

ным выводом, длиной волны генерации 1300 нм и выходной мощностью оптического излучения до 1 Вт, двух стандартных мультиплексоров 1300/1550 с разделением по длине волны, одномодового стандартного оптоволокна типа SMF-28е и фотогальванической батареи на основе *p-i-n* гетероструктур InGaAs/InP диаметром 2 мм, состыкованной с многомодовым оптоволокном.

Система способна обеспечивать электрическую мощность до 300 мВт с эффективностью преобразования оптической мощности в электрическую 40%. Передаваемая электрическая мощность системы при передаче на расстояния до 1 км ограничена эффективностью и критической мощностью излучения для фотогальванической батареи, а в случае передачи электропитания на расстояния свыше 10 км ограничена предельной мощностью оптического излучения одномодового оптоволокна вследствие вынужденного комбинационного (рамановского) рассеяния.

Литература

1. Арагвал Г. Нелинейная волоконная оптика / Пер. с англ. М.: Мир, 1996. 323 с.: ил.
2. Фриман Р. Волоконно-оптические системы связи: 3-е издание, дополненное. М.: Техносфера, 2006. 496 с.
3. Yasu T., Ohwaki J., Mino M., Sakai T. A stable 2 W supply optical-powering system // Photovoltaic Specialists Conference, 2000. Conference Record of the Twenty-Eighth IEEE. Date: 2000. P. 1614–1617.

РАЗРАБОТКА МОДЕЛИ КУМУЛЯНТНОГО АНАЛИЗА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЧИСЛА ФОТООТСЧЕТОВ С УЧЕТОМ ДИФФУЗИИ

Е. Ю. Шинкевич

Метод флуоресцентного кумулянтного анализа (ФКА) распределения числа фотоотсчетов во флуоресцентной флуктуационной спектроскопии является одним из спектроскопических методов изучения вещества на одномолекулярном уровне без изменения термодинамического равновесия исследуемой системы [1]. Данный метод позволяет находить информацию о яркости молекул и их количестве в исследуемом объеме и основывается на приведении экспериментально полученных кумулянтов к математической модели, используя метод моментов, позволяющий приравнять теоретические и экспериментальные кумулянты [2].

В данном методе кумулянты выражаются в качестве функции от яркости q и числа молекул s для каждого флуоресцирующего вида молекул. Для молекул одного вида теоретические кумулянты интенсивности флуоресценции FK^k задаются как

$$FK_{\gamma}^k = \gamma_{\gamma} q^{\gamma} c, \quad (1)$$

где коэффициенты γ_r вычисляются через профиль засветки.

Экспериментальные факториальные кумулянты любого порядка вычисляются по рекуррентной формуле через факториальные моменты измеренного распределения числа фотоотсчётов [4]:

$$FK_k = F_k - \sum_{i=1}^{k-1} \frac{(k-1)!}{i!(k-i-1)!} K_{k-i} F_i. \quad (2)$$

В свою очередь факториальные моменты любого порядка можно вычислить по формуле [3]:

$$\tilde{F}_k = \sum_{n=k}^m n(n-1)\dots(n-k+1)P^*(n). \quad (3)$$

Для задач тестирования метода ФКА требуется имитационное моделирование анализируемой характеристики.

СОЗДАНИЕ ИМИТАЦИОННОЙ МОДЕЛИ

Вероятность обнаружить k невзаимодействующих между собой молекул в некотором подобъеме ΔV объема V_0 аппроксимируется распределением Пуассона со средним значением $\bar{c} = \bar{C}\Delta V$. Вероятность зафиксировать n фотонов, испущенных молекулой, находящейся в позиции $\vec{r}$ в течение интервала времени T , также хорошо аппроксимируется распределением Пуассона со средним значением $\bar{n} = qTB(r)$.

Используя эти допущения, построим алгоритм имитации распределения числа фотоотсчётов для однокомпонентного образца. На первом шаге необходимо получить число молекул c , генерируя случайные значения по распределению Пуассона со средним значением $\bar{c}$, и затем равномерно распределить их по исследуемому объему V_0 . Для получения числа фотонов, испущенных j -ой молекулой, генерируется переменная n_j со средним значением $\bar{n}_j = qTB(r_j)$, где $j = 1, 2, \dots, c$. Затем число фотонов, сгенерированных каждой молекулой, суммируется и получается полное число фотонов S_T , подсчитанных в течение интервала наблюдения T . Этот шаг повторяется m раз для получения серии экспериментальных данных [5].

