_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}$. Энергию будем отсчитывать от дна зоны проводимости. При нашем выборе отсчета энергии $E_\lambda < 0$. Заменяем $\psi_{\mathbf{k}l}^*(0)$ константой ($\Omega^{-1/2}$). Из всей суммы по l сохраним два члена, отвечающие зоне проводимости $l = c$ и валентной зоне $l = v$. Тогда для волновой функции получим:

$$\psi_\lambda(\mathbf{r}) = N_\lambda \Omega^{-1/2} \left(\sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}c}}{\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m_c} + |E_\lambda|} + \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}v}}{-|E_g| - \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m_v} + |E_\lambda|} \right), \quad (17)$$

Из условия нормировки имеем:

$$N_\lambda^2 = \frac{2^{3/2}\pi\hbar^3}{\frac{m_c^{3/2}}{|E_\lambda|^{1/2}} + \frac{m_v^{3/2}}{(|E_g| + |E_\lambda|)^{1/2}}}. \quad (18)$$

Матричный элемент перехода и закон сохранения энергии

Для расчета вероятности перехода «зона – примесь», воспользуемся вторым порядком теории возмущения. Составной матричный элемент имеет вид:

$$M = \sum_j \frac{V_{ij}V_{jf}}{E_i - E_f + \hbar\omega}, \quad (19)$$

где i – начальное состояние электрона, f – конечное, а суммирование ведется по виртуальным состояниям, в которых электрон не находится. Оба фотона поглощаются одновременно.

Суммируя по всем возможным состояниям и учитывая, что $\hbar\omega_1 = \hbar\omega_2 = \hbar\omega$, $E_{\lambda_1} = E_v + 2\hbar\omega$ и $E_{\lambda_1} = E_{\lambda_2} + \hbar\omega$, получаем выражения для случаев одноуровневого и двухуровневого примесных центров соответственно:

$$M^{(1)} = \frac{V_{iv} V_{v\lambda_1}}{\hbar\omega} - \frac{V_{vc} V_{c\lambda_1}}{3\hbar\omega}, \quad (20)$$

$$M^{(2)} = \frac{V_{iv} V_{v\lambda_1}}{\hbar\omega} + \frac{V_{vc} V_{c\lambda_1}}{\hbar\omega - E_g} + \frac{V_{v\lambda_2} V_{\lambda_2\lambda_1}}{3\hbar\omega - E_g} = M^{(1)} + \frac{V_{v\lambda_2} V_{\lambda_2\lambda_1}}{3\hbar\omega - E_g}. \quad (21)$$

Фейнмановские диаграммы, соответствующие рассматриваемому переходу приведены на рис. 3.

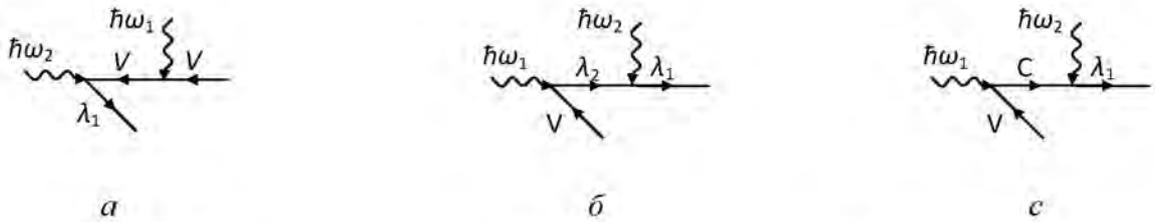


Рис. 3. Фейнмановские диаграммы для матричного элемента двухфотонного перехода $v \rightarrow \lambda_1$ в случае: а – одноуровневого примесного центра; б – дополнительного канала перехода для двухуровневого примесного центра; в – междузонного канала

Закон сохранения энергии для рассматриваемой задачи сводится к соотношению:

$$-|E_{\lambda_1}| = -|E_g| - \frac{\hbar^2 k_v^2}{2m_v} + 2\hbar\omega \quad (22)$$

Внутризонные и междузонные матричные элементы оператора импульса

Используя выражение для интегралов с функциями Блоха [4]:

$$-\frac{i\hbar}{m} \int u_{pl}^* \nabla u_{pl} d\mathbf{r} = \nabla_{\mathbf{p}} E(\mathbf{p}, l) - \frac{\mathbf{p}}{m}, \quad (23)$$

получим выражения для междузонных и внутризонных матричных элементов оператора импульса:

$$\begin{aligned} \int e^{-ik_1 r} u_{k_1 v}^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} e^{-ik_2 r} u_{k_2 c}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} &= \mathbf{p}_{cv} \delta_{k_1 k_2}, \\ \int e^{-ik_1 r} u_{k_1 v}^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} e^{-ik_2 r} u_{k_2 v}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} &= -\frac{m}{m_v} \hbar \mathbf{k}_1 \delta_{k_1 k_2}, \\ \int e^{-ik_1 r} u_{k_1 c}^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} e^{-ik_2 r} u_{k_2 c}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} &= \frac{m}{m_c} \hbar \mathbf{k}_1 \delta_{k_1 k_2}. \end{aligned} \quad (24)$$

Вычисление слагаемых матричного элемента

Используя полученные в предыдущем разделе выражения для междузонных и внутризонных матричных элементов оператора импульса (24) и переходя от суммирования по волновому вектору к интегрированию в сферических координатах (направляем полярную ось вдоль \mathbf{A}), имеем:

$$V_{iv} = \frac{e}{mc} \mathbf{A} \int \psi_v^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} \psi_v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = -\frac{e}{m_v c} A \hbar k_{vz} \cos \theta_{k_v}, \quad (25)$$

$$V_{cc} = \frac{e}{mc} \mathbf{A} \int \psi_c^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} \psi_c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \frac{e}{mc} A \hbar k_{cz} \cos \theta_k, \quad (26)$$

$$V_{v\lambda_2} = \frac{e}{mc} \mathbf{A} \int \psi_v^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} \psi_{\lambda_2}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \frac{eAN_{\lambda_2}}{mc\Omega^{1/2}} \left(\frac{P_{cvz}}{\frac{\hbar^2 k_v^2}{2m_c} + |E_{\lambda_2}|} - \frac{\frac{m}{m_v} \hbar k_{vz} \cos \theta_k}{-|E_g| - \frac{\hbar^2 k_v^2}{2m_v} + |E_{\lambda_2}|} \right), \quad (28)$$

$$V_{\lambda_2\lambda_1} = \frac{e}{mc} \mathbf{A} \int \psi_{\lambda_2}^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} \psi_{\lambda_1}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \frac{Aem_c m_v N_{\lambda_1} N_{\lambda_2} p_{cv}}{\sqrt{2cm\pi\hbar^3}} \left(\frac{1}{\sqrt{m_v(|E_g| - |E_{\lambda_1}|)} - \sqrt{|E_{\lambda_2}| m_c}} + \frac{1}{\sqrt{m_v(|E_g| - |E_{\lambda_2}|)} - \sqrt{|E_{\lambda_1}| m_c}} \right), \quad (29)$$

$$V_{c\lambda_1} = \frac{e}{mc} \mathbf{A} \int \psi_c^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} \psi_{\lambda_1}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \frac{eAN_{\lambda_1}}{mc\Omega^{1/2}} \left(\frac{\frac{m}{m_c} \hbar k_{cz} \cos \theta_k}{\frac{\hbar^2 k_c^2}{2m_c} + |E_{\lambda_1}|} - \frac{P_{cvz}}{-|E_g| - \frac{\hbar^2 k_c^2}{2m_v} + |E_{\lambda_1}|} \right). \quad (30)$$

Вероятность перехода «зона – примесь» и «примесь – зона»

Вероятность перехода «зона – примесь» определяется выражением:

$$W_{v\mathbf{k}_v\lambda_1}^{(1,2)} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}_v \left| M_{v\mathbf{k}_v\lambda_1}^{(1,2)} \right|^2 \delta \left(-|E_{\lambda_1}| + |E_g| + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_v^2}{2m_v} - 2\hbar\omega \right), \quad (31)$$

Переходя к интегрированию в сферических координатах и используя свойство дельта-функции Дирака, получим:

$$\delta(\varphi(x)) = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{\left. \frac{d\varphi(x)}{dx} \right|_{x=x_i}}, \quad (32)$$

где x_i – нули функции $\varphi(x)$, получаем:

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi(k_v)}{dk_v} &= \frac{\hbar k_v}{m_v} \cdot k_{v_i} = \left(\frac{2m_v(|E_{\lambda_1}| - |E_g| + 2\hbar\omega)}{\hbar^2} \right)^{1/2} \\ W_{v\mathbf{k}_v\lambda_1}^{(1,2)} &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \frac{4\pi k_v^2 m_v \left| M_{v\mathbf{k}_v\lambda_1}^{(1,2)} \right|^2}{\hbar^2 k_v} = \frac{\Omega}{\pi} \frac{k_v m_v \left| M_{v\mathbf{k}_v\lambda_1}^{(1,2)} \right|^2}{\hbar^3} = \\ &= \frac{\Omega}{2\pi} \frac{(2m_v)^{3/2} \sqrt{|E_{\lambda_1}| - |E_g| + 2\hbar\omega}}{\hbar^3} \left| M_{v\mathbf{k}_v\lambda_1}^{(1,2)} \right|^2. \end{aligned} \quad (33)$$

В итоге для перехода «валентная зона – примесь» получаем:

$$W_{v\lambda}^{(1)} = \frac{4(Ae)^4 k_v^2 N_{\lambda}^2}{15\pi c^4 m_v \omega^2 \hbar^3} \left\{ \frac{5(m_c p_{cv})^2}{m^2 [(k\hbar)^2 + 2|E_{\lambda}| m_c]^2} + \frac{3(k\hbar)^2}{[-2|E_{\lambda}| m_v + 2|E_g| m_v + (\hbar k_v)^2]^2} \right\}, \quad (34)$$

$$\begin{aligned}
W_{\nu\lambda_1}^{(2)} = & W_{\nu\lambda_1}^{(1)} + \frac{(Ae)^4 k_\nu m_c^2 m_\nu N_{\lambda_1}^2 N_{\lambda_2}^2 p_{cv}^2 \beta}{24c^4 m^4 \pi^3 \omega^2 \hbar^{11}} \left\{ \frac{12m_c^2 m_\nu^2 N_{\lambda_2}^2 p_{cv}^2 \beta}{(2|E_{\lambda_2}|m_c + \hbar^2 k_\nu^2)^2} + \right. \\
& + \frac{4k_\nu^2 m^2 \hbar^2}{(2|E_g|m_\nu - 2|E_{\lambda_2}|m_\nu + \hbar^2 k_\nu^2)^2} \times \\
& \times \left[m_\nu^2 N_{\lambda_2}^2 \beta - \frac{2^{5/2} \pi \hbar^3 (2|E_g|m_\nu - 2|E_{\lambda_2}|m_\nu + \hbar^2 k_\nu^2)}{(2|E_{\lambda_1}|m_c + \hbar^2 k_\nu^2)} + \right. \\
& \left. \left. + \frac{2^{5/2} \pi \hbar^3 (2|E_g|m_\nu - 2|E_{\lambda_2}|m_\nu + \hbar^2 k_\nu^2)^2}{(2|E_{\lambda_2}|m_c + \hbar^2 k_\nu^2)(2|E_g|m_\nu - 2|E_{\lambda_1}|m_\nu + \hbar^2 k_\nu^2)} \right] \right\}, \tag{35}
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
A = & \sqrt{\frac{8\pi c j}{\sqrt{\epsilon_\infty} \omega^2}}, \quad k_\nu = \sqrt{\frac{2m_\nu}{\hbar^2} (|E_{\lambda_1}| - |E_g| + 2\hbar\omega)} \\
\beta = & \frac{1}{\sqrt{m_\nu (|E_g| - |E_{\lambda_1}|)} - \sqrt{|E_{\lambda_2}|m_c}} + \frac{1}{\sqrt{m_\nu (|E_g| - |E_g|)} - \sqrt{|E_{\lambda_1}|m_c}}. \tag{36}
\end{aligned}$$

где j – интенсивность света.

Дополнительный междузонный канал дает вклад:

$$\begin{aligned}
W_{\nu\lambda} = & \frac{4A^4 e^4 k_{0\nu} N_\lambda^2}{15c^4 m^4 m_\nu \pi \beta_c^2 \omega^2 \hbar^3} \left\{ \frac{5k_\nu^2 m^2 p_{cv}^2 (m_c \beta_c + m_\nu \omega \hbar)^2}{(2|E_\lambda|m_c + k_\nu^2 \hbar^2)^2} + \right. \\
& \left. + \frac{15m_\nu^4 p_{cv}^4 \omega^2 + 10k_{0\nu}^2 m^2 m_\nu^2 p_{cv}^2 \beta_c \omega \hbar + 3k_{0\nu}^4 m^4 \beta_c^2 \hbar^2}{(-2|E_\lambda|m_\nu + 2|E_g|m_\nu + k_{0\nu}^2 \hbar^2)^2} \right\}, \tag{37}
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
A = & \sqrt{\frac{8\pi c j}{\sqrt{\epsilon_\infty} \omega^2}}, \quad k_\nu = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_\nu \Delta_\nu}, \quad \beta_c = \gamma \Delta + |E_\lambda| + \hbar\omega, \\
\Delta_\nu = & (|E_\lambda| - |E_g| + 2\hbar\omega), \quad \gamma = m_\nu / m_c. \tag{38}
\end{aligned}$$

Аналогичным образом вычисляется вероятность двухфотонного перехода «примесь – зона проводимости»:

$$\begin{aligned}
W_{\lambda c}^{(1)} = & \frac{4(Ae)^4 k_c^2 N_\lambda^2}{15\pi c^4 m_c \omega^2 \hbar^3} \left\{ \frac{5(m_\nu p_{cv})^2}{m^2 [2|E_g|m_\nu - 2|E_\lambda|m_\nu + (k_c \hbar)^2]^2} + \right. \\
& \left. + \frac{3(k_c \hbar)^2}{[(k_\nu \hbar)^2 + 2|E_\lambda|m_c]^2} \right\}, \tag{39}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 W_{\lambda_2 c}^{(2)} = W_{\lambda_2 c}^{(1)} + \frac{(Ae)^4 k_c m_c m_v^2 N_{\lambda_1}^2 N_{\lambda_2}^2 p_{cv}^2 \beta}{24c^4 m^4 \pi^3 \omega^2 \hbar^{11}} & \left\{ \frac{12m_c^2 m_v^2 N_{\lambda_1}^2 p_{cv}^2 \beta}{(2|E_g| m_v - 2|E_{\lambda_1}| m_v + k_c^2 \hbar^2)^2} + \right. \\
 + \frac{4k_c^2 m^2 \hbar^2}{(2|E_{\lambda_1}| m_c + k_c^2 \hbar^2)^2} & \left[m_c^2 N_{\lambda_1}^2 \beta - \frac{2^{5/2} \pi \hbar^3 (2|E_{\lambda_1}| m_c + k_c^2 \hbar^2)}{(2|E_g| m_v - 2|E_{\lambda_2}| m_v + k_c^2 \hbar^2)} + \right. \\
 + \frac{2^{5/2} \pi \hbar^3 (2|E_{\lambda_1}| m_c + k_c^2 \hbar^2)^2}{(2|E_{\lambda_2}| m_c + k_c^2 \hbar^2)(2|E_{\lambda_1}| m_v - 2|E_g| m_v - k_c^2 \hbar^2)} & \left. \left. \right] \right\}. \quad (40)
 \end{aligned}$$

Междузонный канал дает вклад:

$$\begin{aligned}
 W_{\lambda c} = \frac{4A^4 e^4 k_c N_{\lambda}}{15c^4 m^4 m_c \pi \beta_c^2 \omega^2 \hbar^3} & \left\{ \frac{5k_c^2 m^2 p_{cv}^2 (m_v \beta_c - m_c \omega \hbar)^2}{(-2|E_{\lambda}| m_v + 2|E_g| m_v + k_{0c}^2 \hbar^2)^2} + \right. \\
 + \frac{15m_c^4 p_{cv}^4 \omega^2 - 10k_c^2 m^2 m_c^2 p_{cv}^2 \beta_c \omega \hbar + 3k_{0c}^4 m^4 \beta_c^2 \hbar^2}{(2|E_{\lambda}| m_c + k_{0c}^2 \hbar^2)^2} & \left. \right\}, \quad (41)
 \end{aligned}$$

$$k_{0c} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_c \Delta_c}, \quad \beta_c = E_g - \hbar\omega + (1 + \gamma^{-1})\Delta_c, \quad \Delta_c = (2\hbar\omega - |E_{\lambda}|). \quad (42)$$

Кинетика фотопереходов

Кинетику фотопереходов будем описывать с помощью уравнений баланса. Система уравнений для концентраций электронов в зоне проводимости n_c , валентной зоне n_v и одноуровневых примесных центров будет иметь вид:

$$\begin{aligned}
 \dot{n}_c &= \sigma_{\lambda c} j^2 n_{\lambda} n_i - W_{c\lambda} n_c - d_c n_c (p_0 + n_c - \eta n_i + n_{\lambda} n_i), \\
 \dot{n}_{\lambda} &= -\sigma_{\lambda c} j^2 n_{\lambda} + W_{c\lambda} \frac{n_c}{n_i} + \sigma_{v\lambda} j^2 (1 - n_{\lambda}), \\
 \dot{n}_v &= \sigma_{v\lambda} n_i j^2 (1 - n_{\lambda}) - d_c n_c (p_0 + n_c - \eta n_i + n_{\lambda} n_i), \quad (43)
 \end{aligned}$$

с начальными условиями: $n_c, n_{\lambda} = 0$ (или $n_{\lambda} = 1$), $n_v = p_0$ при $t = 0$, где σ_{lk} – сечения оптических переходов между l -м и k -м уровнями; W_{ik} – описывают вероятность безызлучательного перехода с l -го на k -й уровень; член $d_c n_c (p_0 + n_c - \eta n_i + n_{\lambda} n_i)$ описывает бимолекулярную рекомбинацию электронов в зоне проводимости c с дырками в валентной зоне v ; p_0 обозначает равновесную концентрацию дырок; n_i – концентрацию примесных центров. Параметр η принимает значения 0 или 1 соответственно, в случаях, когда до включения света основное состояние центра не заполнено либо заполнено.

Для случая двухуровневых примесных центров система уравнений баланса имеет вид:

$$\begin{aligned}
 \dot{n}_c &= \sigma_{\lambda_2 c} j^2 n_{\lambda_2} n_i - W_{c\lambda_2} n_c - d_c n_c (p_0 + n_c - \eta n_i + n_{\lambda_1} n_i + n_{\lambda_2} n_i), \\
 \dot{n}_{\lambda_2} &= -\sigma_{\lambda_2 c} j^2 n_{\lambda_2} + W_{c\lambda_2} \frac{n_c}{n_i} + \sigma_{\lambda_1 \lambda_2} j (n_{\lambda_1} - n_{\lambda_2}) - W_{\lambda_2 \lambda_1} n_{\lambda_2}, \\
 \dot{n}_{\lambda_1} &= -\sigma_{\lambda_1 \lambda_2} j (n_{\lambda_1} - n_{\lambda_2}) + W_{\lambda_2 \lambda_1} n_{\lambda_2} + \sigma_{v\lambda_1} j^2 (1 - n_{\lambda_1}), \\
 \dot{n}_v &= \sigma_{v\lambda_1} n_i j^2 (1 - n_{\lambda_1}) - d_c n_c (p_0 + n_c - \eta n_i + n_{\lambda_1} n_i + n_{\lambda_2} n_i). \quad (44)
 \end{aligned}$$

с начальными условиями: $n_c, n_{\lambda_1}, n_{\lambda_2} = 0$ (или $n_{\lambda_1} = 1, n_{\lambda_2} = 0$), $n_v = p_0$ при $t = 0$, где n_{λ_1} – заселенность электронов в основном состоянии двухуровневого примесного центра, n_{λ_2} – концентрация электронов в возбужденном состоянии двухуровневого примесного центра.

Обсуждение результатов

На рис. 4, 5 приведены квазистационарные значения заселенностей различных состояний в зависимости от интенсивности света j при различных концентрациях незаполненных ($n_h = 0$ при $t = 0$) одноуровневых примесных центров n_i и фиксированном значении константы бимолекулярной рекомбинации $d_c = 3 \cdot 10^{-8} \text{ см}^3/\text{с}$ (рис. 4) и от величины d_c при $j = 5 \cdot 10^{10} \text{ Вт}/\text{см}^2$. Представленные зависимости получены в результате численного решения системы уравнений (43) в начальный момент времени примесных центров при следующих значениях параметров: $\sigma_{\lambda_1 c} = 1,09 \cdot 10^{-22} \text{ см}^4/\text{с} \cdot \text{Вт}^2$, $\sigma_{v\lambda_1} = 2,93 \cdot 10^{-22} \text{ см}^4/\text{с} \cdot \text{Вт}^2$, $W_{c\lambda_1} = 10^{10} \text{ с}^{-1}$.

При обсуждении зависимостей, представленных на рис. 4, следует иметь в виду, что уже при относительно слабых интенсивностях $j = 100 \text{ МВт}/\text{см}^2$ происходит заполнение примесных состояний электронами за счет двухфотонных переходов «валентная зона – примесь». При этом в валентной зоне появляется соответствующее количество дырок. Лишь при дальнейшем увеличении интенсивности начинает действовать вторая ступень каскада, а в зоне проводимости появляются неравновесные электроны, попавшие туда в результате ДФП с примесных состояний. Следует также отметить, что зависимость числа неравновесных носителей от константы d_c бимолекулярной рекомбинации в широком диапазоне ее значений носит плавный характер, так что изменение d_c в пределах разумных значений мало меняет общую картину генерации электрон-дырочных пар.

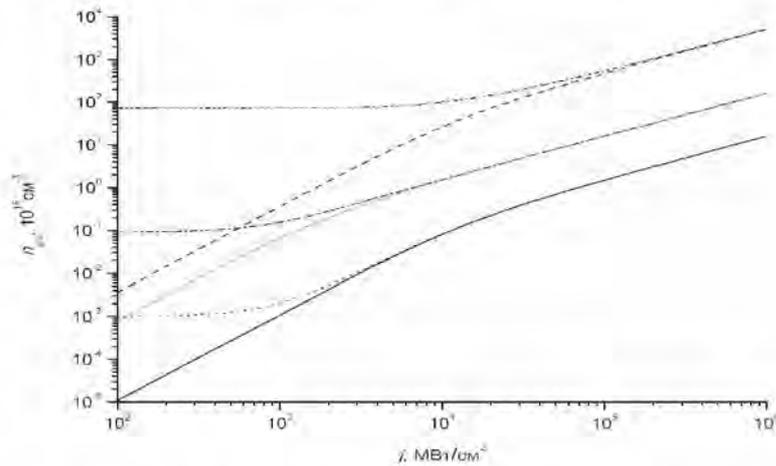


Рис. 4. Зависимости концентраций носителей в зонах проводимости n_c и валентной n_v от интенсивности накачки j при различных концентрациях одноуровневых примесных центров n_i : сплошная линия – n_c при $n_i = 10^{15} \text{ см}^{-3}$, пунктирная – n_v при $n_i = 10^{15} \text{ см}^{-3}$, бледная сплошная – n_c при $n_i = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, штрих-пунктирная – n_v при $n_i = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, – штриховая – n_c при $n_i = 10^{20} \text{ см}^{-3}$, штрих-пунктирная линия с двумя точками – n_v при $n_i = 10^{20} \text{ см}^{-3}$; $d = 3 \cdot 10^{-8} \text{ см}^3/\text{с}$. В начальный момент времени примесные состояния не заселены

На рис. 6, 7 приведены результаты численного решения системы уравнений (44) для случая незаполненных двухуровневых примесных центров при следующих значениях параметров: $\sigma_{\lambda_2 c} = 7 \cdot 10^{-21} \text{ см}^2/\text{с} \cdot \text{Вт}^2$; $\sigma_{v\lambda_1} = 1,5 \cdot 10^{-20} \text{ см}^2/\text{с} \cdot \text{Вт}^2$; $W_{c\lambda_2} = W_{\lambda_2\lambda_1} = 10^{10} \text{ с}^{-1}$; $\sigma_{\lambda_1\lambda_2} = 3 \cdot 10^{-2} \text{ см}^2/\text{с} \cdot \text{Вт}^2$; $d_c = 3 \cdot 10^{-8} \text{ см}^3/\text{с}$ (рис. 6); $j = 5 \cdot 10^9 \text{ Вт}/\text{см}^2$ (рис. 7); $p_0 = 0$. Видно, что качественная картина процесса не изменяется, хотя концентрация неравновесных носителей оказывается несколько большей, чем в случае одноуровневых центров

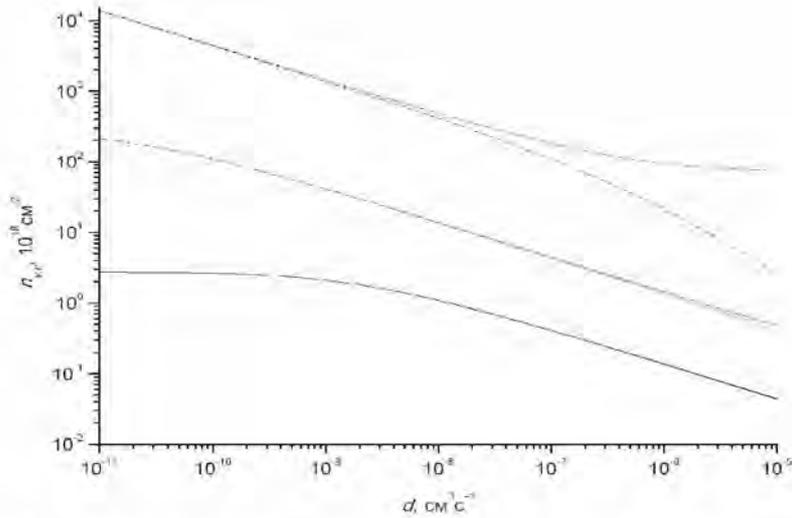


Рис. 5. Зависимости концентраций носителей в зонах проводимости n_c и валентной n_v от скорости бимолекулярной рекомбинации d_c при различных концентрациях одноуровневых примесных центров n_i : сплошная линия – n_c и n_v при $n_i = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, для остальных линий обозначения те же, что на рис. 4; $j = 5 \cdot 10^{10} \text{ Вт/см}^2$. В начальный момент времени примесные состояния не заселены

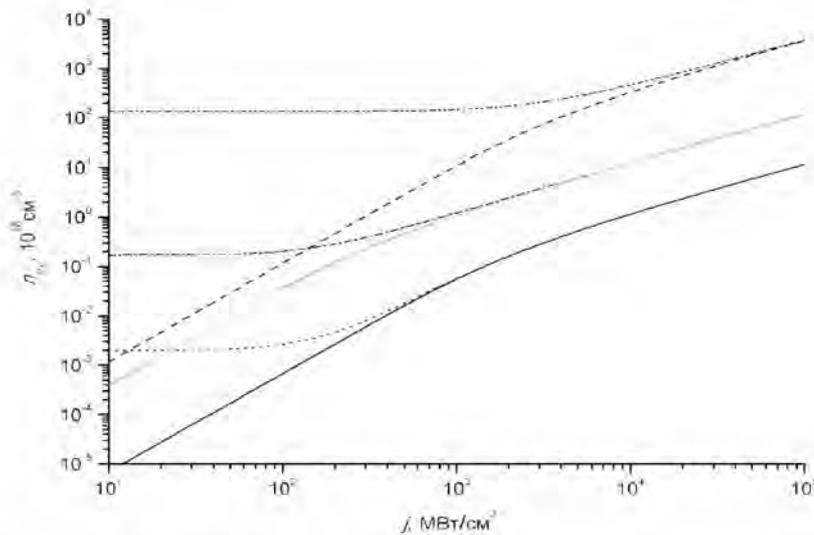


Рис. 6. Зависимости концентраций носителей в зонах проводимости n_c и валентной n_v от интенсивности накачки j при различных концентрациях двухуровневых примесных центров n_i . Обозначения те же, что на рис. 4. В начальный момент времени примесные состояния не заселены

Зависимости квазиравновесных концентраций от интенсивности света для случая заполненных примесных центров приведены на рис. 8 (одноуровневые центры) и рис. 9 (двухуровневые центры). В случае одноуровневых заполненных ($n_i = 0$ при $t = 0$) центров зависимости заселенностей от интенсивностей отличаются от случая одноуровневых незаполненных центров. При концентрации примесей n_i , меньшей эффективной плотности зонных состояний N_c, N_v (как правило, $N_c, N_v \sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$), во всем диапазоне интенсивностей света количество неравновесных электронов оказывается равным количеству неравновесных дырок. Если же $n_i \gg N_c, N_v$, то при умеренных интенсивностях света количество неравновесных электронов, образовавшихся за счет ДФП «примесь – зона проводимости» намного превосходит число неравновесных дырок. Последние могут образоваться за счет ДФП «валентная зона –

примесь» лишь после того, как примесное состояние освободится, благодаря переходам на верхней ступени каскада. В области высоких интенсивностей света концентрации неравновесных электронов и дырок практически всегда в рассматриваемой модели совпадают.

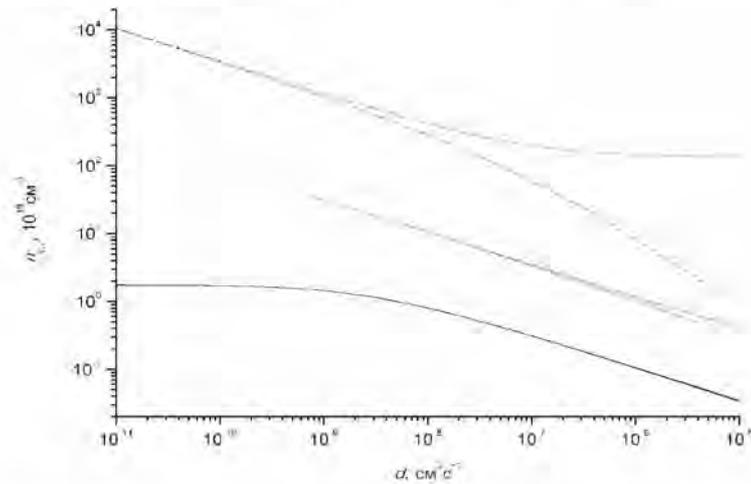


Рис. 7. Зависимости концентраций носителей в зонах проводимости n_c и валентной n_v от скорости бимолекулярной рекомбинации d_c при различных концентрациях двухуровневых примесных центров n_i . Обозначения линий те же, что на рис. 5; $j = 5 \cdot 10^9 \text{ Вт/см}^2$. В начальный момент времени примесные состояния не заселены

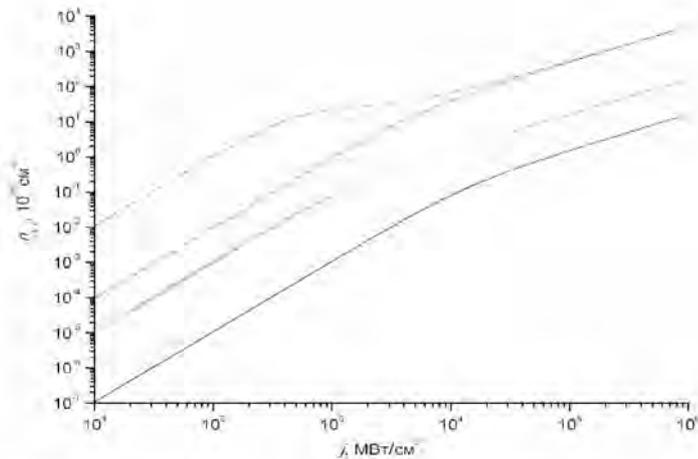


Рис. 8. Зависимости концентраций носителей в зонах проводимости n_c и валентной n_v от интенсивности накачки j при различных концентрациях одноуровневых примесных центров n_i : бледная сплошная линия – n_c и n_v при $n_i = 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Остальные обозначения линий те же, что на рис. 5; $d = 3 \cdot 10^{-8} \text{ см}^3/\text{с}$. В начальный момент времени примесные состояния заселены

В случае заполненных двухуровневых центров уже при малых интенсивностях света нижнее примесное состояние освобождается за счет однофотонных переходов в верхнее состояние. Кроме того, при выбранных значениях параметров сечение ДФП «валентная зона – нижний примесный уровень» несколько превосходит сечение ДФП «верхний примесный уровень – зона проводимости». Поэтому при умеренных значениях j число неравновесных дырок значительно превосходит число неравновесных электронов.

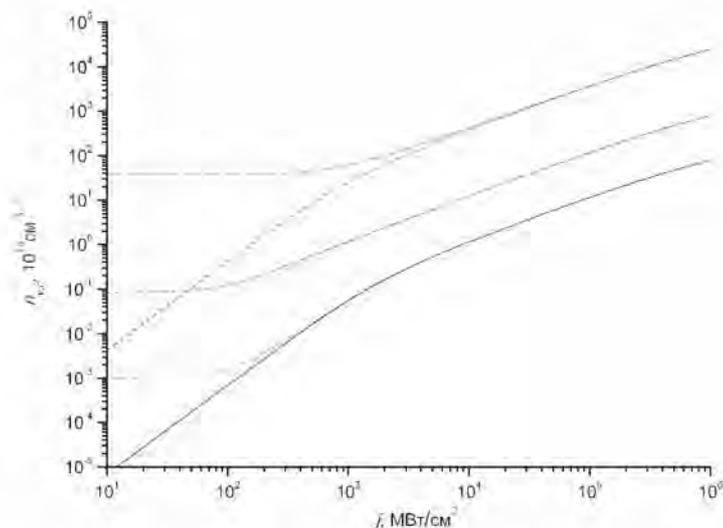


Рис. 9. Зависимости концентраций носителей в зонах проводимости n_c и валентной n_v от интенсивности накачки j при различных концентрациях двухуровневых примесных центров n_i . Обозначения линий те же, что на рис. 4. $d = 3 \cdot 10^{-8}$ см³/с. В начальный момент времени основное состояние примеси заселено

Заключение

В модели потенциала нулевого радиуса в рамках теории возмущений были получены аналитические выражения и численные оценки вероятности двухфотонных переходов «зона – примесь» между состояниями непрерывного спектра в валентной зоне и зоне проводимости и дискретными состояниями глубоких примесных центров в запрещенной зоне. Учтен вклад различных каналов в амплитуду вероятности переходов. При помощи уравнений баланса рассчитана кинетика фотопереходов в двухзонной модели кристалла с одноуровневыми и двухуровневыми глубокими примесями.

Показано, что рассмотренный многофотонно-каскадный механизм, начиная с концентраций глубоких примесных центров $n_i \sim 10^{16} - 10^{17}$ см⁻³, может при типичных значениях параметров зонной структуры широкозонных диэлектриков или полупроводников приводить к генерации большего количества неравновесных электрон-дырочных пар, чем «обычные» прямые четырех- или пятифотонные межзонные переходы. В отличие от эффекта многофотонной лавины рассмотренный механизм не характеризуется какой-либо пороговой интенсивностью возбуждающего лазерного излучения. При высоких концентрациях примесей $n_i > 10^{18}$ см⁻³ существенный вклад в генерацию ЭДП могут дать процессы передачи энергии возбуждения между различными примесными центрами. Эти процессы будут рассмотрены в следующих работах.

Публикации

1. Левицкий Р.С., Перлин Е.Ю., Попов А.А. Многофотонная генерация электрон-дырочных пар в кристаллах с глубокими примесями. I. Вероятности двухфотонных переходов «Зона – примесь» // Оптический журнал. 2010. Т. 77. № 10. С. 3–9.
2. Левицкий Р.С., Перлин Е.Ю., Попов А.А. Многофотонная генерация электрон-дырочных пар в кристаллах с глубокими примесями. II. Каскадные процессы // Оптический журнал. 2011. Т. 78. № 9. С. 13–19.

Доклады на конференциях

1. Перлин Е.Ю., Бондарев М.А., Елисеев К.А., Иванов А.В., Идрисов Э.Г., Левицкий Р.С., Попов А.А., Халилов Я.Т. Механизмы предпробойного возбуждения прозрачных широкозонных кристаллов короткими мощными импульсами лазерного излучения // Сб. трудов конференции

«Фундаментальные проблемы оптики – 2010» (18–22 октября 2010 г.), СПбГУ ИТМО, 2010. С. 63–65.

2. *Perlin E.Yu., Ivanov A.V., Popov A.A.* Photon-avalanche-like low-energy ultrafast excitation and optical switching in transparent crystals // 15-th International Conference “Laser Optics 2012” (St. Petersburg, Russia, June 25–29, 2012). St. Petersburg, 2012. P.50

Литература

1. *Ландау Л.Д., Лившиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М., 2008. – 800 с.

2. *Ландау Л.Д., Лившиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. II. Теория поля. М., 2003. – 536 с.

3. *Lucovsky G.* On the photoionization of deep impurity centers in semiconductors // Solid State Communications. 1965. Vol. 3. P. 299.

4. *Бонч-Бруевич В.Л.* К теории захвата носителей заряда глубокими ловушками в гомеополярных полупроводниках // Вестник Московского университета. Сер. 3. Физика. Астрономия. 1971. Т. 12. Вып. 5. С. 586–593.

5. *Бонч-Бруевич В.Л., Калашиников С.Г.* Физика полупроводников. М., 1977. – 672 с.



Посмитная Яна Станиславовна
Факультет точной механики и технологий
Кафедра нанотехнологий и материаловедения
Email: arabica_sampo@bk.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОВ ЦЕЛЕВОЙ ОБРАБОТКИ ПОВЕРХНОСТИ СТЕКЛЯННЫХ И ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ В МИКРОФЛЮИДНЫХ УСТРОЙСТВАХ

Я.С. Посмитная

Научный руководитель – доцент А.А. Евстрапов

Введение

В течение последнего десятилетия наблюдается стремительный рост проектирования приборов для биохимического анализа на основе микрофлюидных устройств (МФУ) – компактных устройств, содержащих функциональные элементы микро- и нанометровых размеров для операций и действий с исследуемой жидкой или газообразной пробой. Планарные варианты микрофлюидных устройств получили название микрофлюидные чипы. Прототипы таких чипов в настоящее время создаются на базе Института аналитического приборостроения РАН [1] для анализа биологических проб, в частности для метода молекулярной диагностики, основанного на полимеразной цепной реакции (ПЦР).

Для того чтобы реализовать данный метод, требуется проведение комплексных исследований и работ, связанных:

- с выбором материала микрочипа;
- с выбором метода изготовления микрочипа;
- с выбором метода обработки рабочей поверхности;
- с особенностями загрузки реакционной смеси;
- с изучением влияния свойств материала чипа на ПЦР;
- с изучением способов и методов эффективной герметизации микрочипа и т. д.

Большинство систем для биохимического анализа изготавливаются с применением кремния или стекла. Эти материалы остаются предпочтительными, когда требуется высокая

точность, химическая стойкость, хорошая теплопроводность и др. Однако существенным недостатком микрочипов для аналитических применений, в частности для ПЦР как на основе кремния, так и на основе кварца и стекла, является их высокая стоимость, которая также обусловлена трудоемким и сложным изготовлением. В связи с этим в последнее время наметилась устойчивая тенденция применения полимерных материалов в конструкциях микрочипов для ПЦР. Наиболее применяемыми являются: полидиметилсилоксан (ПДМС), поликарбонат (ПК), полиметилметакрилат (ПММА) и ряд других полимеров. Низкая стоимость полимерных материалов, а также простота изготовления и быстрая разработка прототипа позволяет создавать одноразовые чипы. Использование полимерных материалов также упрощает процессы утилизации отработанных изделий. Поверхностные свойства полимеров могут быть легко модифицированы в соответствии с требованиями систем биохимического анализа. Однако не исключается вариант производства гибридных чипов, состоящих из двух видов материалов (стекло+полимер). Кроме того, материал должен выбираться таким образом, чтобы не происходило ингибирования ПЦР, т. е. снижения ее эффективности. Поэтому необходимо применять специальные меры (обработка поверхности) для предотвращения ингибирования.

Выбор метода обработки является сложным и важным этапом, на который влияют несколько факторов. К свойствам рабочих поверхностей как стеклянных, так и полимерных материалов предъявляются особые требования. А именно: для получения устройства с воспроизводимыми и прогнозируемыми свойствами (определяющими аналитические характеристики МФУ) необходима целевая (направленная) обработка поверхности. Следует отметить, что некоторые виды ПЦР, например метод молекулярных колоний, требуют наличия гелевой среды для проведения реакции, поэтому метод обработки должен обеспечивать пришивку и прочную фиксацию геля к поверхности. Кроме того, водные растворы реакционной смеси трудно вводить в гидрофобные камеры чипа. Поэтому, чтобы обеспечить успешное проведение ПЦР на микрочипе, также требуется соответствующая модификация внутренней поверхности реакторов. Вследствие этого актуальным является изучение изменения свойств материалов при разных методах обработки с целью придания требуемых характеристик рабочим поверхностям МФЧ [2].

