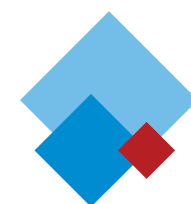




10(2) 2014

ISSN 2224-8412

10(2) 2014



НАНОСТРУКТУРЫ

математическая физика и моделирование

Наноструктуры. Математическая физика и моделирование



Nanostructures. Mathematical physics & modelling

НАНОСТРУКТУРЫ

математическая физика и моделирование

Nanostructures.
Mathematical Physics & Modelling

2014, volume 10(2)

Наноструктуры. Математическая физика и моделирование

Объединенная редколлегия:

Д.В. Быков, И.В. Волович, В.Л. Голо, В.В. Гусаров, П.Н. Дьячков, М.В. Карасев (зам. главного редактора), Ю.А. Косевич, Ю.Е. Лозовик, М.А. Мазо, В.П. Маслов (главный редактор), А.В. Махиборода (ответств. секретарь), А.Ю. Морозов, С.А. Никитов, Ю.И. Сезонов, А.К. Скуратов, И.С. Смирнов, Р.А. Сурис, В.А. Тулин, В.Е. Фортон, А.Р. Хохлов, А.В. Чаплик, Л.А. Чернозатонский, К.В. Шайтан; иностранные члены: А.С. Бакай, А. Шимизу; информационное обеспечение наноиндустрии: В.Н. Азаров, А.Д. Иванников, Ю.Л. Ижванов, В.П. Кулагин, А.Н. Тихонов

Электронная версия журнала размещается на сайте
<http://nano-journal.ru>

Адрес редакции:

Москва 109028, Б. Трехсвятительский пер., 3/12,
НИУ ВШЭ, Московский институт электроники и математики,
nano@miem.edu.ru

Москва

© 2014, Европейский центр по качеству

Содержание

С.Н. Андреев, Ю.И. Еремеичева, В.П. Тараканов РIS-моделирование лазерно-плазменных систем	5
В.А. Беляков Локализованные моды в оптике фотонных жидких кристаллов	41
Б.Л. Григоренко, М.А. Князева, Е.В. Исаева, Д.А. Новичкова, А.В. Немухин Компьютерное моделирование химических реакций в сложных биологических системах: ферментативный гидролиз циклического дигуанозинмонофосфата	95
Информация и правила для авторов	107

Contents

S.N. Andreev, Y.I. Ereimeicheva, V.P. Tarakanov PIC-simulation of laser-plasma systems	5
V.A. Belyakov Localized modes in optics of photonic liquid crystals	41
B.L. Grigorenko, M.A. Knyazeva, E.V. Isaeva, D.A. Novichkova ¹ , A.V. Nemukhin Computer modeling of chemical reactions in complex biological systems: enzymatic hydrolysis of cyclic diguanosine monophosphate	95
The information and rules for authors	107

РІС-МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛАЗЕРНО-ПЛАЗМЕННЫХ СИСТЕМ

Андреев С.Н.¹, Еремеичева Ю.И.¹, Тараканов В.П.²

¹*Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук*

²*Объединенный институт высоких температур Российской академии наук*

andreevsn@ran.gpi.ru, eremeicheva@yandex.ru, karat8tarak@gmail.com

Поступила 03.03.2014

Приводится обзор результатов моделирования при помощи РІС-кода «Карат» процессов взаимодействия сверхинтенсивных фемтосекундных лазерных импульсов с плазменными мишенями различной плотности и состава. Рассмотрено инициирование ядерных реакций с выходом нейтронов в дейтерий-содержащих мишенях под действием лазерного излучения. На основе полученных данных предложены пути оптимизации параметров лазерно-плазменных источников нейтронов. Рассмотрена задача определения коэффициента отражения лазерного импульса от плазменной мишени околоскритической плотности. Найдена область интенсивностей лазерного импульса, в которой коэффициент отражения проявляет аномальное поведение – имеет локальный максимум на фоне монотонно убывающей зависимости.

УДК 533.9

1. Введение

В настоящий момент в научных лабораториях мира существуют лазерные установки, которые позволяют генерировать импульсы фемтосекундной длительности с интенсивностью до 10^{22} Вт/см². Уже при интенсивности лазерного импульса 10^{15} - 10^{16} Вт/см² напряженность электрического поля в нем достигает значений, сравнимых с внутриатомными полями, поэтому любое вещество при облучении такими импульсами мгновенно ионизируется и переходит в состояние плазмы. Электроны, осциллирующие в поле

лазерного импульса с интенсивностью выше 10^{18} Вт/см², обладают релятивистскими энергиями, поэтому при анализе распространения и поглощения сверхинтенсивных лазерных импульсов в плазме необходимо учитывать релятивистские эффекты. Физика взаимодействия сверхинтенсивного лазерного излучения с веществом включает в себя целый ряд быстропротекающих нелинейных процессов. Энергия лазерного излучения достаточно эффективно трансформируется в энергию заряженных частиц: электроны плазмы, ускоренные в электромагнитном поле лазера, являются причиной возникновения сильных электрических полей, в которых в свою очередь ускоряются ионы. Исследователями описано множество уникальных явлений, возникающих при распространении сверхинтенсивного лазерного импульса сквозь плазму: релятивистская самофокусировка и филаментация лазерного импульса, релятивистское просветление, возбуждение кильватерных волн в докритической плазме, генерация электромагнитных полей СВЧ-диапазона и др.

Исследования взаимодействия сверхинтенсивных лазерных импульсов с веществом ведутся как экспериментально, так и теоретически. В силу нелинейного характера протекающих процессов точное аналитическое решение задачи часто оказывается невозможным, по этой причине особое место среди теоретических методов исследования занимает численное моделирование. В настоящее время наиболее подходящим для численного решения подобных задач признан метод «частица-в-ячейке» или PIC-метод, который позволяет осуществлять самосогласованное моделирование плазмы в электромагнитном поле, используя для расчетов обычный персональный компьютер. Плазма в PIC-методе представляется в виде совокупности отдельных «крупных» частиц, положительно и отрицательно заряженных, каждая из которых включает в себя большое количество реальных частиц, при этом отношение заряда к массе у «крупной» частицы такое же, как у реального электрона или иона. Учет взаимодействия между «крупными» частицами осуществляется посредством самосогласованного вычисления движения частиц и электромагнитных полей, создаваемых их движением. На основе PIC-метода создано большое количество расчетных кодов, среди них OOPIC (Object Oriented PIC), VLPL (Virtual Laser Plasma Lab), MAGIC и MAGIC3D, OSIRIS и др. В России на данный момент одним из наиболее широко применяемых в научных исследованиях кодов является электромагнитный 3D PIC-код «Карат» [1-4], который позволяет моделировать широкий класс задач, включая задачи плазменной электродинамики, физики пучков, лазерной физики и др. Код «Карат» использовался в данной работе для численного решения задачи о взаимодействии сверхинтенсивных лазерных импульсов с веществом. Однако признавая и используя колоссальные возможности PIC-моделирования, полезно находить аналитическое решение задачи для тех случаев, когда такое решение существует, для сравнения результатов компьютерных расчетов с результатами аналитических вычислений.

Задача о взаимодействии сверхинтенсивного лазерного импульса с веществом, помимо фундаментального значения, имеет ряд практически важных приложений: лазерный термоядерный синтез и концепция «быстрого зажигания», инициирование ядерных и фотоядерных реакций, генерация сверхсильного магнитного поля, создание новых лазерно-плазменных источников тяжелых ионов, протонов, электронов, нейтронов, коротковолнового электромагнитного излучения и др.

Во всех этих областях научной деятельности важным показателем является та часть энергии лазерного излучения, которая трансформируется в энергию частиц плазмы. Эффективность инжекции лазерной энергии в плазму определяется, прежде всего, коэффициентом отражения лазерного импульса от поверхности плазмы. С момента появления лазеров проблеме определения коэффициента отражения было посвящено множество экспериментальных и теоретических работ [5-12]. Однако с ростом интенсивности лазерных установок возникает необходимость в проведении дополнительных ис-

следований с целью определения зависимости коэффициента отражения от различных параметров лазерного импульса.

Воздействие сверхинтенсивных лазерных импульсов на мишени различного состава может инициировать протекание в них ядерных и фотоядерных реакций. Для эффективного протекания этих процессов необходима интенсивность лазерного импульса 10^{20} – 10^{21} Вт/см², которая была достигнута в лазерных установках лишь в последнее десятилетие. По этой причине в настоящее время активно ведутся исследования в данной области [13–17]. Подобные лазерно-плазменные устройства могут использоваться для анализа задач лазерного термоядерного синтеза, а также в нейтронографии, адронной терапии, утилизации ядерных отходов [18–20].

2. Электромагнитный код «Карат»

Код «Карат» это полностью трехмерный электромагнитный код, предназначенный для решения широкого ряда электродинамических задач, включая моделирование пучково-плазменных систем, задач лабораторной и космической плазмодинамики, взаимодействия лазерного излучения с веществом, различных источников СВЧ-излучения и др. Код позволяет задавать системы произвольной геометрии, включать в рассмотрение инжекцию и абсорбцию частиц, различные проводящие среды, в частности, линейную плазму и диэлектрики [1], а также учитывать многоступенчатую полевую ионизацию вещества [21], протекания ядерных реакций синтеза [4], генерацию гамма-квантов тормозного излучения [3].

Код «Карат» основан на PIC-методе или методе «частица-в-ячейке». Данный метод широко используется для решения различных физических задач, а особенности применения PIC-метода для моделирования электродинамики плазмы подробно изложены, например, в [22, 23]. Суть PIC-метода состоит в следующем: плазма представляется в виде совокупности «крупных» частиц, каждая из которых включает в себя 10^8 – 10^{12} реальных частиц. Отношение заряда к массе у «крупной» частицы такое же, как у реальной частицы. В ходе моделирования рассчитывается самосогласованное движение частиц в электромагнитном поле, которое представляет собой суперпозицию внешнего поля и поля, создаваемого «крупными» частицами.

Основанием для применения PIC-метода для решения задач взаимодействия сверхинтенсивных лазерных импульсов с плазмой является существенно нелинейный характер движения электронов плазмы и возникновение вследствие этого различных эффектов, которые в большинстве случаев не могут быть учтены при попытке решить задачу аналитически. Теоретические исследования поведения плазмы под действием лазерного поля с помощью кодов на основе PIC-метода позволили изучить ряд эффектов (смотреть [24] и цитируемую там литературу).

Код «Карат» позволяет моделировать задачи в 1-, 2-, 2.5- и 3-х мерной геометрии. Расчетная область разбивается на ячейки пространственной сеткой, электромагнитное поле, а также плотность заряда и тока определяются в узлах этой сетки, в то время как «крупные» частицы имеют возможность двигаться по всей расчетной области без ограничений.

Движение заряженных «крупных» частиц описывается релятивистским уравнением Ньютона-Лоренца:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = Q \left(\vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{B} \right), \quad (1.1)$$

где $\vec{v}$ и $\vec{p} = m_p \vec{v} \gamma$ – скорость и импульс макрочастицы, параметр $\gamma = 1 / \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$, $Q = \eta \cdot q$ – заряд «крупной» частицы, $m_p = \eta \cdot m$ – масса «крупной» частицы, q – заряд реальной

частицы, m – масса реальной частицы, η – параметр укрупнения, $\vec{E}$ и $\vec{B}$ – напряженность электрического поля и индукция магнитного поля соответственно, c – скорость света.

Для определения переменного электромагнитного поля решаются уравнению Максвелла:

$$\nabla \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{J} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad (1.2)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (1.3)$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = 4\pi\rho, \quad (1.4)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (1.5)$$

где $\vec{J}$ – плотность тока, а ρ – плотность электрического заряда в узле сетки. Плотность тока:

$$\vec{J} = \frac{1}{\Delta V} \sum_s Q_s \vec{v}_s, \quad (1.6)$$

где $\vec{v}_s$ и Q_s – скорость и заряд «крупной» частицы с номером s , ΔV – объем элементарной ячейки пространственной сетки.

Хотя система уравнений Максвелла включает четыре уравнения, известно, что если поля $\vec{E}$ и $\vec{B}$ являются решениями (1.2), (1.3) и при этом удовлетворяют (1.4), (1.5) в начальный момент времени, то эти поля удовлетворяют двум последним уравнениям системы и во все последующие моменты времени [1]. Это позволяет упростить численное решение, осуществляемое в «Карат», и решать только уравнения (1.2), (1.3).

«Карат» позволяет задавать на границе расчетной области два вида граничных условий: идеальный проводник и граница, прозрачная для излучения и частиц. Для интегрирования уравнений Максвелла и уравнения движения с учетом заданных граничных условий используется конечно-разностная схема с перешагиванием. Значения полей, координат и скоростей частиц вычисляются на дискретной временной сетке.

Расчетный цикл «Карата» на каждом шаге по времени состоит из следующих этапов:

1) Рассчитываются силы, действующие со стороны электромагнитного поля на заряженные частицы.

2) В результате интегрирования уравнения движения (1.1) вычисляется движение заряженных частиц под действием этих сил: определяются координаты и скорости всех «крупных» частиц.

3) Учитываются потери и эмиссия частиц на границах, а также включенные в рассмотрение неупругие процессы (ядерные реакции и др.).

4) Вычисляется плотности тока и заряда в узлах пространственной сетки.

5) С помощью интегрирования уравнений (1.2), (1.3) рассчитываются новые значения $\vec{E}$ и $\vec{B}$ в узлах сетки.

В данной работе для расчетов использовалась двумерная версия кода «Карат».

3. Термоядерные и фотоядерные реакции в фемтосекундной лазерной плазме

Ядерные реакции, протекающие в мишенях различного состава под действием сверхинтенсивных лазерных импульсов исследуются на протяжении более десяти лет. Еще в 1999 году российскими учеными был предложен метод инициирования ядерных реакций в процессе взаимодействия мощного сверхкороткого лазерного импульса с плазмой [25], на основе аналитических расчетов были приведены оценки выхода ядерных реакций. В том же 1999 году вышла работа [26], содержащая результаты первых

экспериментов по инициированию фотоядерных реакций с выходом нейтронов при облучении лазером мишеней различного состава (^{11}C , ^{38}K , ^{63}Zn , ^{106}Ag , ^{140}Pr) на британской установке VULCAN.

Интерес к этой теме не ослабевает и в последние годы. Проведено множество экспериментов по поджигу ядерных реакций с помощью лазерного излучения (см., например, [13-15]), а также теоретических исследований протекающих процессов с помощью аналитических и численных моделей (см., например, [16, 17, 27]).

Пикосекундная релятивистская лазерная микроплазма, формируемая при облучении вещества мишени лазерными импульсами с интенсивностью 10^{18} - 10^{22} Вт/см², является тем уникальным объектом, который позволяет в лабораторных условиях исследовать процессы генерации гамма-квантов тормозного излучения, различные ядерные и фотоядерные реакции, т.е. изучать поведение вещества в экстремальном состоянии, характерном для задач неуправляемого и управляемого термоядерного синтеза.

Помимо фундаментальных исследований, подобные лазерно-плазменные источники частиц представляют большой интерес для различных приложений, таких как нейтронография, адронная терапия, утилизация ядерных отходов и др. Например, в работе [18] при помощи лазерной установки мультитераваттного уровня VULCAN экспериментально осуществлена фототрансмутация долгоживущего изотопа ^{129}I с периодом полураспада 15.7 миллионов лет в изотоп ^{128}I с периодом полураспада 25 минут. В работе [19] сообщается об экспериментах по использованию лазерного источника нейтронов для нейтронной резонансной спектроскопии, которая позволяет осуществлять измерение ионной температуры различных материалов, подвергаемых воздействию лазерного излучения. Эксперименты проводились с помощью лазера Titan в Ливерморской Национальной Лаборатории. Импульсные источники нейтронов являются наиболее перспективными для спектрометрии по времени пролета, используемой как в физике конденсированного состояния, так и в исследованиях структуры атомного ядра [20].

Наиболее значимыми параметрами нейтронного источника являются: общее количество нейтронов в импульсе, интенсивность и длительность нейтронного импульса, энергия и угловое распределение нейтронов. Для успешного применения лазерно-плазменных источников нейтронов во многих практических задачах необходимо максимизировать общий выход нейтронов. Недавние эксперименты демонстрируют возможность получения полного выхода до 10^9 - 10^{10} нейтронов за один лазерный выстрел. Например, в работе [19] авторы сообщают о достигнутом полном выходе $1.8 \cdot 10^9$ нейтронов за один выстрел при длительности лазерного импульса 650 фс и энергии в импульсе 140 Дж. В работе [15] приводятся результаты экспериментов по генерации высокоэнергетичных нейтронов в результате протекания ядерной реакции $^7\text{Li}(d, xn)$, наблюдаемый выход нейтронов составил $8 \cdot 10^8$ н ср⁻¹.

В работе [27] с помощью PIC-моделирования исследуется зависимость выхода нейтронов в результате протекания ядерных реакций в мишени под действием потоков протонов и дейтронов, ускоренных лазерным импульсом (схема «pitcher-catcher»). Авторы рассматривают три реакции: D-D, Li-D и Li-p, и приходят к выводу, что поляризация лазерного импульса влияет на величину нейтронного выхода: в большинстве случаев при интенсивности 10^{21} Вт/см² и длительности 30 фс импульс с линейной поляризацией обеспечивает большие значения нейтронного выхода, чем импульс с круговой поляризацией.

В работе [4], посвященной численному моделированию эмиссии нейтронов в реакции синтеза $\text{D}(d, n)^3\text{He}$ (D-D реакции) при облучении сверхинтенсивными лазерными импульсами мишеней из дейтерированного полиэтилена, был предложен подход, в котором из первых принципов вычислялась вероятность акта D-D реакции на каждом шаге по времени для каждого дейтрона в процессе самосогласованного моделирования

РІС – методом взаимодействия лазерного импульса с мишенью, при этом, однако, процесс многократной ионизации мишени не учитывался. Было получено удовлетворительное согласие результатов расчетов с известными экспериментальными данными, кроме того, было показано, что предложенный метод моделирования эмиссии нейтронов позволяет исследовать случай слоистых мишеней, в которых выход нейтронов значительно возрастает. Очевидно, что параметры мишени, такие как ее состав, количество слоев, их толщина, расстояние между слоями, существенно влияют на ускорение дейтронов и эмиссию нейтронов.

Лазерно-плазменные источники нейтронов занимают уникальное положение среди короткоимпульсных нейтронных источников из-за своей сверхкороткой длительности и сверхмалого размера (точечности) [28]. Моделирование, проведенное в работах [4, 21] показало, что при облучении сверхинтенсивными лазерными импульсами мишеней из дейтерированного полиэтилена толщиной в несколько микрон, длительность импульса нейтронов, возникающих в ходе реакции синтеза двух дейтронов (DD- реакции), составляет около двух пикосекунд. В отличие от DD- реакции, для эффективного протекания которой дейтроны должны иметь кинетическую энергию не менее 30 кэВ, реакция фоторасщепления дейтрона не требует сколь-нибудь значительной кинетической энергии дейтрона, необходимо лишь наличие гамма-квантов с энергией, превышающей энергию связи протона и нейтрона в ядре дейтерия (2.23 МэВ). Гамма-кванты с такой энергией могут возникать в релятивистской лазерной плазме, содержащей ионы с большим зарядом ядра Z , в результате тормозного излучения ускоренных лазерным импульсом высокоэнергетичных электронов [3, 28]. Время существования высокоэнергетичных электронов по порядку величины совпадает с длительностью воздействующего на мишень лазерного импульса. По этой причине источник нейтронов, связанный с протеканием фотоядерных реакций, может иметь длительность сравнимую с длительностью фемтосекундного лазерного импульса [28].

3.1. Оптимизация выхода нейтронов при сверх-интенсивном лазерном воздействии на мишени из дейтерированного полиэтилена

В данном разделе описывается моделирование эмиссии нейтронов при различных параметрах мишени с целью оптимизации параметров лазерного нейтронного источника. В моделировании учитывается процесс многократной полевой ионизации атомов мишени при лазерном воздействии.

Для численного моделирования динамики ионизации мишени на начальной стадии лазерного воздействия был разработан и внедрен в РІС – код «КАРАТ» блок, включающий процесс полевой ионизации. В основу блока ионизации атомов в электромагнитном поле интенсивного фемтосекундного лазерного импульса положена теория Келдыша, подробно рассмотренная в обзоре [29]. Туннельный эффект в переменном электрическом поле лазерного импульса и многофотонная ионизация атомов являются двумя предельными случаями процесса нелинейной фотоионизации, характер которого существенно зависит от значения параметра адиабатичности γ (параметра Келдыша):

$$\gamma = \frac{I}{2K_0 F}, \quad K_0 = \frac{I}{\hbar \omega}, \quad F = \frac{E}{\chi^3 E_a}, \quad \chi = \sqrt{\frac{2I\hbar^2}{m_e e^4}} \quad (3.1)$$

где E – амплитуда электрического поля, ω – частота электрического поля, e – заряд электрона, m_e – масса электрона, $E_a = \frac{m_e^2 e^5}{\hbar^4} = 5,14 \cdot 10^9$ В/см – атомная единица напряженности электрического поля, I – потенциал ионизации атомного уровня. Туннельная ионизация атомных состояний имеет место в случае $\gamma \ll 1$, в то время как при $\gamma \gg 1$

процесс ионизации является многофотонным [30]. В случае сверхинтенсивных лазерных импульсов реализуется случай $\gamma \ll 1$.

При $\gamma \ll 1$ и линейной поляризации электромагнитной волны вероятность ионизации атома (или иона) в единицу времени определяется формулой:

$$W_{l,m} = W_{l,-m} = \left(\frac{m_e e^4}{\hbar^3} \right) \chi^2 \sqrt{\frac{3}{\pi}} (2l+1) \frac{(l+m)!}{2^m m! (l-m)!} C_{\chi l}^2 \cdot 2^{2n^*-m} F^{m+3/2-2n^*} \cdot \exp \left[-\frac{2}{3F} \left(1 - \frac{\gamma^2}{10} \right) \right], \quad (3.2)$$

где $\left(\frac{m_e e^4}{\hbar^3} \right) = 4,13 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$, квантовое число $m \geq 0$ – модуль проекции квантового числа

углового момента l вдоль электрического поля, $n^* = \frac{Z}{\chi}$, Z – безразмерный заряд атома

(или иона),

$$C_{\chi l}^2 = \left| \frac{2^{2n^*-2}}{n^* \Gamma(n^* + l + 1) \Gamma(n^* - l)} \right|, \quad \Gamma(n+1) = n!. \quad (3.3)$$

При выводе формулы (3.2) предполагалось выполнение условия многоквантовости процесса

$$K_0 = \frac{I}{\hbar \omega} \gg 1 \quad (3.4)$$

и условия малости электромагнитного поля по сравнению с атомным полем

$$F = \frac{E}{\chi^3 E_a} \ll 1. \quad (3.5)$$

Например, для лазерного излучения с длиной волны $\lambda = 1 \text{ мкм}$ ($\hbar \omega = 1.24 \text{ эВ}$), амплитудой электрического поля $E = 2.74 \cdot 10^{10} \text{ В/см}$ (интенсивность 10^{18} Вт/см^2) и атома водорода (потенциал ионизации $I = 13.6 \text{ эВ}$) имеем $K_0 = 11$ и $F = 5.3$. Таким образом, для рассматриваемых параметров условие (3.4) заведомо выполнено, в то время как условие (3.5) нарушается – амплитуда электрического поля лазерного импульса оказывается значительно больше величины атомного поля E_a . При этом вероятность ионизации (3.2) формально оказывается значительно больше единицы, что соответствует мгновенной ионизации. Однако с ростом потенциала и степени ионизации атомов с большим Z величина F уменьшается $\sim I^{-3/2}$ и достигает единицы при $I = 41 \text{ эВ}$. Тем самым оба условия (3.4) и (3.5) оказываются выполненными.

Модель ионизации атомов в электромагнитном поле интенсивного лазерного импульса реализована в блоке GFI (Gas Field Ionization), в котором в процессе самосогласованного моделирования, на каждом шаге по времени в каждой точке, где задано начальное распределение газа из атомов, вычисляется соответствующая локальной плотности газа вероятность ионизации и появления пары электрон – ион. Для появившихся многозарядных ионов на каждом шаге по времени для каждой отдельной частицы вычисляется вероятность последующей ионизации в соответствии со значением напряженности электрического поля в точке положения частицы. Если вероятность оказывается больше случайного числа $0 < R < 1$, то степень ионизации I частицы увеличивается на 1 и запускается еще один макро электрон. В предположении, что моделирование будет выполняться для случая облучения газа интенсивными лазерными импульсами, макро электроны запускаются с нулевыми начальными импульсами. В дальнейшем появившиеся макро частицы участвуют в PIC-моделировании на равных условиях со всеми остальными участниками ансамбля.

Счетная область, используемая для моделирования эмиссии нейтронов при воздействии сверх интенсивного лазерного импульсов на мишень, содержащую дейтерий, представляла собой квадрат с размерами 20 мкм по осям x и z . Шаг сетки в обоих направлениях был равен 20 нм. Лазерный импульс запускался с левой границы счетной области и распространялся в положительном направлении оси z . Граничные условия для электрических и магнитных полей на левой и правой границе счетной области обеспечивали ввод и вывод излучения. На верхней и нижней границе счетной области, граничные условия соответствовали условиям на идеально проводящей поверхности. Для макрочастиц все границы счетной области являлись поглощающими.

Мишень представляла собой слой дейтерированного полиэтилена $(CD_2)_n$ толщиной $l_0 = 4$ мкм и шириной $d_0 = 16$ мкм, занимающий область от $z = 5$ мкм до $z = 9$ мкм и от $x = 2$ мкм до $x = 18$ мкм. Ионизация мишени моделировалась при помощи блока «GFI», начальная концентрация атомов дейтерия составляла $n_D = 8.22 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$, концентрация атомов углерода – $n_C = 4.11 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$, что соответствовало твердотельной плотности дейтерированного полиэтилена $\rho_{pe} = 1.105 \text{ г/см}^3$.

В блоке ионизации использовался потенциал ионизации дейтерия $I = 13.6 \text{ эВ}$, а также потенциалы ионизации атома углерода, приведенные в Таблице 1.

Мишень облучалась по нормали лазерным импульсом линейной поляризации со следующими параметрами: длина волны $\lambda = 0.911 \text{ мкм}$, размер гауссова пятна облучения $r_0 = 3$ мкм с центром в точке $x = 10$ мкм, длительность импульса $\tau_0 = 45 \text{ фс}$. Максимум лазерного импульса достигал фронтальной поверхности мишени в момент времени $t = 61 \text{ фс}$. Интенсивность лазерных импульсов изменялась в диапазоне $I_0 = 10^{20} - 10^{21} \text{ Вт/см}^2$.

Воздействие фемтосекундного лазерного импульса на мишень из дейтерированного полиэтилена в момент времени $t = 80 \text{ фс}$ показано на рис. 1: цифрой 1 обозначен лазерный импульс, 2 – многзарядная плазма, образующаяся в результате лазерного воздействия, 3 – не ионизованные к рассматриваемому моменту времени области мишени.

Лазерное излучение, падая на фронтальную поверхность мишени, вызывает ионизацию атомов в тонком поверхностном слое толщиной порядка скин-слоя. Образующиеся при этом электроны, ускоряясь в поле лазерного излучения, создают электрическое поле разделения зарядов, которое приводит к распространению фронта ионизации вглубь мишени. Не смотря на то, что лазерное излучение не проникает вглубь мишени, а полностью экранируется слоем ионизованного вещества, вся мишень оказывается полностью ионизованной. При интенсивности $I_0 = 10^{20} \text{ Вт/см}^2$ средняя степень ионизации атомов углерода оказывается четырехкратной, при $I_0 = 10^{21} \text{ Вт/см}^2$ – шестикратной. Атомы дейтерия, разумеется, ионизованы полностью.

В результате лазерного воздействия на мишень формируются три потока дейтронов: дейтроны, движущиеся с фронтальной поверхности мишени навстречу лазерному импульсу; дейтроны, движущиеся с фронтальной поверхности вглубь мишени; и дейтроны с тыльной поверхности мишени, движущиеся по направлению распространения лазерного импульса.

Ускоренной оказывается лишь малая часть дейтронов на фронтальной и тыльной поверхности мишени, в то время как основная масса дейтронов в ее объеме остается холодной. Более того, только дейтроны, движущиеся с фронтальной поверхности вглубь мишени, могут эффективно участвовать в D-D реакциях с холодными дейтронами мишени, в то время как дейтроны, движущиеся от мишени, несмотря на их большую энергию, не могут дать заметный вклад в выход нейтронов.

При движении дейтронов сквозь объем мишени происходили акты D-D реакций, в результате которых рождались нейтроны в соответствии с моделью, подробно описан-

Табл. 1. Параметры многократной ионизации атома углерода

Кратность ионизации	Главное квантовое число n	Угловой момент l	Проекция углового момента m	Потенциал ионизации (эВ)
1	2	1	0	11.3
2	2	1	1	24.4
3	2	0	0	47.9
4	2	0	0	64.5
5	1	0	0	392
6	1	0	0	490

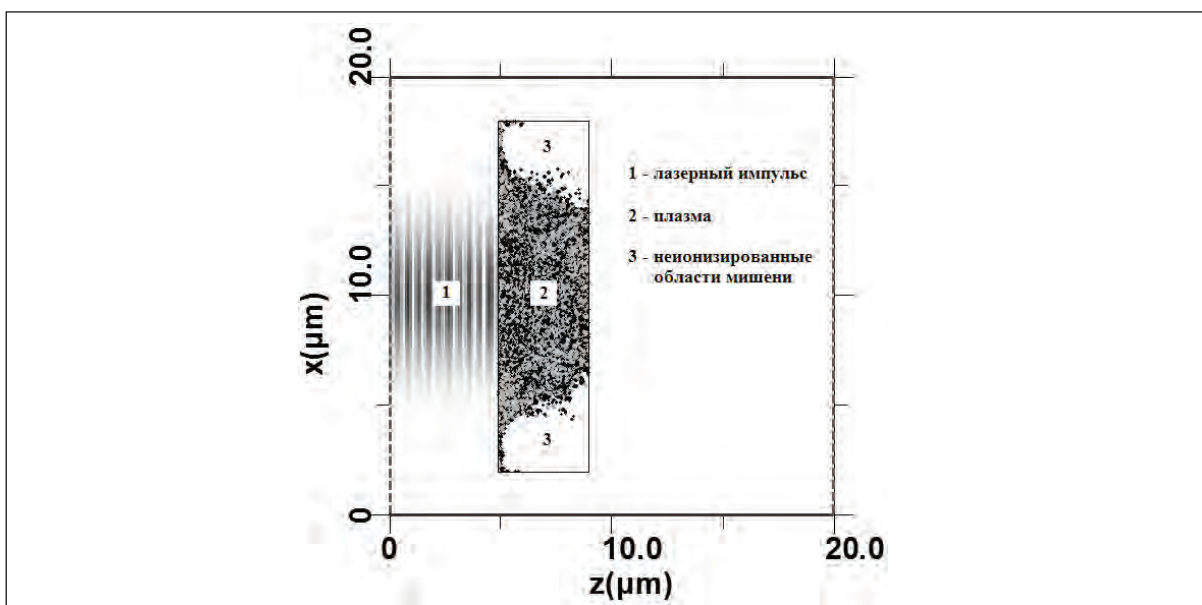


Рис. 1. Воздействие сверхинтенсивного фемтосекундного лазерного импульса на мишень из дейтерированного полиэтилена в момент времени $t=80$ фс: 1 – лазерный импульс; 2 – многозарядная плазма, образующаяся в результате лазерного воздействия; 3 – не ионизованные к рассматриваемому моменту времени области мишени.

ной в работе [4]. Вероятность акта реакции синтеза на каждом шаге по времени для каждой первичной макрочастицы, соответствующей дейтрону, вычислялась по формуле:

$$P = \sigma_{dd} \cdot |\vec{V}_{rel}| \cdot n_d \cdot \Delta t, \quad (3.6)$$

где $\sigma_{dd}(E_0) = (107.4 + 0.33E_0)E_0^{-1} \exp(-44.4/\sqrt{E_0})$ – сечение реакции синтеза (в барнах) $D + D \rightarrow {}^3\text{He} + n$, $\vec{V}_{rel}$ – относительная скорость первичного дейтрона и случайного дейтрона в точке нахождения первичного дейтрона, n_d – концентрация дейтронов в этой точке, E_0 – кинетическая энергия дейтрона (в килоэлектронвольтах), соответствующая скорости $\vec{V}_{rel}$, Δt – шаг по времени.

Нейтроны, рожденные в объеме мишени, начинали попадать на границы счетной области спустя примерно 300 фс после окончания воздействия лазерного импульса на мишень. В течение 1 пс потоки нейтронов нарастали, достигая максимума, а затем уменьшались практически до нуля в течение следующих полутора пикосекунд.

На рис. 2 приводится зависимость полного выхода нейтронов (на 1 Дж лазерной энергии) от интенсивности лазерного импульса. Кривая 1 соответствует мишени из дейтерированного полиэтилена с параметрами, описанными выше. Кривая 2 на рис. 2 соответствует мишени, содержащей только дейтерий в концентрации, равной концентрации дейтерия в мишени из дейтерированного полиэтилена. Сравнение кривых 1 и 2 показывает, что в случае мишени из чистого дейтерия выход нейтронов в 25 – 50 раз

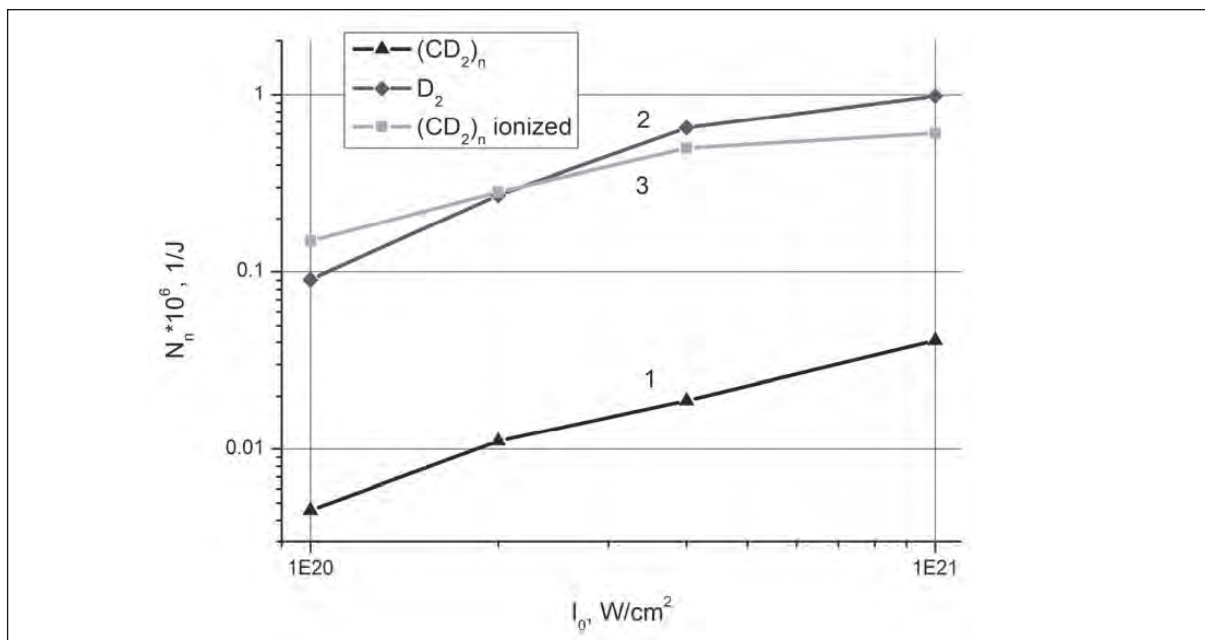


Рис. 2. Зависимости выхода нейтронов на 1 Дж энергии лазерного излучения N_n от максимальной интенсивности лазерного импульса для мишеней из $(\text{CD}_2)_n$ (1), D_2 (2) и предварительно ионизированной мишени из $(\text{CD}_2)_n$ (3).

