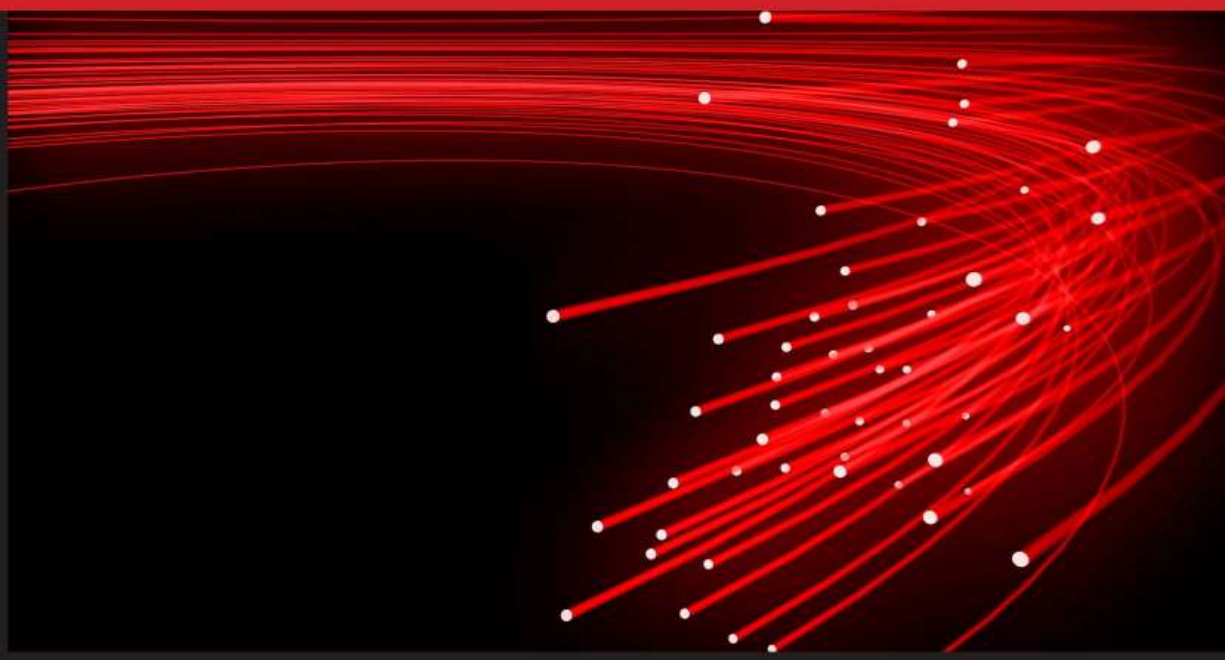
Лазеры. Измерения. Информация



Том 2, № 1 / 2022

Новороссийск
2022

Лазеры. Измерения. Информация
Научный сетевой журнал
Издаётся с марта 2021 года
Выходит 4 раза в год
ISSN 2713-0568

Том 2, № 1 (5)
Март 2022 г. - май 2022 г.

Главный редактор: В. Е. Привалов
Ответственный редактор: В. Г. Шеманин

Редакционная коллегия: А. Н. Власов, В. Н. Дёмкин, Г. С. Евтушенко, И. Г. Иванов, М. М. Кугейко, Г. П. Михайлов, Л. А. Русинов, А. Л. Соколов, А. Н. Солдатов, В. А. Степанов, А. А. Тихомиров, С. А. Филист, А. Э. Фотиади, Е. Г. Чуляева

Учредитель: ФГБОУ ВО БГТУ им. В. Г. Шухова
Издатель: Филиал БГТУ им. В. Г. Шухова в г. Новороссийске
Адрес редакции:
353919, Россия, Новороссийск, Мысхакское шоссе 75
Тел. +78617221333
https://lasers-measurement-information.ru
e-mail: editor-laser@nb-bstu.ru

Свидетельство о регистрации: серия Эл № ФС77-81070 от 02 июня 2021 г.

Опубликовано 29.12.2021

© Филиал БГТУ им. В. Г. Шухова в г. Новороссийске, 2022

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

Содержание:

НАШИ ЮБИЛЯРЫ

Привалов В. Е. (от редакции)
Юбилей Солдатова А. Н. ……. стр. 4

ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА

Привалов В. Е., Туркин В. А., Шеманин В. Г.
Лазеры и зелёная энергетика ……. стр. 5

ЛАЗЕРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

Самигуллин Р. Т., Тимченко П. Е., Тимченко Е. В., Писарева Е. В., Фролов О. О., Гнедова А. А., Власов М. Ю., Волова Л. Т.
Рамановская спектроскопия для оценки донорского ксеноматериала …… стр. 12

Тимченко Е. В., Тимченко П. Е., Волова Л. Т., Фролов О. О., Власов М. Ю., Шипко С. С.
Сравнительный спектральный анализ разной степени деминерализации биоматериалов из ювенильных зубов …… стр. 19

ЛАЗЕРНЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ ИЗМЕРЕНИЯ

Кугейко М. М.
Неинвазивная оптико-физическая диагностика биообъектов (теоретические аспекты) …… стр. 26

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С ВЕЩЕСТВОМ

Чербачи. Ю. В., Мкртычев О. В.
Статистическое моделирование лазерной абляционной деструкции …… стр. 47

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

НАШИ ЮБИЛЯРЫ

doi: 10.51639/2713-0568_2022_2_1_4
УДК 535
ГРНТИ 29.01.09

Юбилей Солдатова А. Н.

В. Е. Привалов (от редакции)

353919, Россия, Новороссийск, Мысхакское шоссе 75,
филиал Белгородского государственного технологического университета
им. В. Г. Шухова в г. Новороссийске

e-mail: editor-laser@nb-bstu.ru

Редакция ЛИИ поздравляет профессора
Солдатова Анатолия Николаевича
с 80-летним Юбилеем!
Желаем здоровья, дальнейших успехов
и большого числа статей на страницах нашего журнала

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА

doi: 10.51639/2713-0568_2022_2_1_5
УДК 535.33, 621.039.533.6: 535.14
ГРНТИ 44.31.19, 29.33.49

Лазеры и зелёная энергетика

[1*] Привалов В. Е., [2] Туркин В. А., [3] Шеманин В. Г.

[1] 195251, Россия, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, 29,
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
[2] 353924, Россия, Новороссийск, Государственный морской университет им. Ф. Ф. Ушакова
[3] 353919, Россия, Новороссийск, Мысхакское шоссе 75,
филиал Белгородского государственного технологического университета им. В. Г. Шухова в г. Новороссийске

e-mail: * vaevpriv@yandex.ru, turvla@mail.ru, shemanin-v-g@nb-bstu.ru

Рассмотрены виды энергетики, предпочтительные на транспорте с экологической точки зрения. Проведён анализ состояния энергетики с использованием различных газов и, в частности, разработки аппаратуры для водного транспорта. Рассмотрены различные виды топлив в газовой фазе, уменьшающей объём отходов. Выполнена оценка погрешности измерения концентрации молекул водорода лидарами для обеспечения безопасной работы аппаратуры. Определены оптимальные параметры лазерного зондирования. Рассмотрены конкретные условия эксплуатации аппаратуры. Определены оптимальные типы лидаров, подходящих для рассматриваемых задач. Результаты исследования позволяют выбрать оптимальные параметры лазера и лидара комбинационного рассеяния света для зондирования молекул водорода в атмосфере на расстояниях зондирования до 1500 м. Чтобы зондировать молекулы водорода с концентрациями $N(z) = 10^{13}$ см$^{-3}$ на длине волны лазерного излучения 405 нм в диапазоне зондирования до 1500 м достаточно времени измерения от 0,3 с до 218,3 мин, что сложно реализовать в одном лидаре комбинационного рассеяния света в конкретных экспериментальных условиях. Если ограничить диапазон зондирования 500 м, то достаточно будет времени измерения 15,8 мин. Подбирая время измерения за счёт параметров того же варианта лидара, можно увеличить расстояние зондирования необходимых концентраций молекул водорода в атмосфере.

Ключевые слова: экология, виды топлива, топливный элемент, особенности водорода, лидары, концентрация молекул газа, погрешность измерения концентрации.

Введение

Безопасная энергетика – одна из ведущих задач, которую должно решить человечество ближайшие десятилетия. Безопасность – многоплановая проблема, в первую очередь, экологическая (см., например, [1]). Следовательно, в первую очередь, должны решаться вопросы минимальных вредных выбросов. Такую энергетику сегодня называют зелёной.

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

При этом, естественно, следует не забывать и об энергетической эффективности, финансах, габаритах и т. д. Многое определяется топливом. Всё чаще отдаётся предпочтение газообразному топливу. На первое место в промышленности выходит природный газ (смесь пропана и бутана). Изучаются возможности применения метана, метанола, сероводорода и др. Но самым распространённым элементом во Вселенной является водород: он составляет три четверти всей материи, т. е. гораздо больше, чем все остальные элементы вместе взятые. Водород составляет примерно 1 % массы земной коры. В составе самого распространённого на Земле вещества – воды масса водорода составляет более 11 %. Почему же он не занял первое место по применению в промышленности много лет назад?

1. Водород в науке и технике

Многое о свойствах водорода мы узнаем из учебника (например, [2]). Известно, что производством водорода интересовались в Англии еще в XIX веке [3]. Водород используют для повышения качества бензина, производства удобрений (в первую очередь, азотных), улучшения качества стали, для гидроочистки, регенерации катализаторов, в пищевой промышленности и др. По-видимому, наиболее эффективным топливом водород является при термоядерной реакции [4]. При этом наблюдается самый большой выход энергии на единицу массы используемого топлива и самая экономичная реакция, учитывая количество водорода в природе, и самая экологически чистая. Более чем за полвека, человек пока не достиг осуществления управляемого термоядерного синтеза. Задумались о сжигании водорода [3]. Для этого нужно добывать его в больших количествах. В. И. Вернадский [5] считал, что термодинамические и химические условия глубин Земли позволяют предполагать возникновение среды, благоприятной для наличия водорода, с ростом глубины. Активность химических реакций уменьшается, исчезает кислород, начинают преобладать металлы, растёт количество водорода. При этом температура и давление растут. Это должно привести к появлению соединений водорода, в том числе растворённого в металлах. Водородная дегазация планеты – явление выделения водорода в смеси с другими газами (чаще всего углеводородами, гелием и радоном) в рифтовых зонах, при извержениях вулканов, из разломов земной коры, кимберлитовых трубок, некоторых шахт и скважин.

Все процессы на Земле следует рассматривать нанизанными на ось водородной дегазации [6]. Землетрясения тектонического происхождения сопровождаются увеличением содержания водорода в воздухе. На геохимической модели Земли (рисунок 1) видно, что до поверхности нашей планеты водород доходит в виде углеводородов, воды и в виде газа H_2. Единственным объяснением водородной дегазации Земли является наличие достаточно больших запасов водорода в недрах, а также круговорот водорода в системе – недра-поверхность-недра. К возможным источникам водорода относят и вулканы [4]. Существует предположение, что абиогенная нефть и природный газ образуются из неорганических веществ в мантии Земли при условии достаточной концентрации водорода во флюидном потоке и мигрируют в земную кору. Особенно хорошо это наблюдается в современных осях расширения океанов [5].

Таким образом, водородный баланс нашей планеты выглядит следующим образом. В атмосфере планеты находится примерно 2,5 миллиардов тонн водорода. Он уходит в космос по 250 тысяч тонн в год. Источником восполнения является водородное «дыхание» Земли», то есть водородная дегазация. После завершения процесса формирования планеты, радиогенный разогрев вещества планеты приводил к разложению гидридов с выделением водорода [3]. Появление интереса к водородной энергетике

породило массу проектов по производству водорода [1]. В зависимости от способа производства водорода появился «зелёный», «голубой»», «серый» и др. Самый чистый водород – зелёный получается электролизом воды. Но он дорогой и не считается рентабельным: затраты на электролиз превышают энергию сгорания водорода. Но можно не сжигать водород, а использовать энергию химической реакции. Это пригодно не для всех применений. Поэтому чаще используют серый водород. Экологические проблемы подталкивают к производству зелёного водорода. Ещё в 1972 году начал разрабатываться проект строительства приливной электростанции в заливе Шелихова для производства «зелёного» водорода. Можно не строить плотину, закрывающую весь залив Шелихова, а только Пенжинскую губу или только её часть до мыса Опасный. Всё равно, это потребует очень больших затрат. Кроме того, потребуется передавать электроэнергию на тысячи километров, так как вблизи нет потребителей этой огромной энергии. Либо транспортировать водород танкерами на место использования. Можно поступить иначе. Водород в огромных количествах сам выходит на поверхность Земли. Надо найти места наибольшего выхода и изучать возможность его сбора и, если потребуется, очистки. Рассмотрим это подробнее. Мы бегло познакомились с возможностью выхода водорода из ядра к поверхности Земли. Как выглядят эти выходы? В зонах выходов водорода в рельефе Земли образуются структуры проседания, по форме напоминающие блюдца, диаметром от 100 м до нескольких километров. Известно, что в угольных шахтах временами появляется метан. Происходят взрывы. Но метан, по-видимому, не главное действующее лицо. Идёт водородная дегазация. Водород, проходя угольные пласты, образует метан. При появлении искр или открытого огня (горящая сигарета) происходит взрыв. Взрывается водород с метаном. Водород вносит основной вклад. Метан является индикатором появления водорода в данном случае.

Для обнаружения опасности следует ставить датчики водорода, а не метана: сначала появляется водород. Когда появляется метан, уже поздно сигнализировать. Хорошими датчиками водорода являются обеспечивающие дистанционные измерения высокой точности лидары [9]. Для обеспечения таких измерений были проведены расчётные и экспериментальные работы [10–12]. Чтобы лучше изучить последовательность появления водорода и метана, стоит поставить лидары для зондирования водорода и метана.

2. **Лазерные методы диагностики водорода**

Для оценки возможностей зондирования молекулярного водорода в атмосфере на уровне фоновых концентраций выполним компьютерное моделирование лидарного уравнения из [11] для варианта лидара комбинационного рассеяния света с биаксиальной [12, 13] оптическая схемой. Дифференциальное сечение комбинационного рассеяния ($d\sigma/d\Omega$) молекулами H_2 при возбуждении лазерным излучением с длиной волны 532 нм возьмём из [10]. Оно равно $(4{,}3 \pm 0{,}9)\cdot 10^{-30}$ см^2/ср.

В качестве зондирующего излучения используется излучение третьей и второй гармоники YAG-Nd-лазера с накачкой полупроводниковым лазером с длинами волн 355 и 532 нм, газовых лазеров с длинами волн 377 и 510 нм и полупроводникового лазера с длиной волны 405 нм с длительностью импульсов 10 нс и энергиями в импульсе до 1 мДж при частоте следования лазерных импульсов f до 100 кГц [9]. Излучение лазера направлялось параллельно оси приемного телескопа на расстоянии 150 мм, как и в [6, 9], а излучение комбинационного рассеяния молекулами водорода в атмосфере в направлении назад собиралось приемным телескопом типа Ньютона со сферическим зеркалом *9* диаметром 200 мм и фокусировалось линзовым объективом *8* в волоконный ввод микроспектрометра FSD-8 *6,* который работал на линии с ПК.

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

Будем рассматривать однократное комбинационное рассеяние света и однородную атмосферу [9, 14]. Значения максимума полосы валентных H-H колебаний молекул водорода равно 4161 см$^{-1}$ по данным [9] и для всех длин волн лазерного излучения были рассчитаны длины волн полос колебательного комбинационного рассеяния света молекулами водорода. Остальные параметры задачи взяты из [11].
С этими данными рассмотрим численное решение уравнения лидарного уравнения [11], полагая, что $G(z)$ в нашем случае равно 1, и концентрация молекул водорода – в диапазоне $N(z) = 10^{13} \ldots 10^{17}$ см$^{-3}$.
Для нашей экспериментальной ситуации за время измерения t может быть зарегистрировано 200 фотонов [11]. Результаты решения уравнения для этого случая представлены на рисунке 1 как зависимость времени измерения t для нашей экспериментальной ситуации от расстояния зондирования z. В этом случае для больших расстояний порядка 1000 м наименьшее время измерения получается для длины волны 532 нм.

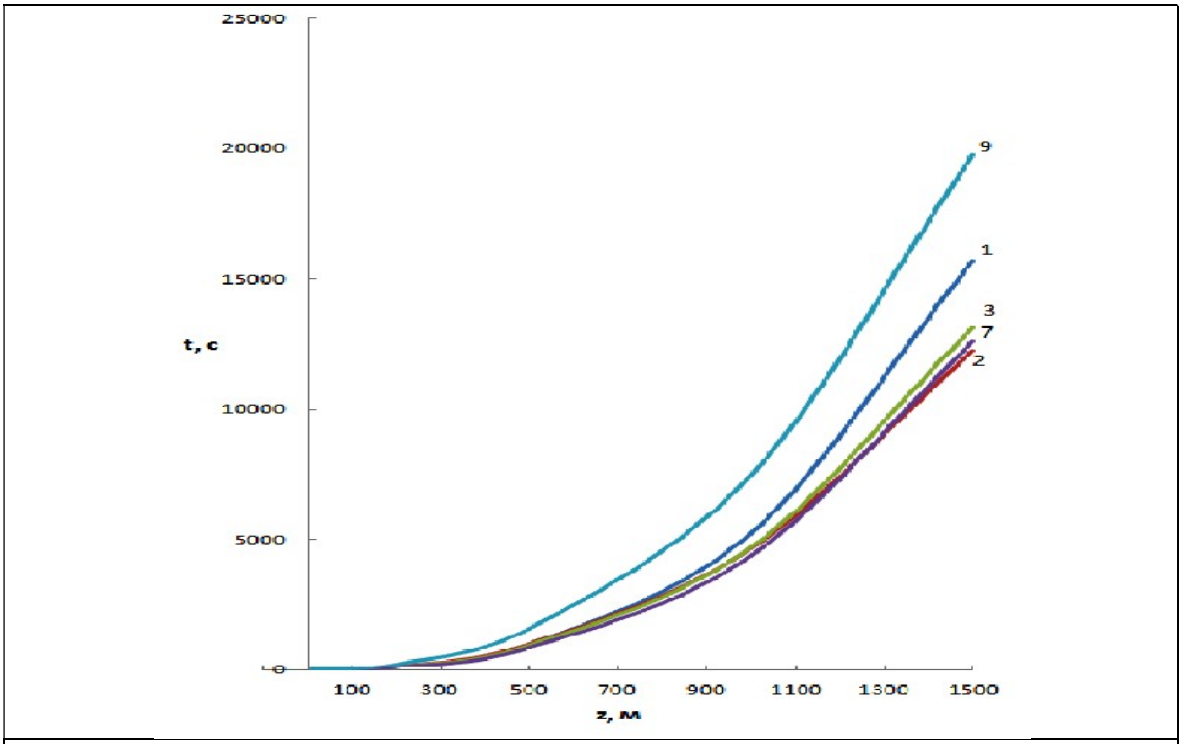


Рис. 1. Графики рассчитанной по лидарному уравнению зависимости времени измерения t (в с) от расстояния зондирования z (в м) для длин волн лазерного излучения 532(2), 377(7), 405(3), 355(1) и 510(9) нм для тех же экспериментальных условий

Более наглядно зависимость концентрации молекул водорода $N(z)$ от расстояния зондирования z для одного и того же времени измерения t =100 с для всех длин волн лазерного излучения можно представить, выразив из уравнения [11], величину $N(z)$ в виде

$$N(z) = \frac{n(\nu, z)z^2}{BY(\nu, z)t},$$

где все обозначения из [11]. Рассмотрим численное решение этого уравнения для диапазона концентрации молекул водорода $N(z)$ от10^{13} см$^{-3}$ до 10^{17} см$^{-3}$.
Результаты решения уравнения представлены на рисунке 2.

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

Как видно из графиков на рисунке 2 кривые для выбранных длин волн лазерного излучения 377, 405 и 532 нм практически совпали, а увеличение концентрации на расстояниях зондирования более 1000 м на длине волны 377 нм отражает влияние спектральной зависимости пропускания атмосферы на результаты моделирования.
Всё это означает, что в зависимости от ожидаемой реальной концентрации на заданном расстоянии зондирования можно будет по времени измерения выбрать параметры лазера, телескопа и фотоприёмника для создания такой лидарной системы комбинационного рассеяния света молекулами водорода.
Такой выбор определяется спектральной зависимостью дифференциальных сечений полосы колебательного комбинационного рассеяния света молекулами водорода, коэффициентов ослабления в атмосфере на этих длинах волн и относительной спектральной чувствительности фотоприёмника.