Поскольку в процессе различных методов обработки поверхности происходит изменение ее свойств, то целесообразным является контролирование следующих характеристик: шероховатость, рельеф поверхности, смачивание (гидрофильность / гидрофобность).

Целью данного исследования являлось обоснование, выбор и изучение влияния методов целевой обработки поверхности материалов на главные аналитические характеристики микрофлюидного устройства.

Существует множество различных технологий и способов обработки поверхности. В рамках данного проекта были использованы следующие методы: термическое воздействие, плазменная обработка, воздействие УФ-излучением, а также различные химические методы (выдерживание в щелочи, силанизация, кислотная обработка и др.).

Объектами исследования служили образцы из стекла марки К8 (мол. %: SiO_2 – 73.75, В – 9.83, ВаО – 1.28, K_2O – 4.28, Na_2O – 10.74, As_2O_3 – 0.12); полиметилметакрилата (ПММА) марки ТОСП, полиметилметакрилата (ПММА) марки АСРУМА, поликарбоната (ПК) марки Barlo.

В работе приведены результаты исследований методов физической и химической обработок, направленные на выбор эффективных способов модификации поверхностей материалов по таким критериям, как длительность обработки, устойчивость приобретаемых свойств, обеспечение прочной фиксации геля в реакционной камере.

Литературный обзор

Как уже отмечалось ранее, выбор метода обработки поверхности является важным этапом при создании МФУ. На протяжении многих лет в связи с технологически важными приложениями в приборостроении, трибологии, электрохимии и в относительно недавних микро- и наносистемах сведения о поверхности имели большое научное и практическое

значение. В связи с этим особое внимание уделяется методам модификации поверхности. Особенностью всех видов обработки является изменение свойств приповерхностного слоя всего в несколько нанометров, в пределах которого свойства материала могут значительно отличаться от объемных. Кроме того, в этом тонком слое такие свойства, как химический состав, коэффициент преломления, механическая прочность, электропроводность, поверхностный заряд и другие, могут также существенно отличаться от свойств объемного материала [3].

Методы модификации поверхностей можно классифицировать следующим образом [4]:

- использование не ковалентных покрытий. К ним относятся: покрытия слоем растворителя, осаждение пленок Ленгмюра–Блоджетт, самоорганизующиеся слои, нанесение поверхностно-активных веществ, осаждение паров атомов углерода и металлов;
- применение покрытий, образованных за счет ковалентных связей. К таким способам можно отнести радиационную пришивку, т. е. образование слоя за счет радиационного воздействия; пришивку под воздействием потока электронов; фотопришивку с применением УФ- и источников видимого излучения; покрытия, образованные с использованием газового разряда; полученные осаждением в газовой фазе; распылением ионным пучком; химическим осаждением паров; иммобилизацией биологических объектов;
- изменение исходной поверхности.

Этот метод можно разделить на две большие категории в зависимости от вида воздействия: физические и химические методы. Однако существует особенность, зависящая от того, как процесс влияет на поверхность. Физические методы в некоторых случаях не меняют химический состав поверхности. Они могут изменять ее шероховатость, размеры и границы зерен. К одним из первых методов модификации физических характеристик поверхностей относится полировка. Это простой процесс изменения шероховатости поверхности с применением абразивных материалов, таких как наждачная бумага. Он известен с древних времен, когда твердые объекты, такие как мелкие камушки и ракушки, прикрепляли к коре или коже животных с помощью смолы (древняя наждачная бумага).

Современные достижения в этой области появились в 1900-х, когда фирма 3М официально запатентовала и разработала различные грубые и мелкозернистые наждачные бумаги, которые доступны и сегодня. Полировка в настоящее время также включает такие методы как химически-механическая полировка, которая очень важна для современной индустрии обработки микроэлектронных материалов.

Другой способ обработки и изменения поверхности – метод термической обработки. Он обычно используется для изменения шероховатости поверхности и изменения границ и размеров зерен. В последние несколько лет термические методы применяются для создания наноразмерных структур и наночастиц на различных поверхностях материалов, включая керамику, металлы, полимеры и полупроводники. Термическая обработка в присутствии кислорода или паров воды может выступать инструментом для изменения существующей поверхности или получения новых форм наноструктур.

Другие физические методы, связанные с использованием лазеров [5], плазменного [6, 7, 8] и ионного травления [9], коронного и тлеющего разряда [10], а также других могут привести к изменениям в химическом составе поверхности из-за удаления или добавления функциональных групп на ее поверхности.

Физический метод также можно рассмотреть с точки зрения изменения свойств смачивания. Например, в работе [11] рассказывается о применении фемтосекундных лазерных импульсов для управления шероховатостью поверхности и придания ей гидрофобных свойств. Осаждением тонких пленок и покрытий также можно менять гидрофильность / гидрофобность поверхности [12]. Создание гидрофобных поверхностей путем обработки УФ-излучением рассмотрено в работе [13], а придание поверхности гидрофильных свойств возможно путем плазменного травления в присутствии различных газов (азота, аргона, кислорода и водяных паров).

Химические методы непосредственно влияют на химический состав поверхностного слоя материала. Причем поверхность может иметь химические свойства, существенно

отличающиеся от свойств объемного материала, кроме того могут наблюдаться изменения в распределении плотности заряда на поверхности. Среди методов химической модификации наиболее распространено формирование поверхностных слоев. Эти методы обычно основаны на принципах органической или неорганической химии, применяемых для создания новых функциональных групп на поверхности с использованием химических реагентов. Такими растворами могут быть спирты, растворы щелочей [14], кислоты, силаны и др. Так же, как и в физических методах, можно провести разделение в зависимости от того, становится поверхность гидрофильной или гидрофобной. Например, для стекла К8 применяется метод силанизации с целью уменьшения смачивания поверхности. В случае с полимерами для придания поверхности гидрофильных свойств существуют методы обработки серной кислотой [15] и алюмогидридом лития [16]. В последнем случае на поверхности происходит образование гидроксильных групп, что приводит к требуемым результатам.

Задачи проекта

- Проведение анализа литературных источников с целью ознакомления с существующими методами обработки поверхностей полимерных и стеклянных материалов для микрофлюидных устройств;
- осуществление физической и химической обработки открытых поверхностей;
- исследование влияния методов обработки на шероховатость, рельеф поверхности, смачивание (гидрофильность / гидрофобность) методами атомно-силовой микроскопии (АСМ), ближнепольной сканирующей оптической микроскопии (СБОМ), оптической спектроскопии и лежащей капли;
- выбор оптимальных условий обработки поверхностей и осуществление их модификации в микрофлюидных устройствах;
- осуществление апробации выбранного метода обработки при анализе биологической пробы;
- проведение анализа полученных результатов, выработка рекомендаций для дальнейших исследований, подготовка материалов для публикации и участия в конференции.

Используемые методы исследования и оборудование

Поверхность исследуемых материалов подвергалась физической и химической обработке, результаты воздействия контролировались методами СБОМ (зондовая нанолaborатория NTEGRA Solaris), АСМ (атомно-силовой микроскоп NTEGRA Aura), а также методами оптической спектроскопии (спектрофотометр Hitachi UV 3210).

После физической и химической обработки поверхности осуществлялось измерение контактных углов смачивания (экспериментальная установка для измерений контактных углов на базе оптического микроскопа ЛОМО PrimaExpert представлена на рис. 1).

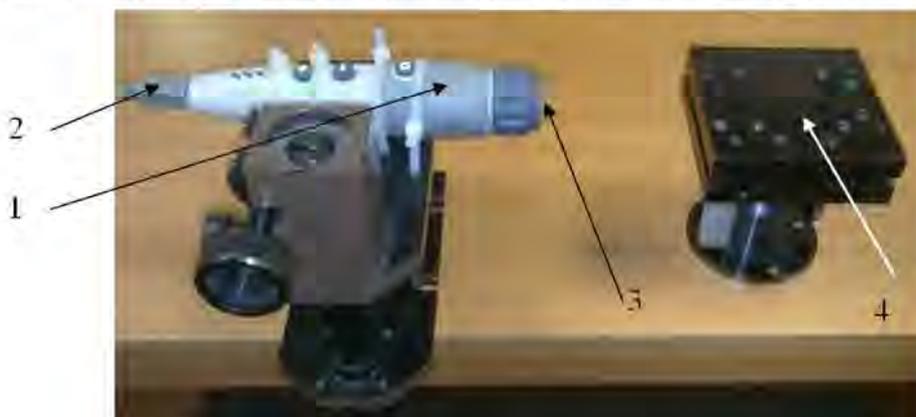


Рис. 1. Схема измерительной установки: 1 – объектив микроскопа Prima Expert; 2 – USB-кабель; 3 – диодная подсветка; 4 – предметный столик с возможностью изменения высоты и угла наклона

Для измерения контактных углов применялся метод лежащей капли. Он служит для определения характеристик смачивания на локальных участках поверхности образцов и основан на измерении краевых углов (θ) взаимодействия жидкости с поверхностью образца при различных условиях его модификации. Проводилось фотографирование капли, а затем – обработка изображения программой DropSnake v2.0 для получения численного значения.

Плазменная обработка поверхности проводилась на вакуумной напылительной установке SPI Module Sputter / Carbon Coater в аргоновой среде. Термическая обработка – в суховоздушном термостате. Ультрафиолетовая обработка осуществлялась при помощи УФ-лампы со спектральным диапазоном 250–350 нм.

Для создания прототипов полимерных микрочипов использовался метод термического формования, для стеклянных – метод кислотного травления и фотолитографии.

Для экспериментальных исследований по определению эффективности ПЦР в изготовленном микрочипе применялся прибор АНК-32 (ИАП РАН, СПб) и прототип прибора для проведения ПЦР в реальном времени на микрочиповой платформе (ИАП РАН, СПб). Для получения изображений молекулярных колоний использовался сканер микрочипов ScanArray™ Express (США).

Образцы и материалы

Объектами исследования служили пластины 24x24 мм из: стекла марки К8 (мол. %: SiO_2 – 73,75; В – 9,83; ВаО – 1,28; K_2O – 4,28; Na_2O – 10,74; As_2O_3 – 0,12); полиметилметакрилата (ПММА) марки ТОСП, полиметилметакрилата (ПММА) марки АCRYМА, поликарбоната (ПК) марки Varlo. А также чипы, изготовленные из стекла К8 (рис. 2), ПММА марок ТОСП и АCRYМА (рис. 3) с реакционными камерами для проведения ПЦР в геле.



Рис. 2. Фотография чипа, изготовленного из стекла К8 методом кислотного травления и фотолитографии (глубина 200 мкм, диаметр 14 мм)

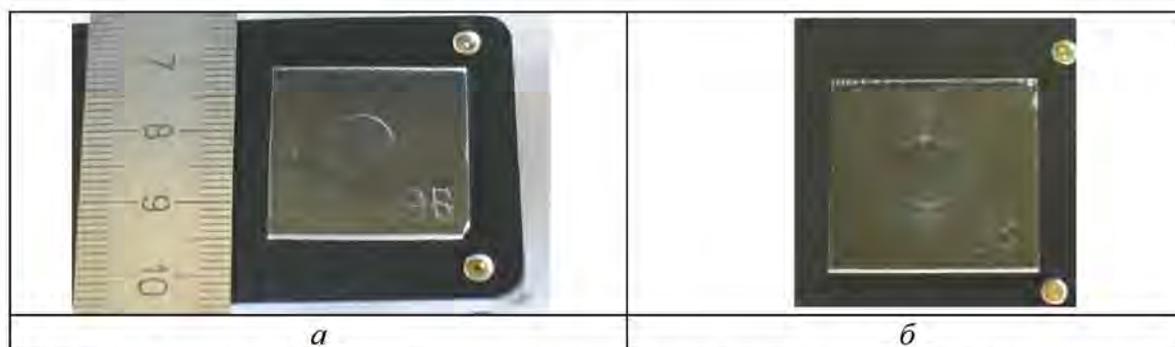


Рис. 3. Фотографии чипов, изготовленных методом термического формования:
 а – из ПММА марки ТОСП (глубина 150 мкм, диаметр 6 мм);
 б – из ПММА марки АCRYМА (глубина 250 мкм, диаметр 6 мм)

Физическая обработка поверхности материалов

Условия проведения измерений и экспериментальные результаты

В ходе работы были изучены свойства смачивания необработанных и обработанных поверхностей при нанесении дистиллированной воды (рис. 4) и щелочи (0,1М NaOH) (рис. 5). Поверхность образцов предварительно очищали в дистиллированной воде в ультразвуковой ванне, высушивали, а затем на поверхность наносились капли жидкости (вода или щелочь) объемом 20 мкл. Известно, что длительное взаимодействие ПММА с водными и щелочными средами приводит к набуханию полимера. В работе [17] исследовался процесс набухания ПММА в трех различных растворах: воде, метаноле и этаноле – в течение 2,5 часов. Согласно полученным результатам, выдерживание ПММА в течение одной минуты в данных растворах не приводит к существенному набуханию. Поскольку измерения контактного угла осуществлялись сразу же после нанесения капли, то такие процессы как набухание и испарение капли не рассматривались. Выполнялось по 6–8 измерений для каждого образца. Значения углов смачивания определялись для образцов до и после обработки.

Плазменная обработка

Плазменная обработка поверхностей полимеров ПК и ПММА марки ТОСП проводилась при давлении $2 \cdot 10^{-3}$ бар в аргоновой среде в течение 30 с (в вакуумной напылительной установке SPI Module Sputter / Carbon Coater).

После плазменной обработки поверхностей образцов наблюдалось существенное снижение значений углов смачивания для обоих полимеров, как при взаимодействии с водой, так и при взаимодействии со щелочью, т. е. происходило увеличение смачивания поверхностей материалов МФЧ. Однако вследствие влияния ряда причин, в том числе подвижности полимерных цепочек и взаимодействия поверхности образца после обработки с окружающей средой, полученный эффект не сохраняется и происходит восстановление гидрофобных свойств поверхности. Для предотвращения подобного процесса на поверхность могут быть нанесены другие полимеры непосредственно после плазменной обработки. Такая предварительная активация способствует образованию на поверхности открытых связей, благодаря чему нанесенный впоследствии слой будет надежно закреплен, и поверхность может приобрести стабильные гидрофильные свойства [18].

С помощью метода атомно-силовой микроскопии (атомно-силовой микроскоп *NTEGRA Aura* (НТ МДТ, Россия)) в полуконтактном режиме измерений были получены изображения рельефа поверхностей (размер кадра 15x15 мкм) материалов и проведены оценки значений шероховатостей поверхностей ПК и ПММА марки ТОСП до и после плазменной обработки. Так, в случае с ПММА происходит увеличение параметра *Ra* с 1,17 нм до 1,82 нм (рис. 10а, 10д), в то время как значение контактного угла снижается с $81,8^\circ$ до $52,7^\circ$ (рис. 4). Для ПК значения параметра *Ra* составляют 1,14 нм и 5,71 нм (рис. 11а, 11в), а значения углов смачивания $70,6^\circ$ и $49,3^\circ$ (рис. 4) до и после плазменной обработки соответственно. Плазменная обработка образца ПК в течение 30 с выявляет наличие механических дефектов, в частности борозд, которые образуются, по-видимому, при формировании листов полимера (рис. 11в).

Под воздействием плазмы на образцы полимеров происходит не только очистка поверхности от загрязнений, но и образование гидрофильных групп. Состав, структура и свойства таких полярных групп зависят как от природы полимера, так и от свойств плазмы. Воздействие плазмой происходило в атмосфере инертного газа аргона, что приводило к образованию активных свободных радикалов, которые на воздухе превращались в стабильные кислородсодержащие полярные группы. Эти функциональные группы образуются за счет разрыва связей в специфической структуре полимера, что, вероятно, влияет на шероховатость поверхности. Включение в состав полимера характерных групп или атомов из газовой фазы плазмы приводит к гидрофилизации поверхности (снижению значения контактного угла) (хотя бы частичной, как в случае с ПММА и ПК). Однако с течением времени число функциональных групп может уменьшаться, вследствие чего происходит восстановление гидрофобных свойств.

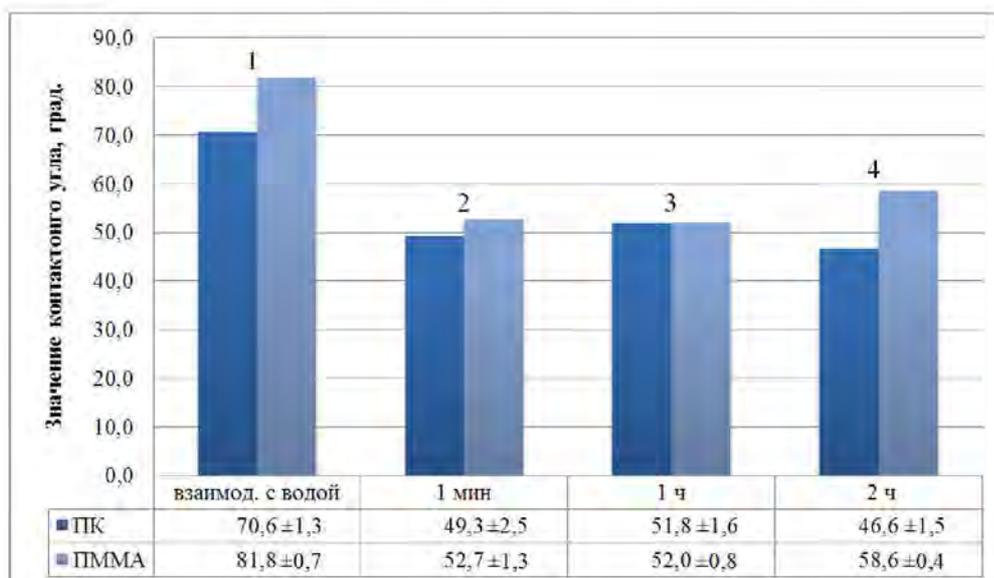


Рис. 4. Изменение величины контактных углов смачивания при взаимодействии образцов с водой до (1) и после плазменной обработки в аргонной среде в течение 30 с (через 1 мин (2), 1 ч (3), 2 ч (4))

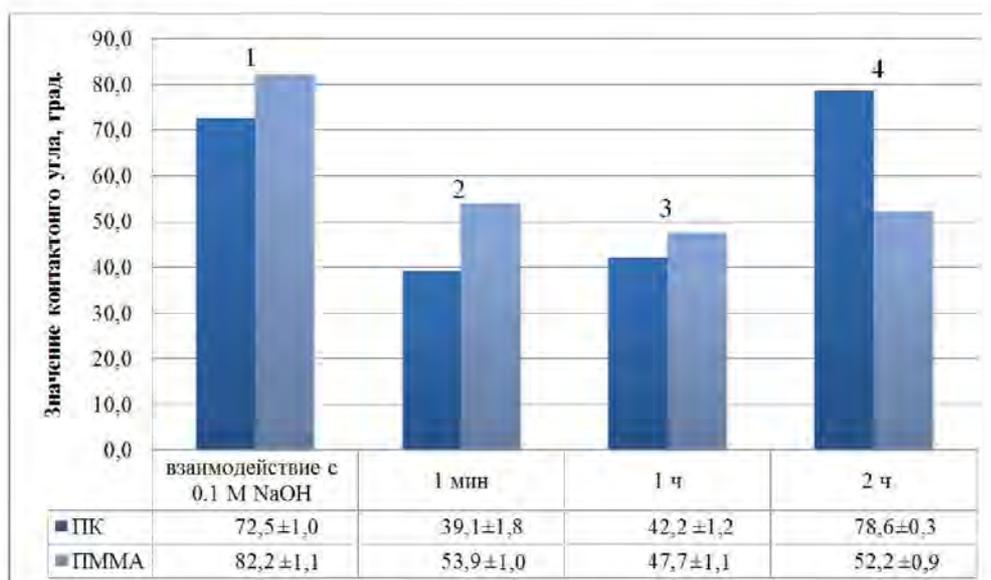


Рис. 5. Изменение величины контактных углов смачивания при взаимодействии образцов со щелочью NaOH (0.1 M) до (1) и после плазменной обработки в аргонной среде в течение 30 с (через 1 мин (2), 1 ч (3), 2 ч (4))

Термическая обработка

Термическая модификация поверхностей ПММА обеих марок осуществлялась в суховоздушном термостате в течение двух часов при температуре 60 °С.

Ультрафиолетовая обработка

Ультрафиолетовое (УФ) воздействие на образцы полимеров ПММА обеих марок выполнялось при помощи УФ-лампы со спектральным диапазоном 250–350 нм в течение двух часов. Результаты термической и ультрафиолетовой обработки представлены в Табл. 1.

На рис. 6 представлены примеры изображений рельефа поверхности ПММА разных марок после обработки, полученные методом микроскопии ближнего поля (зондовая нанолaborатория NTEGRA Solaris) в поперечно-силовой моде (размер кадра 10x10 мкм).

Таблица 1

Изменение значений контактного угла и шероховатости поверхности после УФ- и термической обработки ПММА

	Контактный угол / шероховатость	
	ПММА марки ТОСП	ПММА марки АCRYMA
Исходное значение	84,3°±0,8°/0,48 нм	74,2°±1,0°/1,68 нм
После УФ обработки	82,6°±1,0°/0,76 нм	84,7°±1,3°/2,04 нм
После термической обработки	82,4°±1,0°/0,64 нм	76,4°±0,5°/0,73 нм

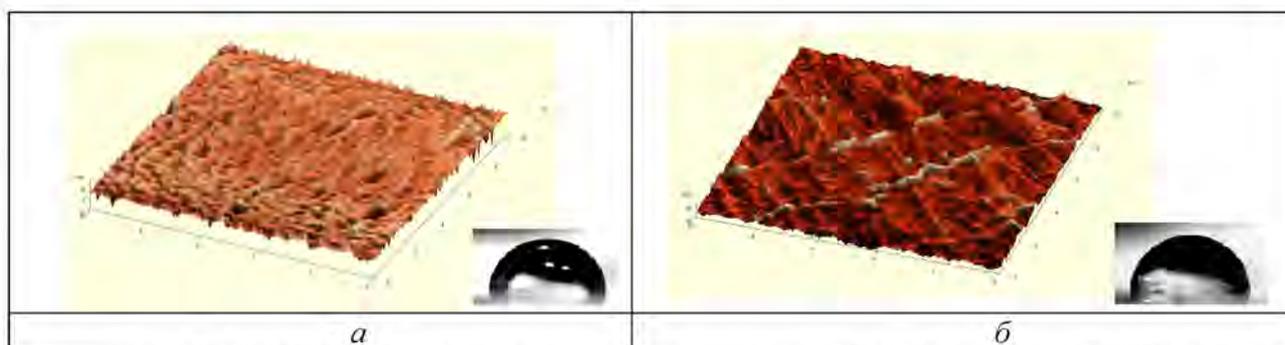


Рис. 6. СБОМ-изображение рельефа поверхности ПММА: а – марки ТОСП после термической обработки; б – марки АCRYMA после ультрафиолетовой обработки.

Справа приведены изображения капли на обработанной поверхности

Согласно полученным данным, указанные методы обработки не приводят к существенным изменениям свойств смачивания и шероховатости поверхности для ПММА марки ТОСП. Для ПММА марки АCRYMA наибольшее значения контактного угла наблюдается при ультрафиолетовой обработке с незначительным изменением шероховатости, тогда как при термической обработке наблюдается снижение шероховатости при практически неизменном значении угла смачивания.

Химическая обработка поверхности материалов

Химическую обработку, проводимую в данной работе, можно разделить на две группы в зависимости от применяемых материалов:

- обработка стекла марки К8, ПК и ПММА марки ТОСП. Для этого были использованы растворы щелочей 0,1М NaOH, 0,5М NaOH; метакрилоксипропил-(триметокси)-силан (далее – силан); 3 % водный раствор NaClO. Экспериментальные данные измерений контактных углов до и после химической обработки представлены на рис. 7, 8, 9;
- обработка полимеров ПММА марок ТОСП и АCRYMA с использованием серной кислоты (5М H₂SO₄) и алюмогидрида лития (LiAlH₄). Экспериментальные данные измерений контактных углов и шероховатости представлены в Табл. 2.

При воздействии на исследуемые материалы раствором щелочи 0,1М NaOH в нормальных условиях получены результаты, представленные на рис. 7. Выявлена следующая динамика изменения свойств поверхности образца К8: значения контактных углов после 15 мин и 2 ч обработки выше, чем в исходном состоянии, т. е. стекло приобретает гидрофобные свойства. Однако после 30 мин обработки поверхность становится более гидрофильной по сравнению с исходными свойствами. Оценка Ra по АСМ-изображениям (рис. 12а, 12г), полученным до и после обработки образцов К8 раствором щелочи 0,1М NaOH при температуре 38 °С в течение 2 ч показала, что значение Ra уменьшается с 0,57 нм (до обработки) до 0,33 нм (после обработки). Это изменение, вероятно, обусловлено тем, что

дефектный поверхностный слой, возникающий в процессе грубой полировки стекла и имеющий большую шероховатость, частично выщелачивается.

Согласно данным, приведенным на рис. 7, ПК проявляет более гидрофобные свойства после двух часовой обработки, тогда как выдерживание в щелочи в течение 15 мин и 30 мин приводит к практически одинаковым результатам, которые мало отличаются от начальных. Для ПММА не происходит существенных изменений свойств. Здесь наблюдается незначительное изменение значения шероховатости с 1,17 нм до 1,09 нм (рис. 10а, 10г), а рельеф поверхности после воздействия раствора щелочи практически не меняется.

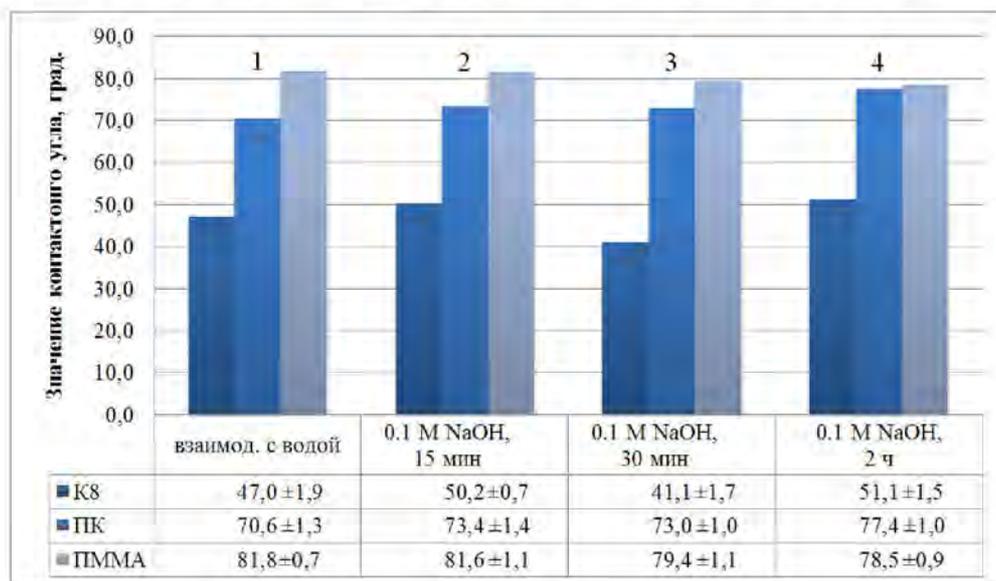


Рис. 7. Изменение величины контактных углов смачивания при взаимодействии образцов с водой до (1), после обработки 0,1М NaOH (в течение 15 мин (2), 30 мин (3) и 2 ч (4))

Обработка силаном поверхности К8 приводит к увеличению значения контактного угла (рис. 8), т. е. стекло приобретает гидрофобные свойства. Силан в качестве модификатора поверхности приводит к гидрофобизации за счет образования защитной пленки на поверхности материала. На основе полученных методом АСМ изображений (рис. 12а, 12б) можно предположить, что пленка силана на поверхности стекла является причиной увеличения значения Ra с 0,57 нм до 0,84 нм и повышения значения контактного угла с 47,0° до 68,2°.

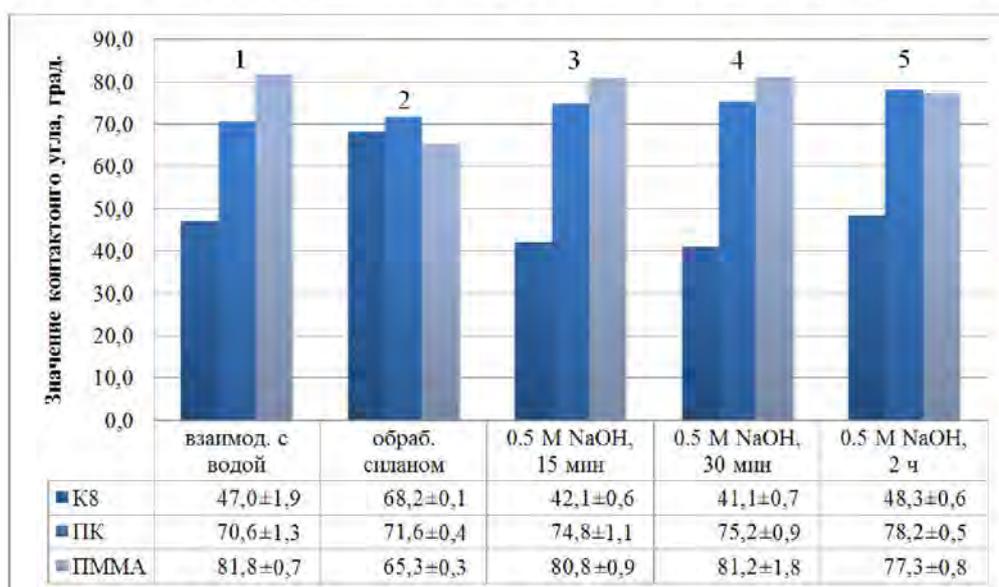


Рис. 8. Изменение величины контактных углов смачивания при взаимодействии образцов с водой до (1) и после обработки силаном (2), после обработки 0,5М NaOH (в течение 15 мин (3), 30 мин (4), 2 ч (5))

При обработке ПК силаном не выявлено существенного изменения значений контактного угла. Хотя наблюдалось изменение Ra с 1,14 нм до 1,81 нм (рис. 11а, 11б), но изменение угла смачивания было незначительно $\sim 1^\circ$ (рис. 8), что находится в пределах погрешности измерений. Образец ПММА при силанизации приобрел гидрофильные свойства: значение контактного угла до обработки составило $81,8^\circ$, после – $65,3^\circ$ (рис. 8). При этом наблюдалось увеличение Ra с 1,17 нм до 3,33 нм (рис. 10а, 10б). Данные АСМ-измерений (рис. 10а, 10б; рис. 11а, 11б) свидетельствуют о том, что обработка силаном влияет на шероховатость поверхности, но рельеф остается практически неизменным.

Результаты, представленные на рис. 8, показывают, что взаимодействие образца К8 со щелочью 0,5М NaOH в течение 15 и 30 мин приводит к снижению значений углов смачивания на $\sim 5^\circ$. Спустя 2 ч после нахождения образца в атмосферной среде поверхность приобретает первоначальные свойства. В случае с образцом ПК происходит постепенный рост контактного угла: примерно на 4° , 5° , 8° (рис. 8) после 15 мин, 30 мин и 2 ч соответственно. Образец ПММА проявляет устойчивость к воздействию щелочи. Только через 2 ч после обработки наблюдается снижение значения угла смачивания с $81,8^\circ$ до $77,3^\circ$.

Результаты обработки образцов исследуемых материалов 3 % водным раствором NaClO в течение 15 мин, 30 мин и 2 часов представлены на рис. 9. Для образца К8 максимальное значение угла (исходное значение $47,0^\circ$) наблюдается после 15 мин и составляет $61,6^\circ$, а начиная с 30 мин, свойства поверхности возвращаются к исходному состоянию. Однако выдерживание образца К8 в растворе NaClO в течение 24 ч приводит к тому, что поверхность приобретает гидрофильные свойства и воспроизводимо оценить значения контактного угла не удастся. Полученные в этом случае АСМ-изображения (рис. 12а, 12в) показывают существенное изменение рельефа поверхности при незначительном изменении шероховатости (0,57 нм и 0,47 нм до и после обработки).

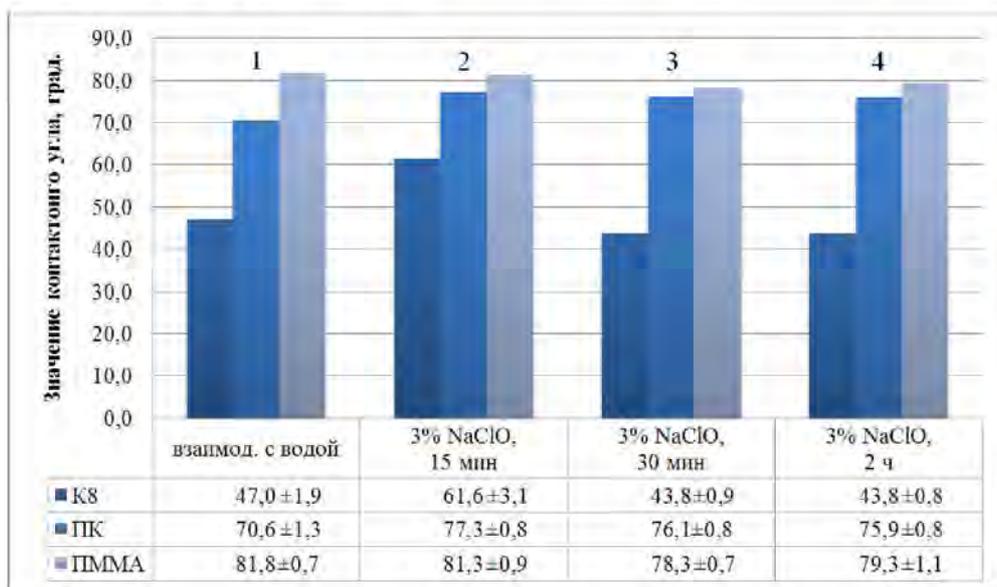


Рис. 9. Изменение величины контактных углов смачивания при взаимодействии образцов с водой до (1), после обработки 3 % раствором NaClO (в течение 15 мин (2), 30 мин (3) и 2 ч (4))

Для образца ПК при подобной обработке наблюдается увеличение значения угла с $70,6^\circ$ до $77,3^\circ$ после 15 мин, а выдерживание полимера в течение длительного времени незначительно снижает это значение. Обработка ПММА гипохлоритом натрия практически не приводит к изменению значений контактного угла, даже при выдерживании образца в растворе в течение 24 ч. Полученные для этого случая АСМ-изображения (рис. 10а, 10в) свидетельствуют о сохранении пористой структуры полимера, а значение шероховатости при этом практически не меняется и составляет 1,17 нм и 1,20 нм до и после обработки соответственно.

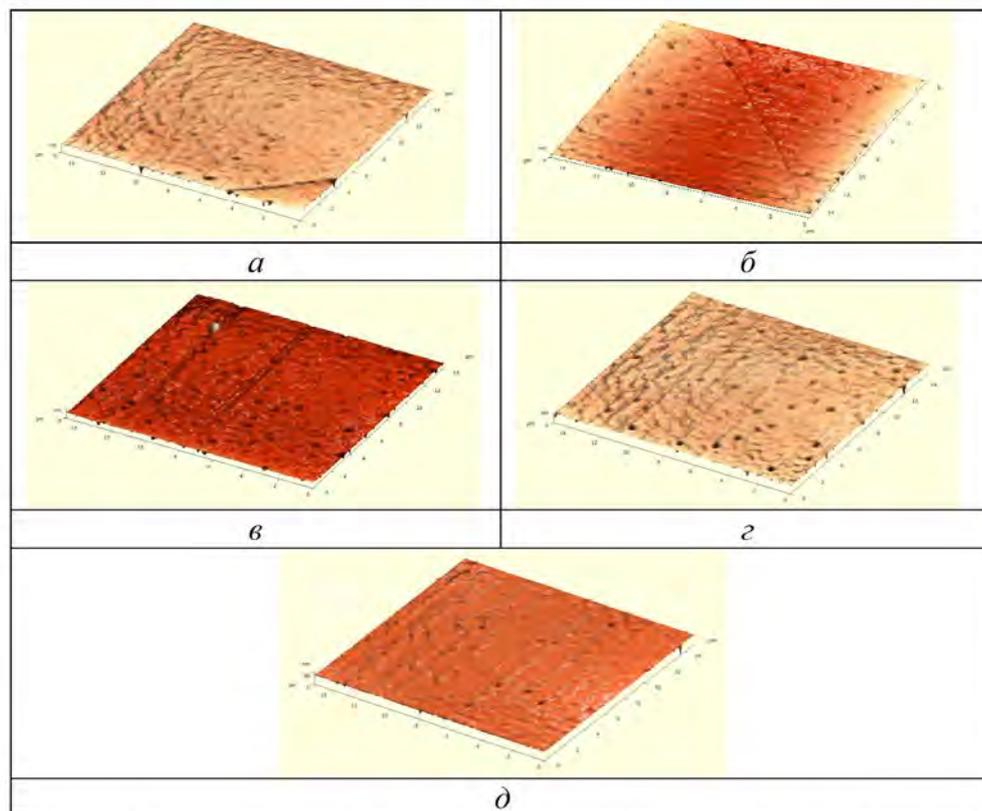


Рис. 10. АСМ-изображение рельефа поверхности ПММА: а – до обработки ($Ra=1,17$ нм); б – после обработки силаном ($Ra=3,33$ нм); в – после обработки 3 % NaClO (24 ч; $Ra=1,20$ нм); г – после обработки 0,1M NaOH (2 ч, $t=38$ °C; $Ra=1,09$ нм); д – после плазменной обработки в среде Ar в течение 30 с ($Ra=1,82$ нм)

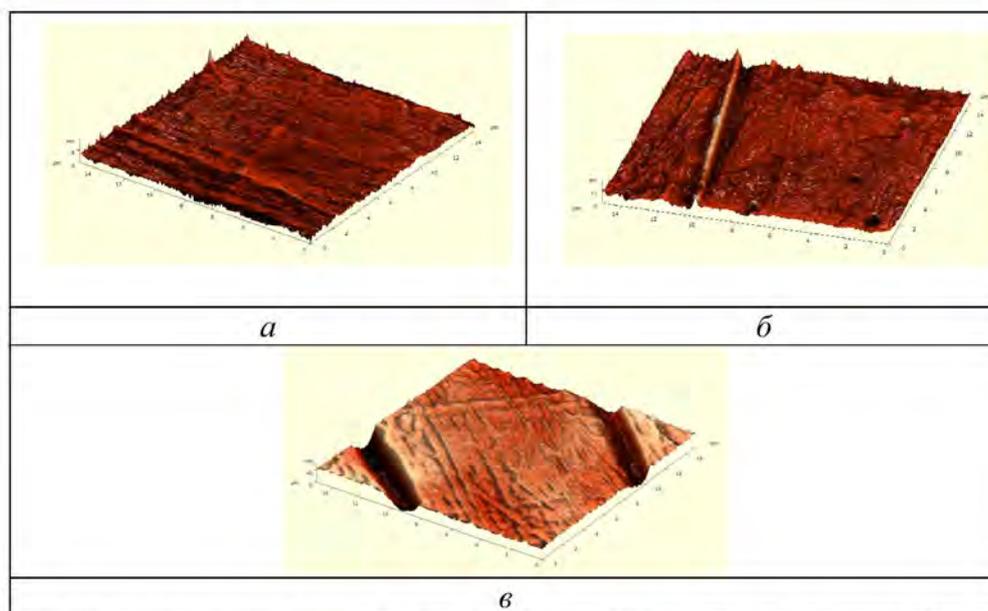


Рис. 11. АСМ-изображение рельефа поверхности ПК: а – до обработки ($Ra=1,14$ нм); б – после обработки силаном ($Ra=1,81$ нм); в – после плазменной обработки в среде Ar в течение 30 с ($Ra=5,71$ нм)

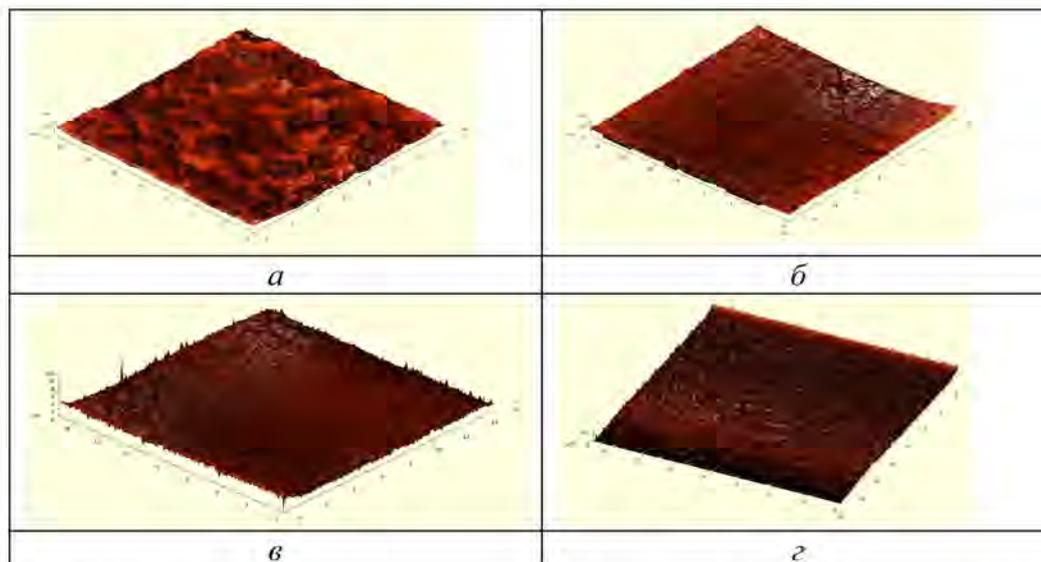


Рис. 12. АСМ-изображение рельефа поверхности К8: а – до обработки ($Ra=0,57$ нм); б – после обработки силаном ($Ra=0,84$ нм); в – после обработки 3 % $NaClO$ (24 ч; $Ra=0,47$ нм); з – после обработки 0,1М $NaOH$ (2 ч, $t=38$ °С; $Ra=0,33$ нм)

Химическая обработка для второй группы материалов осуществлялась следующим образом.