выше, чем в случае мишени из дейтерированного полиэтилена, т.е. наличие в мишени ионов углерода приводит к существенному уменьшению выхода нейтронов.

Значительное влияние на выход нейтронов оказывает процесс полевой ионизации мишени. Действительно, как видно из кривой 3, соответствующей предварительно ионизированной мишени из дейтерированного полиэтилена с двукратной ионизацией углерода, выход нейтронов в этом случае получается завышенным и приблизительно равен выходу нейтронов в случае мишени из чистого дейтерия.

Для выяснения причин влияния ионов углерода на выход нейтронов мы исследовали зависимости различных параметров лазерной плазмы от концентрации углерода при фиксированной интенсивности лазерного импульса $I_0 = 4 \cdot 10^{20} \text{ Вт/см}^2$. Было установлено, что энергия лазерного излучения, поглощаемая электронами на фронтальной поверхности мишени и преобразующаяся в их кинетическую энергию, практически не зависит от концентрации углерода. Действительно, доля поглощенной электронами лазерной энергии в случае мишени из чистого дейтерия ($n_c = 0$) составляет 25.4 %, а в случае в мишени из дейтерированного полиэтилена ($n_c = 4.11 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$) доля лазерной энергии составляет 24.6%. При этом в мишени из чистого дейтерия ($n_c = 0$) полное количество электронов в четыре раза меньше, чем в мишени из дейтерированного полиэтилена. В результате максимальная температура электронов и, как следствие, максимальная кинетическая энергия дейтронов в случае мишени из чистого дейтерия оказывается больше, чем в случае мишени из дейтерированного полиэтилена. На рис. 3 и рис. 4 приводятся зависимости максимальной температуры электронов $T_{e, \max}$ и максимальной кинетической энергии дейтронов $K_{D, \max}$, отнесенной к энергии лазерного импульса, соответственно, от концентрации атомов углерода в мишени. Как видно из графиков, максимальная температура электронов и максимальная кинетическая энергия дейтронов в случае мишени из чистого дейтерия в 4,4 раз больше, чем в случае мишени из дейтерированного полиэтилена. Выход нейтронов при этом увеличивается в 34 раза (см. рис. 2).

Таким образом, для увеличения выхода нейтронов предпочтительными являются твердотельные мишени такого состава, что концентрация атомов дейтерия в них мак-

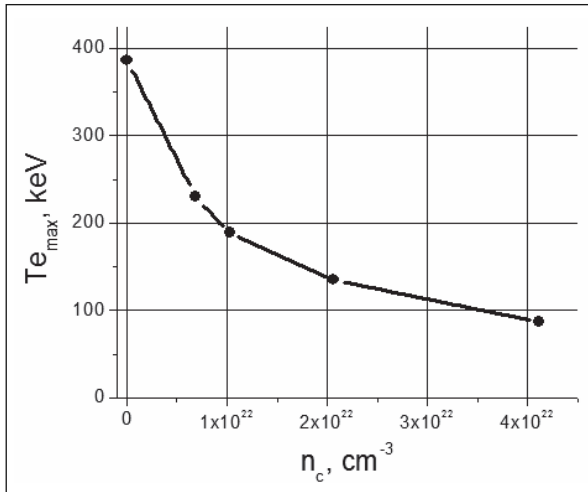


Рис. 3. Зависимость максимальной температуры электронов $T_{e, \max}$ от концентрации атомов углерода.

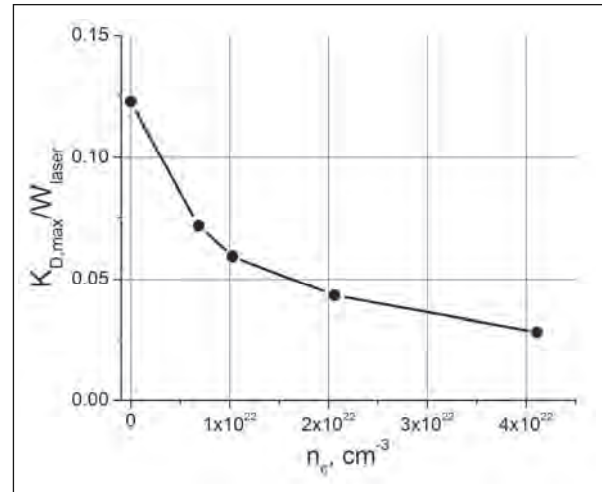


Рис. 4. Зависимость максимальной кинетической энергии дейтронов $K_{D, \max}$, отнесенной к полной энергии лазерного импульса W_{laser} , от концентрации атомов углерода.

симальна (см. формулу (3.6)), а количество электронов с учетом многократной ионизации атомов мишени – минимально (что обеспечивает их максимальную температуру). Перспективными с этой точки зрения представляются мишени из дейтерида лития Li D. В таких мишенях концентрация дейтронов ($n_D = 6.13 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$) в 1.34 раза меньше, чем в мишенях из дейтерированного полиэтилена, при этом максимальная концентрация электронов при полной ионизации мишени также в 1.34 раза меньше. Можно ожидать, что при прочих равных условиях максимальная температура электронов в мишенях из дейтерида лития будет заметно выше, чем в мишенях из дейтерированного полиэтилена.

Дополнительная возможность увеличения выхода нейтронов при сверхинтенсивном лазерном воздействии на мишени, содержащие дейтерий, заключается в использовании мишеней сложной формы, в частности, слоистых. При облучении слоистой мишени потоки дейтронов, аналогичные описанным выше трем потокам дейтронов, формируются в каждом из слоев. Такое перераспределение потоков приводит к тому, что количество ускоренных дейтронов, движущихся во встречных направлениях внутри слоистой мишени значительно возрастает, и увеличивает выход нейтронов. Были проведены расчеты, в которых параметры лазерного импульса и мишени в точности соответствовали случаю, рассмотренному выше ($n_c = 4.11 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$), за исключением того, что мишень была разделена на одинаковые части, разнесенные на равные расстояния друг от друга в положительном направлении оси z . Интенсивность лазерного импульса составляла $I_0 = 4 \cdot 10^{20} \text{ Вт/см}^2$. На рис. 5 показана зависимость выхода нейтронов на 1 Дж лазерной энергии от количества слоев в мишени из дейтерированного полиэтилена. Были рассмотрены следующие варианты разделения мишени на слои: один слой, толщиной 4 мкм, с плотностью ρ_{pe} ; два слоя, толщиной 2 мкм, с плотностью ρ_{pe} , разнесенные на 2 мкм; четыре слоя, толщиной 1 мкм, с плотностью ρ_{pe} , разнесенные на 1 мкм; восемь слоев, толщиной 0,5 мкм, с плотностью ρ_{pe} , разнесенных на 0,5 мкм; шестнадцать слоев, толщиной 0,25 мкм, с плотностью ρ_{pe} , разнесенные на 0,25 мкм; тридцать два слоя, толщиной 0,125 мкм, с плотностью ρ_{pe} , разнесенные на 0,125 мкм; один слой, толщиной 8 мкм, с плотностью $0,5 \rho_{pe}$, соответствующий бесконечному числу слоев с толщиной, стремящейся к нулю. Средняя плотность мишеней при усреднении по толщине 8 мкм во всех семи вариантах была равна $0,5 \rho_{pe}$.

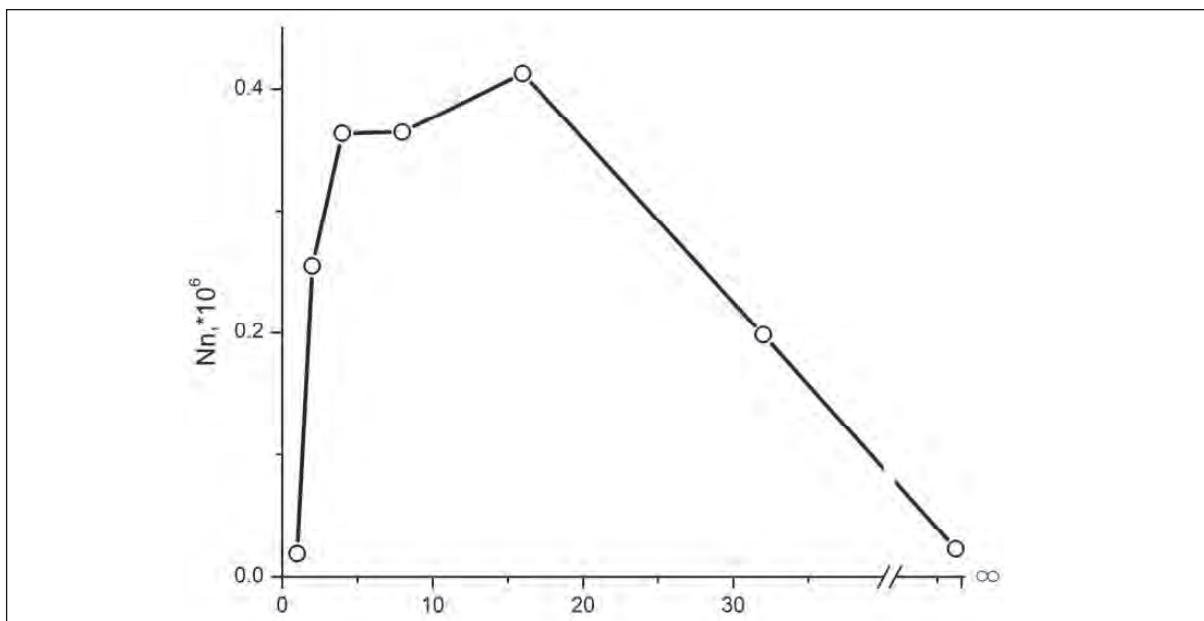


Рис. 5. Зависимость выхода нейтронов на 1 Дж энергии лазерного излучения N_n от количества слоев мишени j .

Как видно из рис. 5, даже наличие двух слоев у мишени ведёт к почти четырнадцатикратному росту выхода нейтронов ($N_n = 255000$) на 1 Дж лазерной энергии по сравнению с одним слоем толщиной 4 мкм, с плотностью ρ_{pe} ($N_n = 18800$). Максимальное число нейтронов $N_n = 413000$ нейтронов достигается для мишени из шестнадцати слоев, разнесенных на 0,25 мкм друг от друга. Дальнейшее увеличение количества слоев и уменьшение расстояния между ними ведет к постепенному снижению выхода нейтронов. В предельном случае бесконечного числа слоев (один слой, толщиной 8 мкм, с плотностью $0,5 \rho_{pe}$) выход нейтронов уменьшается до величины $N_n = 22600$.

Для объяснения такой зависимости рассмотрим распределение z -компоненты электрического поля разделения зарядов в слоистой мишени, которое является суперпозицией электрических полей каждого слоя. На рис. 6 и 7 показаны распределения z -компонент электрического поля (черные сплошные кривые) для мишеней, состоящих из 16 и 32 слоев, соответственно в момент времени $t = 200$ фс: распределение электрического поля каждого слоя имеет биполярную форму с отрицательным и положительным экстремумами на левой и правой границе слоя, соответственно. В областях, отвечающих экстремумам поля, происходит наиболее эффективное ускорение, и формируются потоки дейтронов, направленные от границ слоя. Если расстояние между слоями уменьшается, электрические поля от левой и правой границ соседних слоев (за исключением крайних левого и правого слоя) начинают перекрываться и взаимно компенсироваться (см. рис. 7). В результате эффективность ускорения дейтронов внутри слоистой мишени падает, что приводит к снижению выхода нейтронов. Этот вывод подтверждает рис. 8, на котором показаны энергетические спектры дейтронов для мишеней из 16 (кривая 1) и 32 слоев (кривая 2) в момент времени $t = 1$ пс при их облучении лазерным импульсом с интенсивностью $I_0 = 4 \cdot 10^{20}$ Вт/см². Как видно из рис. 8 максимальная энергия высокоэнергетичных дейтронов в мишени из 16 слоев более чем в два раза превосходит максимальную энергию дейтронов в мишени из 32 слоев. Кроме того, количество дейтронов с энергией, превышающей 100 кэВ в мишени из 16 слоев в два раза больше, чем в мишени из 32 слоев.

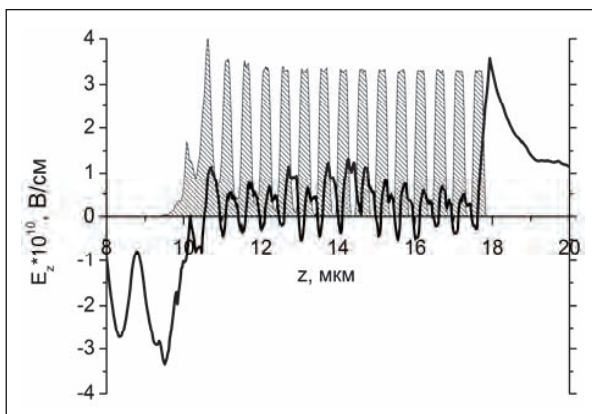


Рис. 6. Распределение компоненты электрического поля E_z (1) и концентрации дейтронов n_d (2) в мишени, состоящей из 16 слоев, в момент времени $t=200$ фс.

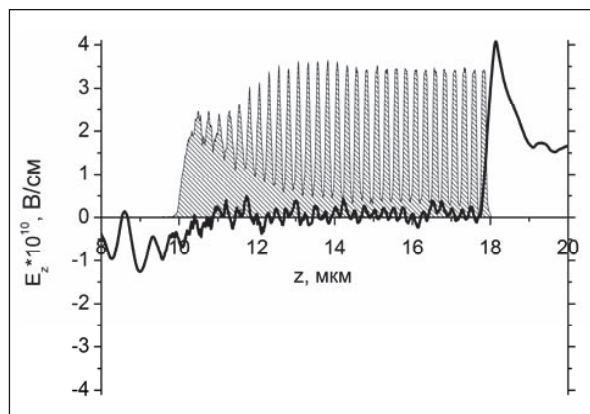


Рис. 7. Распределение компоненты электрического поля E_z (1) и концентрации дейтронов n_d (2) в мишени, состоящей из 32 слоев, в момент времени $t=200$ фс.

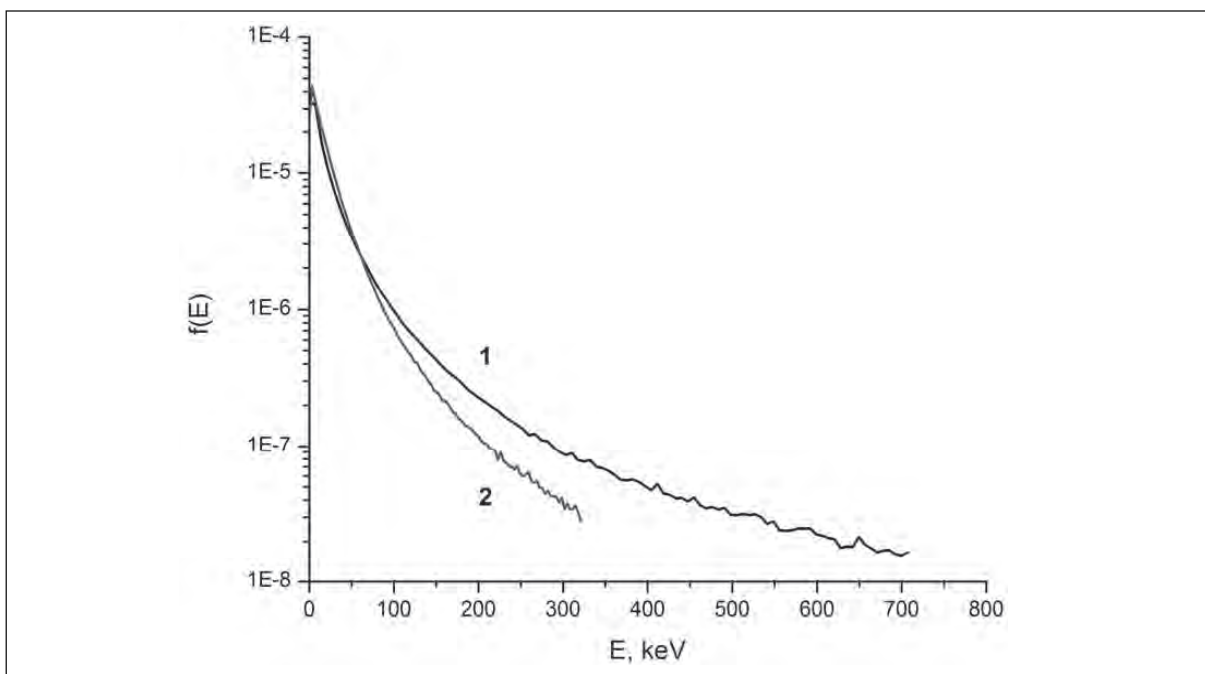


Рис. 8. Энергетические спектры дейтронов в мишенях из 16 (1) и 32 (2) слоев в момент времени $t=1$ пс.

Как видно из рис. 5, зависимость выхода нейтронов от количества слоев мишени (и расстояния между ними) достаточно слабая. Определяющим является само наличие в мишени полостей, на границах которых формируются разнонаправленные потоки ускоренных дейтронов. Таким образом, для существенного увеличения выхода нейтронов при облучении твердотельных мишеней сверхинтенсивными фемтосекундными лазерными импульсами целесообразным представляется использование слоистых или пористых мишеней с размерами полостей порядка одного микрона.

3.2. Моделирование термоядерных процессов при воздействии сверхинтенсивных фемтосекундных лазерных импульсов на тонкопленочные мишени из дейтерида палладия

В данном разделе при помощи двумерной XZ-версии PIC-кода "Карат" исследуются физические механизмы, обуславливающие формирование нейтронных импульсов в

результате протекания ядерных реакций фоторасщепления в плазме под действием лазерного излучения. Перспективными для эффективного фоторасщепления дейтронов, представляются мишени, состоящие из тяжелого металла, например, палладия, с растворенным в нем дейтерием. В таких мишенях из-за большого заряда ядер металла эффективно протекает процесс генерации гамма-квантов тормозного излучения (сечение рассеяния пропорционально Z^2), кроме того концентрация дейтерия, растворенного в палладии, может достигать величин, сравнимых с твердотельными, например, в богатой дейтерием β – фазе дейтерида палладия PdD_x (значение $x > 0.6$ [31]). Дейтрид палладия был выбран в качестве материала мишени для исследования.

В код "Карат" включен ряд моделей, которые можно объединить под общим названием бинарных реакций (во всех этих моделях вычисляется вероятность акта реакции и сравнивается со случайным числом χ из интервала от 0 до 1). Математические модели таких бинарных реакций, как генерация гамма-квантов тормозного излучения и DD-реакция, были подробно описаны в работах [3, 4, 21]. Для моделирования реакции фоторасщепления дейтрона был разработан и включен в код "Карат" блок, состоящий из двух подпрограмм. В первой подпрограмме вычисляется и заносится в таблицу сечение реакции фоторасщепления дейтрона под действием гамма-кванта в лабораторной системе координат в соответствии с известными [32, 33] формулами, учитывающими электрическое (E) и магнитное дипольное (M) взаимодействие гамма-кванта с ядром дейтерия, $\sigma_{d\gamma}(\hbar\omega) = \sigma_E + \sigma_M$,

$$\sigma_E = \frac{8\pi}{3} \alpha \frac{\hbar^2}{m_p} \frac{\sqrt{I}(\hbar\omega - I)^{3/2}}{(\hbar\omega)^3} (1 + \kappa \cdot a), \quad \sigma_M = \frac{8\pi}{3\hbar c} (\mu_p - \mu_n)^2 \frac{\sqrt{I(\hbar\omega - I)}(\sqrt{I} + \sqrt{I_1})^2}{\hbar\omega(\hbar\omega - I + I_1)}; \quad (3.7)$$

где $\alpha = 1/137$ – постоянная тонкой структуры, m_p – масса протона, $I = 2.23$ МэВ – энергия связи протона и нейтрона в ядре дейтерия, $\kappa = \sqrt{2\mu_D \cdot I} / \hbar$, (величина $1/\kappa = 4,32 \cdot 10^{-13}$ см – приближенный радиус дейтрона), $\mu_D = 0.85742 \mu_n$ – магнитный момент дейтрона, $\mu_n = -1.91315 \frac{e\hbar}{2m_p c}$ – магнитный момент нейтрона, $\mu_p = 2.7927 \frac{e\hbar}{2m_p c}$ – магнитный момент протона, $a = 1.5 \cdot 10^{-13}$ см – радиус действия ядерных сил, $I_1 = 0.067$ МэВ – виртуальный уровень системы "протон-нейтрон" с нулевым спином.

Во второй подпрограмме в цикле по времени, в процессе самосогласованного моделирования содержащей дейтроны плазмы, облучаемой гамма-квантами, на каждом шаге по времени для каждой макрочастицы, соответствующей первичному гамма-кванту, вычисляется вероятность акта реакции расщепления дейтрона следующим образом. Во всей счетной области в каждом узле вычисляется плотность дейтронов n_d . Для конкретной макрочастицы – гамма-кванта с определенной энергией $\hbar\omega$ из рассчитанной в первой подпрограмме таблицы берется полное сечение реакции σ и вычисляется вероятность $P = \sigma \cdot c \cdot n_d \cdot \Delta t$, где c – скорость света, Δt – шаг по времени. Далее вычисленная вероятность, которая при используемых счетных параметрах значительно меньше 1, сравнивается со случайным числом χ , и если вероятность меньше этого числа, то осуществляется переход к следующему макро гамма-кванту. В противном случае начинается разыгрываться акт расщепления дейтрона. Сначала находится дейтрон, ближайший к первичному гамма-кванту. Обе частицы уничтожаются. Затем из центра масс указанного дейтрона в противоположных направлениях запускаются нейтрон и протон со скоростями $V = \sqrt{\frac{\hbar\omega - I}{m_p}}$ в системе центра масс. Угол разлета в плоскости, нормальной направлению гамма-кванта, выбирается случайным, а угол θ между на-

правлением разлета и направлением первичного гамма- кванта, в зависимости от реализовавшегося механизма (Е-М), выбирается в соответствии с вероятностью, пропорциональной $\sin^2(\theta)$ или равномерно распределенной от 0 до π . После запуска нейтрона вычисляется его движение до прихода на границу счетной области, где фиксируются его параметры. Считается, что нейтрон внутри счетной области ни с чем не взаимодействует и движется с начальной энергией. Образовавшиеся в процессе фоторасщепления протоны участвуют в самосогласованном PIC- моделировании наряду с остальными заряженными частицами.

Помимо реакции фоторасщепления в расчете моделируется протекание реакций синтеза дейтронов (DD-реакции) по двум практически равновероятным каналам с выходом нейтрона и ядра ^3He , а также с выходом протона и ядра трития. Описание блока моделирования DD- реакций приводится в работе [4].

Расчетная область представляла собой квадрат с размерами 30 мкм по осям x и z . Шаг сетки в обоих направлениях был равен 20 нм. Лазерный импульс запускался с левой границы счетной области и распространялся в положительном направлении оси z . Граничные условия для электрических и магнитных полей на границах счетной области обеспечивали ввод и вывод излучения. Для макрочастиц все границы счетной области являлись поглощающими. Мишень представляла собой слой из дейтерида палладия $\text{PdD}_{0.6}$ шириной $d_0 = 26$ мкм, рассматривались три значения толщины мишени $L = 1; 2; 3$ мкм. Для обеспечения лучшего поглощения лазерного излучения [34] фронтальная поверхность мишени задавалась гофрированной с периодом и глубиной гофрировки 0.5 мкм. Поскольку энергия движения частиц в поле моделируемого лазерного импульса на много порядков превышает энергию связи электронов в твердом теле мишени, мишень моделировалась как однородная бесстолкновительная плазма, состоящая из электронов с концентрацией $n_e = 3,427 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$, ионов палладия Pd^{5+} с массой $m_{\text{Pd}} = 106.42 m_p$, концентрацией $n_{\text{Pd}} = 6,12 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ и степенью ионизации $N = 5$, дейтронов D^+ с массой $m_D = 2 m_p$ и концентрацией $n_D = 3,67 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$.

Мишень облучалась по нормали лазерным импульсом линейной поляризации (электрическое поле – в плоскости XZ) со следующими параметрами: длина волны $\lambda = 1$ мкм, размер гауссова пятна облучения $r_0 = 15$ мкм с центром при $x = 15$ мкм, длительность гауссова импульса $t_0 = 50$ фс. В расчетах использовались значения интенсивности лазерных импульсов в диапазоне $I_0 = 2.5 \cdot 10^{20} - 4 \cdot 10^{21} \text{ Вт/см}^2$.

Отметим, что при воздействии лазерного импульса в указанном диапазоне интенсивностей на атомы палладия, их степень ионизации может существенно превосходить используемое в расчетах значение $N = 5$. Выбор этой величины обусловлен ограничением на максимальное количество макрочастиц, используемых в расчете, которое на доступной вычислительной технике не может существенно превышать 10^7 . Предварительные расчеты для мишени толщиной 1 мкм и степенью ионизации палладия $N = 10$ и $N = 15$ показали, что основные результаты настоящей работы качественно не изменяются. Более подробное изучение влияния степени ионизации палладия на исследуемые процессы, протекающие в лазерной плазме, предполагается провести в дальнейшем.

Поскольку расчет проводился в двухмерной геометрии, третье измерение (вдоль оси y) оставалось формально незадействованным. Поэтому величины, такие как полная энергия лазерного излучения, количество гамма-квантов, выход нейтронов и др., определялись на единицу длины (см) вдоль оси y . Предполагая, что пятно лазерного импульса является круглым, будем использовать размерный множитель $\sqrt{\pi} r_0 = 26.5 \cdot 10^{-4} \text{ см}$ для пересчета требуемых физических величин в их естественную размерность.

На рис. 9 приводится зависимость от времени количества гамма- квантов $N_{\gamma,sh}$ (пунктирная кривая) с энергией, превышающей порог фоторасщепления дейтрона

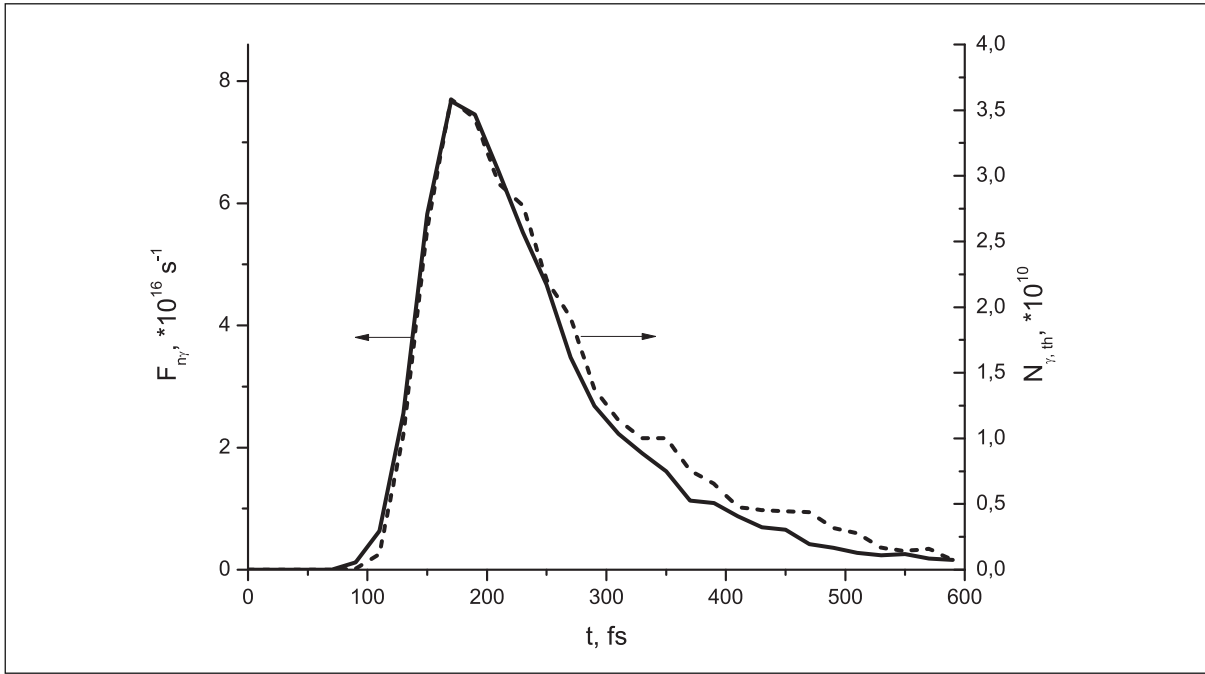


Рис. 9. Зависимость от времени выхода нейтронов в единицу времени $F_{n\gamma}$ в реакциях фоторасщепления дейтронов (сплошная кривая) и количества гамма-квантов $N_{\gamma,th}$ с энергией, превышающей E_{th} (пунктирная кривая) при $L = 2$ мкм и $I_0 = 10^{21}$ Вт/см²

$E_{th} = I = 2.23$ МэВ (см. формулу (3.7)), в пространственной области, которую в начальный момент времени занимала мишень толщиной $L = 2$ мкм при ее облучении лазерным импульсом с интенсивностью $I_0 = 10^{21}$ Вт/см². Сплошная кривая на рис. 22 показывает полный выход нейтронов в единицу времени (флюенс) $F_{n\gamma}$, образовавшихся в ходе реакций фоторасщепления дейтронов мишени, в зависимости от времени. Поведение обеих кривых на рис. 9 практически одинаково в течение всего процесса фоторасщепления дейтронов, длящегося приблизительно 600 фс. Длительность нейтронного импульса, а также интервал времени, в течение которого высокоэнергетичные гамма-кванты находятся в мишени, вблизи атомов дейтерия, приблизительно равны друг другу и составляют, соответственно, FWHM = 126 фс и 138 фс (полная ширина на половине амплитуды).

Таким образом, величина $F_{n\gamma}$ в нулевом приближении пропорциональна $N_{\gamma,th}$. Действительно, для полного выхода нейтронов в единицу времени, с учетом формулы для вероятности реакции фоторасщепления, имеем:

$$F_{n\gamma} = \frac{dN_{n\gamma}}{dt} \propto \frac{d}{dt} \left(\sum_{\gamma} \sigma(\hbar\omega) \cdot c \cdot n_d \cdot dt \right) \approx \sigma_{\max,\gamma} \cdot c \cdot n_{d0} \cdot N_{\gamma,th}, \quad (3.8)$$

где суммирование ведется по всем гамма-квантам с энергией $\hbar\omega > E_{th}$, $N_{n\gamma}$ – полный выход нейтронов в реакциях фоторасщепления дейтрона, $\sigma_{\max,\gamma} = 0.002$ Барн – максимальное сечение реакции фоторасщепления дейтрона (достигаемое при энергии гамма-кванта $\hbar\omega = 4.3$ МэВ), рассчитанное по формуле (3.7), $n_{d0} = 3.67 \cdot 10^{23}$ см⁻³ – начальная концентрация дейтронов. Подставляя в формулу (3.8) приведенные выше численные значения, а также максимальное значение $N_{\gamma,th} = 3.5 \cdot 10^{10}$ (см. рис. 9), получим оценку сверху величины $F_{n\gamma} = 7.7 \cdot 10^{17}$ с⁻¹, которая всего лишь на порядок превосходит точное значение $F_{n\gamma} = 7.67 \cdot 10^{16}$ с⁻¹, полученное в расчете (полный выход нейтронов в данном случае равен $N_{n\gamma} = 11800$).

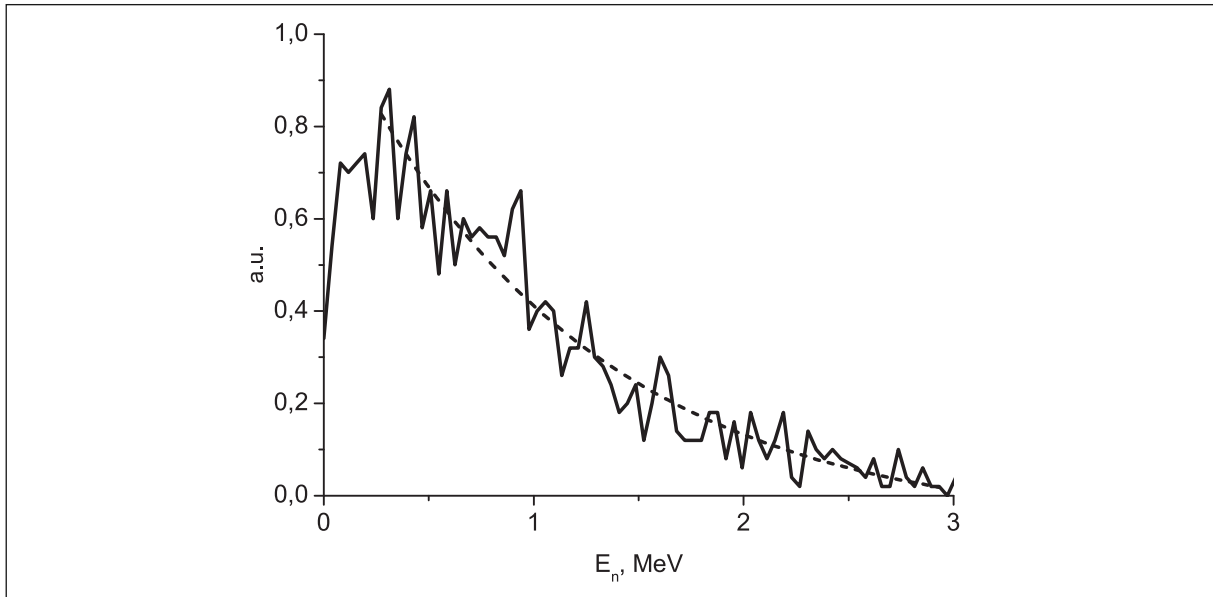


Рис. 10. Энергетический спектр нейтронов, образующихся в ходе реакций фоторасщепления дейтронов при облучении мишени из дейтерида палладия толщиной $L = 2$ мкм лазерным импульсом с интенсивностью $I_0 = 10^{21}$ Вт/см²

Рис. 9. Зависимость от времени выхода нейтронов в единицу времени F_{ny} в реакциях фоторасщепления дейтронов (сплошная кривая) и количества гамма-квантов $N_{\gamma,th}$ с энергией, превышающей E_{th} (пунктирная кривая) при $L = 2$ мкм и $I_0 = 10^{21}$ Вт/см²

Энергетический спектр нейтронов, образующихся в ходе реакций фоторасщепления дейтронов, приведен на рис. 10 (сплошная кривая). Пунктирная кривая — аппроксимация спектра экспоненциальной функцией вида $A \cdot \exp(-E/T_{eff}) + B$, по которой можно определить эффективную температуру нейтронов $T_{eff} = 1.18$ МэВ. Она хорошо согласуется со средней энергией нейтронов, вычисленной усреднением по всем нейтронам $\langle E_n \rangle = 1$ МэВ, образовавшимся в ходе реакций фоторасщепления дейтронов при расчете кодом «Карат». Таким образом, спектр нейтронов фоторасщепления является максвелловским, что отражает характер спектра гамма-квантов, участвующих в реакциях фоторасщепления дейтрона, образующихся, в свою очередь, в результате тормозного излучения высокоэнергетичных электронов, спектр которых также является максвелловским.

Помимо реакций фоторасщепления дейтронов, дополнительным источником нейтронов в лазерной плазме служат реакции синтеза дейтронов (DD-реакции), в ходе которых образуются нейтроны и ядра гелия ^3He .

В отличие от «термализованных» нейтронов, образующихся при фоторасщеплении дейтронов, нейтроны, возникающие в ходе DD-реакций имеют строго определенную кинетическую энергию 2.45 МэВ в системе центра масс. Отличие полученного при расчете спектра DD-нейтронов (рис. 24) от монохроматического связано с движением высокоэнергетичных дейтронов.