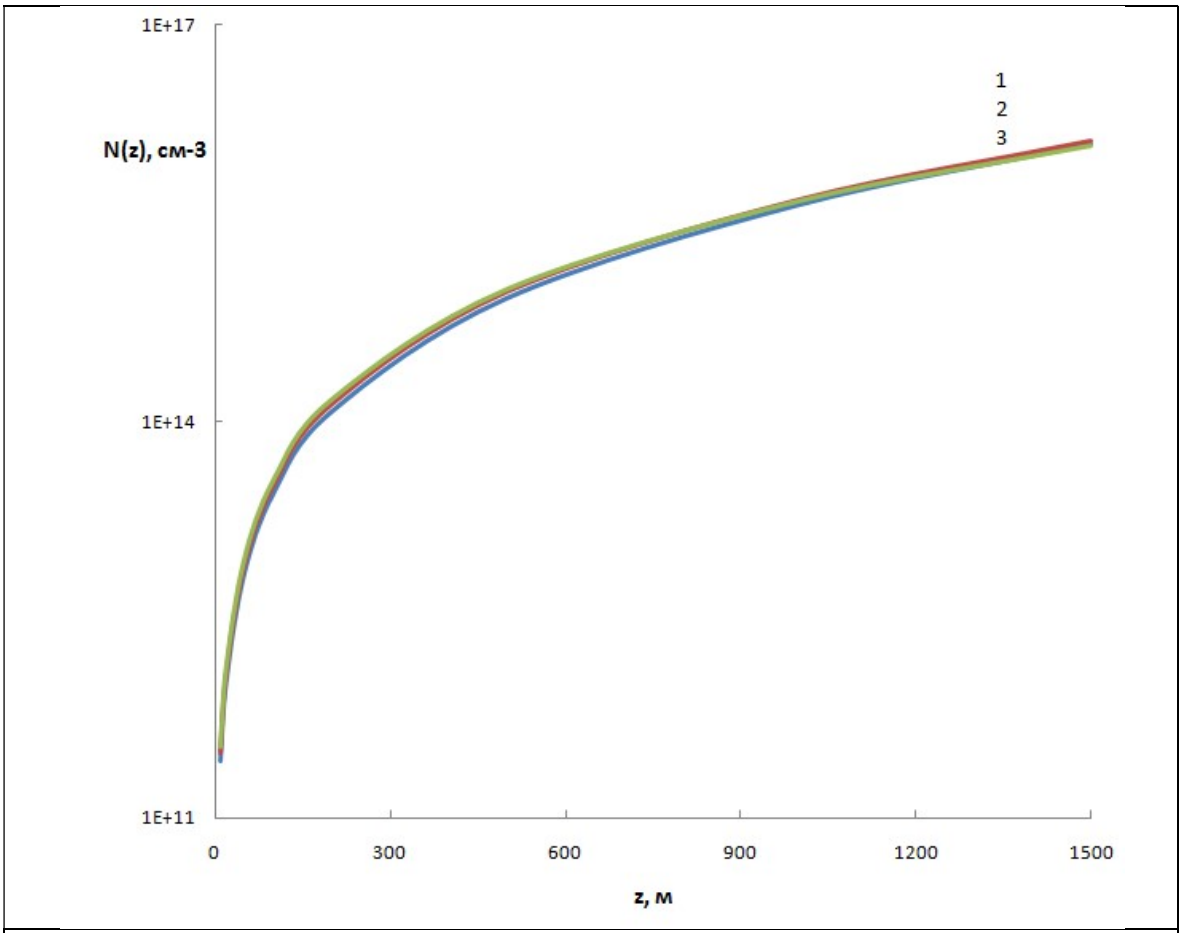


Рис. 2. Графики рассчитанной по лидарному уравнению логарифмической зависимости концентрации молекул водорода $N(z)$ (в $см^{-3}$) от расстояния зондирования z (в м) для одного и того же времени измерения t=10 с для длин волн лазерного излучения 377(1), 405(2) и 532(3) нм для той же самой экспериментальной ситуации

Представленные результаты исследований могут быть также использованы для непрерывного дистанционного мониторинга загрязняющих веществ в атмосфере и оценки качества окружающей среды, что является важнейшей составляющей деятельности человека, направленной на экологическое использование природных ресурсов [12, 13].

3. Заключение

Полученные результаты позволяют выбрать оптимальные параметры лазера и лидара комбинационного рассеяния света для зондирования молекул водорода в атмосфере на расстояниях зондирования до 1500 м. Причём они хорошо согласуются с результатами наших прежних работ [11].
Чтобы зондировать молекулы водорода с концентрациями $N(z) = 10^{13}$ см$^{-3}$ на длине волны лазерного излучения 405 нм в диапазоне зондирования до 1500 м достаточно времени измерения от 0,3 с до 218,3 мин, что сложно реализовать в одном лидаре комбинационного рассеяния света в конкретных экспериментальных условиях [9, 11, 13].
Если ограничить диапазон зондирования 500 м, то достаточно будет времени измерения 15,8 мин. А поэтому, подбирая время измерения за счёт параметров того же варианта лидара, можно увеличить расстояние зондирования необходимых концентраций молекул водорода в атмосфере.

Конфликт интересов

Авторы статьи заявляют, что у них нет конфликта интересов по материалам данной статьи с третьими лицами, на момент подачи статьи в редакцию журнала, и им ничего не известно о возможных конфликтах интересов в настоящем со стороны третьих лиц.

Список литературы

1. Привалов В. Е., Туркин В. А., Шеманин В. Г. О лазерно-информационных технологиях в водородной энергетике // Лазеры. Измерения. Информация. 2021. Т 1. № 2. С. 004–011. DOI 10.51639/2713-0568_2021_1_2_4 [Электронный ресурс] URL: https://lasers-measurement-information.ru/ojs/index.php/laser/article/view/9
2. Суворов А. В., Никольский А. Б. Общая химия / СПб. 1994 «Химия». 624 с.
3. Лобанов С. Водород. Назад в будущее. // Наука. Политех. 2021. № 3 С. 44–57.
4. Край И. Термоядерный синтез: энергия будущего? [Электронный ресурс] URL: https://www.mirf.ru/science/termoyadernyj-sintez-energiya-buduschego/ (02.05.2021).
5. Вернадский В. И. Избранные сочинения. Том 4. Кн. 2 / Москва: Издательство Академии наук СССР. 1960. С. 13–14.
6. Ларин В. Н. Наша Земля. Происхождение, состав, строение и развитие изначально гидридной Земли / Москва: Агар. 2005. 248 с.
7. Портнов А. Вулканы – месторождения водорода // Промышленные ведомости. 2010. С. 10–12.
8. Краюшкин В. А. Небиогенная нефтегазоносность современных центров спрединга дна мирового океана // Геология и полезные ископаемые Мирового океана. 2008. С. 319–39.
9. Межерис Р. Лазерное дистанционное зондирование / Москва: Мир. 1987. 550 с.
10. Воронина Э. И., Привалов В. Е., Шеманин В. Г. Зондирование молекул водорода на лабораторном лидаре КР // ПЖТФ. 2004. Том 30. С. 514–17.
11. Привалов В. Е, Шеманин В. Г. Лидарное уравнение с учётом конечной ширины линии генерации лазера // Известия РАН. Серия физическая. 2004. Том 79. Вып. 2. С. 170–180.
12. Privalov V. E., Shemanin V. G. Accuracy of lidar measurements of the concentration of hydrofluoride molecules in the atmospheric boundary layer // Measurement Techniques. 2020. V. 63. Iss. 7. P 543–548. DOI 10.1007/s11018-020-01821-0

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

13. Privalov V. E., Turkin V. A., Shemanin V. G. Hydrogen Power Capabilities in Water Transport // IOP Conference Series: Earth and Environmental Science. 2021. 872 (1) 012014 DOI 10.1088/1755-1315/872/1/012014
14. Прохоров А. М. Справочник по лазерам. Том 2. / Москва: Сов. Радио. 1978. 512 с.

Lasers and green energy

[1*] Privalov V. E., [2] Turkin V. A., [2] Shemanin V. G.

[1] *195251, Russia, St. Petersburg, st. Polytechnic, 29,*
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
[2] *353924, Russia, Novorossiysk, State Maritime University named after Admiral F.F. Ushakov*
[3] *353900, Russia, Novorossiysk, st. Myskhakskoe highway, 75,*
branch of the Belgorod State Technological University named after V. G. Shukhov in Novorossiysk

The types of energy that are preferable in transport from an environmental point of view are considered. An analysis of the state of energy with the use of various gases and, in particular, the development of equipment for water transport has been carried out. Various types of fuels in the gas phase, which reduce the amount of waste, are considered. An estimate of the error in measuring the concentration of hydrogen molecules by lidars was made to ensure the safe operation of the equipment. The optimal parameters of laser probing are determined. The specific operating conditions of the equipment are considered. The optimal types of lidars suitable for the problems under consideration are determined. The results of the study make it possible to choose the optimal parameters of the Raman laser and lidar for probing hydrogen molecules in the atmosphere at probing distances up to 1500 m. To probing hydrogen molecules with concentrations $N(z)$ = 1013 cm up to 1500 m, the measurement time from 0.3 s to 218.3 min is sufficient, which is difficult to implement in a single Raman lidar under specific experimental conditions. If the sounding range is limited to 500 m, then a measurement time of 15.8 min will suffice. By selecting the measurement time using the parameters of the same version of the lidar, it is possible to increase the probing distance for the required concentrations of hydrogen molecules in the atmosphere.

Key words: ecology, types of fuel, fuel cell, features of hydrogen, lidars, concentration of gas molecules, concentration measurement error.

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

ЛАЗЕРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

doi: 10.51639/2713-0568_2022_2_1_12
УДК 543.424
ГРНТИ 29.31.27
ВАК 01.04.05

Рамановская спектроскопия для оценки донорского ксеноматериала

[1*] Самигуллин Р. Т., [1] Тимченко П. Е., [1] Тимченко Е. В., [1] Писарева Е. В., [1] Фролов О. О., [1] Гнедова А. А., [2] Власов М. Ю., [2] Волова Л. Т.

[1] *443086, Россия, Самара, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва*
[2] *443099, Россия, Самара, Самарский государственный медицинский университет, биотехнологический центр «БиоТех»*

e-mail: samigullin.ravil2015@yandex.ru, [*] laser-optics.timchenko@mail.ru, timpavel@mail.ru, pella1@rambler.ru, frolovaleh@gmail.com, pella1@rambler.ru, mvlasov1@rambler.ru, volovalt@yandex.ru

В данной статье представлены результаты спектральных исследований донорского ксеноматериала, полученных из разных источников (резец, моляр) и изготовленных по технологии «Лиопласт»®. Все исследования проводились с помощью метода Рамановской спектроскопии. Спектры снимали в трёх различных точках и усреднялись с помощью пакета программного обеспечения «Wolfram mathematica». Использовалось оборудование цифрового спектрометра высокого разрешения Andor Shamrock SR-303i, совмещённого с лазерным модулем Luxx Master LML-785.0RB-04. Был произведён нелинейный регрессионный анализ спектров, состоящий в их разложении на спектральные линии. В результате проведённых исследований, были получены данные статистического анализа спектров комбинационного рассеяния, было установлено, что резцы и моляры можно использовать для изготовления ксеноматериалов.

Ключевые слова: Рамановская спектроскопия, донорский материал, ксеноматериалы.

Введение

Для выполнения стоматологических реставрационных процедур и восполнения дефицита костной ткани альвеолярного отростка как правило используются ауто- и аллогенные биосовместимые материалы. Однако часто, из-за отсутствия донорского материала либо нежелания пациента использовать аллогенные ткани, возникают сложности с подбором биоимплантатов. Поэтому ведется поиск альтернативных заменителей дентальных тканей. Изучена биологическая реакция крыс на костный трансплантат крупного рогатого скота при восстановлении альвеолярной кости [1], купировании дефектов нижней челюсти при пересадке материала Bio-Oss карликовым свиньям [2] и собакам [3].
Ключевую роль в пролиферации и дифференцировке клеток играют ряд факторов роста и костные морфогенетические белки. Возможность использования деминерализованного

матрикса зубов в качестве носителя факторов роста и стволовых клеток доказана в работах [4,5].
Таким образом, деминерализованные ксеногенные костные биоимплантаты могут служить альтернативой ауто- и аллоимплантатам. Эффективность заживления костной ткани в значительной степени зависит от способа предоперационной обработки трансплантата, обуславливающей его механическую стабильность, биосовместимость, остеоиндуктивность и остеокондуктивность. В связи с этим возникает необходимость разработки методик оценки качества ксеногенного костно-пластического материала с использованием удалённых зубов животных.
Среди методов исследований широкое распространение получили оптические методы исследований [6–10].
Одними из распространённых оптических методов оценки биоматериалов различного назначения является метод рамановской спектроскопии [9, 10]. Так например, в работе [9] с помощью метода рамановской спектроскопии высокого разрешения были исследованы синтетические волокна гидроксиаппатита и получены их спектральные характеристики. В работе [10] с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния исследовался наногидроксиапатит, легированный ионами иттрия для отслеживания структурных модификаций в чистых и легированных гидроксиапатитах в результате были получены характерные различия в спектрах образцов.
Цель работы: сравнительный спектральный анализ из ксеноматериалов из моляров и резцов прошедших, первичную обработку и деминерализацию, с помощью метода спектроскопии комбинационного рассеяния.

Первый раздел: Материалы и методы

Объектами исследования являлись группы образцов ксеноматериалов, изготовленных по технологии «Лиопласт»® из зубов коровы.
Образцы разделены на три основные группы по типам донорского ксеноматериала (1 – моляр и 2 – резец) при одинаковой степени деминерализации 1.8н.
В качестве основного метода исследования ксеноматериала использовался метод спектроскопии комбинационного рассеяния света, реализованный цифровым спектрометром высокого разрешения Andor Shamrock SR-303i со встроенной охлаждающей камерой DV420A-OE, обеспечивающей спектральное разрешение 0,15 нм, и волоконным световодом, оптический зонд для рамановской спектроскопии RPB785, совмещенный с лазерным модулем Luxx Master LML-785.0RB-04 (до 500 мВт, длина волны 785 нм) [11].
Спектры снимали в трёх различных точках и усреднялись с помощью пакета программного обеспечения «Wolfram mathematica» [12].

Второй раздел: Анализ

На рисунке 1 приведены результаты исследований образцов донорских ксеноматериалов. Значительные изменения наблюдаются на линиях 956 $см^{-1}$ (P-O симметричное валентное), 1071 $см^{-1}$ (C-O плоское валентное), 1129…1242 $см^{-1}$ (Amide III). Значимых изменений на других линиях КР не наблюдается. Данные изменения обусловлены особенностью структуры моляров и резцов. Вероятно, уменьшение минеральных компонент в молярах при данной степени деминерализации по сравнению с резцами обусловлено более быстрым выходом минералов из моляров под воздействием кислоты из-за особенностей строения слоев дентина и эмали. Известно, что гидроксиапатит дентина структурирован

низкокристаллическим фосфатом кальция, что делает возможным ремоделирование кости в будущем [13]. Напротив, гидроксиапатит эмали стехиометрически имеет структуру высококристаллического фосфата кальция, который в меньшей степени подвержен деградации, в том числе и под действием кислот. Упорядоченная структура кристаллов не позволяет остеокластам быстро разрушать матрикс, что приводит к замедлению резорбции [14].

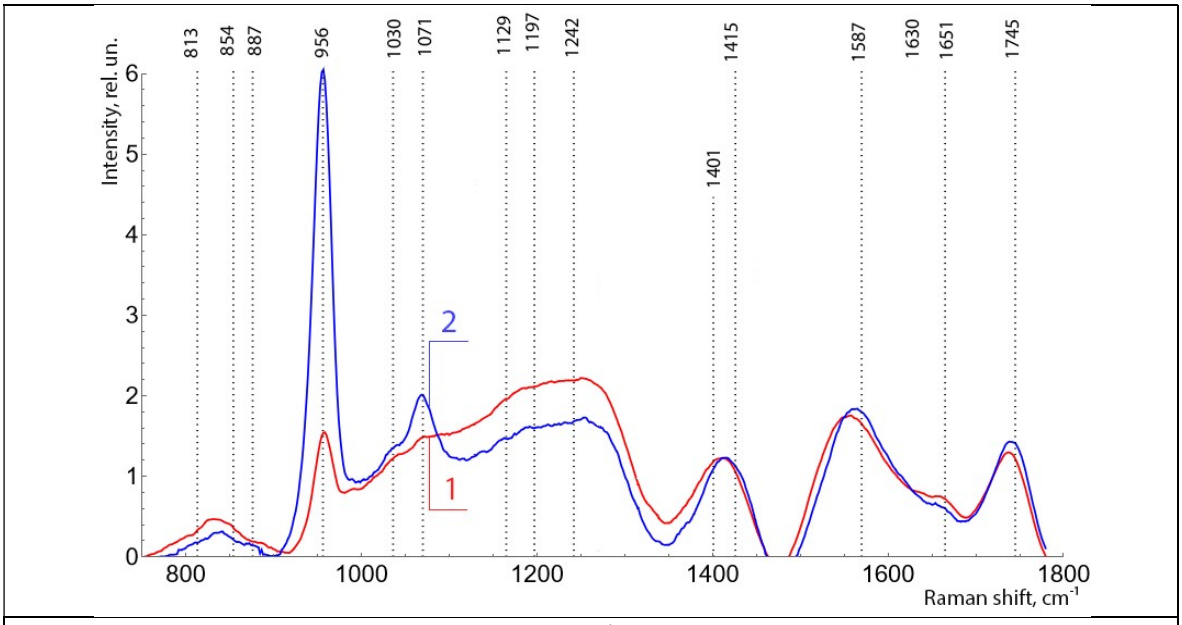


Рис. 1. Усреднённые спектры комбинационного рассеяния донорских ксеноматериалов: 1 – Моляр (красный); 2 – Резец (синий)

Для повышения информативности полученных спектров КР был произведён нелинейный регрессионный анализ спектров, состоящий в их разложении на спектральные линии. На рисунке 2 представлен результат разложения спектрального контура на сумму распределений линий Гаусса.

Среднее значение коэффициента детерминации результирующего спектра от исходного в области 800…1780 см$^{-1}$ составило $R2$ = 0,99, относительная погрешность определения интенсивности спектральных линий а не превышает 5 %, усредненное стандартное отклонение координаты линии x_0 составляет 1 см$^{-1}$, усредненное стандартное отклонение ширины линии (HWHM) Гаусса dx составило 2 см$^{-1}$.

На рисунке 3 описана дискриминантная функция LD-1 описывает дисперсию на 100 %. Положительные значения LD-1 в большей степени характерны для спектров КР, резцов, отрицательные – для моляров.

На рисунке 4 показаны коэффициенты матрицы факторной структуры, имеющие физический смысл корреляции между переменными в модели и дискриминирующей функцией. Чем выше по модулю значение LD-1 для переменной, тем в большей степени она определяет разницу в дискриминационной модели между группами образцов.

Для исследуемых образцов специфичность составила 66,7 %, чувствительность 33,3 %.

Перекрёстный анализ модели на основе дискриминантного анализа показал точность 50 %, что говорит о том, что значимых изменений между группами образцов нет.

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

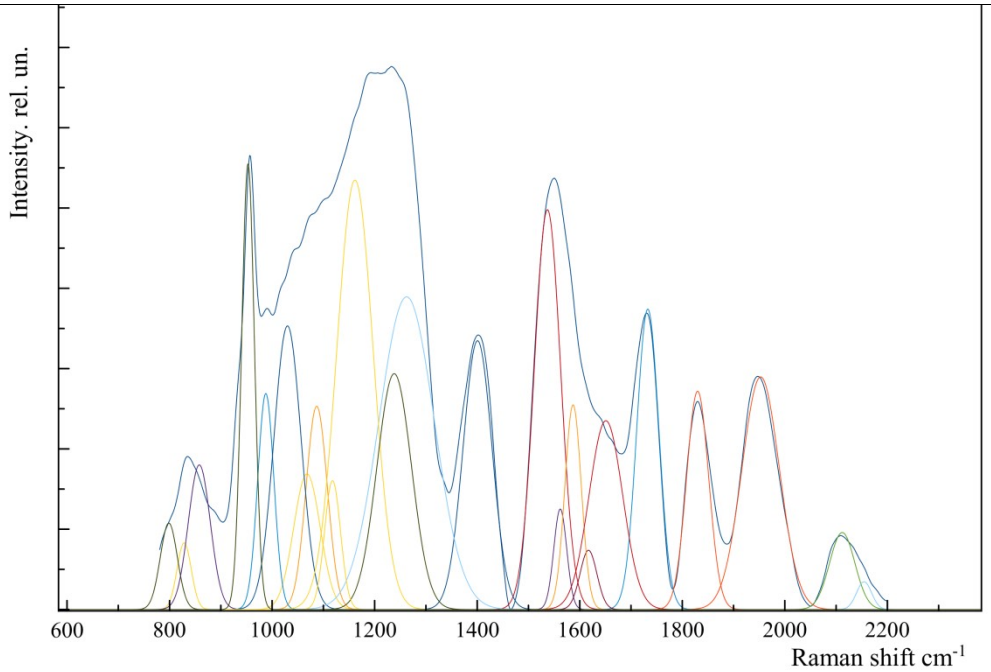


Рис. 2. Спектральное разложение образцов ксеноматериалов

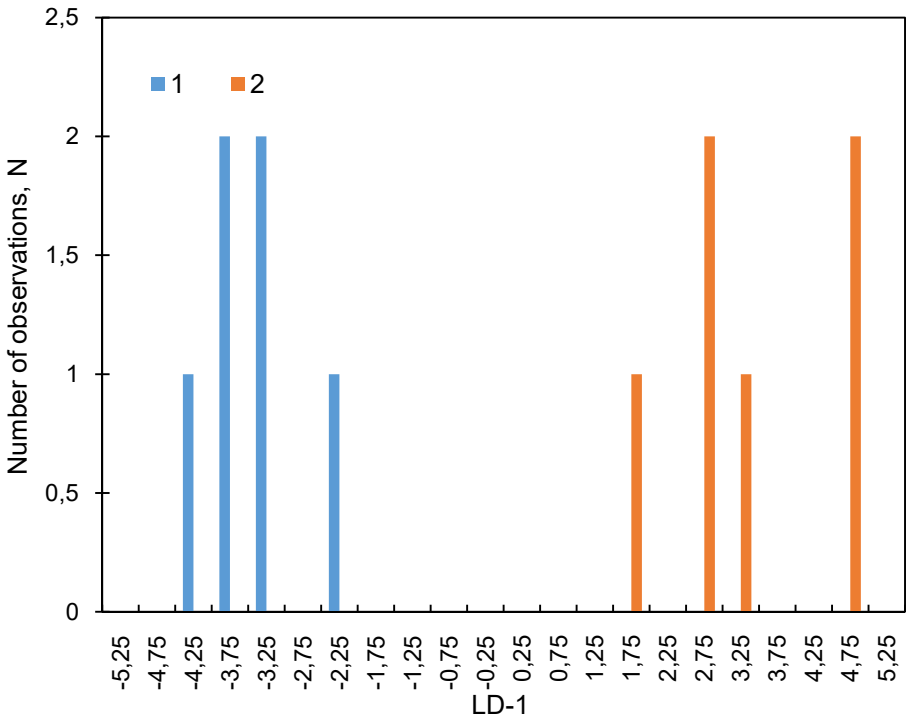


Рис. 3. График значений линейной дискриминантной функции донорских образцов ксеноматериалов: 1 – Моляры; 2 – Резцы