1. *Обработка серной кислотой.* Образцы выбранного полимера помещались: а) в 25 % изопропиловый спирт (ИПС); б) в 30 % этиловый спирт. Промывались в выбранном спирте в ультразвуке в течение 10 мин. Высушивались при комнатной температуре, далее помещались в 5М серную кислоту и выдерживались в суховоздушном термостате при температуре 70 °С в течение 30 мин. Далее образцы промывались в дистиллированной воде и высушивались при комнатной температуре. Затем проводились все необходимые измерения.

2. *Обработка алюмогидридом лития.* Суспензию алюмогидрида лития растворяли в диэтиловом эфире, образец помещали в данный раствор и выдерживали в течение 24 ч. После промывали в 100 % диэтиловом эфире, далее промывали в дистиллированной воде в ультразвуке в течение 10 мин, высушивали и проводили измерения.

Таблица 2

Изменение значений контактного угла и шероховатости поверхности после обработки ПММА серной кислотой и алюмогидридом лития

	Контактный угол / шероховатость	
	ПММА марки ГОСП	ПММА марки АСРУМА
Исходное значение	84,3°±0,8°/0,48 нм	74,2°±1,0°/1,68 нм
После обработки ИПС и серной кислотой	82,1°±1,2°/1,43 нм	68,7°±0,9°/2,13 нм
После обработки этанолом и серной кислотой	83,0°±1,0°/-	70,2°±0,8°/1,97 нм
После обработки алюмогидридом лития	68,1±0,8°/4,44 нм	обработка не проводилась в силу недостаточной стойкости материала к данному реактиву

В соответствии с полученными результатами (Табл. 2), можно сделать вывод, что обработка алюмогидридом лития ПММА марки ГОСП оказывает наиболее существенное воздействие на шероховатость поверхности (происходит увеличение параметра Ra практически в 10 раз) и ее свойства смачивания (значение контактного угла снижается на 16°).

Наиболее эффективным методом обработки ПММА марки АCRYМА с точки зрения максимального изменения угла смачивания (значение угла после обработки отличается от исходного на 6°) является обработка ИПС и серной кислотой. При этом наблюдается наибольшее значение шероховатости поверхности.

На рис. 13 представлены примеры изображений, полученных методом микроскопии ближнего поля (зондовая нанолaborатория NTEGRA Solaris) в поперечно-силовой моде (размер кадра 10×10 мкм).

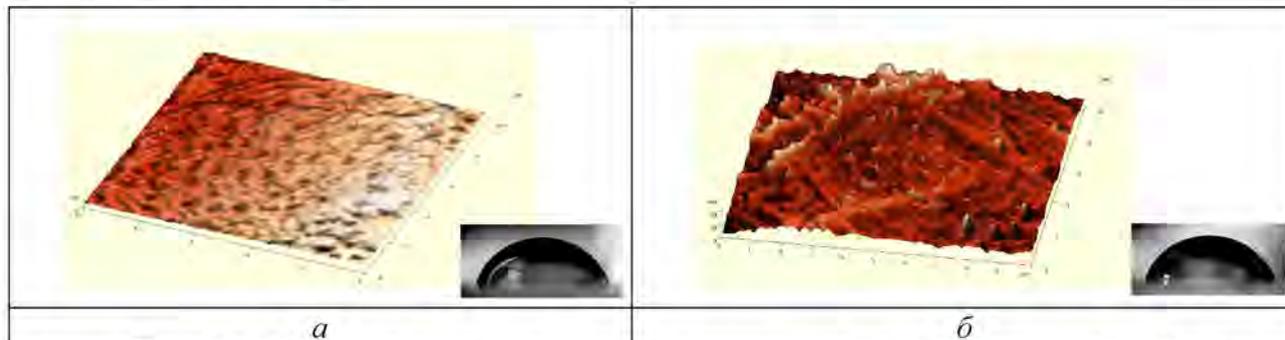


Рис. 13. СБОМ-изображение рельефа поверхности ПММА: а – марки ТОСП после обработки алюмогидридом лития; б – марки АCRYМА после обработки ИПС и серной кислотой. Справа приведены изображения капли на обработанной поверхности

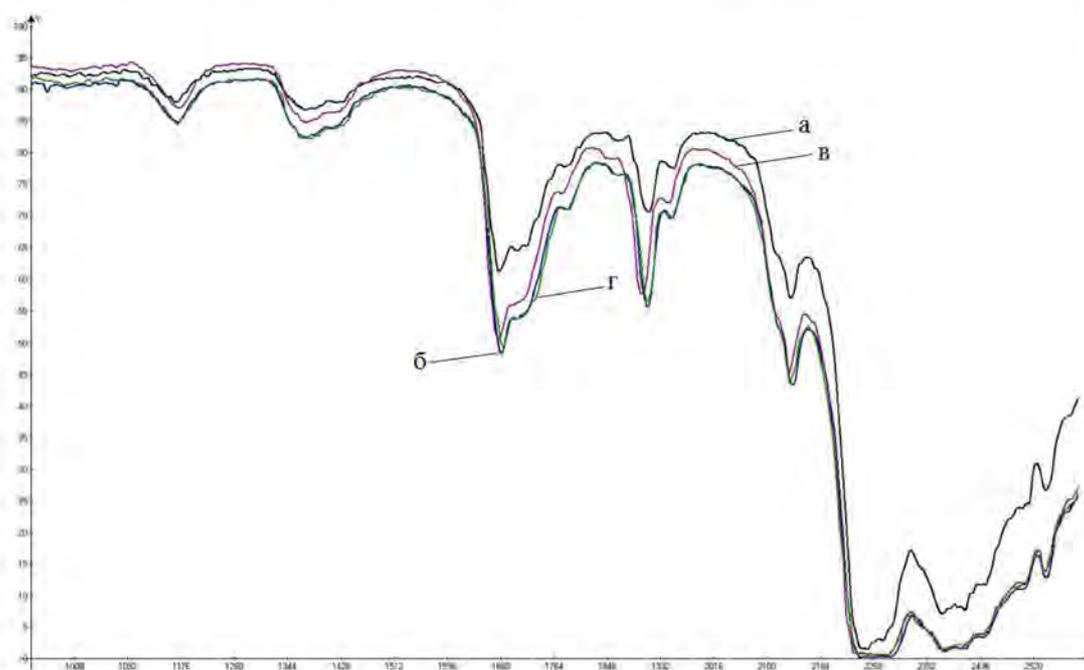


Рис. 14. Спектральные зависимости ПММА марки ТОСП: а – для необработанной поверхности; б – обработанной алюмогидридом лития; в – обработанной ИПС и серной кислотой; г – обработанной этанолом и серной кислотой

Наибольшее различие в спектральных зависимостях светопропускания образцов из всех проведенных измерений наблюдается для ПММА марки ТОСП при обработке серной кислотой и алюмогидридом лития (рис. 14), соответственно эти методы и оказывают наибольшее влияние. Различие спектров в этом случае свидетельствует о том, что на поверхности происходит изменение химических свойств материала.

На основании всех полученных результатов, наиболее эффективными методами обработки поверхности являются: для стекла марки К8 – метод силанизации, для ПММА марок ТОСП и АCRYМА – обработка серной кислотой и алюмогидридом лития. Данные методы были выбраны не только с позиции изменения свойств смачивания и шероховатости, но и с точки зрения активации поверхности для образования необходимых функциональных

групп с целью осуществления пришивки и прочной фиксации акриламидного геля к поверхности микрочипа. Последнее существенно для реализации метода молекулярных колоний при обнаружении молекул ДНК.

После проведения исследований на открытых поверхностях образцов для проверки пригодности выбранных методов были изготовлены чипы из стекла К8 методом кислотного травления и фотолитографии и полимерные чипы методом термического формования из ПММА обоих марок для реализации метода молекулярных колоний (ММК) при определении онкологического маркера цитокератина-19 (СК-19) в биологической пробе.

На рис. 15 представлены изображения молекулярных колоний, которые были получены в результате проведения ПЦР в реакционных камерах с гелем на стеклянном микрочипе. ПЦР осуществляли на приборе АНК-32 (ИАП РАН) за 47 циклов. Использовались FRET – зонды Су3 – Су5.



Рис. 15. Молекулярные колонии комплементарной ДНК СК-19. Изображение получено на сканере микрочипов ScanArray™ Express. FRET – зонды Су3 – Су5

При повторении экспериментов по получению молекулярных колоний СК-19 в лунках полимерных микрочипов детектирование проводили на макете прибора для цифрового ПЦР анализа (ИАП РАН). Использовались FRET – зонды FAM – Су5. Примеры изображений, полученные на полимерном чипе, изготовленном из ПММА марки ТОСП, представлены на рис. 16.

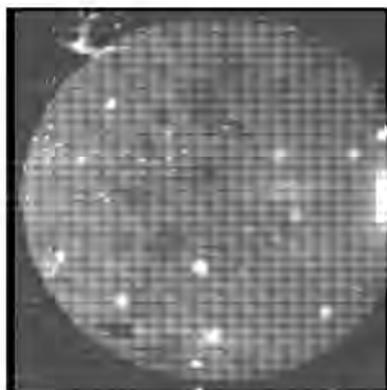


Рис. 16. Молекулярные колонии комплементарной ДНК СК-19. Изображение получено на макете прибора для цифрового ПЦР анализа (ИАП РАН). FRET – зонды FAM – Су5

Таким образом, важным практическим результатом подтверждения выбора наиболее эффективных методов обработки является визуализация изображений молекулярных колоний на микрочипе с помощью сканера микрочипов ScanArray™ Express и макета прибора для цифрового ПЦР анализа (ИАП РАН). Одной из основных аналитических характеристик метода молекулярных колоний является чувствительность. При экспериментах с обработанными чипами была продемонстрирована чувствительность определения на уровне отдельных молекул, что является прекрасным подтверждением правильности выбранного метода обработки поверхности.

Достигнутые результаты

В работе приведены результаты исследований свойств смачивания и измерения рельефа поверхностей, полученные при плазменной, термической и ультрафиолетовой обработке

материалов МФЧ (стекла К8, ПК, ПММА марки ТОСП и марки АСРУМА) и химической обработке (в растворе щелочей, гипохлорита натрия, силане, серной кислоте и алюмогидриде лития).

В ходе работы было показано, что после плазменной обработки поверхностей ПК и ПММА происходит существенное снижение значений углов смачивания для обоих полимеров как при взаимодействии с водой, так и при взаимодействии со щелочью (0,1М NaOH). В случае с ПММА наблюдалось незначительное увеличение параметра Ra , а для ПК значение параметра Ra возросло в 5 раз по сравнению с исходным.

При воздействии на исследуемые материалы раствором щелочи 0,1М NaOH наблюдалось: а) изменение гидрофильности поверхности К8; б) проявление гидрофобных свойств ПК после двухчасовой обработки; в) для ПММА не выявлено существенных изменений свойств.

При изучении взаимодействия образцов со щелочью 0,5М NaOH выявлено: а) что для стекла К8 минимальное значение угла смачивания наблюдается после 30 мин обработки, а после 2 ч поверхность приобретает первоначальные свойства; б) для ПК происходит постепенный рост контактного угла; в) для ПММА наблюдается устойчивость свойств к воздействию щелочи.

Обработка силаном поверхности К8 приводит к увеличению значения контактного угла (стекло приобретает гидрофобные свойства), при этом увеличивается значение Ra . При обработке ПК силаном не выявлено существенного изменения значений контактного угла, хотя наблюдалось изменение Ra . Образец ПММА приобрел гидрофильные свойства, при этом зарегистрировано увеличение Ra почти в три раза.

При обработке образцов исследуемых материалов 3 % водным раствором NaClO получены следующие результаты: а) для образца К8 максимальное значение угла наблюдается после 15 мин, а начиная с 30 мин, свойства поверхности возвращаются к исходному состоянию; б) для образца ПК происходит увеличение угла на 7° после 15 мин, а последующее воздействие раствором незначительно снижает это значение; в) обработка ПММА практически не приводит к изменению значений контактного угла, а АСМ-изображения показывают, что сохраняется пористая структура полимера и шероховатость остается практически неизменной.

Таким образом, в зависимости от материала МФЧ эффективными являются разные методы обработки.

В случае стекла К8 для придания поверхности гидрофобных свойств применяется обработка силаном. Достоинства обработки: устойчивость приобретаемых свойств, незначительное изменение шероховатости.

Для ПММА возможны два способа придания поверхности гидрофильных свойств: силанизация поверхности или плазменная обработка. В последнем случае шероховатость остается практически неизменной, тогда как химическая обработка увеличивает Ra ~ в два раза.

В случае с ПК для уменьшения смачивания рекомендуется плазменная обработка. При этом Ra увеличивается ~ в пять раз. Недостатком плазменной обработки полимеров является неустойчивость приобретаемых свойств.

Для обработки поверхности уже готовых чипов применялись методы силанизации для стекла К8 и обработка серной кислотой и алюмогидридом лития для ПММА обеих марок.

Эксперименты по обнаружению окномаркеров цитокератина-19 на изготовленных микрофлюидных чипах показали правильность и состоятельность выбранных методов обработки. Данные эксперименты подтверждены полученными изображениями молекулярных колоний.

Области возможного использования результатов проекта

Основными требованиями проведения анализа являются его высокая чувствительность, быстрота определения аналита, доступность и др. Для достижения перечисленных характеристик аналитических методов, а также для совершенствования методов анализа, требуется разработка новых современных приборов. В частности, разработка новых топологий

и конструкций микрофлюидных устройств. Аналитические характеристики устройства (в частности чувствительность, воспроизводимость, достоверность и точность определения аналита, время анализа) существенно зависят от характеристик поверхности микрофлюидного устройства.

Результаты предлагаемой работы могут быть использованы при создании современных аналитических и технологических систем на микрофлюидной платформе, при разработке новых методик экспресс-анализа биологических проб, объектов окружающей среды и т. д. Создаваемые микрофлюидные устройства предназначены для широкого применения в химических и биологических исследованиях, медицинской диагностике, для мониторинга состояния окружающей среды и т. д. Так, с помощью метода полимеразной цепной реакции, проводимой на таких чипах, станет возможным получение не только качественного результата «да / нет», но и количественного, т. е. возможность установления количества молекул ДНК в биологической пробе на ранних стадиях заболевания.

Заключение

В течение последнего десятилетия наблюдается стремительный рост проектирования приборов для биохимического анализа на основе микрофлюидных устройств. Преимуществами этих устройств являются: компактность, малый объем образца / реагента, быстрота определения аналита, возможность интеграции устройств в другие системы и приборы, возможность создания приборов для анализа в полевых условиях. Область применения данных приборов чрезвычайно широка: медицинская диагностика, генетический анализ, биотехнологии, криминалистика, космические исследования, экологический мониторинг и т. д.

Микрофлюидное устройство представляет собой компактную конструкцию, в самом простейшем случае состоящую из двух герметично связанных пластин, на поверхности которых сформирована система микроканалов, сосудов, реакторов и других функциональных элементов. Для обеспечения эффективной работоспособности устройства и достижения высоких аналитических характеристик требуется придать рабочим элементам устройства определенные поверхностные свойства. Это приводит к необходимости изучить влияние методов физической и химической обработки на свойства материалов, применяемых при изготовлении микрофлюидных устройств. Исследования, при которых учитываются многопараметрические характеристики функциональных элементов микрочипа (гидрофильность / гидрофобность, шероховатость, неоднородность поверхности, ее физико-химические свойства и т. д.), стали проводиться только в последнее время ведущими зарубежными фирмами и организациями, занимающимися разработкой микрофлюидных платформ для аналитических систем.

Были достигнуты все поставленные задачи. Главным подтверждением правильности выбранных методов обработки поверхности являлись эксперименты с обработанными чипами, а именно реализация на чипах метода молекулярных колоний с демонстрацией чувствительности определения на уровне отдельных молекул. Также были подготовлены материалы для публикации и участия в конференции.

Результаты работы будут использоваться при создании современных аналитических и технологических систем на микрофлюидной платформе и разработке новых методик экспресс-анализа биологических проб.

Публикации

1. *Посмитная Я.С., Кухтевич И.В., Евстапов А.А., Тутик А.Н.* Целевая обработка поверхности материалов микрофлюидных чипов // Научное приборостроение. 2012 (в печати).
2. *Тутик А.Н., Посмитная Я.С., Рудницкая Г.Е., Лукашенко Т.А., Цымбалов А.И., Евстапов А.А.* Полимерные микрочиповые устройства для полимеразной цепной реакции // Тезисы IV Международной научно-практической конференции «Высокие технологии, фундаментальные и прикладные исследования в физиологии, медицине, фармакологии» (Санкт-Петербург, 1–2 ноября 2012 г.) (в печати).

Литература

1. Рудницкая Г.Е., Евстратов А.А. Микрочиповые устройства для полимеразной цепной реакции. Ч. 1. Основные принципы ПЦР, конструкция и материалы микрочипов // Научное приборостроение. 2008. Т. 18. № 3. С. 3–20.
2. Shilpiekandula V., Burns D.J., El Rifai K. et al. Metrology of Microfluidic devices: A Review // ICOMM. 2006. № 49. Published on-line.
3. Shaurya Prakash, Karacor M.B., Banerjee S. Surface modification in microsystems and nanosystems // Surface Science Reports. 2009. Vol. 64. № 7. P. 233–254.
4. Ratner B.D. Surface modification of polymers: chemical, biological and surface analytical challenges // Biosensors and Bioelectronics. 1995. Vol. 10. P. 797–804.
5. Ozdemir M., Sadikoglu H. A new and emerging technology: Laser-induced surface modification of polymers // Trends in Food Science and Technology. 1998. Vol. 9. P. 159–167.
6. Oehr C. Plasma surface modification of polymers for biomedical use // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research: Section B. 2003. Vol. 208. P. 40–47.
7. Bodas D.S., Gangal S.A. Structural characterization of sputtered PMMA in argon plasma // Materials Letters. 2005. Vol. 59. P. 2903–2907.
8. Hegemann D., Brunner H., Oehr C. Plasma treatment of polymers for surface and adhesion improvement // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research: Section B. 2003. Vol. 208. P. 281–286.
9. Cho J.S., Han S., Kim K.H., Beag Y.W., Koh S.K. Surface modification of polymers by ion-assisted reaction // Thin Solid Films. 2003. Vol. 445. P. 332–341.
10. Schulz U., Munzert P., Kaiser N. Surface modification of PMMA by DC glow discharge and microwave plasma treatment for the improvement of coating adhesion // Surface and Coatings Technology. 2001. Vol. 142–144. P. 507–511.
11. Stratakis E., Ranella A., Fotakis C. Biomimetic micro / nanostructured functional surfaces for microfluidic and tissue engineering applications // Biomicrofluidics. 2011. Vol. 5. P. 013411-1–013411-31.
12. Drelich J., Chibowski E., Desheng Meng D. et al. Hydrophilic and superhydrophilic surfaces and materials // Soft Matter. 2011. Vol. 7. № 21. P. 9804–9828.
13. Arayanarakool R., Shui L., Berg A. et al. A new method of UV-patternable hydrophobization of micro- and nanofluidic networks // Lab on a Chip. 2011. Vol. 11. № 24. P. 4260–4266.
14. Sun-Mi Choi, Won-Kyu Yang, Yong-Won Yoo, Woo-Kul Lee. Effect of surface modification on the in vitro calcium phosphate growth on the surface of poly(methyl methacrylate) and bioactivity // Colloids and Surfaces B: Biointerfaces. 2010. Vol. 76. P. 326–333.
15. Brown L., Koerner T., Horton H. et al. Fabrication and characterization of poly(methyl methacrylate) microfluidic devices bonded using surface modification and solvents // Lab on a Chip. 2006. Vol. 6. P. 66–73.
16. Cheng Ji-Yen, Wei Cheng-Wey et al. Direct-write laser micromachining and universal surface modification of PMMA for device development // Sensors and Actuators B: Chemical. 2004. Vol. 99. № 1. P. 186–196.
17. Gervinskas G. High-precision interferometric monitoring of polymer swelling using a simple optofluidic sensor // Sensors and Actuators B: Chemical. 2011. Vol. 159. № 1. P. 39–43.
18. Stamm M. (ed.). Polymer Surfaces and Interfaces: Characterization, Modification and Applications. Springer, 2008. – 324 p.



Савич Ксения Андреевна
Факультет инженерно-физический
Кафедра лазерных технологий и экологического приборостроения
Email: savich_ksenia@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДА ВЛАЖНОЙ ЛАЗЕРНОЙ ОЧИСТКИ МИКРОРЕЛЬЕФНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ

К.А. Савич

Научный руководитель – аспирант А.А. Самохвалов

Введение

Основной проблемой данного проекта является неполноценность современных способов очистки поверхностей, а также преимущества лазерной очистки перед другими их видами (на примере очистки анилоксовых валов).

Цель работы – поиск оптимального способа очистки микрорельефных поверхностей. Для достижения поставленной цели были сформулированы и выполнены следующие задачи:

- изучение современных способов очистки и выявление их недостатков;
- анализ лазерной очистки поверхностей (сухой и влажной);
- изучение физического механизма влажной лазерной очистки;
- сухая очистка анилоксового вала;
- влажная очистка анилоксового вала;
- сравнение результатов.

Суть процесса очистки состоит в удалении поверхностных слоев изделия, образованных какими-либо загрязнениями или покрытиями, иногда даже включая поверхностный слой самого основного материала. В связи с тем, что промышленность и техника развиваются, производство изделий усложняется и совершенствуется, возрастают требования к их качеству и надежности, в том числе к качеству очистки.

Исходя из обзора современной научной литературы можно сделать вывод, что процесс очистки до сих пор является не оптимальным и не высококачественным процессом, несмотря на то, что очистка – одна из основных технологических операций во многих отраслях промышленности. Процесс очистки необходим не только в технологии формирования конечного изделия, но и при производстве изделия. Например очистка от производственных загрязнений разного рода, очистка перед повторной окраской и так далее.

Существует несколько способов очистки поверхностей: механический, химический и физико-химический методы взаимодействия активной очищающей среды с загрязнениями и очищаемой поверхностью. Все они имеют набор отрицательных свойств, в частности, нежелательное воздействие на основной материал изделия, дополнительное загрязнение и / или плохие экологические параметры процесса. Таким образом, очистка высокого качества – весьма проблемная, серьезная и трудоемкая операция.

Все вышесказанное объясняет быстро возрастающий интерес к альтернативным методам очистки, в частности к вопросам лазерной очистки поверхностей.

Выбор технологического лазера для очистки растриванных валов

Многие технологические лазеры обладают на сегодняшний день высокими эксплуатационными показателями. Критерием выбора того или иного лазерного источника являются особенности заданного технологического процесса, производительность же будет полностью зависеть от технических возможностей лазера.

Первым критерием, которому должен удовлетворять излучатель для лазерной очистки микрорельефной поверхности, является длина волны λ , соответствующая поглотительной способности загрязняющих частиц.

Один анилоксовый вал используют для печати несколькими красками, поэтому в его ячейках накапливаются пигменты разных красок, и цвет загрязнителя получается черный. Для ИК-излучения это соответствует максимальной поглотительной способности. Наилучшими в этом случае являются лазеры с длинами волн до 1 мкм, то есть Nd: YAG, волоконный и полупроводниковый. Для длины волны CO₂-лазера ($\lambda=10,6$ мкм) рассматриваемый загрязнитель является практически прозрачным.

Следующий критерий – временные характеристики излучения: длительность импульса t и возможные частоты модуляции f . Эффективность лазерной очистки тем выше, чем короче длительность импульса. Это связано с тем, что отрыв частицы загрязнителя происходит вследствие ее быстрого температурного расширения (термомеханический эффект). Вместе с тем, для обеспечения безопасной очистки, энергия лазерного импульса должна быть много меньше необходимой для разрушения очищаемой поверхности. Это можно обеспечить импульсным режимом работы лазерного источника.

Подходящими лазерами являются Nd: YAG и волоконный. Для первого излучателя возможно использование внутрирезонаторного акустооптического модулятора, а частота следования импульсов второго регулируется системой накачки. Длительность импульсов обозначенных лазеров соответствует наносекундному диапазону, что является оптимальным.

Третий критерий выбора – возможность сфокусировать лазерный луч в пятно, соизмеримое с величиной ячейки анилоксового вала. Современные высоколинейтурные валы имеют ширину ячейки в 20–30 мкм. Таким образом, в технологическом процессе их лазерной очистки необходимо изменять диаметр пятна в соответствии с линиатурой валика. По этому критерию единственно возможным излучателем является волоконный лазер, который имеет одномодовый состав излучения и не требует специальной оптики.

Последним критерием в выборе лазерного источника для очистки является совокупность следующих эксплуатационных характеристик: ресурс активной среды, наличие волоконной доставки излучения, вид охлаждения, массогабаритные размеры.

Всем обозначенным эксплуатационным требованиям одновременно, удовлетворяет волоконный иттербиевый лазер (рис. 1), выходная мощность которого составляет 10 Вт, что достаточно для очистки анилоксовых валов.

Технические характеристики данного лазера сведены в Табл. 1.

Таблица 1

Технические характеристики волоконного лазера YLP-0,5 (НТО ИРЭ-Полус)

Оптические характеристики	
Номинальная средняя выходная мощность, Вт	> 10,0
Номинальная энергия в импульсе, мДж	> 0,5
Частота повторения, кГц	20–100
Длина волны излучения, нм	1060±10
Режим работы	Импульсный
Состояние поляризации	Случайное
Длительность импульса, нс	< 140
Перестройка средней выходной мощности, Вт	0–10
Оптический выход	
Выходной модовый состав, M ²	< 2
Выходное волокно, μм	20/125/3000/7000
Диаметр выходного пучка (1/e ²), мм	6,0–10,5
Некоаксиальность выходного пучка, мрад	<10
Смещение выходного пучка, мм	<3
Длина выходного волокна, м	1

Электрические характеристики	
Напряжение питания, В DC	24
Номинальный ток (при 20 °С), А	7,0
Полный максимальный ток, А	8,0
Энергопотребление при 20°С (включая воздушное охлаждение), Вт	< 200
Общие характеристики	
Габариты, Д x Ш x В, мм	215x95x286
Вес, кг	< 8
Диапазон рабочих температур, °С	0 до 42
Охлаждение	воздушное
Время прогрева, сек	60
Температура хранения, °С	-10 до 60



Рис. 1. Волоконный иттербиевый лазер мощностью 10 Вт

Волоконный лазер

Волоконные лазеры были разработаны сравнительно недавно, в 1980-х гг. прошлого столетия. Первый волоконный лазер был создан Снитцером в 1961 г. после демонстрации лазерной генерации в стекле, легированном ионами неодима. Активный элемент лазера представлял собой стеклянную нить, покрытую оболочкой из стекла с пониженным показателем преломления. Однако в то время это направление лазерной физики развития не получило, так как основным недостатком этого устройства было сильное затухание излучения при прохождении через волокно.

Однако через несколько лет Снитцер создал первый лазер, в котором в качестве рабочей среды использовалось оптическое волокно, легированное неодимом.

Стремительное развитие волоконных лазеров началось с конца 1980-х. Основные направления исследований были связаны с экспериментированием в использовании различных примесей в оптических волокнах для достижения заданных параметров генерируемого излучения. В частности, особый интерес представляла генерация сверхкоротких импульсов в инфракрасной области спектра. С 1993 г. в сенсорике и сфере связи стали широко использоваться промышленные образцы эрбиевых лазеров. В 1990-е гг. мощность генерации эрбиевых лазеров превысила порог в 1 Вт, был продемонстрирован эрбиевый четырехваттный лазер. После 2000 г. к себе привлекли внимание иттербиевые лазеры, показавшие значительный потенциал для увеличения мощности.

Создание современных высокоэффективных и компактных волоконных лазеров стало возможным только благодаря разработке в начале 1970-х гг. стеклянных волоконных световодов с низкими оптическими потерями (≤ 1 дБ/км в ближней ИК-области) и последующему бурному развитию волоконно-оптической связи. Последнее обстоятельство стало решающим фактором в разработке и промышленном производстве долгоживущих

и высокоярких лазерных диодов и целого набора специальных волокон световодов. Среди них – световоды, легированные редкоземельными элементами, нелинейные, фоточувствительные, инфракрасные и ряд других. Эта элементная база и явилась основой для создания волоконных лазеров, включая непрерывные мощные лазеры, пикосекундные и фемтосекундные, одночастотные и ВКР-лазеры и др. [1].

В настоящее время известны модели волоконных технологических лазеров мощностью до 20 кВт. Эти устройства имеют невысокую стоимость, компактны, удобны для сопряжения с магистральным волокном при минимуме вносимых потерь. Сегодня они достигли уровня характеристик, в первую очередь мощности и надежности, позволяющих с успехом использовать их для решения различных задач лазерной обработки материалов. Они представляют собой практически идеальные преобразователи световой энергии лазерных диодов накачки в лазерное излучение с рекордным КПД по сравнению, например, с твердотельными Nd: YAG-лазерами.

Создание таких лазеров явилось результатом многолетнего развития лазерной техники. В последнее время волоконные лазеры (рис. 2) активно вытесняют традиционные из таких областей их применения, как лазерная резка и сварка материалов, маркировка и обработка поверхностей, полиграфия и скоростная лазерная печать. Их используют в лазерных дальномерах и трехмерных локаторах, аппаратуре для телекоммуникаций, в медицинских установках и других сферах промышленных и военных комплексов.

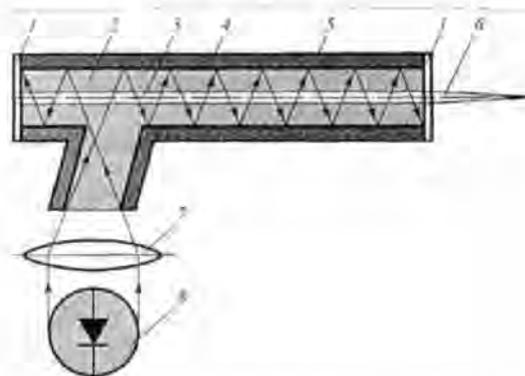


Рис. 2. Схема волоконного лазера: 1 – торцевое зеркало;
2 – оптическое кварцевое волокно; 3 – активированное световодящее волокно;
4 – светотражающее покрытие; 5 – защитная оболочка; 6 – лазерный луч;
7 – фокусирующая линза; 8 – светодиоды

Главная особенность волоконного лазера заключается в том, что излучение возникает в узком волокне 3 (диаметр всего 6–8 мкм), фактически находящемся внутри кварцевого волокна 2, диаметр которого 400–600 мкм.

Излучение лазерных диодов накачки (светодиодов) 8 вводится в оптическое кварцевое волокно 2, распространяется по всему сложному составному волокну (длиной несколько десятков метров, которое наматывается на какую-либо поверхность), отражаясь от светотражающего покрытия 4. Проще говоря, это излучение выполняет оптическую накачку сердцевинки, в которой и происходит усиление спонтанного излучения ионов редкоземельных элементов. На концах волокна на сердцевинке располагают два дифракционных зеркала 1, одно – полупрозрачное, а другое – сплошное. Полупрозрачное зеркало пропускает только часть светового излучения, полученного после многократного отражения, а сплошное зеркало, вообще не пропуская световой поток, отражает его. Таким образом, малая часть излучения выходит в виде лазерного пучка, а другая, испытывает переотражение от стенок волокна и двух зеркал, возмещая тем самым ушедшее излучение. Система уравнивается. Так и формируется резонатор волоконного лазера. Через полупрозрачное зеркало выходит

идеальный одномодовый лазерный луч с достаточно равномерным распределением мощности.

Активная среда и резонатор лазера являются одним целым: брэгговские решетки записываются прямо в легированном волокне (в некоторых случаях привариваются). Принципиальное преимущество волоконных световодов как лазерной среды по сравнению с объемными активными средами заключается в низких оптических потерях, большой длине взаимодействия (более метра) и малом диаметре активированной сердцевины (5–10 мкм), что обеспечивает высокую степень накачки излучением лазерных диодов. Использование внутриволоконных брэгговских решеток показателя преломления в качестве распределенных отражателей обеспечивает высокую пространственно-временную стабильность волоконных лазеров. В данном случае брэгговские решетки работают как плоско-параллельный резонатор (интерферометр Фабри-Перо).

Мощность волоконного лазера, применяемого для технологических целей, должна составлять от 100 Вт до 4–6 кВт. Излучение такой мощности получают сочетанием многокаскадного усиления в волокнах с набором мощности излучения от нескольких лазеров с меньшей мощностью. Волоконный лазер со ступенчатым усилением показан на рис. 3.

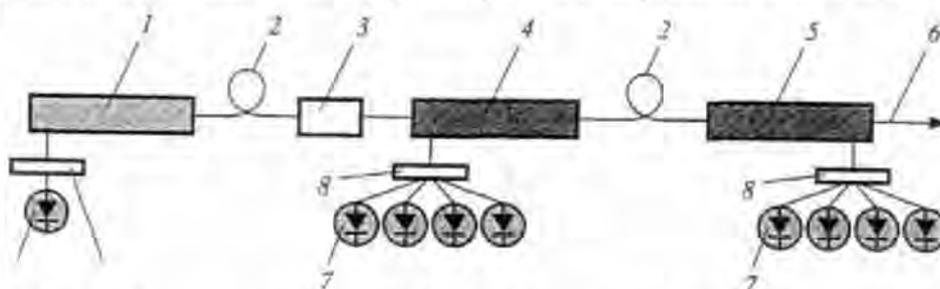


Рис. 3. Схема многокаскадного усиления в волокнах путем набора мощности излучения от нескольких лазеров с меньшей мощностью: 1 – задающий волоконный лазер; 2 – соединяющее световое волокно; 3 – изолятор; 4 – мощный усиливающий волоконный лазер первой ступени; 5 – мощный усиливающий волоконный лазер второй ступени; 6 – лазерный луч; 7 – светодиоды; 8 – фокусирующие системы светодиодов

Основные преимущества волоконных лазеров в сравнении с другими их видами.

- Оптические.

Длина излучения волны волоконного лазера $\lambda=1,06$ мкм. Она дает ему ряд преимуществ:

- хорошая фокусировка через линзы, что позволяет сэкономить денежные средства при установке оптической фокусирующей системы;

- передача излучения по волокну на большие расстояния. Поэтому сама лазерная установка может находиться в удобном для работы месте, а волокно от нее непосредственно протягивается на место сварки.

- малый размер выходной апертуры луча (300 мкм) позволяет сфокусировать конечный лазерный луч в очень маленькую точку.

- Энергетические:

- у волоконного лазера высокий КПД источника (35 %), в то время как у других он достаточно мал (у газовых лазеров он составляет 5 %);

- возможность создания излучателей высокой мощности (до 100 кВт) путем объединения излучений нескольких волоконных лазеров в одно устройство;

- малая теплоотдача, благодаря чему не требуется интенсивного (водяного) охлаждения, а это значит, что лазер становится компактнее и проще в обслуживании и ремонте.

- Технологические:

- волоконным лазерам практически не требуется юстировка;

- размещение в обычных рабочих помещениях цехов без учета специальных требований;

- компактность установок обусловлена тем, что лазер может занимать удобное для работы месторасположение, даже если оно находится на значительном расстоянии от места сварки и обработки деталей;

- возможность передачи излучения по световоду;
- срок работы до 50 тыс. ч., так как большой нагрузки диоды и волокно не испытывают;
- отсутствие настроечных операций на лазере;
- простая оптика (использование стеклянных фокусирующих линз) позволяет снизить затраты на фокусирующую систему.

Недостатком данного типа лазеров является сравнительно небольшая выходная энергия в импульсе, обусловленная малым объемом активного вещества.

Длина волны волоконного лазера зависит от активной добавки, которой легируется сердцевина волокна. Все волоконные лазеры излучают в ближней ИК-области спектра на длине волны от 1 до 1,9 мкм. В оптической связи используют волоконные лазерные источники с длиной волны 1,56 мкм (минимальные потери информации), активная среда которых легирована эрбием (Er^{3+}). Для технологической обработки материалов применяют волоконные лазеры сердцевина которых легируется иттербием (Yb^{3+}), длина волны последних соответствует 1,06 мкм (максимальные выходные мощности). Для получения других длин волн применяют также редкоземельные легирующие добавки: неодим (Nd^{3+}), гольмий (Ho^{3+}), тулий (Tm^{3+}). Два последних легирующих элемента применяются исключительно для создания медицинских лазеров.

На сегодняшний день наибольшее распространение получили иттербиевые волоконные лазеры. Это связано с тем, что их КПД преобразования излучения накачки (квантовая эффективность) достигает 90 %, поэтому общий КПД лазера (до 40 %) также существенно выше, чем у всех современных лазерных источников.

Промышленностью выпускаются как непрерывные, так и импульсные волоконные лазеры. Длительность импульса технологических волоконных лазеров составляет 40–120 нс. Волоконный лазер – это лазер-усилитель, поэтому для модуляции добротности используют схему усилителя мощности с задающим генератором, частота следования импульсов легко регулируется от 20 до 100 кГц [2].

Растрированный вал (анилокс)

Анилокс, или растрированный вал используется во флексографии для переноса и дозирования краски на печатную форму. Он представляет собой цилиндр с равномерно выгравированной поверхностью (рис. 4).



Рис. 4. Растрированный вал (анилокс)

Растрированный вал обладает такими характеристиками, как линеатура и удельная краскостойкость.

Линеатура – это количество ячеек на определенную площадь, например на дюйм. Благодаря растровой структуре анилокса, на оттиске в конечном счете оказывается такое количество краски, которое способен переносить вал. Примеры форм ячеек растрированного вала показаны на рис. 5.

Удельной краскостойкостью анилокса оценивается количество подаваемой краски на единицу площади ($\text{см}^3/\text{м}^2$). Краскоперенос – вес краски, которую передаст анилокс на определенную площадь поверхности ($\text{г}/\text{м}^2$).

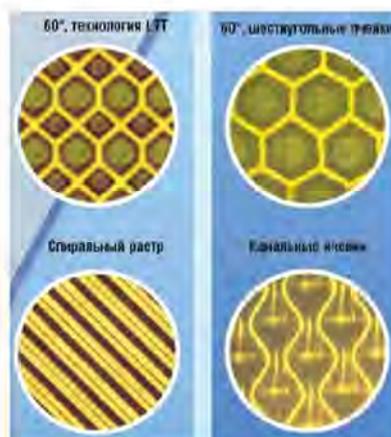


Рис. 5. Виды форм ячеек растрованного вала

Перенос краски анилоксовым валом на печатную форму стал более разноплановым из-за требований к качеству печати, варьирующейся структуре ячеек и способов их гравирования. Хотя создать анилокс, успешно переносящий краску на любые носители при печати любых сюжетов, пока не удалось, производители стараются повышать линиатуры, одновременно увеличивая объем ячеек растровых валов.