Программно реализовав описанный выше алгоритм, получим распределение числа фотоотсчётов и на его примере проверим метод ФКА. Для этого рассчитаем и сопоставим теоретические и экспериментальные ку-

мулянты. В качестве исследуемого образца возьмём однокомпонентную систему со специфической яркостью молекул $q = 50000$ и числом в облучаемом объеме $c = 10$.

Таблица

Сопоставление теоретических и экспериментальных кумулянтов

Номер кумулянта	Теория	Эксперимент
1	1.6420	1.6678
2	0.3478	0.3125
3	0.1115	0.1251
4	0.0463	0.0276

Как видно из таблицы, теоретические и экспериментальные кумулянты близки по значению, что подтверждает достоверность разработанной модели.

КОРРЕКЦИЯ МЕТОДА ФКА С УЧЁТОМ ДИФФУЗИИ

Полученные оценки q и c являются функциями времени наблюдения T . Построим модель для одного вида молекул с обобщенными значениями $q'_j(T)$ и $c'_j(T)$. В применении к однокомпонентному образцу выражения для факториальных моментов запишутся как

$$FK_1(T) = c'(T)q'(T)T, \quad (4)$$

$$FK_2(T) = c'(T)q'^2(T)T^2, \quad (5)$$

Получим коррекцию второго кумулянта, используя вспомогательную функцию $\Gamma(T)$, объединяющую диффузионные свойства и ширину интервала наблюдения T :

$$Corr = cq^2 \int_{-T}^T G(\tau)(T - \tau)d\tau = c(qT)^2 \Gamma(T), \quad (6)$$

где

$$\Gamma(T) = \frac{1}{T^2} \int_{-T}^T G(\tau)(T - \tau)d\tau.$$

Соотнесем действительные и обобщённые параметры [5]:

$$q'(T) = q\Gamma(T), \quad (7)$$

$$c'(T) = \frac{c}{\Gamma(T)}. \quad (8)$$

Проведём сравнительный анализ модели кумулянтного анализа с учетом диффузии молекул. Для этого оценим характеристическую яркость и количество молекул в исследуемом объёме красителя Су5 с использованием коррекции на диффузию и без неё. Вычисления будем проводить для различных интервалов времени наблюдения и затем построим графики зависимости яркости и количества молекул от интервала наблюдения T . Решим две системы уравнений:

$$\begin{cases} FK_1 = qc \\ FK_2 = \gamma_2 q^2 c' \end{cases} \quad (9)$$

для метода ФКА без учёта диффузии молекул и

$$\begin{cases} FK'_1 = qc \\ FK'_2 = \frac{1}{T^2} \Gamma(T) \gamma_2 q^2 c' \end{cases} \quad (10)$$

для метода ФКА с учётом диффузии молекул.

В результате программной реализации были получены графики зависимости яркости и количества молекул от интервала наблюдения T . Из вида графиков следует, что диффузия молекул через исследуемый объём существенно влияет на характеристическую яркость и количество молекул в исследуемом объёме и её необходимо учитывать. Применение же коррекции устраняет зависимость данных параметров от интервала наблюдения, тем самым позволяя вычислять кумулянты для произвольных времен T .

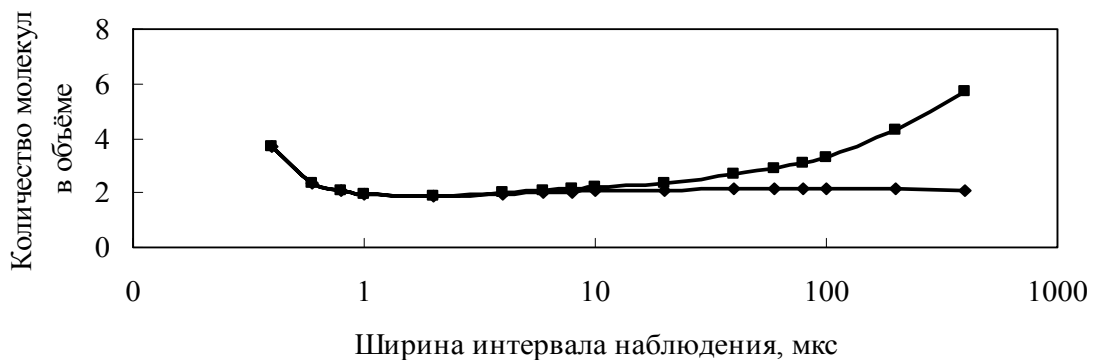


Рис. 1. Зависимость количества молекул в объёме от ширины интервала наблюдения
 ■ без коррекции, ♦ с коррекцией