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

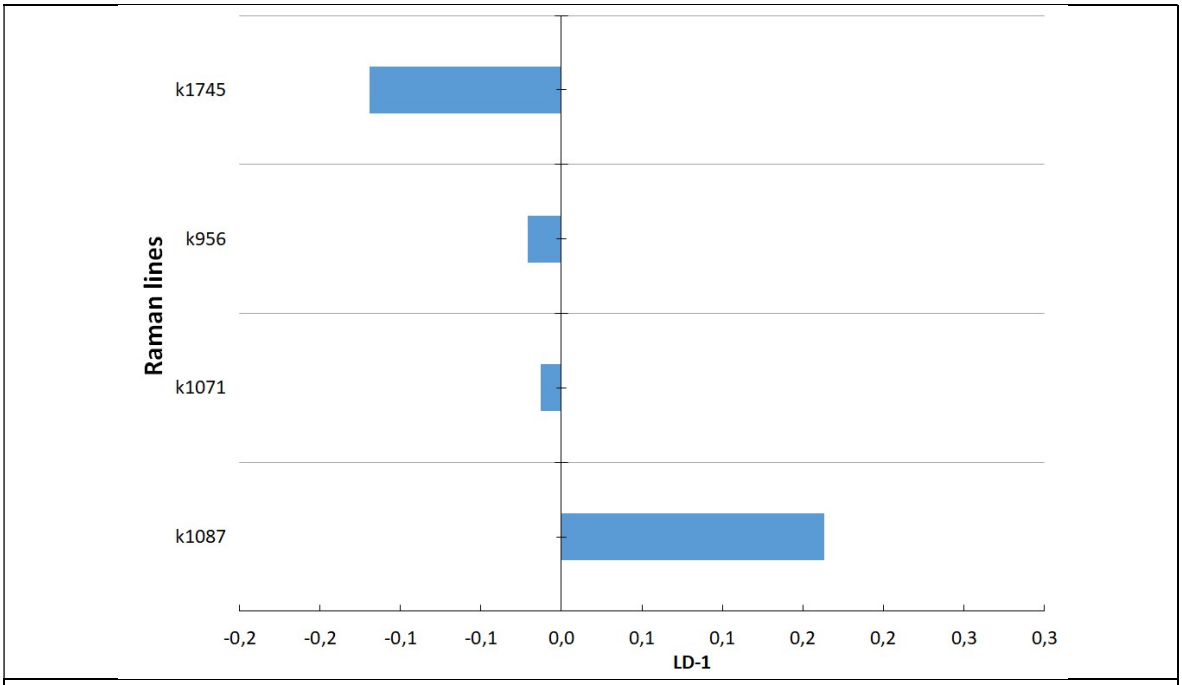


Рис. 4. Значения коэффициентов факторной структуры для образцов резцов и моляров

Заключение

Проведённый расширенный сравнительный анализ спектров комбинационного рассеяния исследуемых образцов ксеноматериалов, полученных из моляров и резцов показал, что наиболее выраженные спектральные изменения после процесса деминерализации наблюдаются в образцах из моляров и проявляются в изменении концентрации PO_4^{3-} и CO_3^{2-} по сравнению с резцами, о чём свидетельствуют изменения на линиях 1071 $см^{-1}$ (C-O плоское валентное), 956 $см^{-1}$ (P-O симметричное валентное) соответственно. Полученные результаты могут свидетельствовать о том, что гидроксиапатит эмали имеет структуру высококристаллического фосфата кальция, что делает эмаль резцов более плотной, медленнее растворяющейся под воздействием кислот.

Конфликт интересов

Авторы статьи заявляют, что у них нет конфликта интересов по материалам данной статьи с третьими лицами, на момент подачи статьи в редакцию журнала, и им ничего не известно о возможных конфликтах интересов в настоящем со стороны третьих лиц.

Список литературы

1. de Almeida C. S., Sartoretto S. C., Durte I. M., Alves A. T. N. N, Barreto H. V., Resende R. F. B [and etc.] In vivo evaluation of bovine xenograft associated with oxygen therapy in alveolar bone repair // J. Oral. Implantol. 2021. Vol. 47. № 6. P. 465–471.
2. Catros S., Sandgren R., Pippenger B. E., Fricain J. C., Herber V., El Chaar E. A novel xenograft bone substitute supports stable bone formation in circumferential defects around dental implants in minipigs // Int. J. Oral. Maxillofac. Implants. 2020. Vol. 35. № 6. P. 1122–1131.

3. Antunes A. A., Oliveira Neto P., de Santis E., Caneva M., Botticelli D., Salata L. A. Comparisons between Bio-Oss(®) and Straumann(®) Bone Ceramic in immediate and staged implant placement in dogs mandible bone defects // Clin. Oral. Implants Res. 2013. Vol. 24. № 2. P. 135–42.
4. Um I. W., Ku J. K., Kim Y. K., Lee B. K., Leem D. H. Histological review of demineralized dentin matrix as a carrier of rhBMP-2 // Tissue Eng. Part B. Rev. 2020. Vol. 26. № 3. P. 284–293.
5. Liu G., Xu G., Gao Z., Liu Z., Xu J., Wang J. [and etc.] Demineralized dentin matrix induces odontoblastic differentiation of dental pulp stem cells // Cells Tissues Organs. 2016. Vol. 201. № 1. P. 65–76.
6. Привалов В. Е., Половченко С. В., Чартий П. В. Экспериментальное зондирование промышленных аэродисперсных потоков // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки. 2014. № 4 (206). С. 64–7.
7. Мкртычев О. В., Привалов В. Е., Фотиади А. Э., Шеманин В. Г. Лазерная абляция нанокомпозитов // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки. 2015. № 1(213). С. 128–135.
8. Привалов В. Е., Шеманин В. Г. Лидарное уравнение с учетом конечной ширины линии генерации лазера // Известия высших учебных заведений. Физика. 2014. Т. 57. № 8. С. 49–58
9. Shah F. A. Characterization of Synthetic Hydroxyapatite Fibers Using High-Resolution, Polarized Raman Spectroscopy. // Appl Spectrosc. 2021. Vol. 75. № 4. P. 475–479.
10. Yilmaz B., Evis Z. Raman spectroscopy investigation of nano hydroxyapatite doped with yttrium and fluoride ions // Spectroscopy Letters. 2014. Vol. 41. № 1. P. 24–29.
11. Тимченко Е. В., Тимченко П. Е., Писарева Е. В., Даниил М. А., Волова Л. Т., Федотов А. А. [и др.] Оптический анализ костной ткани методом рамановской спектроскопии при экспериментальном остеопорозе и его коррекции с помощью аллогенного гидроксиапатита // Журнал оптических технологий. 2020. Т. 87. № 3. С. 161–167.
12. Тимченко П. Е., Тимченко Е. В., Волова Л. Т., Зыбин М. А., Фролов О. О., Долгушов Г. Г. Оптическая оценка дентинных материалов // Оптическая память и нейронные сети. 2020. Т. 29. № 4. С. 354–357.
13. Bohner M. Calcium orthophosphates in medicine: from ceramics to calcium phosphate cements // Injury. 2000. Vol. 31 № 4. P. 37–47.
14. Kim Y. K., Lee J., Um I. W., Kim K. W., Murata M., Akazawa T., Mitsugi M. Tooth-derived bone graft material // J. Korean Assoc. Oral. Maxillofac. Surg. 2013. Vol. 39. № 3. P. 103–11.

Raman spectroscopy for the evaluation of donor xenomaterial

[1*] Samigullin R. T., [1] Timchenko P. E., [1] Timchenko E. V., [1] Pisareva E. V., [1] Frolov O. O., [1] Gnedova A. A., [2] Vlasov M. Yu., [2] Volova L. T.

[1] *443086, Russia, Samara, Samara National Research University named after Academician S. P. Korolev*
[2] *443099, Russia, Samara, Samara State Medical University, BioTech Biotechnology Centre*

This paper presents the results of spectral studies of donor xenomaterial obtained from different sources (incisor, molar) and fabricated using the Lioplast® technology. All investigations were carried out by Raman spectroscopy. Spectra were taken at three different points and averaged using the Wolframmathematica software package. We used an Andor Shamrock SR-303i high resolution digital spectrometer coupled with a Luxx Master LML-785.0RB-04 laser module. A non-linear regression analysis of the spectra was performed, consisting in their decomposition into spectral lines. As a result of these studies, statistical analysis of Raman spectra was obtained, it was found that incisors and molars can be used for xenomaterials.

Key words: Raman spectroscopy, donor material, xenomaterials.

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

ЛАЗЕРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

doi: 10.51639/2713-0568_2022_2_1_19
УДК 543.424
ГРНТИ 29.31.27
ВАК 01.04.05

Сравнительный спектральный анализ разной степени деминерализации биоматериалов из ювенильных зубов

[1] Тимченко Е. В., [1] Тимченко П. Е., [2] Волова Л. Т., [1] Фролов О. О., [2] Власов М. Ю., [1*] Шипко С. С.

[1] *443086, Россия, Самара, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва*
[2] *443099, Россия, Самара, Самарский государственный медицинский университет, биотехнологический центр «БиоТех»*

e-mail: laser-optics.timchenko@mail.ru, timpavel@mail.ru, volovalt@yandex.ru, frolovaleh@gmail.com, mvlasov1@rambler.ru, * s.shipko567@gmail.com

Проведены эксперименты по оптической оценке методом Рамановской спектроскопии биоматериалов из ювенильного дентина, деминерализованных соляной кислотой с разной степенью нормальности. Каждый образец был разрезан на две равные части и далее поделен на две основные группы, в соответствии с этапами их обработки: первая группа – биоматериалы из ювенильного дентина, деминерализованные в соляной кислоте 1,2 Н степени нормальности; вторая группа – биоматериалы из ювенильного дентина, деминерализованные в соляной кислоте 1,8 Н степени нормальности. Деминерализации осуществлялась в растворе соляной кислоты по технологии «ЛИОПЛАСТ» [ТУ-9398-001-01963143-2004]. Показано, что в процессе деминерализации соляной кислотой ювенильные зубы величина степени нормальности раствора кислоты вызывает незначительные изменения. При деминерализации 1,2 Н раствором соляной кислоты сохраняется большее количество органических компонент по сравнению с деминерализацией 1,8 Н раствором соляной кислоты.

Ключевые слова: ювенильный дентин, Рамановская спектроскопия, спектральный анализ, деминерализованные биоматериалы, изменения в дентине, деминерализованный костный трансплантат, деминерализованный матрикс.

Введение

Остеопластические материалы являются основой для формирования собственной ткани пациента. Эти материалы служат биосовместимой матрицей для построения костной ткани в период её регенерации и должны полностью замениться собственной тканью пациента. В стоматологии применяются различные типы остеоплатические материалов: аутогенные, аллогенные, ксеногенные и синтетические материалы. Аллогенные аналоги костной ткани считаются наиболее доступным источником биоматериалов-заменителей, которые содержат биологически активные клеточные структуры. Известно, что зубы

развиваются из клеток нервного гребня, и большое количество структурных белков являются аналогичным для костной ткани. Вследствие этого дентин, составляющий более 85 % структуры зубов, может быть применен в качестве трансплантатного материала в процессе аугментации [1].
Дентин содержит 35 % органических веществ и 65 % неорганических веществ. Деминерализация необходима, поскольку кристаллический гидроксиапатит препятствует высвобождению факторов роста. Кроме того, процесс деминерализации не приводит к деградации факторов роста. Многие исследования показали, что деминерализованным костным трансплантатам свойственны высокая остеоиндуктивность, малая антигенность, антибактериальные свойства и хорошая переносимость организмом реципиента. Дентин является биосовместимым и после его трансплантации формируется костная ткань. В работе [2] показано, что основные способы изготовления деминерализованных костных трансплантатов основаны на обязательном использовании соляной кислоты, т. к. использование других кислот нежелательно при их изготовлении из-за снижения остеиндуктивности полученных биоматериалов. Для изготовления биоматериалов была применена технология «ЛИОПЛАСТ» [ТУ-9398-001-01963143-2004].
Оценка степени деминерализации биоматериалов из ювенильного дентина является актуальной задачей, т.к. биологический состав трансплантата напрямую влияет на его приживляемость.
Оптические методы исследований широко применимы в различных областях [3–5], в том числе они применимы и для оценки биоматериалов: рентгенологические исследования, компьютерная томография, гистоморфологические исследования, магнитно-резонансная томография, денситометрия, спектроскопия комбинационного рассеяния и т. д. [6–8]. Одним из методов оценки качества биоматериалов является Рамановская спектроскопия, как показано в работе [9] данный метод позволяет фиксировать колебания минеральных соединений, определяющих химический состав твердых тканей зубов, и колебания органических компонент. Использование метода спектроскопии комбинационного рассеяния позволяет исследовать кристаллическую структуру твёрдых тканей зубов при патологических процессах, как показано в работе [10]. В работе [11] при помощи метода Рамановской спектроскопии происходит определение характера минерализации твердых тканей человека.
Целью исследования является оценка и сравнение биоматериалов, полученных из ювенильного дентина, деминерализованного соляной кислотой с различной степенью нормальности, с помощью метода спектроскопии КР.

Материалы и методы

Объектами исследований являлся дентин, полученный из здоровых ювенильных зубов предварительно механически обработанных. Каждый образец был разрезан на 2 равные части и далее поделен на две основные группы, в соответствии с этапами их обработки: 1 группа – биоматериалы из ювенильного дентина, деминерализованные в соляной кислоте 1,2 Н степени нормальности; 2 группа – биоматериалы из ювенильного дентина, деминерализованные в соляной кислоте 1,8 Н степени нормальности. Деминерализации осуществлялась в растворе соляной кислоты по технологии «ЛИОПЛАСТ» [ТУ-9398-001-01963143-2004].
В качестве основного метода анализа биоматериалов на основе ювенильного дентина был использован метод спектроскопии КР, реализуемый с помощью экспериментального стенда, включающий в себя рамановский пробник RPB-785 (фокусное расстояние 7,5 мм), совмещенный с лазерным модулем Luxx MasterLML-785.0RB-04 (мощность до 500 мВт,

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

длина волны 784,7 ± 0,05 нм) и высокоразрешающий цифровой спектрометр Shamrock sr-303i, обеспечивающий спектральное разрешение 0,15 нм, со встроенной охлаждаемой камерой DV420A-OE (спектральный диапазон 200-1200 нм) [12].
Анализ спектров осуществлялся в программной среде Magic Plot Pro, а также с помощью метода дискриминантного анализа (LDA) в программе IBMSPSS Statistics. Усреднение спектров проводилось в математическом программном пакете Mathematica 8 [13].

Анализ

На рисунке 1 представлены усредненные спектры комбинационного рассеяния 2 групп образцов: молочных зубов после деминерализации в 1,2 Н и 1,8 Н растворах соляной кислоты. Основные различия проявляютсявлинияхКР 474 $см^{-1}$ (Polysaccharides, amylose), 528 $см^{-1}$ (Phosphatidylserine), 813 $см^{-1}$ (C-C stretching (collagen assignment)), 854 $см^{-1}$ ((C-O-C) skeletal mode of a-anomers (polysaccharides, pectin)), 918 $см^{-1}$ (Proline, hydroxyproline), 1027 $см^{-1}$ (υ_3 PO_4), 1051 $см^{-1}$ (υ_3 PO_4), 1088 $см^{-1}$ (C-C stretch, PO_2 stretch), 1171 $см^{-1}$ (Tyrosine (collagen type I)), 1241 $см^{-1}$ (Asymmetric phosphate stretching modes), 1271 $см^{-1}$ (Collagen (amide III)), 1299 $см^{-1}$ (CH_2 deformation (lipid)), 1448 $см^{-1}$ (CH_2CH_3deformation, CH_2 deformation, CH_2, Collagen), 1556 $см^{-1}$ (Amide II), 1663 $см^{-1}$ (Proteins, including collagen I), 1741 $см^{-1}$ (Ester group) [14–16].

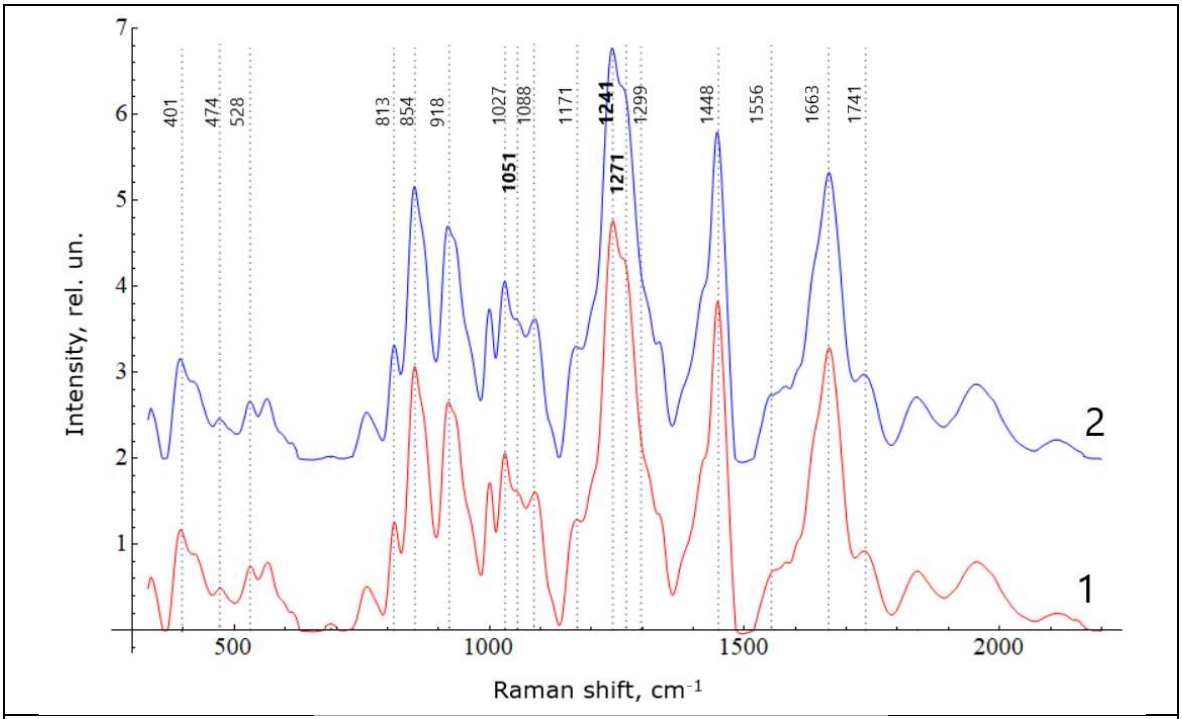


Рис. 1. Усреднённые нормализованные спектры КР образцов ювенильного дентина: 1 – биоматериалы из ювенильных зубов, деминерализованных в 1,2 Н соляной кислоты, 2 – биоматериалы из ювенильных зубов, деминерализованных в 1,8 Н соляной кислоты

Для повышения информативности полученных спектров КР был произведен нелинейный регрессионный анализ спектров, состоящий в их разложении на спектральные линии. На рисунке 2 представлен результат разложения спектрального контура на сумму распределений линий Гаусса.

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

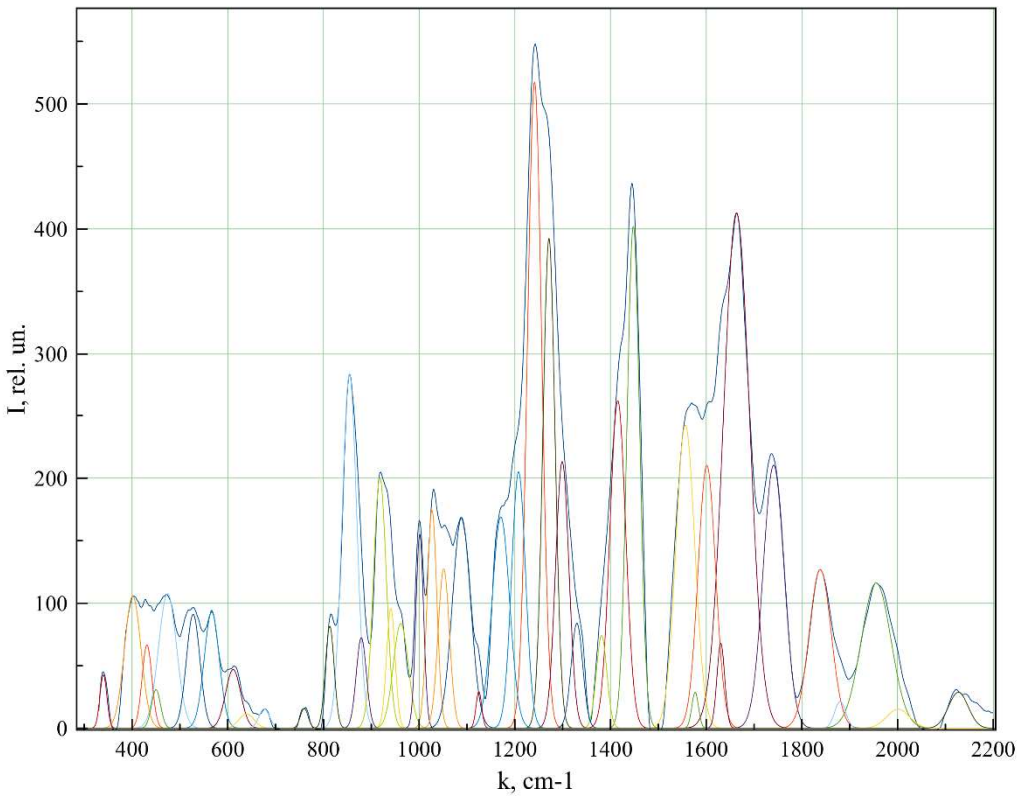


Рис. 2. Разложение спектрального контура для образцов дентина

Среднее значение коэффициента детерминации результирующего спектра от исходного в области 300…2000 $см^{-1}$ составило R^2 = 0,99, относительная погрешность определения интенсивности спектральных линий а не превышает 6 %, усреднённое стандартное отклонение координаты линии x_0 составляет 0,5 $см^{-1}$, усреднённое стандартное отклонение ширины линии (HWHM) Гаусса *dx* составило 1,8 $см^{-1}$.