Объем краски, переносимой анилоксом, зависит не только от его линиатуры, важным параметром является глубина ячеек. На рис. 6 приведена типичная структура поверхности растрованного вала.

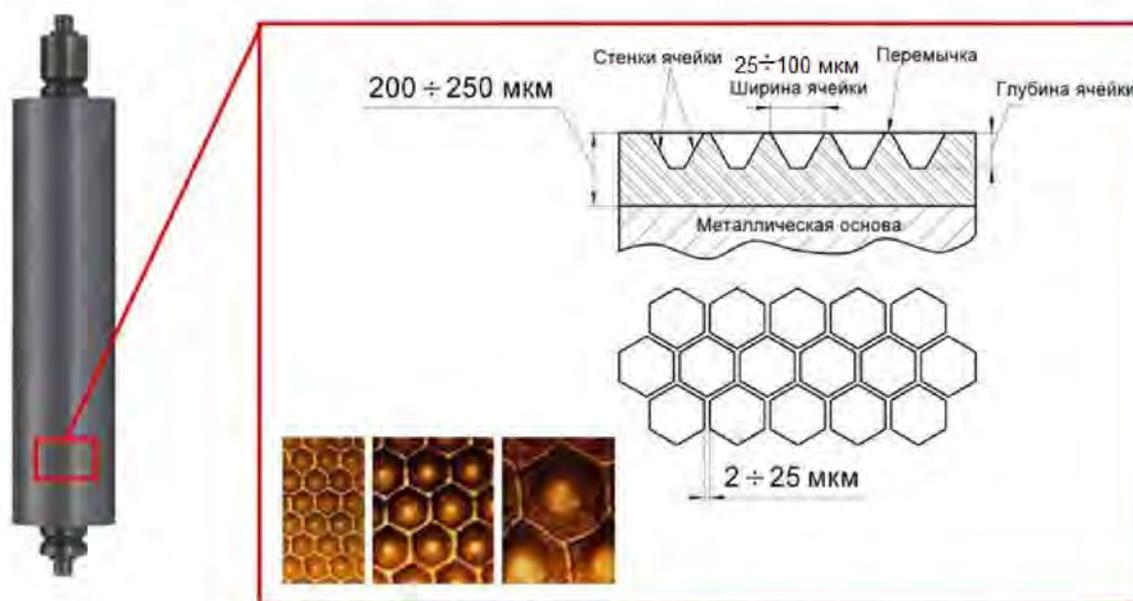


Рис. 6. Структура поверхности растрованного вала

В современной флексографии для изготовления растрованных валов применяется керамика, получаемая из композитных нанопорошков плазменным напылением (это Al_2O_3 или Si_2O_3). Однако в отечественных типографиях до сих пор активно используются хромированные валики.

Экспериментальная часть

С помощью экспериментальной установки осуществлялась очистка анилоксового вала. В эксперименте использовался растрованный вал с линиатурой 800 *lpi* (размер ячейки 30 мкм), с углом гравирования ячейки 60° (шестиугольная форма ячейки). Очищаемый вал имел керамическую поверхность Si_2O_3 , загрязненную УФ-краской. Применение УФ-красок во флексопечати быстро расширяется, что связано с большой скоростью их высыхания (миллисекунды) по сравнению с другими красками. Температура размягчения краски составляет 70 °С, толщина слоя краски, нанесенной на вал, – 10 мкм, нагрев такого слоя до

70 °С происходит за 5 мкс. Таким образом, при нагреве краски до температуры размягчения происходит температурное расширение слоя на 0,56 %, что обеспечивает нарушение адгезии загрязнителя к поверхности анилокссового вала. Поверхность загрязненного вала представлена на рис. 7.

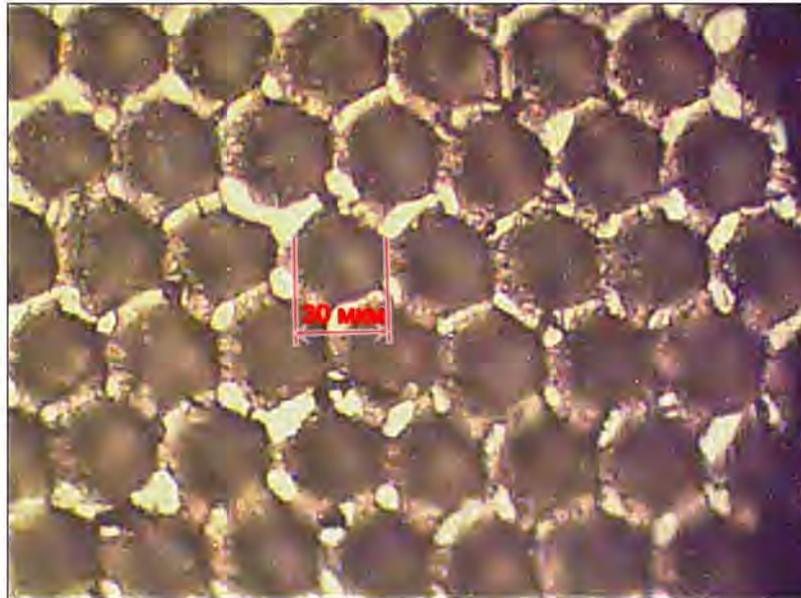


Рис. 7. Поверхность растриванного вала до очистки

Очистка загрязненного вала осуществлялась двумя способами: сухой и влажной лазерными очистками. На рис. 8 представлена структурная схема экспериментальной установки.

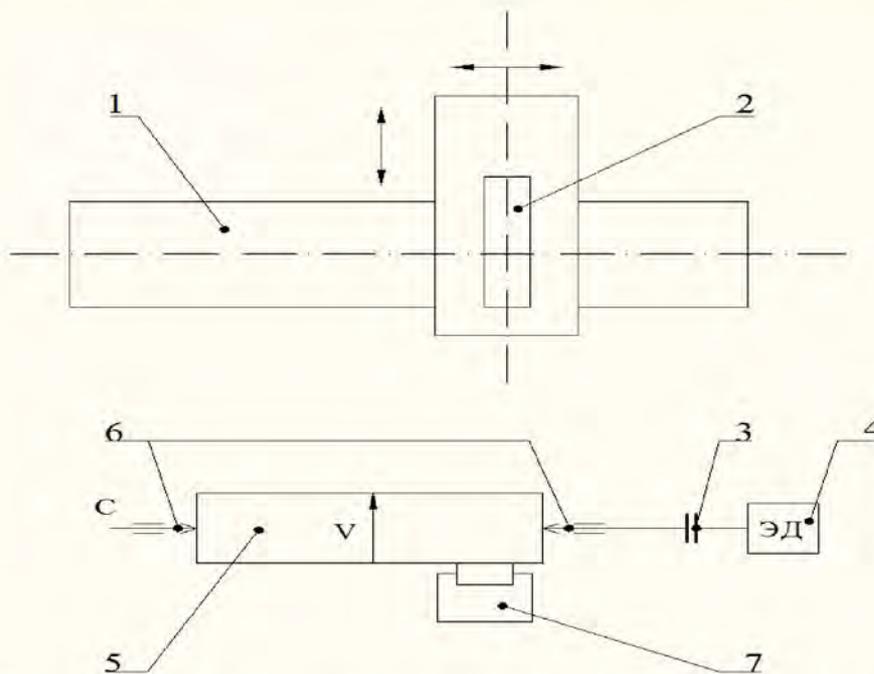


Рис. 8. Схема экспериментальной установки: 1 – координатный стол; 2 – лазер; 3 – муфта; 4 – электродвигатель; 5 – анилокссовый вал; 6 – оси (центра); 7 – устройство для смачивания вала

Перемещение лазера 2 вдоль очищаемого вала осуществляется с помощью координатного стола 1, который имеет привод от двух шаговых двигателей. Привод предназначен для вращения анилокссовых валов с регулируемой скоростью. Частота вращения валов должна регулироваться в диапазоне 1–60 об/мин с интервалом в 1 об/мин.

Крепление электродвигателя 4 осуществляется к поверхности оптического стола. Функцией лазера 2 является абляция (удаление) засохшей краски из ячеек вращающегося анилоксового вала. Перемещение луча лазера вдоль растрированного вала осуществляется с помощью координатного стола, скорость сканирования которого задается программно, что обеспечивает качественное сканирование поверхности очищаемого вала.

Регулировка фокусного расстояния происходит путем перемещения координатного стола 1 во взаимно перпендикулярном направлении. Функцией резинового ракеля 7 является равномерное распределение жидкости по поверхности вала. На рис. 9 приведена используемая экспериментальная установка для очистки растрированного вала.



Рис. 9. Экспериментальная установка лазерной очистки анилоксового вала

Результаты эксперимента

В общем случае лазерная очистка осуществляется, когда очищающая сила превосходит силу адгезии, которая удерживает загрязнитель на подложке.

Известно, что в основе сухой лазерной очистки лежит термомеханический эффект. Это явление заключается в отрицательном ускорении очищаемой поверхности при прекращении действия лазерного импульса, вследствие чего и происходит отрыв загрязняющих частиц.

Механизмы влажной лазерной очистки несколько сложнее, слой жидкости выполняет две функции. Во-первых, он выступает в роли защитной среды, что важно при очистке микрорельефных поверхностей, когда наиболее вероятны термопластические деформации, возникающие вследствие локального разогрева поверхности. Вторая функция – образование упругой волны, отрывающей частицы загрязнителя. Объяснение механизмов влажной лазерной очистки упирается в исследования особенностей термодинамики процесса, вследствие которого происходит генерация упругой волны. Преимуществом сухой лазерной очистки является простота технологического процесса. Недостатком – термическое воздействие на очищаемую поверхность, что приводит к ее разрушению.

Сухая лазерная очистка анилоксовых валов

После предварительного расчета значения плотности мощности и времени воздействия лазерного излучения задавался соответствующий режим сканирования [3]. Общим условием развертки валов было перекрытие точки, то есть сканирование вдоль вала с шагом несколько меньшим, чем размер пятна. Например, при диаметре пятна в 100 мкм шаг перемещения лазера должен составлять 80–90 мкм. Этим обеспечивается тщательное удаление загрязнителя из ячеек. Сканирование вдоль образующей вала осуществлялось в шаговом режиме, то есть за один оборот вала лазер смещался на один шаг равный диаметру пятна. Диаметр сфокусированного пятна составлял 60 мкм при шаге продольного сканирования 50 мкм. Так как размер ячейки был 30 мкм, то за один оборот вала очищалось сразу два ряда ячеек. Таким

образом, для увеличения производительности процесса очистки высоколинейтурных валов можно фокусировать луч в пятно равное размеру сразу нескольких ячеек.

Для механизма удаления УФ-краски оказалось характерным интенсивное испарение, поскольку часть краски, заполняющая ячейки находится в неполимеризованном состоянии. Помимо микрорельефной структуры анилоксов задача очистки усложнялась еще и тем, что предоставленные валы имели трещины гравированной поверхности.

Для подтверждения безопасности лазерной очистки один и тот же участок растриванного валика был сфотографирован до и после очистки с большим увеличением ($\times 100$). Очищаемая поверхность имеет высокую твердость (более 1000 HV), однако тонкие перемычки можно разрушить даже при неаккуратном обращении с валиком. Как видно из представленных фотографий, размеры и количество трещин не изменились. Результат сухой лазерной очистки поверхности вала показан на рис. 10.

Стоит отметить, что при удалении частиц, в процессе сухой лазерной очистки во всех рассмотренных случаях были слышны характерные щелчки. Это связано с генерацией звуковой и ударной волны, последняя направлена в очищаемый материал.

Таким образом, экспериментально подтверждена эффективность и безопасность лазерного способа очистки анилоксовых валов различных линейтур. Предлагаемая технология не разрушает микрорельефную поверхность, даже в случае наличия у растриванного валика многочисленных трещин керамического покрытия.

Для сухой лазерной очистки не требуется дополнительной обработки химическими реагентами; выделение испаряющихся веществ минимальны, что обусловлено удалением загрязнителя в твердой фазе. Поэтому можно говорить об экологической безопасности предлагаемого способа.

Лазерная очистка не требует больших энергетических затрат: мощность используемого в экспериментальной установке лазерного источника составила 10 Вт.

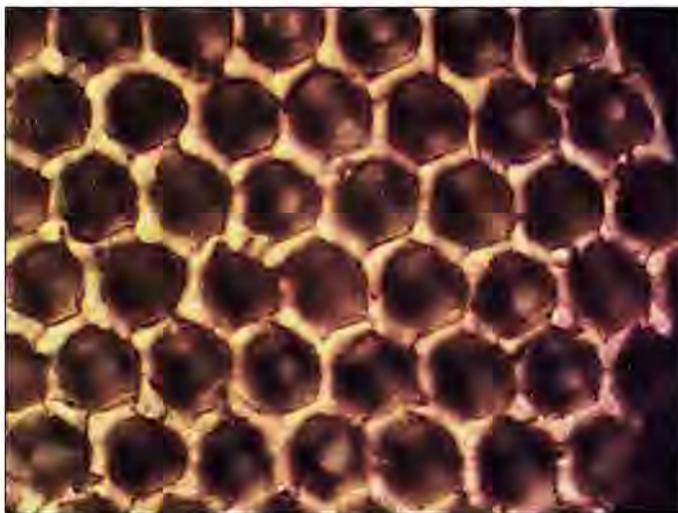


Рис.10. Поверхность растриванного вала после сухой лазерной очистки

Влажная лазерная очистка анилоксовых валов

Из опытов по влажной лазерной очистке было установлено, что ее энергетические пороги для частиц субмикронного размера ниже, чем сухой в 2–3 раза. Это связано с пузырьковым механизмом удаления загрязнителя [4].

Вследствие того что часть тепла переходит в слой жидкости, влажная лазерная очистка представляется более безопасным режимом по сравнению с сухой. В наших экспериментах в качестве защитного слоя использовалась вода, которая капельницей подводилась к вращающемуся валу и равномерно распределялась по нему с помощью резинового валика.

Влажная очистка была проведена для этого же анилоксового валика (800 lpi), было зафиксировано снижение пороговой мощности на 20–25 %. Схема сканирования и скорости остались такими же, как и в случае сухой очистки.

Поверхность анилокса после влажной очистки представлена на рис. 11.

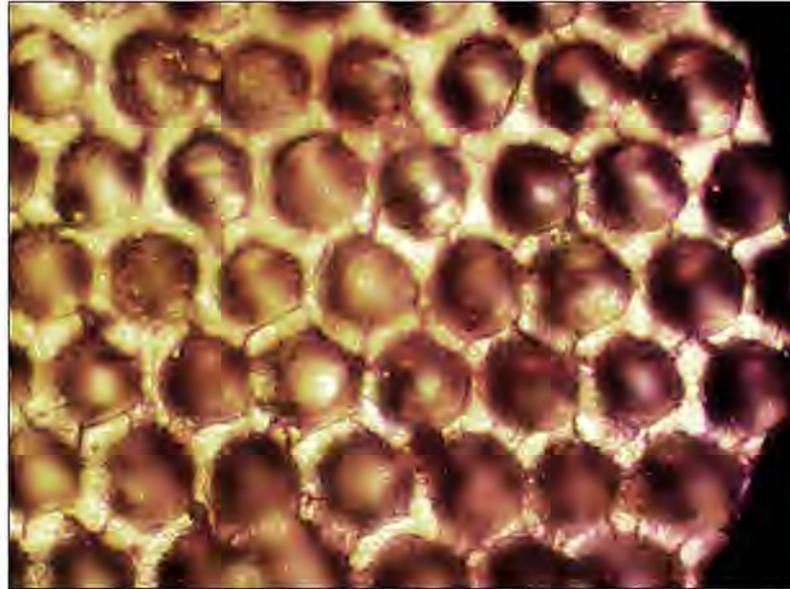


Рис. 11. Поверхность растриванного вала после влажной лазерной очистки

Заключение

Для удаления краски необходимо нарушение ее адгезии к поверхности анилоксого вала, что вызывается смещением слоя загрязнителя, происходящим вследствие температурного расширения [5]:

$$\delta_p = k \cdot \int_0^{hp} \alpha_p T dy_p,$$

где k – коэффициент, учитывающий характер нагрева загрязнителя; hp – толщина слоя загрязнения (глубина ячейки анилокса); p – коэффициент линейного температурного расширения; T – заданная температура.

Коэффициент $k = 0,5$, так как слой загрязнителя нагревается равномерно по толщине. Значения теплофизических коэффициентов краски можно принять равными значениям физико-химическим константам канифоли.

Температура кипения полиграфической краски составляет примерно 250°C . При этом известно, что за счет термомеханического эффекта отрыв загрязнителя происходит в твердой фазе. Поэтому можно считать заданную температуру T не более 250°C .

Подставляя значение T , найдем смещение частицы: $\delta_p = 0,2 \text{ мкм}$.

На основании заданной температуры (250°C) можно сделать оценку максимальной плотности мощности q_{max} [6]. Для этого воспользуемся решением одномерного уравнения теплопроводности, выраженного через плотность мощности q_{max} :

$$q_{max} = \frac{(T - T_H) \cdot \lambda \cdot \sqrt{\pi}}{2 \cdot (1 - R) \cdot \sqrt{a\tau}},$$

где T_H – начальная температура.

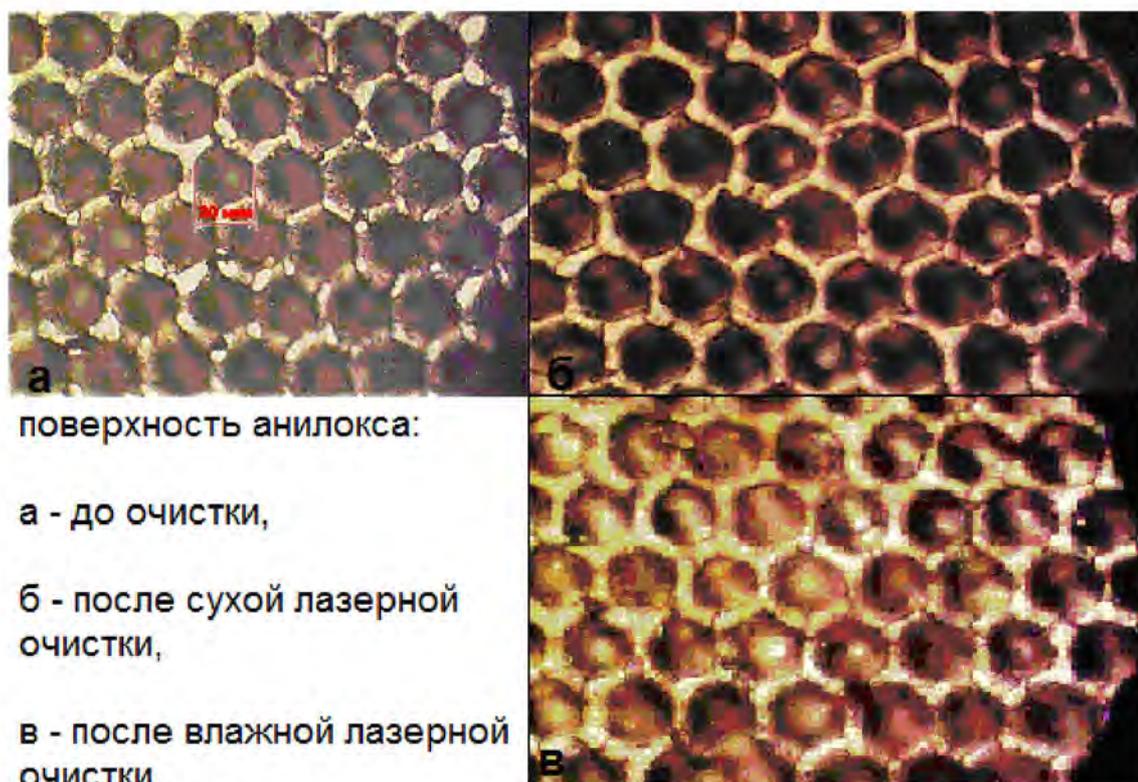
Условие одномерности лазерной очистки анилоксогов валов выполняется для лазеров с радиусом пятна $r_{\text{л}} = 50 \text{ мкм}$ и длительностью импульса $\tau = 100 \text{ нс}$:

$$r_{\text{л}} \gg \sqrt{a \cdot \tau},$$

где a – температуропроводность, $\text{м}^2/\text{с}$.

Найденное значение плотности мощности $q_{max} = 3,24 \cdot 10^7 \text{ Вт/м}^2$ легко обеспечивается современными технологическими лазерами.

Преимуществом предлагаемой модели очистки микрорельефных поверхностей является увеличение скорости очистки при одновременном уменьшении плотности мощности лазерного излучения. В результате повышается производительность реализуемого метода лазерной очистки твердых поверхностей. На рис. 12 продемонстрированы результаты экспериментов.



поверхность анилокса:

а - до очистки,

б - после сухой лазерной
очистки,

в - после влажной лазерной
очистки.

Рис. 12. Изображение поверхности анилоксого вала (800 lpi) до и после лазерной очистки

Результатом работы над проектом является подробное описание метода влажной лазерной очистки поверхности. Были выявлены его недостатки и достоинства, экспериментально подтверждены эффективность и безопасность на примере очистки растрированного вала для флексопечати.

Рассматриваемый процесс экологически безопасен и не требует предварительной обработки химическими средствами, а также больших энергетических затрат, что обуславливает его эффективность и возможность внедрения в серийное использование.

В конечном итоге лазерная очистка растрированных валов обеспечивает стабильность качества флексографической продукции, минимизирует общее время на операции особой цикличности и продлевает срок службы дорогостоящих анилоксов.

Литература

1. Акияма Й., Сасаки М., Юаса Х., Нишида Н. Эффективный 10-кВт Nd:YAG-лазер с диодной накачкой // Фотоника. 2007. № 4. С. 6–11.
2. Вейко В.П. Опорный конспект лекции по курсу «Физико-технические основы лазерных технологий». Раздел: Технологические лазеры и лазерное излучение. СПб., 2007. – 52 с.
3. Вейко В.П., Шахно Е.А. Физические механизмы лазерной очистки поверхности // Известия РАН. Сер. физическая. 2001. Т. 65. № 4. С. 584–587.
4. Вудс С., Дака М., Флин Г. Волоконные лазеры средней мощности и их применение // Фотоника. 2008. № 4. С. 6–10.
5. Курков А.С., Дианов Е.М. Непрерывные волоконные лазеры средней мощности // Квантовая электроника. 2004. Т. 34. № 10. С. 881–900.
6. Lu Y.F., Song W.D., Zhang Y., Low T.S. Theoretical Model and Experimental Study for Dry and Steam Laser Cleaning // SPIE. 1998. Vol. 3550. P. 7–18.



Смирнов Роман Игоревич
Факультет точной механики и технологий
Кафедра измерительных технологий и компьютерной томографии
Email: sri7@mail.ru

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ БУРОВОЙ УСТАНОВКИ ДЛЯ ПРОГРАММНО-АППАРАТНОГО КОМПЛЕКСА ПО ПОДГОТОВКЕ СПЕЦИАЛИСТОВ ПО ОСВОЕНИЮ РОССИЙСКОГО КОНТИНЕНТАЛЬНОГО ШЕЛЬФА

Р.И. Смирнов

Научный руководитель – доцент Д.В. Казунин

Введение

Резолюция ИМО А89 «Рекомендации по подготовке персонала морских передвижных установок (МПУ)» поставила ряд новых задач перед морскими администрациями стран-участниц. Одна из них – разработка средств обучения, предназначенных для подготовки, оценки компетентности и отработки навыков поведения в повседневных и аварийных ситуациях.

Единственным крупным неиспользованным резервом нефти и газа во всем мире в настоящий момент остаются шельфовые месторождения. Повышение квалификации персонала морских буровых предприятий крайне важно для обеспечения безаварийного освоения шельфа.

Для эффективного обучения и переподготовки кадров необходимы полномасштабные тренажеры с физическими устройствами управления, максимально приближенными к реальным. Одним из таких тренажеров является продукт ЗАО «Транзас Морские Технологии» – тренажер буровой платформы для подготовки специалистов по освоению континентального шельфа. Он моделирует оборудование поста управления буровой установкой, который позволяет управлять положением относительно устья скважины и технологическим оборудованием платформы.

Тренажер полупогружной буровой установки Transas FOS 6000s является составной частью интегрированного комплекса взаимодействия «Шельф», включающего в себя тренажеры нефтегазового направления и тренажеры взаимодействия навигационной направленности.

Основную роль в любом тренажерном комплексе играет математическая модель, которая выполняет вычисления и обменивается данными с интерфейсом. О проделанной мной работе при разработке математической модели и пойдет речь.

Главная цель работы – создание части математической модели тренажера полупогружной буровой установки FOS6000s, которая будет задействована в операциях маневрирования и динамического позиционирования в точке. Результатом выполнения работы будет являться программный продукт, написанный на языке высокого уровня Си++, который будет работать в составе основной математической модели, включающей как расчет термодинамических параметров технологического оборудования электростанции, так и сетевой обмен.

Тренажер полупогружной буровой установки FOS6000s компании ЗАО «Транзас Морские Технологии». Постановка задачи

Основное назначение тренажера (Transas FOS 6000s) – подготовка персонала в соответствии с частью 6 резолюции ИМО А.891 (21) в рамках специальной программы подготовки квалифицированного персонала, занимающего ключевые позиции на буровой установке.

Тренажер позволяет проводить подготовку и проверку специальных знаний морского персонала полупогружной плавучей буровой установки (ППБУ) в соответствии с квалификационными требованиями к профессиональным навыкам вышеперечисленных специальностей.

Тренажер полупогружной установки позволяет моделировать оборудование, необходимое для подготовки специалистов в основном в части отработки навигационных навыков, а также навыков по размещению балласта и поддержанию установки в мореходном состоянии с помощью доступных якорных и маневровых средств, возможностей балластной, топливной систем и систем пресной воды в условиях ограничений, наложенных энергетической установкой. Для обеспечения возможности отработки комплекса задач, связанных с контролем непотопляемости буровой платформы в процессе тушения пожара и борьбе за живучесть, в тренажер включены осушительная и пожарная системы [1].

В качестве прототипа установки выбрана реальная буровая установка (рис. 1), которая дооборудована дополнительными учебными модулями. Конструктивно она состоит из двух понтонов и шести колонн (по три колонны на каждом понтоне). На колонны опирается двухпалубная надстройка (главная и верхняя палубы), на которой расположено буровое оборудование, палубные механизмы, модуль энергетического оборудования и гидравлики, жилые и производственные помещения.



Рис. 1. Полупогружная буровая установка морского базирования

В понтонах и колоннах расположены балластные танки и танки запасов (топливо, пресная вода), а также водонепроницаемые осушаемые пространства. Оборудование, находящееся в понтонах, соответствует требованиям для изолированных и невентилируемых помещений. Насосные отделения понтонов соединены трубным туннелем.

Тренажер обеспечивает наиболее полный спектр учебных возможностей для подготовки специалистов для наиболее распространенных типов полупогружных платформ [2].

Подробно изучив все системы, расположенные на борту ППБУ и требования к тренажеру со стороны резолюции ИМО, можно сформировать список основных задач, которые следует решить в области динамического позиционирования в точке:

- описать физику поведения ППБУ на воде;
- описать физику поведения якоря и якорных цепей;
- оптимизировать полученные математические выкладки таким образом, чтобы скорость вычисления при работе программы была максимальной;
- описать систему динамического позиционирования;
- все математические выкладки необходимо реализовать на языке высокого уровня Си ++ таким образом, чтобы шаг вычисления модели вместе с термодинамической частью не превышал секунды;
- провести верификацию полученной модели.

Математическая модель. Методы исследования

Описание математической модели ППБУ

Первостепенная задача проекта – описание физики поведения ППБУ в результате внешних воздействий и собственных технических средств. Сюда включены уравнения движения, уравнения динамики платформы; силы, действующие на каркас (гидродинамические и аэродинамические) на большой глубине; рулевые, винтовые и подруливающие силы; а также действующие со стороны якорей, ветра и волн.

Системы координат

Ниже представленные системы координат используются для описания собственного движения буровой платформы (все они являются декартовыми):

– неподвижная система координат, где O_0 – начало отсчета, выбранное в некоторой неподвижной точке: X_0 – ось, направленная на север и лежащая в плоскости, параллельной невозмущенной поверхности воды; Y_0 – ось, направленная на восток и лежащая в плоскости, параллельной невозмущенной поверхности воды; Z_0 – ось, направлена вниз перпендикулярно невозмущенной поверхности воды.

– связанная (подвижная) система координат, где O – начало отсчета – центр тяжести платформы: X_1 – ось, направленная от кормы к носу, лежащая в диаметральной плоскости и параллельная плоскости ватерлинии (продольная ось); Y_1 – ось, направленная на правый борт, перпендикулярная диаметральной плоскости и параллельная плоскости ватерлинии (поперечная ось); Z_1 – ось, направленная вниз перпендикулярно плоскости ватерлинии (вертикальная ось) [3].

Системы координат проиллюстрированы на рис. 2 и рис. 3.

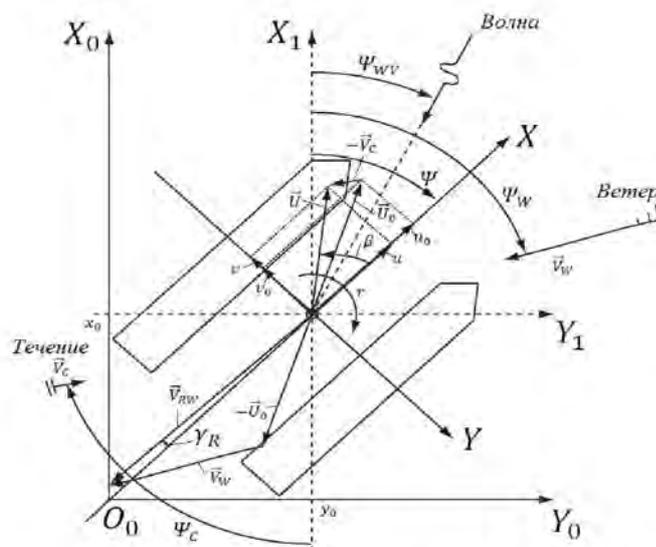


Рис. 2. Неподвижная и связанная системы координат (горизонтальная плоскость)

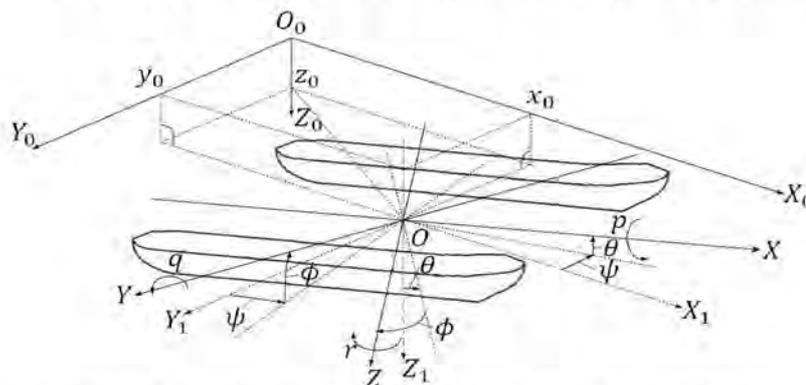


Рис. 3. Неподвижная и связанная системы координат

Уравнения кинематики*Кинематические уравнения Эйлера для крена, тангажа и рыскания*

Положение платформы, координаты ее центра масс в неподвижной системе координат обозначаются параметрами: x_0, y_0, z_0 . Для определения ориентации корпуса платформы пользуются углами крена ϕ , тангажа θ и рыскания ψ (рис. 2).

Кинематические уравнения Эйлера для крена, тангажа и рыскания позволяют определить проекции углов крена, тангажа и рыскания на оси связанной декартовой системы координат посредством их производных:

$$p = \dot{\phi} - \dot{\psi} \sin \theta; \quad (1)$$

$$q = \dot{\theta} \cos \phi + \dot{\psi} \cos \theta \sin \phi; \quad (2)$$

$$r = -\dot{\theta} \sin \phi + \dot{\psi} \cos \theta \cos \phi, \quad (3)$$

где p, q, r – соответственно проекции крена, тангажа и рыскания. Уравнения (1)–(3) следует решить относительно $\dot{\phi}, \dot{\theta}$ и $\dot{\psi}$.

Кинематические уравнения для скорости платформы относительно жидкости

Если есть течение (поток) (с постоянным однородным полем скоростей), то используется понятие скорости платформы относительно жидкости:

$$\vec{U} = \vec{U}_0 - \vec{V}_c,$$

где \vec{U} – вектор скорости платформы относительно жидкости, \vec{U}_0 – вектор собственной скорости платформы, \vec{V}_c – вектор скорости жидкости.

Компоненты векторов u, v, ω определяются следующим образом:

$$u = u_0 - V_{cX}; \quad (4)$$

$$v = v_0 - V_{cY}; \quad (5)$$

$$\omega = \omega_0 - V_{cZ}; \quad (6)$$

Кинематические уравнения видимого ветра

В вычислении аэродинамических сил используются скорость видимого ветра V_{RW} и его направление γ_{RW} .

Вектор скорости видимого ветра \vec{V}_{RW} и его компоненты (проекции на оси связанной системы координат) определяются:

$$\vec{V}_{RW} = -\vec{U}_0 + \vec{V}_W; \quad (7)$$

$$V_{RWX} = -u_0 + V_{WX}; \quad (8)$$

$$V_{RWY} = -v_0 + V_{WY};$$

где \vec{V}_W – вектор скорости ветра, а V_{WX} и V_{WY} – его компоненты по координатным осям.

Фактическим креном и тангажем можно пренебречь в силу малости V_{Wz} . Тогда модуль скорости видимого ветра и угол направления ветра могут быть определены из уравнений:

$$V_{RW} = \sqrt{V_{RWX}^2 + V_{RWY}^2}; \quad (9)$$

$$V_{RWX} = -V_{RW} \cos \gamma_{RW}; \quad (10)$$

$$V_{RWY} = V_{RW} \sin \gamma_{RW}; \quad (11)$$

где γ_{RW} – угол видимого ветра.

Уравнения движения платформы

В связанной системе координат пространственные уравнения движения (шесть степеней свободы X, Y, Z, K, M, N) платформы примут вид:

$$m(\dot{u}_0 - v_0 r + \omega_0 q) = X; \quad (12)$$

$$m(\dot{v}_0 + u_0 r - \omega_0 p) = Y; \quad (13)$$

$$m(\dot{\omega}_0 - u_0 q + v_0 p) = Z; \quad (14)$$

$$I_{X_C} \dot{p} + (I_{Z_C} - I_{Y_C})qr = K; \quad (15)$$

$$I_{Y_C} \dot{q} + (I_{X_C} - I_{Z_C})rp = M; \quad (16)$$

$$I_{Z_C} \dot{r} + (I_{Y_C} - I_{X_C})pq = N; \quad (17)$$

где I_{X_C} , I_{Y_C} , I_{Z_C} – моменты инерции платформы; m – масса платформы; X , Y , Z – результирующие силы, а K , M , N – результирующие моменты инерции относительно осей OX , OY и OZ соответственно [4].

Силы и моменты инерции записаны в связанной системе координат.

Силы из уравнений (12)–(17) будут представлены в следующей форме:

$$X = X_I + X_H + X_P + X_R + X_T + X_C + X_A + X_W + X_{EXT};$$

$$Y = Y_I + Y_H + Y_P + Y_R + Y_T + Y_C + Y_A + Y_W + Y_{EXT};$$

$$Z = Z_I + Z_H + Z_W + Z_{EXT};$$

$$K = K_I + K_H + K_P + K_R + K_T + K_C + K_A + K_W + K_{EXT};$$

$$M = M_I + M_H + M_P + M_W + M_{EXT};$$

$$N = N_I + N_N + N_P + N_R + N_T + N_C + N_A + N_W + N_{EXT};$$

где $X_I, Y_I, Z_I, K_I, M_I, N_I$ – силы инерции и моменты; $X_H, Y_H, Z_H, K_H, M_H, N_H$ – гидродинамические силы и моменты; X_A, Y_A, K_A, N_A – аэродинамические силы и моменты; X_C, Y_C, K_C, N_C – силы и моменты потока; X_R, Y_R, K_R, N_R – рулевые силы и моменты; X_T, Y_T, K_T, N_T – подруливающие силы и моменты; X_P, Y_P, K_P, M_P, N_P – винтовые силы и моменты; $X_W, Y_W, Z_W, K_W, M_W, N_W$ – волновые силы и моменты; $X_{EXT}, Y_{EXT}, Z_{EXT}, K_{EXT}, M_{EXT}, N_{EXT}$ – внешние силы и моменты, включающие силы взаимодействия с судами, якорные силы, швартовы и т. д. [2]

Далее осуществляется моделирование воздействия якорных канатов на платформу при позиционировании буровой установки (рис. 4), винторулевых подруливающих устройств, внешних погодных условий и системы автоматического динамического позиционирования.

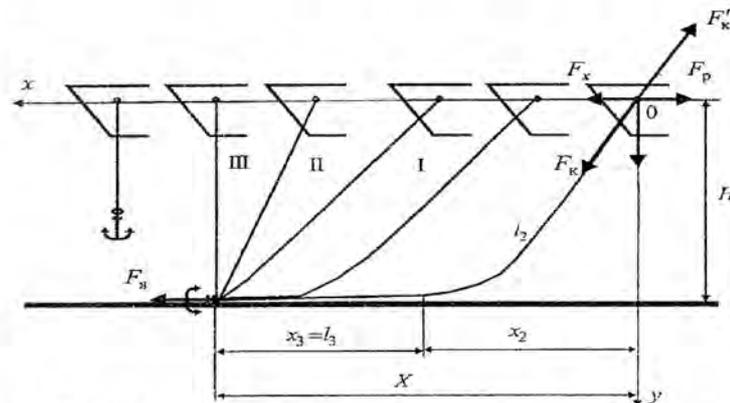


Рис. 4. Схема положений судна при стоянке и снятии с якоря

Программная реализация, описание архитектуры и алгоритмов математической модели. Взаимодействие математической модели с тренажерным комплексом

Термины и определения

Console (консоль) – приложение, являющееся частью рабочего места обучаемого, осуществляющее все основное диалоговое взаимодействие между пользователем с одной стороны и моделью технологического объекта с другой.

Instructor (консоль инструктора) – приложение, являющееся частью рабочего места инструктора, осуществляющее все основное диалоговое взаимодействие между пользователем с одной стороны и моделью технологического объекта с другой.

Model (модель) – приложение, являющееся частью рабочего места обучаемого и содержащее математическую модель, а также выполняющее функции организации хранения и доступа к данным моделирования для остальных приложений.

LCS – приложение, являющееся частью рабочего места обучаемого и (или) инструктора и служащее исключительно для запуска следующего приложения (а также в целях лицензирования).

LR – автономное приложение, являющееся частью рабочего места обучаемого или инструктора, служащее для расчета остойчивости, прочности и уровней в танках судна, являющееся по сути частью расчетной модели, однако обладающая собственным пользовательским интерфейсом и производимое в другой фирме.

Visualisation (визуализация) – приложение, являющееся частью места обучаемого или инструктора, служащее для трехмерного отображения объекта моделирования.

Plotter (плоттер) – приложение, являющееся частью места обучаемого или инструктора, позволяющее отслеживать и сравнивать изменения во времени различных данных, рассчитываемых *Model*.

«Упражнение» – файл, в котором хранится единственное и полное состояние приложения *Model*, используемое для установки его начальной ситуации. Для этого несколько таких файлов включается в поставляемую конфигурацию. Используется для сохранения текущего состояния приложения *Model* для любых целей обучения. Может быть прочитан с диска приложением *Model*.

TrnNetwork – сетевая библиотека компании ЗАО «Транзас Морские Технологии», обеспечивающая решение следующих задач:

- сетевой обмен в распределенной системе;
- лицензирование;
- конфигурирование распределенной системы;
- запуск распределенной системы.

Схема взаимодействия основных компонентов тренажерного комплекса представлена на рис. 5 [1].

Model (математическая модель) – это программа, написанная на языке Си++ и включающая в себя все математические выкладки, о которых сказано выше.

Для организации вычислительного алгоритма важна правильная организация структуры данных модели, что может давать значительный выигрыш в скорости и эффективности вычислений.

По форме все данные модели, которые используются тренажером, можно разделить на три мэпа (map – ассоциативный массив в языке Си++):

1. *SModel* – хранит полные данные модели на локальной машине (часть из которых используется для обмена, а другая для внутренних расчетов);

2. *Mnb* – хранит данные, необходимые для возобновления расчета, которые участвуют в сетевом обмене ($Mnb \subset SModel$). Часть данных *SModel* вычисляется моделью самостоятельно; они не участвуют в сетевом обмене, выступая в роли служебных переменных;

3. *MnV* – хранит данные необходимые для обмена в сети [1].