Временная форма импульса источника нейтронов, образующихся в ходе DD-реакций, аналогична представленной на рис. 9. Однако, полный выход нейтронов N_{nD} , а также максимальная величина полного выхода в единицу времени F_{nD} в случае DD-реакций оказывается примерно на два порядка выше, чем соответствующие величины в случае реакций фоторасщепления дейтронов, поскольку максимальное значение сечения DD-реакции с выходом нейтрона ($\sigma_{max,D} = 0.11$ Барн [4]) в 55 раз выше максималь-

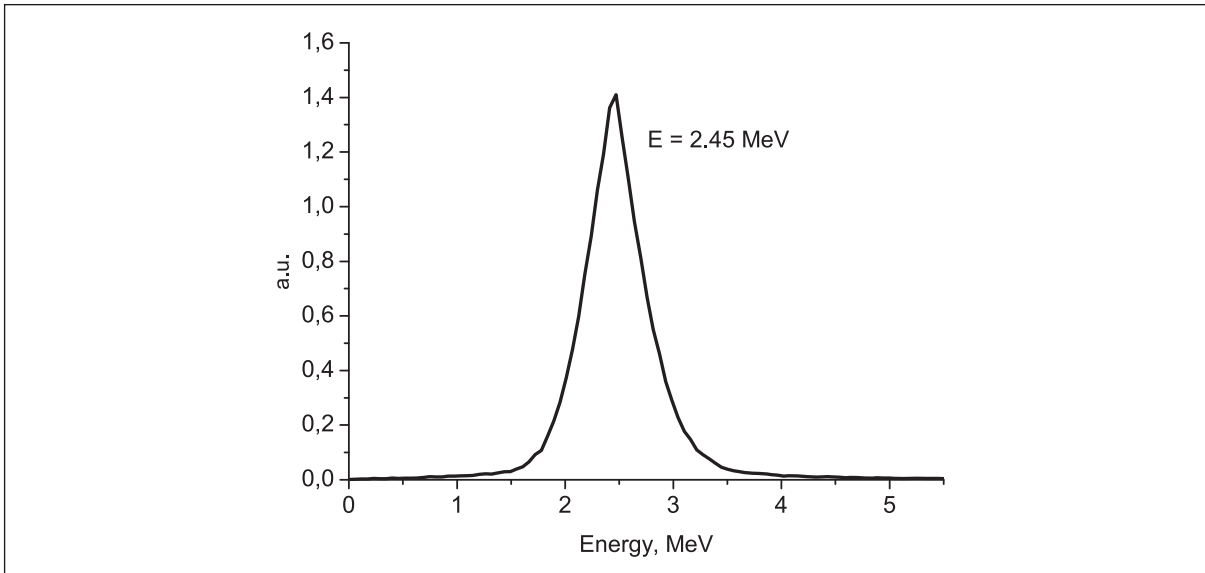


Рис. 11. Энергетический спектр нейтронов, возникающих в ходе DD-реакций, протекающих при облучении мишени из дейтерида палладия толщиной $L = 2$ мкм лазерным импульсом с интенсивностью $I_0 = 10^{21}$ Вт/см²

ного значения сечения реакции фоторасщепления дейтрона. Например, при облучении мишени толщиной $L=2$ мкм лазерным импульсом с интенсивностью $I_0=10^{21}$ Вт/см² полный выход нейтронов составляет $N_{nD} = 6 \cdot 10^6$, а максимальное значение величины F_{nD} достигает $F_{nD, \max} = 1.5 \cdot 10^{19}$ с⁻¹.

На рис. 12 приводятся зависимости от толщины мишени длительностей импульсов нейтронов, образовавшихся в реакциях фоторасщепления дейтронов (кривая 1) и нейтронов, образовавшихся в ходе DD-реакций (кривая 2). Видно существенное различие поведение кривых 1 и 2: для нейтронов фоторасщепления длительность практически постоянна, а для DD нейтронов она пропорциональна толщине мишени.

Для объяснения такого поведения нейтронов рассмотрим вопрос о формировании потоков высокоэнергетичных дейтронов, участвующих в DD-реакциях. Как было показано в работе [4], при воздействии сверх-интенсивного фемтосекундного лазерного импульса на тонкую мишень, содержащую дейтерий, формируются три потока высокоэнергетичных дейтронов: поток с фронтальной поверхности мишени навстречу лазерному импульсу и поток с тыльной поверхности мишени по направлению лазерного импульса, обусловленные квазистатическими полями разделения зарядов на границах мишени, не дают существенного вклада в DD-реакции, в то время как поток дейтронов с фронтальной поверхности по направлению лазерного импульса (т.е. вглубь мишени), обусловленный световым давлением лазерного импульса, в основном обеспечивает протекание DD-реакций. Подобные потоки дейтронов формируются и в рассматриваемой задаче.

Оценим скорость дейтронов на фронтальной поверхности мишени, ускоренных световым давлением лазерного импульса вглубь мишени. Из закона сохранения импульса, переданного излучением тонкому слою плазмы на поверхности мишени, для скорости этого слоя (фактически, для скорости дейтронов в этом слое) получаем (см., например, [35]):

$$V_D = \sqrt{\frac{P}{m_D n_D}} = \sqrt{\frac{2RI_0}{cm_D n_D}}, \quad (3.9)$$

где $P = 2RI_0/c$ – световое давление, R – коэффициент отражения лазерного импульса от плазменной мишени.

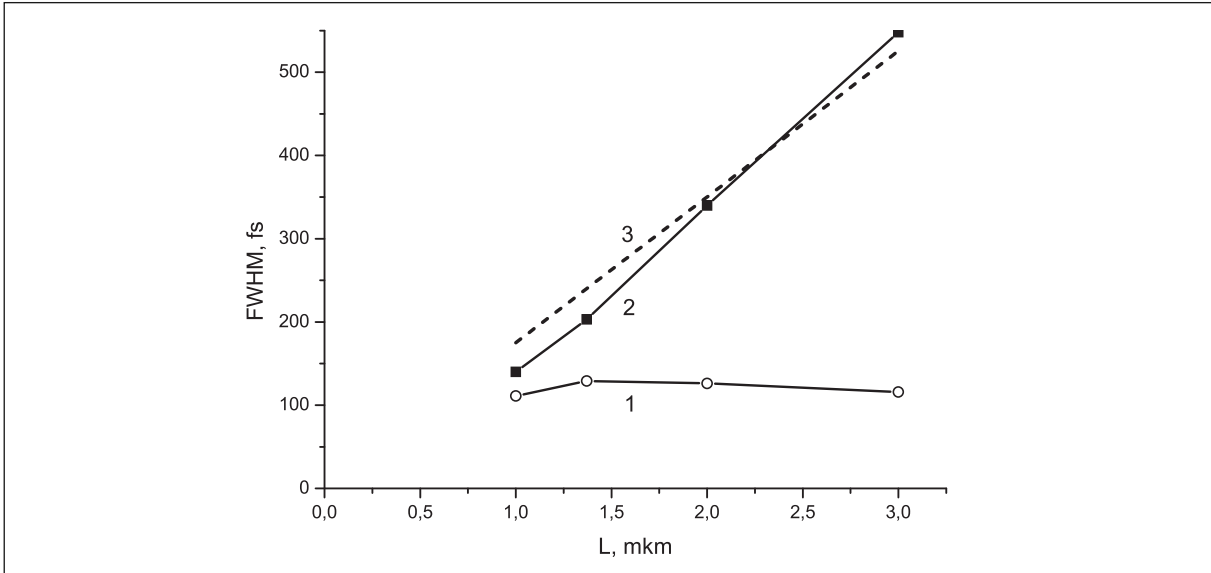


Рис. 12. Зависимость длительностей импульсов нейтронов, образовавшихся в реакциях фоторасщепления дейтронов (кривая 1) и в DD- реакциях (кривая 2) от толщины мишени L . Кривая (3) – расчет по формуле (4.10) при $I_0=10^{21}$ Вт/см² и $R=0.1$

Поскольку плазменная мишень является в целом квазинейтральной, то, как было показано в работе [36], дейтроны, ускоренные на ее поверхности световым давлением, движутся сквозь плазменную мишень практически с постоянной скоростью V_D .

Очевидно, что ускоренные дейтроны участвуют в DD-реакциях с покоящимися дейтронами мишени в течение интервала времени их "баллистического" пролета сквозь мишень, поэтому длительность импульса нейтронов, образующихся в ходе DD- реакций, можно оценить по формуле:

$$\tau_{nD} = \frac{L}{V_D} = L \sqrt{\frac{cm_D n_D}{2RI_0}}, \quad (3.10)$$

где, напомним, L – толщина мишени. Таким образом, длительность нейтронного импульса прямо пропорциональна толщине мишени и обратно пропорциональна квадратному корню из интенсивности лазерного импульса. На рис. 12 (кривая 3) приводится расчет по формуле (3.10) зависимости длительности нейтронного импульса от толщины мишени при $I_0=10^{21}$ Вт/см². Значение коэффициента отражения $R=0.1$ определялось из результатов моделирования кодом "Карат", как отношение полной энергии лазерного излучения, отраженной от мишени толщиной $L=2$ мкм, к полной энергии лазерного импульса.

Интересно отметить, что достаточно грубая модель (3.10) неожиданно хорошо описывает результаты моделирования кодом "Карат", приведенные на рис. 12 (кривая 2). Более того, формула (3.10) правильно описывает зависимость длительности импульса DD-нейтронов от интенсивности лазерного импульса, как это видно из сравнения кривых 2 и 3 на рис. 13: кривая 2 показывает длительности импульсов нейтронов, образовавшихся в ходе DD- реакций в зависимости от интенсивности лазерного импульса, полученные из результатов моделирования кодом "Карат", а кривая 3 – ту же зависимость, рассчитанную по формуле (3.10) при $L=2$ мкм и $R=0.1$.

Если длительность импульса нейтронов, образованных в ходе DD- реакций уменьшается при увеличении интенсивности лазерного импульса (за счет уменьшения времени пролета мишени ускоренными дейтронами), то длительность импульса нейтро-

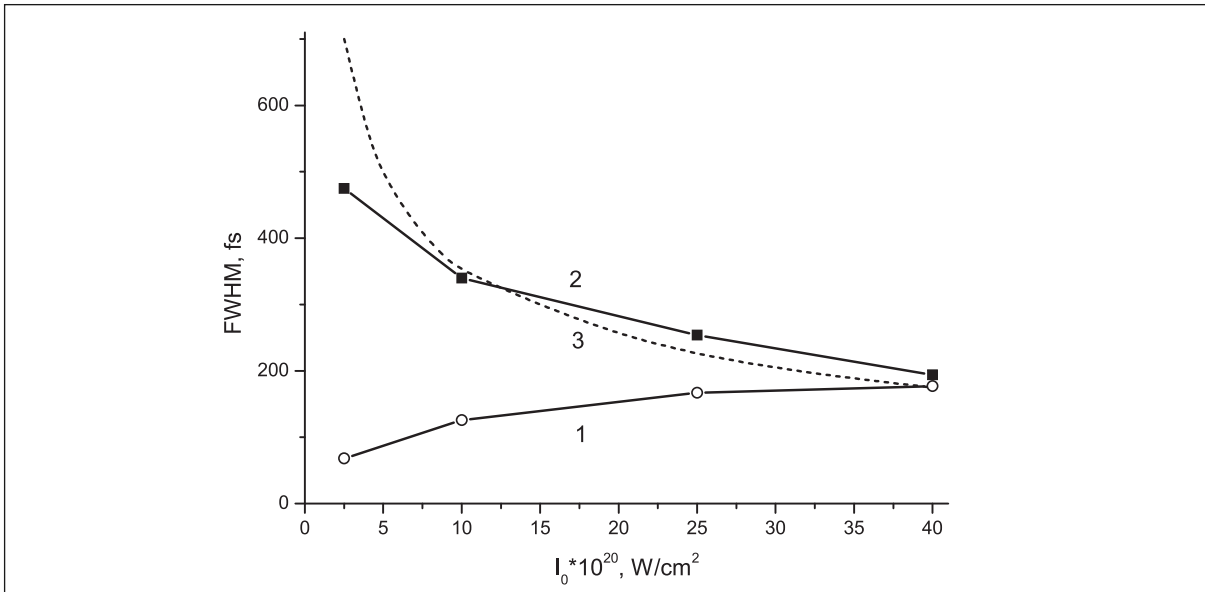


Рис. 13. Зависимость длительностей импульсов нейтронов, образовавшихся в реакциях фоторасщепления дейтронов (кривая 1), в DD- реакциях (кривая 2) от интенсивности лазерного импульса I_0 . Кривая (3) - расчет по формуле (4) при $L = 2$ мкм и $R = 0,1$

нов, образованных в ходе реакций фоторасщепления дейтронов, наоборот, увеличивается (см. кривую 1 на рис. 13). Это связано с тем, что при увеличении интенсивности лазерного импульса увеличивается количество и максимальная энергия высокоэнергетичных электронов в мишени, и, соответственно, время, в течение которого возникают гамма- кванты с энергией, превышающей порог фоторасщепления дейтрона. При интенсивности $I_0 = 4 \cdot 10^{21}$ Вт/см² длительности импульсов DD- нейтронов и нейтронов фоторасщепления практически сравниваются и составляют 194 фс и 175 фс, соответственно. При этом полный выход нейтронов достигает значений $N_{nd} = 6.2 \cdot 10^6$ и $N_{ny} = 9 \cdot 10^4$. Напомним, что при интенсивности $I_0 = 10^{21}$ Вт/см² соответствующие значения были равны $N_{nd} = 6 \cdot 10^6$ и $N_{ny} = 1.2 \cdot 10^4$. Таким образом, полный выход DD- нейтронов с ростом интенсивности выходит на насыщение за счет уменьшения длительности нейтронного импульса и увеличения вероятности DD- реакций, в то время как полный выход нейтронов фоторасщепления продолжает монотонно увеличиваться, поскольку и длительность нейтронного импульса и вероятность реакций фоторасщепления при увеличении интенсивности лазерного импульса растут. Логично предположить, что при дальнейшем существенном увеличении интенсивностей лазерных импульсов вклад реакций фоторасщепления дейтронов в выход нейтронов может стать определяющим.

Несмотря на то, что полученный полный выход нейтронов существенно ниже, чем у других нейтронных источников (например, современные ускорительные источники нейтронов обеспечивают порядка 10^{12} нейтронов за импульс [37]), значения плотности потока нейтронов в рассматриваемой задаче достигают рекордных величин из-за микронных размеров и субпикосекундной длительности нейтронных импульсов.

Действительно, на рис. 14 приводятся зависимости пиковых значений интенсивностей импульсов нейтронов, образованных в ходе реакций фоторасщепления дейтронов F_{ny} и в ходе DD-реакций F_{nd} , от интенсивности лазерного импульса I_0 . Как видно из этого рисунка, при $I_0 > 5 \cdot 10^{20}$ Вт/см² пиковые значения интенсивности лазерно-плазменного нейтронного источника превышают величину 10^{19} нейтронов в секунду. Оценивая площадь нейтронного источника, как площадь лазерного пятна на мишени

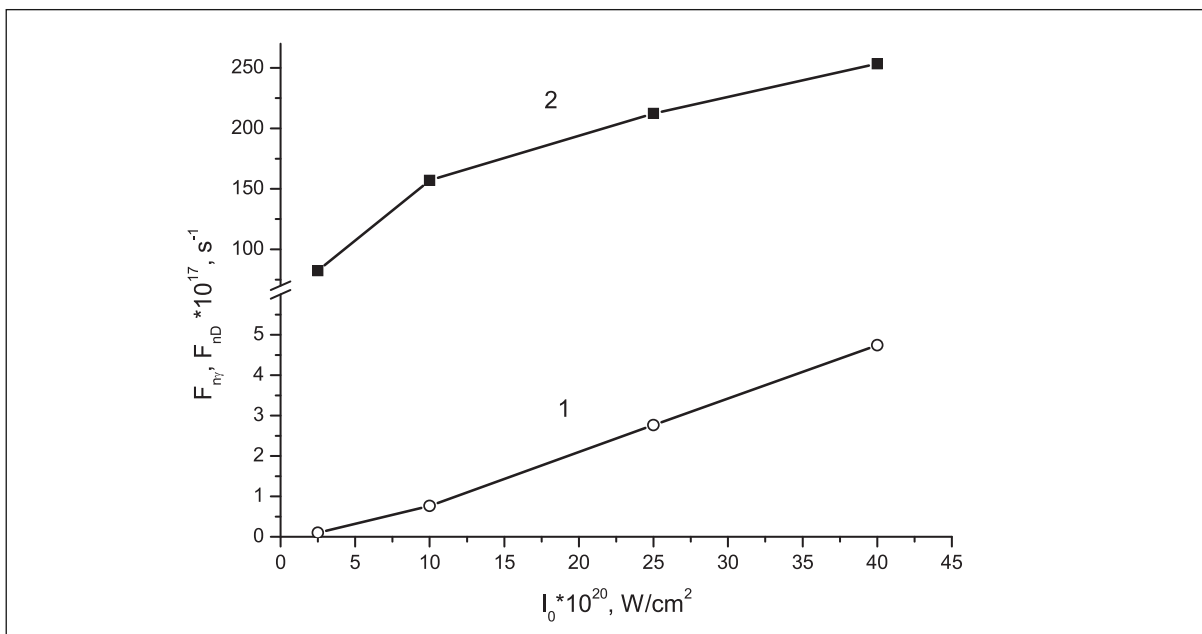


Рис. 14. Зависимости пиковых значений интенсивностей импульсов нейтронов, образованных в ходе реакций фоторасщепления дейтронов $F_{n\gamma}$ (кривая 1) и в ходе DD-реакций F_{nD} (кривая 2), от интенсивности лазерного импульса I_0 при $L = 2$ мкм

(10^{-5} см^2) получим максимальную плотность потока нейтронов не менее $10^{24} \text{ с}^{-1} \text{ см}^{-2}$, что на восемь порядков превосходит максимальные плотности потоков существующих нейтронных источников (по данным обзора [37]).

Отметим в заключение, что для получения в релятивистской лазерной плазме нейтронных импульсов с рекордными значениями интенсивности и плотности потоков нейтронов, не требуется накладывать жесткие условия на величину контраста сверхинтенсивных фемтосекундных лазерных импульсов – термоядерные реакции фоторасщепления и синтеза дейтронов будут эффективно идти в лазерной плазме только после прихода основного фемтосекундного лазерного импульса. Образование предплазмы при воздействии на мишень лазерных предимпульсов будет играть положительную роль, увеличивая поглощение основного фемтосекундного лазерного импульса.

4. Отражение сверхинтенсивного фемтосекундного лазерного импульса от плазмы околукритической плотности

Исследования отражения лазерного импульса от плазмы ведутся практически с момента создания лабораторных лазеров, обладающих мощностью, достаточной для ионизации вещества [5]. С появлением в последние годы сверхмощных пико- и фемтосекундных лазеров с интенсивностью I до 10^{21} Вт/см^2 данная задача сохраняет актуальность в силу своей важности для многих практических областей деятельности: лазерный термоядерный синтез и концепция «быстрого зажигания», инициирование ядерных и фотоядерных реакций, генерация сверхсильного магнитного поля, создание новых лазерно-плазменных источников тяжелых ионов, протонов, электронов, нейтронов, коротковолнового электромагнитного излучения и др. [38]. Отражение лазерного излучения от поверхности плазмы наряду с абсорбцией лазерного излучения в объеме плазмы является одним из основных факторов, влияющих на эффективность инжекции энергии лазерного излучения в плазму. По этой причине первостепенное значение имеют исследования зависимости коэффициента отражения от различных параметров мишени и лазерного излучения: решающую роль играют плотность электронов плазмы, интенсивность и длительность лазерного импульса. Помимо этого коэффициент отражения –

следования зависимости коэффициента отражения от различных параметров мишени и лазерного излучения: решающую роль играют плотность электронов плазмы, интенсивность и длительность лазерного импульса. Помимо этого коэффициент отражения – это один из немногих параметров фемтосекундной лазерной плазмы, достаточно надежно измеряемых в экспериментах [6], поэтому его корректное теоретическое определение может использоваться не только при построении моделей взаимодействия излучения с плазмой в вышеперечисленных областях, но и быть полезным с точки зрения интерпретации экспериментальных данных.

За последние пятнадцать лет проблеме определения коэффициента отражения было посвящено множество теоретических и экспериментальных исследований [5-12]. Большинство экспериментальных работ описывает ситуацию, когда сверхмощный лазерный импульс воздействует на твердотельную металлическую мишень [7-10, 39], при этом интенсивность лазерного импульса в отдельных экспериментах меняется в некотором диапазоне, обычно не превышая значения $I=10^{15}$ - 10^{16} Вт/см², а плотность образовавшейся плазмы близка к твердотельной. Авторы [7, 8, 10] приводят зависимости коэффициента отражения лазерного импульса от интенсивности для различных материалов и условий облучения: коэффициент отражения уменьшается с ростом интенсивности выше 10^{13} Вт/см². В работе [11] исследуются зависимости коэффициентов отражения и абсорбции фемтосекундных лазерных импульсов, падающих нормально на мишени различного состава, интенсивность лазерного излучения меняется в диапазоне $I=10^{13}$ - 10^{18} Вт/см². Эксперименты [11] показывают, что коэффициент отражения импульса от металлической мишени уменьшается с ростом интенсивности до 10^{15} Вт/см², а затем опять растет.

Существует ряд теоретических исследований, направленных на создание математических моделей для расчета коэффициента отражения лазерного импульса произвольной интенсивности от плазмы произвольной плотности. Ранним примером подобных исследований является работа [5], в которой авторы описывают самосогласованную модель и осуществляют численный расчет коэффициентов отражения лазерного импульса длительностью 0.01...10 пс с интенсивностью $I=10^{12}$ - 10^{16} Вт/см², падающего на плоский плазменный слой. В работе [6] описана расчетная модель и приводятся результаты численного моделирования отражения лазерного импульса фемтосекундной длительности с интенсивностью $I=10^{14}$ - 10^{17} Вт/см² от лазерной плазмы твердотельной плотности, результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными других исследователей. В работе [12] также приводятся результаты численного моделирования отражения лазерного импульса с интенсивностью до 10^{20} Вт/см² от твердотельных мишеней. Авторы работ [7, 9, 10] приводят результаты теоретических расчетов коэффициента отражения в сравнении с полученными экспериментальными результатами. Например, в работе [9], помимо экспериментального исследования, описана теоретическая модель взаимодействия интенсивных фемтосекундных лазерных импульсов с твердотельными мишенями, использующая двухтемпературное уравнение состояния облучаемого вещества и позволяющая рассчитать коэффициент отражения импульса, сравнение экспериментальных данных с результатами расчетов в диапазоне интенсивностей $I=10^{13}$ - 10^{14} Вт/см² позволяет уточнять некоторые параметры модели.

Как видно из приведенных данных, верхнее значение интенсивности лазера $I=10^{16}$ - 10^{18} Вт/см², которое могут обеспечить доступные широкому кругу исследователей экспериментальные установки, не позволяет получить представление о том, какова будет зависимость коэффициента отражения от интенсивности при переходе в область, когда электроны плазмы становятся релятивистскими, что соответствует интенсивности $I>10^{18}$ Вт/см² при длине волны $\lambda \approx 1$ мкм. Так как твердотельные мишени наиболее удобны для проведения экспериментов, основная часть накопленных данных о коэф-

коэффициенте отражения при интенсивности $I > 10^{16}$ Вт/см² относится к диапазону плотностей, значительно превышающих критическую плотность для лазерного излучения. Теоретические исследования покрывают практически ту же область параметров плазмы и импульса, что и эксперименты. Поэтому дальнейший интерес представляют как теоретические, так и экспериментальные исследования коэффициента отражения в области сверхвысоких интенсивностей импульса $I > 10^{18}$ Вт/см² и плотностей плазмы ниже твердотельной плотности.

4.1. Определение коэффициента отражения лазерного импульса от околоскритической плазмы по формулам Френеля

Пусть электромагнитный импульс, распространяясь в вакууме, падает на резкую границу «плазма-вакуум», частично отражаясь и частично проникая внутрь плазмы. Рассматривается электромагнитный импульс, амплитуда напряженности которого изменяется со временем согласно распределению Гаусса. При фиксированной пространственной координате напряженность электрического поля в таком импульсе зависит от времени следующим образом:

$$E(t) = E_0 \exp \left[- \left(\frac{t - t_1}{t_2} \right)^2 \right], \quad (4.1)$$

где E_0 – максимальное значение амплитуды электрического поля лазерного импульса, t_2 – временной параметр, связанный с шириной электромагнитного импульса на половине максимума интенсивности $FWHM$ по формуле $FWHM = t_2 \sqrt{2 \ln 2} \approx 1.18 t_2$, t_1 – длительность переднего фронта электромагнитного импульса.

Классические формулы Френеля для случая нормального падения монохроматической электромагнитной волны на однородную среду со ступенчатой границей общеизвестны [40]. С помощью этих формул можно найти коэффициент отражения по интенсивности монохроматической волны, которая, распространяясь в вакууме, падает на плазменную среду:

$$R_I = \left(\frac{n_{pl} - 1}{n_{pl} + 1} \right)^2, \quad (4.2)$$

где n_{pl} – показатель преломления плазменной среды.

Коэффициент отражения по напряженности записывается как:

$$R_E = \frac{n_{pl} - 1}{n_{pl} + 1}. \quad (4.3)$$

В некоторых случаях удобно пользоваться коэффициентом отражения по энергии, который определяется формулой:

$$R_W = \frac{W'_1}{W_1}, \quad (4.4)$$

где W_1 – полная энергия падающей волны, W'_1 – полная энергия отраженной волны.

В случае, когда мнимая часть комплексной диэлектрической проницаемости плазмы гораздо меньше действительной, то есть плазма обладает слабым коэффициентом поглощения, показатель преломления плазмы описывается формулой [41]:

$$n_{pl} \cong \sqrt{\varepsilon_\omega} = \sqrt{1 - \frac{4\pi \cdot e^2 n_e}{m_e \omega^2}} = \sqrt{1 - \frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2}}, \quad (4.5)$$

где e и m_e – заряд и масса электрона соответственно, n_e – концентрация электронов в

плазме¹, ω – частота электромагнитного излучения, $\omega_{pl} = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n_e}{m_e}}$ – плазменная частота.

Подставляем показатель преломления плазмы в (4.3):

$$R_E = \frac{\omega^2}{\omega_{pl}^2} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2}} \right)^2. \quad (4.6)$$

В случае, когда подкоренное выражение в формуле (4.6) меньше нуля, коэффициент отражения становится равным единице:

$$R_E = 1 \text{ при } \frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2} > 1. \quad (4.7)$$

Физический смысл (4.7) следующий: монохроматические импульсы с частотой $\omega < \omega_{pl}$ отражаются от плазмы полностью.

Формула (4.6) позволяет рассчитать коэффициент отражения для монохроматической электромагнитной волны с частотой ω . В случае лазерного импульса фемтосекундной длительности мы не можем считать излучение монохроматическим. Однако любой конечный электромагнитный импульс можно представить в виде совокупности гармонических компонент, путем разложения в ряд или интеграл Фурье. Тогда можно найти коэффициент отражения для каждой из компонент импульса, а затем найти общий коэффициент отражения.

Воспользуемся этим методом. Исходный импульс задается формулой:

$$f(t) = E_0 \cdot \sin \omega_0(t) \cdot \exp \left[-\left(\frac{t}{t_2} \right)^2 \right], \quad (4.8)$$

где ω_0 – частота колебаний электромагнитного поля импульса.

Для перехода из временной области в частотную и построения частотного спектра импульса используется тригонометрическая форма прямого преобразования Фурье [42]:

$$g(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{+\infty} f(t) \cdot \sin \omega t \cdot dt. \quad (4.9)$$

Формула (4.9) учитывает, что функция (4.8) является нечетной. После подстановки (4.8) в (4.9) и интегрирования получаем следующий вид функции $g(\omega)$:

$$g(\omega) = \frac{E_0 t_2}{2\sqrt{2}} \left\{ \exp \left[-\frac{1}{4} t_2^2 (\omega - \omega_0)^2 \right] - \exp \left[-\frac{1}{4} t_2^2 (\omega + \omega_0)^2 \right] \right\}. \quad (4.10)$$

Обратное преобразование Фурье в тригонометрической форме для нечетной функции выглядит следующим образом [42]:

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(\omega) \cdot \sin \omega t \cdot d\omega. \quad (4.11)$$

Для того чтобы найти отраженный сигнал, необходимо каждую гармонику умножить на спектральный коэффициент отражения $R_E(\omega)$ на соответствующей ей частоте, а затем провести обратное преобразование Фурье:

¹ Так как общепринятые литеры, обозначающие показатель преломления и концентрацию электронов плазмы совпадают, в дальнейшем показатель преломления плазмы всегда будем обозначать n_{pl} , а электронную концентрацию n_e , критическую концентрацию электронов плазмы будем обозначать n_{cr} .

$$f_{refl}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(\omega) \cdot \sin \omega t \cdot R_E(\omega) \cdot d\omega. \quad (4.12)$$

Подставив в (4.11) выражения для $g(\omega)$ (3.9) и $R_E(\omega)$ (4.5), получаем формулу для отраженного импульса в следующем виде:

$$f_{refl}(t) = \frac{E_0 t_2}{2\sqrt{\pi}} \frac{1}{\omega_{pl}^2} \int_0^{+\infty} \left\{ \exp\left[-\frac{1}{4} t_2^2 (\omega - \omega_0)^2\right] - \exp\left[-\frac{1}{4} t_2^2 (\omega + \omega_0)^2\right] \right\} \times \\ \times \left(1 - \sqrt{1 - \frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2}} \right) \sin \omega t \cdot \omega^2 d\omega. \quad (4.13)$$

Учитывая (4.6) и (4.7), можно заключить, что результирующий отраженный сигнал складывается из двух частей:

$$f_{refl} = f'_{refl}(t) + f''_{refl}(t), \quad (4.14)$$

где

$$f'_{refl}(t) = \frac{E_0 t_2}{2\sqrt{\pi}} \frac{1}{\omega_{pl}^2} \int_0^{+\infty} \left\{ \exp\left[-\frac{1}{4} t_2^2 (\omega - \omega_0)^2\right] - \exp\left[-\frac{1}{4} t_2^2 (\omega + \omega_0)^2\right] \right\} \times \\ \times \left(1 - \sqrt{1 - \frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2}} \right) \sin \omega t \cdot \omega^2 d\omega \quad \text{при } \frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2} < 1, \quad (4.15)$$

$$f''_{refl}(t) = \frac{E_0 t_2}{2\sqrt{\pi}} \int_0^{\omega_{pl}} \left\{ \exp\left[-\frac{1}{4} t_2^2 (\omega - \omega_0)^2\right] - \exp\left[-\frac{1}{4} t_2^2 (\omega + \omega_0)^2\right] \right\} \sin \omega t \cdot d\omega \quad \text{при } \frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2} > 1. \quad (4.16)$$

После нахождения отраженного импульса f_{refl} можно определить коэффициент отражения по энергии (4.4). Для ограниченного во времени электромагнитного импульса можно вычислить удельную энергию, падающую на единицу площади, проинтегрировав мгновенные значения интенсивности волны по времени:

$$w = \int_{t^H}^{t^K} I dt, \quad (4.17)$$

где I – интенсивность лазерного импульса в момент времени t , $[t^H; t^K]$ – интервал времени, на котором существует лазерный импульс.

Тогда коэффициент отражения по энергии для ограниченной во времени плоской волны можно записать следующим образом:

$$R_w = \frac{w_R}{w_I} = \frac{\int_{t_R^S}^{t_R^F} I_R dt}{\int_{t_I^S}^{t_I^F} I_I dt}, \quad (4.18)$$

где w_R – энергия отраженной волны, приходящаяся на единицу площади, w_I – энергия падающей волны, приходящаяся на единицу площади, I_R – мгновенная интенсивность отраженной волны, I_I – мгновенная интенсивность падающей волны, $[t_I^S; t_I^F]$, $[t_R^S; t_R^F]$ – интервалы времени, на которых существуют соответственно падающая и отраженная волна.

Интенсивность света в вакууме пропорциональна квадрату амплитуды световой волны. Следовательно, можно переписать формулу (4.18) в виде:

$$R_w = \frac{\int_{t_R^S}^{t_R^F} E_R^2(t) dt}{\int_{t_I^S}^{t_I^F} E_I^2(t) dt}, \quad (4.19)$$

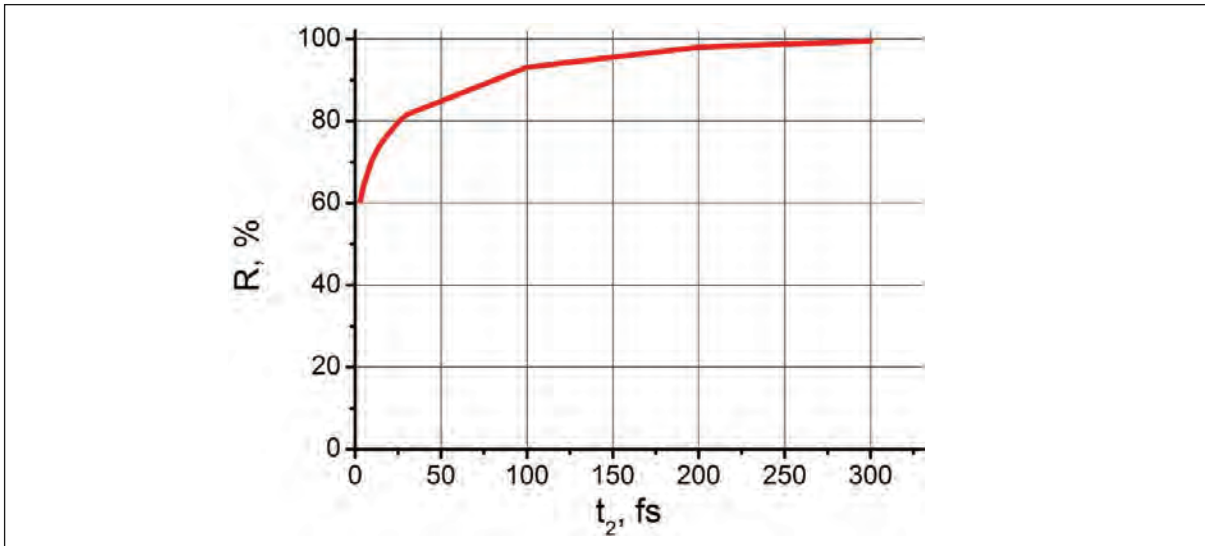


Рис. 15. Зависимость коэффициента отражения от длительности импульса в случае критической концентрации плазмы $n_{cr}=1.12 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$

где $E_i(t)$ и $E_r(t)$ – напряженность падающей и отраженной электромагнитной волны соответственно.

Формула (4.19) совместно с формулами (4.14)-(4.16) позволяет вычислить коэффициент отражения по энергии для электромагнитного импульса фемтосекундной длительности в случае плазмы околоскритической плотности. На рис. 15 приведен график зависимости коэффициента отражения по энергии от длительности импульса для случая, когда плотность плазмы равна критической. Для электромагнитного импульса с длиной волны $\lambda = 1 \text{ мкм}$ критическая концентрация плазмы $n_{cr} = 1,21 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$.

Из графика на рис. 15 видно, что коэффициент отражения уменьшается с уменьшением длительности импульса. Данный факт является следствием увеличения ширины спектра импульса при уменьшении его длительности. Также следует обратить внимание на то, что если бы расчет осуществлялся по классическим формулам Френеля для монохроматической электромагнитной волны, то результатом был бы коэффициент отражения равный 100%, так как в случае критической плотности плазмы волна отражается от плазмы полностью. В наших расчетах по преобразованным с учетом немонотонности импульса формулам Френеля мы получаем коэффициенты отражения, отличные от 100% для критической плотности плазмы.

Следует отметить, что коэффициент отражения в данных расчетах не зависит от интенсивности излучения. Формулы Френеля для фемтосекундного импульса позволяют учесть зависимость коэффициента отражения от длительности импульса и плотности плазменной среды, но не позволяют учесть проявление нелинейных свойств плазмы при увеличении интенсивности импульса, а также влияние на коэффициент отражения процесса поглощения электромагнитной энергии в плазме.