Для дальнейшего анализа полученных после разделения спектральных линий исследуемых объектов был выбран метод линейного дискриминантного анализа в программной среде IBM SPSS Statistics.

На рисунке 3 представлены результаты LDA сравнения двух групп образцов. Проанализированы 64 спектра молочных зубов (32 деминерализованных в 1,2 Н растворе соляной кислоты и 32 деминерализованных в 1,8 Н растворе соляной кислоты). Дискриминантная функция LD-1 описывает дисперсию на 100 %. Положительные значения LD-1 характерны для спектров КР, полученных из материалов, деминерализованных в 1,8 Н растворе соляной кислоты.

На рисунке 4 показаны коэффициенты матрицы факторной структуры, имеющие физический смысл корреляции между переменными в модели и дискриминирующей функцией. Чем выше по модулю значение LD-1 для переменной, тем в большей степени она определяет разницу в дискриминационной модели между группами образцов.

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

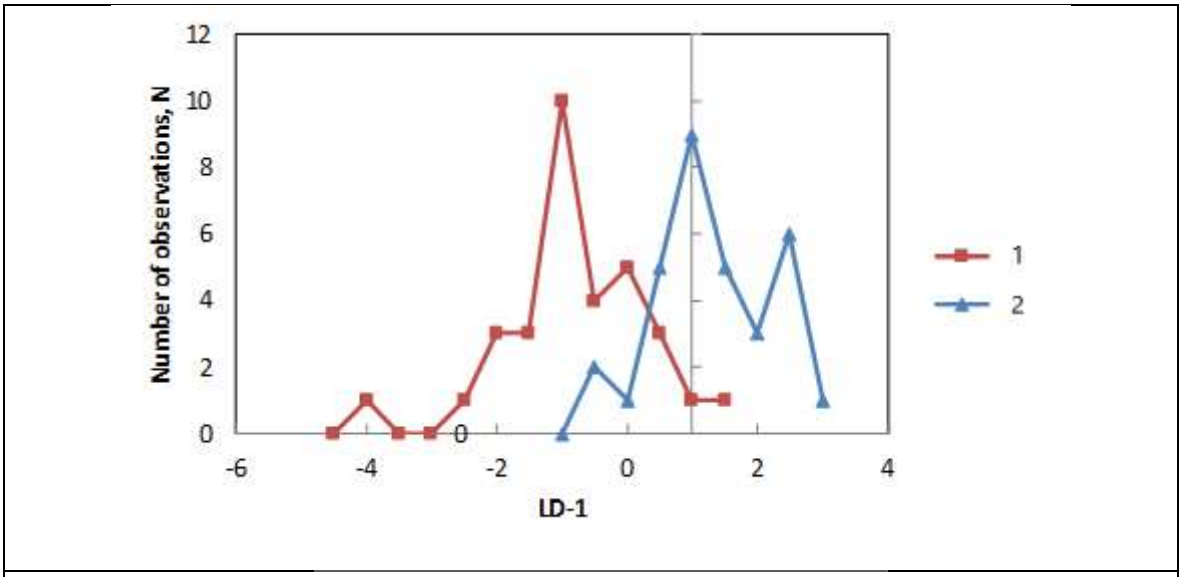


Рис. 3. График значений линейной дискриминантной функции

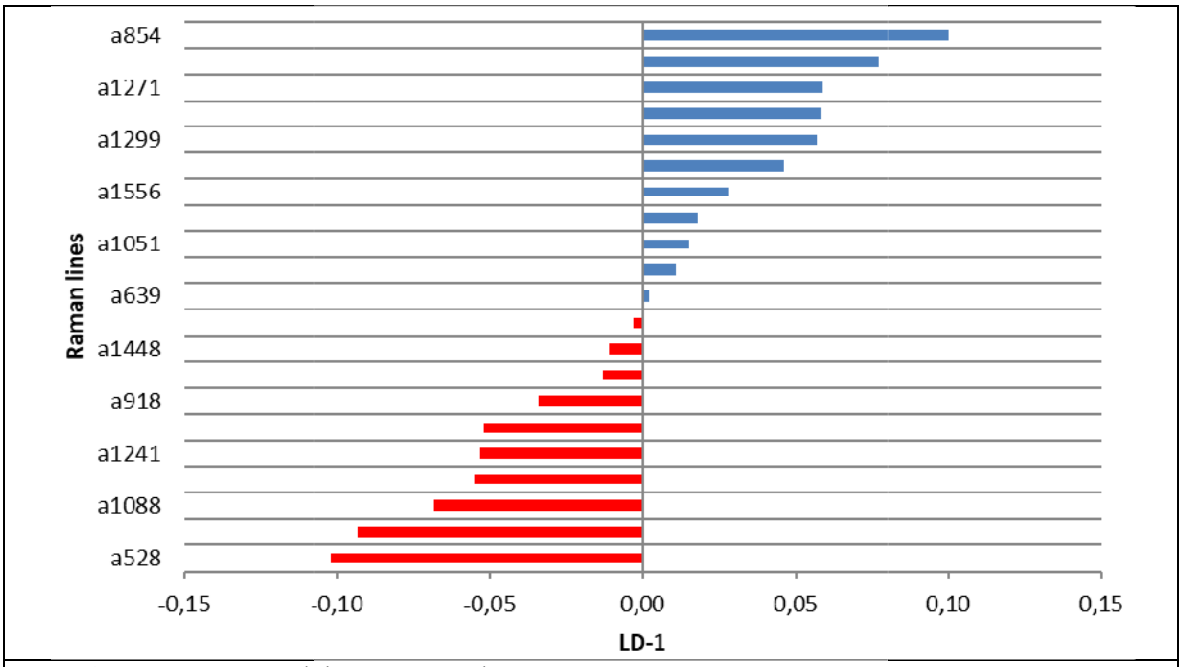


Рис. 4. Значения коэффициентов факторной структуры

Заключение

В результате проведённых исследований были установлены основные спектральные отличия биоматериалов из ювенильного дентина, деминерализованных в соляной кислоте различной степени нормальности. Показано, что деминерализация раствором 1,2 Н соляной кислоты позволяет сохранить большее количество органических компонент по сравнению с деминерализацией раствором 1,8 Н, о чем свидетельствует увеличение интенсивности линий 918 $см^{-1}$ (Proline, hydroxyproline), 1171 $см^{-1}$ (Tyrosine (collagentypeI)), 1271 $см^{-1}$ (Collagen (amideIII)), 1663 $см^{-1}$ (Proteins, includingcollagenI).

Конфликт интересов

Авторы статьи заявляют, что у них нет конфликта интересов по материалам данной статьи с третьими лицами, на момент подачи статьи в редакцию журнала, и им ничего не известно о возможных конфликтах интересов в настоящем со стороны третьих лиц.

Список литературы

1.Tanoue R., Ohta K., Miyazono Y. et al. Three-dimensional ultrastructural analysis of the interface between an implanted demineralised dentin matrix and the surrounding newly formed bone. SciRep. 2018. Vol. 8. № 2858. [Электронный ресурс]. URL: https://doi.org/10.1038/s41598-018-21291-3
2. Булатов А. А., Калинин А. В., Савельев В. И. Современные способы изготовления, стерилизации и консервации деминерализованных костных трансплантатов (обзор литературы) // Травматология и ортопедия России. 2005. № 1(34). С. 55–59.
3. Привалов В. Е., Шеманин В. Г. Экспериментальное зондирование промышленных аэродисперсных потоков // Научно-технические Ведомости СПбПУ. Физико-Математические науки. 2014. № 4(206). С. 64–73.
4. Мкртычев О. В., Привалов В. Е., Фотиади А. Э., Шеманин В. Г. Лазерная абляция нанокомпозитов // Научно-технические Ведомости СПбПУ. Физико-Математические науки. 2015. № 1 (213) С. 128–135.
5. Привалов В. Е., Шеманин В. Г. Лидарное уравнение с учётом конечной ширины линии генерации лазера // Известия РАН. 2015. Т. 79. № 2. С. 170–180.
6. Юрьев Е. М., Ушаков А. И., Серова Н. С., Багиров Э. А., Канноева М. В. Дифференциальный подход к выбору костно-пластического материала при дентальной имплантации в условиях дефицита костной ткани // Российская стоматология. 2014. № 7(4). С. 30–33.
7. Пикалюк В. С., Кутя С. А., Шадуро Д. В. Модификация методики гистологического исследования костной ткани // Морфологія. 2010.Т. IV. № 3. С. 72–76.
8. Токмакова А. Ю., Юшков П. В., Ульянова И. Н., Чернова Т. О., Анциферов М. Б. Оценка состояния костной ткани у больных с синдромом диабетической стопы // Проблемы эндокринологии. 2002. № 48(4). С. 31–35.
9. Легких А. В., Мандра Ю. В., Киселева Д. В. Метод рамановской спектроскопии как средство оценки морфологии микрорельефа поверхности зуба, а также степени минерализации твёрдых тканей зубов // Вестник Уральского государственного медицинского университета. 2015. № 2(3). С. 214–217.
10. Мандра Ю. В., Ивашов А. С., Вотяков С. Л., Киселева Д. В. Возможности применения рамановской микроспектроскопии для исследования структурных особенностей твёрдых тканей зубов // Проблемы стоматологии. 2011. № 1.С. 24–27.
11. Минаева С. А., Михайловский А. А., Антонов Е. Н., Гольдштейн Д. В., Попов В. К., Волков А. В., Морфологическое исследование твердых тканей лицевого скелета с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния // Российская стоматология. 2015. № 8(1). С. 3–10.
12. Timchenko P. E., Timchenko E. V., Volova L. T. etc. Raman spectroscopy method for the evaluation of bone bioimplants made using the «Lyoplast» technology from cadaveric and in vivo resected bone tissue // Journal of Physics: Conference Series. 2018. Vol. 1038. Issue 1.
13. Timchenko E. V.; Timchenko P. E.; Frolov O. O.; Yagofarova E. F.; Chernyy-Tkach K. B.; Zybin M. A.; Dolgushov G. G. Optical Methods for Periodontitis Early Rapid Diagnosis //Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech), IEEE 2019, № 978-1-7281-4439-9/19. P. 298–300. [Электронный ресурс]. URL: DOI 10.1109/EExPolytech.2019.8906802

14. M. Anwar Alebrahim, C. Kraffta, W. Sekhaneh, B. Sigusch and J. Popp. ATR-FTIR and Raman spectroscopy of primary and permanent teeth // Biomedical Spectroscopy and Imaging 3. 2014. P. 15–27. [Электронный ресурс]. URL: DOI 10.3233/BSI-130059
15. M. Anwar Alebrahim, C. Krafft and J. Popp. Raman imaging to study structural and chemical features of the dentin enamel junction // International Conference on Advanced Materials (ICAM 2015), IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. 2015. № 92. [Электронный ресурс]. URL: doi:10.1088/1757-899X/92/1/012014
16. Gisele Fernandes Dias, Ana Cláudia Rodrigues Chibinski, Fábio André dos Santos, Viviane Hass, Fabiana Bucholdz Teixeira Alves, Denise Stadler Wambier. The hardness and chemical changes in demineralized primary dentin treated by fluoride and glass ionomer cement // Rev. odontol. UNESP. 2016. Vol. 45. № 1. [Электронный ресурс]. URL: https://doi.org/10.1590/1807-2577.0881.

Comparative spectral analysis of different degrees of demineralization of biomaterials from juvenile teeth

[1] Timchenko E. V., [1] Timchenko P. E., [2] Volova L. T., [1] Frolov O. O., [2] Vlasov M. Yu., [1*] Shipko S. S.

[1] *443086, Russia, Samara, Samara National Research University named after Academician S. P. Korolev*
[2] *443099, Russia, Samara, Samara State Medical University, BioTech Biotechnology Centre*

Experiments on the optical evaluation by Raman spectroscopy of biomaterials from juvenile dentin demineralized with hydrochloric acid with varying degrees of normality were carried out. Each sample was cut into 2 equal parts and further divided into two main groups, according to the stages of their processing: Group 1 – biomaterials from juvenile dentin demineralized in hydrochloric acid of 1.2 N degree of normality; group 2 – biomaterials from juvenile dentin demineralized in hydrochloric acid of 1.8 N degree of normality. Demineralization was carried out in a hydrochloric acid solution using the «LIOPLAST» technology [TU-9398-001-01963143-2004]. It is shown that during the demineralization of juvenile teeth with hydrochloric acid, the degree of normality of the acid solution causes minor changes. Demineralization with 1.2 N hydrochloric acid solution preserves a large number of organic components compared to demineralization with 1.8 N hydrochloric acid solution.

Key words: juvenile dentin, Raman spectroscopy, spectral analysis, demineralized biomaterials, changes in dentin, demineralized bone graft, demineralized matrix.

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

ЛАЗЕРНЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ ИЗМЕРЕНИЯ

doi: 10.51639/2713-0568_2022_2_1_26
УДК 535.243, 535.36
ГРНТИ 29.31.26, 76.13.15
ВАК 01.04.05, 05.11.07

Неинвазивная оптико–физическая диагностика биообъектов (теоретические аспекты)

Кугейко М. М.

220030, Беларусь, г. Минск, пр-т Независимости 4,
Белорусский государственный университет

e-mail: kugeiko@bsu.by

В обзоре рассмотрены возможности оптической диагностики биологических объектов и послойной дозиметрии в них лазерного излучения, включающие: разработку быстрых и высокоточных методов расчёта пространственной освещенности в биологических объектах и потоков многократно рассеянного ими излучения; решение обратных задач оптики биотканей на основе устойчивых регрессионных соотношений между параметрами тканей и спектрально-пространственными характеристиками их обратного рассеяния, а также спектральными характеристиками их изображений; разработку методов диагностики параметров тканей и крови человека; разработку подходов к неинвазивному определению спектров действия света на хромофоры ткани и контролю эффективности фотоиндуцированных процессов в ткани при лазерной терапии.

Ключевые слова: оптическая диагностика, биообъекты, спектроскопия диффузного отражения, теория переноса, обратные задачи, регрессионные подход для обратных задач, фотодинамическая терапия, персонифицированная фототерапия.

1. Введение

Фотометрические методы, включающие колориметрию и спектрофотометрию, являются основой лабораторного анализа биообъектов. Спектрофотометрия и колориметрия – это методы, которые можно использовать для идентификации молекул в зависимости от их свойств поглощения и излучения. Хотя молекулы не имеют цвета, но если мы можем сделать из них окрашенное соединение с помощью химической реакции, то это соединение также можно будет использовать в этих методах. Кроме того, с молекулой связаны уровни энергии, и они дискретны. Следовательно, дискретные переходы между энергетическими состояниями будут происходить только при определенных дискретных энергиях. В этих методах мы измеряем поглощение и излучение, возникающие в результате этих изменений в энергетических состояниях. Таким образом, сказанное выше является основой всех фотометрических методов лабораторного медицинского анализа, требующего отбора проб.
Неинвазивные (не требующие взятия пробы) оптические методы диагностики состояния организма человека в настоящее время находят широкое применение в онкологии, хирургии, неонатологии, педиатрии, дерматологии, офтальмологии и в ряде других

областей медицины, поскольку позволяют без искажающего влияния на исследуемый объект отслеживать временную динамику его состояния и происходящие в нем структурно-морфологические изменения.

Основой неинвазивной оптической диагностики являются оптико-физические измерения, в которых информация об измеряемом объекте получается с использованием оптического диапазона длин волн. Они получили интенсивное развитие с появлением таких источников излучения как лазеры, светодиоды. Без использования современных квантовых приборов различного спектрального диапазона не могут успешно решаться задачи изучения строения различных сред и объектов, развиваться средства диагностики и контроля окружающей среды, диагностики и лечения в медицине. Практически все оптико-физические измерения относятся к классу косвенных, состоящих в определении искомого значения физической величины на основании результатов прямых измерений других физических величин, функционально связанных с искомой величиной. Важной задачей, требующей решения в косвенных оптико-физических измерениях, является интерпретация измерительной информации. В методах, где исследуется отклик среды как целого, интерпретация измерительной информации – это наиболее сложный этап. Наличие погрешностей в измерениях делает задачу обращения ещё и некорректной. Некорректность проявляется в сильной зависимости решения обратной задачи от погрешностей измерений (в неустойчивости решения). Для решения таких задач требуется использование априорной информации об объекте исследования, регуляризирующих алгоритмов [1, 2].

Задача количественной оценки определяемых параметров объекта обычно реализуется в два этапа. На первом этапе определяются оптические параметры объекта из получаемой измерительной информации. На втором этапе решается обратная задача по восстановлению определяемых параметров (микрофизических, биофизических и т. п.) из полученных значений оптических параметров.

Для обеспечения необходимой для практики точности требуется использование методов теории переноса излучения, не использующих различные приближения о доминирующем процессе взаимодействия, что, в свою очередь, требует больших вычислительных затрат и, поэтому, исключает возможность интерпретации экспериментальных данных в режиме реального времени (например, при использовании наиболее точного метода Монте-Карло (МК) [3].

Необходимость использования априорной информации, допущений об исследуемом объекте в настоящее время, например, не позволила метрологически аттестовать лазерно–локационные системы в создаваемых глобальных сетях (мировой, европейской, СНГ, РБ) мониторинга загрязнений окружающей среды, системы неинвазивной оптической диагностики биофизических параметров биообъектов и т. д. (для интерпретации измерительной информации используются дополнительные измерения).

Таким образом, в условиях априорной неопределённости эффективное использование оптико-физических методов измерений в неинвазивной диагностике биообъектов требует развития методического обеспечения интерпретации измерительной информации. Ниже рассматриваются теоретические аспекты решения этой проблемы в диагностике и терапии биообъектов.

2. Спектроскопия диффузного отражения

Неразрушающая природа света, используемого для исследования и детектирования аномалий в тканях человека, делает её весьма привлекательной для разработки новых неинвазивных диагностических методов. Среди них наиболее простыми в реализации и

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

безопасными для здоровья пациента являются методы спектроскопии диффузного отражения (ДО) [4–14].

В большинстве известных методов спектроскопии ДО для доставки излучения на исследуемый объект и сбора обратно рассеянного им светового потока используются оптические волокна. В принципе измерения могут выполняться на базе коммерчески доступных спектрометрических устройств – широкополосного источника излучения, соединенной с оптическим волокном для доставки излучения на объект, и многоканального спектрометра, соединенного с оптическими волокнами для приёма рассеянного объектом излучения с различных расстояний от области облучения. Однако возможны и другие варианты реализации измерительного устройства [9, 12, 15–18]. Общая схема устройства для спектральных измерений сигналов обратного рассеяния (СОР), в то числе и с пространственным разрешением, приведена на рис. 1 [19].

Источник света *1* может быть выполнен на основе широкополосного излучателя, например белого светодиода или лампы, или на основе набора узкополосных излучателей, например лазерных или светодиодных источников. В качестве устройства спектральной селекции *2* и *2'* могут использоваться спектрометр, монохроматор, перестраиваемый оптический фильтр или набор интерференционных светофильтров, которые могут располагаться в канале посылки зондирующего излучения или в канале регистрации рассеянного объектом излучения. Фотоприёмное устройство *5* может быть выполнено на основе фотодиодов или ПЗС-матрицы. Свет от источника излучения *1*, пропущенный через устройство спектральной селекции *2*, поступает в оптоволоконный зонд *3*, который подводит его к исследуемому объекту *4*. Рассеянное объектом излучение попадает в светопринимающие волокна *8*, подводящие его к блоку спектральной селекции *2'*, связанному с фотоприёмным устройством *5*. Сигналы с фотоприёмного устройства передаются на блок обработки измерительной информации *6*, выполняющий их количественный анализ с целью определения параметров объекта.