Область пересечения данных *SModel* и *MnV* дают *Mnb* (рис. 6).

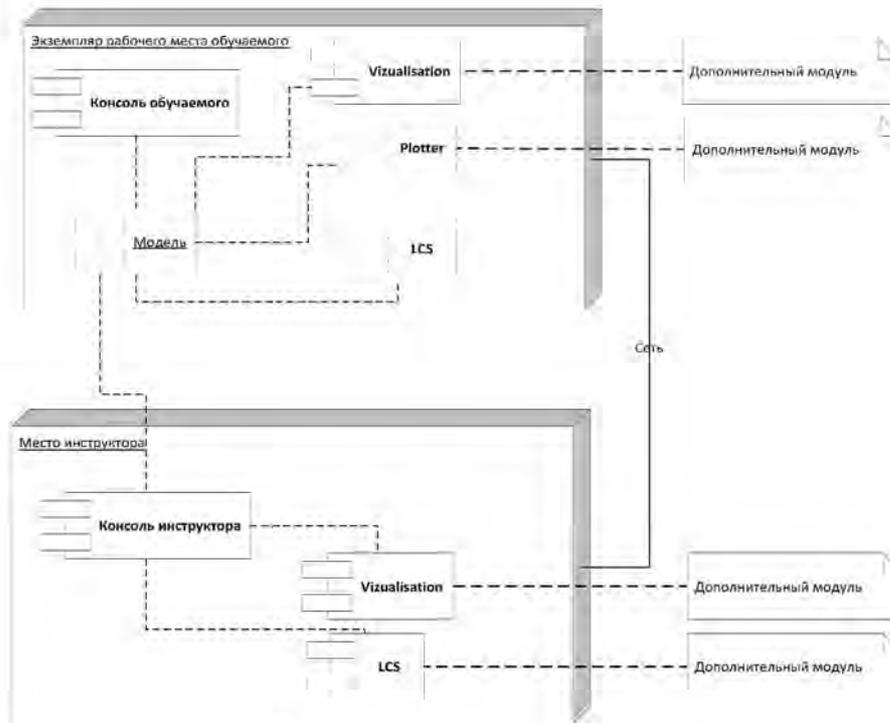


Рис. 5. Диаграмма распределения модулей

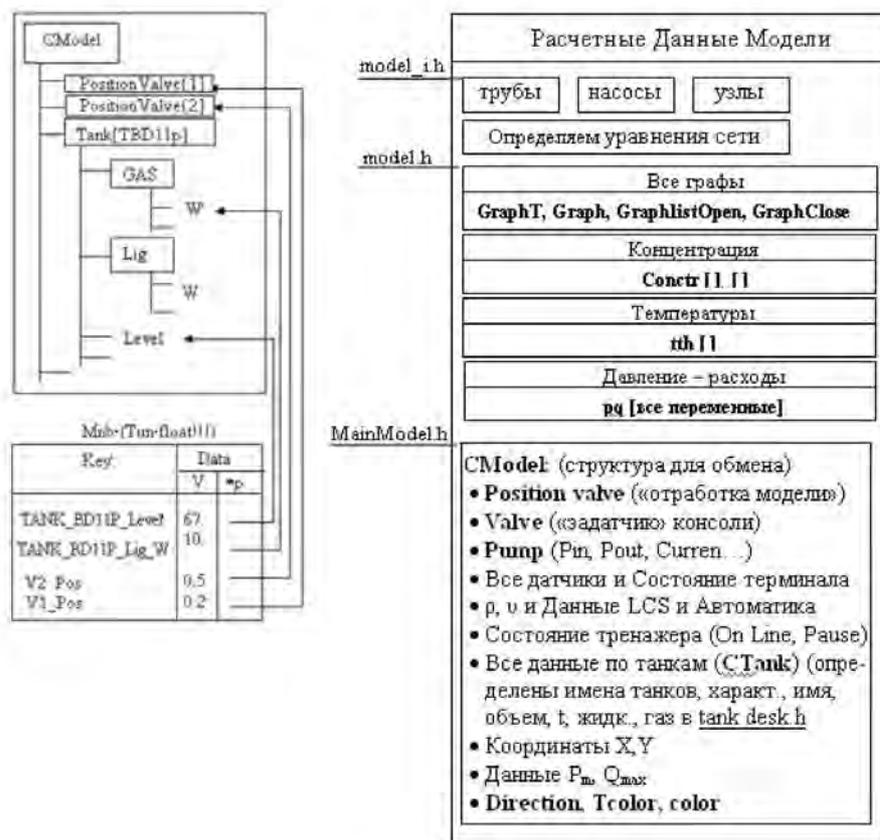


Рис. 6. Иллюстрация организации данных в виде Map и расчетные данные модели

Последовательность функций и методов для расчета всех параметров ППБУ:

- получение и обработка данных и команд, поступающих от консоли;
- вычисление полного водоизмещения с учетом всего груза на борту;
- расчет остойчивости и осадок;
- расчет якорного зацепления: положение якоря, сил, действующих со стороны якорных цепей и лебедок;
- расчет сил, действующих со стороны погодных условий;
- расчет сил, действующих со стороны подруливающих устройств;
- расчет суммарного воздействия со стороны всех сил. Вычисление моментов;
- вычисление вектора скорости. Расчет положения платформы в глобальной системе координат.

Верификация

Согласно техническому заданию, точность математической модели не должна быть ниже требований, достаточных для имитационного моделирования в тренажерах (около 10%). В большинстве случаев для подготовки персонала важна не столько количественная составляющая результата, сколько качественная.

В проект тренажерного комплекса входит программный продукт *Plotter*, он позволяет строить графики по всем переменным, которыми обменивается математическая модель с консолью. Проведем несколько проверок модели, получим эксплуатационные характеристики:

– *свободный выбег* (рис. 7, 8). Запускаем тренажер, включаем на полную мощность все трастеры, ждем, пока платформа наберет максимальную скорость, затем выключаем трастеры. Эксперимент проводится при различной загрузке платформы. Рассмотрим зависимости: дистанции удаления платформы от времени; скорости от времени [5].

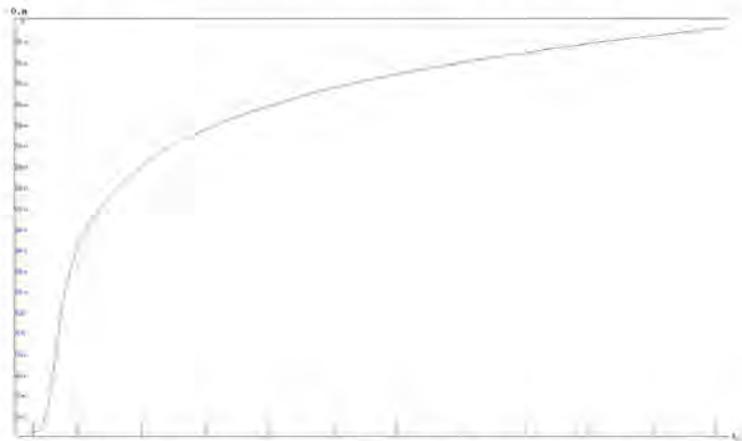


Рис. 7. Зависимость дистанции удаления от времени: пустое судно

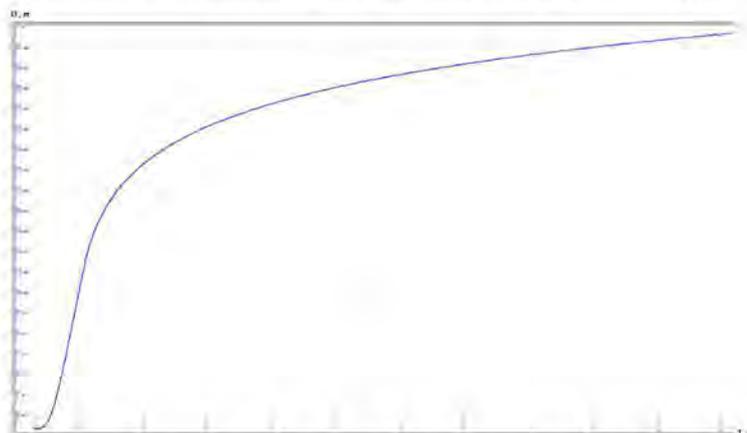


Рис. 8. Зависимость дистанции удаления от времени: судно заполнено на 90 %

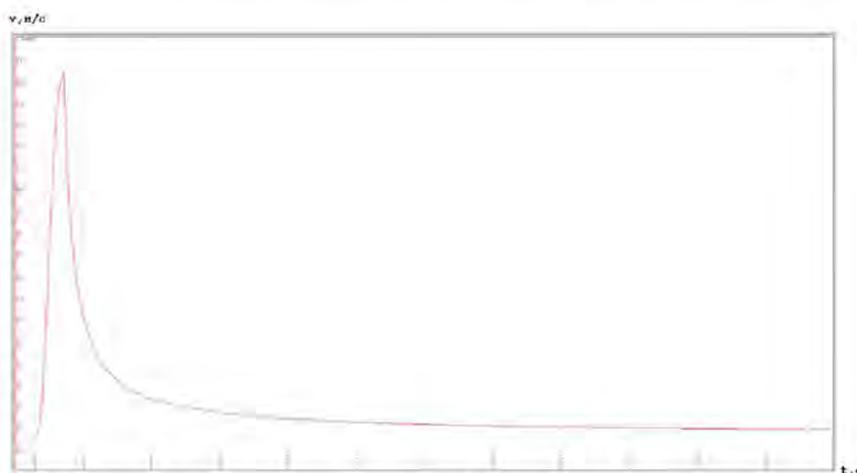


Рис. 9. Зависимость скорости платформы от времени: пустое судно

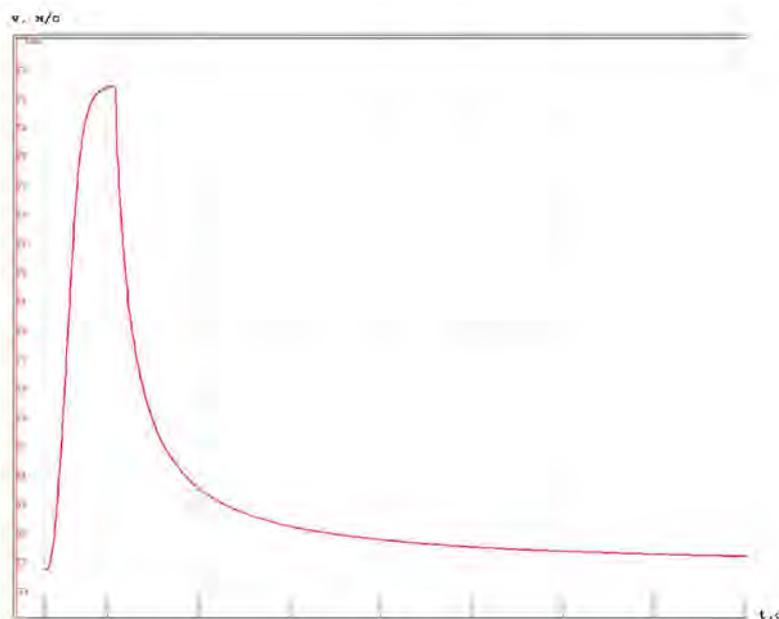


Рис. 10. Зависимость скорости платформы от времени: судно заполнено на 90 %

С увеличением массы ППБУ, максимальная скорость снижается (рис. 9, 10), что связано с увеличением осадки и ростом сопротивления движению. При порожнем движении платформы ее максимальная скорость достигла 3,64 м/с, а при загрузке на 90 % – 2,63 м/с. Рост массы судна отражается и на величине свободного выбега (расстоянии, которое проплывет платформа после выключения движителей). При загрузке в 90 % выбег сократился со 150 до 100.

– циркуляция буровой платформы при внешнем воздействии (ветер) и без него (рис. 11, 12). При этом кормовые винторулевые колонки включены на полную мощность, что соответствует тяге 200 кН, углы перекладки составляют 30°. При сильном боковом ветре платформу начинает сносить: она описывает спираль [3].

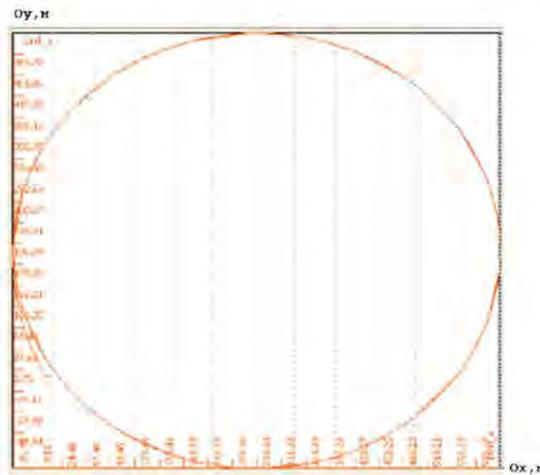


Рис. 11. Циркуляция без возмущающего воздействия

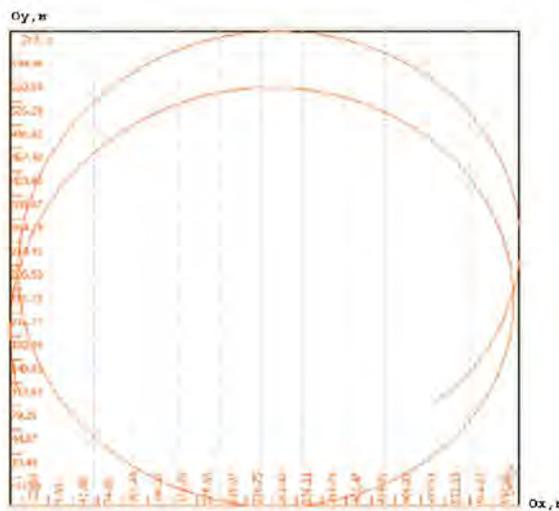


Рис. 12. Циркуляция с внешним воздействием (ветер)

– комплексные испытания (рис. 13, 14). Включаем четыре винторулевых колонки на 80 % мощности, разгоняем платформу до скорости в 3,5 узла за 2,5 мин. При этом выбег ППБУ составляет 140 м (рис. 13), скорость достигает максимума при данной загрузке судна, мощность трастеров стабилизируется.

– изменение мощности трастеров до 0: скорость снижается, при этом мы наблюдаем торможение примерно за 1,5 мин и выбег около 100 м (рис. 14).

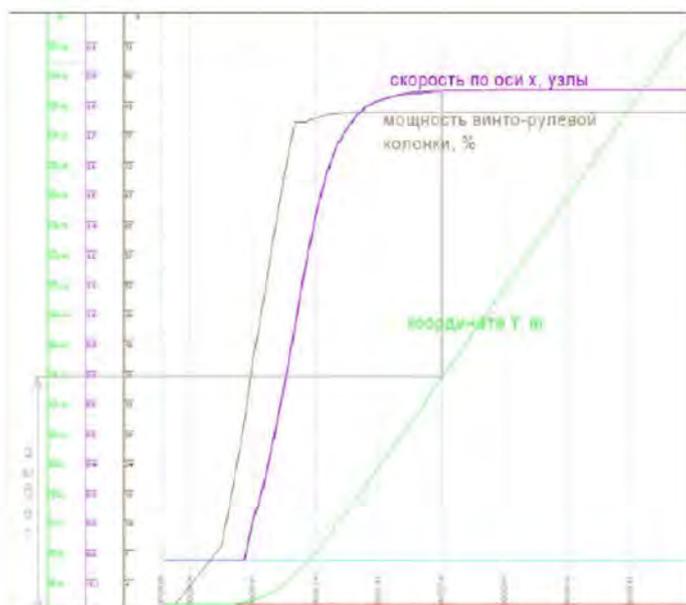


Рис. 13. Первое комплексное испытание, разгон

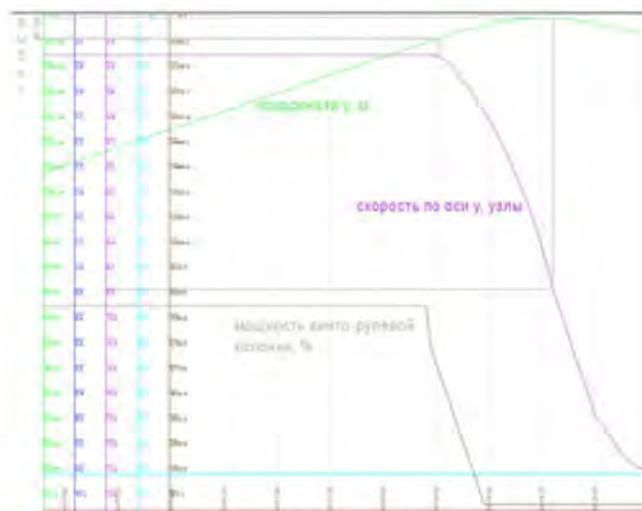


Рис. 14. Второе комплексное испытание, торможение

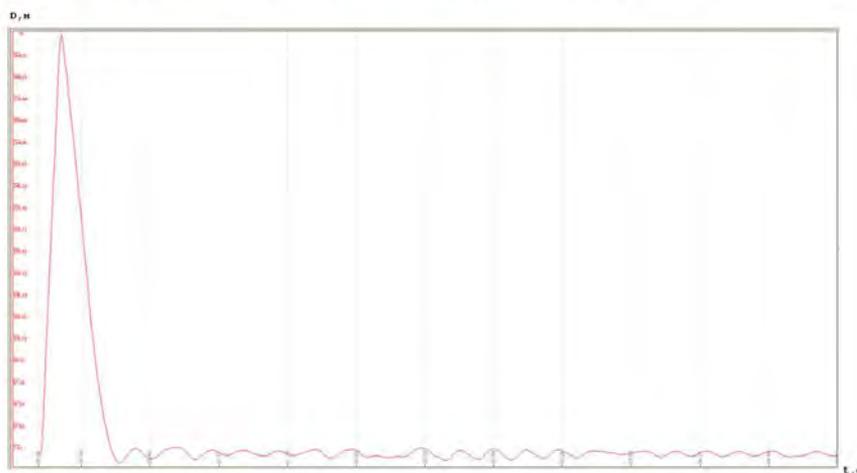


Рис. 15. Работа системы динамического позиционирования при ветре 10 м/с, Oх



Рис. 16. Работа системы динамического позиционирования, Оу

Рассмотрим графики, представленные на рис. 15 и 16. Здесь изображена работа системы позиционирования в точке, обеспечивающей нахождение судна над заданным местом бурения путем компенсирования внешних воздействий. Эксперимент проводился при силе ветра 10 м/с и скорости течения 0,3 м/с на глубине 150 м. Допускаемое отклонение судна – 10° , что примерно составляет радиус в 10 м от точки бурения. Из графика видно, что система полностью удовлетворяет техническому заданию.

По результатам испытаний можно утверждать, что точности данной модели хватает для имитационного моделирования в тренажерах. Данная модель в достаточной степени полно описывает поведение полупогружной платформы на воде при различных внешних воздействиях.

Вывод

Описана математическая модель поведения морской ППБУ на волнении, физика поведения якорной цепи, якорей, винторулевых подруливающих устройств.

Математическая модель, реализованная на языке Си++, была интегрирована в математическую модель тренажерного комплекса, оптимизирована для расчетов в режиме реального времени и точности, достаточной для имитационного моделирования для целей обучения. Ее работа осуществляется в совокупности с термодинамической моделью тренажера. Выполнена верификация.

Достигнутые результаты:

- математическая модель выполнена с точностью, достаточной для имитационного моделирования и системы динамического позиционирования (не более 10 %);

- математическая модель была интегрирована в термодинамическую модель технологического оборудования тренажера ППБУ FOS6000s.

- тренажерный комплекс FOS6000s внедрен в учебный процесс в Морской государственной академии имени Адмирала Ушакова в городе Новороссийске и Морском техническом колледже в Санкт-Петербурге.

- по программному коду математической модели было получено свидетельство о регистрации программы для ЭВМ № 2011612011 «Тренажер полупогружной буровой установки FOS 6000 (ППБУ)».

Таким образом, на основе использования описанных методов моделирования в составе единой математической модели виртуального судна, реализованного для ППБУ, удастся смоделировать поведение разнообразных морских плавучих объектов, находящихся в различных режимах эксплуатации на континентальном шельфе при разных внешних воздействиях. Созданная модель позволяет подготовить основных специалистов буровой установки к повседневной ее эксплуатации и эксплуатации в аварийных ситуациях.

Публикации

1. Соколов А.Н., Казунин Д.В., Хвастунов А.П., Бутурлимов О.В., Рыбий В.В., Маценко С.В., Казунин И.Д., Смирнов Р.И., Малюгин А.А. Технологическая платформа / свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ RU 2011616397.
2. Соколов А.Н., Казунин Д.В., Хвастунов А.П., Бутурлимов О.В., Рыбий В.В., Маценко С.В., Казунин И.Д., Смирнов Р.И., Малюгин А.А. Тренажер газового терминала LCHS Gas (ТГТ) / свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ RU 2011610224.
3. Соколов А.Н., Казунин Д.В., Хвастунов А.П., Бутурлимов О.В., Рыбий В.В., Маценко С.В., Казунин И.Д., Смирнов Р.И., Малюгин А.А. Тренажер грузобалластных операций на сухогрузных судах LCHS 6000 Cargo (ТГОСС) / свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ RU 2011610225.
4. Белентьев А.В., Поселеннов А.А., Соколов А.Н., Казунин Д.В., Хвастунов А.П., Бутурлимов О.В., Рыбий В.В., Маценко С.В., Казунин И.Д., Смирнов Р.И., Малюгин А.А. Тренажер морской нефтедобывающей платформы (Добыча 2011) / свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ RU 2011610227.
5. Белентьев А.В., Смирнов Р.И., Поселеннов А.А., Соколов А.Н., Казунин Д.В., Хвастунов А.П., Бутурлимов О.В., Рыбий В.В., Маценко С.В., Казунин И.Д., Малюгин А.А. Тренажер полупогружной буровой установки FOS 6000 (ТПБУ) / свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ RU 2011610228.
6. Казунин Д.В., Бутурлимов О.В., Рыбий В.В., Ганс Е.С., Маценко С.В., Хвастунов А.П., Смирнов Р.И. Создание динамических средств обучения для подготовки специалистов, связанных с добычей углеводородного сырья на Арктическом шельфе // Морской вестник. 2010. № 4 (36). С. 95–98.
7. Казунин Д., Хвастунов А., Бутурлимов О., Рыбий В., Смирнов Р. Тренажер грузобалластных операций сухогрузного судна // Материалы международной научно-практической конференции «Водный транспорт России: инновационный путь развития» (6–7 октября 2010 г.). Т. 2. СПб., 2011. С. 290–296.
8. Бутурлимов О., Рыбий В., Хвастунов А., Смирнов Р., Казунин Д. Тренажер плавучей полупогружной буровой установки // Материалы международной научно-практической конференции «Водный транспорт России: инновационный путь развития» (6–7 октября 2010 г.). Т. 2. СПб., 2011. С. 273–277.

Литература

1. Казунин Д.В. Численное моделирование технологических процессов танкеров и терминалов. Новороссийск, 2009. – 268 с.
2. Трухин А.В. Анализ существующих в РФ тренажерно-обучающих систем // Открытое и дистанционное образование. 2008. № 1 (29). С. 32–40.
3. Строительные нормы и правила (СНиП 2.06.04-82): Нагрузки и воздействия на гидротехнические сооружения (волновые, ледовые и от судов). М., 1989 (ред. 1996 г.): <http://cncexpert.ru/Data1/1/1977/index.htm>.
4. Фрейдзон И.Р. Математическое моделирование систем автоматического управления на судах. Л., 1969. – 469 с.
5. Казунин Д.В., Бутурлимов О.В., Рыбий В.В. и др. Создание динамических средств обучения для подготовки специалистов, связанных с добычей углеводородного сырья на Арктическом шельфе // Морской вестник. 2010. № 4 (36). С. 95–98.



Соколов Юрий Александрович
Факультет оптико-информационных систем и технологий
Кафедра компьютеризации и проектирования оптических приборов
Email: sokolov-juri@yandex.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФРАКЦИОННОГО МЕТОДА КОНТРОЛЯ УГЛОВЫХ И ЛИНЕЙНЫХ ВЕЛИЧИН

Ю.А. Соколов

Научный руководитель – доцент В.Н. Назаров

Введение

В настоящее время для юстировки и проведения линейных и угловых измерений в приборостроении и машиностроении широко применяются различные оптические, оптико-механические и оптико-электронные приборы и датчики. Автоколлиматоры широко используются во многих задачах угловых измерений [1]. Особо важными являются точные угловые измерения для технологий, связанных с разработкой и созданием систем навигации и ориентации, в том числе точных гироскопов, кодовых датчиков угла, авиационных, космических и морских систем навигации и астроориентации, а также при создании крупногабаритных оптических систем и большебазных интерферометров.

В современных прецизионных автоколлиматорах в качестве фотоприемного устройства широко используются матричные фотоприемники – ПЗС-линейки и матрицы. Достоинствами таких приборов перед визуальными автоколлиматорами является большее угловое разрешение, точность и воспроизводимость результатов измерения, поскольку они (результаты измерения) не зависят от индивидуальных параметров зрения, тренированности и внимания оператора. Еще одним достоинством фотоэлектрических автоколлиматоров является большая скорость измерений. Автоколлиматоры, выпускаемые иностранными фирмами «TRIOPTICS», «MOELLER-WEDEL» имеют чувствительность (1–0,005)″, погрешность измерения (3–0,01)″ [2, 3]. Недостатками фотоэлектрических автоколлиматоров являются высокая стоимость; большие габариты приборов, вызванные необходимостью использования длиннофокусных объективов для достижения высокой чувствительности $f = (100–1000)$ мм; невозможность регулировки диапазона и погрешности измерений.

Альтернативой таким автоколлиматорам служат различные когерентно-оптические схемы контроля, использующие волновую природу света. Данные методы обладают рядом достоинств, главные из которых: высокая чувствительность, точность, простота, дешевизна и малые габариты конструкции. Недостатками таких схем являются значительно меньший диапазон измерений при сравнимой чувствительности [4]; сложность конструкции при большом диапазоне измерений [1]; специфичность конструкции, которая делает невозможным использование схемы для автоколлимационных измерений, но обладает высокой чувствительностью и большим диапазоном измерений при использовании схемы в качестве углоизмерительного датчика [5].

Цель работы – исследование новой схемы дифракционного контроля малых угловых и линейных величин на основе схемы дифракционного интерферометра и применение полученных результатов для создания средств измерения угловых и линейных величин, обладающих большей чувствительностью, точностью, компактностью и простотой реализации по сравнению с ныне существующими фотоэлектрическими и дифракционными угломерами.

Задачи, решаемые в работе:

– анализ процесса формирования интерференционной картины и ее свойств в дифракционном интерферометре;

- разработка математических моделей, описывающих распределения интенсивности света в плоскости регистрации;
- расчет чувствительности схем с различными конструктивными параметрами к угловым и линейным смещениям;
- создание экспериментального макета схемы для проверки основных положений теоретической части работы.

Общая методика проведения исследований: в теоретической части работы преобразования световых полей в схеме дифракционного интерферометра рассматриваются с помощью математических методов теории систем и интегральных преобразований в оптике. Оценка метрологических возможностей схемы, расчет необходимых конструктивных параметров и моделирование ее работы производились с помощью персонального компьютера. Проверка основных теоретических положений и работы математических моделей производилась экспериментальным путем. Обработка и анализ экспериментальных интерферограмм производилась с помощью персонального компьютера в среде MathCAD.

Схема дифракционного интерферометра

Общий вид исследуемой схемы представлен на рис. 1. Здесь около линзы установлены два объекта в виде щелевых апертур, или нитей, на которые под наклоном падает пучок излучения от лазерного источника.

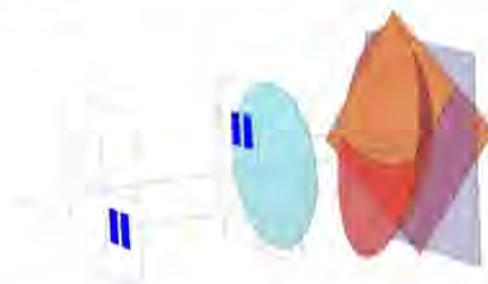


Рис. 1. Общий вид исследуемой схемы дифракционного интерферометра

На рис. 2 показано, как меняется форма поверхности, на которой формируется Фурье-образ апертуры при продольном и поперечном смещениях щели относительно линзы [6].

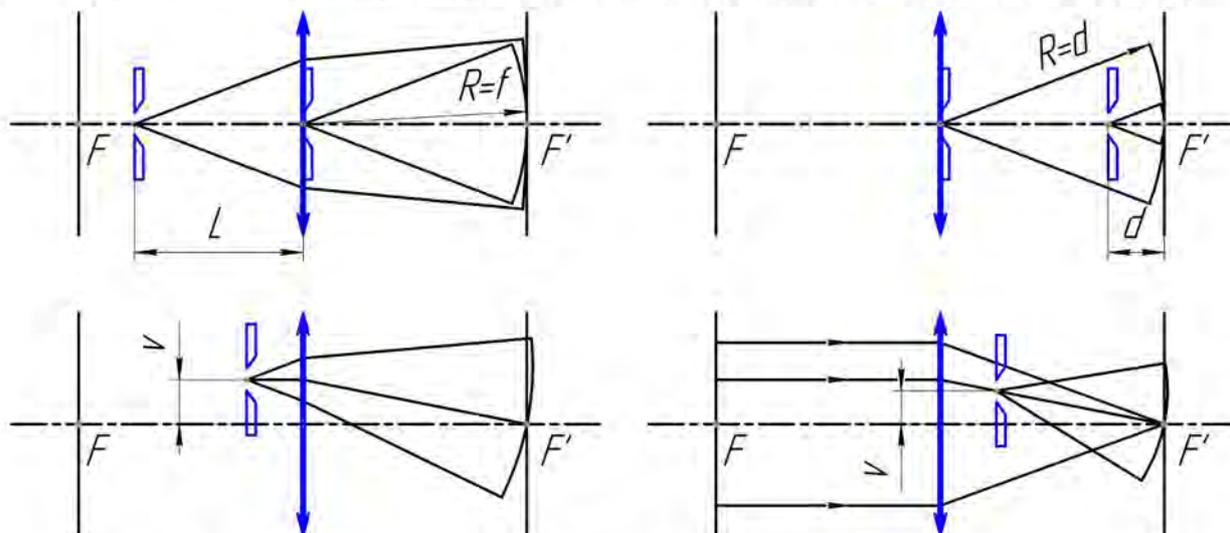


Рис. 2. Влияние положения апертуры около линзы на поверхность локализации ее Фурье-спектра

Как видно из рис. 1, 2, если около объектива расположены две щели, то в его фокальной плоскости наблюдается картина интерференции двух сферических волн, радиус и наклон которых зависят от положения щелей относительно объектива. Это открывает возможность контроля положения одной из апертур относительно линзы по различным параметрам

интерференционной картины. Качественный вид интерференционной картины от двух щелевых апертур показан на рис. 3.

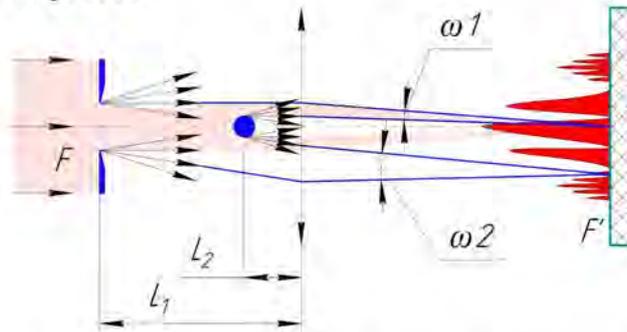


Рис. 3. Образование интерференционной картины с переменной шириной полос

Важное свойство данной интерференционной картины в том, что центр ее наиболее широкой области (наиболее удобной для измерений) статичен при любых углах падения излучения на систему и его ширина постоянна (определяется положением апертур относительно объектива).

При расположении апертур на оси системы центр наиболее широкой интерференционной полосы будет всегда находиться в задней фокальной точке объектива.

При изменении угла падения излучения на систему α между волновыми фронтами, которые образуются за апертурами, будет возникать дополнительная разность фаз $\Delta(\alpha)$. Это следует из неравенства оптических путей L и L' (рис. 4).

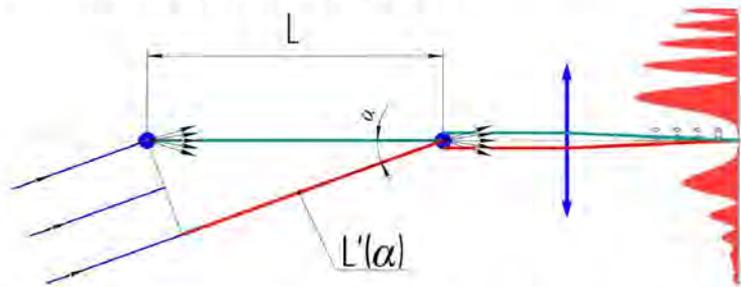


Рис. 4. Схема образования разности фаз между щелевыми апертурами

Из рис. 4 оптический путь $L'(\alpha)$ можно определить как:

$$L'(\alpha) = L \cdot \cos(\alpha). \quad (1)$$

Разность фаз между лучами, дифрагировавшими по оси системы:

$$\Delta(\alpha) = L \cdot [1 - \cos(\alpha)]. \quad (2)$$

Возникновение дополнительной разности фаз между интерферирующими фронтами приводит к изменению интенсивности интерференционных полос и их смещению на приемнике. Данный эффект открывает возможности контроля угла падения излучения или перемещения одной из апертур (продольного или поперечного).

Оценка потенциальной чувствительности схемы к изменению угла падения излучения

Для оценки потенциальной чувствительности схемы заменим на рис. 4 щелевые апертуры точечными источниками излучения. При этом оптические пути, которые проходят волны перед интерференцией от каждого из источников, положим равными L и $L \cdot \cos(\alpha)$. Тогда суммарную амплитуду в задней точке фокуса объектива можно определить как:

$$A = e^{-jkL} + e^{-jkL \cos(\alpha)} = e^{-jkL \cos(\alpha)} \left[e^{-jkL[1 - \cos(\alpha)]} + 1 \right] = e^{-jkL \cos(\alpha) - 0.5jkL[1 - \cos(\alpha)]} \times \\ \times \left[e^{-0.5jkL[1 - \cos(\alpha)]} + e^{0.5jkL[1 - \cos(\alpha)]} \right] = 2e^{-0.5jkL[1 + \cos(\alpha)]} \cdot \cos\{0.5kL \cdot [1 - \cos(\alpha)]\} ,$$

где $k = 2\pi/\lambda$; λ – длина волны источника излучения.

Откуда интенсивность в точке заднего фокуса объектива будет равна:

$$I = A \cdot A^* = 4 \cdot \cos^2 \left\{ \frac{\pi}{\lambda} L \cdot [1 - \cos(\alpha)] \right\}. \quad (3)$$

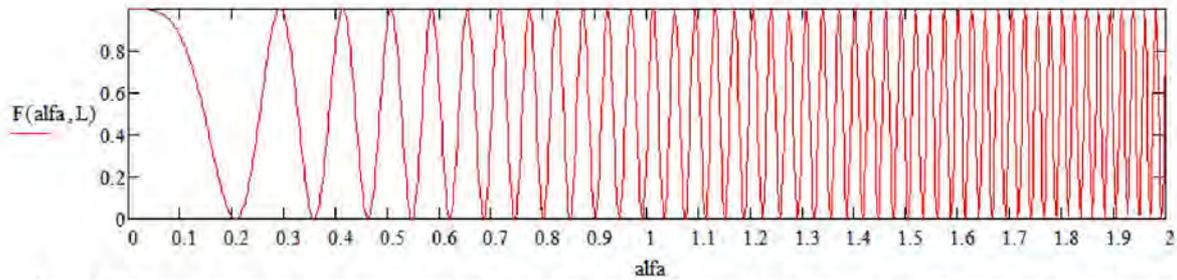


Рис. 5. Зависимость интенсивности в задней фокальной точке объектива от угла падения излучения на систему (град) ($L = 50$ мм, $\lambda = 0.65$ мкм)

Приравняв (3) к нулю и единице, получим выражения, описывающие величины углов, при которых интенсивность принимает минимальное и максимальное значения соответственно:

$$\alpha_{k \max} = \arccos \left\{ 1 - \frac{\lambda}{\pi \cdot L} \cdot \pi k \right\}; \quad \alpha_{k \min} = \arccos \left\{ 1 - \frac{\lambda}{\pi \cdot L} \cdot \left(\frac{\pi}{2} + \pi k \right) \right\},$$

где k – целое, номер максимального (минимального) колебания интенсивности (рис. 5).

Минимально разрешаемую угловую величину можно определить по формуле:

$$S = \frac{\alpha_{k \max} - \alpha_{k \min}}{2 \cdot m}, \text{ сек}, \quad (4)$$

где параметр $m = 100$ – величина разрешающей способности приемника по интенсивности ($\Delta I = 0,01 \cdot I_{\max}$); коэффициент, равный двум, учитывает двукратное увеличение разрешающей способности при использовании данной схемы в качестве автоколлиматора. Это следует из известного правила геометрической оптики: при повороте плоского зеркала на некоторый угол α , луч, падающий на апертуры, развернется на удвоенный угол 2α .

С помощью среды MathCAD были рассчитаны величины S при различных начальных углах падения излучения на схему и различных расстояниях между апертурами L . Полученные графики представлены на рис. 6.

Из графиков видно, что чувствительность системы к изменению угла падения излучения α растет при увеличении расстояния между апертурами L и начального значения α . Это открывает возможность варьирования чувствительности схемы путем изменения параметров L и α .

Для оценки максимальной чувствительности схемы зададимся ее параметрами, исходя из возможности изготовления.

Параметры схемы, ограничивающие максимальную чувствительность:

- максимальный диаметр коллимированного пучка излучения;
- длина когерентности источника излучения;
- минимальный размер щелевых апертур или нитей.

Максимальный диаметр пучка из рис. 4. можно определить по выражению:

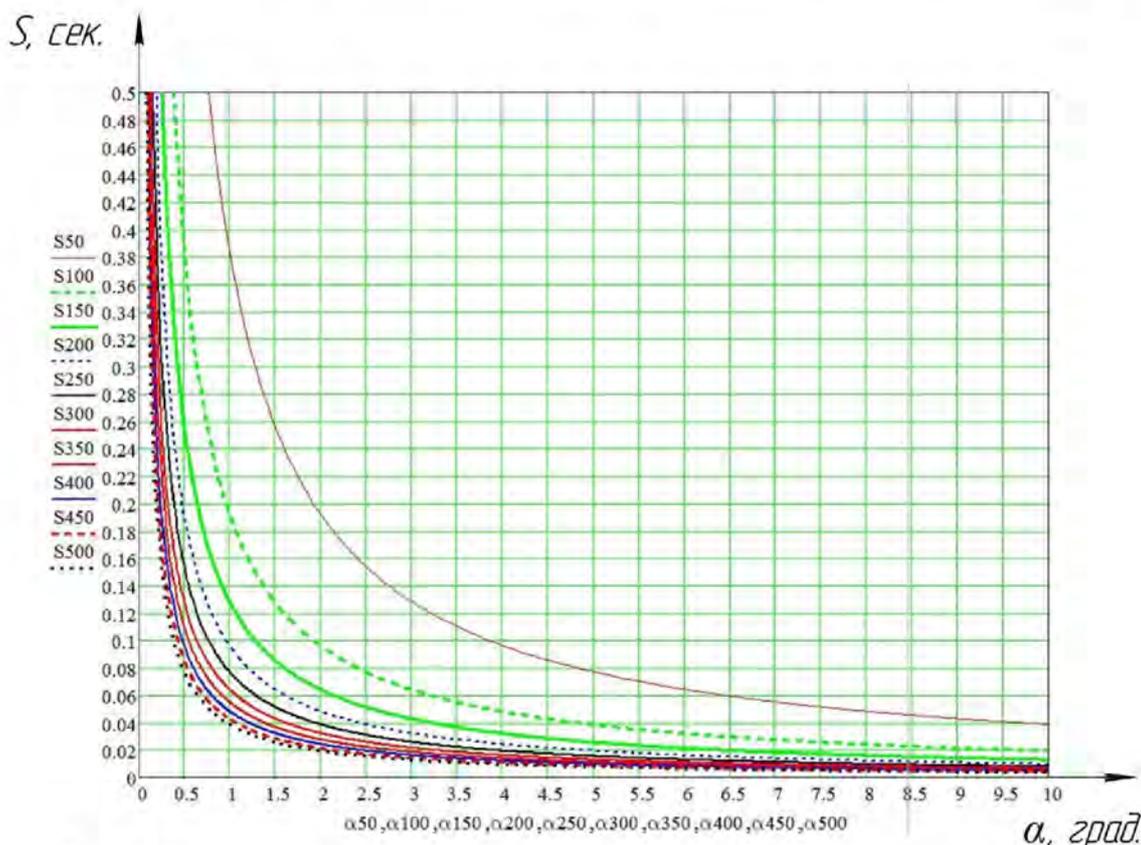
$$D_{\max} = L \cdot \sin(\alpha) \text{ (мм)}. \quad (5)$$

Максимальные диаметры пучков излучения определяются используемым типом лазерного источника и системами коллимирования и расширения пучка. Параметры наиболее распространенных и доступных лазерных источников приведены в Табл. 1.