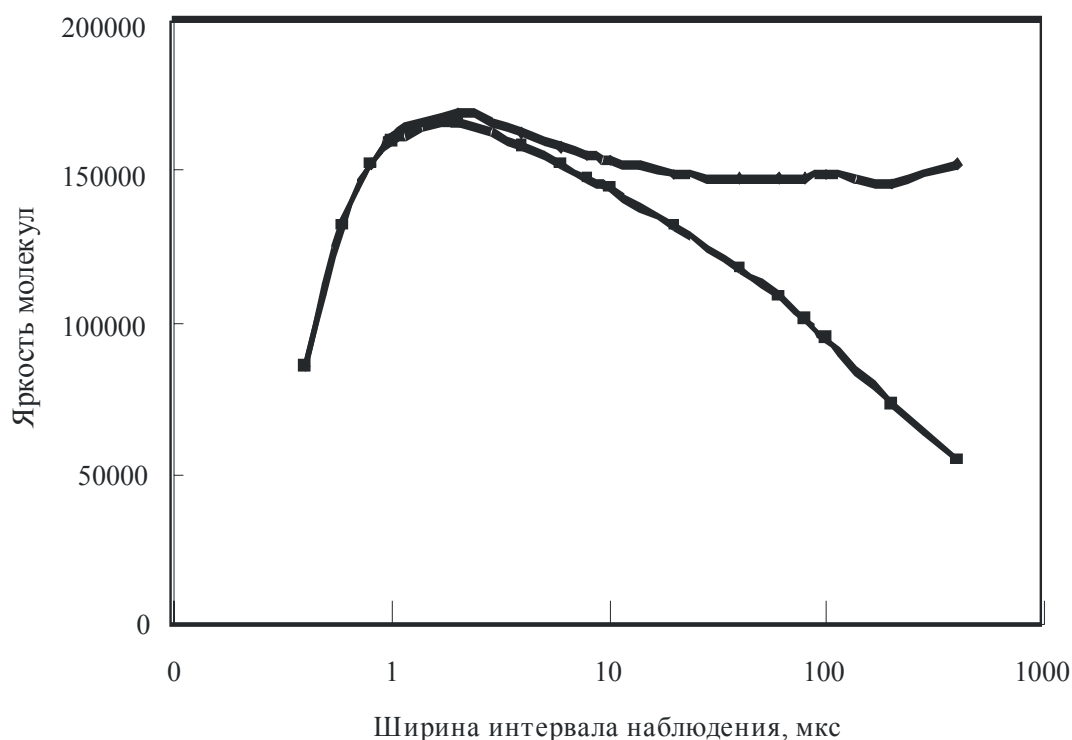


Рис. 2. Зависимость яркости молекул от ширины интервала наблюдения

◆ с коррекцией
■ без коррекции

Таким образом, в данной работе предложена модель кумулянтного анализа распределения числа фотоотсчетов с учетом диффузии. Разработанная модель протестирована на смоделированных и реальных данных.

Литература

1. Yan Chen, Joachim D. Muller, Peter T.C. So, and Enrico Gratton. The Photon Counting Histogram in Fluorescence Fluctuation Spectroscopy. Biophysical Journal. 1999.
2. Muller Joachim D. Cumulant Analysis in Fluorescence Fluctuation Spectroscopy. Biophysical Journal. 2004.
3. Skakun V., Novikov E., Apanasovich V., Tanke H., Deelder A. Initial guesses generation for fluorescence intensity distribution analysis. Biophysical Journal. 2006.
4. Дж. Кендалл М. и Стьюарт А. Теория распределений. М.: Наука, 1966. 588 с.
5. Shingaryov I.P., Skakun V. V., Apanasovich V. V. Photon Count Simulation in Fluorescence Fluctuation Spectroscopy // Proc. of PRIP' 2009 int. conference. Minsk 2009. P. 178–182.

ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ РЕАЛИЗАЦИИ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Ю. П. Жишко, А. В. Асташкин, Е. В. Лисица, В. М. Лутковский

Метод молекулярной динамики, в основе которого лежит численное решение уравнений Ньютона для взаимодействующих частиц, относится