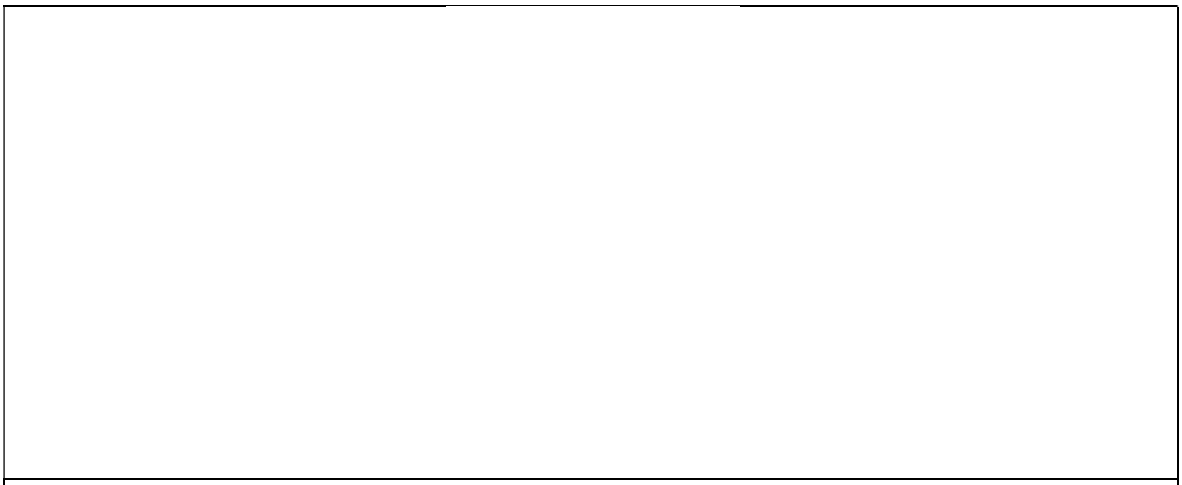


Рис. 1. Блок-схема устройства для спектральных измерений сигналов обратного рассеяния (*1* – источник света, *2* и *2'* – устройства спектральной селекции, *3* – оптоволоконный зонд, *4* – исследуемый объект, *7*– светоподводящие волокна, *8* – светопринимающие волокна, *5* – фотоприёмное устройство, *6* – блок управления источником света и обработки измерительной информации)

Исходной информацией таких измерений являются спектральные коэффициенты диффузного отражения (КДО) ткани, определяемые с использованием спектрофотометра с

интегрирующей сферой, или спектрально-пространственные характеристики поля обратно рассеянного тканью излучения (спектроскопия с пространственным разрешением), получаемые на основе оптоволоконной техники с пространственным разнесением каналов посылки и регистрации оптического излучения (рис. 1). Детектируемые сигналы, являясь суперпозицией рассеяния и поглощения ткани, несут информацию о ее структурно-морфологических параметрах (СМП) – концентрациях оптически–активных хромофоров (оксигемоглобин, деоксигемоглобин, меланин, билирубин и др.), концентрациях и размере эффективных рассеивателей ткани.

В методах спектроскопии ДО с пространственным разрешением задача количественной оценки СМП ткани решается в два этапа. На первом этапе определяют значения оптических параметров (ОП) ткани (коэффициента поглощения k и транспортного коэффициента рассеяния $\beta' = (1 - g)\beta$, где β – коэффициент рассеяния, g – фактор анизотропии рассеяния) на длинах волн оптического зондирования путём сравнения экспериментальных и рассчитанных теоретически (в рамках модели переноса света в ткани) пространственных профилей обратного рассеяния (ОР) ткани (т. е. обратно рассеянных тканью световых потоков, регистрируемых на нескольких расстояниях от области ее облучения). На втором этапе решается обратная задача по восстановлению СМП ткани из найденных спектральных значений её ОП. Таким образом, спектральные и пространственные профили ОР ткани рассматриваются независимо друг от друга. Следует также отметить, что известные методы анализа пространственных профилей ОР биотканей [7, 9, 11, 20] либо не обеспечивают необходимой для практики точности, либо требуют больших вычислительных затрат и поэтому исключают возможность оперативной количественной интерпретации экспериментальных данных.

3. Решение обратных задач оптико-физических измерений (регрессионный подход)

В работах [16–19, 21–40] предложены регрессионные методы решения обратных задач оптического зондирования светорассеивающих сред, заключающиеся в определении параметров исследуемой среды как на основе аналитических выражений, аппроксимирующих связи искомых параметров среды с измеряемыми в эксперименте оптическими сигналами (спектральными, пространственными), так и на основе одновременной обработки пространственных и спектральных характеристик её обратного рассеяния.

Эти выражения получают путём регрессионного анализа результатов статистического моделирования оптических сигналов при широкой вариации параметров среды. Важным достоинством такого подхода к интерпретации данных оптического зондирования является возможность восстановления параметров среды в режиме реального времени без привлечения для этого априорной информации (если реальные значения параметров среды не выходят за пределы выборки, используемой для получения статистического оператора решения обратной задачи). Кроме того, он позволяет получить представление о потенциальной точности восстановления искомых параметров с учетом особенностей реальной аппаратуры и имеющейся априорной информации, исследовать влияние количества и точности оптических измерений на устойчивость решения обратной задачи, дает возможность определять параметры среды в тех случаях, когда объём экспериментальных данных не достаточен для использования строгих математических методов решения некорректных обратных задач.

Разработанный регрессионный подход к решению обратных задач оптического зондирования биологических и аэродисперсных сред [21–22] включает извлечение из

регистрируемых оптических сигналов линейно–независимых компонент, как проекций сигналов на пространство из собственных векторов их ковариационной матрицы, и определение искомых параметров среды на основе их устойчивых регрессионных связей с линейно-независимыми компонентами сигналов. Использование в регрессиях линейно-независимых величин, соответствует извлечению из исходных (обращаемых) данных «полезного сигнала» и отбрасыванию «шума», что позволяет строить решения обратных задач, устойчивые к случайным «возмущениям» этих данных. Вышеотмеченные собственные векторы и регрессионные решения обратных задач получают путём статистического моделирования оптических сигналов при максимальной вариативности параметров среды, влияющих на процесс переноса в ней излучения. В последующем это позволяет выполнять оперативную обработку измеряемых оптических сигналов без решения уравнения переноса излучения в исследуемой среде, доопределения и регуляризации обратной задачи. Оптимальная размерность собственного базиса ковариационной матрицы обращаемых данных, используемого для их разложения на линейно-независимые компоненты, определяется на основе замкнутых численных экспериментов по восстановлению параметров среды из характеристик ее светорассеяния. Для этого первоначально на основе смоделированного ансамбля реализаций вектора измерений **r** формируется «тестовый» ансамбль, в котором каждая реализация **r** получена путем наложения на компоненты исходного вектора **r** случайных отклонений в пределах погрешности измерений δ**r**. Далее перебираются все реализации «тестового» ансамбля и для каждой из них осуществляется решение обратной задачи по формулам регрессии между модельными параметрами **x** и линейно-независимыми величинами **ξ**, составленными из компонентов **r,** устанавливаемыми с использованием метода главных компонент. Получаемые в итоге значения модельных параметров x^* сравниваются с их фактическими значениями **x**, и рассчитываются погрешности их восстановления. В соответствии с этим выбирается количество линейно-независимых компонентов обращаемых данных при заданной погрешности измерений и характеристики светорассеяния среды, по которым можно наиболее точно определять конкретные параметры среды в условиях априорной неопределенности всех других. Это также позволяет оценить информативность измеряемых данных, получить представление о теоретически достижимой точности восстановления из них параметров среды, исследовать влияние количества и точности оптических измерений на точность решения обратной задачи.

В большинстве случаев связь между **x** и **ξ** достаточно хорошо описывается полиномиальными функциями следующего вида (1) [21–22]:

$$x_p = a_{00}^p + \sum_{n=1}^{N_{LIC}} \sum_{m=1}^{M} a_{nm}^p \left(\xi_n\right)^m , \qquad (1)$$

где a_{nm}^p – коэффициенты регрессий, зависящие от конструктивных параметров оптоволоконного датчика (диаметры оптических волокон, их геометрическая конфигурация, числовые апертуры) и длин волн оптического зондирования; M – степень полинома, которая выбирается исходя из значения остаточной дисперсии (как правило, для аппроксимации статистической связи между **x** и **ξ** достаточно использовать $M = 3–6$); N_{LIC} – количество собственных векторов, используемых для разложения **r**; **ξ** – линейно-независимые компоненты регистрируемых сигналов.

Таким образом, предлагаемый метод определения СМП биоткани, включает посылку на ткань света, регистрацию СОР $P(L, \lambda)$ не менее чем на двух расстояниях L от области освещения ткани, определение нормированных сигналов $r(L, \lambda) = P(L, \lambda)/P(L_0, \lambda)$, нахождение проекций **ξ** сигналов $r(L, \lambda)$ на пространство из собственных векторов их

ковариационной матрицы и использование выражений (1) для преобразования проекций $\boldsymbol{\xi}$ в искомые параметры.

В тех случаях, когда объём измеряемой информации небольшой, а спектрально-пространственные отсчёты СОР линейно независимы, определять искомые параметры ткани **x** можно напрямую из измеряемых сигналов $r(L, \lambda)$, т. е. без извлечения из них линейно-независимых компонент. При этом также удобно использовать полиномиальные регрессии вида (2) [21, 22]:

$$x_p = a_{000}^p + \sum_{i=1}^{N_L}\sum_{j=1}^{N_\lambda}\sum_{m=1}^{M} a_{ijm}^p \left[\ln r\left(L_i, \lambda_j\right)\right]^m . \qquad (2)$$

где a_{ijm}^p – коэффициенты регрессии.

Так, например, в [24–27] на основе оптических моделей кожи и слизистых оболочек человека, а также метода Монте-Карло (МК) для решения уравнения переноса в них излучения, получены устойчивые регрессионные решения обратных задач спектроскопии биотканей с пространственным разрешением, позволяющие определять оптические (коэффициент поглощения, транспортный коэффициент рассеяния, фактор анизотропии индикатрисы рассеяния) и структурно-морфологические (концентрации меланина, общего гемоглобина и билирубина в ткани; степень оксигенации крови; средний диаметр кровеносных сосудов; концентрация и размер эффективных рассеивателей) параметры тканей напрямую из сигналов их обратного рассеяния (ОР), регистрируемых на основе волоконно-оптической техники с пространственным разнесением каналов посылки и приема излучения. Рассмотрена геометрическая схема измерений сигналов обратного рассеяния (СОР) слизистых оболочек, в которой излучение инжектируются в среду посредством волокна с диаметром 0,2 мм, а обратно рассеянное излучение собирается принимающими волокнами, расположенными на расстояниях L = 0,23; 0,46; 0,69; 0,92; 1,15 мм от центра светоподводящего волокна (диаметр принимающих волокон 0,2 мм). Такая геометрия измерений позволяет обеспечить приемлемую для практики величину оптического сигнала (не менее 10^{-4} мощности зондирующего светового пучка) в спектральной области сильного поглощения света хромофорами биоткани ($\lambda < 600$ нм) при максимальном расстоянии между освещающем и приёмным волокнами, не превышающем диаметр инструментального канала эндоскопа.

Оценены погрешности восстановления параметров тканей, вызванные их статистическим разбросом и погрешностями оптических измерений. Результаты замкнутых численных экспериментов по восстановлению оптических и структурно-морфологических параметров слизистых оболочек человека приведены в таблице.

Из результатов, представленных в таблице, видно, что совместная обработка спектральных и пространственных характеристик ОР ткани позволяет 2…3 раза уменьшить погрешность восстановления ОП ткани по сравнению результатами их восстановления только из спектральных или только из пространственных характеристик ОР.

Таблица

Средние погрешности восстановления ОП из спектральных $P(\lambda)$, пространственных $P(L)$ и спектрально-пространственных $P(L, \lambda)$ отсчетов сигнала обратного рассеяния

λ, нм	$P(\lambda)$		$P(L)$		$P(L, \lambda)$	
	δk, %	$\delta\beta'$, %	δk, %	$\delta\beta'$, %	δk, %	$\delta\beta'$, %
514	9,5	9,3	8,4	7,7	3,1	3,5
633	15,5	8,3	15,6	5,8	7,1	3,5

Возможности регрессионного подхода к планированию экспериментов по оптическому зондированию рассеивающих сред продемонстрированы в работах [23, 28–36], в которых проведен анализ информативности спектральных коэффициентов ослабления и направленного светорассеяния разбавленной крови, аэрозолей естественного и антропогенного происхождений, выбраны длины волн оптического зондирования и углы приема рассеянного излучения, оптимальные для определения микрофизических параметров эритроцитов и аэрозолей (показателя преломления, счётной и объёмной концентраций, характеристик распределения частиц по размерам), получены соответствующие множественные регрессии, позволяющие определять искомые микрофизические параметры в широких пределах их вариаций без решения некорректных обратных задач. Использование полученных регрессий хорошо согласуются с расчётными и экспериментальными данными глобальной сети мониторинга аэрозоля AERONET и установленными экспериментально парными оптико-микроструктурными корреляциями для стратосферного и приземного аэрозолей [35, 36].

Предложено решение обратной задачи реконструкции двумерных распределений структурно-морфологических параметров (СМП) тканей человека по их мультиспектральным изображениям [37–40]. Для устранения влияния неравномерной освещенности и геометрии съемки ткани на результаты восстановления её параметрических карт используются изображения ткани, нормированные на один из своих спектральных слоёв. Обратная задача состоит в восстановлении СМП ткани из спектральных значений каждого пикселя нормированного изображения. Для её решения используются регрессионные соотношения, предварительно полученные на основе репрезентативной выборки спектра диффузного отражения (ДО) среды, моделирующей исследуемую ткань. Устойчивость регрессионных операторов преобразования изображений тканей в параметрические карты к погрешностям измерений обеспечивается за счёт использования для решения обратной задачи линейно-независимых составляющих изображения, получаемых путем проекций спектральных значений каждого пикселя на собственные векторы ковариационной матрицы спектра ДО ткани. На этой основе разработаны и запатентованы методы оперативной реконструкции двумерных распределений СМП кожи, слизистых оболочек и глазного дна (ГД) человека по их мультиспектральным изображениям. Выбраны рабочие длины волн методов, обеспечивающие наибольшую точность и устойчивость решения обратных задач в условиях общей вариативности всех параметров тканей, влияющих на их спектры ДО. Показано, что по мультиспектральным изображениям слизистых оболочек человека, в их представлении однородной средой, можно определять: степень оксигенации крови S, средний диаметр сосудов, параметр спектральной зависимости транспортного коэффициента рассеяния среды, характеризующий размер эффективных рассеивателей ткани и отношение концентрации общего гемоглобина в среде (локализованного в сосудах) к её транспортному коэффициенту рассеяния на $\lambda = 632$ нм. Последний параметр условно назван гемоглобиновым индексом ткани.

На разработанные методы оперативной реконструкции двумерных распределений СМП кожи, слизистых оболочек и глазного дна человека получены патенты (Патенты BY 10918 C1, 2008; BY 19144 C1, 2015; RU 2510506 C, 2014; RU 2506567 C1, 2014; RU 2511747 C2, 2014; BY 18652 C1, 2014; RU 2501522 C2, 2013; BY 18653 C1, 2014; RU 2517155 C1, 2014; RU 2536217 C1, 2014; RU 2539367 C1, 2014). Выбраны рабочие длины волн методов, обеспечивающие наибольшую точность и устойчивость решения обратных задач в условиях общей вариативности всех параметров тканей, влияющих на их спектры ДО.

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

4. Развитие теории переноса излучения

Рассмотренный выше регрессионный подход к количественному анализу характеристик светорассеяния биологических тканей позволят с успехом решать широкий круг практических задач и обладает рядом важных достоинств. Во-первых, он позволяет в реальном масштабе времени обрабатывать экспериментальные данные и вести непрерывный мониторинг параметров ткани, например во время хирургических операций, терапевтических процедур или в ходе проведения эндоскопического обследования. Во-вторых, регрессионный метод дает возможность определять искомые параметры ткани в тех случаях, когда объем экспериментальных данных не достаточен для использования строгих математических методов решения некорректных обратных задач. И наконец, интерпретация экспериментальных данных на основе предварительно построенных регрессионных соотношений не требует привлечения сложных алгоритмов и компьютерных кодов, а также больших затрат вычислительных ресурсов, что позволяет в реальном времени обрабатывать большие объёмы экспериментальных данных, содержащиеся в мультиспектральных изображениях биотканей [22].

В тоже время, регрессионный метод не позволяет выполнять тонкий анализ характеристик светорассеяния ткани, например, выявлять в них особенности, обусловленные малыми вариациями компонентного состава крови. В частности, это относится к содержанию дисгемоглобинов в крови (карбоки-, мет- и сульфгемоглобина), спектры поглощения которых существенно перекрываются с аналогичными спектрами основных форм гемоглобина (окси- и деоксигемоглобина). Малые вариации спектра ОР ткани, обусловленные вариациями гемоглобинного состава, в значительной степени усредняются по статистическому материалу, используемому для получения регрессий, что делает регрессионный метод слабо чувствительным к концентрации каждой конкретной формы гемоглобина в условиях их общей вариативности. В этих условиях значительно более высокая точность оценки искомых параметров может быть достигнута путем измерений спектра ОР ткани с высоким спектральным разрешением и последующего решения обратной задачи, заключающейся в моделировании теоретического спектра по отношению к экспериментальному, и сравнении их путём подбора модельных параметров. Высокое спектральное разрешение исходных данных обеспечивает устойчивость обратной задачи к погрешностям оптических измерений и устраняет неоднозначность её решения в рамках используемой модели биоткани. Сложность здесь заключается в адекватном теоретическом расчёте характеристик ОР ткани.

Расчёт оптических сигналов, измеряемых при помощи волоконно-оптических датчиков, осуществляется с использованием диффузионного приближения (ДП) теории переноса излучения [41], метода Монте-Карло (МК) [42] или заранее построенных «look-up» таблиц (расчётных или эмпирических) [43]. Диффузное приближение далеко не всегда обеспечивает требуемую точность и накладывает ряд ограничений на геометрию схемы измерений рассеянного тканью излучения и используемый спектральный диапазон. Метод МК не имеет подобных ограничений и позволяет рассчитывать пространственные характеристики световых полей в среде с учетом ее многослойного строения, конечного размера падающего пучка и отражения света от границ среды. Однако при всех неоспоримых достоинствах метода МК он требует больших затрат машинного времени, что существенно затрудняет его практическое использование.

Сокращение времени расчётов может быть достигнуто путём сохранения результатов базовых вычислений в таблицах, к которым в последующем может быть осуществлён быстрый доступ. Часто подобные таблицы получают на основе измерений пространственного профиля рассеянного назад светового потока для множества

калибровочных образцов с известными оптическими параметрами [11, 44]. Известны также различные аналитические выражения, аппроксимирующие расчетные или эмпирические «look-up» таблицы [9, 11, 14, 45]. При этом предполагается, что детектируемые сигналы зависят лишь от двух оптических параметров среды – коэффициента поглощения k и транспортного коэффициента рассеяния β'. В тоже время известно, что потоки обратно рассеянного излучения, регистрируемые на расстояниях от точки освещения $\rho = 0{,}3l_{ph} - 10l_{ph}$, где $l_{ph} = (k + \beta')^{-1}$ – средняя транспортная длина пробега фотона, зависят также от первого и второго моментов индикатрисы рассеяния среды [50]. Кроме того, диффузный свет, прежде чем дойти от источника к приёмнику, многократно переотражается между внутренними слоями и поверхностью среды. Соответствующий коэффициент отражения зависит от показателя преломления среды n и для диапазона $n = 1{,}35…1{,}50$, типичного для большинства биотканей, составляет примерно 50…60 % [46]. Очевидно, что это обстоятельство не может не влиять на детектируемые сигналы. Кроме того, большинство биотканей состоят из нескольких слоев с различающимися ОП и геометрическими толщинами, поэтому интерпретация сигналов их ОР в рамках модели однородной среды не всегда правомерна. Очевидно, что узкая область применимости известных аналитических моделей переноса света в ткани, невозможность учёта слоистости ткани, вариаций её фактора анизотропии рассеяния и показателя преломления не позволяют проводить корректное сравнение теоретических расчетов с экспериментальными данными и существенно влияют на точность оптической диагностики параметров ткани.

С целью повышения точности решения прямых и обратных задач спектроскопии ДО биотканей разработаны аппроксимационные аналоги метода МК для быстрых расчётов следующих характеристик переноса излучения [21, 22]:

1) коэффициента диффузного отражения R – отношение диффузно-отражённого средой потока к падающему на неё коллимированному потоку;

2) нормированного СОР $r = P(L) / P_0$, где P_0 – мощность коллимированного света, падающего на среду; $P(L)$ – мощность диффузного излучения, выходящего с площадки на поверхности среды на расстоянии L от области падающего света;

Алгоритм получения аппроксимирующих функций для рассматриваемых характеристик кожной ткани можно представить в следующем виде. Генерировались случайные значения модельных параметров из диапазонов их вариаций. Для каждой реализации модельных параметров рассчитывались коэффициенты поглощения эпидермиса $k_e(\lambda)$ и дермы $k_d(\lambda)$, а также транспортный коэффициент рассеяния ткани обоих слоёв $\beta'(\lambda)$ на 30 длинах волн λ, равномерно распределённых в диапазоне 450…800 нм. В качестве индикатрисы рассеяния ткани использовалась функция Хеньи – Гринштейна с эмпирическим параметром анизотропии. В соответствии с полученными значениями ОП ткани n_{sk}, L_e, $k_e(\lambda)$, $k_d(\lambda)$, $\beta'(\lambda)$ и $g(\lambda)$ методом МК рассчитывались характеристики переноса в ней излучения.

В частности, получены аппроксимационные выражения для расчёта спектра диффузного пропускания кюветы с цельной кровью в зависимости от биохимического состава крови и морфологических параметров эритроцитов [22, 47], а также для расчёта спектрально-пространственных характеристик ДО и ОР кожи, слизистых оболочек, бульбарной конъюнктивы и глазного дна человека в зависимости от их оптических и структурных параметров [22, 48–53], проведён анализ эффективности использования полученных выражений для решения обратных задач оптики биотканей.

Особо следует отметить разработанные аппроксимационные аналоги метода МК для быстрых расчётов характеристик переноса излучения в однородной и двухслойной многократно рассеивающих средах.