Таблица 1

Параметры источников излучения

Вид источника излучения	Диаметр выходного пучка, мм	Длина когерентности, мм
Полупроводниковые лазеры и лазерные диоды	Зависит от фокусирующей оптики и угла расходимости пучка	2–5; (> 1 000, одночастотный режим)
Твердотельные лазеры с диодной накачкой	≤ 2	> 50 000, одночастотный режим
Гелий-неоновые лазеры	≤ 0.8 мм	200–300

Рис. 6. Зависимость минимально разрешимого угла от расстояния между щелями L (мм) и угла падения излучения α ($\lambda=0,65$ мкм)

Минимально необходимую длину когерентности можно определить по формуле (2).

С помощью выражений (2) и (5) в среде MathCAD были построены графики необходимых длины когерентности $l_{\text{ког.}}(L, \alpha)$ и диаметра коллимированного пучка излучения $D_{\text{max}}(L, \alpha)$, представленные на рис. 7а, 7б. Данные о параметрах $l_{\text{ког.}}$, мм. и D_{max} , мм при одной и той же чувствительности схем были сведены в Табл. 2.

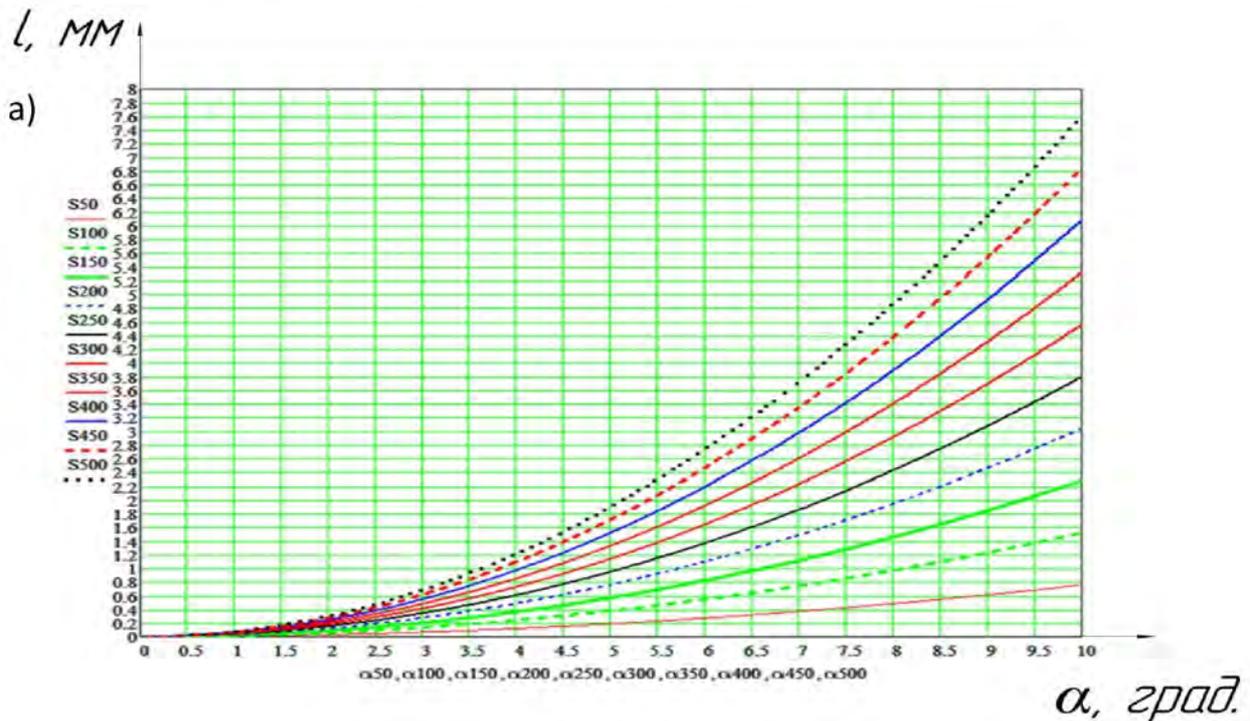
Таблица 2

Конструктивные параметры схем с различной чувствительностью

		L, мм						
		50	100	150	200	250	300	
S^*	0,5"	α	45'	23'	16'	10,6'	9,5'	8,6'
		$l_{\text{ког.}}$	0,004	0,002	0,002	0,001	0,001	0,001
		D_{max}	0,65	0,67	0,69	0,62	0,69	0,75
	0,1"	α	3,8°	1,9°	1,3°	1°	46'	38'
		$l_{\text{ког.}}$	0,11	0,06	0,04	0,03	0,02	0,02

	D_{max}	3,36	3,35	3,35	3,36	3,35	3,33
0,05"	α	7,7°	3,9°	2,6°	1,9°	1,5°	1,3°
	$l_{ког.}$	0,45	0,23	0,15	0,11	0,09	0,08
	D_{max}	6,70	6,71	6,72	6,72	6,68	6,71
0,02"	α	19,6°	9,7°	6,4°	4,8°	3,8°	3,2°
	$l_{ког.}$	2,89	1,42	0,94	0,7	0,56	0,47
	D_{max}	16,76	16,77	16,74	16,75	16,76	16,77
0,015"	α	26,6°	12,9°	8,6°	6,4°	5,1°	4,3°
	$l_{ког.}$	5,27	2,53	1,68	1,25	1	0,83
	D_{max}	22,35	22,35	22,36	22,35	22,33	22,34
0,01"	α	42,1°	19,6°	12,9°	9,7°	7,7°	6,4°
	$l_{ког.}$	12,90	5,78	3,79	2,83	2,26	1,88
	D_{max}	33,51	33,52	33,52	33,54	33,52	33,52

* При разрешающей способности приемника равной 1% от максимального значения интенсивности.



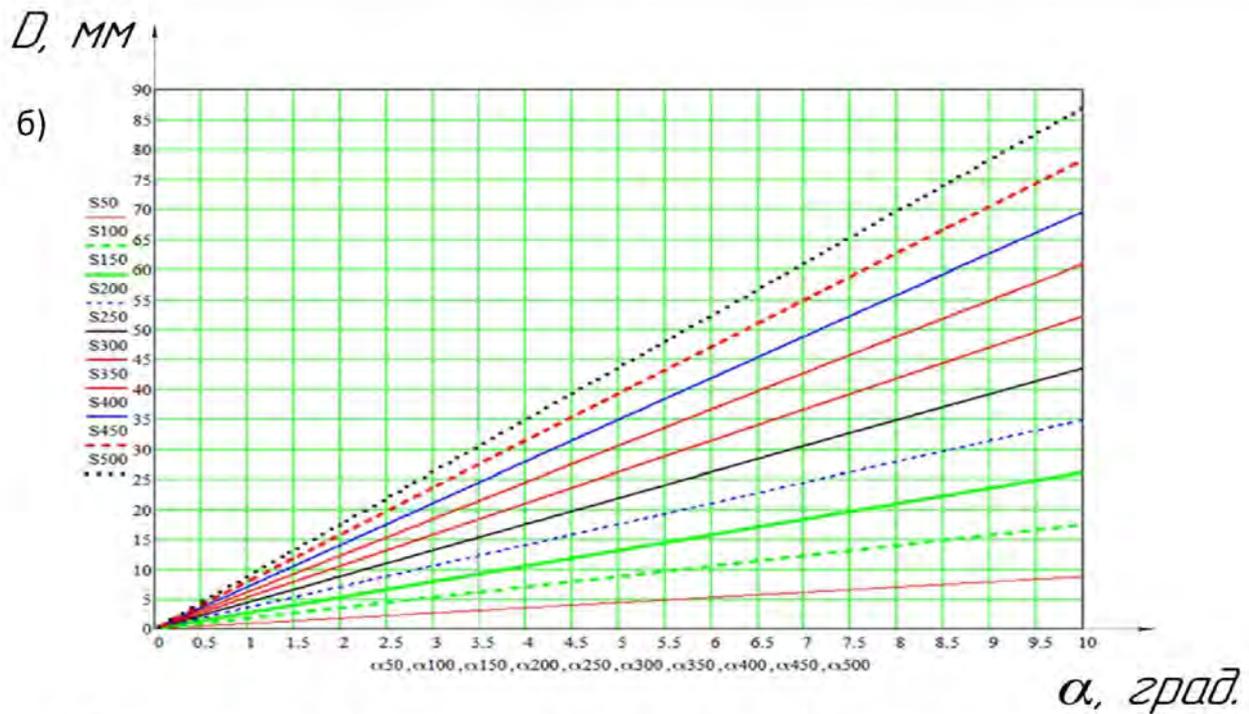


Рис. 7. Зависимость необходимой длины когерентности l и диаметра пучка излучения D от угла падения излучения α и расстояния между апертурами L

Из Табл. 2 видно, что главным схемным параметром, определяющим чувствительность системы, является максимальный диаметр пучка излучения источника. Это ограничивает использование твердотельных и гелий-неоновых лазеров имеющих узкий диаметр пучка.

При использовании в качестве источника лазерного диода задача по созданию широкого коллимированного пучка существенно упрощается, поскольку диаметр пучка определяется углом расходимости излучения лазерного диода и фокусным расстоянием объектива. Максимальный угол расходимости типичных лазерных диодов в двух взаимоперпендикулярных плоскостях составляет около 9° и 30° . Таким образом, для достижения ширины пучка $D_{\max} = 34$ мм (при чувствительности в $0,01''$) потребуется объектив

с минимальным фокусным расстоянием $f' = \frac{D_{\max}}{2 \cdot \operatorname{tg}(15^\circ)} \approx 64$ мм.

Вторым важным параметром является длина когерентности излучения источника. Как видно из Табл. 1 современные лазерные диоды удовлетворяют необходимым требованиям по длине когерентности.

Третий фактор, ограничивающий чувствительность схемы, – минимально возможные размеры щелевых апертур, или нитей. Обратимся к рис. 8 и формуле (6), описывающей интенсивность излучения в дальней зоне при дифракции на одной щели:

$$I(\beta) = \operatorname{sinc}^2\left(\frac{a \cdot \pi}{\lambda} \beta\right), \quad (6)$$

где $\operatorname{sinc}(x) = \sin(x)/x$; a – ширина щели, β – угол дифракции.

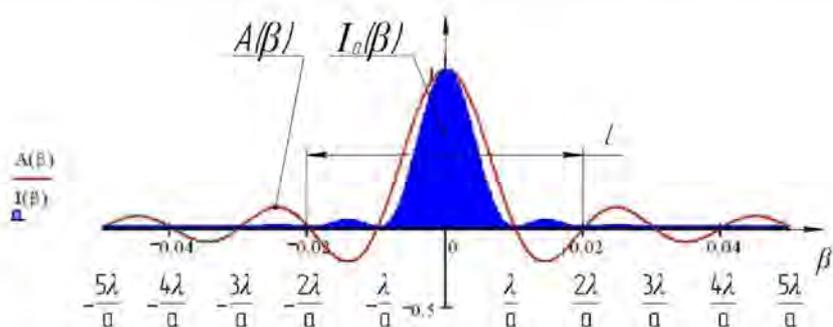


Рис. 8. Зависимость амплитуды $A(\beta)$ и интенсивности $I_0(\beta)$ от угла дифракции в дальней зоне от щели шириной a (масштаб по вертикальной оси не сохранен)

Из рис. 8 и выражения (6) следует, что положение первого дифракционного минимума определяется величиной $\beta = \lambda/a$. При изменении угла падения излучения на щель дифракционная картина смещается на приемнике (при этом центр наиболее широкой области интерференционной картины остается неподвижным).

Величина максимального угла падения излучения, при котором в задней фокальной точке объектива будет располагаться первый минимум дифракционной картины, будет равна:

$$\alpha_{\max} = \lambda/a, \quad (7)$$

где a – ширина апертуры, мкм.

Возможны разные способы регистрации интенсивности.

- В пределах половины главного максимума дифракционной картины.

Известно, что явление дифракции света на объекте можно наблюдать при размере объекта a , сравнимом с длиной волны падающего излучения, поэтому примем минимальный размер щелевых апертур равным $a = 10$, мкм ($\lambda = 0,65$, мкм). В этом случае максимальный угол падения излучения будет равен $\alpha_{\max} = 0,65/10 = 0,065$ рад или $\alpha_{\max} = 3,7^\circ$. Из рис. 6 видно, что максимальная чувствительность на краю главного максимума дифракционной картины будет около $0,1''$ (при расстоянии между апертурами $L = 50$ мм).

Достоинством данного способа регистрации является большая интенсивность главного максимума по сравнению с побочными.

Недостатки: необходимость изготовления узких щелей (~ 10 мкм), меньшая достижимая чувствительность схемы при малых L (из-за малого начального угла падения излучения α на апертуры).

- В побочном максимуме дифракционной картины.

Преимуществом такого способа является возможность достижения большей чувствительности без необходимости создания узких апертур, поскольку для данного угла падения излучения всегда можно выбрать необходимый размер апертур так, чтобы в задней фокальной точке объектива находился центр побочного максимума. Возможна регулировка чувствительности схемы изменением начального угла α так, чтобы в точке заднего фокуса объектива оказался другой побочный максимум дифракционной картины.

Недостатки: ограничение диапазона относительных измерений шириной побочного максимума дифракционной картины; меньшая интенсивность побочных максимумов.

- Регистрация интерференционной картины, накладывающейся на большое число побочных максимумов дифракционной картины. Достоинствами данного способа являются: наименьшие требования к размерам апертур (до нескольких миллиметров); возможность достижения большей чувствительности, чем при работе в главном максимуме дифракционной картины; диапазон измерений не ограничен размерами дифракционных максимумов; возможна более плавная регулировка чувствительности схемы путем изменения начального угла падения излучения.

Недостатки: большая сложность обработки интерференционной картины и поиска значения интенсивности в случае попадания дифракционного минимума в область измерения интенсивности интерференционной полосы.

Оценка потенциальной чувствительности схемы к продольным перемещениям

Оценку потенциальной чувствительности можно провести на основании формулы (2) и рис. 4: при фиксированном угле падения излучения на систему α и изменении расстояния L между апертурами изменится разность фаз между освещающими апертуры пучками излучения. Это приведет к изменению интенсивности в наблюдаемой интерференционной картине.

На рис. 9 представлена зависимость интенсивности в задней фокальной точке объектива от величины продольного смещения щелевой апертуры L , полученная по формуле (3). Из графика видно, что чувствительность системы не меняется при изменении расстояния между апертурами и определяется только начальным углом падения излучения α .

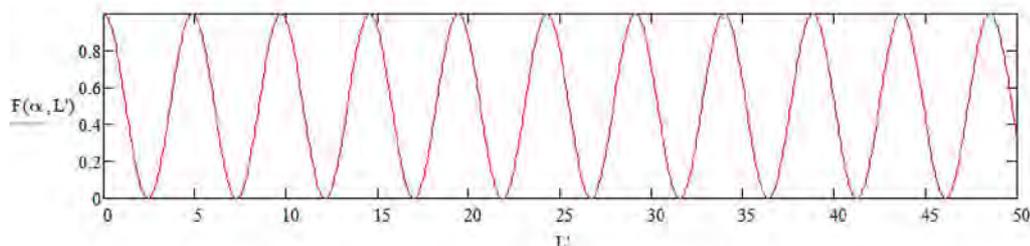


Рис. 9. Колебания интенсивности в фокальной плоскости линзы при продольном перемещении апертуры, мкм ($\alpha=30^\circ$, $\lambda=0,65$ мкм)

Результаты расчетов, выполненных по формулам, (3) и (4) представлены в Табл. 3. Из таблицы видно, что максимальная чувствительность схемы к продольным перемещениям может достигать единиц нанометров.

Таблица 3

Минимально разрешимые продольные смещения апертуры

α°	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	15	20	25
S_L^* , нм	21300	5300	2400	1300	860	600	440	330	260	210	95	54	35
α°	30	35	40	45	50	55	60						
S_L^* , нм	24	18	14	11	9,1	7,6	6,5						

* При разрешающей способности приемника равной 1% от максимального значения интенсивности.

Оценка потенциальной чувствительности схемы к поперечным перемещениям

Оценим потенциальную чувствительность схемы при поперечных смещениях апертуры. При этом будем рассчитывать величину поперечного смещения апертуры, при котором интенсивность в задней фокальной точке объектива изменится на минимальную величину, разрешаемую приемником.

Как показано на рис. 10 в случае поперечного смещения v одной из апертур между освещающими апертуры пучками будет возникать дополнительная разность фаз Δ , величину которой можно определить по формуле:

$$\Delta(\alpha) = v \cdot \sin(\alpha).$$

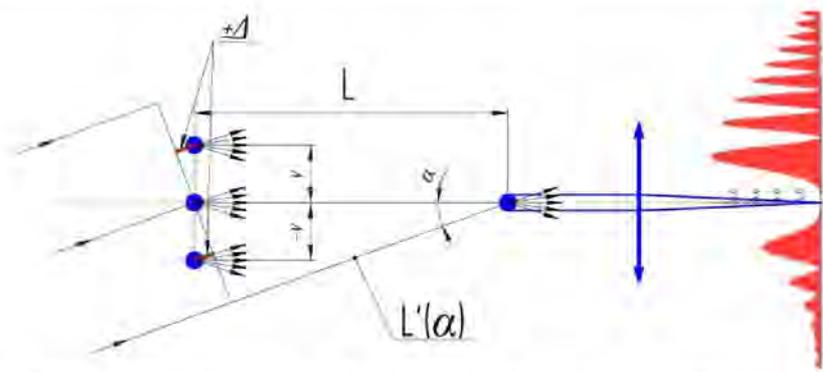


Рис. 10. Схема образования разности фаз между апертурами при поперечных смещениях

Заменим щелевые апертуры точечными источниками излучения, при этом положим, что оптические пути, которые проходят волны перед интерференцией в задней фокальной точке объектива от каждого из источников будут равны $L+v\sin(\alpha)$ и $L\cos(\alpha)$. Тогда суммарную амплитуду в задней точке фокуса объектива можно определить как:

$$\begin{aligned} A &= e^{-jk(L+v\sin\alpha)} + e^{-jkL\cos\alpha} = e^{-jkL\cos\alpha} \left(e^{-jk[L(1-\cos\alpha)+v\sin\alpha]} + 1 \right) = \\ &= e^{-jkL\cos\alpha - 0.5jk[L(1-\cos\alpha)+v\sin\alpha]} \cdot \left(e^{-0.5jk[L(1-\cos\alpha)+v\sin\alpha]} + e^{0.5jk[L(1-\cos\alpha)+v\sin\alpha]} \right) = \\ &= 2e^{-0.5jkL(1+\cos\alpha) - 0.5jkv\sin\alpha} \cdot \cos\{0.5k \cdot [L(1-\cos\alpha) + v \cdot \sin\alpha]\} \end{aligned}$$

где $k = 2\pi/\lambda$; λ – длина волны источника излучения.

Откуда интенсивность в заднем фокусе объектива будет равна:

$$I = A \cdot A^* = 4 \cdot \cos^2 \left\{ \frac{\pi}{\lambda} [L(1-\cos\alpha) + v \cdot \sin\alpha] \right\}.$$

Проведенные расчеты показали, что чувствительность системы к поперечным смещениям постоянна при любых продольных расстояниях между апертурами L и определяется углом падения излучения α . Также была выявлена независимость чувствительности к продольным перемещениям от величины поперечного смещения щелей.

Минимально разрешимые поперечные смещения одной из апертур при различных углах падения излучения, рассчитанные с помощью выражений (4) и (10) представлены в Табл. 4.

Таблица 4

Минимально разрешимые поперечные смещения апертуры

α°	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	15	20	25
$S_v^*, \text{ нм}$	93	47	31	23	19	16	13	12	10	9.4	6.3	4.8	3.8
α°	30	35	40	45	50	55	60						
$S_v^*, \text{ нм}$	3.5	2.9	2.5	2.3	2.1	2.0	1.9						

* При разрешающей способности приемника равной 1% от максимального значения интенсивности.

Как видно из табл. 3 и 4, при малых углах падения излучения ($\alpha < 2^{\circ}$) схема может быть использована для контроля поперечных смещений апертуры. В этом случае направляющая, по которой перемещается щель, ориентируется поперек оптической оси линзы. Смещение апертуры поперек направляющей на величину порядка 5 мкм не вызовет существенной погрешности измерений. При более высокой разрешающей способности схемы колебания апертуры поперек направляющей делают невозможным проведение измерений. Принципиально решить данную проблему можно установкой направляющей под углом $\gamma = \arctg(S_v / S_L)$ к оптической оси объектива. В этом случае интерференционная картина оказывается нечувствительной к поперечным смещениям апертуры относительно направляющей, поскольку при этом апертура перемещается и вдоль, и перпендикулярно оптической оси линзы на величины, вызывающие одинаковые приращения интенсивности

в интерференционной картине, но противоположные по знаку. Минимально регистрируемое перемещение апертуры вдоль направляющей S_{LV} в этом случае составит $S_{LV} = (S_L^2/4 + S_v^2/4)^{1/2}$.

Расчет дифракционной картины от двух щелевых апертур, расположенных перед объективом и освещаемых наклонным пучком излучения

Пусть щелевая апертура имеет функцию пропускания

$$T(\xi) = \begin{cases} 1 & \text{при } -a/2 \leq \xi \leq a/2; \\ 0 & \text{при } \xi < -a/2; \xi > a/2 \end{cases}$$

и освещается плоской волной с амплитудой A (рис. 11).

В случае если апертура расположена вплотную к линзе, амплитуда волны, падающая на линзу, будет равна $U(\xi) = A \cdot T(\xi)$. Поле за линзой может быть определено как поле перед ней, умноженное на коэффициент передачи линзы в приближении Френеля:

$$U(\eta) = U(\xi) \cdot T_{\text{линзы}},$$

где $T_{\text{линзы}} = e^{jkn \Delta_0} \cdot e^{-j \frac{k\xi^2}{2f}}$; $e^{jkn \Delta_0}$ – постоянный фазовый множитель, учитывающий прохождение света в линзе с показателем преломления n и толщиной Δ_0 .

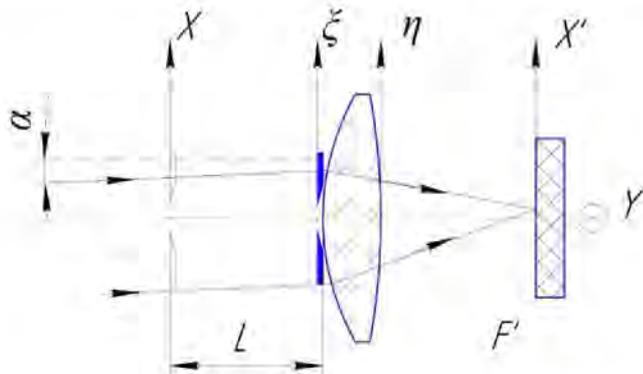


Рис. 11. К выводу формулы распределения амплитуды поля в фокальной плоскости объектива от одной апертуры

Поле в задней фокальной плоскости линзы может быть найдено с помощью приближения

Френеля:
$$U(x') = \frac{j}{\lambda z} e^{jkz} \int_{-\infty}^{+\infty} U(\eta) \cdot e^{j \frac{k(x'-\eta)^2}{z}} d\eta,$$

где $z = f$ – путь, пройденный излучением из плоскости ξ_3 в плоскость ξ_4 . Таким образом, получим:

$$U(x') = \frac{j}{\lambda f} e^{jkf} \int_{-\infty}^{+\infty} U(\xi) \cdot e^{-j \frac{k\xi^2}{2f}} \cdot e^{j \frac{k(x'-\xi)^2}{f}} d\xi = \frac{j}{\lambda f} e^{jkf} \int_{-\infty}^{+\infty} U(\xi) \cdot e^{-j \frac{k\xi^2}{2f}} \cdot e^{j \frac{kx'^2}{2f}} \cdot e^{j \frac{k\xi^2}{2f}} \cdot e^{-j \frac{kx'\xi}{f}} d\xi$$

$$U(x') = \frac{j}{\lambda f} e^{jkf} \cdot e^{j \frac{kx'^2}{2f}} \int_{-\infty}^{+\infty} U(\xi) \cdot e^{-j \frac{kx'\xi}{f}} d\xi = \frac{j}{\lambda f} e^{jkf} \cdot e^{j \frac{kx'^2}{2f}} F\{U(\xi)\}. \quad (8)$$

Выражение (8) без учета фазовых множителей представляет собой прямое преобразование Фурье и является спектральной функцией поля за щелевой апертурой $F\{U(\xi)\}$.

Известно, что спектральная функция поля, прошедшего участок свободного пространства длиной L , может быть определена как спектральная функция поля до прохождения пути L , умноженная на передаточную функцию свободного пространства $K(L)$:

$$F\{U(\xi)\} = F\{U(x)\} \cdot K(L),$$

$$\text{где } K(L) = e^{jkL} e^{-j\frac{L}{2k}x^2} = e^{jkL} e^{-j\frac{L}{2k}\left(\frac{kx'}{f}\right)^2}.$$

Таким образом, если щелевая апертура расположена на расстоянии L перед линзой, то амплитуду поля в ее фокальной плоскости можно определить как:

$$U(x') = \frac{j}{\lambda f} e^{jkf} \cdot e^{j\frac{kx'^2}{2f}} \cdot F\{U(x)\} \cdot K(L) = \frac{j}{\lambda f} e^{jkf} e^{jkL} \cdot e^{j\frac{kx'^2}{2f}\left(1-\frac{L}{f}\right)} \cdot F\{U(x)\}$$

или

$$U(x') = \frac{j}{\lambda f} e^{jkf} e^{jkL} \cdot e^{j\frac{kx'^2}{2f}\left(1-\frac{L}{f}\right)} \int_{-\infty}^{+\infty} U(x) \cdot e^{-j\frac{k}{f}x'x} dx. \quad (9)$$

При наклонном падении излучения в соответствии с теоремой смещения для преобразования Фурье в выражении (9) появится дополнительный фазовый множитель $e^{jkx\sin\alpha}$.

В случае если перед линзой установлены две щелевые апертуры, как видно на рис. 4, 10, то между волновыми фронтами, исходящими из апертур возникает дополнительная разность фаз. Она может быть учтена с помощью фазовых множителей вида $e^{jkL(1-\cos\alpha)}$ и $e^{jkv\sin\alpha}$, которые описывают разность фаз, возникающую между вершиной первой поверхности объектива и центром щелевой апертуры.

Двумерное распределение амплитуды в фокальной плоскости объектива от одной апертуры может быть найдено по выражению:

$$U(x', y') = A \frac{j}{\lambda f} e^{jkf} e^{jkL(2-\cos\alpha-\cos\beta)} e^{jk(v_x \sin\alpha + v_y \sin\beta)} \cdot e^{j\frac{k(x'^2+y'^2)}{2f}\left(1-\frac{L}{f}\right)} \times \\ \times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} T(x, y) \cdot e^{-jkx\left(\frac{x'}{f}-\sin\alpha\right)} e^{-jky\left(\frac{y'}{f}-\sin\beta\right)} dx dy,$$

$$\text{где } T(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{при } -a/2 + v_x \leq x \leq a/2 + v_x; & -b/2 + v_y \leq y \leq b/2 + v_y \\ 0 & \text{при } x < -a/2 + v_x; & x > a/2 + v_x; & y < -b/2 + v_y; & y > b/2 + v_y \end{cases},$$

a, b – размеры апертур, v_x, v_y – смещения апертур от оси системы.

Суммарную интенсивность поля в фокальной плоскости линзы при дифракции на двух апертурах получим как $I(x', y') = U_{\Sigma}(x', y') \cdot U_{\Sigma}^*(x', y')$:

$$I(x', y') = \left(\frac{1}{\lambda f}\right)^2 \left[\begin{aligned} & \left\{ a_1 b_1 \cdot \sin c \left[\frac{\pi a_1}{\lambda} \left(\frac{x'}{f} - \sin \alpha \right) \right] \cdot \sin c \left[\frac{\pi b_1}{\lambda} \left(\frac{y'}{f} - \sin \beta \right) \right] \right\}^2 + \left\{ a_2 b_2 \cdot \sin c \left[\frac{\pi a_2}{\lambda} \left(\frac{x'}{f} - \sin \alpha \right) \right] \cdot \sin c \left[\frac{\pi b_2}{\lambda} \left(\frac{y'}{f} - \sin \beta \right) \right] \right\}^2 + \\ & + 2 a_1 a_2 b_1 b_2 \cdot \sin c \left[\frac{\pi a_1}{\lambda} \left(\frac{x'}{f} - \sin \alpha \right) \right] \cdot \sin c \left[\frac{\pi a_2}{\lambda} \left(\frac{x'}{f} - \sin \alpha \right) \right] \cdot \sin c \left[\frac{\pi b_1}{\lambda} \left(\frac{y'}{f} - \sin \beta \right) \right] \cdot \sin c \left[\frac{\pi b_2}{\lambda} \left(\frac{y'}{f} - \sin \beta \right) \right] \cdot \\ & \cdot \cos \left[\frac{\pi}{\lambda} \left[\frac{x'^2 + y'^2}{f^2} \cdot (L_1 - L_2) + 2(L_1 - L_2) \cdot (\cos \alpha + \cos \beta - 2) + 2 \left(\frac{x'}{f} - 2 \sin \alpha \right) \cdot (v_{x1} - v_{x2}) + 2 \left(\frac{y'}{f} - 2 \sin \beta \right) \cdot (v_{y1} - v_{y2}) \right] \right] \end{aligned} \right] \quad (10)$$

Экспериментальные исследования

План экспериментальных работ включал:

– проверку качественного соответствия экспериментальных дифракционных картин теоретическому распределению интенсивности;

– проверку соответствия чувствительности схемы теоретическому расчету при различных расстояниях между апертурами и начальном угле падения излучения.

Для проверки правильности математических моделей на базе лабораторий НИУ ИТМО кафедры КиПОП [7] и Технического университета (ТУ) Ильменау (Германия) были собраны лабораторные установки.

Принципиальная схема и фотография установки в ТУ Ильменау представлены на рис. 12. Установка состоит из двух щелевых апертур 7, 8, расположенных друг за другом, одна из которых помещена на оси вращения поворотного столика 4. Для исключения взаимного экранирования щелей они были разнесены в вертикальной плоскости. Сведение дифрагировавших на щелях волновых фронтов, осуществлялось одиночной линзой 9 с $f = 300$ мм.

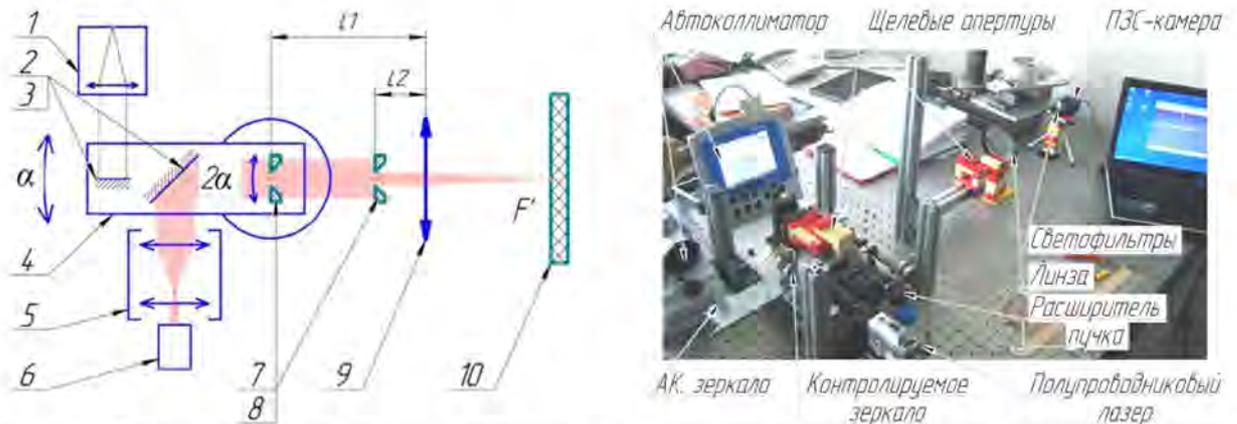


Рис. 12. Установка для проверки чувствительности схемы к углу падения излучения:

1 – автоколлиматор Elcomat 3 000; 2, 3 – зеркала; 4 – поворотный столик с микрометрической подвижкой; 5 – телескопическая система; 6 – полупроводниковый лазер ($\lambda = 0,65$ мкм); 7, 8 – щелевые апертуры, разнесенные в плоскости, перпендикулярной рисунку; 9 – линза; 10 – ПЗС-матрица

С помощью автоколлиматора 1 с чувствительностью 0,1" контролировался угол поворота столика α . При этом угол падения излучения на апертуры изменялся на величину 2α . Полученная дифракционная картина регистрировалась на ПЗС-камеру, подключенную к компьютеру.

В ходе экспериментов были получены несколько серий фотографий дифракционных картин при различных расстояниях между апертурами L и углах падения излучения α . С помощью среды MathCAD из полученных фотографий были считаны данные об интенсивности и построены графики зависимости интенсивности в центре дифракционной картины от угла падения излучения.

В Табл. 7 представлены примеры полученных фотографий, инвертированные по интенсивности, для указанных значений α и $L_1=442$ мм, $L_2=324$ мм.

Таблица 7

Примеры экспериментальных интерференционных картин

α	162.6"	
	278.5"	
	390.6"	
	450.1"	
	516.6"	

576.3"	
611.3"	
675.4"	

На рис. 13 приведен пример расчетной интерференционной картины при $\alpha = 0$ и измеренных параметрах установки. Видно, что результаты моделирования и эксперимента имеют хорошее качественное соответствие.



Рис. 13. Расчетная дифракционная картина

На рис. 14 представлены экспериментальные и расчетные графики изменения интенсивности в центре дифракционной картины, полученные в ходе проверки соответствия экспериментальной и расчетной чувствительности схемы. Для количественного сравнения полученных результатов определялись положения экстремумов интенсивности. Результаты представлены в Табл. 8.

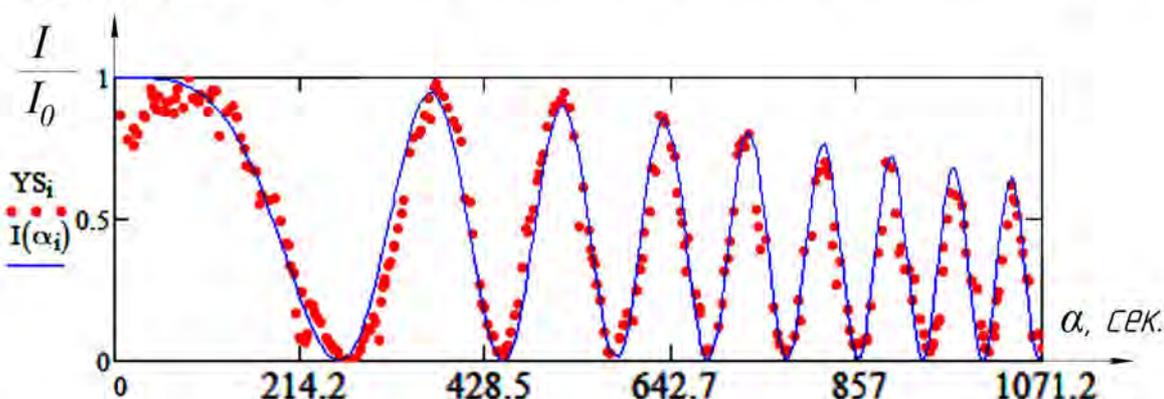


Рис. 14. Экспериментальный (точечный) и расчетный (непрерывный) графики колебаний интенсивности в центре интерференционной картины ($L_1 = 450,5$ мм, $L_2 = 38$ мм)

Таблица 8

Отклонения положений экстремумов интенсивности от расчетных значений

$\alpha_{\text{макс}}''$	0	-7.5	-2.8	3.6	-0.5	-1.8	4.3	1.8	-1.3
$\alpha_{\text{мин}}''$	-6.2	-3.5	6.2	1.1	2.4	5	-9.4	-7.4	-4.8

В Табл. 9 представлены экспериментальные и расчетные значения чувствительности между соседними экстремумами и соответствующие им относительные отклонения чувствительности схемы от расчетной. Максимальное отклонение чувствительности в эксперименте составило около 35 %.

Таблица 9

Теоретическая и экспериментальная разрешающая способность схемы*

Номер наклонного участка кривой интенсивности	1	2	3	4	5	6	7	8	9
		10	11	12	13	14	15	16	17
$S_{\text{Эксп.}}''$	2.64	1.08	0.78	0.69	0.52	0.58	0.53	0.49	0.42
	0.46	0.33	0.39	0.5	0.24	0.43	0.27	0.35	
$S_{\text{Теор.}}''$	2.58	1.07	0.82	0.69	0.61	0.55	0.51	0.47	0.45
	0.42	0.40	0.38	0.37	0.35	0.34	0.33	0.32	

$\frac{\Delta S}{S_{\text{Теор.}}}, \%$	2,4	1,2	4,9	1	14,7	4,7	4,9	3,4	6,5
	10	17	1,8	37,3	31,8	27,1	18,5	11	

*При разрешающей способности приемника, равной 1% от максимального значения интенсивности.

Полученные смещения положений экстремумов объясняются несовершенством установки, отдельные части которой не были жестко закреплены друг относительно друга. Так же, как было отмечено по автоколлиматору, используемый поворотный столик вносил изменяющееся отклонение пучка излучения и по вертикали, что вызывало дополнительный фазовый сдвиг и изменение интенсивности.

Результаты экспериментов подтвердили правильность математической модели (10) и показали хорошее соответствие с результатами расчетов.

Достигнутые результаты

- Проведено теоретическое и экспериментальное исследование новой схемы дифракционного интерферометра. Рассмотрено влияние изменения начального угла падения излучения и перемещений апертур на интерференционную картину и чувствительность схемы. Получены математические модели, описывающие распределения интенсивности света в плоскости приемника при различных параметрах схемы.

- Получена инженерная методика расчета необходимых конструктивных параметров схемы: диаметра коллимированного пучка излучения, длины когерентности источника, расстояния между апертурами и начального угла падения излучения, размера щелевых апертур. Проведен их расчет для заданных чувствительностей схемы.

- Проведены расчеты чувствительностей схемы к изменению угла падения излучения, продольным и поперечным смещениям апертур при различных параметрах схемы и методах регистрации. Минимально разрешимые величины составили $<0,01''$, $<6,5$ нм, <2 нм соответственно.

- Для расширения диапазона абсолютных угловых измерений предложено вместо одной из апертур использовать двойную апертуру с целью получения двух интерференционных картин с различной чувствительностью. Это может быть также достигнуто использованием второй схемы освещения с другим углом падения излучения.

- Для увеличения чувствительности и компактности схемы предложено исследовать различные ее модификации (с оптическим клином или с дифракционными решетками).

- На базе кафедр КиПОП НИУ ИТМО и машиностроения ТУ Ильменау (Германия) собраны лабораторные установки измерителей угловых перемещений с выводом экспериментальных интерферограмм на персональный компьютер и их последующей обработкой в среде MathCAD. В настоящее время создается действующий макет дифракционного автоколлиматора.

- Данная схема может быть использована при создании простых и компактных средств измерений угловых и линейных величин, работающих в широком диапазоне чувствительностей (с разрешающей способностью от десятков секунд до $0,01''$; от 20 мкм до 5 нм), а также для метрологической аттестации и поверки высокоточных средств измерений.

Публикации

1. Назаров В.Н., Соколов Ю.А. Исследование схемы дифракционного контроля положений объектов с изменяющимся масштабом спектра Фурье // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. 2011. Вып. 1 (71). С. 6–9.

2. Назаров В.Н., Соколов Ю.А. Дифракционный метод контроля пространственного положения объектов с изменяющимся масштабом спектра Фурье // Известия вузов. Приборостроение. 2011. Т. 54. № 11. С. 53–56.