4.2. Численное моделирование отражения лазерного импульса от плазмы околоскритической плотности

Численное моделирование отражения лазерного импульса от плазменной мишени и его поглощения проводилось посредством двухмерной XZ-версии электромагнитного 3D PIC кода KARAT. Использовалась следующая модель физической системы: плоская электромагнитная волна с огибающей, описываемой распределением Гаусса (4.1), запускалась слева вдоль оси Z в вакуум (см. рис. 16). При $z=15 \text{ мкм}$ размещалась мишень толщиной 15 мкм в виде плазменного слоя, моделируемого PIC-частицами. Электро-

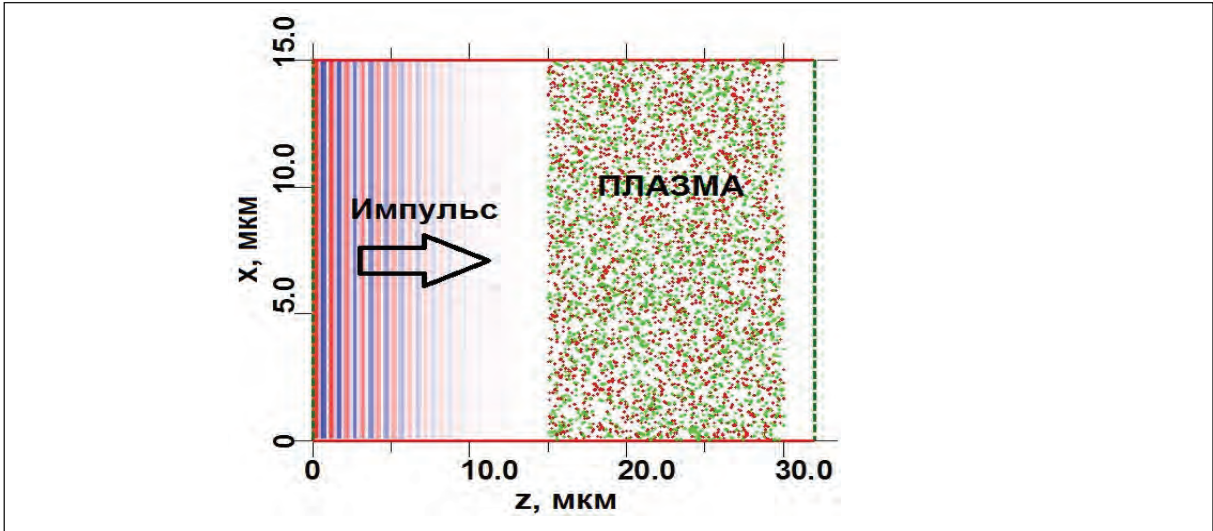


Рис. 16. Конфигурация счетной области

магнитная волна падала на поверхность плазменного слоя с резкими границами, после чего отраженная волна начинала двигаться в обратную сторону, а прошедшая волна распространялась в глубь плазменной мишени с поглощением электромагнитной энергии. На правой границе плазменного слоя электромагнитная волна вновь разделялась на отраженную и прошедшую, прошедшая волна затем выходила из расчетной области через правую границу.

Численные расчеты были проведены для следующих параметров электромагнитного импульса и плазмы:

- частота лазерного излучения $\nu = 3 \cdot 10^{14}$ Гц, т.е. длина волны $\lambda = 1$ мкм;
- концентрация электронов плазмы $n_e = n_{cr} = 1,12 \cdot 10^{21}$ см $^{-3}$ – критическая концентрация для данной частоты, а также $n_e = 0,5n_{cr}$ и $n_e = 0,75n_{cr}$;
- временной параметр, определяющий длительность лазерного импульса (см. (4.1)) $t_2 = 30$ фс;
- временная задержка лазерного импульса $t_1 = 60$ фс (см. (4.1));
- интенсивность лазерного импульса в различных расчетах $I = 10^{16} \dots 10^{21}$ Вт/см 2 .

Численная модель позволяла определить поток вектора Пойнтинга падающей и отраженной электромагнитной волны для каждого момента времени на левой и правой границе расчетной области. Коэффициент отражения по энергии R определялся по формуле (4.19) с помощью численного интегрирования соответствующих зависимостей потоков вектора Пойнтинга от времени на левой границе области. Аналогично определялся коэффициент пропускания импульса с использованием потока вектора Пойнтинга на правой границе расчетной области:

$$T = \frac{\int_{t_i^S}^{t_f^F} E_T^2(t) dt}{\int_{t_i^S}^{t_f^F} E_I^2(t) dt}, \quad (4.20)$$

где $E_T(t)$ – напряженность электромагнитной волны, прошедшей сквозь плазменный слой.

По полученным данным был вычислен коэффициент поглощения электромагнитного импульса в объеме плазменного слоя:

$$A = 1 - R - T. \quad (4.21)$$

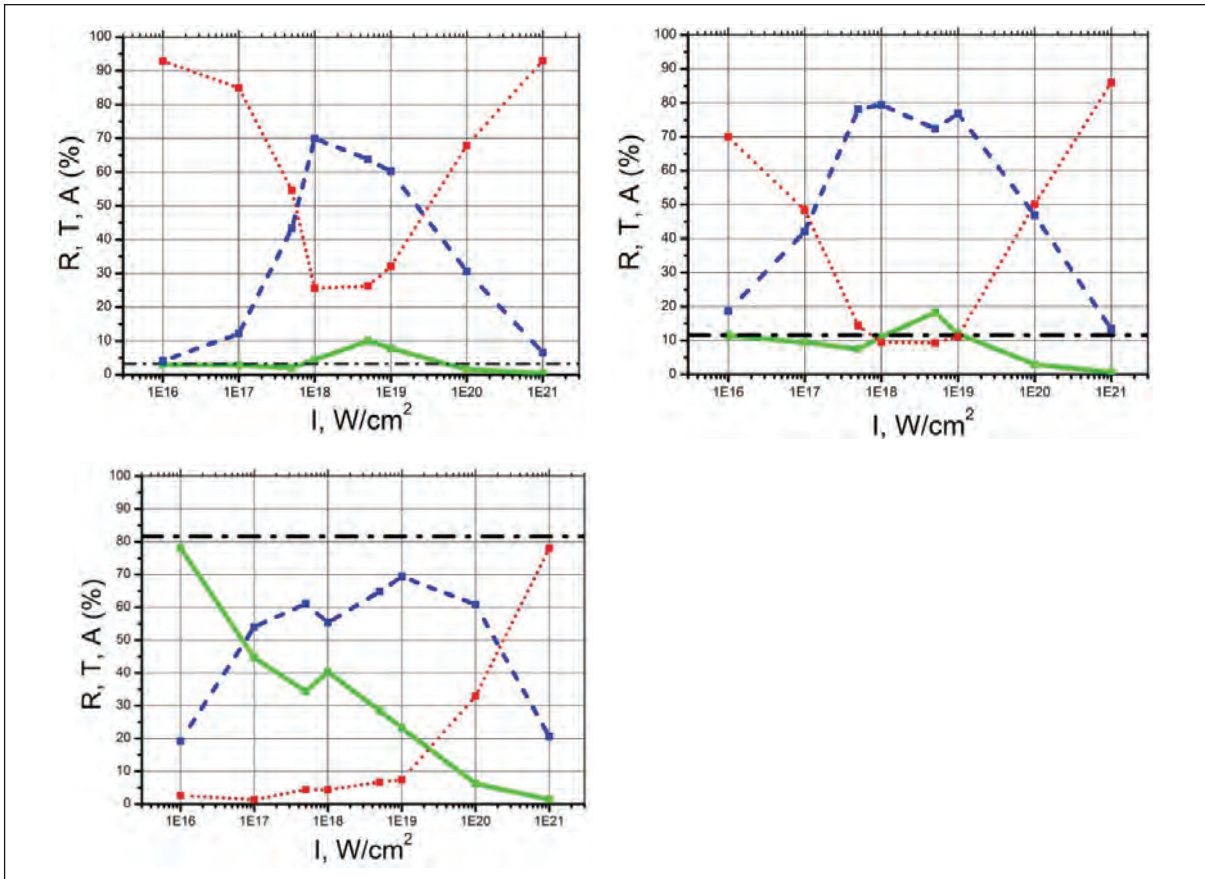


Рис. 17. Зависимости коэффициента отражения (сплошная линия), пропускания (пунктирная линия) и поглощения (штриховая линия) от интенсивности лазерного импульса с $t_2 = 30 \text{ фс}$ для различных плотностей плазмы: (а) $n_e = 0,5n_{cr}$, (б) $n_e = 0,75n_{cr}$, (в) $n_e = n_{cr}$; штрихпунктирные линии – результат расчета коэффициентов отражения по формулам п. 3.2 для соответствующих плотностей плазмы

На рисунке 17 приведены зависимости коэффициентов отражения, прохождения и поглощения от интенсивности электромагнитного импульса, полученные для импульса длительностью $t_2 = 30 \text{ фс}$ и трех вариантов плотностей плазмы: $n_e = 0,5n_{cr}$, $n_e = 0,75n_{cr}$, $n_e = n_{cr}$. Штрихпунктирными линиями показаны значения коэффициентов отражения, вычисленные по формулам Френеля для импульса длительностью $t_2 = 30 \text{ фс}$ (см. п. 4.2). Из графиков на рис. 17 видно, что для всех рассматриваемых плотностей плазмы характерно следующее: коэффициент отражения убывает в интервале интенсивностей импульса $10^{16} \dots 5 \cdot 10^{17} \text{ Вт/см}^2$, затем следует возрастание – локальный максимум находится в интервале $10^{18} \dots 10^{19} \text{ Вт/см}^2$, и затем при интенсивности более 10^{19} Вт/см^2 коэффициент отражения вновь убывает практически до нулевых значений. На интервале интенсивностей $10^{18} \dots 10^{19} \text{ Вт/см}^2$ находится не только локальный максимум коэффициента отражения, но и локальный минимум коэффициента пропускания для случаев $n_e = 0,5n_{cr}$, $n_e = 0,75n_{cr}$ (рис. 17 (а, б)). На основании этих результатов можно предположить, что изменение коэффициента отражения обусловлено поглощением электромагнитной энергии в слое и развитием в плазме внутренних процессов, влияющих на отражение. Рассмотрим подробнее эти процессы.

4.3. Влияние процесса поглощения электромагнитной энергии в плазме на оптические свойства плазменного слоя

Проанализируем изменение свойств плазменного слоя по мере возрастания интенсивности импульса на примере случая докритической плазмы с $n_e = 0,5n_{cr}$. На рис. 18

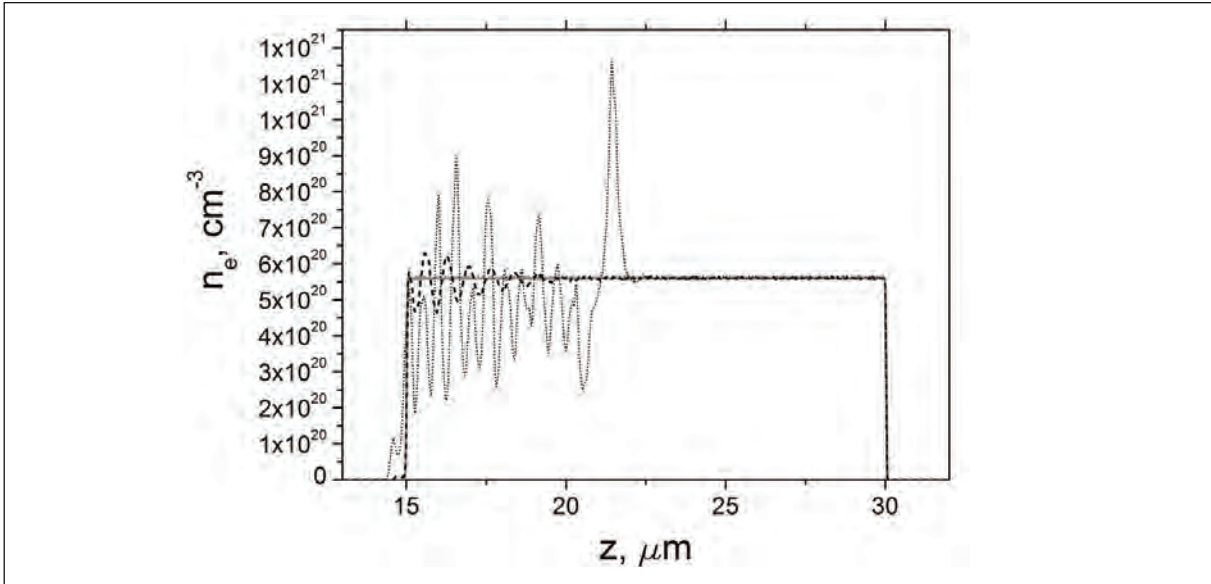


Рис. 18. Профиль электронной плотности плазменного слоя в момент времени $t=90$ фс для начальной концентрации электронов в слое $n_e=0,5n_{cr}=5,6 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ и различных интенсивностей лазерного импульса: сплошная серая линия – $I=10^{16} \text{ Вт/см}^2$, штриховая линия – $I=5 \cdot 10^{18} \text{ Вт/см}^2$, пунктирная линия – $I=10^{21} \text{ Вт/см}^2$

показаны профили средней электронной плотности для момента времени $t=90$ фс и трех интенсивностей лазерного импульса: $I=10^{16}; 5 \cdot 10^{18}; 10^{21} \text{ Вт/см}^2$. Заметим, что во всех расчетах в момент времени $t=90$ фс передний фронт лазерного импульса уже проник вглубь плазменного слоя на половину его толщины.

Как видно из рис. 18, при интенсивности импульса $I=10^{16} \text{ Вт/см}^2$ профиль электронной плотности не отличается от начального: на всей толщине слоя $n_e \approx 0,5n_{cr}$. При $I=5 \cdot 10^{18} \text{ Вт/см}^2$ на рис. 18 видна структура электронной плотности в области левой границы слоя. Похожая структура электронной плотности существует в слое и при интенсивности $I=10^{21} \text{ Вт/см}^2$, однако крайний правый максимум в этом случае значительно превышает остальные, что обусловлено большим значением пондеромоторной силы при данной интенсивности, которая смещает электроны в направлении распространения волны. Аналогичная картина изменения профиля электронной плотности с ростом интенсивности наблюдается и в расчетах для плазмы с $n_e = 0,75n_{cr}$ и $n_e = n_{cr}$.

На рис. 19 график профиля электронной плотности совмещен с графиком напряженности электромагнитной волны внутри плазменного слоя для случая $n_e = 0,5n_{cr}$, $I=5 \cdot 10^{18} \text{ Вт/см}^2$. Из рис. 19 видно, что локальные максимумы электронной плотности совпадают с минимумами электромагнитной волны. Таким образом, период структуры электронной плотности равен половине длины электромагнитной волны в плазме. Данная зависимость выполняется во всех расчетах для всех рассматриваемых плотностей плазменного слоя. Подробное изучение физического механизма, приводящего к возникновению подобной модуляции электронной плотности при облучении плазмы сверхмощным лазерным импульсом, представляет материал для дальнейших исследований.

По мере распространения электромагнитной волны вглубь плазменного слоя синхронно смещается и структура электронной плотности. В ходе исследования было получено, что величина скорости смещения локального экстремума плотности вглубь плазмы совпадает с фазовой скоростью электромагнитной волны, а величина скорости смещения огибающей электронной структуры V_{ce} совпадает с групповой скоростью V_{gr}^{EM} электромагнитной волны в плазме с частотой ω :

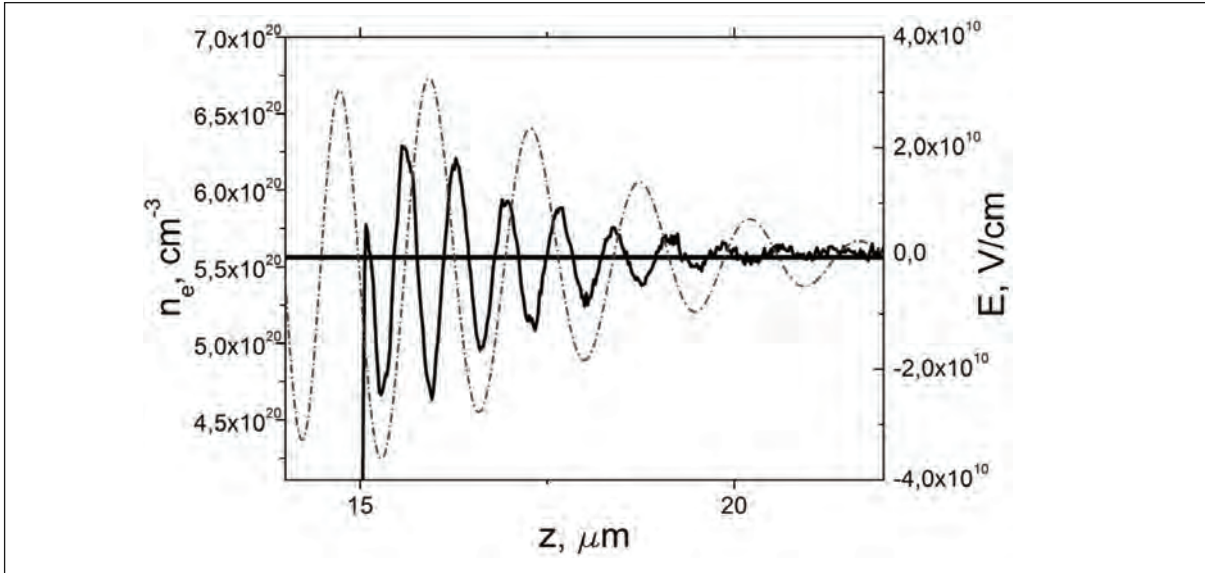


Рис. 19. Профиль средней электронной плотности плазменного слоя (сплошная черная линия) и мгновенная напряженность электромагнитной волны (штрихпунктирная линия) в момент времени $t=90$ фс для начальной концентрации электронов в слое $n_e=0,5n_{cr}=5,6 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ и интенсивности $I=5 \cdot 10^{18} \text{ Вт/см}^2$; сплошная линия соответствует уровню начальной концентрации электронов и нулю электрического поля

$$V_{ee} = V_{gr}^{EM} = c \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{\omega_{pl}^2}}. \quad (4.22)$$

При отражении той части лазерного импульса, которая падает на плазменный слой с уже сформированной структурой электронной плотности, наблюдается эффект Доплера: в спектре отраженной волны присутствует не только исходная частота падающего излучения, но и частотный сдвиг в красную сторону, соответствующий отражению от границы раздела сред, движущейся со скоростью V_{ee} . Данный факт указывает на то, что отражение происходит от периодической структуры электронной плотности внутри плазменного слоя.

Таким образом, мы имеем основания предположить, что именно структура электронной плотности является причиной существования локального максимума коэффициента отражения на графике зависимости от интенсивности (рис. 17). Для проверки этого предположения были исследованы оптические характеристики подобной слоистой среды с помощью методики, описанной в [43], где для нахождения коэффициента отражения предлагается использовать характеристическую матрицу среды. Была задана система из шести слоев с чередующимися показателями преломления n_{pl1} и n_{pl2} , постоянными внутри каждого слоя. Рассмотрим данный подход на примере случая отражения лазерного импульса от плазмы с электронной концентрацией $n_e = 0,5n_{cr}$. Толщина одного слоя была принята равной характерному размеру возмущения электронной плотности в численном расчете, что соответствует половине длины электромагнитной волны в плазме – $0,35 \text{ мкм}$ для $n_e = 0,5n_{cr}$ (см. рис. 19). Значения показателей преломления n_{pl1} и n_{pl2} были рассчитаны по формуле (4.5). Плотность электронов плазмы в (4.5) для n_{pl1} и n_{pl2} была принята равной соответственно максимальному и минимальному значению плотности в формирующейся внутри плазменного слоя структуре (см. рис. 19): $n_{pl1} = n_{pl}(n_{eMAX})$, $n_{pl2} = n_{pl}(n_{eMIN})$. Записав характеристическую матрицу подобной системы, можно найти зависимость коэффициента отражения от показателей преломления $R(n_{pl1}, n_{pl2})$. Величины n_{eMAX} и n_{eMIN} были приближенно представлены следующим образом:

$$\begin{aligned}
n_{eMAX} &= n_{e0} + \Delta n, \quad n_{pl1} = n_{pl}(n_{e0} + \Delta n), \\
n_{eMIN} &= n_{e0} - \Delta n, \quad n_{pl2} = n_{pl}(n_{e0} - \Delta n), \\
R(n_{pl1}, n_{pl2}) &= R(\Delta n),
\end{aligned}
\tag{4.23}$$

где n_{e0} – начальное значение электронной плотности плазмы; Δn – величина отклонения электронной плотности от начального значения n_{e0} в периодической структуре.

Заметим, что Δn в численных расчетах увеличивается по мере роста интенсивности импульса. Коэффициент отражения будет зависеть не только от величины отклонения электронной плотности Δn , но и от последовательности, в которой расположены слои с чередующимися показателями преломления. Так как профиль электронной плотности со временем смещается в глубь плазменного слоя, концентрация плазмы на границе плазменного слоя будет меняться от максимального до минимального значения и обратно. При расчете шестислойной схемы мы рассмотрели два из возможных вариантов: когда импульс сначала падает на слой с большей электронной концентрацией, $n_{pl1} = n_{pl}(n_{eMAX})$, и когда импульс сначала падает на слой с меньшей электронной концентрацией $n_{pl2} = n_{pl}(n_{eMIN})$. На рис. 20 приведены графики зависимости коэффициента отражения от величины среднего отклонения электронной плотности Δn для случая отражения от шестислойной слоистой среды, штриховая кривая соответствует случаю, когда слои расположены в порядке $(n_{pl1}, n_{pl2}, n_{pl1}, n_{pl2}, n_{pl1}, n_{pl2})$, пунктирная кривая соответствует порядку расположения слоев $(n_{pl2}, n_{pl1}, n_{pl2}, n_{pl1}, n_{pl2}, n_{pl1})$.

Из графика на рис. 20 видно, что коэффициент отражения в случае отсутствия в плазме электронной структуры ($\Delta n = 0$, $n_{pl1} = n_{pl2} = n_{pl}(n_{e0})$) составляет приблизительно 3%, что совпадает с результатом, полученным нами в численных расчетах при относительно невысокой интенсивности импульса $I = 10^{16}$ Вт/см², а также с результатом расчета по формулам Френеля (см. п. 4.2). Из рис. 20 также видно, что наличие в плазме структуры электронной плотности может как увеличивать, так и уменьшать коэффициент отражения в зависимости от того, на какую область этой структуры падает лазерный импульс: если импульс падает вначале на слой с низкой электронной концентрацией $n_{pl2} = n_{pl}(n_{eMIN})$, то происходит увеличение коэффициента отражения, если на слой с высокой электронной концентрацией $n_{pl1} = n_{pl}(n_{eMAX})$ – коэффициент отражения сначала уменьшается, а затем увеличивается по мере роста Δn , то есть по мере роста интенсивности импульса. Область между штриховой и пунктирной кривой на рис. 20 является областью возможных значений коэффициента отражения. Сплошная кривая на рис. 20 построена на основании данных численного моделирования (см. рис. 17а), значения Δn взяты из расчетов для соответствующих интенсивностей импульса. Видно, что почти все точки на численной кривой принадлежат области возможных значений коэффициента отражения, определенной в результате расчета для слоистой системы. Последняя и предпоследняя точка этой кривой соответствуют интенсивностям $I = 10^{20}$ Вт/см² и $I = 10^{21}$ Вт/см². При таких интенсивностях коэффициент отражения уменьшается, это происходит вследствие проявления релятивистских эффектов, о которых будет сказано ниже. Расчеты коэффициентов отражения шестислойной системы были проведены и для случаев электронной концентрации плазменного слоя $n_e = 0,75n_{cr}$ и $n_e = n_{cr}$. Заметим, что подобный подход объясняет значительное уменьшение коэффициента отражения в случае $n_e = n_{cr}$ (см. рис. 17в) в диапазоне интенсивностей $I = 10^{16} \dots 5 \cdot 10^{17}$ Вт/см², которое не может быть обусловлено релятивистскими эффектами в силу низких значений интенсивности импульса. Таким образом, структура электронной плотности внутри плазменного слоя может увеличивать или уменьшать коэффициент отражения лазерного импульса от слоя.

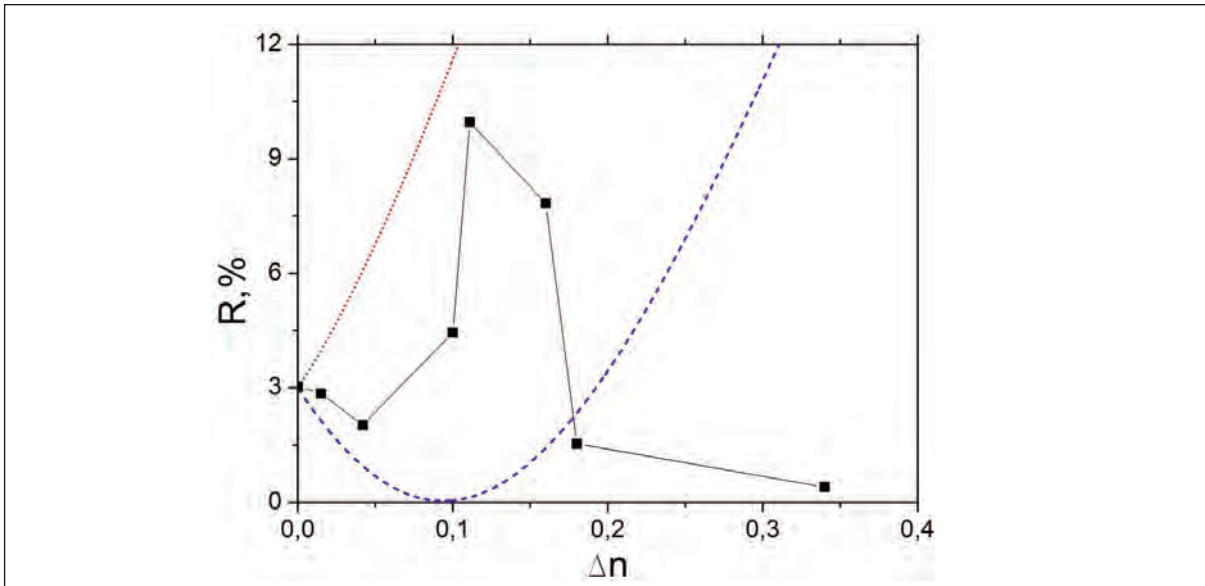


Рис. 20. Зависимость коэффициента отражения лазерного импульса от величины отклонения электронной концентрации Δn для слоистой системы с чередующимися показателями преломления n_{pl1} , n_{pl2} : импульс первоначально падает на слой с n_{pl1} - штриховая кривая, на слой с n_{pl2} - пунктирная кривая; сплошная кривая – данные численных расчетов.

Для всех рассматриваемых плотностей плазмы наблюдается уменьшение коэффициента отражения в области высоких интенсивностей лазерного импульса (см. рис. 17). Данное явление было описано исследователями достаточно давно [44, 45] и получило название релятивистского просветления. Электромагнитное поле разгоняет электроны до скоростей, близких к скорости света, вследствие чего происходит увеличение эффективной массы электронов и уменьшение плазменной частоты ω_{pl} . Чтобы найти коэффициент отражения в этом случае, можно воспользоваться формулой для диэлектрической проницаемости плазмы в ультрарелятивистском пределе [46]:

$$\varepsilon^{tr} = 1 - \frac{\omega_{pl,UR}^2}{\omega^2}, \quad (4.24)$$

где $\omega_{pl,UR} = \sqrt{\frac{2\pi \cdot e^2 \cdot n_e \cdot c^2}{\kappa \cdot T_e}}$ – плазменная частота в ультрарелятивистском пределе, κ –

постоянная Больцмана, T_e – температура электронов плазмы. Воспользовавшись (4.24) вместо (4.5) и проведя расчеты по формулам Френеля, аналогичные расчетам в п. 4.2, мы получили значения коэффициента отражения лазерного импульса от плазмы с критической плотностью в ультрарелятивистском пределе, которые оказались весьма близки к результатам численного расчета посредством кода «Карат». Температура электронов для подстановки в формулу (4.24) была взята из численного расчета. Так как явление релятивистского просветления достаточно хорошо изучено [47-49], мы не приводим здесь подробного анализа этих данных.

Изложенные результаты опубликованы в работах [50, 51].

5. Заключение

С помощью двумерной хз-версии PIC-кода «Карат» проведено моделирование взаимодействия сверхинтенсивных фемтосекундных лазерных импульсов с твердотельными дейтерий-содержащими мишенями. Исследованы процессы генерации нейтронов в таких мишенях в результате протекания реакций синтеза дейтронов и реакций фотопрощепления ядра дейтерия.

Для мишени из дейтерированного полиэтилена продемонстрирована возможность существенного увеличения выхода нейтронов (в десятки раз) при использовании слоистых мишеней, облучаемых сверхинтенсивными фемтосекундными лазерными импульсами. Исследована зависимость выхода нейтронов от количества слоев и расстояния между ними. Показано, что это зависимость достаточно слабая – определяющим является наличие внутри мишени полостей субмикронных размеров, на чьих границах формируются разнонаправленные потоки ускоренных дейтронов, столкновения которых между собой и с покоящимися дейтронами мишени существенно увеличивают полный выход нейтронов.

Исследованы физические механизмы, обуславливающие формирование нейтронных импульсов субпикосекундной длительности при воздействии сверхинтенсивного фемтосекундного лазерного излучения на мишени из дейтерида палладия, а также найдены пути увеличения нейтронного выхода за счет оптимизации параметров лазерных импульсов и мишеней. Показано, что длительность импульса нейтронов, возникающих в ходе реакций фоторасщепления дейтронов, определяется интервалом времени, в течение которого в мишени образуются гамма-кванты с энергией, превышающей порог реакции фоторасщепления (2.23 МэВ). Длительность импульса нейтронов, возникающих в ходе DD-реакций определяется временем «баллистического» пролета дейтронов, ускоренных световым давлением лазерного импульса на фронтальной поверхности мишени, сквозь объем мишени. Получена простая аналитическая формула, количественно описывающая зависимость длительности этого нейтронного импульса от толщины мишени и интенсивности лазерного импульса. Показано, что несмотря на относительно невысокий полный выход ($6 \cdot 10^6$ нейтронов за импульс), из-за микронных размеров пятна облучения мишени и субпикосекундной длительности импульса нейтронов, его пиковая интенсивность достигает величин порядка 10^{19} с^{-1} , характерных для самых мощных из существующих нейтронных источников, а максимальная плотность потока нейтронов $10^{24} \text{ с}^{-1} \text{ см}^{-2}$, на восемь порядков превосходит максимальные плотности потоков существующих нейтронных источников.

Проведено подробное исследование коэффициента отражения сверхинтенсивного фемтосекундного лазерного импульса от плазмы с околосверхкритической плотностью. Проведен аналитический расчет коэффициента отражения лазерного импульса по формулам Френеля с учетом немонохроматичности импульса. Показано, что в случае коротких импульсов происходит уменьшение коэффициента отражения импульса по сравнению с его значением для монохроматической электромагнитной волны по причине увеличения ширины спектра импульса. Показано, что в случае фемтосекундных лазерных импульсов длительностью менее 100 фс использование классических формул Френеля для монохроматической электромагнитной волны дает неудовлетворительный результат.

На основании результатов численного моделирования отражения лазерного импульса от плазменного слоя показано, что помимо длительности импульса, важную роль в процессе отражения играют внутренние процессы, протекающие в плазме под действием электромагнитного поля импульса. При падении сверхинтенсивного фемтосекундного лазерного импульса на плазменный слой с концентрацией, близкой к критической, внутри плазмы формируется квазипериодическая структура электронной плотности, которая может как увеличивать, так и уменьшать коэффициент отражения лазерного импульса. Физические механизмы, приводящие к формированию таких структур в плазме, требуют дальнейших исследований.

Литература

1. *Tarakanov V.P.* User's manual for Code KARAT // VA, USA: Berkeley Research Associates, Inc., 1992.
2. *Андреев С.Н., Рухадзе А.А., Тараканов В.П., Якутов Б.П.* Моделирование ускорения протонов при облучении майларовой мишени фемтосекундными лазерными импульсами // Квантовая электроника, 2010, **40** (1), 64-67.
3. *Андреев С.Н., Гаранин С.Г., Рухадзе А.А. и др.* Моделирование генерации гамма-квантов тормозного излучения при облучении тонких металлических пленок сверхинтенсивными фемтосекундными лазерными импульсами // Квантовая электроника, 2010, **40** (4), 355-362.
4. *Андреев С.Н., Гаранин С.Г., Рухадзе А.А. и др.* Моделирование эмиссии нейтронов при облучении мишеней из дейтерированного полиэтилена сверхинтенсивными лазерными импульсами // Квантовая электроника, 2011, **41** (4), 377-381.
5. *Афанасьев Ю.В., Демченко Н.Н., Крохин О.Н., Розанов В.Б.* Поглощение и отражение лазерного излучения разлетающейся высокотемпературной плазмой // ЖЭТФ, 1977, **72**, 170-179.
6. *Величко О.М., Урлин В.Д., Якутов Б.П.* Взаимодействие лазерного импульса фемтосекундной длительности с конденсированным веществом // Доклад на конференции "VI Забабахинские научные чтения, 2001, Саров", URL: <http://www.vniitf.ru/rig/konfer/6zst/dokl/sec3/1.pdf>.
7. *Grimes M.K., Rundquist A.R., Lee Y.S., Downer M.C.* Experimental identification of «vacuum heating» at femtosecond-laser irradiated metal surfaces // Phys. Rev. Lett., 1999, **82** (20), 4010-4013.
8. *Комаров П.С., Агранат М.Б., Ашитков С.И. и др.* Экспериментальные исследования неидеальной плазмы твердотельной плотности, образованной мощными фемтосекундными лазерными импульсами // Доклад на конференции "Научная сессия МИФИ-2009, Москва", URL: <http://library.mephi.ru/data/scientific-sessions/2009/t4/7-2-1.doc>.
9. *Агранат М.Б., Андреев Н.Е., Ашитков С.И. и др.* Определение транспортных и оптических свойств неидеальной плазмы твердотельной плотности при фемтосекундном лазерном воздействии // Письма в ЖЭТФ, 2007, **85** (6), 328-333.
10. *Chen L.M., Zhang J., Dong Q.L. et al.* Hot electron generation via vacuum heating process in femtosecond laser-solid interactions // Phys. Plasmas, 2001, **8**, 2925-2929.
11. *Price D.F., More R.M., Walling R.S. et al.* Absorption of ultra-short laser pulses by solid targets heated rapidly to temperatures 1-1000 eV // Phys. Rev. Lett., 1995, **75** (2), 252-255.
12. *Lefebvre E., Bonnaud G.* Transparency/opacity of a solid target illuminated by ultrahigh-intensity laser pulse // Phys. Rev. Lett., 1995, **74** (11), 2002-2005.
13. *McKenna P., Ledingham K.W.D., Spencer I. et al.* Experiments in laser-induced nuclear physics // Report on "11th International Conference on Emerging Nuclear Energy Systems ICENES 2002", Oct. 2002, Albuquerque, USA, URL: http://www.researchgate.net/publication/2832968_Experiments_In_Laser-Induced_Nuclear_Physics
14. *McKenna P., Ledingham K.W.D., Robson L.* Laser-driven ion acceleration and nuclear activation // Lecture Notes in Physics, 2006, **694**, 91-107.
15. *Higgison D.P., McNaney J.M., Swift D.C. et al.* Production of neutrons up to 18 MeV in high-intensity, short-pulse laser matter interactions // Phys. Plasmas, 2011, **18**, 100703, 4 pp.
16. *Macchi A.* A femtosecond neutron source // Appl. Phys. B, 2006, **82**, 337-340.
17. *Petrov G.M., Davis J.* Influence of prepulse plasma formation on neutron production from the laser-target interaction // Phys. Plasmas, 2008, **15**, P. 083107, 9 pp.
18. *Ledingham K.W.D., J. Magill, McKenna P. et al.* Laser-driven photo-transmutation of ^{129}I – a long-lived nuclear waste product // J. Phys. D: Appl. Phys., 2003, **36** (18), 79-82.
19. *Higginson D.P., McNaney J.M., Swift D.C. et al.* Laser generated neutron source for neutron resonance spectroscopy // Physics of plasmas, 2010, **17**, P. 100701, 4 pp.
20. *Рябов Ю.В., Грачев М.И., Каманин Д.В. и др.* Импульсный нейтронный источник на протонном пучке Московской мезонной фабрики // Физика твердого тела, 2010, **52** (5), 957-960.
21. *Андреев С.Н., Гаранин С.Г., Еремеечева Ю.И. и др.* Оптимизация выхода нейтронов при сверхинтенсивном лазерном воздействии на мишени из дейтерированного полиэтилена // Квантовая Электроника, 2012, **42** (7), 600-604.
22. *Бэдсел Ч.К., Ленгдон А.Б.* Физика плазмы и численное моделирование // М.: Энергоатомиздат, 1989, 452 стр.
23. *Dawson J.M.* Particle simulation of plasmas // Rev. Mod. Phys., 1983, **55** (2), 403-447.
24. *Pukhov A.* Strong field interaction of laser radiation // Rep. Prog. Phys., 2003, **66**, 47-101.
25. *Быченков В.Ю., Тихончук В.Т., Толоконников С.В.* Лазерное инициирование ядерных реакций высокоэнергетичными ионами // ЖЭТФ, 1999, **115** (6), 2080-2090.
26. *Ledingham K.W.D., Norreys P.A.* Nuclear physics merely using a light source // Contemporary Physics, 1999, **40** (6), 367-383.