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

Так, аналитическая модель КДО однородной, полубесконечной среды с коэффициентом поглощения $k = 0{,}004…7{,}0$ мм$^{-1}$, транспортным коэффициентом рассеяния $\beta' = 0{,}3…5{,}1$ мм$^{-1}$, средним косинусом индикатрисы рассеяния $g = 0{,}5…0{,}97$ и показателем преломления $\eta = 1{,}35…1{,}45$ основана на следующей аппроксимационной формуле [22, 47]:

$$\ln R = A + \sum_{m=1}^{3}(a_m[\ln(kz_0)]^m + b_m[\ln(\beta' z_0)]^m) + \sum_{m=1}^{3}\left(c_m\left[\ln\left(\frac{\beta' z_0}{1-g}\right)\right]^m + d_m[\ln(\eta)]^m\right),$$

где $z_0 = [3k(k+\beta')]^{-1/2}$ – диффузионная глубина проникновения света в среду, A, a_m, b_m, c_m и d_m – числовые коэффициенты, рассчитанные путём численного моделирования переноса излучения в среде. Максимальная погрешность вычисления R для указанных значений ОП среды – 4 %, средняя погрешность – 0,9 %. Аналитическая аппроксимация позволяет моделировать КДО большинства биотканей и многих сред небиологического происхождения в спектральных областях сильного и слабого поглощения в них света.

Аналогичная модель для двухслойной среды основана на представлении КДО в виде произведения эффективных пропусканий света слоями, с учётом его многократного рассеяния и переотражения между ними [54]. Предложенные здесь формулы с высокой точностью аппроксимируют результаты численных расчётов КДО. Относительная среднеквадратическая погрешность расчёта КДО среды в диапазоне $R = 0{,}01…0{,}60$ составляет 0,65 %. КДО кожи, рассчитанные методом МК $R_{МК}$ и аналитически R, сопоставлены на рис. 2. Видно, что предложенные формулы с высокой точностью аппроксимируют результаты численных расчетов КДО.

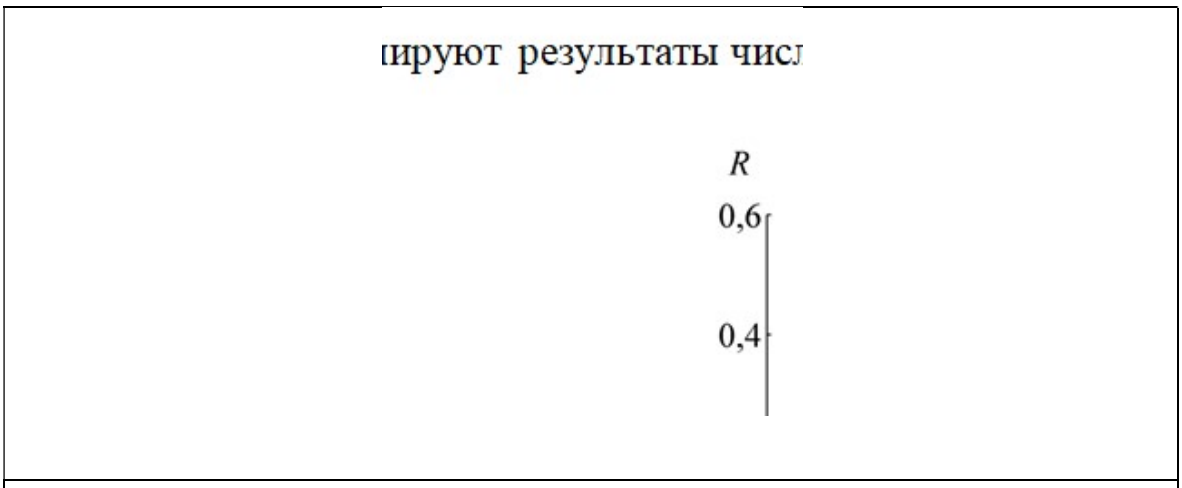


Рис. 2. Сопоставление КДО двухслойной среды, моделирующей кожную ткань, рассчитанных методом МК (ось абсцисс) и аналитически (ось ординат)

Таким образом, разработанные быстрые методы расчёта спектрально-пространственных характеристик поля излучения, формируемого процессами обратного рассеяния, диффузного отражения и пропускания биологическими объектами (кожей, слизистыми оболочками, бульбарной конъюнктивой, глазным дном и кровью человека), основанные на аналитических аппроксимациях зависимостей характеристик переноса излучения в исследуемых объектах от их оптических и структурных параметров, обеспечивают точность расчётов, сравнимую с методом МК. Это, в свою очередь, позволяет уточнить последующее решение обратной задачи, заключающееся в моделировании теоретического спектра по отношению к экспериментальному путём подбора модельных параметров, а также обработку в реальном времени больших объёмов экспериментальных данных,

содержащихся в мультиспектральных изображениях биотканей. Высокое спектральное разрешение исходных данных обеспечивает устойчивость обратной задачи к погрешностям оптических измерений и устраняет неоднозначность её решения в рамках используемой модели биоткани.

5. Фотодинамическая терапия

Послойная дозиметрия лазерного излучения в биологических тканях – важное направление исследований в лазерной биофизике, целью которой является разработка комплекса методов и средств определения параметров лазерного излучения и индуцируемых им процессов в заданном слое ткани для оценки степени деструктивного воздействия излучения на ткань и обеспечения положительного терапевтического эффекта. Корректное определение дозы облучения различных слоёв биоткани необходимо при выборе оптимальной стратегии проведения фотохимической, фотодинамической, светогипертермической терапии онкологических и многих других заболеваний, а также при коагуляции лазерным излучением поверхностных сосудов.

Эффективность различных механизмов воздействия света на биоткань пропорциональна световой мощности, поглощенной хромофором–мишенью в ткани (молекулярный кислород, фотосенсибилизатор, оксигемоглобин, билирубин и т. д.). Увеличение дозы облучения обеспечивает пропорциональный рост поглощенной световой мощности, но может вызывать ряд отрицательных эффектов передозировки лазерного воздействия. Из-за экранирующего эффекта биоткани и вариаций её оптических свойств мощность воздействующего излучения не связана напрямую со световой мощностью, поглощённой хромофором-мишенью. При этом далеко не все параметры, определяющие свойства биоткани и характер распространения в ней лазерного излучения, могут быть непосредственно измерены экспериментально.

На практике длина волны лазерного излучения и доза облучения, как правило, выбираются исходя из опыта врача и статистически накопленной информации либо на основании результатов моделирования спектра световой мощности, поглощаемой хромофором–мишенью, при средних или выборочных значениях оптических параметров биоткани. Достоверность такого подхода невысока и не позволяет стандартизировать методы лазерной терапии больных с одинаковой патологией, поскольку для обеспечения требуемого терапевтического эффекта выбор параметров лазерного излучения должен осуществляться с учетом оптических свойств реально облучаемой ткани пациента.

Известно большое количество публикаций, посвященных выработке оптимальной стратегии терапевтического воздействия света на биоткани. Так, в работе [55], исходя из результатов численного моделирования светового поля в коже человека при выборочных значениях её параметров, даются рекомендации по спектральной оптимизации методов светотерапии различных заболеваний. Однако данные рекомендации носят качественный характер и их практическое использование для выбора оптимальных спектральных и энергетических параметров лазерного излучения в каждом конкретном случае затруднено из-за отсутствия надежных данных по ОП реально облучаемой ткани. Накопленные к настоящему времени данные по ОП тканей организма человека относятся большей частью к тканям *in vitro*, характеристики которых могут существенно изменяться по сравнению с тканями в условиях *in vivo*.

В работах [56, 57] об эффективности проведения фотодинамической терапии (ФДТ) предлагается косвенно судить по уровню оксигенации ткани и концентрации в ней фотосенсибилизатора (ФС). Мониторинг концентрации кислорода в ткани позволяет поддерживать её на уровне, необходимом для эффективной терапии патологии, например,

за счёт использования явления фотодиссоциации гемоглобина под действием света. Знание концентрации ФС позволяет контролировать его расход в фотохимических реакциях с участием кислорода. Тем не менее, этих двух параметров недостаточно для адекватной оценки эффективности фотофизических и фотохимических процессов в облучаемой ткани. Для корректного решения задач дозиметрии лазерного излучения и всестороннего анализа эффективности ФДТ необходимо знание целого комплекса параметров [58, 59]: абсолютных концентраций ФС и молекулярного кислорода в ткани; объемной концентрации капилляров и их среднего диаметра; соотношения концентраций различных форм гемоглобина; глубины проникновения света в ткань; распределение плотности излучения в ткани и световой мощности, поглощаемой эндогенными (естественными) и экзогенными (специально введенными) хромофорами ткани. Причём, для выбора оптимальных спектральных и энергетических характеристик лазерного излучения все параметры, характеризующие процессы переноса излучения в среде и его взаимодействия с веществом среды, должны быть представлены в зависимости от длины волны света.

Количественной мерой эффективности фотофизических и фотохимических процессов в облучаемой ткани, связанных с поглощением света её хромофором X, может служить спектр действия света на данный хромофор (3) [57, 60]:

$$K_X(z,\ \lambda) = C_X(z)k_X(\lambda)\Phi(z,\ \lambda), \qquad (3)$$

где C_X и k_X – концентрация и коэффициент поглощения хромофора, $\Phi(z, \lambda)$ – спектр плотности излучения на глубине ткани z (пространственная освещённость), Вт/м^2.

До последнего времени в научной литературе отсутствовали публикации по определению спектров действия света на хромофоры ткани *in vivo*, поскольку для этого необходимо знать характеристики светового поля в глубине ткани. Между тем, знание функций $K_X(z, \lambda)$ играет ключевую роль при решении задачи послойной дозиметрии лазерного излучения в тканях человека, поскольку позволяет при проведении сеансов лазерной терапии учитывать индивидуальные особенности ткани пациента, а также выбирать наиболее эффективные для него спектральные и энергетические параметры фотовоздействия. В связи с этим, разработка методов неинвазивного определения функций $K_X(z, \lambda)$ для хромофоров биоткани является чрезвычайно актуальной задачей, имеющей большое практическое значение.

Идея, положенная в основу предлагаемого неинвазивного определения функций $K_X(z, \lambda)$, состоит в следующем [22, 61–67]. Известно, что световое поле внутри биоткани и поле излучения, рассеянного ею в обратном направлении, определяются одними и теми же параметрами ткани [22, 60, 63]. Характеристики поля обратно рассеянного излучения могут быть непосредственно измерены в эксперименте, а оптически значимые параметры ткани установлены путём решения соответствующей обратной задачи [22, 51–54]. Далее можно с использованием теории переноса излучения рассчитать все необходимые спектральные и пространственные характеристики светового поля внутри ткани, а также глубинные распределения спектров действия света на её хромофоры. Таким образом, параметры фотовоздействия, обеспечивающие оптимальный терапевтический эффект, можно выбирать по характеристикам обратно рассеянного тканью излучения. Однако для этого необходимы быстрые и надежные методы расчёта характеристик световых полей внутри и вне облучаемой ткани.

Разработан простой и быстрый (инженерный) метод расчёта КДО многослойной среды и распределения в ней светового потока, допускающий простую компьютерную реализацию и позволяющий эффективно решать задачи оперативной оптической диагностики и послойной дозиметрии широкого класса биотканей [22, 62]. Поле излучения в среде описывается суперпозицией падающего коллимированного, падающего диффузного и

отраженного диффузного потоков. Световые потоки в соседних элементарных слоях среды и на её поверхности связаны простыми матричными операторами, полученными сочетанием асимптотических формул теории переноса излучения с приближением однократного рассеяния. Сравнение результатов расчёта световых потоков в пятислойной среде, моделирующей кожу человека, инженерным методом и методом МК показывает, что они сопоставимы по точности при существенном различии вычислительных затрат. Исследованы возможности разработанного метода для решения задачи диагностики биотканей и послойной дозиметрии в них лазерного излучения.

В [22, 61, 63–64] предложена и обоснована методика восстановления распределения освещённости по глубине многослойной ткани и спектров действия света на её хромофоры из спектральных характеристик её многократного рассеяния (КДО или СОР). Физической основой такого восстановления является зависимость глубины проникновения света в ткань от λ. Зондирующее излучение с различной λ проникает в различные слои ткани и поэтому содержит информацию об этих слоях. Оперативность и точность оценки освещённости слоёв биоткани, необходимой для контроля эффективности сеансов фототерапии, достигаются за счёт использования для решения прямой и обратной задач разработанных [22, 62] методов расчёта характеристик переноса излучения в рассеивающих средах. Предложенная методика позволяет контролировать эффективность светоиндуцированных процессов в ткани пациента при лазерной терапии, оценивать степень термического повреждения ткани, выбирать оптимальные спектральные и энергетические параметры лазерного излучения и проводить их коррекцию в ходе сеанса терапии, повышающую эффективность лечения. Возможности методики демонстрируется на примерах определения спектров действия света на фотосенсибилизатор и оксигемоглобин при фотодинамической терапии, а также скорости фотоизомеризации билирубина при фототерапии желтухи у новорожденных.

В [22, 66–67] предложена методика контроля эффективности ФДТ биоткани, предполагающая периодические измерения спектра обратного рассеяния ткани, восстановление из него оптических и структурно-морфологических параметров ткани и вычисление спектральных и энергетических характеристик светового поля внутри среды с использованием разработанных методов. При анализе измеряемого спектра учитывается присутствие в ткани таких хромофоров, как меланин, билирубин, бета-каротин, окси- и деоксигемоглобин, а также поглощение света фотосенсибилизатором обескровленной тканью-основой и метгемоглобином, образующимся под воздействием лазерного излучения.

Влияние всех этих факторов на точность определения глубинных распределений спектров действия света на фотосенсибилизатор и оксигемоглобин исследовано путём численного моделирования процесса перенос излучения в биоткани. Эффективность определения спектра действия света $K_{ps}(z, \lambda)$ на фотосенсибилизатор (ФС) «Фотосенс» и скорости фотодиссоциации оксигемоглобина $n(z, \lambda)$ по спектру ОР кожи $\omega(\lambda) = r(\lambda) / r(800\ \text{нм})$ иллюстрирует рис. 3). Под функцией $K_{ps}(z, \lambda)$ понимается световая мощность, поглощаемая ФС в единичном объеме ткани на глубине z. Функция $n(z, \lambda)$ характеризует количество молекул кислорода, образующихся за единицу времени в единице объёма ткани на глубине z, за счёт лазерно-индуцированной фотодиссоциации оксигемоглобина (HbO_2).

Пусть сигнал ОР измеряют при диаметрах круговых осветительной и приемной площадок на поверхности среды 0,8 мм и расстоянии между их центрами 0,83 мм. Спектр $\omega(\lambda)$, смоделированный методом МК в соответствии с заданной геометрией измерений, представлен на рис. 3*а*. Распределения освещённости по глубине среды $\Phi(z, \lambda)$ на $\lambda = 575$ и 675 нм, рассчитанные методом МК при заданных значениях модельных параметров и

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

разработанным инженерным методом при восстановленных значениях модельных параметров, представлены на рис. 3*б*. Функции $K_{\mathrm{ps}}(\lambda) = \int_{z_1}^{z_2} K_{\mathrm{ps}}(z, \lambda)dz$ и $n(\lambda) = \int_{z_1}^{z_2} n(z, \lambda)dz$, рассчитанные методом МК для трёх слоёв среды $[z_1, z_2]$, и реконструированные по спектру ω(λ) сопоставлены на рис. 3 *в*, *г*.
Видно, что небольшие различия между истинными и восстановленными профилями $K_{\mathrm{ps}}(\lambda)$ и $n(\lambda)$ имеют место лишь для глубоких слоёв среды, в которые видимый свет практически не проникает.

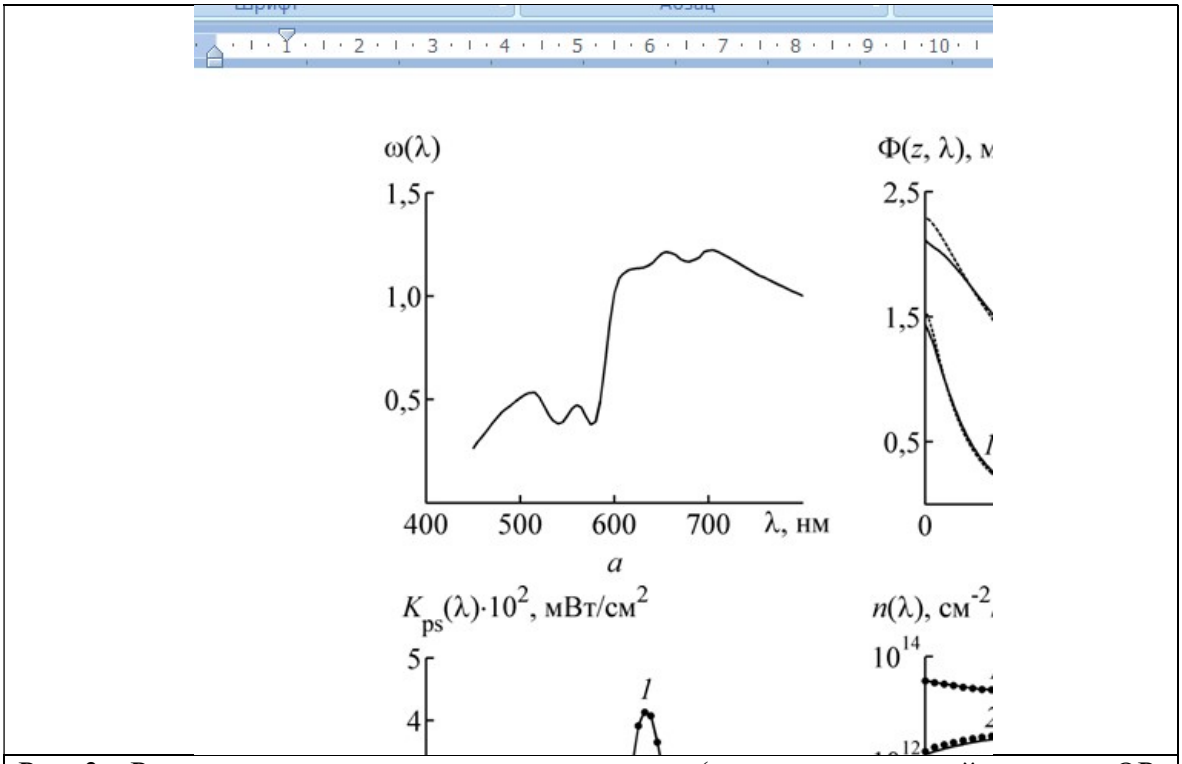


Рис. 3. Результаты численного эксперимента (*а* – спектральный сигнал ОР, нормированный на λ = 800 нм; *б* – истинные (сплошные кривые) и восстановленные (пунктир) распределения полной освещённости по глубине среды на λ = 575 (*1*) и 675 нм (*2*); *в* – истинные (точки) и восстановленные (пунктир) спектральные эффективности поглощения света ФС; *г* – истинные (точки) и восстановленные (пунктир) спектральные эффективности фотодиссоциации HbO_2; *1* – z_1 = 0,1 мм, z_2 = 1,0 мм; *2* – z_1 = 1,0 мм, z_2 = 2,0 мм; *3* – z_1 = 3,0 мм, z_2 = 5,0 мм)

Разработан также метод неинвазивного определения скорости трансформации токсичного ZZ-билирубина в его водорастворимый структурный фотоизомер люмирубин в единичном объёме кожи при фототерапии неонатальной желтухи с учётом текущей концентрации конфигурационных фотоизомеров билирубина (ZZ-билирубина, ZE-билирубина) и плотности излучения в среде [65, 67–70]. Позволяет выбирать освещённость кожи новорожденного, обеспечивающую требуемый терапевтический эффект при минимальной дозе облучения, а также оценивать эффективности лечения с использованием различных фототерапевтических установок [65, 67–70]. Показано, что для достижения максимальной эффективности лечения следует использовать свет из спектрального диапазона 484…496 нм.

Изложенное выше является базой персонифицированной фототерапии тканей человека с контролем эффективности доставки излучения в заданный слой ткани и спектров действия света на её эндогенные (естественные) и экзогенные (специально введённые) хромофоры, основанной на измерении спектра обратного рассеяния ткани и извлечении из него информации о характеристиках светового поля внутри ткани с использованием разработанных инженерных методов их расчёта [22, 62, 63, 67]. Это позволяет контролировать и оптимизировать параметры светового воздействия на заданный слой ткани, что является основой повышения эффективности и минимизации побочных неблагоприятных эффектов фототерапии, а также стандартизации методов лечения больных с одинаковой патологией.

Следует отдельно отметить разработанный метод двухцветной фотодинамической терапии рака [71], включающий введение фотосенсибилизатора в зону опухолевой ткани и облучение её лазерными источниками одновременно на двух длинах волн, обеспечивающих воздействие на фотосенсибилизатор и оксигемоглобин. Длины волн лазерных источников и фотодинамическая доза выбираются с учетом спектра действия света на фотосенсибилизатор и эффективности фотодиссоциации оксигемоглобина в заданном слое ткани, а также с учётом изменений концентрации фотосенсибилизатора, объёмного содержания кровеносных сосудов и соотношения различных форм гемоглобина в процессе фотодинамической терапии. Метод позволяет выбирать оптимальные для конкретного пациента длины волн лазерных источников и дозы облучения, обеспечивающие некроз раковых клеток при нанесении минимального вреда здоровой ткани.

Получены патенты на методы, позволяющие проводить фотодинамическую терапию онкологических заболеваний человека (Патенты RU 2521838 C1, 2013; BY 19557 C1, 2014; Евразийский патент 031413 B1, 2018). Разработаны и запатентованы: устройство для диагностики злокачественных образований в слизистой оболочке человека посредством определения концентрации гемоглобина и степени оксигенации крови в ней (Патент BY 19558 C1, 2015); устройство для определения концентрации гемоглобина и степени оксигенации крови в слизистых оболочках (Патент RU 2528087 C1, 2014). Данное устройство может с успехом использоваться в ходе проведения эндоскопических исследований слизистых оболочек полости рта, пищевода, органов желудочно-кишечного тракта и легких.