3. Назаров В.Н., Соколов Ю.А. Дифракционный метод контроля угловых и линейных перемещений // Известия вузов. Приборостроение. 2012. Т. 55. № 4. С. 78–82.

4. Назаров В.Н., Соколов Ю.А. Новый метод дифракционного контроля малых угловых и линейных перемещений // Сборник трудов 10-ой Международной конференции «Прикладная оптика-2012». СПб. 2012. Т. 1. – 1.2. С. 152–156.

Литература

1. Высокоточные угловые измерения / Под ред. Ю.Г. Якушенкова. М., 1987. – 480 с.
2. Проспект фирмы „TRIOPTICS“ (Германия).
3. Проспект фирмы „MOELLER-WEDEL“ (Германия).
4. Назаров В.Н., Литьков А.Е. Дифракционные методы контроля геометрических параметров и пространственного положения объектов // Оптический журнал. 2002. Т. 69. № 2. С. 76–81.
5. Arefiev A.A., Ivanov A., Kotenok A. Interferometric devices for angular measurements // SPIE. 1996. Vol. 2775. P. 189–196.
6. Гуревич С.Б., Константинов В.Б., Соколов В.К., Черных Д.Ф. Передача и обработка информации голографическими методами. М., 1978. – 304 с.
7. Назаров В.Н., Соколов Ю.А. Дифракционный метод контроля угловых и линейных перемещений // Известия вузов. Приборостроение. 2012. Т. 55. № 4. С. 78–82.



Терентьева Ирина Валерьевна
Факультет информационных технологий и программирования
Кафедра информационных систем
Email: irinaterent@gmail.com

ИДЕОЛОГИЧЕСКИЕ ИСТОКИ ВНЕШНЕЙ ПОЛИТИКИ ДЖОРДЖА БУША-МЛАДШЕГО

И.В. Терентьева

Научный руководитель – доцент Д.Н. Иванов

Изучая политику США последних нескольких десятков лет, можно столкнуться с понятием демократизации как одной из основных внешнеполитических целей. Известно, что высшей ценностью американцы называют свободу слова, религии, прессы [2] и т. д. А под демократизацией понимается не просто соблюдение перечисленных свобод и конституционных прав, а продвижение идей демократии по всему земному шару. Как образовалась эта идеология внешней политики и где она берет свои истоки – первый вопрос моего исследования.

Чтобы начать исследование, необходимо представить основные положения и особенности книги Фрэнсиса Фукуямы «Конец истории и последний человек». Главной идеей книги является некий конец истории. Смысл этого выражения заключается в укоренении и популярности либеральной демократии в качестве государственного строя среди все большего количества стран. Либеральная демократия, по мнению Фукуямы, является концом, так как не требует войны для решения межгосударственных конфликтов, не создает глобальных причин для революции внутри государства. Либеральная демократия рассматривается как окончательная форма правления, последняя ступень лестницы государственной эволюции.

Именно эти идеи были опубликованы Фрэнсисом еще в 1989 году в эссе «Конец истории?» в журнале The National Interest [16]. Но Фукуяма ясно показывает, что он не первый, кто размышляет о возможности конца истории. В качестве основных своих наставников автор называет Гегеля, Маркса и Александра Кожева – французского философа XX века русского

происхождения. Статья в журнале вызвала большой резонанс по всему миру. Как указывает сам автор во введении в книге 1992 года, недовольство и несогласие с его мнением вызвано в большей степени из-за непонимания смысла термина «конец истории». Поэтому и было принято решение о написании книги на эту тему. Тем более события, произошедшие с 1989 по 1992 годы сильно изменили картину мира и подтвердили идею Фукуямы о естественном стремлении государств к формированию либеральной демократии (падение Берлинской стены, распад Советского Союза).

Переходя непосредственно к внешней политике США, укажем четыре направления движения мысли внешнеполитических деятелей последних 20 лет [15]:

- неоконсерваторы;
- реалисты (во главе с идеями Генри Киссинджера);
- либералы-интернационалисты;
- джексоновские националисты.

Основные принципы неоконсерватизма были опубликованы в 1996 году. Они провозглашали «гуманную гегемонию», «единение народа и армии», «моральную ясность» в распространении демократии [5].

Под «гуманной глобальной гегемонией» Кристол и Каган, авторы неоконсервативной программы, понимают «сохранение и укрепление безопасности Америки, поддержку других стран, продвижение своих интересов и принципов в мире».

«Единение народа и армии» – это принятие каких-либо мер по сокращению границ между гражданской и военной культурой, дополнительное привлечение граждан на военную службу, провозглашение глобальной миссии Америки среди граждан.

«Моральная ясность» заключается в помощи дружественным государствам, которые пытаются проводить у себя экономические реформы, направленные на развитие рыночных и главное, демократических отношений. Но здесь также имеется в виду не только поддержка, но и давление на страны с целью смены режима (примерами этого можно считать внешнеполитические отношения с Кубой, Ираном и Китаем).

Таким образом, неоконсерватизм во внешней политике США во многом отображает суждения Фукуямы 1992 года, главным образом по причине соответствия основной идеи книги в расширении границ демократической системы в мире. Именно поэтому Фукуяму иногда называют идейным вдохновителем Джорджа Буша младшего в формировании курса внешней политики.

Рассмотрим подробно, какие примеры из книги могли послужить для президента и государственного департамента основой при создании идеологии внешней политики Соединенных Штатов, и как они модернизировались.

Для того чтобы понять, как давно возникла идея равенства в Америке, нужно вернуться к началу истории страны, провозглашению ее независимости. Рассмотрим для этого труды Токвиля – французского историка и политика, по взглядам настоящего американского демократа. Его наиболее известный труд «Демократия в Америке» (1835, 1840) в XX веке был назван редакторами издания «одновременно лучшей книгой о демократии и лучшей книгой об Америке».

Токвиль пробыл в Америке всего девять месяцев, но всю дальнейшую жизнь посвятил ее изучению: он встречался с американцами, путешествующими по Франции, переписывался со знакомыми из Америки, изучал ее историю и конституцию.

Основные положения «Демократии в Америке» [1]:

- власть, которая базируется на идее равенства, ведет за собой особый образ мышления и убеждения граждан;
- установленный в государстве режим – это ключ к постижению политической жизни;
- со временем демократия произведет триумфальное шествие по странам и народам, так как она естественное всеобщее будущее.

В последнем тезисе мы видим истоки неоконсерватизма, истоки внешнеполитической стратегии Америки. Разница в том, что Фукуяма и Токвиль, в отличие от современных неоконсерваторов, видели шествие демократии как естественный процесс, как, например,

постепенное развитие организма. В политике Штатов это же стало выражаться через военные действия и навязывание демократии «сверху», что уже сложно назвать «гуманной гегемонией». Главным отличием неоконсерватизма в последние годы стало ведение реальной войны с противником, а не просто устрашение (как, это было во время Холодной войны). Безусловно, это изменение произошло после событий 11 сентября 2001 года, но развязывая войну с Ираком, неоконсерваторы не учли следующие моменты:

- не была реально оценена степень угрозы для самих Штатов при вступлении в такую войну;
- не предусмотрена последующая оценка осуществления подобной политики другими странами (которая была негативной);
- не определены факты, которые были необходимы для провозглашения мира с Ираком.

Таким образом, в стремлении и попытке смены режима в чужой стране видна неосторожность. Государственная система не может устанавливаться и меняться просто по возникшему желанию, ведь, как говорил Арнольд Тойнби: «Режим – это образ мышления граждан, он формировался столетиями, во время которых основывался на этнических и религиозных традициях», – поэтому режим не может беспрекословно следовать и подчиняться «гуманной гегемонии» другого государства.

Снова вернемся к влиянию книги «Конец истории и последний человек» непосредственно на внешнюю политику США. Наиболее интересное ранее исследование на эту тему есть у американского политолога Кена Джоуита:

«Изначально, пусть и в неявной форме, администрация Буша подписалась под тезисом о “конце истории”, гласящем, что “остальной” мир более или менее естественным путем сделается похожим на Запад вообще и на Соединенные Штаты в частности. События 11 сентября многое изменили. После них администрация Буша пришла к выводу, что исторический прогноз Фукуямы носит чересчур пассивный характер. Фукуяма недостаточно внимателен к рычагам исторических изменений. История, согласно заключениям администрации Буша, нуждается в сознательной организации, лидерстве и направлении. По величайшей иронии, определение администрацией Буша смены режимов как ключевого компонента ее антитеррористической политики, соответствующей ее стремлению к построению демократического капиталистического мира, привело к возникновению активной “ленинистской” внешней политики взамен пассивной “марксистской” социальной телеологии Фукуямы» [3].

После знакомства с инаугурационными речами Буша легко объяснить высказывание Джоуита. Безусловно, курс внешней политики первого и второго президентства Буша отличались довольно сильно. В 2000 году Буш говорит: «Я не думаю, что наши войска должны использоваться, для того чтобы сражаться и побеждать»; в 2004-м монолог звучит более устойчиво и воинственно: «Рано или поздно стремление к свободе зарождается в каждом разуме и душе», «Сохранение демократии на нашей земле все больше зависит от успехов демократии в других странах». Поэтому и возникает подобное сравнение внешней политики Буша с активной «ленинистской». Только строится уже не социализм, а мировая демократия.

Был ли Буш неоконсерватором в своих внешнеполитических идеях? Да, он следовал идее Рузвельта о национальном величии через военное превосходство, поддерживал отношения с союзниками и укреплял оборону. Эти принципы соответствуют провозглашенным в «канонической книге» неоконсерватизма Кагана и Кристалла, но именно за столь активные направленные действия вслед за этими принципами первый срок правления Буша сопровождался недовольством среди граждан Америки его политикой.

Причины Иракской войны 2003–2011 гг. сам Джордж Буш связывал с идеологией внешней политики США и «Конца истории». Война с Ираком была названа превентивной, т. е. предупреждающей (от лат. *praeventio* – опережать, предупреждать). То есть она была объявлена на основании безусловной будущей угрозы обществу со стороны Ирака. Какие угрозы видела команда Буша в Ираке?

Основной угрозой в Ираке Буш представлял наличие у этой страны оружия массового поражения. Следующей причиной он называл связь Ирака с террористическими организациями, такими как «Аль-Каида» и рядом других. Последней причиной для начала войны выделялась тирания на территории Ирака и обязанность США ее устранить.

В ходе военных действий было определено, что оружием массового поражения Ирак не обладает. Связь с террористами можно провести лишь через джихадизм – радикальную сторону ислама, которая призывает идеализировать религию через насилие. Но это лишь одна третья ветвь ислама, выступающая как побочный эффект глобализации современного мира, цель джихадизма связать религию и политику, доказать ее необходимость в применении при постоянной модернизации.

Остается одна непротиворечивая причина – свержение тирании. Ее теоретические истоки и планы можно проследить в «Стратегии национальной безопасности США» 2002 года. Начинается она довольно традиционно – с провозглашения основных идей внешней политики и ценностей государства: «Великие битвы XX века между идеалами свободы и тоталитаризмом завершились решающей победой сил свободы и выживанием единственной жизнеспособной модели, позволяющей обеспечить процветание нации: свободы, демократии и свободного предпринимательства». Но отличительной особенностью «Стратегии» стало заявление Буша о возможности объявления превентивной войны в случае, если будет обнаружена угроза со стороны иностранного государства: потенциальная или даже предполагаемая. «Мы не можем допустить, чтобы наши враги нанесли удар первыми». «Мы намерены защищать мир от угроз, исходящих от террористов и тиранов».

Насколько был оправдан риск столь агрессивной политики Буша против Ирака? Нужна ли была Соединенным Штатам эта превентивная война, когда так называемая потенциальная угроза была абсолютно переоценена. Это уже совсем не те принципы, о которых рассказывалось в книге «Конец истории» Фукуямы. В последней главе автор говорит о войне как о возможном действии лишь «от скуки», а шествие демократии должно проходить само собой с развитием технического, экономического и информационного прогресса. Но особенность книги так же в том, что Фукуяма практически ничего не упоминает о странах ислама. Во время выхода книги эти страны с авторитарными режимами были абсолютно далеки от установления либеральной демократии. Поэтому некоторые критики даже обвиняли его в скрытии фактов, которые могли опровергать его теорию в субъективном и одностороннем подходе к проблеме.

Вопросу риска вступления США в такую войну и ее оценки европейским сообществом можно уделить особое внимание. Уже после «холодной войны» спокойная Европа и Америка со своим демократическим максимализмом стали отстраняться друг от друга в вопросах внешней политики. Есть популярное высказывание американского чиновника времен правления Буша, которое до сих пор вызывает большой резонанс в Европе: «Никто не вправе говорить нам, где мы можем или не можем бомбить» [6]. Идея о том, что США – исключительная страна, зародилась в мышлении Америки еще не при Буше и не при Клинтоне, а во времена самого Вашингтона. Именно он рассуждал о том, как сформировалось американское государство, насколько процесс становления был отличным от других, и делал выводы о том, что именно поэтому американское общество может стать примером для подражания остальным странам.

Следуя высшим идеям Вашингтона, неоконсерваторы Каган и Кристоппер пишат, что «американская внешняя политика насыщена высокой моралью» [7]. В Европе такие суждения вызывают непонимание, поэтому Буш пытается объяснить войну в Ираке как действия, представляющие интересы всего мира, пытаясь ослабить негативную оценку происходящего. Его речи «или с нами или против всех» современный политолог Стивен Сестанович охарактеризовал как «американский максимализм» [8].

Поэтому очевидно, что эта война была абсолютно не «от скуки», эта война – борьба за признание. И если факт того, что действительно существует неизбежная тенденция к распространению в мире либеральной демократии, категорически отрицать невозможно, то

с мнением США о том, что демократию можно построить в любой момент времени в конкретно-определенном государстве, согласятся немногие [9].

В попытке построить демократию в чужой стране США не учитывали ряд важных факторов возникновения и последовательного становления системы:

- демократия рождается из последовательного становления государственных и гражданских институтов – это длительный и сложный процесс, который вряд ли может контролировать стороннее государство;

- внедрение демократии – исключительно внутреннее строительство, так как это сложный исторический процесс, поэтому невозможно предусмотреть какие-либо универсальные схемы возникновения демократии.

К самым сложнейшим трудностям и затормаживающим факторам демократизации общества относится религия. Ислам сложная конфессия, которая если и принимает какие-то изменения в исповедующих его странах, то только последовательно.

Если рассмотреть демократизацию с логической точки зрения, также можно увидеть ряд проблем. Представим современную модернизацию общества в виде геометрической плоскости. На этой плоскости – две параллельные прямые, одна из которых экономическое развитие, вторая – политическое. События, происходящие в стране, – прямые, которые пересекают и экономическое, и политическое развитие. Теперь покажем, что делают США с помощью инструментов внешней политики. Они пытаются ускорить в обществе политическое развитие, когда экономическое остается на прежнем уровне. Прямая политического развития выходит за пределы плоскости модернизации, поэтому возникают негативная реакция общества на американское вмешательство. Расширение границ плоскости модернизации возможно только при одновременном гармоничном движении вперед двух прямых (экономического и политического движения).

О том, что для модернизации необходимо и экономическое, и политическое развитие говорит Сэмюэл Хантингтон в работе 1968 году «Политический порядок в меняющихся обществах», указывая на то, что при непоследовательном развитии только одной из ветви модернизации возможны бурные волнения общества вплоть до насилия и войн.

США говорили, что они уже провели успешную демократизацию в Германии и Японии во второй половине XX века, но они никогда не упоминали в речах о не столь удачных программах, проводимых на Кубе, в Никарагуа, Доминикане и Гаити. Разница в том, что Германия и Япония к тому моменту уже подошли в своем развитии к формированию демократии, а в остальных перечисленных странах просто не было демократических институтов.

Современные успешные примеры участия США в демократизации стран:

- Сербия, 2000 год;
- Грузия, 2003 год;
- Украина, 2004–2005 год.

Ситуация выглядит так: инициатива насильственной смены режима возникала еще внутри государств; авторитарный режим в этих странах существовал только частично; общество в этих странах было готово принять поддержку из-за океана.

Эти страны наряду с Германией и Японией демонстрируют грамотный пример влияния США на установление демократии. На их примере легко понять, что нужно учесть для того, чтобы начать устанавливать демократию. Кроме уже обозначенного суждения о необходимости совместного политического развития наряду с экономическим, можно добавить четкие цели и инструменты для их достижения.

Таковыми инструментами в Сербии, Грузии и Украине была так называемая «мягкая сила» [10] (к ней можно отнести, например, образовательные программы, гранты для студентов / аспирантов со стороны США, консультации, дающие представление об историческом и политическом развитии обществ, денежные потоки на реализацию определенных благ). Ситуация с Ираком совершенно иная: для формирования демократии в Сербии, Грузии и Украине было отведено намного больше времени (процесс демократизации

Украины длился почти 15 лет назад с момента отделения ее от СССР до «оранжевой революции»), созрели экономические перемены, и граждане были к ним готовы.

Превентивную войну можно назвать инструментом, но он не оправдывал цели (ведь стало известно, что оружия массового поражения у Ирака нет). Война, которая официально завершилась лишь в 2011 году, имела тяжелые последствия и затяжной характер.

В период правления Буша интерес к основным положениям реалистической внешней политики возник вновь. К идеям реализма 28-го президента США Вудро Вильсона относился разумный подход к формированию мирового порядка. Вильсон говорил, что огромное значение для международного порядка имеют события, происходящие внутри государств. Нельзя повлиять на порядок исключительно снаружи. Поэтому современные реалисты говорят о том, что если США хочет политического развития стран, необходимо сначала обращать внимание на их экономическую и внутреннюю политику. Такая внешняя политика даже получила собственное название – «вильсонизм». У нее есть и свои интересные особенности, например, вильсонизм славится громкими фразами об исключительности Америки, об обладании ею огромной мощи и стремлении к добродетели во всем мире [11].

Война в глобальном смысле соответствовала идее «конца истории» Фукуямы в необходимости победы демократии все всем мире для благополучной жизни граждан. Однако если стороннее государство решило создать демократию не у себя дома, то оно должно предоставить стране, в которой будет проводиться направленная на это политика, основные государственные институты, опираясь на которые и будет функционировать еще молодая демократия. Институты – важнейшая ступень на пути утверждения демократии. Америка не смогла бы обеспечить Ирак институтами, которые эффективно и легитимно могли бы действовать в стране.

Какие еще интересные выводы можно сделать из политики вильсонизма? Безусловно, заявляя об исключительности своей страны, США стоит больше внимания уделять политической ответственности за свои действия, учитывать мнения европейских стран, оперативно реагировать на возникшие негативные оценки.

Дополнительной проблемой Буша в ситуации с Ираком было то, что Америка не вызывала доверия у арабских стран, не обладала в их глазах авторитетом. Поэтому во время второго срока правления Буша некоторые принципы внешней политики были пересмотрены. Например, США пытались убедить мир, что Ближнему Востоку нужна демократия как таковая, а не как средство борьбы с терроризмом.

Опираясь на тезисы Вильсона, можно сказать, что американская мощь и исключительность, возможно, будут воздействовать эффективнее, если они будут не так заметны государствам, в дела которых вмешивается Америка. Силу можно проявлять и скрытым образом.

Однако столь открытые агрессивные действия по отношению к Ираку можно смягчить. Америка до и после 11 сентября – это две разные страны. Страх, боль, ужас и плач надолго воцарились в стране. Доктрина национальной безопасности о превентивных войнах и смене режима в других странах 2002 года выражала на тот момент тревогу не только Буша и правительства Америки. Она была попыткой спасти американцев от ужаса, поднять национальный дух, дать возможность вспомнить гражданам штатов об исключительной мощи своей страны. Да, в многочисленных СМИ есть и другие мнения по поводу «доктрины Буша», одно из которых просто списывает действия внешней политики на излишнюю самоуверенность. Сейчас трудно определить, что из этого было действительно (тем более возможен и промежуточный вариант). Однако, несмотря на это, вступая в международные конфликты, проявляя силу, государство обязано проявлять благоразумие (тем более, по Кагану и Кристолю, гегемония должна быть «гуманной») и основываться на точной стратегии.

Курс, направленный на демократизацию мира, Буш удерживал все восемь лет своего правления. Какие факторы могли способствовать развитию демократии в мире?

Первое – развитие науки и техники, следовательно, модернизация военной техники, увеличение производственных мощностей, экономический рост производительности. Все эти факторы приводят к желанию налаживать со страной дипломатические отношения и заключать

контракты. Это в свою очередь ведет к вмешательству одного государства в политику другого с целью формирования в нем либеральной демократии для упрощения международных отношений.

Второе, что может стать причиной демократизации, – противоречия внутри страны, которые, как правило, являются переходным этапом на пути ее развития.

Последнее – жажда признания. Занимаясь строительством демократии в чужой стране, легко утвердиться в своей мощности и благодетельности, равно как и в мыслях о том, что все действия направлены прежде всего на всеобщее развитие.

Эта интересная перспектива, возможно, и привлекла внимание Буша. Соблюдение всех ее пунктов позволило действительно оказать влияние на формирование демократии в Грузии, Сербии и Украине. Мы рассматривали эти страны выше и убедились в том, что основные принципы, на которые опирается демократия, действительно работают.

Американский политолог польского происхождения Адам Пшеворский говорит, что демократизация – «процесс внедрения демократических принципов в политическую систему, культуру и стиль жизни» [12], подчеркивая, что при этом задействована не только политика. Смена режима в стране – это изменения в жизни граждан, новые дополнительные особенности в менталитете. Государство в целом (как власть, так и народ) должны быть готовы к этому.

Несмотря на то, что вскоре стало ясно, что угроза Ирака по отношению к другим странам была точно переоценена, а международная оценка внешней политики Америки носила негативный характер, в речах Буша продолжало звучать «или с нами или против всех». Затем появился термин «американский максимализм», а за Бушем закрепилась несколько комическая репутация. «Наши враги обладают технологиями и ресурсами. И мы – тоже. Они не перестают думать о том, чтобы навредить нашей стране и нашему народу. И мы – тоже»

Интернет-ресурсы

1. <http://www.whitehouse.gov/administration/eop/nsc> – тексты «Стратегии национальной безопасности США» разных лет.
2. <http://www.loc.gov/index.html> – библиотека Конгресса США.
3. <http://www.the-american-interest.com/> – интернет-журнал о политике и культуре, одним из авторов которого является Фрэнсис Фукуяма.
4. <http://nationalinterest.org/> – политический журнал о международных отношениях.
5. <http://www.newamericancentury.org/publicationsreports.htm> – библиотека публикаций на английском языке о внешней политике США.

Литература

1. *de Tocqueville A. Democracy in America / translated, edited, and with an introduction by H.C. Mansfield and D. Winthrop. Chicago Press, 2000. – 251 p.*
2. *Constitution of the United States of America (1787).*
3. *Jowitt Ken. Rage, Hubris, and Regime Change: The Urge to Speed History Along // Policy Review. 2003. Vol. 118. P. 33–42.*
4. *Anderson K. Goodbye to All that? A Requiem for Neoconservatism (2006).*
5. *Kristol W., Kagan R. Toward a Neo-Reaganite Foreign Policy // Foreign Affairs. 1996. Vol. 75. № 4. P. 18–32.*
6. *Clark W.K. Waging Modern War: Bosnia, Kosovo, and the Future of the Combat. New York, 2002. – 512 p.*
7. *Kagan R., Kristol W. (eds.). Present Dangers: Crisis and Opportunity in American Foreign and Defense Policy. San Francisco, 2000. – 392 p.*
8. *Sestanovich S. American Maximalism // National Interest. 2005. Vol. 79. P. 13–23.*
9. *Garfinkle A. The Impossible Imperative? Conjuring Arab Democracy // National Interest. 2002. Vol. 69. P. 156–167.*
10. *Joseph S. Nye Jr. Soft Power: The Means to Success in World Politics. New York, 2004. – 191 p.*
11. *Гаджиев К.С. Введение в политическую философию. М., 2004. – 336 с.*

12. Речь Дж. Буша в Вест-Поинте о превентивной войне (1 июня 2002 г.).
13. Речь Дж. Буша о ситуации на Ближнем Востоке (5 апреля 2002 г.).
14. Уткин А.И. Доктрина Буша: концепция, разделившая Америку // Россия в глобальной политике. 2005. № 4. С. 29–42.
15. Фукуяма Ф. Америка на распутье. Демократия, власть и неоконсервативное наследие. М., 2007. – 282 с.
16. Фукуяма Ф. Конец истории и последний человек. М., 2010. – 588 с.



Ульянцев Владимир Игоревич
Факультет информационных технологий и программирования
Кафедра компьютерных технологий
Email: vl_ulyantsev@gmail.com

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ О ВЫПОЛНИМОСТИ БУЛЕВОЙ ФОРМУЛЫ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ УПРАВЛЯЮЩИХ КОНЕЧНЫХ АВТОМАТОВ ПО СЦЕНАРИЯМ РАБОТЫ

В.И. Ульянов

Научный руководитель – профессор А.А. Шалыто

Введение

В последнее время для решения все большего числа задач начинает применяться автоматное программирование, в рамках которого поведение программ описывается с помощью детерминированных конечных автоматов [1].

Для многих задач автоматы удается строить эвристически, однако существуют и те, для которых это затруднительно. К задачам этого класса относятся, например, задачи об «Умном муравье» [2–4] и об управлении моделью беспилотного летательного аппарата [5].

Для построения автоматов в задачах такого типа успешно применяются генетические алгоритмы [6], в том числе на основе обучающих примеров [7]. Недостатком генетических алгоритмов является то, что время их работы весьма велико и его достаточно трудно оценить аналитически.

Целью настоящей работы является разработка метода построения управляющего конечного автомата, лишённого указанных минусов.

Постановка задачи

Управляющим конечным автоматом будем называть детерминированный конечный автомат, каждый переход которого помечен *событием*, последовательностью *выходных воздействий* и *охраняемым условием*, представляющим собой логическую формулу от *входных переменных*.

Автомат получает события от так называемых *поставщиков событий* (в их роли может выступать внешняя среда, интерфейс пользователя и т. д.) и генерирует выходные воздействия для *объекта управления*. При поступлении события автомат выполняет переход в соответствии с охраняемыми условиями и значениями входных переменных, во время которого генерируются выходные воздействия, которыми он помечен. Затем автомат принимает соответствующее данному переходу состояние. Отметим, что состояния такого автомата не делятся на допускающие и не допускающие.

Формальное определение управляющего автомата дано в [1]. Пример управляющего автомата приведен на рис. 1.

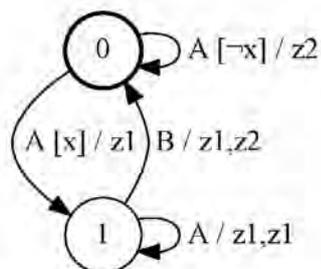


Рис. 1. Пример управляющего автомата

Для данного автомата множество входных событий равно $\{A, B\}$, охранные условия зависят от единственной логической входной переменной x , множество выходных воздействий равно $\{z1, z2\}$. Далее состояние автомата с номером 0 будем считать начальным.

В настоящей работе в качестве исходных данных для построения управляющего конечного автомата используется множество *сценариев работы*. Сценарием работы будем называть последовательность $T_1 \dots T_n$ троек $T_i = \langle e_i, f_i, A_i \rangle$, где e_i – входное событие, f_i – булева формула от входных переменных, задающая охранные условия, A_i – последовательность выходных воздействий. В дальнейшем тройки T_i будем называть *элементами сценария*.

Будем говорить, что автомат, находясь в состоянии *state*, *удовлетворяет элементу сценария* T_i , если из *state* исходит переход, помеченный событием e_i , последовательностью выходных воздействий A_i и охранным условием, тождественно равным f_i как булева формула. Автомат *удовлетворяет сценарию работы* $T_1 \dots T_n$, если он удовлетворяет каждому элементу данного сценария, находясь при этом в состояниях пути, образованного соответствующими переходами.

В работе [8] разработан метод построения автомата-распознавателя по заданному набору слов. Данный метод основан на сведении поставленной задачи к задаче о выполнимости булевой формулы (boolean satisfiability problem, SAT) – по набору слов строится логическая формула. Выполняющая подстановка для нее ищется с помощью сторонней программы. Затем, на основании полученных значений переменных логической формулы строится искомый автомат-распознаватель. Результаты вычислительных экспериментов показывают более высокую скорость работы этого метода по сравнению с методами, основанными на объединении состояний [9, 10].

В настоящей работе решается задача построения управляющего конечного автомата с заданным числом состояний S по заданному множеству сценариев работы S_c , которым автомат должен удовлетворять.

Этапы предлагаемого метода

Построение управляющего автомата осуществляется в пять этапов.

1. Построение дерева сценариев.
2. Построение графа совместимости вершин дерева сценариев.
3. Построение булевой формулы в конъюнктивной нормальной форме (КНФ-формула), задающей требования к раскраске построенного графа и выражающей непротиворечивость системы переходов результирующего автомата.
4. Запуск сторонней программы, решающей задачу о выполнимости булевой КНФ-формулы.
5. Построение автомата по найденному выполняющему набору значений переменных.

Построение дерева сценариев

Деревом сценариев назовем дерево, каждый переход которого помечен событием, булевой формулой и последовательностью выходных воздействий. Опишем алгоритм построения дерева сценариев по заданному множеству сценариев S_c .

Изначально дерево сценариев состоит из единственной вершины – корня дерева. Затем по очереди добавим в дерево все сценарии работы из S_c .

Для каждого из сценариев будем добавлять его элементы в дерево в порядке возрастания их номеров начиная с первого. При этом будем хранить указатель на текущую вершину дерева v и номер i первого необработанного элемента сценария.

В начале процесса добавления v указывает на корень дерева сценариев, а $i = 1$. На каждом шаге проверяется существование исходящего из вершины v ребра, помеченного событием e_i и логической формулой, совпадающей с f_i как булевой функции. Если такое ребро не существует, то создается новая вершина дерева u , и в нее направляется ребро, помеченное тройкой $\langle e_i, f_i, A_i \rangle$. После этого u становится текущей вершиной, а значение i увеличивается на единицу.

Если такое ребро существует, то производится сравнение последовательности A_i и последовательности выходных воздействий A' , которой помечено рассматриваемое ребро. Если $A_i = A'$, то текущей становится вершина, в которую ведет рассматриваемое ребро дерева, а значение i увеличивается на единицу.

Если же указанные последовательности не совпадают, то заданное множество сценариев S_c является противоречивым, поэтому работа алгоритма прерывается, и пользователю выводится соответствующее сообщение.

После завершения добавления всех сценариев в дерево производится проверка охранных условий. Для каждой вершины перебираются все пары исходящих из нее ребер. Если существует такая пара ребер, что они помечены одним и тем же событием, а их охранные условия имеют общий выполняющий набор значений входных переменных, то множество сценариев предполагает недетерминированное поведение. Поэтому работа алгоритма прерывается, и пользователю выводится соответствующее сообщение.

На рис. 2 приведен пример дерева сценариев. Сценариям данного дерева удовлетворяет автомат с рис. 1.

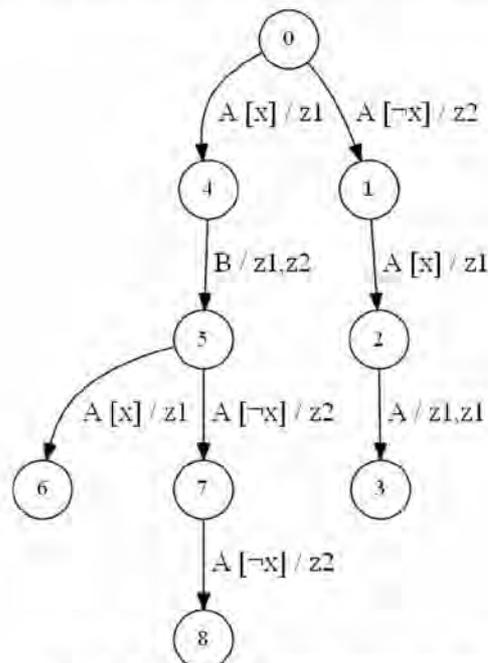


Рис. 2. Пример дерева сценариев

Построение графа совместимости вершин дерева сценариев

Для построения управляющего автомата необходимо «раскрасить» вершины дерева сценариев в заданное число цветов (равное числу состояний, которое выбирается в качестве одного из параметров алгоритма). При этом вершины одного цвета будут объединены в одно состояние результирующего автомата, а множество исходящих из состояния переходов будет строиться из объединения множеств ребер исходящих из вершин заданного цвета.

Для установления ограничений на раскраску построим так называемый *граф совместимости* вершин дерева сценариев. Множество вершин этого графа совпадает

с множеством вершин дерева сценариев, поэтому в дальнейшем вершины графа и дерева различаться не будут. Ребра графа определяются следующим образом.

Вершины графа совместимости u и v соединены ребром (далее такие вершины будем называть *несовместимыми*), если существует последовательность пар $\langle e_1, values_1 \rangle \dots \langle e_k, values_k \rangle$ событий и наборов значений входных переменных, которая различает соответствующие вершины дерева. Будем говорить, что указанная последовательность *различает вершины* u и v , если выполняется совокупность следующих условий:

- из вершины u существует путь P_u , ребра которого помечены соответственно событиями $e_1 \dots e_k$ и такими охранными условиями $f_1 \dots f_k$, что наборы значений входных переменных $values_1 \dots values_k$ являются соответственно их выполняющими подстановками;
- аналогичный путь P_v существует из вершины v ;
- для последних ребер путей P_u и P_v верно хотя бы одно из двух условий:
 - пометки этих ребер различаются в части выходных воздействий;
 - у охранных условий этих ребер есть общий выполняющий набор значений входных переменных, но они не совпадают как булевы функции.

Опишем алгоритм построения графа совместимости. Напомним, что множество вершин этого графа совпадает с множеством вершин дерева сценариев. Основной идеей данного алгоритма является метод динамического программирования [11].

Для каждой вершины дерева сценариев v найдем все несовместимые с ней вершины. Обозначим как $S(v)$ множество вершин, несовместимых с v . Будем вычислять значения функции $S(v)$ начиная с листьев дерева сценариев. Для каждого из листьев u множество $S(u)$ пусто по определению несовместимых вершин.

Покажем, как вычислить значение $S(v)$, если оно уже вычислено для всех значений «детей» вершины v . Переберем все вершины дерева – вершина u входит в множество $S(v)$, если существует пара ребер ux (помечено событием e , формулой f_1 и последовательностью действий A_1) и vu (помечено также событием e , формулой f_2 и последовательностью действий A_2) такая, что выполняется одно из трех условий:

- формулы f_1 и f_2 имеют общий выполняющий набор значений входных переменных, но не совпадают, как булевы функции. Тогда $\langle e, values \rangle$, где как $values$ обозначена выполняющая подстановка f_1 , – последовательность, различающая u и v ;
- формулы f_1 и f_2 совпадают, как булевы функции, а последовательности A_1 и A_2 не совпадают. Тогда вершины u и v различает такая же последовательность;
- формулы f_1 и f_2 совпадают, как булевы функции, и вершина x входит во множество $S(y)$, посчитанное заранее. Тогда существует последовательность $\langle e_1, values_1 \rangle \dots \langle e_k, values_k \rangle$, различающая вершины x и y , а вершины v и u различает последовательность $\langle e, values \rangle \langle e_1, values_1 \rangle \dots \langle e_k, values_k \rangle$.

Время работы этого алгоритма составляет $O(n^2)$ (где за n обозначено число вершин в дереве сценариев), так как каждая пара ребер дерева сценариев в процессе работы алгоритма будет рассмотрена не более одного раза. При этом такое время работы достижимо, если заранее для каждой пары формул вычислено, равны ли они как булевы функции и имеют ли общий выполняющий набор значений входных переменных.

В худшем случае время работы этапа обработки формул составляет $O(2^{2m} n^2)$, где за m обозначено максимальное число входных переменных, используемых в одном охранном условии. На практике число m не превышает четырех. Пример графа совместимости приведен на рис. 3.

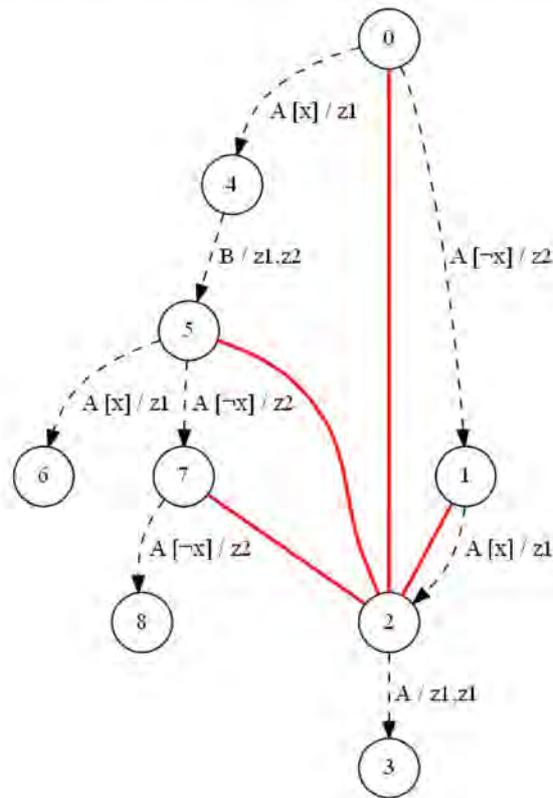


Рис. 3. Пример графа совместимости дерева сценариев.
Ребра графа совместимости выделены непунктирными линиями

Построение булевой КНФ-формулы

Опишем алгоритм построения булевой КНФ-формулы, задающей требования к раскраске построенного графа и выражающей непротиворечивость системы переходов результирующего автомата. Данное построение аналогично построению КНФ-формулы, используемой в работе [8] для построения автомата-распознавателя.

Напомним, что в настоящей работе на вход алгоритму подается число C состояний результирующего автомата.

В данной формуле будут использоваться следующие логические переменные:

- $x_{v,i}$ (для каждой вершины дерева сценариев v и цвета вершины i – числа от 0 до $C - 1$) – верно ли, что вершина v имеет цвет i . Напомним, что вершины одного цвета будут объединены в одно состояние результирующего автомата;

- $y_{a,b,e,f}$ (для каждой пары состояний результирующего автомата a и b , каждого события e , каждой формулы f , встречающейся в сценариях) – верно ли, что в результирующем автомате существует переход из состояния a в состояние b , помеченный событием e и формулой f .

КНФ-формула состоит из следующих дизъюнктов:

- $(x_{v,1} \vee \dots \vee x_{v,C})$ (для каждой вершины v дерева сценариев) – накладываем условие существования цвета вершины v ;

- $(x_{v,i} \vee \neg x_{v,j})$ (для каждой вершины v дерева сценариев, цвета i и цвета j , где $i < j$) – накладываем условие, что вершина v не покрашена одновременно в цвета i и j ;

- $(\neg x_{v,i} \vee \neg x_{u,i})$ (для каждой пары несовместимых вершин u и v дерева сценариев и цвета i) – накладываем ограничения на раскраску, задаваемые графом совместимости;

- $(\neg y_{a,b,e,f} \vee \neg y_{a,d,e,f})$ (для каждой тройки состояний результирующего автомата a , b и d ($b < d$), каждого события e , каждой формулы f) – из состояния a выходит не более одного ребра, помеченного событием e и формулой f ;

- $(y_{a,b,e,f} \vee \neg x_{v,a} \vee \neg x_{u,b})$ (для каждого ребра vu дерева сценариев) – если выполняется:

- ребро из вершины дерева v в вершину u помечено событием e и формулой f ;

- вершина v покрашена в цвет a ;

- вершина u покрашена в цвет b ;
- то в результирующем автомате существует переход из состояния a в состояние b , помеченный событием e и формулой f ;
- $(\neg y_{a,b,e,f} \vee \neg x_{v,a} \vee x_{u,b})$ (для каждого ребра vu дерева сценариев) – если выполняется:
 - ребро из вершины дерева v в вершину дерева u помечено событием e и формулой f ;
 - вершина v покрашена в цвет a ;
 - в результирующем автомате существует переход из состояния a в состояние b , помеченный событием e и формулой f ;
 - то вершина u покрашена в цвет b .

Запуск сторонней программы, решающей задачу о выполнимости булевой КНФ-формулы

Для того чтобы найти выполняющий набор для построенной КНФ-формулы, воспользуемся сторонней программой (SAT-solver), решающей задачу SAT.

В результате анализа результатов соревнования SAT-Race 2010 [12] был произведен выбор программы cryptominisat [13]. Эта программа признана победителем в указанном соревновании.