27. *Davis J., Petrov G.M.* Neutron production from ultrashort pulse lasers using linear and circular polarization // *Physics of plasmas*, 2011, **18** (7), 073109, 6 pp.
28. *Schwoerer H., Gibbon P., Düsterer S. et al.* MeV X rays and photoneutrons from femtosecond laser-produced plasmas // *Phys.Rev.Lett.*, 2001, **86** (11), 2317-2320.
29. *Попов В.С.* Туннельная и многофотонная ионизация атомов и ионов в сильном лазерном поле (теория Келдыша) // *УФН*, 2004, **174** (9), 921-951.
30. *Келдыш Л.В.* Ионизация в поле сильной волны // *ЖЭТФ*, 1964, **47** (5), 1945-1957.
31. *Antonov V.E., Fedotov V.K., Gnesin B.A. et al.* Anisotropy in the inelastic neutron scattering from fcc NiH // *Europhys. Lett.*, 2000, **51** (2), 140-146.
32. *Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Теоретическая физика. Том IV. Квантовая электродинамика // М.: Наука, 1980, 704 стр.
33. *Roy R.R., Nigam B.P.* Nuclear Physics. Theory and experiment // NY: John Wiley & Sons LTD, 1967, 602 pp.
34. *Andreev A., Kumar N., Platonov K., Pukhov A.* Efficient generation of fast ions from surface modulated nanostructure targets irradiated by high intensity short-pulse lasers // *Phys. Plasmas*, 2011, **18**, 103103, 5 pp.
35. *Беляев В.С., Крайнов В.П., Лисица В.С., Матафонов А.П.* Генерация быстрых заряженных частиц и сверхсильных магнитных полей при взаимодействии сверхкоротких интенсивных лазерных импульсов с твердотельными мишенями // *УФН*, 2008, **178** (8), 823-847.
36. *Андреев С.Н., Тараканов В.П.* Ускорение электронов и протонов в сверхсильном лазерном поле: расчеты и модели // *Физика плазмы*, 2009, **35** (12), 1094-1101.
37. *Кутеев Б. В., Гончаров П.Р., Сергеев В. Ю., Хрипунов В. И.* Мощные нейтронные источники на основе реакций ядерного синтеза // *Физика плазмы*, 2010, **36** (4), 307-346.
38. *Norreys P.A., Krushelnick K.M., Zepf M.* PW lasers: matter in extreme laser fields // *Plasma Phys. Control. Fusion*, 2004, **46**, B13-B21.
39. *Cai Y., Wang W., Xia C. et al.* Time-resolved measurements on reflectivity of an ultrafast laser-induced plasma mirror // *Phys. Plasmas*, 2009, **16**, 103104, 6 pp.
40. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Том VIII. Электродинамика сплошных сред // М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005, 656 стр.
41. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Том X. Физическая кинетика // М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002, 536 стр.
42. *Курант Р., Гилберт Д.* Методы математической физики // ГТТИ, 1933, 525 стр.
43. *Борн М., Вольф Э.* Основы оптики // М.: Наука, 1973, 720 стр.
44. *Steiger A.D., Woods C.H.* Intensity-dependent propagation characteristics of circularly polarized high-power laser radiation in a dense electron plasma // *Phys. Rev. A*, 1972, **5** (3), 1467-1474.
45. *Kaw P., Dawson J.* Relativistic nonlinear propagation of laser beams in cold overdense plasmas // *Phys. Fluids*, 1970, **13** (2), 472-481.
46. *Силин В.П., Рухадзе А.А.* Электромагнитные свойства плазмы и плазмоподобных сред // М.: Книжный дом "ЛИБРОКОМ", 2012, 248 стр.
47. *Palaniyappan S., Hegelich B.M., Wu H. et al.* Dynamics of relativistic transparency and optical shuttering in expanding overdense plasmas // *Nature Physics*, 2012, **8**, 763-769.
48. *Siminos E., Grech M., Skupim S. et al.* Effect of electron heating on self-induced transparency in relativistic-intensity laser-plasma interactions // *Phys. Rev. E*, 2012, **86**, 056404, 12 pp.
49. *Fuchs J., Adam J.C., Amiranoff F. et al.* Transmission through highly overdense plasma slabs with subpicosecond relativistic laser pulse // *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **80** (11), 2326-2329.
50. *Андреев С.Н., Еремеева Ю.И., Тараканов В.П.* Особенности отражения фемтосекундного лазерного импульса от околосубкритической плазмы // *Краткие сообщения по физике ФИАН*, 2013, **40** (8), 25-32.

PIC-SIMULATION OF LASER-PLASMA SYSTEMS

S.N. Andreev¹, Y.I. Ereimeicheva¹, V.P. Tarakanov²

¹*Prokhorov General Physics Institute, Russian Academy of Science*

²*Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences*

andreevsn@ran.gpi.ru, ereimeicheva@yandex.ru, karat8tarak@gmail.com

Received 03.03.2014

The review of PIC-simulations of the action of super-intense femtosecond laser pulses on various density and composition plasma is given. The simulations were carried out by means of the PIC-code «Karat». Nuclear processes in deuterium-containing targets leading to the neutron emission under the effect of the laser radiation was investigated. As a result of this research the ways to the optimization of laser-plasma neutron sources parameters were suggested. The reflection coefficient of super-intense femtosecond laser pulses from near-critical plasma was investigated. It is shown, that the reflection coefficient behaves abnormally on the definite laser intensity interval, the local maximum of the decreasing reflection coefficient curve exists.

ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ МОДЫ В ОПТИКЕ ФОТОННЫХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ

В.А. Беляков

Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау

bel1937@mail.ru

Поступила 10.04.2014

Рассмотрены оптические свойства фотонных кристаллов со специальным акцентом на роль локализованных оптических мод. Поэтому значительное внимание уделено изложению свойств локализованных оптических мод в фотонных структурах конечных размеров и их необычным проявлениям в оптике фотонных кристаллов, в частности в лазерах с распределенной обратной связью (РОС лазерах) на фотонных структурах. Для конкретности изложение материала выполнено на примере аналитической теории оптики периодических спиральных сред, являющихся интересным представителем фотонных кристаллов, а именно, на примере хиральных жидких кристаллов, оказавшихся в настоящее время популярным объектом для исследований по линейной и нелинейной оптике фотонных кристаллов.

УДК 533.9

Введение

В последние несколько десятилетий в научных статьях появился термин «**фотонные кристаллы**», а работы по соответствующей тематике составили новое актуальное направление в современной оптике. Опубликованы книги о фотонных кристаллах [1-3], между тем существенные и важные достижения, полученные, в упомянутом направлении в области аналитического описания оптики фотонных кристаллов, совершенно не нашли своего достаточного отражения в литературе. Цель настоящей статьи – хотя бы частично восполнить названный пробел.

Начнем с разъяснения термина «фотонные кристаллы». Под этим термином принято понимать периодические среды, величина периода которых находится в области длин волн видимого света, так что явления дифракции, хорошо известные в обычных кристаллах для рентгеновского излучения, в фотонных кристаллах существуют в оптическом диапазоне длин волн (см рис. 1, на котором приведены схематические примеры одномерных (1D), двумерных (2D) и трехмерных (3D) фотонных кристаллов). При этом проявляются интересные и полезные для приложений оптические эффекты. Так, например, порог лазерной генерации может быть существенно ниже, чем в соответствующих однородных средах [1], реализуется повышение эффективности нелинейно-оптических явлений [3] и т.д. Конкретными примерами 1D фотонных кристаллов могут служить слоистые, модулированные и спиральные среды с периодом в оптическом диапазоне длин волн. Примером естественных 3D фотонных кристаллов являются опалы, известные как полудрагоценные камни, и жидкокристаллические, так называемые, голубые фазы [4, 5], а также существуют искусственно созданные фотонные структуры, в том числе двумерные. При всем своем разнообразии названные среды обладают качественно подобными оптическими свойствами. Поэтому их изучение естественно начать на примере среды, допускающей наиболее простое описание оптических свойств. Таковыми средами являются одномерные спиральные среды (локально одноосные среды, оптическая ось в которых вращается вокруг некоторой оси с перемещением вдоль этой оси). Соответствующую ось принято называть осью спирали, а величину периода **шагом спирали**.

Ниже будет рассматриваться оптические свойства фотонных кристаллов именно на примере одномерной спиральной среды, а для конкретности в качестве такой среды будет рассматриваться **холестерический жидкий кристалл** или, как говорят, холестерик (ХЖК) [4–6]. Там, где это окажется необходимым, будут даны комментарии, как соотносятся оптические свойства других фотонных кристаллов с оптическими свойствами ХЖК. Здесь же следует упомянуть, что необычные оптические свойства ХЖК оказываются связанными с эффектами, имеющими общезначение.

Сведения по оптике ХЖК содержатся в [5, 6], однако для удобства читателя они будут также частично воспроизведены и здесь. ХЖК представляют собой анизотропную жидкость, состоящую из удлиненных молекул, между ориентацией длинных осей которых в различных точках вдоль спиральной оси имеется корреляция (в случае ХЖК эта ось называется также **холестерической осью**, см. рис. 2). Для характеристики ориентационного порядка в ХЖК вводится вектор единичной длины **n**, называемый **директором**, направление которого совпадает с направлением усредненной ориентации длинных осей молекул в каждой пространственной точке. Таким образом, поле директор **n**, задает выделенное, преимущественное направление молекул в каждой точке ХЖК. Кроме того, вводится еще одна величина, **параметр порядка**, **S** [4], который характеризует степень ориентационного порядка молекул в каждой точке (ориентация каждой молекулы испытывает тепловые флуктуации). Параметр порядка определяется следующим образом:

$$S = (3/2) \langle \cos^2 \theta - 1/3 \rangle \quad (1)$$

где θ – угол между направлением директора в рассматриваемой точке и мгновенным значением направления длинной оси молекул, а угловые скобки в (1) означают усреднение по времени. Из формулы (1) ясно, что параметр порядка **S** может принимать значения от 0 до 1. Значение $S=1$ соответствует полной ориентационной упорядоченности молекул, $S=0$ означает полный ориентационный беспорядок и соответствует ХЖК, перешедшему в изотропную жидкость. В холестерической же фазе (ХЖК)

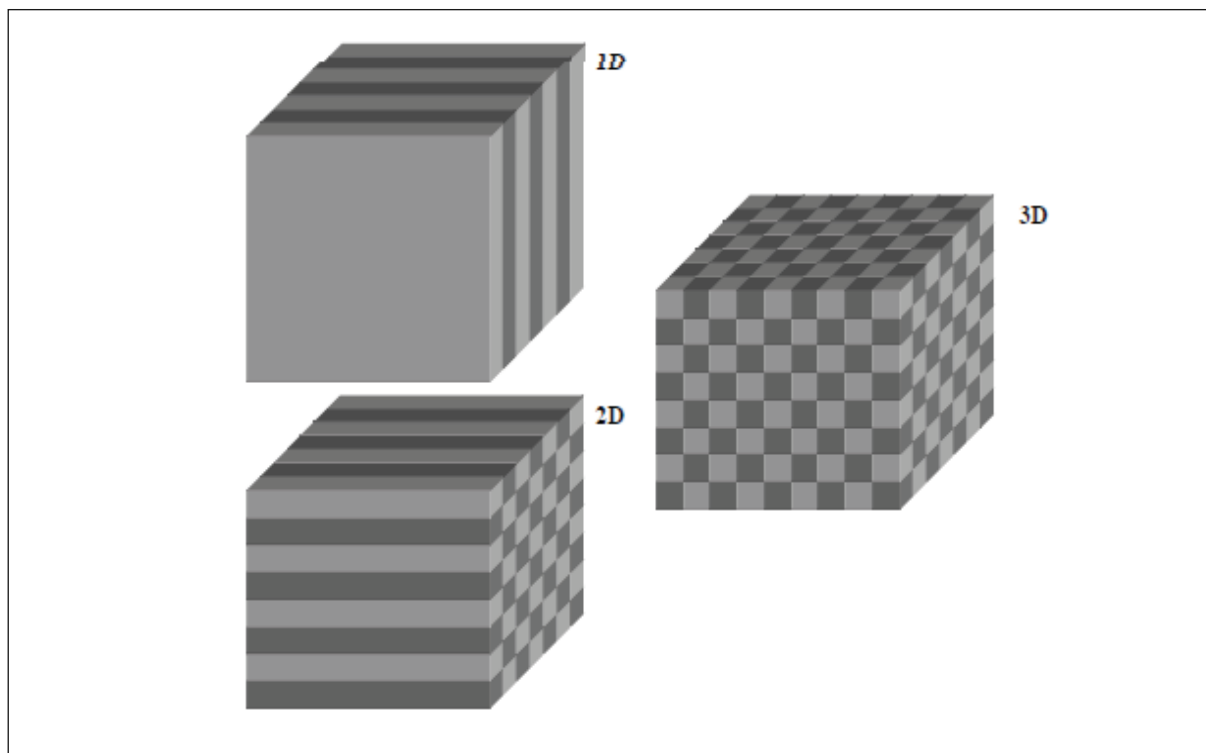


Рис. 1

значение параметр порядка $1 > S > 0$, минимально непосредственно при температуре перехода T_C из изотропной жидкости в холестерическую фазу и возрастает по мере понижении температуры ниже T_C .

ХЖК существуют в конечном температурном интервале, который лежит внутри температурного интервала, соответствующего плавлению обычного кристалла в анизотропную жидкость и перехода анизотропной жидкости в обычную изотропную жидкость. Выше говорилось об однодоменном образце ХЖК (если не приняты специальные меры, то образце ХЖК оказывается полидоменным, т.е. разбитым на множество однодоменных областей малого размера). Далее будут обсуждаться свойства только однодоменных ХЖК.

1. Однодоменный ХЖК

Локально ХЖК имеет свойства одноосного кристалла. Это означает, что в малом объеме усредненное упорядочение молекул в ХЖК такое, что приводит к оптическим свойствам обычного одноосного кристалла, а поэтому локально его можно также охарактеризовать директором $\mathbf{n}$ и параметр порядка S . Отличия ХЖК от обычного одноосного кристалла проявляются в больших по сравнению с молекулярными масштабах. Эти отличия связаны с тем, что в нем молекулы образуют так называемую **холестерическую спираль**. А именно, направление директора не остается неизменным в его объеме (даже для однодоменного образца!). Существует такое направление, называемое **холестерической осью**, вдоль которого регулярным образом меняется ориентация директора. Директор перпендикулярен этой оси и равномерно вращается вокруг нее с изменением координаты вдоль этой оси. Это означает, что угол поворота директора j линейно зависит от координаты z вдоль холестеической оси и может быть представлен в виде $j = 2\pi z/p$. Расстояние p вдоль холестеической оси, на котором директор (средняя ориентация молекул) поворачивается на 360° , носит название **шага холестеической спирали**.

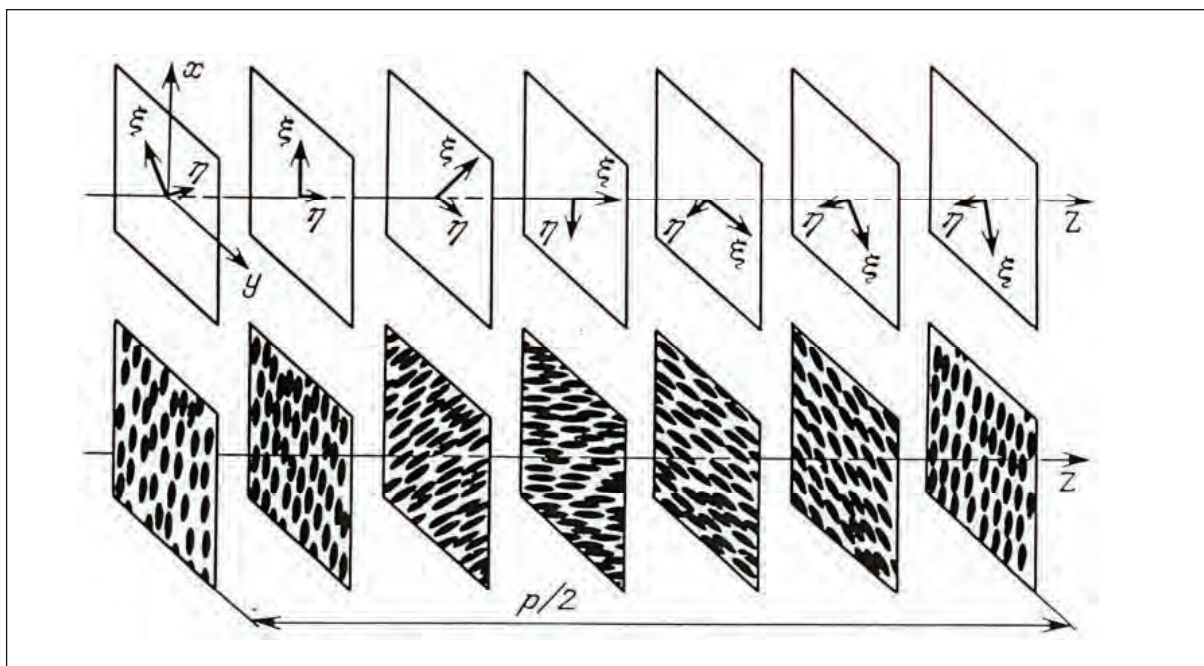


Рис. 2

Если провести воображаемые плоскости, перпендикулярные холестерической оси, то для каждой плоскости во всех ее точках направление директора оказывается одинаковым и фиксированным во времени, однако изменяющимся от плоскости к плоскости, что изображено на рис. 2, где также показано, как изменяется ориентация главных осей тензора диэлектрической проницаемости вдоль холестерической оси.

Холестерики устроены более «деликатно», чем многие известные разновидности жидких кристаллов. Об этом, в частности, говорит поведение холестерической спирали при изменении температуры в области существования ХЖК. При повышении температуры холестерическая спираль закручивается, т.е. ее шаг p уменьшается с ростом температуры. Таким образом, как правило, шаг p холестерической спирали оказывается минимальным на верхней температурной границе существования холестерика и максимальным вблизи температуры перехода в кристаллическую фазу. Так как типичные значения шага холестерической спирали оказываются порядка длин волн видимого света, то для этой разновидности фотонных кристаллов температурные изменения шага проявляются в сильной температурной зависимости оптических свойств ХЖК, поскольку последние, как мы увидим, самым существенным образом зависят от шага спирали [4-6].

Для получения однодоменного ХЖК образца, или, как говорят монокристалла, необходимо принять специальные меры. Для этого необходимо использовать влияние факторов, стабилизирующих структуру ХЖК. Такими факторами могут быть либо **поверхностные силы сцепления**, задающие определенную ориентацию молекул на поверхностях, ограничивающих ХЖК, которая, в свою очередь, индуцирует за счет межмолекулярного взаимодействия соответствующую ориентацию молекул во всем объеме, либо внешние поля (как правило, электрические), ориентирующие молекулы однородным образом сразу во всем объеме. Последнее время для этих целей также используется **фото-ориентация**, т.е. ориентация молекул ХЖК на поверхности линейно поляризованным светом. Далее мы будем говорить о, так называемой, «**планарной холестерической текстуре**», т.е. совершенном слое ХЖК, в котором холестерическая ось направлена перпендикулярно поверхностям слоя.

Исторически первый (не утративший своего значения и в настоящее время) способ получения однодоменных ХЖК-образцов состоит в специальной механической обработке поверхностей, ограничивающих ХЖК. Поскольку ясно, что ориентирующее влияние поверхности на молекулы тем сильнее, чем менее молекулы удалены от поверхности, то следует заранее ожидать, что однородной ориентации молекул ХЖК легче всего добиться в тонких слоях. Практика показывает, что полной однородности структуры можно добиться, поместив ХЖК между пластинами, зазор между которыми не более 10–100 микрон. Пластины, ограничивающие ХЖК, как правило, изготавливают из прозрачных материалов: стекла, полимеров, токопроводящего прозрачного соединения окиси олова (SnO_2) и т.д. Обработка поверхностей пластин в простейшем случае состоит в их **направленной полировке**. Иногда оказывается достаточным, например, просто натереть поверхность в одном направлении кусочком бумаги или шерстяной ткани. Применяется также направленное, **косое напыление на поверхность молекулярных слоев или нанесение молекул специальных веществ, ориентантов**.

1.1. О традиционной оптике холестериков

Вся специфика оптических свойств холестериков связана с их структурой, а именно со спиральным упорядочением молекул в них. Разберемся, почему и как эта спиральная структура оказывает решающее влияние на оптические свойства холестерика. Удобно воспользоваться тем, что локально, т.е. в малом объеме оптические характеристики ХЖК аналогичны оптическим характеристикам одноосного кристалла. А это значит, что направление упорядочения молекул для каждого значения координаты z (см. рис. 2) характеризуется директором $\mathbf{n}$, а диэлектрические свойства анизотропны, т.е. локальные главные значения тензора диэлектрической проницаемости различны ($D_\epsilon = \epsilon - \epsilon_\perp \neq 0$). Только в отличие от одноосного кристалла в ХЖК директор $\mathbf{n}$, т.е. направление оптической оси, изменяется в пространстве, и ХЖК можно представить себе как «закрученный одноосный кристалл». Ориентация директора между обкладками в ХЖК меняется, как правило, на толщине ХЖК на сотни оборотов. Диэлектрические свойства холестерика периодичны по z (вдоль холестерической оси) с периодом $p/2$. В холестерике периодом диэлектрических свойств служит не шаг спирали p , на котором директор совершает оборот на угол 2π , а $p/2$, так как ориентации директора $\mathbf{n}$ и $-\mathbf{n}$ эквивалентны и период диэлектрических свойств холестерика оказывается вдвое меньше, чем расстояние, на котором директор совершает полный оборот. Поскольку, как уже говорилось, величина шага спирали находится в диапазоне длин волн видимого света, то свет может испытывать дифракцию на периодической структуре холестерика. Условия дифракции аналогичны хорошо известным условиям дифракции рентгеновских лучей и описываются **соотношением Вульфа-Брегга**

$$2\sin\theta = s\lambda/d, \quad (2)$$

где s – целое число, 2θ – угол рассеяния пучка, λ – длина волны, d – период структуры.

Это соотношение определяет направление (угол θ), распространяясь в которое свет с длиной волны λ испытывает дифракцию на структуре с периодом d . Для холестерика – $d=p/2$. При выполнении условия (2) падающий на холестерик пучок света генерирует дифракционно отраженный пучок. Если падающий на холестерик свет монохроматичен, то его дифракционное отражение происходит согласно соотношению (2) только при определенных дискретных углах θ . Если же падающий свет белый, т.е. немонохроматичный, то при произвольном угле падения есть дифракционное отражение, однако отражается свет определенной, зависящей от угла θ , длины волны. В оптических ячейках, как правило, используется дифракционное отражение при $\theta = \pi/2$ (как говорят,

при нормальном падении света на слой ХЖК), что соответствует распространению дифрагировавшего света в направлении, противоположном падающему.

Теперь легко понять, что при освещении холестерика белым светом цвет дифракционно отраженного света будет изменяться при изменении шага спирали p . А именно цвет отраженного света воспринимается нами как окраска холестерика. Если вспомнить теперь, что шаг холестерика изменяется в зависимости от его температуры, то становится понятным, что от температуры холестерика должна зависеть (и действительно зависит) его окраска.

1.2. Дифракция и оптика холестериков

Пока что речь шла о сравнительно грубых оптических эффектах в холестериках, объяснение которых не встречало больших затруднений. Однако существуют и более тонкие оптические эффекты, для объяснения которых требуется более детальное изучение особенностей взаимодействия света с холестериками. К их числу, в частности, относится зависимость от длины волны света направления **вращения плоскости поляризации** линейно поляризованного света и величины **удельного вращения плоскости поляризации** в ХЖК. Следует сказать, что этот эффект наблюдается во всех спиральных средах. Другое необычное свойство холестериков состоит в **селективном отражении света** определенной круговой поляризации. Так, если на планарный холестерический слой перпендикулярно его поверхности падает луч света, то свет одной круговой поляризации, вне зависимости от его длины волны, проходит через этот слой, не ослабляясь, а свет другой круговой поляризации испытывает сильное отражение, когда его длина волны близка к шагу холестерической спирали p . Причем отражение испытывает свет той круговой поляризации (правой или левой) которая совпадает с хиральностью холестерической спирали (правая, левая), т.е. отражается правая круговая поляризация, если холестерическая спираль правая и левая – если спираль левая. Перечисленные явления, подобно зависимости окраски холестерика от шага спирали, объясняются дифракцией света на периодической структуре холестерика. Однако для их объяснения недостаточно использовать только соотношение Вульфа-Брегга (2), а требуется привлечение более сложной теории [4-6].

Следует сказать еще об одном свойстве холестерика, которое не находит своего объяснения в простейшем теоретическом описании дифракции, т.е. с помощью соотношения Вульфа-Брегга (2). Речь идет о том, что, согласно формуле (2), дифракция света фиксированной длины волны λ имеет место при строго определенном угле θ_B . Опыт же показывает, что при фиксированной длине волны дифракция света в холестерике происходит в некотором интервале углов $\Delta\theta$ в окрестности угла θ_B , определяемого формулой (2). И наоборот, при фиксированном угле θ дифракция света происходит в интервале длин волн $\Delta\lambda$ в окрестности брегговской длины волны λ_B .

Этот интервал длин волн $\Delta\lambda$ (или углов $\Delta\theta$) в холестерике принято называть **областью селективного отражения (ОСО)**. Строгое теоретическое рассмотрение [5, 6] (см. ниже) показывает, что величина области селективного отражения определяется **анизотропией локальной диэлектрической проницаемости** холестерика $\Delta\epsilon = \epsilon - \epsilon_\perp$. Например при нормальном падении света изменение длин волн $\Delta\lambda$ в пределах ОСО определяется соотношением $\Delta\lambda / \lambda_B = 1/(1-\delta)^{1/2} - 1/(1+\delta)^{1/2}$, где **параметр анизотропии** $\delta = \Delta\epsilon / (\epsilon_\parallel + \epsilon_\perp)$ и $\lambda_B = p$.

Свет круговой поляризации, знак которой совпадает со знаком спирали, испытывает дифракцию в холестерике и отражается от него, а свет противоположной круговой поляризации дифракции не испытывает и проходит через холестерик, не ослабляясь.

Попробуем понять наблюдаемую частотную зависимость направления вращения плоскости поляризации и инверсию ее знака вращения, а также частотную зависимость

величины вращательной способности холестерика. Наблюдаемая зависимость находит естественное объяснение, если разложить амплитуду световой волны на входной поверхности холестерика по так называемым **собственным волнам**, а потом с учетом различия фазовых скоростей собственных волн найти поле световой волны на выходной поверхности холестерика. В холестерике собственные волны обладают круговыми поляризациями. В холестерике вращение плоскости поляризации света происходит при любой ориентации плоскости поляризации линейно поляризованного падающего света и описывается следующей формулой:

$$j = (\omega/c)(n_L - n_R)L, \quad (3)$$

где n_L и n_R – показатели преломления лево и право поляризованной волны, соответственно.

Другая особенность вращения плоскости поляризации состоит в нелинейной зависимости угла поворота плоскости поляризации от толщины слоя и связана с тем, что в холестерике в области селективного рассеяния существуют две собственные волны с дифрагирующей круговой поляризацией. Эти волны обладают различными фазовыми скоростями. Это и приводит к тому, что величина и даже направление вращения плоскости поляризации в холестерике зависят от частоты света.

Дело в том, что при падении на холестерик света извне в нем возбуждаются обе собственные волны дифрагирующей круговой поляризации, обладающие различными скоростями распространения. Однако в зависимости от частоты света происходит изменение соотношения амплитуд возбуждаемых собственных волн так, что с одной стороны области селективного отражения возбуждается преимущественно волна, например, медленная, а с другой – другая собственная волна – быстрая. Если теперь учесть, что фазовая скорость недифрагирующей собственной волны с противоположной круговой поляризацией не зависит от частоты (в узком интервале частот вблизи области селективного отражения такой зависимостью можно пренебречь), то станет понятным, что знак разности $n_L - n_R$ в формуле (3) оказывается различным по обе стороны от области селективного отражения, что и соответствует противоположным направлениям вращения плоскости поляризации. В некоторой же промежуточной точке, как предсказывает теория и подтверждает эксперимент, вращение отсутствует.

Еще одно удивительное свойство холестерика проявляется также в области селективного отражения (ОСО) и состоит в **аномальном поглощении света**. А именно, для определенной частоты света в холестерике может полностью исчезнуть поглощение света и слой холестерика, совершенно непрозрачный для света выше температуры перехода в изотропную фазу (жидкость), оказывается прозрачным для света в холестерической фазе [7]. Это свойство также связано с дифракцией света на холестерической спирали и объясняется тем, что поле электромагнитной волны в холестерике в условиях дифракции существенно отличается от плоской волны $\exp[i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)]$ (где $\mathbf{k}$ – волновой вектор света), которая описывает распространение света вне дифракции. В условиях дифракции поле электромагнитной волны представляет собой суперпозицию двух плоских волн $\exp[i(\mathbf{k}\mathbf{r})]$ и $\exp[i(\mathbf{k}_1\mathbf{r})]$, где $\mathbf{k}$ – волновой вектор первичной волны, а $\mathbf{k}_1$ – волновой вектор дифрагировавшей волны.

Волна дифрагирующей поляризации в холестерике имеет пространственную структуру, подобную холестерической спирали. Если найти суммарное электрическое поле двух плоских волн, образующих дифрагирующую собственную волну, то окажется, что ориентация суммарного поля относительно директора зависит от частоты. Так на границе ОСО суммарное электрическое поле в любой точке направлено вдоль директора, а на другой границе ОСО – перпендикулярно директору.

Описанная структура поля дифрагирующей собственной волны объясняет исчезновение поглощения света в холестерике на некоторой частоте. Однако следует отметить, что исчезновение поглощения света может наблюдаться только в **дихроичных молекулах**, поглощение света которыми зависит от поляризации волны. Поглощение дихроичных молекул максимально, если поле в волне (поляризация) совпадает с ориентацией осцилляторов поглощения. Эти осцилляторы могут обладать сильной анизотропией, что проявляется в зависимости поглощения света от его поляризации. В дихроичных молекулах ориентация осцилляторов строго определена, а в ЖК, содержащем эти молекулы, она оказывается скореллированной с локальным направлением директора (например, направлена вдоль директора). Поэтому, если, например, в холестерике поле световой волны направлено перпендикулярно директору, то оно оказывается также перпендикулярным (для нашего примера) осцилляторам поглощения и поглощение света в холестерике должно исчезнуть. Именно такая благоприятная структура поля и может реализоваться в холестерике при частотах света, совпадающих с границами ОСО, так как в типичной ситуации осцилляторы поглощения направлены вдоль длинной оси или перпендикулярны ей. Причем в зависимости от направления осцилляторов поглощения в молекуле исчезновение поглощения происходит либо на коротковолновой, либо на длинноволновой границе ОСО. По частоте, на которой происходит исчезновение поглощения, можно судить об ориентации осцилляторов поглощения в дихроичных молекулах.

Отметим, что исчезновение поглощения в холестериках является аналогом известного в дифракции рентгеновских лучей **эффекта Бормана** [8]. Последний состоит в подавлении поглощения рентгеновских лучей в условиях дифракции и так же связан с образованием в кристалле из двух плоских волн конфигурации поля рентгеновских лучей, которая не испытывает поглощения.

Приведенные выше качественные объяснения не достаточны для количественного описания оптических свойств холестерика. Поэтому в следующем разделе будет изложена более сложная теория оптических свойств холестериков, основанная на точном решении уравнений Максвелла в спиральных средах и позволяющая количественно описать наблюдаемые оптические свойства холестериков.

2. Оптика ХЖК (точное решение)

Необычные оптические свойства холестериков обусловлены одномерной периодичностью их структуры [4]. Для холестериков (и более общо одномерных спиральных сред) в случае распространения света вдоль спиральной оси известно точное аналитическое решение уравнений Максвелла [5, 6], которое к тому же оказывается достаточно простым. Подчеркнем, что других примеров точного аналитического решения уравнений Максвелла для периодических сред даже с более простой структурой, чем у холестерика, неизвестно.

2.1. Диэлектрические свойства холестериков

Переходя к описанию точного аналитического решения уравнений Максвелла для холестериков, приведем в начале вид их тензора диэлектрической проницаемости, который определяется равномерным вращением с координатой вдоль холестерической оси направления анизотропии холестерика [4-6]:

$$\epsilon(z) = \begin{pmatrix} \epsilon_0[1+\delta\cos\tau z] & \pm\epsilon_0\delta\sin\tau z & 0 \\ \pm\epsilon_0\delta\sin\tau z & \epsilon_0[1-\delta\cos\tau z] & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{\perp} \end{pmatrix} \quad (4)$$

где $\epsilon_0 = (\epsilon_1 + \epsilon_2)/2$, $\delta = (\epsilon_1 - \epsilon_2)/(\epsilon_1 + \epsilon_2)$ и $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$ – главные значения тензора диэлектрической проницаемости ($\epsilon_2 = \epsilon_3$ в случае холестерика). Угол вращения направления локальной анизотропии $\phi(z)$ линейно зависит от координаты z вдоль холестерической оси, а именно, $\phi(z) = \tau z/2$, где **вектор обратной решетки холестерика** $\tau = 4\pi/p$, а p является шагом холестерика. Период изменения диэлектрических свойств, как уже отмечалось, холестерика совпадает с полу-шагом $p/2$ холестерической спирали, так как направление анизотропии, повернутое на пол оборота физически эквивалентно исходному направлению анизотропии. Два знака в выражении для тензора (4) соответствуют двум топологическим возможностям – левой и правой спиралям.

2.2. Собственные волны

Найдем сначала собственные волны в ХЖК при распространения света вдоль холестерической оси. Заметим, что для выбранного направления распространения электромагнитная волна оказывается строго поперечной, т.е., вектор электрического поля волны $\mathbf{E}$ перпендикулярен оси Z . В отсутствии внешних токов и зарядов уравнения Максвелла для холестериков принимают вид

$$\partial^2 \mathbf{E} / \partial z^2 = c^2 \boldsymbol{\epsilon}(z) \partial^2 \mathbf{E} / \partial t^2, \quad (5)$$

где c – скорость света, а также было также принято, что магнитная проницаемость $\mu = 1$, что является хорошим приближением для немагнитных сред. Для плоской волны, распространяющейся вдоль холестерической оси, т.е. вдоль оси Z , поле не зависит от координат x и y и уравнение (5) допускает простое решение.