Заключение

Рассмотренные выше результаты существенно расширяют возможности оптической диагностики биологических объектов и послойной дозиметрии в них лазерного излучения. Они включают: разработку быстрых и высокоточных методов расчета пространственной освещенности в биологических объектах и потоков многократно рассеянного ими излучения; решения обратных задач оптики биотканей на основе устойчивых регрессионных соотношений между параметрами тканей и спектрально-пространственными характеристиками их обратного рассеяния, а также спектральными характеристиками их изображений; разработку методов диагностики практически всех параметров тканей и крови человека, проявляющихся в потоках многократно рассеянного ими излучения; разработку подходов к неинвазивному определению спектров действия света на хромофоры ткани и контролю эффективности фотоиндуцированных процессов в ткани при лазерной терапии.

Конфликт интересов

Автор статьи заявляет, что у него нет конфликта интересов по материалам данной статьи с третьими лицами, на момент подачи статьи в редакцию журнала, и ему ничего не известно о возможных конфликтах интересов в настоящем со стороны третьих лиц.

Список литературы

1. Зуев В. Е., Наац И. Э. Обратные задачи лазерного зондирования атмосферы. Новосибирск: Наука, 1992. 240 с.
2. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1974. 509 с
3. Метод Монте-Карло в атмосферной оптике. Под ред. Марчука. Новосибирск: Наука, 1971. 296 с.
4. Иванов А. П., Дик В. П., Барун В. В. Малогабаритный спектрофотометр для диагностики параметров биотканей и гуморальных сред // сборник науч. трудов VIII Международной научной конференции «Лазерная физика и оптические технологии», (Минск, 27–30 сентября 2010 г.). Минск, 2010. Т. 1. С. 271–275.
5. Yudovsky D., Pilon L. Retrieving skin properties from in vivo spectral reflectance measurements // J. Biophotonics. 2011. Vol. 4, № 5. P. 305–314.
6. Patent US 5,353,790. Method and apparatus for optical measurement of bilirubin in tissue: A61N5/06, G01N21/47 / S. L. Jacques, D. G. Oelberg, I. Saidi; applicant of invention: Board Of Regents, The University Of Texas System – № US 07/822,461; claimed 17.01.1992; published 11.10.1994.
7. G. Zonios [et. al.]. Diffuse reflectance spectroscopy of human adenomatous colon polyps in vivo // Appl. Opt. 1999. Vol. 38, № 31. P. 6628–6637.
8. Johns M., Giller C., Liu H. Determination of hemoglobin oxygen saturation from turbid media using reflectance spectroscopy with small source-detector separation // Appl. Spectroscopy. 2001. Vol. 55, № 12. P. 1686–1694.
9. Dam J. S. [et. al.]. Fiber-optic probe for noninvasive real-time determination of tissue optical properties at multiple wavelengths // Appl. Opt. 2001. Vol. 40, № 7. P. 1155–1164.
10. Ghosh N. [et. al.] Measurement of optical transport properties of normal and malignant human breast tissue // Appl. Opt. 2001. Vol. 40, № 1. P. 176–184.
11. Bargo P. R. [et. al.]. In vivo determination of optical properties of normal and tumor tissue with white light reflectance and an empirical light transport model during endoscopy // J. Biomed. Opt. 2005. Vol. 10, № 3. P. 1–15.
12. Palmer G. M., Ramanujam N. Monte-Carlo based inverse model for calculating tissue optical properties. Part I: Theory and validation on synthetic phantoms // Appl. Opt. 2006. Vol. 45, № 5. P. 1062–1071.
13. Patent № US 2009/0270702 A1. Method and apparatus for measuring cancerous changes from reflectance spectral measurements obtained during endoscopic imaging. A61B 5/1455, A61B 6/00 / H. Zeng, Y. S. Fawzy; applicant of invention: S. L. Jacques, D. G. Oelberg, I. Saidi – № US 11/722,822; claimed 20.01.2006; published 29.10.2009.
14. Zonios G. A., Dimou A.. Modeling diffuse reflectance from semi-infinite turbid media: application to the study of skin optical properties // Optics Express. 2006. Vol. 14, № 19. P. 8661–8674.
15. Bevilacqua F. [et. al.] In vivo local determination of tissue optical properties: applications to human brain // Appl. Opt. 1999. Vol. 38, № 22. P. 4939–4950.

16. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Метод неинвазивного определения содержания гемоглобина в биологических тканях // Журнал прикладной спектроскопии. 2012. Т. 79, № 4. С. 656–662.
17. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Метод неинвазивного определения оптических и микрофизических параметров кожи человека // Измерительная техника. 2013. № 1. С. 68–73.
18. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Оперативное определение биофизических параметров слизистых оболочек организма человека // Квантовая электроника. 2013. Т. 43, № 7. С. 683–689.
19. Пат. № 2510506 РФ. МПК G01N 33/483 (2006.01), G01N 21/01 Способ определения оптических и биофизических параметров биоткани. / С. А. Лысенко, М. М. Кугейко; заявитель Белорус. гос. ун-т. – № а.с. 2012116721; заявл. 24.04.2012; зарегистрирован в Гос. реестре изобретений РФ 27.03.2014, Бюл. № 9.
20. Pham T. H. [et. al.]. Quantifying the absorption and reduced scattering coefficients of tissue-like turbid media over a broad spectral range using non-contact Fourier transform hyperspectral imaging // Appl. Opt. 2000. Vol. 39, № 34. P. 6487–6497.
21. Кугейко М. М., Лысенко С. А. Лазерная спектронефелометрия аэродисперсных сред . Минск: БГУ, 2012. 208 с.
22. Лысенко С. А. Методы оптической диагностики биологических объектов. Минск: БГУ, 2014. 250 с.
23. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Оперативное определение биофизических параметров слизистых оболочек организма человека // Квантовая электроника. 2013. Т. 43. № 7. С. 683–689.
24. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Метод неинвазивного определения содержания гемоглобина в биологических тканях // Журнал прикладной спектроскопии. 2012. Т. 79, № 4. С. 656–662.
25. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Неинвазивная диагностика микрофизических параметров кожи на основе спектроскопии диффузного отражения с пространственным разрешением // Журнал прикладной спектроскопии. 2012. Т. 79, № 6. С. 932–941.
26. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Метод неинвазивного определения оптических и микрофизических параметров кожи человека // Измерительная техника. 2013. № 1. С. 68–73.
27. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Неинвазивная диагностика микрофизических параметров кожи на основе спектроскопии диффузного отражения с пространственным разрешением // Журнал прикладной спектроскопии. 2012. Т. 79, № 6. С. 932–941.
28. Кугейко М. М., Лысенко С. А. Определение показателя преломления эритроцитов крови человека по результатам нефелометрических измерений оптических характеристика // Измерительная техника. 2007. № 12. С. 52–56.
29. Кугейко М. М., Лысенко С. А. Определение показателя преломления сферизованных эритроцитов крови человека в спектральном интервале 0,3 – 1,2 мкм. // Журнал прикладной спектроскопии. 2007. Т. 74, № 3. С. 386–390.
30. Кугейко М. М., Лысенко С. А. Определение микрофизических параметров эритроцитов крови человека по рассеянию лазерного излучения // Журнал прикладной спектроскопии. 2007. Т. 74, № 5. С. 652–658.
31. Кугейко М. М., Лысенко С. А. Определение гематокрита крови человека по спектральным значениям коэффициентов ослабления и малоуглового рассеяния // Оптика и спектроскопия. 2008. Т. 104, № 4. С. 699–703.

32. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Регрессионный подход к анализу информативности и интерпретации данных аэрозольных оптических измерений // Журнал прикладной спектроскопии. 2009. Т. 76, № 6. С. 876–883.
33. Кугейко М. М., Лысенко С. А. Определение интегральных микрофизических параметров многокомпонентных аэрозолей по данным зондирования атмосферы локационными системами на основе Nd:YAG–лазера // Оптика и спектроскопия. 2009. Т. 107, № 1. С. 166–172.
34. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Методика определения концентрации респирабельной фракции атмосферного аэрозоля по данным трехчастотного лидарного зондирования // Оптика атмосферы и океана. 2010. Т. 23, № 2. С. 149–155.
35. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Методика восстановления высотного распределения массовой концентрации аэрозоля в атмосфере из результатов лидарного зондирования на длинах волн Nd:YAG лазера // Оптика и спектр. 2010. Т. 109, № 6. С. 1212–1220.
36. Лысенко С.А., Кугейко М.М. Восстановление оптических и микрофизических характеристик поствулканического стратосферного аэрозоля из результатов трехчастотного лидарного зондирования // Оптика атмосферы и океана. 2011. Т. 24, № 4. С. 308–318.
37. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Метод определения концентраций пигментов кожи по ее мультиспектральным изображениям // Измерительная техника. 2013. № 6. С. 67–72.
38. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Количественная мультиспектральная эндоскопия слизистых оболочек // Измерительная техника. 2013. № 11. С. 68–73.
39. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Метод оперативной количественной интерпретации мультиспектральных изображений биологических тканей // Оптика и спектроскопия. 2013. Т. 115, № 4. С. 148–157.
40. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Оперативный количественный анализ мультиспектральных изображений тканей организма человека // Квантовая электроника. 2013. Т. 43, № 8. С. 777–784.
41. Farrell T. J. M., Patterson S., Wilson B. C. A diffusion theory model of spatially resolved, steady-state diffuse reflectance for the noninvasive determination of tissue optical properties in vivo // Med. Phys. 1992. Vol. 19, № 4. P. 879–888.
42. Wang L., Jacques S. L., Zheng L. MCML – Monte Carlo modeling of photon transport in multi-layered tissues // Computers Methods and Programs in Biomedicine. 1995. № 47. P. 131–146.
43. Pham T. H. [et. al.] Quantifying the absorption and reduced scattering coefficients of tissue-like turbid media over a broad spectral range using non-contact Fourier transform hyperspectral imaging // Appl. Opt. 2000. Vol. 39, № 34. P. 6487–6497.
44. Pham T. H. [et. al.] Quantifying the absorption and reduced scattering coefficients of tissue-like turbid media over a broad spectral range using non-contact Fourier transform hyperspectral imaging // Appl. Opt. 2000. Vol. 39, № 34. P. 6487–6497.
45. Amelink A. [et. al.]. Singlescattering spectroscopy for the endoscopic analysis of particle size in superficial layers of turbid media // Appl. Opt. 2003. Vol. 42, № 19. P. 4095–4101.
46. Egan W. G., Hilgerman T. W., Reichman J. Determination of absorption and scattering coefficients for nonhomogeneous media // Appl. Opt. 1973. Vol. 12, № 8. P. 1816–1823.
47. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Экспресс анализ гемоглобинов цельной крови методом светорассеяния // Журнал прикладной спектроскопии. 2013: Т. 80, № 3. С. 432–441.
48. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Количественная мультиспектральная эндоскопия слизистых оболочек. Измерительная техника. 2013: 11; 68–73.
49. Кугейко М.М., Лысенко С.А. Определение спектральных значений показателя преломления эритроцитов крови человека в интервале 0,3 – 1,2 мкм // Медэлектроника-

2007: сб. материалов V Междунар. науч.-техн. конф., Минск, 12–13 декабря 2007 г. / Белорус. госуд. ун-т информатики и радиоэлектроники; редкол.: С. К. Дик [и др.]. Минск, 2007. С. 85–88.
50. Лысенко С. А., Кугейко М. М., Фираго В. А., Собчук А. Н. Неинзвазивный экспресс-анализ содержания гемоглобинов в крови с использованием оптоволоконного спектрофотометра // Журнал прикладной спектроскопии. 2014. Т. 81, № 1. С. 128–136.
51. Лысенко С. А., Кугейко М. М., Фираго В. А., Собчук А. Н. Аналитическая модель спектра диффузного отражения кожной ткани // Квантовая электроника. 2014. Т. 44, № 1. С. 69–75.
52. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Определение компонентного состава гемоглобина и структурно-морфологических параметров кожи на основе аппроксимирующих функций для потоков обратно рассеянного кожей излучения // Журнал прикладной спектроскопии. 2014. Т. 81, № 3. С. 418–425.
53. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Бесконтактная диагностика биопараметров кожи и крови на основе аппроксимирующих функций для потоков рассеянного кожей излучения // Квантовая электроника. 2014. Т. 44, № 3. С. 252–258.
54. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Метод получения двумерных распределений гемоглобина и макулярного пигмента в сетчатке по мультиспектральным изображениям глазного дна // Медэлектроника–2014: Средства медицинской электроники и новые медицинские технологии: сб. научных статей VIII Междунар. науч.-технич. конф., Минск, 10–11 декабря, 2014 г. / Белорус. госуд. ун-т информатики и радиоэлектроники; редкол.: С. К. Дик [и др.]. Минск, 2014. С. 255–258.
55. Асимов М. М., Королевич А. Н.,. Константинова Е. Э. Кинетика оксигенации кожной ткани под воздействием низкоинтенсивного лазерного излучения // Журнал прикладной спектроскопии. 2007. Т. 74, № 1. С. 120–125.
56. Стратонников А. А. [и др.]. Использование спектроскопии обратного диффузного отражения света для мониторинга состояния тканей при фотодинамической терапии // Квантовая электроника. 2006. Т. 36, № 12. С. 1103–1110.
57. Асимов М. М., Асимов Р. М., Рубинов А. Н. Новый метод определения индивидуального биологического отклика и эффективности терапевтического действия оптического излучения при лазерной фототерапии // Фотобиология и фотомедицина. 2009. Т. 2, № 3. С. 112–119.
58. Li B., Qiua Z., Huang Z. Advanced optical techniques for monitoring dosimetric parameters in photodynamic therapy // Proc. SPIE. 2012. Vol. 8553. P. 1–9.
59. Самцов М. П. [и др.] Флуоресценция фотосенсибилизатора на основе индотрикарбоцианинового красителя при фотохимиотерапии // Журнал прикладной спектроскопии. 2011. Т. 78, № 1. С. 121–127.
60. Барун В. В., Иванов А. П. Глубинные распределения спектров действия света для хромофоров кожи // Журнал прикладной спектроскопии. 2010. Т. 77, № 1. С. 82–88.
61. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Метод определения индивидуальной дозы облучения при лазерной терапии // Электроника-инфо. 2012. № 8. С. 108–112.
62. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Метод расчёта характеристик световых полей в задачах оптической диагностики и персонифицированной терапии биологических тканей // Журнал прикладной спектроскопии. 2013. Т. 80, № 2. С. 273–280.
63. Лысенко С. А., Кугейко М. М., Лисенкова А. М. Неинвазивное определение спектральной глубины проникновения света в кожу // Оптика и спектроскопия. 2013. Т. 115, № 5. С. 184–191.

64. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Метод оценки оптимальных спектральных и энергетических параметров лазерного воздействия при фотодинамической терапии биоткани // Квантовая электроника. 2015. Т. 45, № 4. С. 358–365.
65. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Метод оценки эффективности изомеризации билирубина при фототерапии неонатальной желтухи // Журнал прикладной спектроскопии. 2014. Т. 81, № 5. С. 761–769
66. Лысенко С. А., Кугейко М. М., Лисенкова А. М., Фираго В. А., Железнякова Т. А. Методика контроля эффективности фототерапии биотканей // Вест. Белорусскрн государмтвенного университета. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. 2014. № 3. С. 52–56.
67. Лысенко С. А., Кугейко М. М. Персонифицированная лазерная терапия биотканей. Сб. научных статей VII междунар. науч.-технич. конф., // Медэлектроника–2012: Средства медицинской электроники и новые медицинские технологии: сб. научных статей VIII Междунар. науч.-технич. конф., Минск, 10–11 декабря, 2012 г. / Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники; редкол.: С. К. Дик [и др.]. – Минск, 2012. С. 177–179.
68. Кугейко М. М., Лысенко С. А. Способ определения скорости трансформации токсичного билирубина в фотоизомер люмирубин. Материалы 5 Междунар. конференции «Прикладные проблемы оптики, информатики, радиофизики и физики конденсированного состояния» (Минск, 20–21 мая, 2019 г.). Белорусский государственный университет. С. 52 –54.
69. Кугейко М. М., Лысенко С. А. Определение скорости трансформации токсичного билирубина в фотоизомер люмирубин. Материалы 12-й Международной научно-технической конференции по квантовой электронике –КЭ'2019. (Минск, 18–22 ноября 2019 года). С. 284–285.
70. Евразийский патент № 031413. B1 A61N 5/06 (2006.01) A61B 5/1455. Способ определения скорости трансформации токсичного билирубина в нетоксичный и водорастворимый фотоизомер люмирубин // Кугейко М. М., Лысенко С. А. Заявитель и патентообладатель Белорусский государственный университет. Заявл. 16.04.2015; опубл. 28.12.2018. Бюл. № 27.
71. Пат. № 2506567, Российская Федерация. МПК G01N 21/31 (2006.01), A61B 5/1455. Способ определения концентрации хромофоров биологической ткани / С. А. Лысенко, М. М. Кугейко, В. А. Фираго, А. И. Кубарко; Заявитель и патентообладатель Белорусский государственный университет. Заявл. 01.08.2012, опубл. 10.02.2014. Бюл. № 4.

Non-invasive optical-physical diagnostics of biological objects (theoretical aspects)

Kugeiko M. M.

220030, Belarus, Minsk, Independence Avenue 4, Belarusian State University

The review considers the possibilities of optical diagnostics of biological objects and layer-by-layer dosimetry of laser radiation in them, including: development of ultrafast and high-precision methods for calculating spatial illumination in biological objects and fluxes of radiation multiply scattered by them; solution of inverse problems of biotissue optics based on stable regression relationships between tissue parameters and spectral-spatial characteristics of their backscattering, as well as spectral characteristics of their images; development of methods for

diagnostics of parameters of human tissues and blood; development of approaches to non-invasive determination of the spectra of light action on tissue chromophores and control of the efficiency of photoinduced processes in tissue during laser therapy.

Key words: optical diagnostics, biological objects, diffuse reflection spectroscopy, transfer theory, inverse problems, regression approach for inverse problems, photodynamic therapy, personalized phototherapy.

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С ВЕЩЕСТВОМ

doi: 10.51639/2713-0568_2022_2_1_47
УДК 535.21, 535.23
ГРНТИ 29.31.27, 29.33.47
OCIS 140.3440, 140.3390, 160.3380

Статистическое моделирование лазерной абляционной деструкции

Чербачи Ю. В., * Мкртычев О. В.

353919, Россия, Новороссийск, Мысхакское шоссе 75,
филиал Белгородского государственного технологического университета
им. В. Г. Шухова в г. Новороссийске

e-mail: cherbachi-yu-v@nb-bstu.ru, * mkrtychev-o-v@nb-bstu.ru

Важной характеристикой оптических материалов является прочность материала под воздействием излучения на поверхность такого материала. Рассматривают три вида лучевой прочности оптических материалов: термоупругое растрескивание, разрушение вследствие разогрева инородных включений и пробой в поле световой волны (явление самофокусировки). В данной статье, с использованием модели Вейбулла–Гнеденко и некоторых параметров излучения, например, зная площадь воздействия луча лазера при лазерном разрушении, можно определить концентрацию дефектов и вычислить вероятность разрушения, определив таким образом оптическую прочность образцов при однократном облучении.

Ключевые слова: модель Вейбулла–Гнеденко, надёжность образца, оптическая прочность.

Введение

Прочность – свойство материалов противостоять разрушению при воздействии внешних нагрузок – является важным качеством в технических устройствах. При объяснении зависимости прочности материала разрушаемый материал, причины, виды и условия разрушения моделируются разными способами [1, 2]. В частности, статистическая теория прочности материала считает, что прочность поверхности материала меньше прочности внутреннего объёма из-за наличия на поверхности микродефектов [3]. Ввиду статистического распределения микродефектов, и прочность материала является статистической величиной. Для количественного определения прочности используют функцию распределения

$$f(x) = \frac{1}{N}\frac{\Delta N}{\Delta x},$$

где x –среднее значение прочности, N – число измерений при доверительном интервале Δx, ΔN – число образцов с прочностью в диапазоне (x, $x+\Delta x$). Вид этой функции позволяют делать выводы о природе дефектов и динамике повреждений.