Подадим на вход выбранной программе построенную КНФ-формулу, записанную в формате DIAMAX (<http://www.satlib.org/ubcsat/satformat.pdf>). Если программа не обнаружила выполняющий набор значений переменных, то будем считать, что по данному набору сценариев невозможно построить управляющий автомат с заданным числом состояний.

Если же программа обнаружила выполняющий набор, то построим искомым автомат. Для этого на основании полученных значений переменных $x_{v,i}$ определим цвет каждой вершины дерева сценариев. На рис. 4 приведен пример раскраски дерева сценариев, рассмотренного на рис. 2.

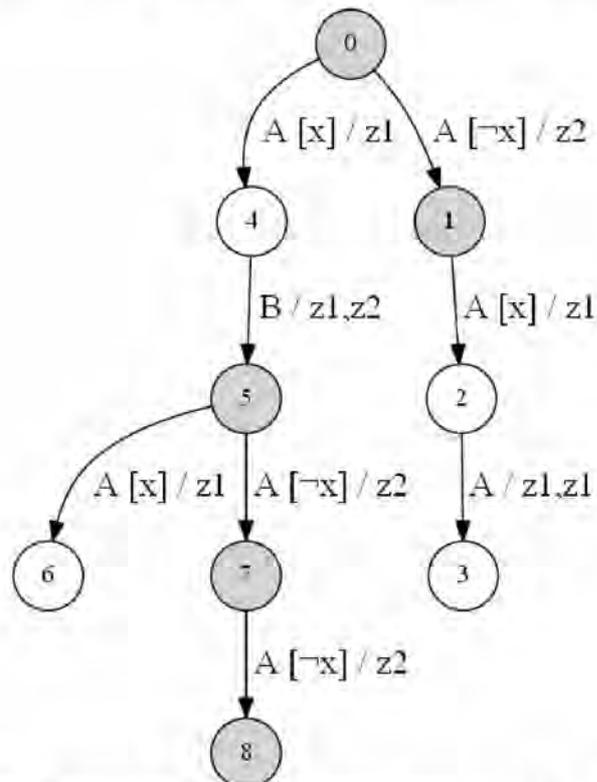


Рис. 4. Пример раскраски дерева сценариев в два цвета

После этого объединим все вершины одного цвета в одно состояние автомата, а начальным положим состояние, соответствующее цвету корня дерева сценариев. Множество исходящих из состояния переходов построим из объединения множеств ребер, инцидентных вершинам заданного цвета.

Например, после объединения вершин дерева, приведенного на рис. 4 получим автомат, изображенный на рис. 5. Заметим, что данный автомат изоморфен автомату, рассмотренному на рис. 1. Отметим, что не исключено существование нескольких автоматов, удовлетворяющих сценариям множества Sc .

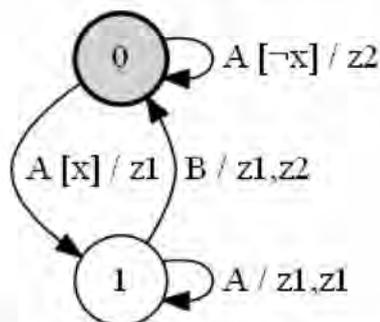


Рис. 5. Автомат, полученный после объединения вершин дерева

Экспериментальное исследование

Экспериментальное исследование проводилось на примере решения задачи построения автомата управления часами с будильником [1]. Было задано 38 сценариев, аналогичных тестам, приведенным в работе [7]. На основе этих сценариев был построен автомат, изоморфный автомату, построенному вручную в работе [1]. Его построение заняло менее секунды работы персонального компьютера с процессором Intel Core 2 Quad Q9400, что позволяет говорить о достаточно высокой производительности разработанного метода.

Заключение

В настоящей работе предложен метод построения управляющих конечных автоматов по сценариям работы. Этот метод основан на сведении указанной задачи к задаче о выполнимости булевой формулы. Работоспособность метода проверена на задаче построения автомата управления часами с будильником. На этой задаче соответствующий управляющий автомат был построен корректно, а время работы алгоритма составляло менее секунды работы персонального компьютера с процессором Intel Core 2 Quad Q9400.

В сферу возможного использования результатов проекта входят системы управления встраиваемых систем и области с повышенными требованиями к качеству программного обеспечения, такие как авиационная промышленность, медицина, телекоммуникации.

Публикации

1. *Ulyantsev V., Tsarev F.* Extended Finite-State Machine Induction using SAT-Solver // Proceedings of the 14th IFAC Symposium “Information Control Problems in Manufacturing – INCOM’12”. Bucharest, 2012. P. 512–517.
2. *Ульянцев В.И., Царев Ф.Н.* Применение методов решения задачи о выполнимости булевой формулы для построения управляющих конечных автоматов по сценариям работы // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2012. №1 (77). С. 96–100.
3. *Ulyantsev V., Tsarev F.* Extended Finite-State Machine Induction using SAT-Solver // Proceedings of the 10th International Conference on Machine Learning and Applications. Vol. 2. Honolulu, 2011. P. 346–349.

Литература

1. *Поликарпова Н.И., Шальто А.А.* Автоматное программирование. СПб., 2011. – 176 с.
2. *Angeline P.J., Pollack J.* Evolutionary Module Acquisition // Proceedings of the Second Annual Conference on Evolutionary Programming. La Jolla, 1993. P. 154–163.
3. *Jefferson D., Collins R., Cooper C. et al.* The Genesys System: Evolution as a Theme in Artificial Life. Los Angeles, CA, 1992: <http://www.cs.ucla.edu/~dyer/Papers/AlifeTracker/Alife91Jefferson.html>.

4. *Chambers L.* Practical Handbook of Genetic Algorithms. Vol. III. Complex Coding Systems. Boca Raton, FL, 1999. – 592 p.
5. *Царев Ф.Н., Шальто А.А.* Гибридное управление беспилотными летательными объектами на основе автоматного программирования // I Российская мультиконференция по проблемам управления: Сб. докладов четвертой научной конференции «Управление и информационные технологии». СПб., 2006. С. 138–144.
6. *Гладков Л.А., Курейчик В.В., Курейчик В.М.* Генетические алгоритмы. М., 2006. – 368 с.
7. *Царев Ф.Н.* Метод построения управляющих конечных автоматов на основе тестовых примеров с помощью генетического программирования // Информационно-управляющие системы. 2010. № 5. С. 31–36.
8. *Heule M., Verwer S.* Exact DFA Identification Using SAT Solvers // Grammatical Inference: Theoretical Results and Applications: 10th International Colloquium (ICGI 2010). Valencia, 2010. P. 66–79.
9. *Oncina J., Garcia P.* Inferring regular languages in polynomial update time // Pattern Recognition and Image Analysis. Series in Machine Perception and Artificial Intelligence. 1992. Vol. 1. P. 49–61.
10. *Oliveira A.L., Marques-Silva J.P.* Efficient search techniques for the inference of minimum sized finite state machines // Proceeding of 5th Symposium on String Processing and Information Retrieval. Santa Cruz de La Sierra, 1998. P. 81–89.
11. *Кормен Т., Лейзерсон Ч., Ривест Р., Штайн К.* Алгоритмы: построение и анализ. М., 2010. – 1296 с.
12. Presentation of SAT-Race results at the SAT'10 conference: <http://baldur.iti.uka.de/sat-race-2010/downloads/SAT-Race-2010-Presentation.pdf>.
13. *Soos M.* CryptoMiniSat: <http://www.msoos.org/cryptominisat2>.



Щербин Борис Олегович
Факультет точной механики и технологий
Кафедра нанотехнологий и материалов
Email: Esenin@nxt.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК НАНООБЪЕКТОВ

Б.О. Щербин

Научный руководитель – старший научный сотрудник А.В. Анкудинов

Информация о механических характеристиках микро- и нанообъектов позволяет создавать на их основе композиты с заранее заданными свойствами [1]. Для исследования механических характеристик нанообъектов можно визуализировать их тепловые или вынужденные колебания с помощью электронного микроскопа (ЭМ) [2]. Однако такие методы обладают большой погрешностью. При помощи атомно-силового микроскопа (АСМ) можно проводить наноиdentацию [3], которая при использовании стандартного зонда АСМ обладает нелинейной силовой зависимостью в связи с особенностью конструкции зонда. При наноиdentации он изгибается, что вызывает изменение направления действия силы кончик зонда – образец. Возникают касательные внутренние напряжения, чем и обуславливается нелинейность. На точность результатов так же влияет эффект «плуга» заключающийся в смещении кончика зонда [4].

При использовании метода подвешенного нанообъекта можно добиться линеализации силовой зависимости. Подвешенный объект при этом всегда деформируется нормально

к острию зонда, а касательные внутренние напряжения отсутствуют [5]. Используя специальный алгоритм можно избежать возникновения эффекта «плуга», что обеспечит проведение исследования механических характеристик нанобъектов с хорошей точностью, а также исключит соскальзывание острия зонда при использовании метода подвешенного нанобъекта.

В качестве объекта исследования данной работы использованы гидросиликатные наносвитки [6]. Они являются перспективным материалом-наполнителем для нанокompозитов, однако, из-за недостатка экспериментальных данных, создание композитов на их основе с заранее заданными свойствами затруднено.

Целью данной работы является исследование механических характеристик гидросиликатных наносвитков (ГСН). Для достижения поставленной цели и проведения точных наномеханических экспериментов реализован алгоритм измерения жесткости нанобъектов, исключая эффект «плуга». Измерения выполнялись в стандартных условиях и в условиях умеренного вакуума, что позволило изучить влияние окружающей атмосферы на механические характеристики ГСН. Кроме того было проведено исследование силового взаимодействия зонд-образец в полуконтактном режиме работы АСМ.

Для исследований механических характеристик ГСН методом подвешенного нанобъекта были использованы специальные образцы, представляющие собой пористую лавсановую мембрану с характерным диаметром пор 0,6 мкм и среднеквадратичной шероховатостью R_q 4 нм, измеренными экспериментально, с нанесенными на ее поверхность наносвитками. Нанобъекты наносились на поверхность мембраны капельной методикой. Некоторые из них перекрывали поры и образовывали подвешенные нанобъекты. Для приготовления правильных образцов были проведены специальные расчеты концентрации исходного коллоидного раствора наносвитков. Перед нанесением коллоидный раствор подвергался ультразвуковой обработке для разделения образовавшихся агломератов наносвитков. Методом АСМ была измерена жесткость провисающих частей наносвитков, методом конечных элементов были рассчитаны модули Юнга наносвитков асбеста. Жесткость зонда измерялась методом Садера на расстоянии 2 мм от образца.

Полученные в результате исследования средние значения модуля Юнга натуральных индивидуальных ГСН составили 102 ± 60 ГПа для натуральных образцов и 365 ± 189 ГПа для синтезированных свитков соответственно. Полученное для натуральных наносвитков значение хорошо согласуется со значениями для макрообразцов натурального минерала хризотил асбеста. Среднее значение модуля Юнга наносвитков синтезированного гидросиликата магния заметно выше чем у натуральных аналогов. Возможно это происходит за счет возникновения дополнительных связей между слоями синтезированных ГСН и их большей степени дефектности. Большой разброс значений модуля Юнга наносвитков, вероятно, определяется различной плотностью их дефектов. Известно влияние этого фактора на механические свойства многостенных углеродных нанотрубок, подвергнутых воздействию высокоэнергетического электронного пучка [7].

В центре наносвитка имеется наноканал. Жесткость наносвитков может меняться в зависимости от среды за счет капиллярных сил, созданных жидкостью в его капиллярном канале. В результате эксперимента для свитков было выявлено повышение жесткости при переходе из воздушной атмосферы в вакуум. Это можно объяснить исчезновением (испарением) несвязанной воды из внутреннего канала наносвитка. При переходе из вакуума в спиртовую и толуоловую атмосферы жесткость наносвитков не проявила определенной тенденции, что показывает избирательную проницаемость наноканалов ГСН [8].

Измерение сил взаимодействия зонд-образец в полуконтактном режиме работы АСМ проводилось на специальных наноустройствах, представляющих собой провисающие над порой наносвитки с известной жесткостью. Была разработана специальная методика определения изменения силы при изменении амплитуды колебаний зонда. Среднее приращение при изменении амплитуды на пятьдесят нанометров составило 17 нН. Среднее значение отношения пиковой и средней сил составило 10, что хорошо согласуется с теоретическими данными.

Для исключения эффекта «плуга», заключающегося в возникновении паразитного смещения кончика зонда в горизонтальном направлении при проведении силовой спектроскопии, была написана программа, полностью заменяющая собой стандартный алгоритм проведения силовой спектроскопии АСМ ИНТЕГРА компании НТ-МДТ. В программе реализована корректировка положения сканера с помощью обратной связи по сенсорам. С помощью наноидентационных экспериментов было подтверждено исключение эффекта плуга при использовании созданной программы.

В результате проведенной работы реализован скрипт, позволяющий проводить точные наноидентационные эксперименты при помощи АСМ, определен модуль Юнга натуральных и синтезированных ГСН, проверен вклад нанокапиллярного эффекта в жесткость ГСН, исследованы специальные образцы, предназначенные для калибровки импульсной силы полуконтактного режима работы АСМ. Полученные экспериментальные результаты хорошо согласуются с представленными в заявке.

Разработанная программа позволяет проводить наноидентационные испытания нанобъектов с помощью АСМ, не используя специальные приставки, что делает данный вид исследования доступнее. Знание механических характеристик наносвитков гидросиликата магния открывает возможность предварительной оценки свойств нанокompозитов на их основе. Количественная информация о силовом взаимодействии зонд-образец и разработанная методика могут быть использованы для оптимизации существующих методик исследования механических характеристик мягких микро- и нанобъектов, в том числе живых клеток.

Публикации

1. Щербин Б.О. Нятиев И.А. и др. Механические свойства наносвитков на основе $Mg_3Si_2O_5(OH)_4$ [Текст] // Наносистемы: физика, химия, математика. – 2011. – № 2 (2). С. 48–57.
2. Щербин Б.О. Исследование механических характеристик наносвитков гидросиликата магния [Текст] // Сборник тезисов докладов конгресса молодых ученых. – 2012. № 2. С. 347–348.

Литература

1. Елецкий А.В. Механические свойства углеродных наноструктур и материалов на их основе [Текст] // Успехи физических наук. – 2007. – Т. 177. № 3. – С. 233–247.
2. Heer D. Electrostatic Deflections and Electromechanical Resonances of Carbon Nanotubes [Текст] // Science. – 1999. – P. 283.
3. Yu M.-F., Kowalewski T., Ruoff R.S. Investigation of the Radial Deformability of Individual Carbon Nanotubes under Controlled Indentation Force [Текст] // Physical Review Letters. – 2000. – P. 85.
4. Ганзий Д.А. Разработка метода измерения толщины проводящих пленок с помощью наноидентирования [Текст] // Магистер. дисс. Город Долгопрудный, 2010 С. 57
5. Salvétat J.-P., Bonard J.M., Thomson N.H., Kulik A.J., Forró L., Benoit W., Zuppiroli L. Mechanical Properties of Carbon Nanotubes [Текст] // Applied Physics. – 1999. – P. 69, 255.
6. Tenne R. Inorganic Nanotubes and Fullerene-like Nanoparticles [Текст] // Nature nanotechnology. – 2006, november. – Vol 1. – P. 103–111.
7. Kis A. Mechanical Properties of Mesoscopic Objects [Текст]. Thesis for the degree of Doctor of Science. Ecole Polytechnique Federale de Lausanne. – 2003. – 166 p.
8. Nair R.R. and all. Unimpeded Permeation of Water Through Helium-Leak – Tight Graphene-Based Membranes [Текст] // Science. – 2012. 27 January. – Vol. 335. – P. 442–444.



Ясенко Егор Андреевич
Факультет оптико-информационных систем и технологий
Кафедра экологического приборостроения и мониторинга
Email: geo-yashenko@mail.ru

РАЗРАБОТКА СТАНДАРТНОГО ОБРАЗЦА ПОЛИХЛОРИРОВАННЫХ ДИБЕНЗО-*n*-ДИОКСИНОВ И ДИБЕНЗОФУРАНОВ В СВИНОМ ЖИРЕ

Е.А. Ясенко

Научный руководитель – профессор Л.А. Конопелько

Введение

Мониторинг стойких органических загрязнителей (СОЗ) в объектах окружающей среды является составляющей частью национальной системы химической безопасности Российской Федерации [1]. К СОЗ прежде всего относятся полихлорированные дибензо-*n*-диоксины (ПХДД) и дибензофураны (ПХДФ), являющиеся побочными продуктами многих производств. Наибольшую опасность представляют 2, 3, 7, 8-замещенные конгенеры ПХДД и ПХДФ, среди которых наиболее токсичным является 2, 3, 7, 8-тетрахлордибензо-*n*-диоксин (2, 3, 7, 8-ТХДД) [2, 3].

Высокая токсичность, особая генетическая опасность, влияние на иммунную систему даже малых концентраций (на уровне ppt) ПХДД/ПХДФ обуславливают необходимость разработки высокочувствительных и селективных методов их измерения в сложных природных объектах: в воде, почве и особенно в биологических объектах с высоким содержанием жира [4–9]. Получение правильных результатов анализа этих химических соединений возможно при использовании комбинированных средств измерения. Основным является газовая хроматография с масс-спектрометрическим детектированием (ГХ-МС), а также эффективного метода подготовки пробы к анализу [10–21].

Необходимым условием применения ГХ-МС методов измерения, разрабатываемых в экологических лабораториях России и за рубежом, является обеспечение единства измерений. Для этого применяют стандартные образцы (СО) ПХДД/ПХДФ в сложных природных матрицах (мясо, пепел, зола, сточные воды, городская пыль).

Их используют для контроля качества измерений и валидации методик анализа, так как они полностью соответствуют объектам окружающей среды. В развитых странах Европы, Америки, Азии разрабатываются и создаются подобные образцы либо на основе имеющихся загрязненных объектов, либо искусственным путем – посредством внесения в природную матрицу интересующее соединение [22–40]. Отсутствие подобных СО природных объектов российского производства послужило основанием для разработки СО полихлорированных дибензо-*n*-диоксинов и дибензофуранов в свином жире.

В качестве основного метода для решения поставленной цели использовалась газовая хроматография с масс-спектрометрическим детектированием (ГХ-МС).

Для выполнения измерений применялся прибор – газовый хроматограф Agilent Technology 7890A (хроматографическая колонка DB-DIOXIN 60 м, 0,25 мм, 0,15 мкм), соединенный с масс-спектрометром Agilent Technology 5975С. Он позволяет регистрировать отдельные ионы с заданными массами в диапазоне 50–600 а. е. м. при ионизации пробы в режиме «электронного удара» с детектированием отрицательно заряженных ионов и компьютерной системы обработки данных. Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

1. Разработана и подготовлена для аттестации методика измерений (МИ) изомерспецифического определения 17 токсичных конгенов полихлорированных дибензо-*n*-

диоксинов и дибензофуранов (аналитов) в жиросодержащих матрицах со следующими характеристиками: предел обнаружения 0,5 нг/кг (Табл. 1).

Таблица 1

Метрологические характеристики методики измерений

Диапазон измерений, пг/г	Расширенная неопределенность, вычисленная с применением коэффициента охвата $k = 2$, $\pm \frac{U(y)}{y}, \%$	Абсолютное допустимое расхождение результатов двух параллельных определений (повторяемость) R , %, при $P = 0,95$
от 0,5 до 5 включительно	64	30
от 5 до 25 включительно	28	15
от 25 до 1500 включительно	16	10

2. Приготовлен материал для сертификации СО ПХДД/ПХДФ в свином жире в количестве 290 флаконов по 5 мл.

3. В соответствии с разработанной методикой выполнены измерения для указанного материала (они необходимы для оценки содержания индивидуальных токсичных конгенов ПХДД/ПХДФ и набора статистического материала для метрологической аттестации разработанной МИ).

4. В соответствии с требованиями ГОСТ 8.315-97 выполнена оценка однородности приготовленного образца (Табл. 2). Полученные результаты позволяют говорить о том, что приготовленная опытная партия материала является однородной, так как разброс результатов измерений разных аликвот материала (σ_H) не превышает случайной составляющей погрешности анализа (СКО) (т. е. $\sigma_H < \text{СКО}$)

Таблица 2

Результаты оценки неоднородности СО σ_H

Конгенер	Значение нг/кг	σ_H	$\sigma_H, \%$	СКО	СКО, %
2, 3, 7, 8-ТХДФ	2	0,27	17,9	0,4	24
2, 3, 4, 7, 8-ПХДФ	1282	31,17	2,4	56,8	4
1, 2, 3, 4, 7, 8-ГсХДФ	107	5,46	5,1	11,5	11
1, 2, 3, 6, 7, 8-ГсХДФ	63	3,36	5,3	8,8	14
1, 2, 3, 7, 8, 9-ГсХДФ	64	3,09	4,9	7,3	11
1, 2, 3, 4, 6, 7, 8-ГпХДФ	27	0,49	1,9	1,4	5
1, 2, 3, 4, 7, 8, 9-ГпХДФ	4	0,48	12,8	0,6	15
Сумма	1502	21,82	1,5	55,7	4

Заключение

Подобных проектов в России прежде не было, несмотря на то, что стандартные образцы являются неотъемлемой составляющей частью системы контроля качества продуктов питания. Созданный нами стандартный образец ПХДД/ПХДФ можно будет применить в межлабораторном контроле, в международных сличениях, что повысит статус Российской метрологии.

Публикации

1. Основные свойства и принципы нормирования стойких органических загрязнителей // Сб. тезисов докладов конференции молодых ученых (12–15 апреля 2011 г.). Вып. 3. СПб., 2011. С. 59–60.
2. Создание стандартного образца полихлорированных дибензо-*n*-диоксинов и дибензофуранов в свином жире // Сб. тезисов VI Всероссийской конференции молодых ученых, аспирантов и студентов с международным участием «Менделеев-2012». СПб., С. 117–118.
3. Разработка стандартного образца полихлорированных дибензо-*n*-диоксинов и дибензофуранов в свином жире // Сб. тезисов I Всероссийского конгресса молодых ученых. СПб., 2012. С. 40–42.

Литература

1. Федоров Л.А. Диоксины как экологическая опасность: ретроспектива и перспективы. М., 1993. – 266 с.
2. Исидоров В.А. Введение в химическую экотоксикологию: Учеб. пособие. СПб., 1999. – 144 с.
3. International Intercalibration studies: A global QA / QC tool for the analysis of POPs under the Stockholm Convention. Geneva, 2005. – 46 p.
4. Диоксины. Озеро Байкал. Регионы России / Под ред. Ю.М. Арского (Супертоксиканты XXI века. Информационный выпуск № 6). М., 2001. – 213 с.
5. Тарасова Е.Н., Мамонов А.А. и др. Диоксины в целлюлозно-бумажной промышленности Байкальского региона // Тезисы докладов Всероссийской конференции с международным участием «Диоксины и родственные соединения: экологические проблемы, методы контроля». Уфа, 2001. С. XX–XX.
6. Goodman J.E., Kerper L.E., Boyce C.P. et al. Weight-of-evidence analysis of human exposures to dioxins and dioxin-like compounds and associations with thyroid hormone levels during early development // Regulatory Toxicology and Pharmacology. 2010. Vol. 58. P. 79–99.
7. Kogevinas M. Epidemiological approaches in the investigation of environmental causes of cancer: the case of dioxins and water disinfection by-products // Environmental Health. 2011. Vol. 10. № 1. P. 1–10.
8. Miyashita C., Sasaki S., Saijo Y. et al. Effects of prenatal exposure to dioxin-like compounds on allergies and infections during infancy // Environmental Research. 2011. Vol. 111. P. 551–558.
9. Sun S.J., Zhao J.H., Liu H.J., Liu D.W. et al. Dioxin concentration in human milk in Hebei province in China and Tokyo, Japan: Potential dietary risk factors and determination of possible sources // Chemosphere. 2006. Vol. 62. P. 1879–1888.
10. Maruyama W., Yoshida K., Tanaka T., Nakanishi J. Simulation of dioxin accumulation in human tissues and analysis of reproductive risk // Chemosphere. 2003. Vol. 53. P. 301–313.
11. Nagayama J., Tsuji H., Iida T. et al. Immunologic effects of perinatal exposure to dioxins, PCBs and organochlorine pesticides in Japanese infants // Chemosphere. 2007. Vol. 67. P. 393–398.
12. Единые санитарно-эпидемиологические и гигиенические требования к товарам, подлежащим санитарно-эпидемиологическому надзору (контролю): http://www.tsouz.ru/KTS/KTS17/Pages/P2_299.aspx
13. Masunaga S., Yao Y., Ogura I. et al. Source and behavior analyses of dioxins based on congener-specific information and their application to Tokyo Bay basin // Chemosphere. 2003. Vol. 53. P. 315–324.
14. Sakurai T., Suzuki N., Morita M. Examination of dioxin fluxes recorded in dated aquatic-sediment cores in the Kanto region of Japan using multivariate data analysis // Chemosphere. 2002. Vol. 46. P. 1359–1365.
15. Raun L.H., Correa O., Rifai H. et al. Statistical investigation of polychlorinated dibenzo-*p*-dioxins and dibenzofurans in the ambient air of Houston, Texas // Chemosphere. 2005. Vol. 60. P. 973–989.
16. Kim M., Kim S., Yun S. et al. Comparison of seven indicator PCBs and three coplanar PCBs in beef, pork, and chicken fat // Chemosphere. 2004. Vol. 54. P. 1533–1538.

17. *Humblet O., Sergeev O., Altshul L. et al.* Temporal trends in serum concentrations of polychlorinated dioxins, furans, and PCBs among adult women living in Chapaevsk, Russia: A longitudinal study from 2000 to 2009 // *Environmental Health*. 2011. Vol. 10. P. 1–6.
18. Method 1613. Tetra- through Octa-Chlorinated Dioxins and Furans by Isotope Dilution HRGC / HRMS. 1994:
http://water.epa.gov/scitech/methods/cwa/organics/dioxins/upload/2007_07_10_methods_method_dioxins_1613.pdf
19. Method 8280A. The analysis of polychlorinated dibenzo-*p*-dioxines and polychlorinated dibenzofurans by high resolution gas chromatography / low resolution mass spectrometry (HRGC / LRMS). U.S. EPA Methods, 1996. – 55 p.:
http://www.well-labs.com/docs/epa%208280a_dec1996.pdf.
20. Методические указания по отбору проб мяса, мясопродуктов, рыбы, рыбопродуктов, кормов и других жиросодержащих продуктов для определения полихлорированных дибензо-*p*-диоксинов и дибензофуранов методом хромато-масс-спектрометрии. М., 1999:
<http://www.dioxin.ru/doc/otbor99.htm>
21. *Dolezal I.S., Segebarth K.P., Zennegg M., Wunderli S.* Comparison between supercritical fluid extraction (SFE) using carbon dioxide / acetone and conventional soxhlet extraction with toluene for the subsequent determination of PCDD / PCDF in a single electrofilter ash sample // *Chemosphere*. 1995. Vol. 31. № 9. P. 4013–4024.
22. *Mascini M., Macagnano A., Scortichini G. et al.* Biomimetic sensors for dioxins detection in food samples // *Sensors and Actuators B: Chemical*. 2005. Vol. 111–112. P. 376–384.
23. *Hui L.L., Hedley A.J., Nelson E.A.S. et al.* Agreement between breast milk dioxin levels by CALUX bioassay and chemical analysis in a population survey in Hong Kong // *Chemosphere*. 2007. Vol. 69. P. 1287–1294.
24. *Hasegawa J., Guruge K.S., Seike N. et al.* Determination of PCDD / Fs and dioxin-like PCBs in fish oils for feed ingredients by congener-specific chemical analysis and CALUX bioassay // *Chemosphere*. 2007. Vol. 69. P. 1188–1194.
25. *Shyu T.S., Lee Y.H., Lee M.L. et al.* Determination of PCDDS / DFS and dioxin-like PCBs in egg and fish feed samples in Taiwan by the DR CALUX bioassay, Taiwan Agricultural Chemicals and Toxic Substances Research Institute, Council of Agriculture, Taichung County 41358: (<http://public.tactri.gov.tw/pdf/2009/E8/B7/A8/E7/B3/BB/determination/20of/20pcdds/20dfs/20and/20dioxin.pdf>)
26. *Wiberg K., Sporning S., Haglund P., Björklund E.* Selective pressurized liquid extraction of polychlorinated dibenzo-*p*-dioxins, dibenzofurans and dioxin-like polychlorinated biphenyls from food and feed samples // *Journal of Chromatography A*. 2007. Vol. 1138. P. 55–64.
27. *Roy S., Mysior P., Brzezinski R.* Comparison of dioxin and furan TEQ determination in contaminated soil using chemical, micro-EROD, and immunoassay analysis // *Chemosphere*. 2002. Vol. 48. P. 833–842.
28. *Hayward D.G., Hooper K., Andrzejewski D.* Tandem-in-time Mass Spectrometry Method for the Sub-parts-per-trillion Determination of 2,3,7,8-chlorine Substituted Dibenzo-*p*-dioxins and -furans in High Fat Foods // *Analytical Chemistry*. 1999. Vol. 71. P. 212–220.
29. *Aozasa O., Mochizuki A., Ohta S. et al.* Optimization of the purification method for dioxin analysis in human serum and temporal changes in background dioxin levels in the general population // *Chemosphere*. 2003. Vol. 50. P. 1157–1165.
30. *Van Beuzekom A.C., Hijman W.C., Berkhoff C.J. et al.* Fast sample preparation involving MASE and coupled column normal phase liquid chromatography for the rapid trace analysis of dioxins in air-dust samples from fire catastrophe emissions // *Talanta*. 2004. Vol. 63. P. 1183–1191.
31. *McHale C.M., Zhang L., Hubbard A.E. et al.* Microarray analysis of gene expression in peripheral blood mononuclear cells from dioxin-exposed human subjects // *Toxicology*. 2007. Vol. 229. P. 101–113.
32. *Mascini M., Macagnano A., Scortichini G. et al.* Biomimetic sensors for dioxins detection in food samples // *Sensors and Actuators B: Chemical*. 2005. Vol. 111–112. P. 376–384.

33. Hoh E., Mastovska K., Lehotay S.J. Optimization of separation and detection conditions for comprehensive two-dimensional gas chromatography-time-of-flight mass spectrometry analysis of polychlorinated dibenzo-*p*-dioxins and dibenzofurans // *Journal of Chromatography A*. 2007. Vol. 1145. P. 210–221.
34. Malavia J., Abalos M., Santos F.J. et al. Analysis of polychlorinated dibenzo-*p*-dioxins, dibenzofurans and dioxin-like polychlorinated biphenyls in vegetable oil samples by gas chromatography-ion trap tandem mass spectrometry // *Journal of Chromatography A*. 2007. Vol. 1149. P. 321–332.
35. Van Bavel B. High resolution GC / MS chromatogram of 2,3,7,8-TCDD in a standard solution. Örebro University, Sweden, 2005. – 46 p.
36. Pirard C., De Pauw E., Focant J.F. New strategy for comprehensive analysis of polybrominated diphenyl ethers, polychlorinated dibenzo-*p*-dioxins, polychlorinated dibenzofurans and polychlorinated biphenyls by gas chromatography coupled with mass spectrometry // *Journal of Chromatography A*. 2003. Vol. 998. P. 169–181.
37. Nakamura T., Nakai K., Matsumura T. et al. Determination of dioxins and polychlorinated biphenyls in breast milk, maternal blood and cord blood from residents of Tohoku, Japan // *Science of total environment*. 2008. Vol. 394. P. 39–51.
38. Hagberg J. Analysis of brominated dioxins and furans by high resolution gas chromatography / high resolution mass spectrometry // *Journal of Chromatography A*. 2009. Vol. 1216. P. 376–384.
39. Todaka T., Hirakawa H., Hori T. et al. Improvement in dioxin analysis of human blood and their concentrations in blood of Yusho patients // *Journal of Dermatological Science Supplement*. 2005. Vol. 1. № 1. P. 21–28.
40. Behnisch P.A., Hosoe K., Sakai S. Combinatorial bio / chemical analysis of dioxin and dioxin-like compounds in waste recycling, feed / food, humans / wildlife and the environment // *Environment International*. 2001. Vol. 27. P. 495–519.
41. Kitamura K., Takazawa Y., Hashimoto S. et al. Effective extraction method for dioxin analysis from lipid-rich biological matrices using a combination of pressurized liquid extraction and dimethyl sulfoxide / acetonitrile / hexane partitioning // *Analytica Chimica Acta*. 2004. Vol. 512. № 1. P. 27–37.
42. Hoh E., Lehotay S.J., Mastovska K., Huwe J.K. Evaluation of automated direct sample introduction with comprehensive two-dimensional gas chromatography / time-of-flight mass spectrometry for the screening analysis of dioxins in fish oil // *Journal of Chromatography A*. 2008. Vol. 1201. P. 69–77.
43. Михеева А.Ю. Унификация пробоподготовки на основе колоночной хроматографии при определении стойких органических загрязнителей: Автореф. дис. ... канд. хим. наук. М., 2009. – 23 с.
44. Р 50.2.056-2007. Рекомендации по метрологии. Государственная система обеспечения единства измерений. Образцы материалов и веществ стандартные. Термины и определения: <http://base.consultant.ru/cons/cgi/online.cgi?req=doc;base=EXP;n=449192>.
45. Родионов О.В., Бокач Н.А., Булатов А.В. Основы метрологии физико-химических измерений и химического анализа: Учебно-методическое пособие. СПб., 2010. – С. 71-80.
46. Namieśnik J., Zygmunt B. Role of reference materials in analysis of environmental pollutants // *Science of the Total Environment*. 1999. Vol. 228. P. 243–257.
47. РМГ 52-2002. Государственная система обеспечения единства измерений. Общие методические рекомендации по применению положений ГОСТ 8.315-97 при разработке и применении стандартных образцов: <http://kropus.com/images/content/docs/52-2002.pdf>.
48. Maier E.A., Tuinstra L.G.M. Th., Roos A.H. The certification of the contents (mass fractions) of organochlorine pesticides (HCB, β -HCH, γ -HCH, Heptachlor, γ -Chlordane α -Endosulfan, Dieldrin, Endrin *o,p'*-DDT and *p,p'*-DDE) in animal feed (Bcr information. Reference Materials). Brussel, 2007. – 60 p.
49. Voorspoels S., Ricci M., Held A. Certification of mass fractions of polychlorinated biphenyls (PCBs 28, 52, 74, 99, 101, 105, 110, 118, 138, 149, 153, 156, 177, 180, 183, 187, 194 and 196) in fish oil. Certification report. Certified Reference Material ERM-BB350. Geel, 2010. – 68 p.

50. Wells D.E., McKenzie C., Maier E.A. The certification of the contents (mass fraction) of HCB, α -HCH, β -HCH, γ -HCH, γ -Chlordane, α -Chlordane, Oxychlorane, Transnonachlor, Dieldrin, *p,p'*-DDE, *o,p'*-DDD, *p,p'*-DDD and *p,p'*-DDT in cod liver oil (Bcr information. Reference materials). Luxembourg, 1994. – 60 p.
51. Maier E.A., Schimmel H., Hirschberger J. et al. The certification of the natural contents (mass fractions) of six chlorobiphenyls (IUPAC № 52, 118, 153, 156, 170 and 180) in milk powder (Bcr information. Reference materials). Luxembourg, 1994. – 60 p.
52. Griepink B., Wells D.E., Ferreira M.F. The certification of the contents (mass fraction) of chlorobiphenyls (IUPAC № 28, 52, 101, 118, 138, 153 and 180) in two fish oils (Bcr information. Reference materials). Luxembourg, 1988. – 96 p.
53. Sejerøe-Olsen B., Dabrio Ramos M., Schimmel H. Certification of Mass Fractions of Organochlorine Pesticides in Pork Fat (HCB, α -HCH, β -HCH, γ -HCH, β -Heptachloro Epoxide, *p,p'*-DDT, *p,p'*-DDD, *p,p'*-DDE, Dieldrin and Endrin). Certification report. Certified Reference Material ERM-BB430. Geel, 2011. – 72 p.
54. Zeleny R., Schimmel H., Emteborg H., Emons H. The Certification of the Mass Fraction of Chloramphenicol in Pork Meat. Certification report. Certified Reference Material ERM-BB130. Geel, 2010. – 38 p.
55. Bester K., de Vos P., Le Guern L., Harbeck S. et al. The certification of PCBs in pork fat IRMM-444, -445 and -446. IRMM information. Reference materials. Luxembourg, 2004. – 38 p.
56. Tuinstra L.G.M. Th., Startin J.R., Maier E.A., Kramer G.N. The certification of the contents (mass fractions) of five polychlorodibenzo-*p*-dioxins (D48, D54, D66, D67, D70) and six polychlorodibenzo furans (F83, F94, F114, F118, F121, F130) in milk powder (Bcr information. Reference materials). Geel, 2007. – 51 p.
57. McLaren J. Certified reference materials for environmental measurement – think globally, act locally // IRMM 2010 Conference. Geel, 2010. – 23 p.
58. Maier E.A., Van Cleuvenbergen R., Kramer G.N. et al. BCR (non-certified) reference materials for dioxins and furans in milk powder // Fresenius Journal of Analytical Chemistry. 1995. Vol. 352. P. 179–183.
59. Certified reference materials. European commission. Joint Research Centre. IRMM. Brussel, 2012. – 101 p.
60. Poster D.L., Kucklick J.R. et al. Development of a House Dust Standard Reference Material for the Determination of Organic Contaminants // Environmental Science and Technology. 2007. Vol. 41. P. 2861–2867.
61. Van Leeuwen S.P.J., Van Cleuvenbergen R. et al. New certified and candidate certified reference materials for the analysis of PCBs, PCDD / Fs, OCPs and BFRs in the environment and food // Trends in Analytical Chemistry. 2006. Vol. 25. № 4. P. 397–409.
62. National Institute for Environmental Studies. Certified Reference Material № 24. Fly Ash II: http://www.nies.go.jp/labo/crm-e/crm_24.pdf.
63. Commission directive 2002 / 70 / EC. Establishing requirements for the determination of levels of dioxins and dioxin-like PCBs in feedingstuffs // Official Journal of the European Communities. 2002. Vol. 209. P. 15–21.
64. Miraglia M., Brera C. The Role of Reference Materials in Food Analysis // Microchimica Acta. 1996. Vol. 123. P. 33–37.
65. Pauwels J., van der Veen A., Lamberty A., Schimmel H. Evaluation of uncertainty of reference materials // Accreditation and Quality Assurance. 2000. Vol. 5. P. 95–99.
66. Linsinger T.P.J., Pauwels J., van der Veen A.M.H. et al. Homogeneity and stability of reference materials // Accreditation and Quality Assurance. 2001. Vol. 6. P. 20–25.
67. Van der Veen A.M.H., Pauwels J. Uncertainty calculations in the certification of reference materials. 1. Principles of analysis of variance // Accreditation and Quality Assurance. 2000. Vol. 5. P. 464–469.
68. Van der Veen A.M.H., Linsinger T., Pauwels J. Uncertainty calculations in the certification of reference materials. 2. Homogeneity study // Accreditation and Quality Assurance. 2001. Vol. 6. P. 26–30.

69. *Van der Veen A.M.H., Linsinger T.P.J., Lamberty A., Pauwels J.* Uncertainty calculations in the certification of reference materials. 3. Stability study // *Accreditation and Quality Assurance*. 2001. Vol. 6. P. 257–263.
70. *Bester K., de Vos P., Le Guern L., Harbeck S.* Preparation and certification of reference material on PCBs in pig fat and its applications in quality control in monitoring laboratories during the Belgian «PCB-crisis» // *Chemosphere*. 2001. Vol. 44. P. 529–537.
71. *Marsh K.N.* Role of reference materials for the realization of physicochemical properties. Past, present, and future // *Pure and Applied Chemistry*. 2000. Vol. 72. № 10. P. 1809–1818.

Сборник трудов студентов НИУ ИТМО, победителей конкурса грантов
Правительства Санкт-Петербурга / Под редакцией проф. В.О. Никифорова. –
СПб.: НИУ ИТМО, 2013. – 239 с.

СБОРНИК ТРУДОВ СТУДЕНТОВ НИУ ИТМО,
ПОБЕДИТЕЛЕЙ КОНКУРСА ГРАНТОВ
ПРАВИТЕЛЬСТВА САНКТ-ПЕТЕРБУРГА

Под редакцией проф. В.О. Никифорова

Дизайн обложки А.А. Кушнарченко

Редакторы

А.В. Бутина, И.А. Лапшина

Лицензия ИД № 00408 от 5.11.1999

Подписано в печать 05.07.2013

Заказ 3021 Тираж 100 экз.

ISBN 978-5-7577-0438-8