Мы будем искать решение уравнения (5) для фиксированной частоты волны ω . Как известно (см, например [5]), в пространственно периодической среде простейшее решение уравнений Максвелла не является плоской волной, $\exp[ikz]$ (где k – волновой вектор), как в однородной среде, а является **блоховской волной**, т.е. линейной суперпозицией многих плоских волн (формально бесконечного числа) с отличающимися значениями волновых векторов. Для справедливости надо сказать, что в реальных ситуациях в этой суперпозиции только ограниченное число плоских волн (обычно одна или две) имеют достаточно большие амплитуды, в то время как остальным плоским волнам в этой линейной суперпозиции соответствуют малые амплитуды.

Замечательным свойством решения уравнений Максвелла для холестерика при распространении света вдоль холестерической оси, т.е. решения уравнения (5), является то, что **точное решение этого уравнения представляется блоховской волной, являющейся суперпозицией всего двух плоских волн**. Не останавливаясь здесь на выводе названного свойства решения, отметим только, что оно является следствием специфических поляризационных характеристик рассеяния света в холестерике, определяемых видом тензора (4).

Таким образом, решение уравнения (5) следует искать в виде:

$$\mathbf{E}(z, t) = e^{-i\omega t} [\mathbf{E}^+ \mathbf{n}_+ \exp(i\mathbf{K}^+ z) + \mathbf{E}^- \mathbf{n}_- \exp(i\mathbf{K}^- z)], \quad (6)$$

где векторы круговых поляризаций $\mathbf{n}_{\pm} = (\mathbf{e}_x \pm i\mathbf{e}_y)/\sqrt{2}$, а $\mathbf{e}_x$ и $\mathbf{e}_y$ являются единичными векторами вдоль осей x и y и волновые вектора $\mathbf{K}^{\pm}$ удовлетворяют условию Брэгга:

$$\mathbf{K}^+ - \mathbf{K}^- = \tau. \quad (7)$$

Далее для удобства введем следующие обозначения

$$K^{\pm} = k\eta^{\pm}, \quad k = \omega (\epsilon_0)^{1/2}/c \quad (8)$$

Подставляя (6) с учетом (7), (8) в уравнение (5), получаем систему уравнений для E^+ и E^-

$$[1-(\eta^+)^2] E^+ + \delta E^- = 0, \quad \delta E^+ + [1-(\eta^-)^2] E^- = 0 \quad (9)$$

Условием нетривиального решения системы (9) является равенство нулю ее определителя:

$$[1-(\eta^+)^2][1-(\eta^-)^2] - \delta^2 = 0 \quad (10)$$

Из уравнения (10) с учетом формулы (7) получаем выражения, определяющие $K^{\pm}$ как функции частоты (или k), шага холестерической спирали p и параметра анизотропии δ :

$$K_j^+ / k = \eta_j^+ = (\tau/2 \pm q^{\pm})/k, \quad \eta_j^- = \eta_j^+ - \tau/k, \quad (11)$$

$$q^{\pm} = \kappa \{ 1 + (\tau/2\kappa)^2 \pm [(\tau/\kappa)^2 + \delta^2]^{1/2} \}^{1/2}.$$

Выражение (11) для фиксированного значения частоты ω определяет четыре значения $\eta_j^{\pm}$, т.е., четыре значения волновых векторов $K_j^{\pm}$. Четыре соответствующих решения системы (9) и выражение (7) определяют **собственные волны в холестерике** для направления распространения света вдоль холестерической оси.

Пронумеруем собственные решения (собственные волны) следующим образом: $j=1,4$ для знака “+” и “-” перед $q^{\pm}$ в первом соотношении уравнений (11) и $j=2,3$ для знака “+” и “-” перед $q^{\pm}$ в том же соотношении.

Отношение ξ_j амплитуд двух плоских волн в $j^{\text{ом}}$ собственном решении E^-/E^+ определяется следующим выражением

$$\xi_j = (E^-/E^+)_j = \delta / [(K_j^+ - t)^2 / \kappa^2 - 1] \quad (12)$$

Рисунок 3, представляющий частотную зависимость модуля ξ_j для двух собственных решений с j равными 1 и 2 выявляет существенное различие в частотном поведении соответствующих собственных решений (которые также часто называют **собственными волнами в ХЖК**).

Это различие является следствием сильных дифракционных эффектов для собственной волны, соответствующей $j=2$, и практическому отсутствию дифракционных эффектов для собственной волны, соответствующей $j=1$. В следующем разделе мы рассмотрим свойства собственных волн более детально.

2.3. Свойства собственных волн

Как видно из уравнения (6), собственные решения представляют собой суперпозицию двух циркулярно поляризованных плоских волн. В зависимости от относительного знака K^+ и K^- в (6) это могут быть либо две волны с противоположными круговыми поляризациями, распространяющиеся в одном направлении (в случае одного знака K^+ и K^-), либо две волны с одной и той же круговой поляризацией, распространяющиеся в противоположных направлениях (в случае противоположных знаков K^+ и K^-). Напомним, что изменение знака волнового вектора в выражении, описывающем циркулярно поляризованную волну, эквивалентно одновременному изменению

направления распространения и круговой поляризации волны на противоположную круговую поляризацию.

Из выражений (6), (8) и (12) следует, что решения 1 и 4, содержащие q^+ в (11), соответствуют двум собственным волнам, недифрагирующим на периодической структуре холестерика и распространяющимся вдоль и против оси Z . Каждая из этих собственных волн является суперпозицией двух плоских волн дифрагирующей и недифрагирующей поляризации, распространяющихся в одном направлении, причем преимущественно представлена составляющая с недифрагирующей круговой поляризацией (за исключением коротковолнового предела). Решения 2 и 3, содержащие q^- в (11) отвечают двум собственным волнам, дифрагирующим в холестерике.

Остановимся подробнее на физических характеристиках собственных решений и их зависимости от частоты, считая, как это обычно бывает, что параметр диэлектрической анизотропии холестерика $\delta \ll 1$. В собственной волне 1 для всех частот K^+ и K^- имеют совпадающие знаки, а одна из амплитуд в (6) E^+ (или E^-) – порядка δ по сравнению с другой (рис. 3), за исключением высокочастотного предела $\omega/c \gg \tau/\delta$, в котором амплитуды сравниваются.

Поэтому оказывается, что собственная волна 1 с точностью порядка δ соответствует волне, поляризованной по кругу в направлении, обратном винту холестерической спирали для всех частот за исключением $\omega/c > \tau/\delta$. При $\omega/c \gg \tau/\delta$, т.е., в пределе очень коротких волн по сравнению с шагом холестерикоа, собственная волна 1 соответствует линейно-поляризованной волне, плоскость поляризации которой вращается с периодом p в направлении винта спирали с изменением координаты z . При этом плоскость поляризации света везде параллельна локальной ориентации главной оси тензора диэлектрической проницаемости (4), соответствующей меньшему главному значению ϵ_2 . Волновой вектор собственной моды в этом пределе равен $k(1 - \delta/2)$. Собственная волна 4, как уже отмечалось, совершенно аналогична собственной волне 1, но описывает распространение волны в противоположном направлении.

В собственной волне 2 волновые векторы K^+ и K^- в зависимости от частоты могут быть действительными и иметь противоположные знаки, могут быть комплексными, могут быть действительными и иметь совпадающие знаки. Область комплексных значений K^+ и K^- находится вблизи **брегговской частоты**

$$\omega_B = \tau c / 2(\epsilon_0)^{1/2} \quad (13)$$

в интервале частот $\omega_B/(1+\delta)^{1/2} < \omega < \omega_B/(1-\delta)^{1/2}$, определяющем границы области селективного отражения, соответствующем существованию «**запрещенной зоны**» (**ОСО**) и чисто мнимым q^- , т.е. отсутствию в этом интервале частот распространяющихся в холестерике волн с круговой поляризацией, совпадающей с винтом холестерической спирали. Длина волны света λ , отвечающая брегговской частоте (13), в точности равна шагу холестерической спирали p . Независимо от значения δ , для частот в области запрещенной зоны $|E^+/E^-| = 1$ и, как будет показано ниже, имеет место обусловленное дифракцией селективное отражение света в холестерике.

Вне запрещенной зоны, за исключением высокочастотного предела, одна из амплитуд E^- (или E^+) порядка δ относительно другой и собственная волна 2 с хорошей точностью соответствует волне, поляризованной по кругу в направлении винта холестерической спирали. При $\omega/c \gg \tau/\delta$, т.е., в пределе очень коротких волн по сравнению с шагом холестерика, собственная волна 2 соответствует линейно-поляризованной волне, плоскость поляризации которой, будучи перпендикулярной плоскости поляризации моды 1, вращается с периодом p в направлении винта спирали с

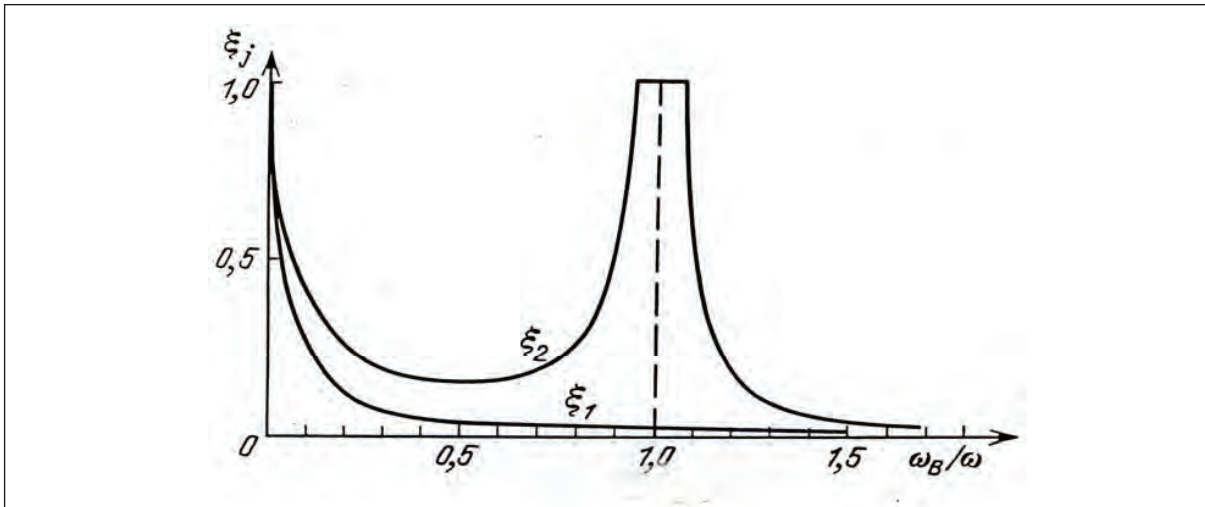


Рис. 3

изменением координаты z . В этом пределе волновой вектор собственной волны 2 равен $k(1 + \delta/2)$. Собственная волна 3 обладает теми же свойствами, что и собственная волна 2, описывая при этом вне запрещенной зоны распространения света в противоположном направлении.

Характер зависимости от частоты $q^\pm (K^\pm)$ в собственных волнах иллюстрирует рис. 4 ($\text{Im}[q^\pm]$, изображенное на рисунке пунктиром, отложено на оси ординат справа). Из этого рисунка, в частности, видно, что закон дисперсии $K(\omega)$ в собственных волнах 1 и 4 близок к закону дисперсии для волны, распространяющейся в однородной среде. Закон же дисперсии $K(\omega)$ в собственных волнах 2 и 3 имеет дифракционный вид с запрещенной для распространения света зоной.

В заключение этого раздела отметим еще раз интересные особенности распространения света в холестерике. При распространении света вдоль оси холестерика селективное дифракционное отражение испытывает только свет с круговой поляризацией (левой или правой), в зависимости от того какова (левая или правая) холестерическая спираль. При этом существенно, что реализуется дифракционное отражение только в первом порядке и строго отсутствуют все высшие порядки дифракционного отражения (в формуле (2) $s=1$). Отсутствие дифракционных рефлексов высших порядков иллюстрируют дисперсионные кривые, представленные на рис.4, демонстрирующем только одну запрещенную зону для собственных волн 2 и 3 при отсутствии вовсе дифракционных рефлексов для собственных волн 1 и 4. Поведение собственных волн в коротковолновом пределе ($\omega/c \gg \tau/\delta$), т.е., для длин волн малых по сравнению с холестерическим шагом, состоящее во вращении собственных линейных поляризаций как функции координаты z вдоль холестерической оси вокруг этой оси, повторяющем вращение директора, известно как **предел Могена** [4].

3. Граничная задача

Описание экспериментально наблюдаемых оптических характеристик спиральных периодических сред требует не только знания собственных волн для этой среды, но и решения уравнений Максвелла, удовлетворяющего определенным граничным условиям, т.е. решения граничной задачи. Решение граничной задачи для спиральных периодических сред продемонстрировано ниже на примере ХЖК с использованием найденных выше собственных волн ХЖК.

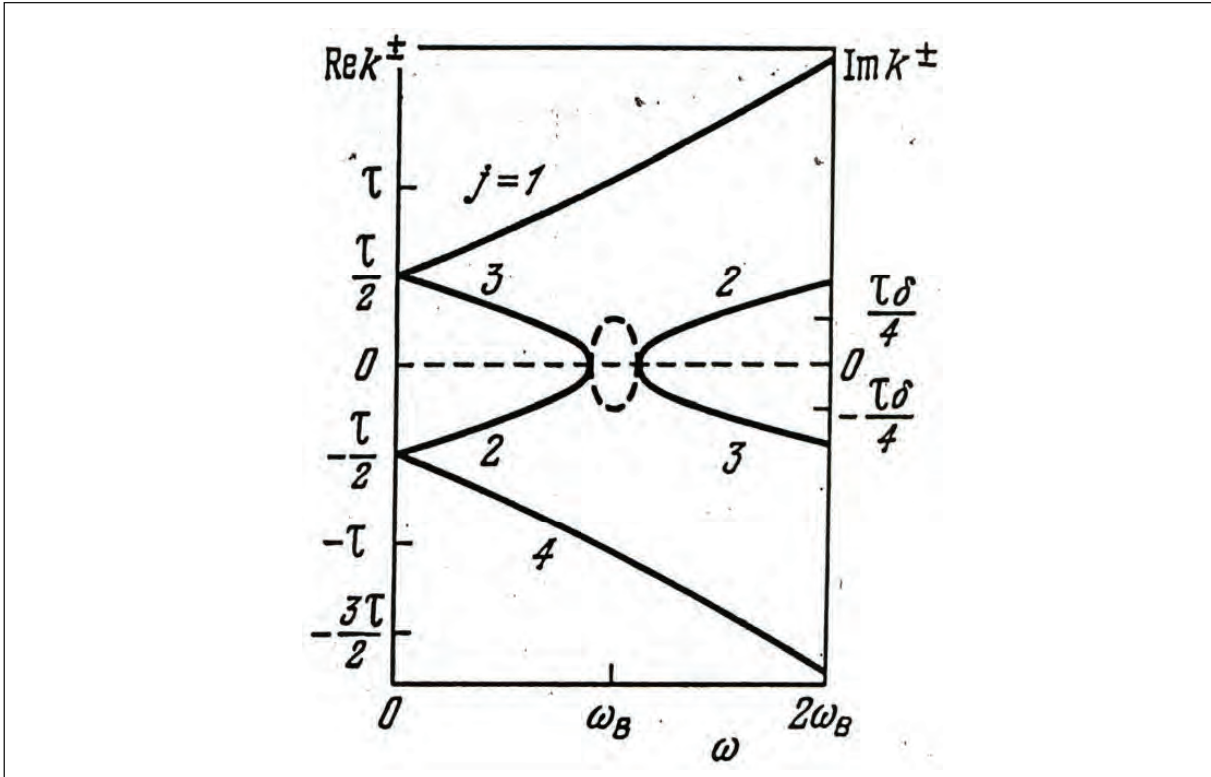


Рис. 4

3.1. Планарная холестерическая текстура

Используя найденные выше собственные волны, приступим к решению задачи об отражении и прохождении света в случае холестерического образца конечных размеров. Будем считать, что образец представляет собой плоскопараллельную пластину толщиной L и пучок света падает по нормали к поверхности. Другими словами, рассмотрим оптические свойства идеальной планарной текстуры при нормальном падении света (см. рис. 5).

Для того, чтобы найти амплитуды волн, отраженной от слоя холестерика и прошедшей через него, надо найти, какие из собственных решений системы (9), т.е. собственных волн, и с каким весом возбуждаются в образце падающей на него волной. Это делается с помощью граничных условий, задаваемых на обеих поверхностях образца. В рассматриваемом случае нормального падения света, так как в холестерике волна, распространяющаяся вдоль холестерической оси строго поперечна, граничные условия, состоящие в непрерывности на границе тангенциальных составляющих электрического $\mathbf{E}$ и магнитного $\mathbf{H} = (ic/\omega)\text{rote } \mathbf{E}$ полей, принимают вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_e(0) + \mathbf{E}_r(0) &= \mathbf{E}(0), \quad \mathbf{E}_t(L) = \mathbf{E}(L) \\ \text{rot}[\mathbf{E}_e(z) + \mathbf{E}_r(z)]_{z=0} &= \text{rot}[\mathbf{E}(z)]_{z=0} \\ \text{rot}[\mathbf{E}(z)]_{z=L} &= \text{rot}[\mathbf{E}_t(z)]_{z=L}. \end{aligned} \quad (14)$$

Электрические поля падающей $\mathbf{E}_e$, отраженной $\mathbf{E}_r$, прошедшей $\mathbf{E}_t(L)$ и волны $\mathbf{E}$ в образце представим в виде

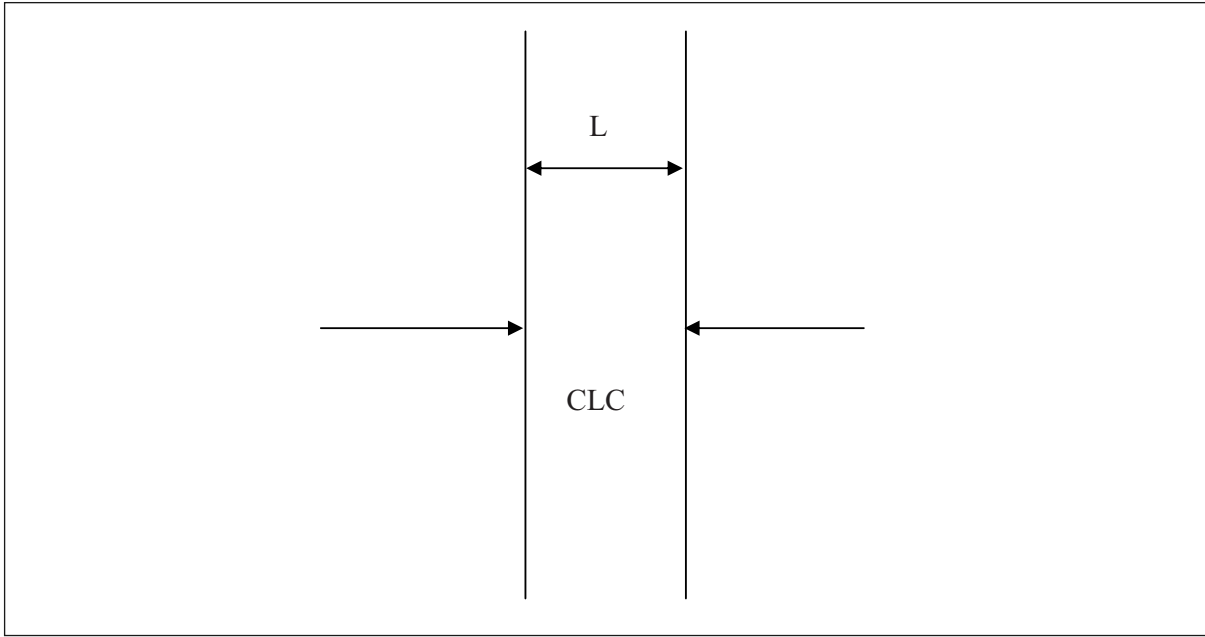


Рис. 5

$$\begin{aligned}
 \mathbf{E}_e &= \text{Exp}[i(k_e z - \omega t)] (\mathbf{E}_e^+ \mathbf{n}_+ + \mathbf{E}_e^- \mathbf{n}_-), \\
 \mathbf{E}_r &= \text{Exp}[-i(k_e z + \omega t)] (\mathbf{E}_e^+ \mathbf{n}_+ + \mathbf{E}_r^- \mathbf{n}_-), \\
 \mathbf{E}_t &= \text{Exp}[i(k_e z - \omega t)] (\mathbf{E}_t^+ \mathbf{n}_+ + \mathbf{E}_{et}^- \mathbf{n}_-), \\
 \mathbf{E} &= \text{Exp}[-i\omega t] \sum (\mathbf{E}_e^+ \mathbf{n}_+ + \mathbf{E}_e^- \mathbf{n}_-),
 \end{aligned} \tag{15}$$

где у $\mathbf{n}_\pm$ – векторы круговых поляризаций и k_e – волновой вектор света вне образца. Здесь же напомним, что если для волны, распространяющейся в положительном направлении оси Z, (в частности для падающей волны) $\mathbf{n}_+$ и $\mathbf{n}_-$ описывают правую и левую круговую поляризацию, соответственно, то для отраженной волны, распространяющейся в противоположном направлении, $\mathbf{n}_+$ и $\mathbf{n}_-$ описывают левую и правую поляризации, соответственно. Это нашло свое отражение в формуле для $\mathbf{E}_t^+$ в (15).

Подставляя (15) в (14), приравнявая затем нулю по отдельности множители перед $\mathbf{n}_+$ и $\mathbf{n}_-$ и проведя затем несложные преобразования, найдем, что амплитуды отраженной и прошедшей через образец волн выражаются через амплитуды возбуждаемых в образце собственных волн $\mathbf{E}_j^+$ следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{E}_r^+ &= (1/2) \sum \xi_j (1 - K_j^- / k_e) \mathbf{E}_j^+, \\
 \mathbf{E}_t^+ &= (1/2) \sum \exp[i(K_j^+ - k_e)L] (1 + K_j^+ / k_e) \mathbf{E}_j^+, \\
 \mathbf{E}_r^- &= (1/2) \sum (1 - K_j^+ / k_e) \mathbf{E}_j^+, \\
 \mathbf{E}_t^- &= (1/2) \sum \xi_j \exp[i(K_j^- - k_e)L] (1 + K_j^- / k_e) \mathbf{E}_j^+,
 \end{aligned} \tag{16}$$

где суммирование ведется по всем четырем значениям j .

Амплитуды же собственных волн $\mathbf{E}_j^+$ определяются следующей системой уравнений:

$$\begin{aligned}
(1/2) \sum (1 + K_j^+ / \kappa_e) E_j^+ &= E_e^+, \\
\sum \exp[iK_j^+ L] (1 - K_j^+ / \kappa_e) E_j^+ &= 0, \\
(1/2) \sum \xi_j (1 + K_j^- / \kappa_e) E_j^+ &= E_e^-, \\
\sum \xi_j \exp[iK_j^- L] (1 - K_j^- / \kappa_e) E_j^+ &= 0.
\end{aligned} \tag{17}$$

Таким образом, задача о прохождении и отражении света для случая нормального падения пучка на планарную холестерическую текстуру сводится к решению неоднородной системы четырех линейных уравнений [5, 6]. Ее решение в совокупности с выражениями (11) и (12) для параметров $K_j^\pm$ и ξ_j в собственных волнах дает в общем случае точное описание оптических характеристик планарного слоя. В частности, оно описывает их зависимость от частоты, поляризации света и диэлектрических свойств среды, граничащей с холестериком.

Ниже мы для простоты ограничимся подробным рассмотрением задачи для случая совпадения диэлектрической проницаемости среды вне холестерика со средней диэлектрической проницаемостью холестерика ϵ_0 .

3.2. Планарный слой без френелевского отражения на границах

Таким образом, мы будем рассматривать оптические свойства слоя холестерика произвольной толщины L при нормальном падении светового пучка (см. рис. 5, схематически поясняющий геометрию оптической задачи), предполагая, что отсутствует отражение света на диэлектрических границах между холестериком и внешней средой (или, как говорят, в отсутствии френелевского отражения на границах), т.е. случай совпадения диэлектрической проницаемости среды вне холестерика со средней диэлектрической проницаемостью холестерика.

Мы изучим поляризационную и частотную зависимость отражения и прохождения света, предполагая малой диэлектрическую анизотропию холестерика δ , что позволяет пренебречь отражением света на границах холестерика. В сделанных предположениях падающая на холестерический слой световая волна возбуждает в холестерике только три собственные волны: две собственные волны, соответствующие дифрагирующей в холестерике поляризации, и одну собственную волну распространяющуюся в направлении падения светового пучка и соответствующую недифрагирующей поляризации.

Предположение об отсутствии отражения света на границах позволяет дальнейшее упрощение задачи, а именно, редуцирует системы (16), (17) четырех уравнений к системам двух линейных уравнений. Это происходит по той причине, что в системах (16), (17) реализуется разделение поляризаций и падающая на холестерический слой волна с дифрагирующей круговой поляризацией возбуждает в слое только собственные волны дифрагирующей поляризации, т.е. собственные волны 2 and 3, в то время как волна с недифрагирующей поляризацией возбуждает только собственную волну 1. Это означает, что амплитуда и фаза собственной волны 1 на поверхности холестерического слоя определяется E_e^- , т.е., эта величина оказывается совпадающей с соответствующей величиной на поверхности холестерического слоя для недифрагирующей составляющей падающей световой волны.

Далее, учитывая принятое приближение, т.е. пренебрежение отражением на границе, которое вносит ошибку порядка δ , получим из (17) уравнения для амплитуд дифрагирующих собственных волн E_2 и E_3 :

$$E_2^+ + E_3^+ = E_e^+, \quad \xi_2 \exp[iK_2^- L] E_2^+ + \xi_3 \exp[iK_3^- L] E_3^+ = 0. \quad (18)$$

Из выражений (16) находим соотношения, связывающие амплитуды отраженной и прошедшей волн дифрагирующей круговой поляризации с амплитудами собственных волн дифрагирующей поляризации:

$$E_r^+ = \sum \xi_j E_j^+, \quad E_t^+ = \sum \exp[iK_j^+ L] E_j^+, \quad (19)$$

где в сумме j принимает только два значения 2 и 3.

Из (18) и (19) мы получаем следующие выражения для амплитуд отраженной и прошедшей волн дифрагирующей поляризации (т.е. амплитудный коэффициент отражения и прохождения, если положить $E_e^+ = 1$):

$$\begin{aligned} E_r^+ &= i E_e^+ \delta \sin qL / \{ (q\tau/\kappa^2) \cos qL + i[(\tau/2\kappa)^2 + (q/\kappa)^2 - 1] \sin qL \} \\ E_t^+ &= E_e^+ \exp[i\tau L/2] (q\tau/\kappa^2) / \{ (q\tau/\kappa^2) \cos qL + i[(\tau/2\kappa)^2 + (q/\kappa)^2 - 1] \sin qL \}, \end{aligned} \quad (20)$$

где $q = \kappa \{ 1 + (\tau/2\kappa)^2 - [(\tau/\kappa)^2 + \delta^2]^{1/2} \}^{1/2}$ (см. (11)).

Для коэффициентов отражения R^+ и прохождения T^+ по интенсивности для света дифрагирующей круговой поляризации из (20) получаем:

$$\begin{aligned} R^+ &= \delta^2 |\sin qL|^2 / \{ (q\tau/\kappa^2) \cos qL + i[(\tau/2\kappa)^2 + (q/\kappa)^2 - 1] \sin qL \}^2 \\ T^+ &= |\exp[i\tau L/2] (q\tau/\kappa^2)|^2 / \{ (q\tau/\kappa^2) \cos qL + i[(\tau/2\kappa)^2 + (q/\kappa)^2 - 1] \sin qL \}^2. \end{aligned} \quad (21)$$

Волна недифрагирующей круговой поляризации в принятом приближении отражения не испытывает ($R^- = 0$), а полностью проходит через холестерический слой ($T^- = 1$).

На эксперименте часто измеряется разница коэффициентов пропускания круговых поляризаций, т.е., так называемая величина **кругового дихроизма** $D = (T^- - T^+) / (T^- + T^+)$, которая для рассматриваемых непоглощающих холестериков в принятом приближении следующим образом выражается через T^+ или R^+ :

$$D = (1 - T^+) / (1 + T^+) = R^+ / (2 - R^+) \quad (22)$$

Рассмотрим, как оптические свойства холестерического слоя зависят от его параметров – толщины слоя L , величины анизотропии диэлектрической проницаемости δ , значения шага холестерической спирали, величины поглощения или усиления в холестерике.

3.3. Непоглощающие холестерики

Рассмотрим сначала оптические свойства холестерического слоя в отсутствии поглощения. Поскольку в этом случае для любой поляризации падающего на холестерический слой света выполняется соотношение $T+R=1$, где R и T – коэффициенты отражения и пропускания холестерического слоя (по интенсивности), то в отсутствии поглощения вся оптическая информация содержится в коэффициенте отражения и мы ограничимся изучением зависимости только R от параметров задачи. На рис.6 приведена частотная зависимость R для различных толщин слоя L , рассчитанная по

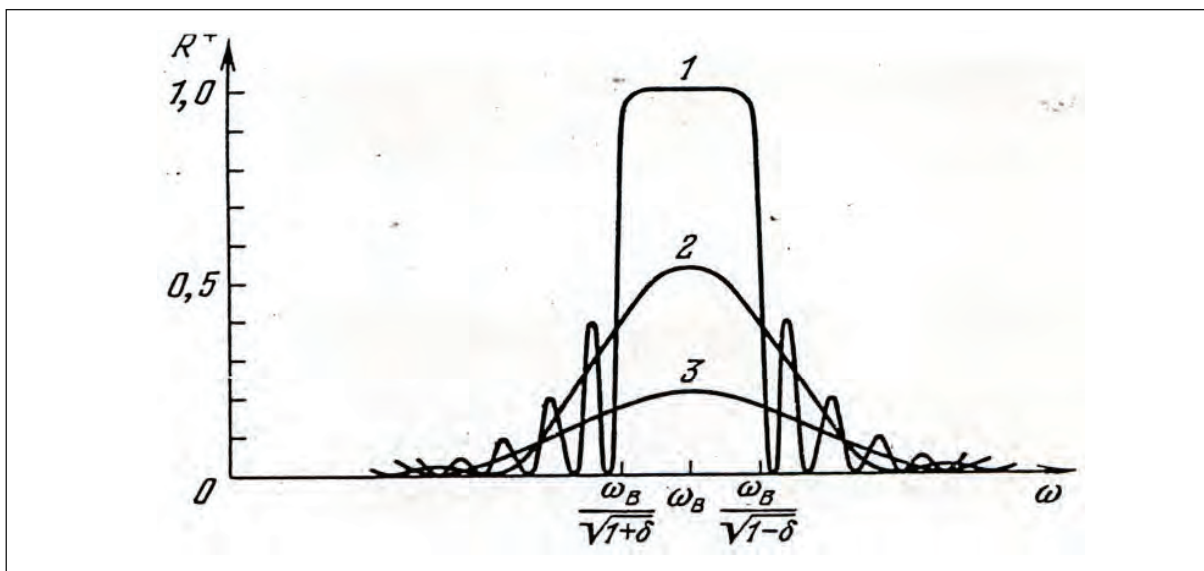


Рис. 6

формуле (21) для света дифрагирующей круговой поляризации (кривые 1,2,3, соответственно, для толстого, промежуточной толщины и тонкого холестерического слоя). Приведенные кривые демонстрируют, что вид частотной зависимости коэффициента отражения R определяется значением параметра $\delta L/p$. Случай $\delta L/p < 1$ соответствует дифракционно тонкому слою и малому R , случай $\delta L/p \approx 1$ соответствует умеренно толстому слою и появлению биений в отражении вне области селективного отражения при R сравнимом с 1 внутри области селективного отражения, случай $\delta L/p > 1$ соответствует дифракционно толстому слою с резко выраженными биениями отражения вне области селективного отражения при R практически равном 1 внутри области селективного отражения. Отметим, что в минимумах биения отражения для рассматриваемого нами случая отсутствия поглощения в холестерике R строго обращается в ноль.

3.4. Поглощающие холестерики

Рассмотрим теперь оптические свойства холестерического слоя при наличии поглощения. Для этого в уравнениях Максвелла (5) следует использовать тензор диэлектрической проницаемости вида (4), компоненты которого являются комплексными числами. При этом в общем случае тензор будет соответствовать наличию анизотропии в поглощении света. Мы ниже для упрощения задачи будем считать, что поглощение в холестерике изотропно. Изотропное поглощение описывается добавкой мнимой составляющей к усредненной диэлектрической проницаемости ε_0 в выражении (4) для тензора диэлектрической проницаемости. Поэтому будем ниже считать, что усредненная диэлектрическая проницаемость ε теперь задается формулой $\varepsilon = \varepsilon_0(1 + i\gamma)$, где γ – малый положительный параметр (что подтверждается фактически реализуемой величиной поглощения в оптическом диапазоне). В этом случае использованное выше соотношение $T+R=1$ не справедливо, а выполняется неравенство $T+R < 1$, поскольку часть излучения поглощается в слое холестерика.

При малых γ частотная зависимость коэффициентов отражения и прохождения остается качественно такой же, как и в случае отсутствия поглощения. Отметим, однако, что при наличии поглощения в холестерике в минимумах биения отражения коэффициент отражения R теперь не обращается в ноль.

Качественно новая особенность по сравнению с соответствующим однородным слоем выявляется в частотной зависимости поглощения в слое (особенно при очень малых γ). Поглощение, а именно величина $1 - T - R$, оказывается функцией частоты и достигает максимума на частотах, соответствующих минимумам R . Причем максимум поглощения для каждого минимума R достигается при вполне определенном значении γ (см. рис. 7 а,б, на котором частота отсчитывается от края ОСО и обезразмерена брегговской частотой, т.е. в качестве безразмерной частоты отложена величина $\nu = \delta[2(\omega - \omega_B)/(\delta \omega_B) - 1]$, толщина слоя выражена в числе шагов холестерической спирали $N = L/p = 25$, $\delta = 0,05$ и $\gamma = 0.001$ на рис. а; $\gamma = 0.005$ на рис. б).

Значения γ , обеспечивающие максимум поглощения, определяются условием

$$\partial(1 - T - R)/\partial\gamma = 0, \quad (23)$$

приводящем к трансцендентному уравнению на γ .

Для толстых холестерических слоев и слабого поглощения, такого, что $\text{Im}[q]L \ll 1$, значения γ , соответствующие максимумам поглощения, находятся аналитически путем разложения (23) по малому параметру $\text{Im}[q]L$ и даются следующим выражением:

$$\gamma = \delta(n\pi)^2/(\delta L\tau/4)^3. \quad (24)$$

Сами же коэффициенты отражения и прохождения для соответствующих частот как функция γ принимают значения

$$R = ((\delta L\tau/4)^3\gamma)^2/[(n\pi)^2 + (\delta L\tau/4)^3\gamma]^2, \quad T = (n\pi)^4/[(n\pi)^2 + (\delta L\tau/4)^3\gamma]^2, \quad (25)$$

где n нумерует минимумы R ($n=1$ соответствует минимуму, ближайшему к границе ОСО, рис. 6).

При выполнении соотношения (25) коэффициенты отражения и прохождения в минимумах R принимают значения $R=1/4$, $T=1/4$ и $1-R-T=1/2$. В связи с принятой малостью γ этот результат означает сильное возрастание поглощения для слабо поглощающих холестерических слоев на частотах минимумов R , если выполняется условие (24). Из соотношений (24, 25) следует, что наиболее сильным возрастанием поглощения оказывается для $n=1$, т.е. на частоте первого минимума в частотных биениях коэффициента отражения R . Условие (24) означает, что для достижения максимального поглощения в слое требуется выполнение специального соотношения между параметрами холестерика и толщиной слоя L .

3.5. Усиливающие ХЖК

Рассмотрим теперь оптические свойства усиливающего (на некоторой частоте света) холестерического слоя. Такая ситуация, например, реализуется в лазерах, где за счет инверсии заселенностей для верхнего состояния лазерного перехода в рабочей среде лазера свет соответствующей частоты испытывает усиление при распространении в этой среде.

