

частности, теплообмена между фазами на молекулярном уровне. Т.к. данный процесс участвует во многих физико-химических взаимодействиях, исключение его из рассмотрения дает существенное снижение точности полученных данных и границ применимости метода в целом.

В рамках данной работы на базе метода классической молекулярной динамики разработана модель массопереноса в газовой фазе с учетом влияния физической адсорбции.

Для интегрирования уравнений движения частиц применена схема Верле в скоростной форме. Для учета теплового взаимодействия граница твердого тела представлена в виде набора независимых осцилляторов, совершающих автоколебания.

Разработано программное обеспечение, реализующее предложенную модель с решением систем уравнений на GPU с использованием технологии CUDA. Данная технология позволяет за реальные промежутки времени (порядка нескольких часов) проследить кинетику системы состоящей из $\sim 10^4$ частиц на интервале времени $\sim 10^{-7} \dots 10^{-6}$ секунды.

Проведены численные эксперименты, направленные на проверку адекватности предложенной модели. Для модельных случаев построены кинетические кривые адсорбции, изотермы адсорбции (Ленгмюра, некоторые типы изотермы БЭТ). Полученные зависимости на качественном уровне согласуются с теоретическими.

На следующих этапах работы планируется расчет значений параметров, необходимых для моделирования конкретных веществ, что позволит провести численное сравнение результатов моделирования с литературными данными.

Список использованных источников

1. Товбин, Ю.К. Метод молекулярной динамики в физической химии [текст] / Под ред. Ю.К. Товбина // М.: Наука, 1996. – 334 с.
2. Frenkel, D., Smit B. Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications [текст] / Frenkel D., Smit B. // San Diego, Academic Press, 2002 - p. 638

УДК 621.373.826

ИССЛЕДОВАНИЕ СХЕМЫ СТАБИЛИЗАЦИИ ОПТИЧЕСКОЙ МОЩНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ЛАЗЕРА ДЛЯ ПРИБОРОВ БИОСПЕКТРОФОТОМЕТРИИ

М.С. Василькин, П.И. Бахтинов

г. Самара, «Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королёва»

При разработке многоканального прибора для неинвазивного определения гемоглобина крови методом лазерной спектрофотометрии

возникла задача стабилизации оптической мощности в разрабатываемой схеме управления полупроводниковым лазером.

Стабилизация в схемах на основе полупроводниковых лазеров крайне важна для поддержания постоянной мощности в приборах спектрофотометрии. В данной работе стабильности удалось достичь за счет использования отрицательной обратной связи (ООС) через встроенный в лазерный модуль фотодиод. Использование единственного операционного усилителя в каждом из каналов стабилизации существенно упростило реализацию многоканального лазерного излучателя.

Разработанная схема одного из каналов стабилизации изображена на рисунке 1.

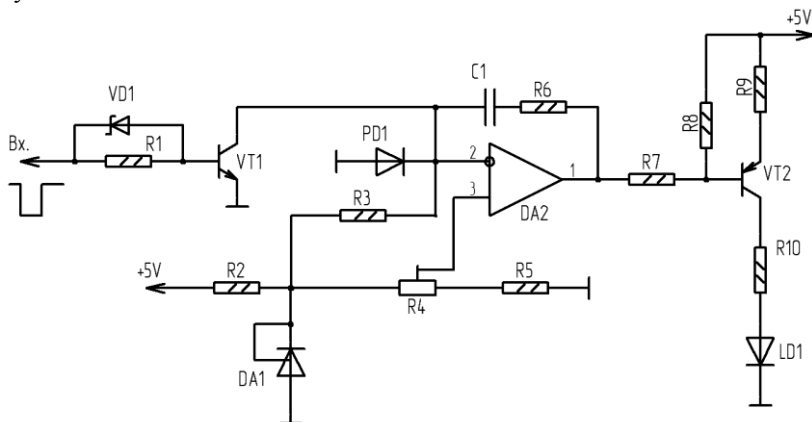


Рисунок 1 - Схема канала стабилизации лазерного модуля

При подаче на вход напряжения высокого уровня транзистор VT1 насыщен, на инвертирующем входе операционного усилителя DA2 поддерживается близкое к нулю напряжение, в результате чего выходной транзистор VT2 закрыт высоким уровнем с выхода ОУ и ток через лазерный диод LD1 не течет.

Подача на вход низкого уровня закрывает транзистор VT1, напряжение на инвертирующем входе ОУ начинает расти, а напряжение на выходе ОУ - снижаться по мере заряда конденсатора C1. После перехода транзистора VT2 в активный режим и достижения током через лазерный диод LD1 порогового уровня начинается рост мощности излучения, часть которой отбирается фотодиодом обратной связи PD1, конструктивно размещенным в одном корпусе с LD1. Фототок обратной связи создает падение напряжения на резисторе R3, которое сравнивается с опорным напряжением, формируемым ИОН DA1 и делителем R4, R5. После достижения равенства, рост тока через лазерный диод прекращается и мощность его излучения стабилизируется. Таким образом, в схеме

действует петля отрицательной обратной связи (ООС), поддерживающая фототок PD1 (а также пропорциональную ему мощность излучения LD1) на постоянном уровне.