Модель Вейбулла–Гнеденко

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

Наиболее широко при анализе прочности хрупких материалов, в том числе, и стёкол, используется модель Вейбулла–Гнеденко [4, 5].
Вероятность разрушения при этом даётся выражением:

$$p = 1 - e^{-Y},$$

где Y – риск разрушения, определяемый для объёма V из выражения

$$Y = \begin{cases} \int\limits_V \left(\dfrac{y - y_{\text{пр}}}{y_{\text{норм}}}\right)^m dV, & y > y_{\text{пр}}, \\ 0, & y < y_{\text{пр}}, \end{cases}$$

где y – нагрузка элемента dV; $y_{\text{пр}}$ –предел прочности, т.е. минимальная нагрузка, вызывающая разрушение; $y_{\text{норм}}$ – нормировочный параметр размерности (напряжение×объём$^{1/m}$); m – модуль Вейбулла или параметр формы распределения. Для наиболее распространённого натриево-калиево-силикатного стекла типичные величины модуля Вейбулла находятся в диапазоне от 4 до 15.
В случае наличия двух видов дефектов, определяющих прочность материала, график $\ln\left(\ln\frac{1}{1-p}\right)$ от $\ln y$ будет состоять из отрезков двух прямых, трёх дефектов – из отрезков трёх прямых (и так далее). Выяснение количественных отношений для исследуемых зависимостей представляет интерес, как для выяснения физического механизма разрушения, так и для определения характерных параметров дефектов (например, концентрации), которые могут быть извлечены из сравнения указанных теоретических зависимостей с наблюдаемыми. В простейшем случае, когда вероятность лазерного разрушения определяется дефектами одного рода на поверхности или в объёме образца, для которой вероятность разрушения может быть описана показательной функцией типа

$$p(F) = 1 - e^{-\rho(F)A} = 1 - e^{-kAF^m}, \quad (1)$$

где $\rho(F) = kF^m$ – средняя объёмная концентрация дефектов, и A – объём области, подвергнутой воздействию лазерного излучения с плотностью энергии F. Данные по лазерному разрушению могут быть проанализированы, как и в [6–9], с использованием статистики Вейбулла–Гнеденко.
В случае трёхпараметрического распределения Вейбулла–Гнеденко плотность вероятности (дифференциальная функция распределения) имеет вид

$$f_{\text{wbl}}(x) = \begin{cases} \dfrac{c}{b}\left(\dfrac{x-a}{b}\right)^{c-1} e^{-\left(\frac{x-a}{b}\right)^c}, & x \geq a, \\ 0, & x < a, \end{cases}$$

где $f_{\text{wbl}}(x) \geq 0$, $x \geq a$, $c > 0$, $b > 0$, $-\infty < a < \infty$. Величина a называется параметром положения (срок безрисковой работы), b – параметром масштаба (характерный срок) и c – параметром формы (угловой коэффициент). При этом параметры положения a и масштаба b имеют ту же размерность, что и случайная величина x, а параметр формы c – величина безразмерная. После того как оценены параметры распределения Вейбулла–Гнеденко, можно оценить различные характеристики надёжности. В частности, вычислить функцию распределения отказов (обычно обозначаемую как $F(t)$). Соответственная кумулятивная, иначе интегральная, функция распределения Вейбулла–Гнеденко имеет вид:

$$F_{\text{wbl}}(x) = 1 - e^{-\left(\frac{x-a}{b}\right)^c}. \quad (2)$$

Надёжность определяется, как функция вероятности отказа тестируемой единицы в зависимости от времени. Формально функция надёжности (обычно обозначаемая через $R(t)$, иногда $Q(t)$) является дополнением функции распределения до 1 (т.е. $R(t) = 1 - F(t)$);

функция надёжности также иногда называется функцией выживания (равна вероятности дожития экземпляра до момента *t*). Функция надёжности вычисляется по формуле:

$$R(x) = 1 - F_{\text{wbl}}(x) = e^{-\left(\frac{x-a}{b}\right)^c}.$$

Срок надёжности (полагая, что переменная x является временем), считая от момента времени 0, даётся выражением:

$$\mathrm{X}_R = a + b[-\ln R]^{\frac{1}{c}} = x.$$

Это время, в течение которого экземпляр будет успешно функционировать с надежностью $R(x)$.

Математическое ожидание распределения Вейбулла–Гнеденко

$$\bar{X} = a + b \cdot \Gamma\left(\frac{1}{\mathrm{c}} + 1\right),$$

где $\Gamma(z) = \int_0^\infty e^{-x} x^{n-1} dx$ –гамма-функция.

Медиана этого распределения равна

$$\breve{X} = a + b \cdot [\ln 2]^{\frac{1}{c}}.$$

Если в формуле для срока надёжной работы положить $R = 0{,}5$, то срок надёжности станет равным медиане распределения $\mathrm{X}_R = \breve{X}$.

Мода трёхпараметрического распределения Вейбулла–Гнеденко

$$\tilde{X} = a + b \cdot \left[1 - \frac{1}{c}\right]^{\frac{1}{c}}.$$

Функция риска (интенсивности отказа) описывает вероятность отказа в течение малого промежутка времени при условии, что до этого момента отказа не произошло. Для распределения Вейбулла–Гнеденко функция риска имеет следующий вид:

$$h(x) = \frac{f_{wbl}(x)}{1-F_{wbl}(x)} = \frac{f_{wbl}(x)}{R(x)} = \frac{c}{b}\left(\frac{x-a}{b}\right)^{c-1}.$$

Двухпараметрическое распределение Вейбулла–Гнеденко получается из трёхпараметрического при условии равенства нулю параметра положения $a = 0$, то есть:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{c}{b}\left(\frac{x}{b}\right)^{c-1} e^{-\left(\frac{x}{b}\right)^c}, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

Для однопараметрического распределения Вейбулла–Гнеденко, кроме условия $a = 0$, добавляется условие постоянства параметра формы $c = C = \text{const}$:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{C}{b}\left(\frac{x}{b}\right)^{C-1} e^{-\left(\frac{x}{b}\right)^C}, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

Все величины, характеризующие одно- и двух-параметрические распределения, находятся из выражений, аналогичных соответственным выражениям для величин трёхпараметрического распределения Вейбулла–Гнеденко. Достаточно только положить значение параметра положения равным нулю и значение параметра формы приравнять постоянной величине.

Моделирование лазерной абляции

В случае лазерной абляции, полагая A = const, по экспериментальной зависимости $p(F)$ для фиксированного значения p получаем

$$kA = -\frac{\ln(1-p)}{F^m}.$$

Так как погрешность измерения пороговых параметров для p = 0,5 минимальна, то подставляя это значение вероятности, получаем

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

$$kA = \frac{\ln}{F_{0,5}^{m}}.$$

Следовательно, выражение (1) можно переписать в виде

$$p(F) = 1 - e^{-\ln 2\left(\frac{F}{F_{0,5}}\right)^{m}},$$

или, после логарифмирования,

$$\ln\left(\frac{\ln\frac{1}{1-p}}{\ln 2}\right) = m \ln\left(\frac{F}{F_{0,5}}\right). \quad (3)$$

График зависимости $\ln\left(\frac{\ln\frac{1}{1-p}}{\ln}\right)$ от $\ln\left(\frac{F}{F_{0,5}}\right)$ будет графиком прямой пропорциональности с коэффициентом m, равным показателю экспоненты в статистике Вейбулла–Гнеденко. Анализ экспериментальных данных подтверждает, что наклоны прямых многократно повторяются из-за дефектного механизма лазерной абляции и статистика Вейбулла–Гнеденко адекватно описывает процесс лазерной абляции и позволяет оценивать вероятность разрушения полимерного образца при заданной плотности энергии лазерного импульса.

В случае однократно облучённой мишени, при условии, что вероятность лазерной абляции определяется дефектами одного рода на поверхности или в объёме образца, вероятность разрушения может быть описана показательной функцией типа

$$p(F) = \begin{cases} 1 - e^{-\rho(F)A} = 1 - e^{-kAF^{m}} = 1 - e^{-\ln 2\left(\frac{F}{F_{0,5}}\right)^{m}}, & F > 0, \\ 0, & F \le 0, \end{cases}$$

где $\rho(F) = kF^{m}$ – средняя поверхностная/объёмная концентрация дефектов, и A – площадь/объём области, подвергнутой воздействию лазерного излучения с плотностью энергии F, $F_{0,5}$ – пробойная энергия, для которой вероятность пробоя равна 0,5. Именно эту величину $F_{0,5}$ мы измеряем в наших экспериментах.

Этой функции соответствует интегральная функция распределения Вейбулла–Гнеденко с параметрами: $a = 0$, $b = \frac{F_{0,5}}{\sqrt[m]{\ln 2}}$ и $c = m = \text{const}$, относительно переменной величины $x = F$.

На основании полученных экспериментальных данных были выполнены расчёты по уравнению (3). Результат вычисления для нескольких образцов показателя экспоненты m в статистике Вейбулла–Гнеденко методом наименьших квадратов представлен в таблице.

Таблица. Показатель экспоненты m в статистике Вейбулла–Гнеденко, вычисленный по экспериментальным данным методом наименьших квадратов.

Образец	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$m_{20\text{ нс}}$	15,65	4,99	27,67	27,96	16,18	14,43	15,31	15,19	13,25	9,16
$m_{300\text{ мкс}}$	7,74	7,71	4,59	7,70	4,69	8,85	11,54	10,09	9,16	-

Таблица показывает, что значения показателя экспоненты m в формуле (2) группируются вокруг некоторых опорных значений. При этом большинство значений лежит в наиболее распространённом натриево-калиево-силикатном стекле типичных величин модуля Вейбулла, то есть в диапазоне от 4 до 15. Все эти результаты могут стать основой для различных методов изучения лазерного абляционного разрушения образцов [10–18].

Надёжность, в нашем случае эта функция называется оптической прочностью покрытия детали (часто обозначается $Q(F)$), и определяет функцию вероятности разрушения покрытия в зависимости от величины плотности энергии падающего излучения, имеет вид:

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

$$R(F) = 1 - p(F) = e^{-\ln 2\left(\frac{F}{F_{0,5}}\right)^m}. \quad (4)$$

Надёжность в отношении пробоя даётся выражением:

$$\mathrm{X}_R = \frac{F_{0,5}}{\sqrt[m]{\ln}}\left[\ln 2\left(\frac{F}{F_{0,5}}\right)^m\right]^{\frac{1}{m}} = F.$$

Эта величина показывает, что для значения плотности энергии падающего излучения равного F, надёжность в отношении пробоя имеет значение $R(F)$, вычисляемое по выражению (4).

Функция риска (интенсивности отказа) описывает вероятность пробоя в малом промежутке диапазона изменения плотности энергии падающего излучения при условии, что до этого значения плотности энергии пробоя не произошло. Для нашей функции распределения функция риска имеет следующий вид:

$$h(F) = \frac{m}{\frac{F_{0,5}}{\sqrt[m]{\ln 2}}}\left(\frac{F}{\frac{F_{0,5}}{\sqrt[m]{\ln 2}}}\right)^{m-1} = \left(\frac{m}{F_{0,5}^m}\ln 2\right)F^{m-1}.$$

Математическое ожидание распределения Вейбулла–Гнеденко

$$\bar{F} = \frac{F_{0,5}}{\sqrt[m]{\ln}} \cdot \Gamma\left(\frac{1}{\mathrm{m}} + 1\right),$$

где $\Gamma(z)$ −гамма-функция.

Медиана этого распределения равна

$$\breve{F} = \frac{F_{0,5}}{\sqrt[m]{\ln 2}} \cdot [\ln 2]^{\frac{1}{m}} = F_{0,5}.$$

Мода распределения Вейбулла–Гнеденко

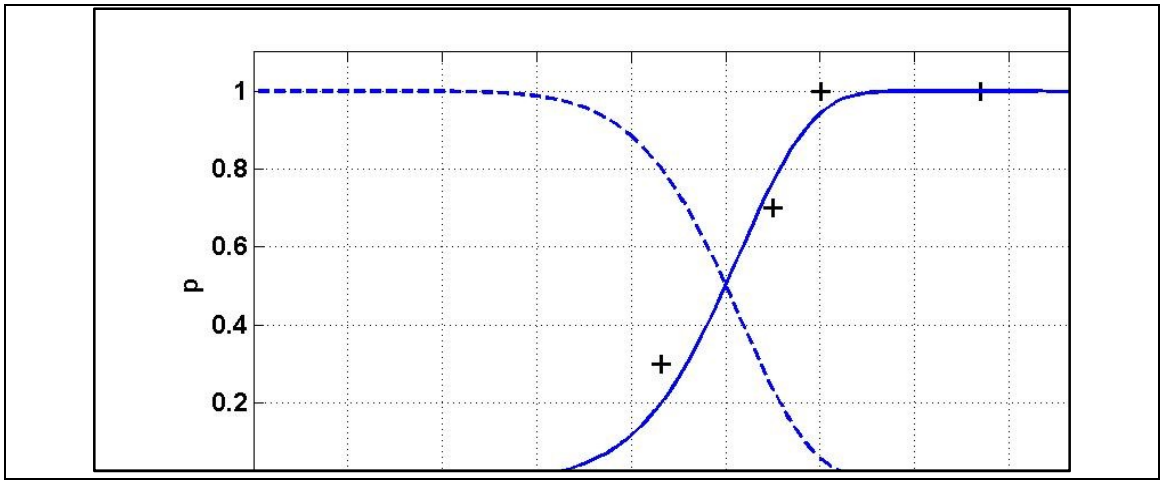
$$\tilde{F} = \frac{F_{0,5}}{\sqrt[m]{\ln}} \cdot \left[1 - \frac{1}{m}\right]^{\frac{1}{m}}.$$

Для примера рассмотрим образец 1 в микросекундном и наносекундном диапазоне. Экспериментальные данные для этого образца сведены в таблице. По этим данным в микросекундном диапазоне m = 7,74 и $F_{\max}$ = 100,17 Дж·см$^{-2}$ и интегральная функция распределения Вейбулла–Гнеденко будет иметь вид (рис. 1)

$$p(F) = 1 - e^{-0,6931\left(\frac{F}{100,17}\right)^{7,74}}.$$

Оптическая прочность образца 1 в микросекундном диапазоне:

$$R(F) = e^{-0,6931\left(\frac{F}{100,17}\right)^{7,74}}.$$



Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

Рис. 1. График интегральной функции распределения $p(F)$ образца 1 в микросекундном диапазоне: точки – экспериментальные данные, сплошная кривая – аппроксимация функцией распределения Вейбулла–Гнеденко, оптическая прочность – штриховая линия

По данным в наносекундном диапазоне m = 15,65 и F_{max} = 30,21 Дж·см$^{-2}$ и интегральная функция распределения Вейбулла–Гнеденко будет иметь вид (рис. 2):

$$p(F) = 1 - e^{-0{,}6931\left(\frac{F}{30{,}21}\right)^{15{,}65}}.$$

Оптическая прочность образца 1 в наносекундном диапазоне:

$$R(F) = e^{-0{,}6931\left(\frac{F}{30{,}21}\right)^{15{,}65}}.$$

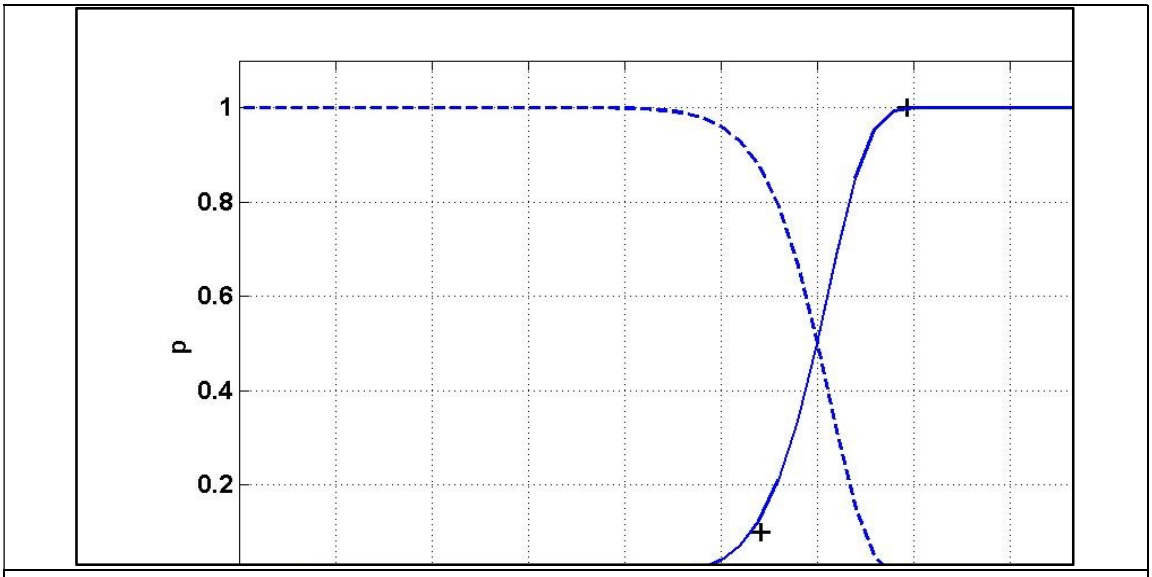


Рис 2. График интегральной функции распределения $p(F)$ образца 1 в наносекундном диапазоне: точки – экспериментальные данные, сплошная кривая – аппроксимация функцией распределения Вейбулла–Гнеденко, оптическая прочность – штриховая линия

Заключение

Таким образом, применение однопараметрического распределения Вейбулла–Гнеденко позволяет получить значения функции распределения вероятности пробоя при лазерном разрушении нанокомпозитов, хорошо совпадающие с экспериментально измеренными вероятности. При этом значения модуля Вейбулла, в основном, имеют типичные величины модуля для натриево-калиево-силикатного стекла в диапазоне от 4 до 15.

Конфликт интересов

Авторы статьи заявляют, что у них нет конфликта интересов по материалам данной статьи с третьими лицами, на момент подачи статьи в редакцию журнала, и им ничего не известно о возможных конфликтах интересов в настоящем со стороны третьих лиц.

Список литературы

1. Александров А. В., Потапов В. Д., Державин Б. П. // Сопротивление материалов. – М.: Москва. Высшая школа. 2003. 561 с.
2. Никоноров Н. В., Евстропьев С. К. // Оптическое материаловедение: основы прочности оптического стекла. – СПб: СПбГУ ИТМО, 2009. – 104 с.
3. O. V. Mkrtychev, V. G. Shemanin, and Yu. V. Shevtsov «Investigation of laser ablation destruction of polymer materials», Proc. SPIE 11322, XIV International Conference on Pulsed Lasers and Laser Applications, 1132221 (11 December 2019); DOI https://doi.org/10.1117/12.2555980.
4. Weibull W. Statistical distribution function of wide applicability // Journal of Applied Mechanics. 1951. V. 18. P.293-297.
5. Madjoubi M. A., Bousbaa C., Hamidouche M., Bouaouadja N. Weibull statistical analysis of the mechanical strength of a glass eroded by sand blasting // Journal of the European Ceramic Society. 1999. V. 19. No. 16. P.2957-2962.
6. Воронина Э. И., Ефремов В. П., Привалов В. Е., Чартий П. В., Шеманин В. Г. Оптическая прочность полимерных материалов при их лазерной абляционной деструкции // ЖТФ. 2009. Т. 79. Вып. 5. С. 143.
7. Воронина Э. И., Чартий П. В., Шеманин В. Г. // Физика экстремальных состояний вещества-2003. под ред. Фортова В. Е. и др. Черноголовка. ИПХФ РАН. 2003. С. 24.
8. Воронина Э. И., Чартий П. В., Шеманин В. Г. // Физика экстремальных состояний вещества-2005. под ред. Фортова В. Е. и др. Черноголовка. ИПХФ РАН. 2005. С. 37.
9. Voronina E. I., Efremov V. P., Privalov V. E., Shemanin V. G. Laser ablation thresholds of polymer materials studies // Proc. SPIE. 2003. V. 5381. P. 178–185.
10. Воронина Э. И., Ефремов В. П., Привалов В. Е., Шеманин В. Г. Исследование лазерного абляционного нагружения полимеров // Письма в ЖТФ. 2008. Т. 34. В. 23. С. 59.
11. Efremov V. P., Privalov V. E., Skripov P. V., Charty P. V., Shemanin V. G. Polymer materials laser destruction thresholds studies // Proc. SPIE. 2004. V. 5447. P. 234–241.
12. A. B. Atkarskaya, O. V. Mkrtychev, V. E. Privalov, V. G. Shemanin. Laser ablation of the glass nanocomposites studies // Optical Memory and Neural Networks (Information Optics). V.23, Issue 4, October 2014. ISSN: 1060-992X (Print) 1934-7898 (Online). p. 265–270.
13. Laktushkin G. V., Shemanin V. G. Surface quality laser testing system // Proc. SPIE. 1998. V. 3687. P. 53–55.
14. Мкртычев О. В. Методика определения лучевой прочности материалов при однократном облучении. Лазеры. Измерения. Информация. 2021. Т. 1. № 1(1). С. 7–13. [Электронный ресурс] URL: https://lasers-measurement-information.ru/ojs/index.php/laser/article/view/3 DOI: 10.51639/27130568_2021_1_1_7.
15. Мкртычев О. В., Шеманин В. Г. Способ определения оптической прочности материалов при однократном облучении. Патент на изобретение RU 2694073 C1, 09.07.2019. Заявка № 2018110756 от 26.03.2018.
16. Привалов В. Е., Шеманин В. Г., Мкртычев О. В. Метод оценки оптической прочности облучаемой поверхности при лазерной абляции. Измерительная техника. 2018. № 7. С. 34–37. [Электронный ресурс] URL: http://izmt.ru/note.php?type=TAMI_izmt&notes_id=281
17. Чунгурова Т. Л., Мкртычев О. В. Метод определения динамики оптической прочности материалов. Лазеры. Измерения. Информация. 2021. Т. 1. № 2(2). С. 26–29. [Электронный ресурс] URL: https://lasers-measurement-information.ru/ojs/index.php/laser/article/view/12 DOI: 10.51639/27130568_2021_1_2_26.
18. Чербачи Ю. В., Мкртычев О. В. Сравнение значений пробойной энергии при различных длительностях лазерного импульса. Лазеры. Измерения. Информация. 2021. Т. 1. № 2(2). С. 30–32. [Электронный ресурс] URL: https://lasers-measurement-information.ru/ojs/index.php/laser/article/view/13 DOI:10.51639/27130568_2021_1_2_30.

Лазеры. Измерения. Информация. 2022. Том № 02. № 01 (05)
https://lasers-measurement-information.ru

Statistical modeling of laser ablative destruction

Cherbachi Yu. V., Mkrtychev O. V.

353919, Russia, Novorossiysk Novorossiysk, Myskhakskoe shosse 75
Branch of Belgorod V G Shukhov State Technology University

An important characteristic of optical materials is the strength of the material when exposed to radiation on the surface of such a material. Three types of radiation resistance of optical materials are considered: thermoelastic cracking, destruction due to heating of foreign inclusions, and breakdown in the field of a light wave (self-focusing phenomenon). In this article, using the Weibull–Gnedenko model and some radiation parameters, for example, knowing the area of action of a laser beam during laser destruction, it is possible to determine the concentration of defects and calculate the probability of destruction, thus determining the optical strength of samples with a single irradiation.

Keywords: Weibull–Gnedenko model, sample reliability, optical strength.