Для упрощения задачи так же как для случая поглощения будем считать, что усиление в холестерике изотропно. Теперь ϵ_0 в выражении (4) для тензора диэлектрической проницаемости следует заменить на $\epsilon = \epsilon_0(1 + i\gamma)$, где γ – малый отрицательный параметр. В этом случае выполняется неравенство $T+R>1$, поскольку излучения в слое холестерика усиливается.

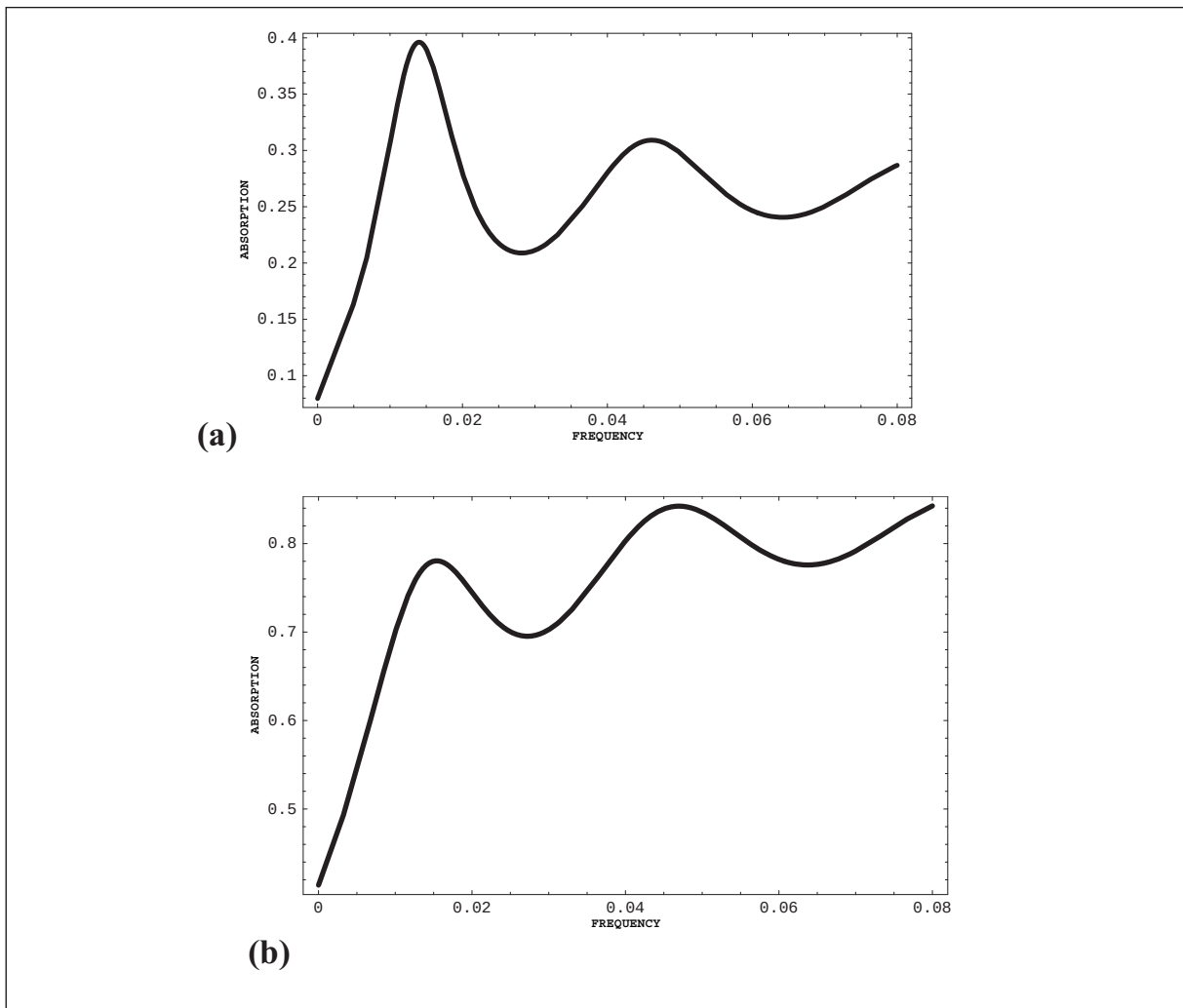


Рис. 7

При малых $|\gamma|$ частотная зависимость коэффициентов отражения и прохождения остается качественно такой же, как и в случае отсутствия усиления, а превышение $T+R$ единицы является малым. Однако по мере возрастания $|\gamma|$ $T+R$ возрастает и становится существенно больше единицы, а по достижении некоторого критического значения $|\gamma|$ ситуация коренным образом меняется: каждый из коэффициентов T и R оказывается расходящимся на частоте первого минимума в частотных биениях R (для $n=1$), что означает достижение порога лазерной генерации.

Здесь кратко напомним принцип устройства **лазера с распределенной обратной связью (РОС-лазера)**. В фотонных кристаллах любого вида возможна реализация РОС-лазера, который в отличие от традиционной схемы лазера [9] не требует использования зеркал в качестве элементов резонаторной системы. В таком РОС лазере роль зеркал, используемых в традиционном лазере, играет дифракция (брегговское отражение) на периодической структуре [5, 6]. Краситель, необходимый для обеспечения требуемых для осуществления **накачки и лазерной генерации** переходов, как правило, вводится (растворяется) непосредственно в материале фотонного кристалла, волна накачки направляется на фотонный кристалл по направлению близкому либо к направлению периодичности, либо перпендикулярному этому направлению. Поскольку в фотонном кристалле сильное дифракционное отражение осуществляется для длины волны света вблизи удвоенного периода фотонного кристалла (для

определенности речь идет об одномерном фотонном кристалле и распространении света вдоль направления периодичности), длина волны лазерной генерации в РОС лазере оказывается почти совпадающей с величиной удвоенного периода фотонного кристалла. Порог лазерной генерации в РОС лазере определяется мощностью накачки, которая обеспечивает инверсию заселенности уровней лазерного перехода, достаточную для начала индуцированного излучения (лазерной генерации, т.е. расходимости коэффициентов пропускания и отражения) в обсуждаемой структуре. Направление индуцированного излучения в РОС лазере совпадает с направлением периодичности, а генерируемое лазерное излучение испускается в обе стороны вдоль этого направления.

Рис. 8, представляющий частотную зависимость коэффициента отражения, иллюстрирует эту расходимость. На рис. 8а $\gamma = 0,00565$. При дальнейшем увеличении $|\gamma|$ расходимость T и R исчезает, а затем вновь появляется по достижении некоторого нового критического значения $|\gamma|$ (см. рис. 8б, $\gamma = 0,0129$ на частоте второго минимума в биениях R (для $n=2$). На рис. 8 толщина слоя принята той же, что для рис. 7, частота на рис. 8 и всех последующих рисунках измеряется в тех же единицах, что на рис. 7, а также везде в расчетах диэлектрическая анизотропия $\delta = 0,05$.

Итак, с увеличением $|\gamma|$ проявляются другие критические значения $|\gamma|$ в виде расходимостей T+R на частотах других минимумов в биениях R. Соответствующие значения $|\gamma|$ определяют пороги лазерной генерации для лазеров с распределенной обратной связью (РОС) на частотах минимумов в биениях R, причем, чем больше n , тем выше оказывается соответствующий порог, а минимальным значение порога лазерной генерации оказывается при $n=1$. Трансцендентное уравнение, определяющее пороговые значения γ , следует из выражения для T и R (21), имеет вид

$$\operatorname{tg} qL = i(q\tau/\kappa^2)/[(\tau/2\kappa)^2 + (q/\kappa)^2 - 1] \quad (26)$$

и может быть решено численными методами.

Для толстых холестерических слоев при выполнении условия $|\operatorname{Im} q L| \ll 1$ значения γ , соответствующие порогам генерации, находятся аналитически и даются следующим выражением:

$$\gamma = -\delta(n\pi)^2/(\delta L\tau/4)^3. \quad (27)$$

Уравнение (27) показывает, что для толстых холестерических слоев порог лазерной генерации обратно пропорционален кубу толщины слоя и растет как квадрат n , номера минимума в биениях R. Таким образом, наименьшим порогом лазерной генерации оказывается порог генерации на частоте первого минимума в биениях R причем этот порог оказывается ниже, чем порог генерации в соответствующем непериодическом слое для традиционной схемы лазера с зеркалами. Для реализации минимумов порога лазерной генерации в слое, как следует из (27), требуется выполнение специального соотношения между параметрами холестерика в активном слое и толщиной этого слоя L.

4. Локализованные моды в фотонных кристаллах

В физике волновых процессов уже давно известно, что собственные состояния волновых полей для конкретных структур могут приводить к весьма интересным, а часто и полезным явлениям. Так в акустике хорошо известно явление «шепчущей галереи». Оно состоит в том, что, например, для определенной конфигурации колонн в храме даже шепотом произнесенное слово оказывается прекрасно слышимым в

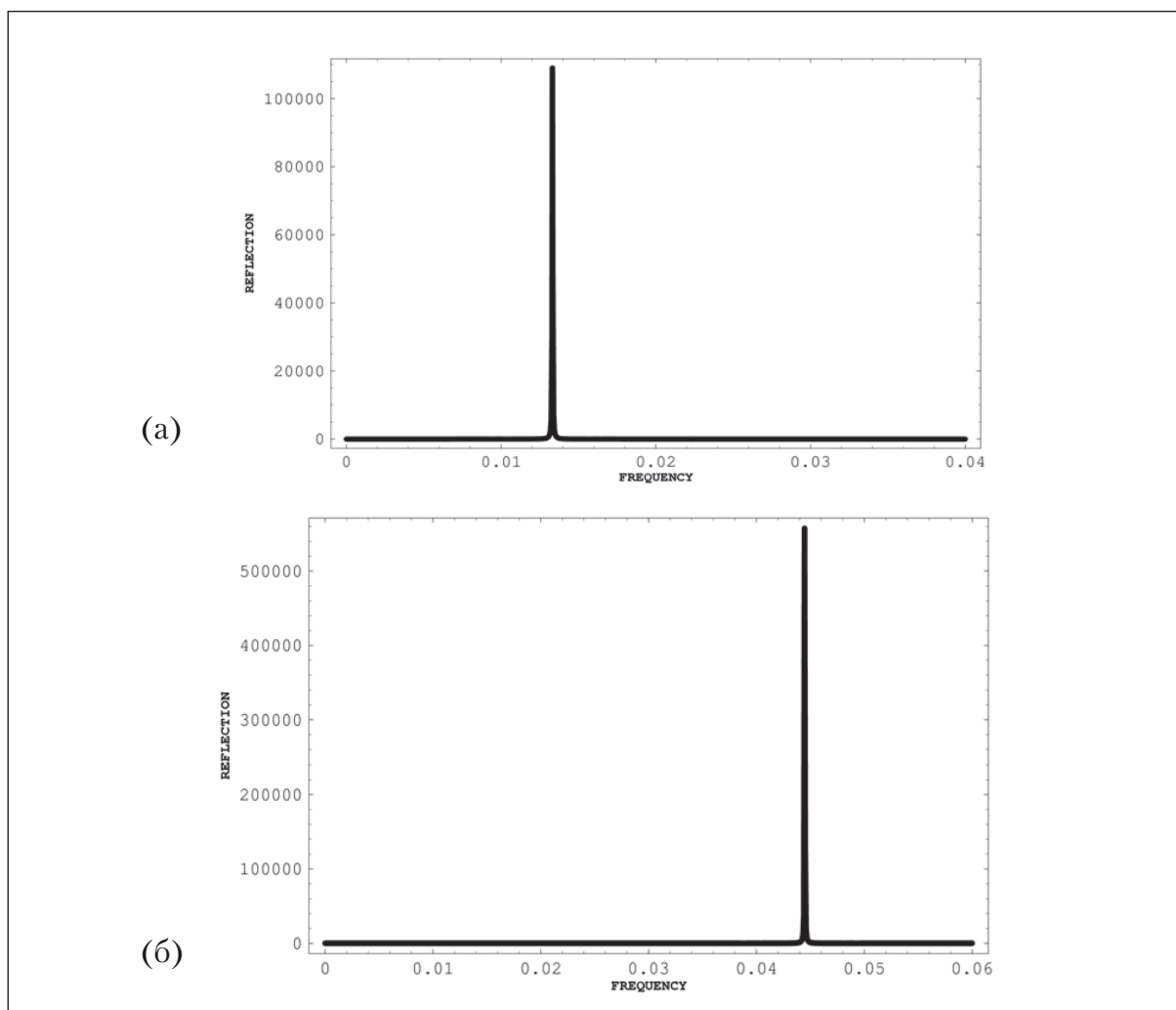


Рис. 8

некоторой зоне помещения или архитектурного ансамбля (как правило, по его периметру), в то время как в других местах слышимость практически нулевая. Эффект «шепчущей галереи» объясняется тем, что в сооружении существуют, так называемые «собственные моды», т.е. локализованные решения волнового уравнения для конкретной конфигурации сооружения, которым соответствует резко неоднородное в пространстве распределение волновой (в нашем примере акустической) энергии. Пребывание человека в соответствующей зоне повышенной плотности волновой энергии и обеспечивает реализацию эффекта «шепчущей галереи». Разумеется, для реализации эффекта требуется специальная геометрия сооружения, которую умели создавать уже архитекторы древности. Конечно, локализованные акустические моды не ограничиваются только «шепчущей галереей» – существуют и другие их виды.

В связи с общностью свойств волновых явлений, т.е. независимости их общих свойств от конкретной природы волнового явления, естественно ожидать, что локализованные собственные решения граничных задач (локализованные моды) существуют не только для акустических, но и для других типов волн, в частности электромагнитных. В последнее время выяснилось, что электромагнитные локализованные моды весьма ярко проявляются в оптике фотонных кристаллов. Ниже на примере ХЖК будут рассмотрены два типа локализованных мод в фотонных кристаллах [10, 11].

4.3.1. Краевые моды

Существующее в поглощающем слое аномально сильное поглощение и в усиливающем слое расходимости коэффициентов отражения и пропускания на дисретных частотах является следствием того, что эти частоты соответствуют собственным модам рассматриваемой структуры, т.е. холестерического слоя. Проверим это утверждение, не ограничиваясь только расчетом коэффициентов отражения и пропускания слоя (рис. 6), а рассчитаем частотную зависимость амплитуд собственных мод холестерика, возбуждаемых в слое (считая, что амплитуда падающей на слой волны постоянна). Соответствующие зависимости представлены на рис. 9 для числа витков на толщине ХЖК слоя $N=350$.

Как видно из рис. 8 амплитуды собственных волн в слое на частотах, соответствующих нулю коэффициента отражения R , резко возрастают, причем это возрастание тем сильнее, чем больше толщина слоя L . Таким образом можно думать, что частоты минимумов R совпадают с частотами собственных мод холестерического слоя. Чтобы окончательно убедиться в этом следует решить уравнение, определяющее собственные моды. Таким уравнением оказывается уравнение, получаемое из (18), если в нем положить равной нулю амплитуду волны, падающей на холестерический слой, т.е. однородная система уравнений, соответствующая неоднородной системе (18).

Условием разрешимости однородной системы является зануление ее детерминанта, которое оказывается в точности совпадающим с выражением (26). Однако теперь для нахождения частот собственных мод выражение (26) следует решить относительно частоты. В общем случае выражение (26) удовлетворяется только для комплексных значений частоты, поэтому частоту собственной моды (которая получила название краевой моды) ω_{EM} представим в виде $\omega_{EM} = \omega_{EM}^0(1+i\Delta)$, где ω_{EM}^0 и Δ действительные величины (в реальных ситуациях Δ является малой величиной).

Комплексность ω_{EM} означает, что краевая мода оказывается затухающей, а время ее жизни τ_μ определяется мнимой составляющей частоты ω_{EM} .

$$\tau_\mu = 1/\text{Im}(\omega_{EM}) . \quad (28)$$

Для толстых слоев и таких малых Δ что удовлетворяется условие $L\text{Im}q \ll 1$ может быть найдено аналитическое решение уравнения (26). В этом случае величина ω_{EM}^0 совпадает с частотой минимума коэффициента отражения R для непоглощающего холестерического слоя, т.е. определяется условием $qL = n\pi$, а Δ дается выражением

$$\Delta = -\frac{1}{2}\delta(n\pi)^2/(\delta L\tau/4)^3, \quad (29)$$

где n – целое число, задающее номер краевой моды (порядковый номер минимума коэффициента отражения R), возрастающий с удалением частоты от границы ОСО (с $n=1$, соответствующим ближайшему к ОСО частотному минимуму коэффициента отражения R). В пределе толстых слоев, как следует из (29) время жизни краевой моды пропорционально третьей степени толщины слоя, обратно пропорционально квадрату номера моды и определяется согласно (28) выражением:

$$\tau_\mu = (L/c)(\delta L/pn)^2. \quad (30)$$

Найдя решение однородного уравнения, следующего из (18), легко получить распределение по координате поля краевой моды в слое:

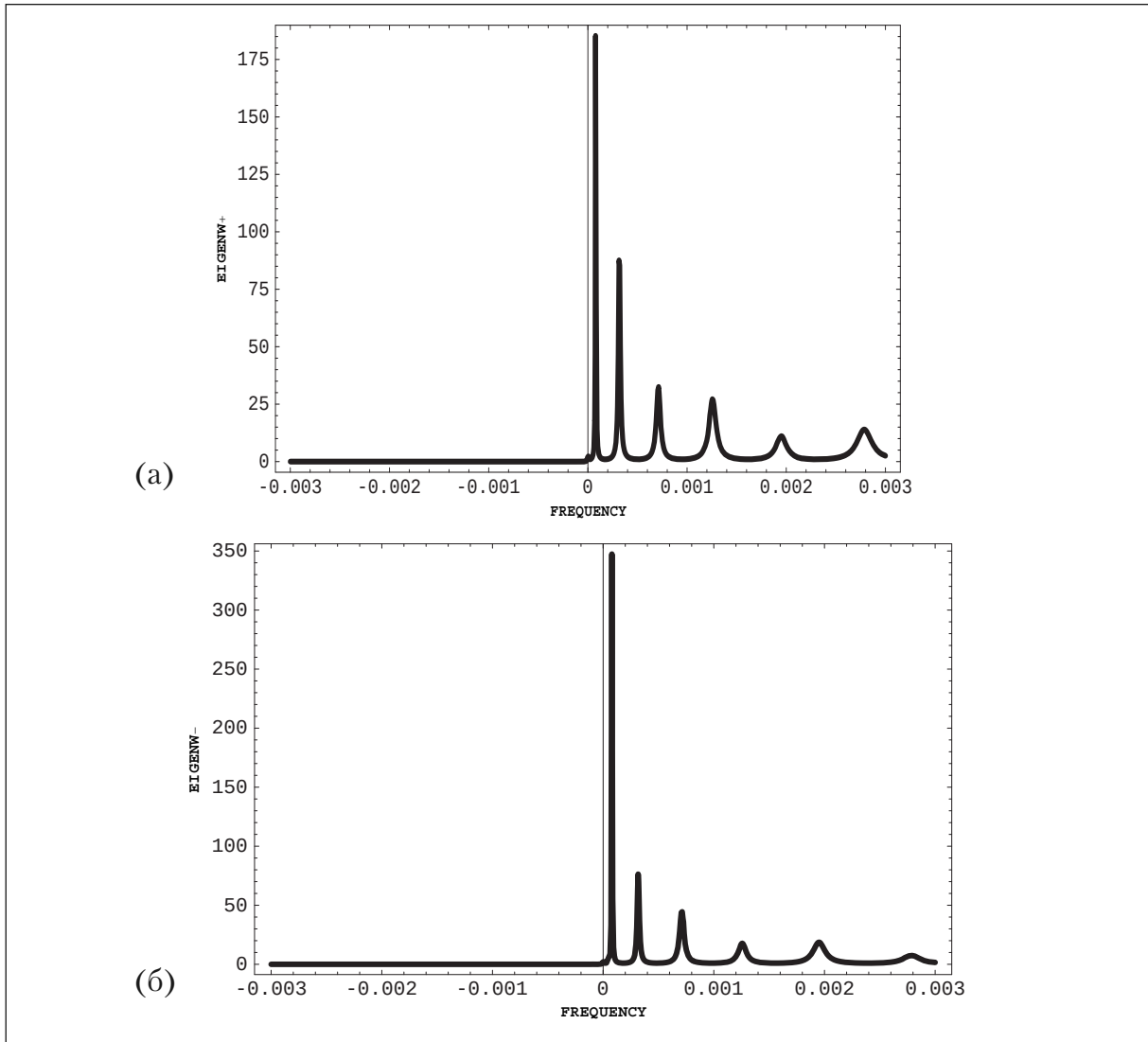


Рис. 9

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\omega_{EM}, z, t) = i \exp(-i\omega_{EM}t) \{ \mathbf{n}_+ \exp(i\tau z/2) \sin qz - \mathbf{n}_- \exp(-i\tau z/2) \{ [(\tau/\kappa)^2 + \delta^2]^{1/2} \sin qz \\ + i\tau q / (\delta \kappa)^2 \cos qz \} \}, \end{aligned} \quad (31)$$

где q определено в (11,20). Для обсуждавшегося выше случая толстых слоев из аналитического решения дисперсионного уравнения для краевой моды следует, что в (31) надо положить $q = \pi/L$ (условие, обеспечивающее $R^+ = 0$, см.(20)).

Выражение (31) приводит к следующему координатному распределению плотности энергии краевой моды в пределах холестерического слоя [12], вычисленному для числа витков на толщине ХЖК слоя $N=350$ (см. рис. 9, по оси абсцисс отложено τz) для трех первых краевых мод ($n=1,2,3$). Как видно из рисунка, плотность энергии краевой моды внутри слоя испытывает осцилляции, причем число максимумов в этих осцилляциях совпадает с номером краевой моды n . Поскольку собственные волны, комбинация которых создает поле краевой моды в слое, являются суперпозициями двух плоских волн (см. (6)), то можно легко вычислить поток энергии в слое вблизи его поверхности, направленный внутрь слоя и наружу (рис. 10, $N=16,5$). Оказывается, что точно на границе слоя поток энергии, направленный внутрь слоя (жирная линия) точно равен нулю, что же касается потока на границе, направленного наружу (тонкая линия), он оказывается хотя и малым (тем меньше, чем больше толщина слоя), но не нулевым. Вот

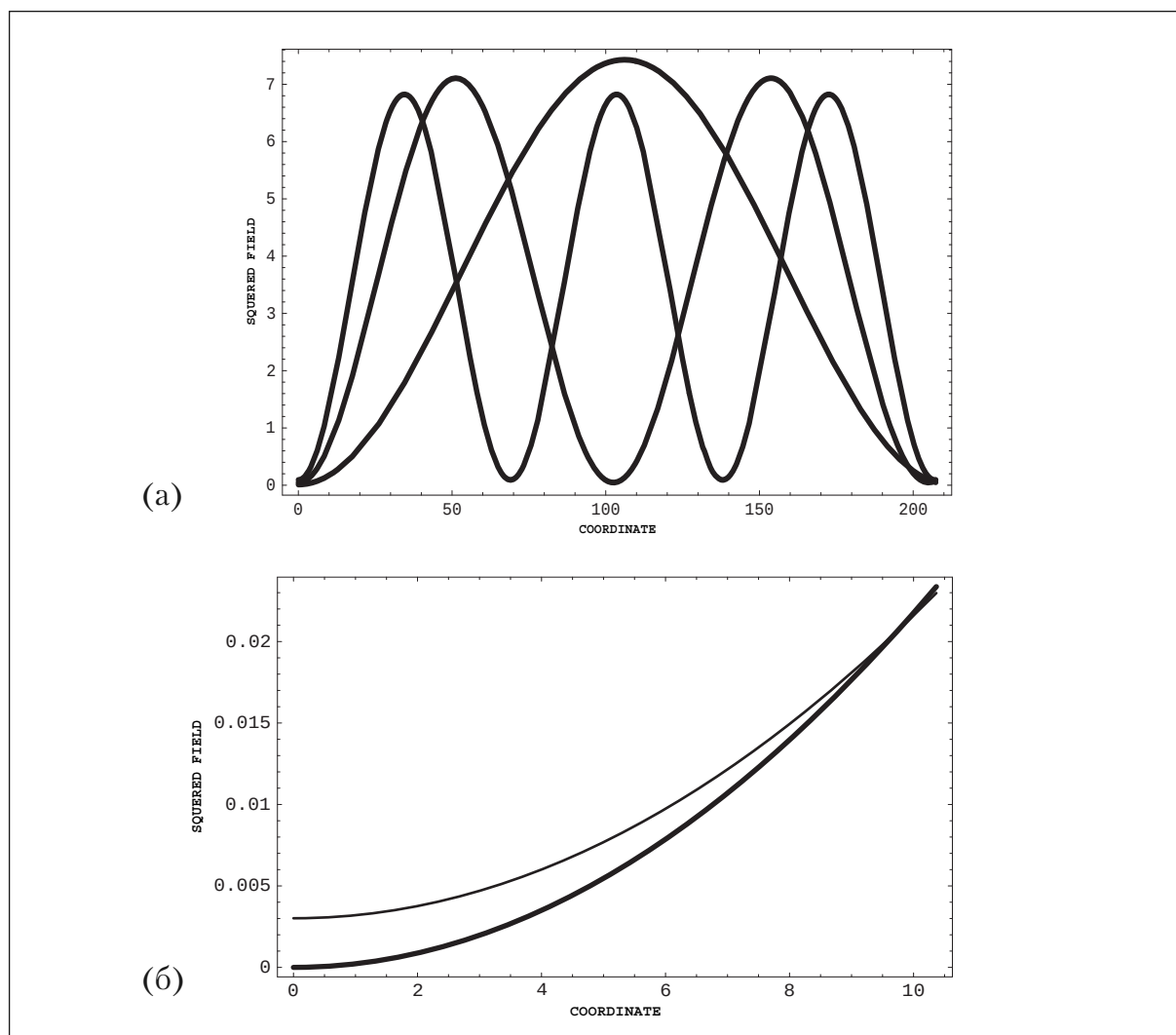


Рис. 10

этот поток энергии из слоя (утечка) и является физической причиной найденного выше затухания краевой моды.

Таким образом, как показывает этот раздел, аномально сильное поглощение в поглощающих холестериках и расходимости коэффициентов отражения и прохождения в усиливающих холестериках (ведущие к понижению порога лазерной генерации), происходящие на дискретных частотах, оказываются проявлением возбуждения в слое локализованных краевых мод. Отметим, что понижение порога РОС лазерной генерации является не единственным явлением, в котором проявляются краевые моды. Например, краевые моды проявляются также в повышении эффективности нелинейной генерации высших оптических гармоник и усилении черенковского излучения в выделенных направлениях в спиральных средах [5].

4.2. Оптимизация накачки в РОС лазерах

Формулы предыдущих разделов демонстрируют возможность понижения порога лазерной РОС генерации при совмещении частоты генерации с частотами краевых мод (максимальный эффект соответствует $n=1$). При этом никаких специальных требований к волне накачки не подразумевалось. Однако, существует возможность дальнейшего понижения порога лазерной РОС генерации при наложении дополнительных условий на волну накачки. А именно, такая возможность реализуется, если волна накачки

находится в условиях аномально сильного поглощения, которые обсуждались выше (максимальный эффект соответствует $n=1$). Напомним, что при лазерной РОС генерации ХЖК должен быть усиливающим материалом на частоте генерации и одновременно поглощающим на частоте накачки. Если обеспечить условия аномально сильного поглощения волны накачки (сохраняя при этом совмещение частоты генерации с частотой краевой моды), то произойдет дальнейшее понижение порога лазерной РОС генерации. Поскольку частота волны накачки всегда выше, чем частота генерации, то для реализации эффекта аномально сильного поглощения на частоте накачки ее частота ω_p должна совпадать с частотой краевой моды на высокочастотной границе ОСО, т.е. должно выполняться соотношение

$$\omega_p = (c\tau/2)/[\epsilon_{0p}(1-\delta_p)]^{1/2}. \quad (32)$$

При этом частота лазерной РОС генерации ω_l , должна совпадать с частотой краевой моды на низкочастотной границе ОСО, т.е. должно выполняться соотношение

$$\omega_l = (c\tau/2)/[\epsilon_{0l}(1+\delta_l)]^{1/2}. \quad (33)$$

Совмещение частоты генерации и накачки с частотами краевых мод в коллинеарной геометрии РОС генерации (т.е. при распространении всех волн вдоль холестерической оси) требует следующего соотношения между этими частотами накачки и генерации

$$\omega_p/\omega_l = [\epsilon_{0l}(1+\delta_l)/\epsilon_{0p}(1-\delta_p)]^{1/2}, \quad (34)$$

где диэлектрическая постоянная ϵ_0 и ее анизотропия δ помечены индексами «р» и «l», отмечающими, что из-за частотной дисперсии диэлектрических свойств ХЖК соответствующие величины, относящиеся к частоте накачки и частоте РОС генерации, могут быть различными. Следует отметить, что хотя соотношение (34) достижимо на эксперименте, однако оно накладывает серьезные ограничения на частоты накачки и генерации, поскольку в типичной экспериментальной ситуации лазерной генерации отношение ω_p/ω_l оказывается больше величины, даваемой выражением (34). Однако существует регулярный способ обеспечения условия аномального поглощения волны накачки – это осуществление накачки пучком, распространяющимся под углом к холестерической оси (т.е. выход в эксперименте из коллинеарной геометрии).

При этом приближенное значения угла отклонения пучка накачки θ от направления холестерической оси, вдоль которой реализуется РОС генерация, дается выражением

$$\theta = \arccos[\omega_l/\omega_p]. \quad (35)$$

Отметим, что понижения порога лазерной генерации за счет аномально сильного поглощения волны накачки были экспериментально реализованы как в коллинеарной, так и неколлинеарной геометрии эксперимента.

4.3. Локализованные дефектные моды

Другой разновидностью локализованных мод в фотонных кристаллах являются **дефектные моды**. Свое название они получили потому, что они наблюдаются в фотонных кристаллах, содержащих плоский дефект, нарушающий совершенную периодическую структуру фотонного кристалла. В последнее время дефектные моды привлекают к себе значительное внимание, в частности потому, что они позволяют

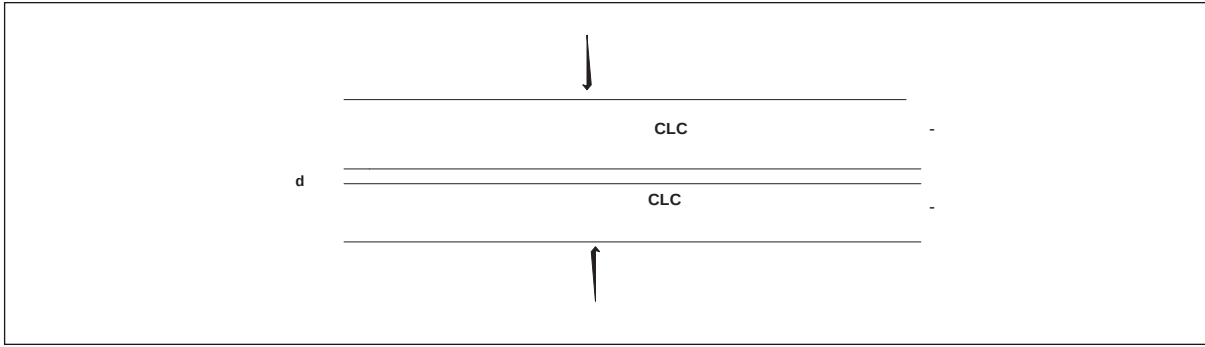


Рис. 11

реализовать низкопороговую РОС лазерную генерацию, узкополосные оптические фильтры и оказываются полезными в некоторых других явлениях оптики фотонных кристаллов. Как и выше, описание локализованных дефектных мод проведем на примере дефектных структур ХЖК.

4.3.1. Граничная задача для дефектной ХЖК структуры

Рассмотрим граничную задачу для дефектной структуры [10-13], представляющей собой два совершенных планарных слоя толщины L с холестерической осью, направленной перпендикулярно их поверхностям и разделенных изотропным слоем толщины d (см. рис. 11).

Примем, что диэлектрическая проницаемость дефектного слоя и среды вне структуры совпадает со средней диэлектрической проницаемостью ХЖК ϵ_0 . Решая граничную задачу для дефектной структуры (см. рис. 11) аналогично рассмотренному выше случаю краевой моды, для коэффициентов отражения $|R(d,L)|^2$ и прохождения $|T(d,L)|^2$ дефектной структуры при нормальном падении на нее света дифрагирующей круговой поляризации получим следующие выражения:

$$|T(d,L)|^2 = | [T_e T_d \exp(ikd)] / [1 - \exp(2ikd) R_d R_u] |^2, \quad (36)$$

$$|R(d,L)|^2 = | \{ R_e + R_u T_e T_u \exp(2ikd) / [1 - \exp(2ikd) R_d R_u] \} |^2, \quad (37)$$

где $R_e(T_e)$, $R_u(T_u)$ и $R_d(T_d)$ – амплитудные коэффициенты отражения (прохождения) индивидуального ХЖК слоя (20) (см. рис. 6) при падении света на внешнюю (верхнюю) поверхность ХЖК слоя, при падении света из дефектного слоя на внутреннюю верхнюю поверхность ХЖК слоя и при падении света из дефектного слоя на внутреннюю нижнюю поверхность ХЖК слоя, соответственно. При выводе выражений (36, 37) предполагалось, что свет на дефектную структуру (рис. 11) падает только сверху. Результаты расчетов $|R(d,L)|^2$ и $|T(d,L)|^2$ приведены в следующем разделе.