Исследование модели спроектированной схемы стабилизации мощности полупроводникового лазера проводилось с помощью пакета OrCAD. Были смоделированы режимы работы для пяти полупроводниковых лазерных модулей типа ПОМ, отличающихся параметрами лазерных диодов и фотодиодов обратной связи. Целью моделирования было подтверждение полученных расчетным путем безопасных режимов работы лазерных диодов, в том числе возникающих при единичных неисправностях (таких, как превышение номинального напряжения питания и пробой выходного транзистора), а также подбор частотной коррекции цепи обратной связи (R6 C1) для оптимизации переходных процессов.

Пример полученных на расчетной модели результатов показан на рисунке 2. Графики 1 и 3 соответствуют неоптимальным вариантам частотной коррекции, приводящим либо к выбросам на фронтах и колебаниям на вершине импульса, либо к слишком затянутому времени установления. Результатом подбора параметров коррекции для каждого из лазерных модулей стал оптимальный переходный процесс, пример которого показан на графике 2.

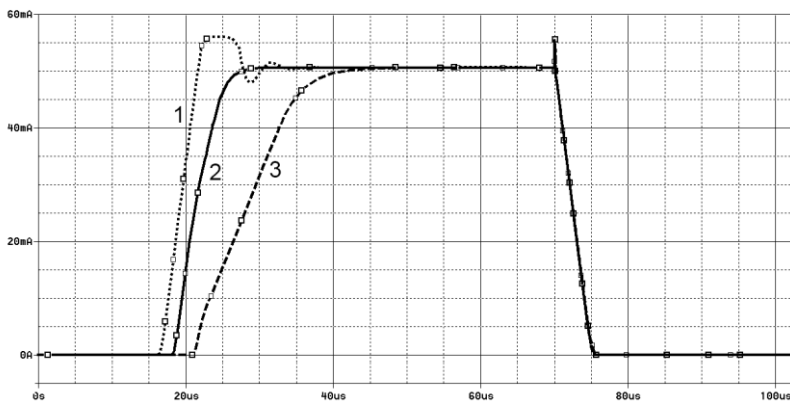


Рисунок 2 - Результаты моделирования переходных процессов

Таким образом, были рассмотрены и смоделированы режимы работы пяти полупроводниковых лазерных модулей, работающих на разных длинах волн. Разработана схема, реализующая оптимальный и безопасный режим работы лазерного диода с использованием одного операционного усилителя в каждом спектральном канале многоканального прибора спектрофотометрии.

Список использованных источников

1. Хоровиц П., Хилл У. Искусство схемотехники. [Текст] Т.2/ Издание 4-е, переработанное и дополненное, перевод с англ./Хоровиц П., Хилл У. -М.:Мир, 1993.-371 с.
2. Грибковский В. П. Полупроводниковые лазеры Учеб. пособие по спец. «Радиофизика и электроника».- Мн.: Университетское, 1988.- 304 с.

УДК 681.785

СХЕМОТЕХНИКА И ОПТИКА ПОРТАТИВНЫХ ДИАГНОСТИЧЕСКИХ ФЛУОРИМЕТРОВ

Д.С. Бурков, В.Н. Гришанов, Д.В. Корнилин, В.С. Куликов
г. Самара, «Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королёва»

Флуоресцентные исследования кожи *in vivo* с диагностическими целями интенсивно внедряются в медицинскую практику. Кожный покров человека является своеобразным аккумулятором продуктов, отражающих процессы, происходящие в организме. Наиболее привлекательно использование для диагностики, особенно при скрининговых обследованиях, аутофлуоресценции (АФ), т.к. измерение интенсивности АФ не требует дополнительных материальных и временных затрат и травмирующих пациента процедур, связанных с введением флуорофора. В тоже время, современная оптоэлектроника способна обеспечить чувствительность диагностического флуориметра, достаточную для достоверной регистрации сравнительно слабой интенсивности АФ при умеренной стоимости прибора. Измерение АФ кожи востребовано медиками для оценки содержания конечных продуктов гликирования (AGE). Флуориметры медицинского назначения для диагностики *in vivo* в России серийно не производятся, импортные приборы большинству клиник недоступны, поэтому разработка портативного, простого в обращении и легко тиражируемого оборудования для измерения интенсивности флуоресценции кожи весьма актуальна. Авторами разработан модульный вариант портативного флуориметра, обладающий перечисленными выше качествами и предназначенный для оценки содержания продуктов AGE.

Флуориметр состоит из опτικο-электронного блока размерами 153*83*51 мм и компьютера, соединённых кабелем через порт USB. Опτικο-электронный блок содержит оптическую систему возбуждения и регистрации АФ и плату электроники, ядром которой является микроконтроллер.

Известно, что измерение АФ кожи для оценки содержания AGE, требует источника возбуждения флуоресценции, излучающего в области 350 – 400 нм и регистрации АФ в диапазоне 450 – 600 нм. В качестве