Легко также найти выражения для амплитуд собственных волн, возбуждаемых в слоях ХЖК волной, падающей на структуру (см. Рис.11) извне, используя выражения (36, 37) для коэффициентов пропускания $T(d,L)$ и отражения $R(d,L)$. Амплитуды собственных волн на входной поверхности структуры $E_{\pm}^{+u}$ выражаются через амплитудный коэффициент отражения $R(d,L)$ следующим образом:

$$E_{+}^{+u} = (E_{iu}) [\xi^- - R(d,L)] / (\xi^- - \xi^+), \quad E_{-}^{+u} = -(E_{iu}) [\xi^+ - R(d,L)] / (\xi^- - \xi^+). \quad (38)$$

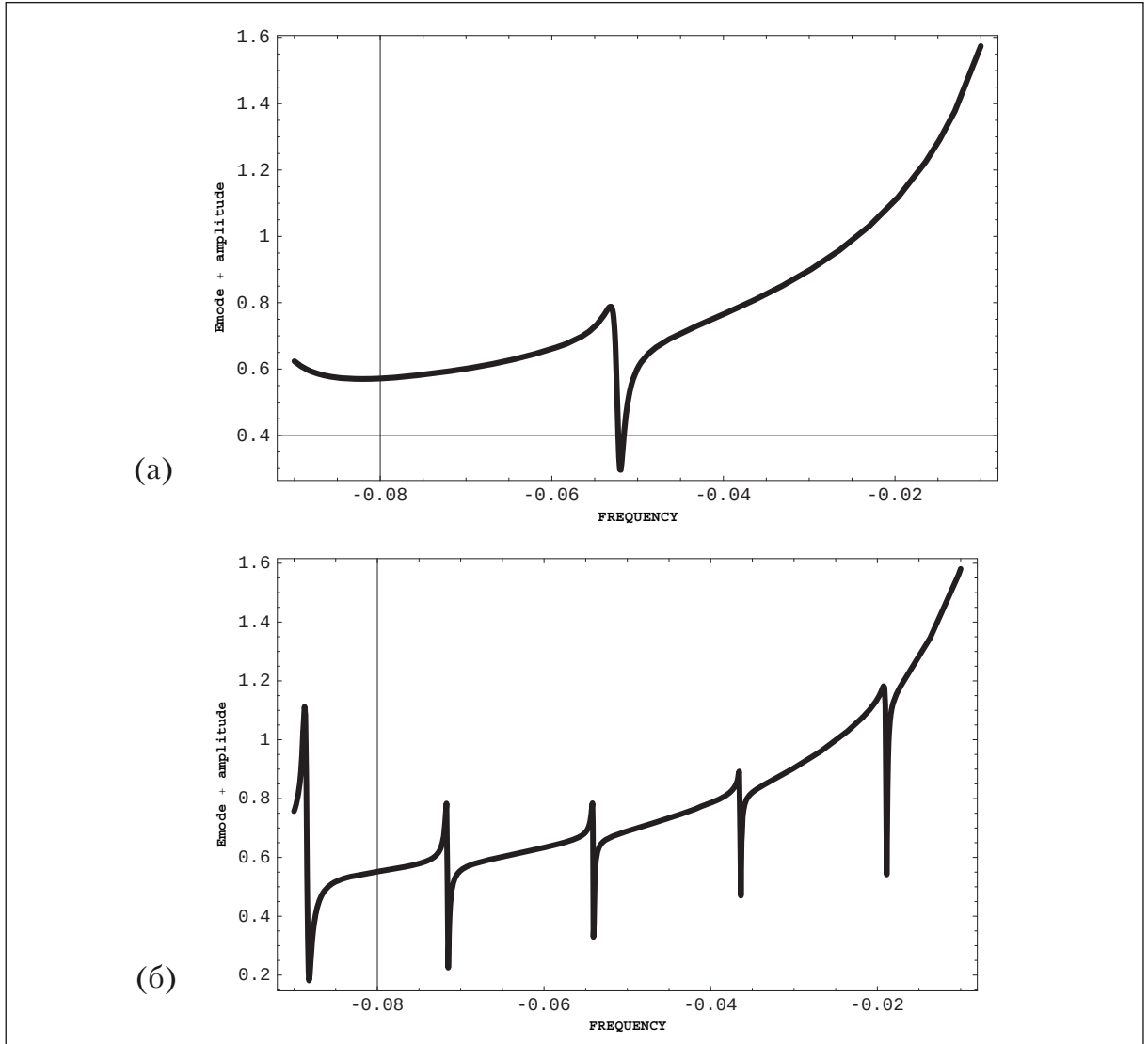


Рис. 12

Амплитуды собственных волн на выходной поверхности структуры выражаются через амплитудный коэффициент пропускания $T(d,L)$ аналогичным образом:

$$E_{+}^{+d} = (E_{iu})[\xi^{-}T(d,L)]\exp[-i(2K_{+}^{+}L+kd)]/(\xi^{-}-\xi^{+}), \quad (39)$$

$$E_{-}^{+d} = -(E_{iu})[\xi^{+}T(d,L)]\exp[-i(2K_{+}^{+}L+kd)]/(\xi^{-}-\xi^{+}).$$

Соответствующие вычисления амплитуд E_{+}^{+u} , E_{-}^{+u} , E_{+}^{+d} и E_{-}^{+d} собственных волн в структуре обнаруживают их нетривиальную зависимость от частоты (см. рис. 12, $d/p=0,25$ (a), $d/p=1000,6$ (b); $N=33$). А именно, вблизи частоты дефектной моды (которая находится внутри области селективного отражения, см. рис. 13-15) амплитуды собственных волн испытывают резкие изменения. В результате происходит существенное возрастание амплитуды собственных волн по сравнению с амплитудой волны, падающей на дефектную структуру извне. И чем толще слои ХЖК, тем больше оказывается возрастание амплитуд собственных волн.

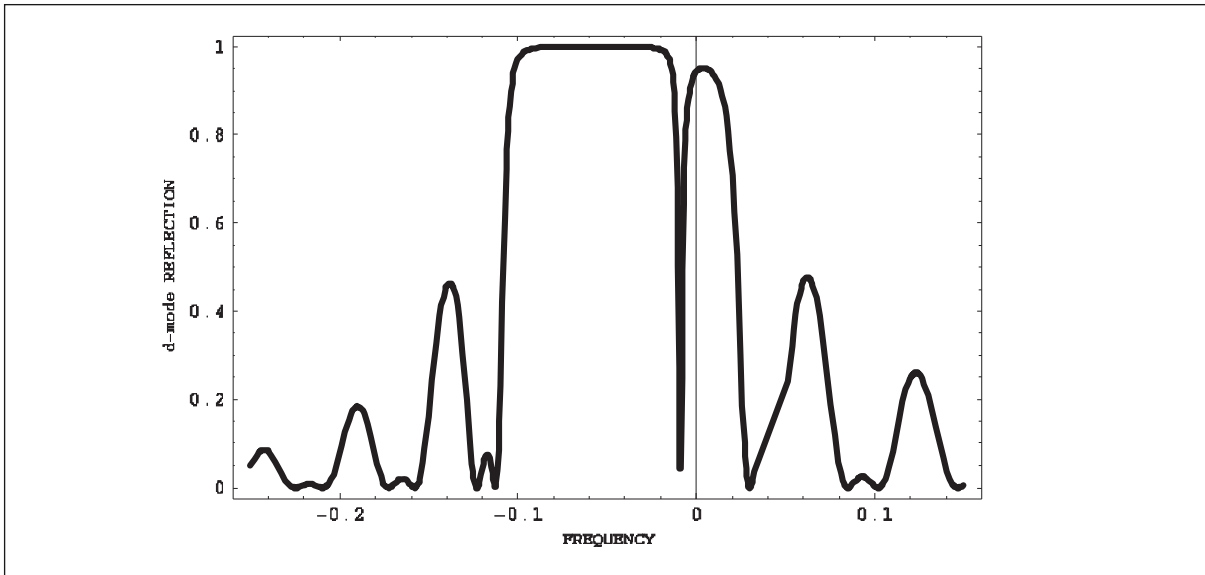


Рис. 13

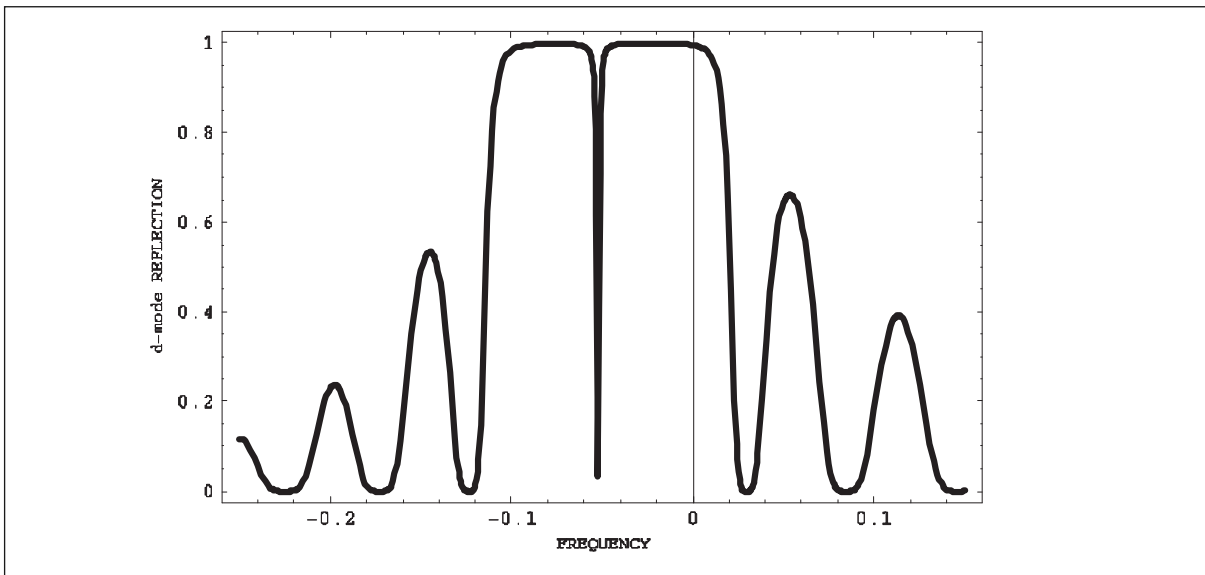


Рис. 14

4.3.2. ДМС с непоглощающими ХЖК слоями

Рассмотрим подробнее формулы предыдущего раздела для непоглощающих ХЖК слоев в структуре на рис. 11. Рассчитанные частотные спектры отражения $|R(d,L)|^2$ и пропускания $|T(d,L)|^2$ при нормальном падении внешней волны на структуру представлены на рис. 13, 14 (здесь представлены только $|R(d,L)|^2$ поскольку для непоглощающих слоев выполняется соотношение $|R(d,L)|^2 + |T(d,L)|^2 = 1$). Характерной чертой этих спектров является существование максимумов пропускания $|T(d,L)|^2$ и минимумов отражения $|R(d,L)|^2$ на некоторой частоте внутри области селективного отражения, положение которой зависит от толщины дефектного слоя d . Как известно, частотное положение соответствующих минимумов $|R(d,L)|^2$ и максимумов $|T(d,L)|^2$ совпадает со значением действительной части частоты дефектной моды. Для толщины дефектного слоя $d=p/4$, соответствующей как раз половине периода изменения тензора диэлектрической проницаемости ХЖК, эти максимумы и минимумы расположены точно по середине ОСО.

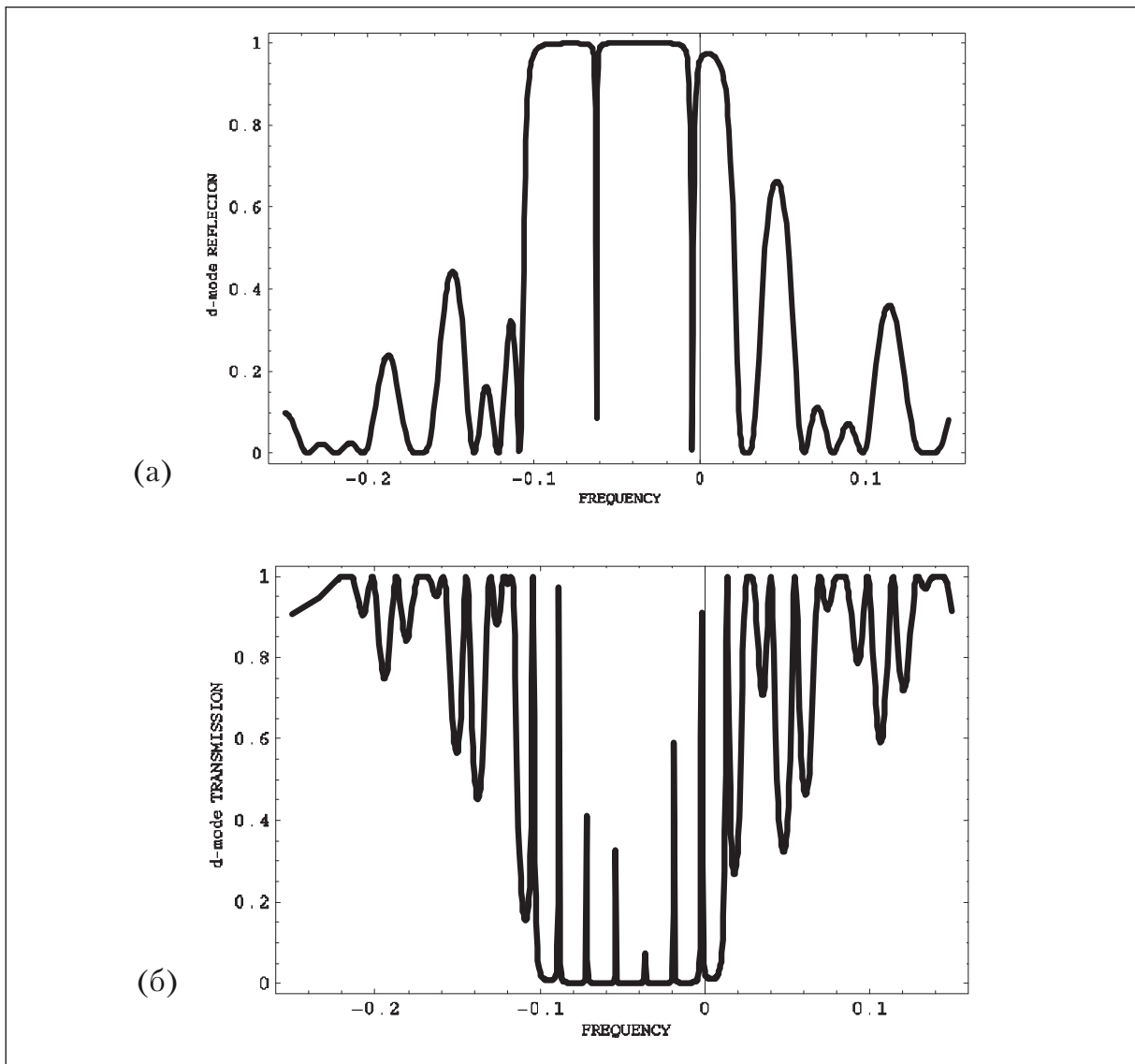


Рис. 15

В интервале толщин $0 < d/p < 0.5$ частота дефектной моды перемещается от высокочастотной границы ОСО до ее низкочастотной границы. При дальнейшем увеличении толщины дефектного слоя частота дефектной моды испытывает частотные осцилляции между высокочастотной границей ОСО и ее низкочастотной границей. Однако, эти осцилляции происходят только до тех пор пока Δkd остается меньше, чем 2π , где Δk представляет собой изменение волнового вектора на частотном интервале, равном частотной ширине ОСО. Когда Δkd начинает превосходить 2π , внутри ОСО появляется вторая дефектная мода (два провала в коэффициенте отражения $|R(d,L)|^2$ или максимума в $|T(d,L)|^2$). При дальнейшем росте толщины дефектного слоя продолжается дальнейшее увеличение числа дефектных мод, число которых может быть оценено как $\Delta kd/2\pi$.

Описанное появление многих дефектных мод иллюстрируется рис. 15 ($d/p = 200,15$ (a), $d/p = 1000,6$ (b); $N=33$), на которых представлены только $|T(d,L)|^2$ или $|R(d,L)|^2$ поскольку, как уже отмечалось, для непоглощающих слоев выполняется соотношение $|R(d,L)|^2 + |T(d,L)|^2 = 1$.

Как видно из рис. 13, 14 и следует из (37), на некоторой частоте коэффициент отражения $|R(d,L)|^2 = 0$. Условие зануления коэффициент отражения, вытекающее из (37) имеет вид:

$$R_e [1 - \exp(2ikd) R_d R_u] + R_u T_e T_u \exp(2ikd) = 0. \quad (40)$$

Интересно сравнить частотную зависимость коэффициента отражения $|R(d,L)|^2$ с поведением амплитуд собственных волн E_{+}^{+u} , E_{-}^{+u} , E_{+}^{+d} , and E_{-}^{+d} , возбуждаемых в дефектной структуре. Сравнивая рис. 13-15 с рис. 16, видим, что частотное положение резких осцилляций амплитуд собственных волн как раз совпадает с точками зануления $|R(d,L)|^2$. Это является проявлением того факта, что соответствующие частоты совпадают с частотами локализованных мод рассматриваемой дефектной структуры, т.е. с частотами, так называемых, **дефектных мод**.

4.3.3 Дефектные моды (непоглощающие ХЖК слои)

Так же, как в случае ЕМ дефектная мода (DM) определяется решением соответствующей граничной задачи (см. рис. 11) при отсутствии падающих на дефектную структуру (ДМС) внешних волн, т.е. при $E_{iu} = E_{id} = 0$. В этом случае, как известно, условием разрешимости соответствующей однородной системы является зануление ее детерминанта, которое, в частности, определяет частоту DM ω_D и поэтому является дисперсионным уравнением для DM.

Явный вид найденного описанным способом дисперсионного уравнения для DM определяется следующим уравнением:

$$\{\exp(2ikd)\sin^2 qL - \exp(-itL)[(\tau q/\kappa^2)\cos qL + i((\tau/2\kappa)^2 + (q/\kappa)^2 - 1)\sin qL]^2 / \delta^2\} = 0, \quad (41)$$

которое также является условием обращения в ноль знаменателя в выражениях (36-37) для коэффициентов отражения и пропускания дефектной структуры, т.е. может быть записано в виде:

$$1 - R_d R_u \exp(2ikd) = 0 \quad (42)$$

Заметим, что для непоглощающих ХЖК при конечной толщине L слоев ХЖК дисперсионное уравнение (41) удовлетворяется только при комплексном значении частоты ω_D , при чем, чем больше толщина L , тем меньше мнимая часть ω_D . И только в пределе бесконечного L частота ω_D становится действительной. Таким образом, дефектная мода является квазистационарным состоянием, а ее время жизни, как известно, определяется мнимой частью частоты ω_D .

Поле DM в слое ХЖК является суперпозицией собственных волн ХЖК с амплитудами, удовлетворяющими условию:

$$E_{+}^{+u} + E_{-}^{+u} = 0. \quad (43)$$

С помощью соотношения (43) можно найти поле DM в ХЖК слоях дефектной структуры, используя выражение (6) для собственных волн в ХЖК. Например, для отдельного ХЖК слоя дефектной структуры (см. рис. 11) выражение, описывающее координатную зависимость поля DM, принимает вид

$$E(\omega_D, z, t) = i \exp(-i\omega_D t) \{ n_+ \exp(i\tau z/2) \sin qz + (n_-/\delta) \exp(-i\tau z/2) \{ [(\tau/2\kappa)^2 + (q/\kappa)^2 - 1] \sin qz - i(\tau q/\kappa^2) \cos qz \} \} \quad (44)$$

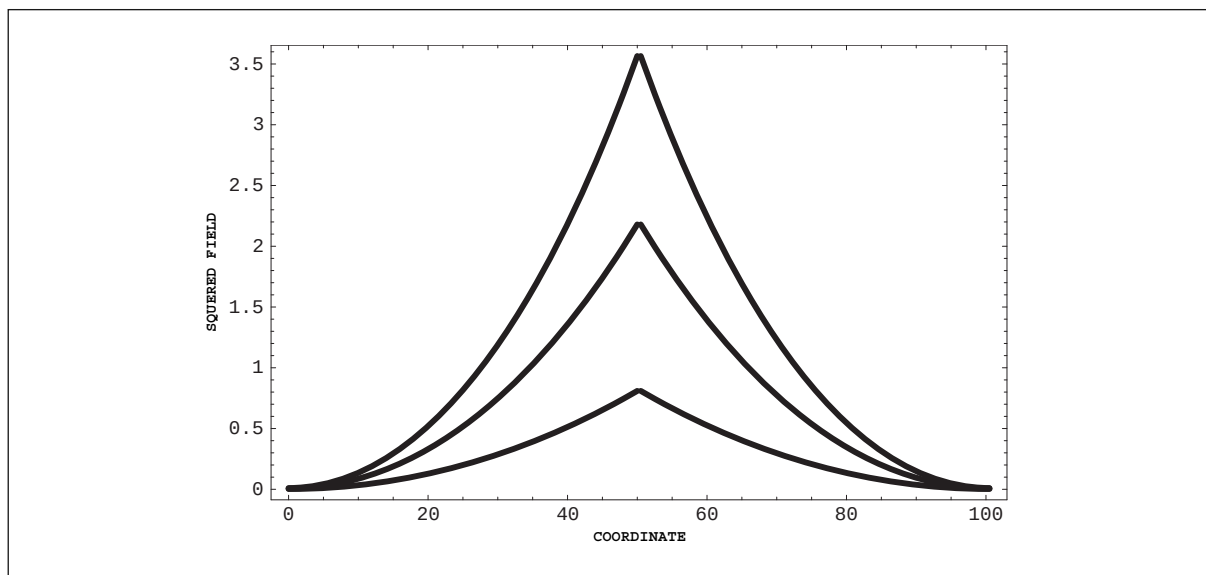


Рис. 16

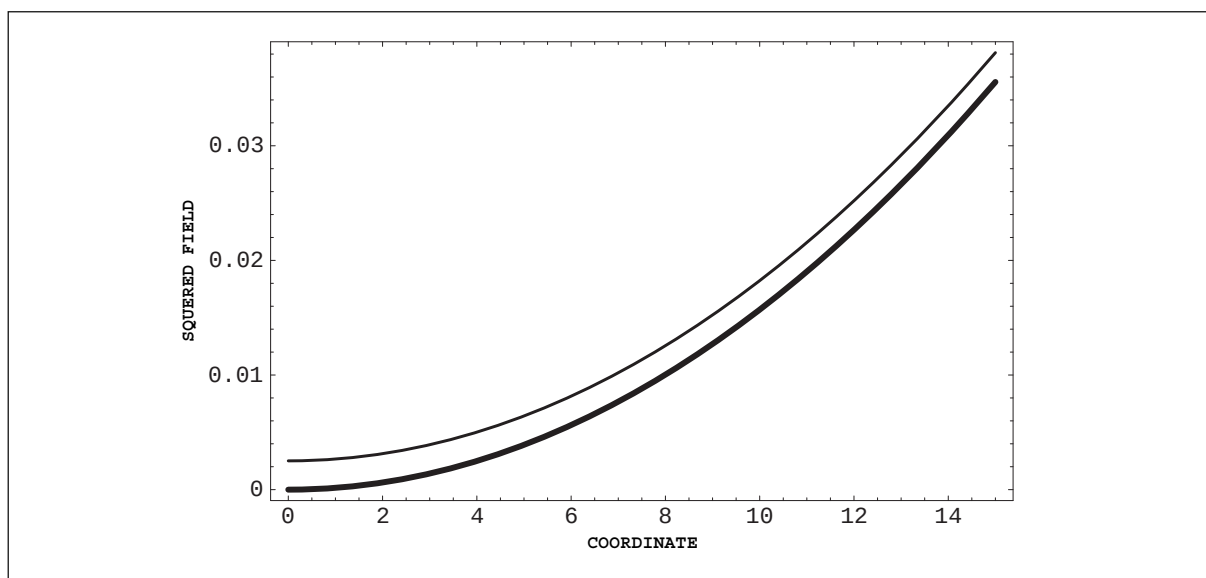


Рис. 17

где ω_D – частота ДМ, q определены в (20), а $z=0$ соответствует внешней поверхности ХЖК слоя. Координатные зависимости распределения энергии в ДМС представлены на рис. 16 ($N=50$, $d/p = 1/4$, $\delta=0,05$; $0,04$; $0,025$ соответственно, для верхней, средней и нижней кривых; координата по толщине ХЖК слоев обезразмерена величиной шага p), а зависимости плотности потока энергии вблизи внешней поверхности ХЖК слоя внутрь структуры (жирная линия) и наружу – на рис. 17 при тех же значениях параметров, что на рис. 16 $\delta=0,05$.

Рис. 16 демонстрирует, что, чем больше диэлектрическая анизотропия ХЖК δ , тем возрастание плотности энергии в ДМ по направлению к дефектному слою структуры оказывается более быстрым. Рис. 17 показывает, что на внешней поверхности ХЖК слоя равен нулю только поток энергии, направленный внутрь ДМС, а поток энергии, направленный наружу хоть и мал, но отличен от нуля при конечных толщинах ХЖК слоев L .

Это обстоятельство приводит к утечке во вне энергии ДМ, которая исчезает только в пределе бесконечно больших толщин ХЖК слоя L . Отношение утечки энергии через поверхности ДМС к полной энергии ДМ, аккумулированной в ДМС, определяет обратное время жизни (а поэтому и частотную ширину линии) ДМ и соответствующая величина может быть представлена в аналитическом виде.

Для непоглощающих ХЖК слоев, которые рассматриваются здесь, единственным каналом убывания энергии ДМ является ее утечка через внешние поверхности ДМС. Ее убыль за единицу времени равна потоку энергии через внешние поверхности ДМС: $(2c/\varepsilon_0^{1/2})|E_{out}|^2$, где E_{out} – амплитуда волны, вытекающей из ДМС через внешние поверхности. Поэтому, используя (44) можно получить следующее выражение для τ_m , времени жизни ДМ:

$$\begin{aligned} \tau_m = & \int |E(\omega_D, z, t)|^2 dz / \{d[\int |E(\omega_D, z, t)|^2 dz]/dt\} = \int |E(\omega_D, z, t)|^2 dz \\ & / (2c/\varepsilon_0^{1/2}) |E_{out}|^2 = [(\delta\kappa^2/\tau q)^2] (L\varepsilon_0^{1/2}/2c) \{[1-(2/qL)\sin 2qL](1+\delta^{-2} \\ & [(\tau/2\kappa)^2 + (q/\kappa)^2 - 1]^2) + \delta^{-2}(\tau q/\kappa^2)^2(1+(2/qL)\sin 2qL)\}, \end{aligned} \quad (45)$$

где интегрирование в силу симметрии ДМС ограничивается только половиной структуры. Анализ уравнения (45) показывает, что времени жизни τ_m зависит от положения ω_D , частоты ДМ, внутри ОСО и достигает максимума для ω_D точно посередине ОСО, т.е. при $k=\tau/2$.

В общем случае описание ДМ требует численного решения дисперсионного уравнения (41). То обстоятельство, что $\text{Re}\omega_D$ определяется частотой, соответствующей занулению коэффициента отражения в случае непоглощающих ХЖК слоев упрощает изучение ДМ в общем случае. В частности, т.к. время жизни ДМ может быть представлено как $1/\text{Im}\omega_D$, уравнение (45) для времени жизни τ_m может быть применено для вычисления $\text{Im}\omega_D$. Однако существуют некоторые предельные случаи, упрощающие описание ДМ. В целом, как показывает анализ, чем толще ХЖК слои, тем больше время жизни ДМ, а в пределе бесконечно толстых ХЖК слоев время жизни ДМ становится бесконечным.

4.3.4. ДМС с бесконечно толстыми ХЖК слоями

Рассмотрим задачу о ДМ в пределе бесконечно толстых ХЖК слоев в структуре, изображенной на рис. 11. В этом случае амплитуды собственных волн, распространяющихся в ХЖК слоях в направлениях к внешним поверхностям структуры должны обратиться в ноль. При этом ненулевыми амплитудами собственных волн оказываются только амплитуды собственных волн распространяющихся по направлению к дефектному слою. Это означает, что в уравнении, определяющем ДМ, остается только две неизвестных амплитуды собственных волн и оно принимает вид:

$$\begin{aligned} \exp[i kd] \exp[i K^+_{+} L_-] E^{+u}_+ &= \exp[i K^+_{-} L_+] E^{+d}_- \\ \xi^+ \exp[i K^+_{+} L_-] E^{+u}_+ &= \exp[i kd] \xi^- \exp[i K^+_{-} L_+] E^{+d}_- \end{aligned} \quad (46)$$

Частота ДМ, т.е. ω_D , в этом случае определяется условием зануления определителя системы (46), сводящегося к следующему соотношению:

$$-(2/\delta) \exp[i(k-q)d] \{(\tau q/\kappa^2) \cos(\tau/2-k)d + i[(\tau/2\kappa)^2 + (q/\kappa)^2 - 1] \sin(\tau/2-k)d\} = 0. \quad (47)$$

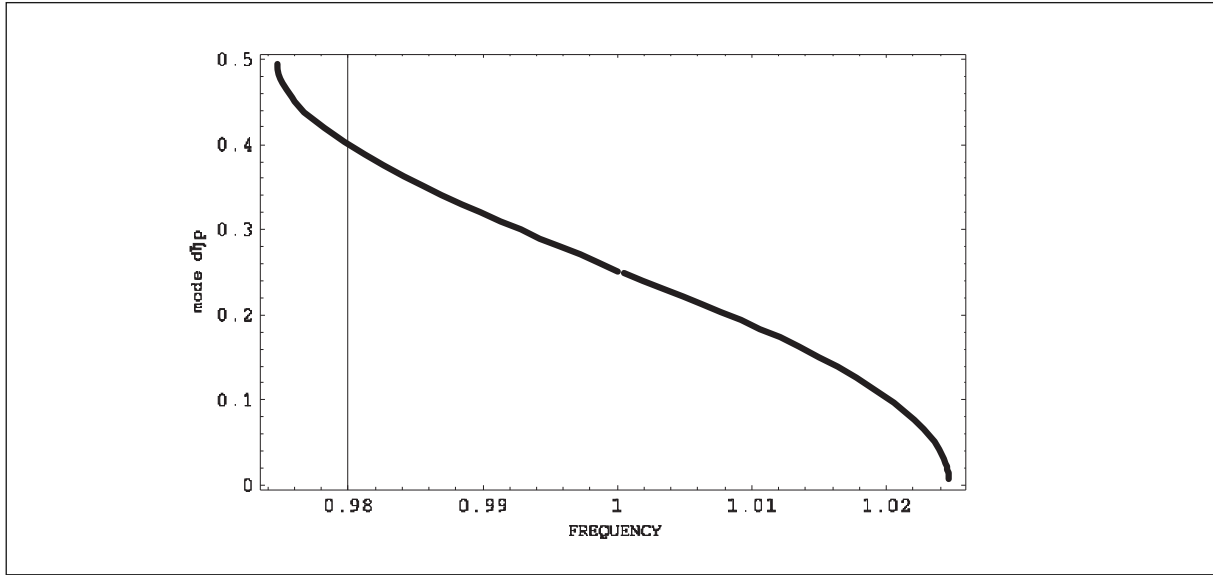


Рис. 18

Для частот внутри ОСО определитель (47) обращается в ноль, если толщина дефектного слоя d следующим образом связана с частотой:

$$(d/p)(1 - k/(\tau/2)) = (1/2\pi) \arctg[2(\tau/2\kappa) \{ [4(\tau/2\kappa)^2 + \delta^2]^{1/2} - 1 - (\tau/2\kappa)^2 \}^{1/2} / [2(\tau/2\kappa)^2 - [4(\tau/2\kappa)^2 + \delta^2]^{1/2}]] \quad (48)$$

Это означает, что для любой частоты внутри ОСО существует ДМ, однако каждая выбранная частота реализуется при строго определенной толщине d дефектного слоя.

Обсуждаемая связь ω_D с толщиной дефектного слоя в пределе бесконечной толщины ХЖК слоев приведена на рис. 18, на котором отсчет частоты ДМ смещен так, что брегговской частоте (см. (13)) соответствует 1 на оси абсцисс. Как уже упоминалось, ω_D для $d/p=1/4$ расположена точно в центре ОСО, что и подтверждает рис. 18. Этот результат следует непосредственно из (48), если предположить, что ω_D расположена точно в середине ОСО, т.е. $\tau/2\kappa=1$. При этом (48) дает:

$$d/p = (1/2\pi) \arctg[2 / \{ [4 + \delta^2]^{1/2} - 2 \}^{1/2}] \approx (1/2\pi) \arctg[4/\delta]. \quad (49)$$

что приближенно соответствует $d/p = 1/4 + n/2$, где n – ноль или целое число.

Сдвиг $\Delta\omega$ частоты ω_D , обусловленный Δd , малыми изменениями толщины дефектного слоя, в интервале $|\Delta\omega/\omega_B| < \delta$ вблизи $d/p=1/4$, приблизительно дается соотношением

$$\Delta\omega/\omega_B = -4\Delta d/p. \quad (50)$$

Как показывают вычисления, ω_D слабо зависит от толщины ХЖК слоев L . Поэтому приведенные выше зависимости ω_D от d/p для бесконечно больших L можно рассматривать как хорошее приближение для ω_D при любых L .

Как известно, поле в ДМ локализовано в окрестности дефектного слоя. Рис. 19 ($d/p = 1/4$, $\delta=0,05$; $0,1$; $0,2$ соответственно, для верхней, средней и нижней кривых; координата по толщине ХЖК слоев обезразмерена величиной шага p), представляющий координатную зависимость распределения энергии в ДМ, иллюстрирует эту локали-

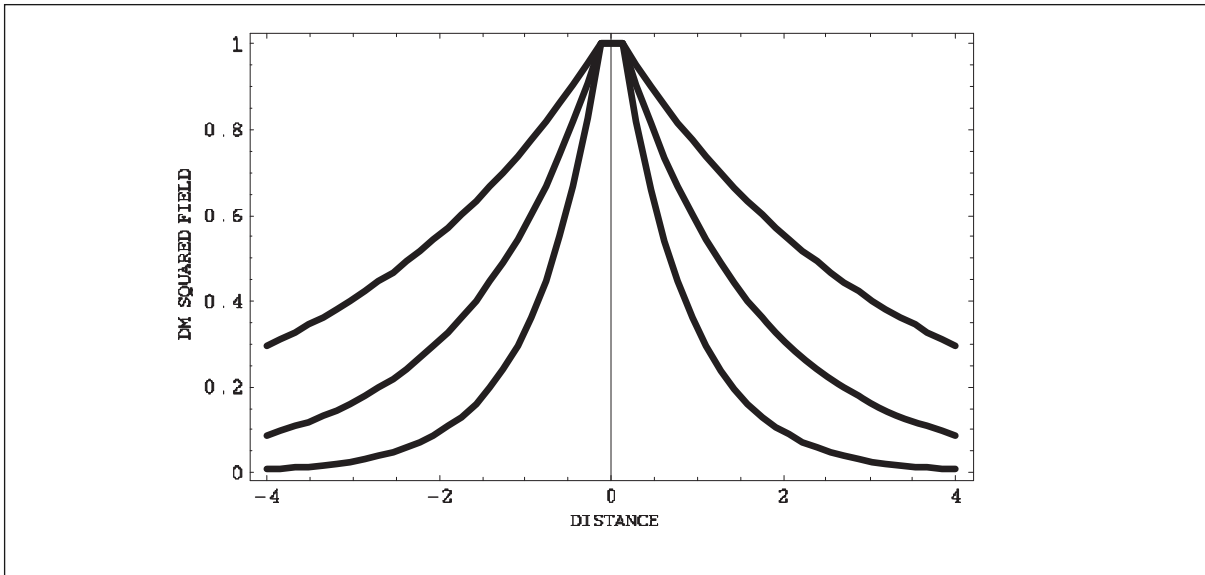


Рис. 19

зацию для случая бесконечно толстых ХЖК слоев в ДМС. Максимум амплитуды поля в ДМС расположен в дефектном слое и поле затухает экспоненциально с координатой вне дефектного слоя. Наиболее быстрое затухание реализуется для $d/p=1/4$, т.е. для ω_D точно в центре ОСО. При удалении ω_D от центра ОСО скорость экспоненциального затухания уменьшается. Затухание поля ДМ с координатой также усиливается с возрастанием диэлектрической анизотропии δ (при фиксированных прочих параметрах).

Уравнения (47-49) демонстрируют, что для случая бесконечно толстых ХЖК слоев в ДМС ω_D является действительной величиной и, следовательно, время жизни ДМ бесконечно. Для случая конечной толщины ХЖК слоев это не так. Физическая причина этого вполне прозрачна. Для конечной толщины ХЖК слоев, как уже отмечалось, происходит утечка энергии ДМ через внешние поверхности ДМС, что и приводит к конечному времени жизни ДМ. Из решения дисперсионного уравнения (41) отмеченный факт объясняется тем, что для конечной толщины ХЖК слоев решение дисперсионного уравнения дает комплексное значение ω_D , что эквивалентно конечному времени жизни ДМ.

4.3.5. ДМС С толстыми холестерическими слоями

В случае ДМС с толстыми ХЖК слоями ($|q|L \gg 1$) также могут быть получены некоторые аналитические результаты, относящиеся к ДМ. Эти результаты можно получить как из дисперсионного уравнения (41), а также из выражений (36, 37) для коэффициентов пропускания и отражения ДМС.

Вместо непосредственного решения (41) для отыскания комплексной частоты ДМ могут быть использованы уравнения (36, 37) для коэффициентов пропускания и отражения ДМС с целью оценки мнимой составляющей частоты дефектной моды ω_D . Следует считать, что частота имеет малую ненулевую мнимую добавку (определенную, например, соотношением $\omega/\text{Re}[\omega] = \omega(1+i\Delta)$, где Δ является малой величиной) и найти экстремумы (36, 37) по отношению к этой малой мнимой добавке $i\Delta$. Оценить эту добавку можно по результатам соответствующих вычислений коэффициентов пропускания $|T(d,L)|^2$ и отражения $|R(d,L)|^2$ демонстрирующих, что мнимая добавка к частоте дефектной моды ω_D уменьшается с возрастанием толщины ХЖК слоев, а также возрастает с приближением $\text{Re}\omega_D$ к краям ОСО при фиксированной толщине ХЖК слоя.

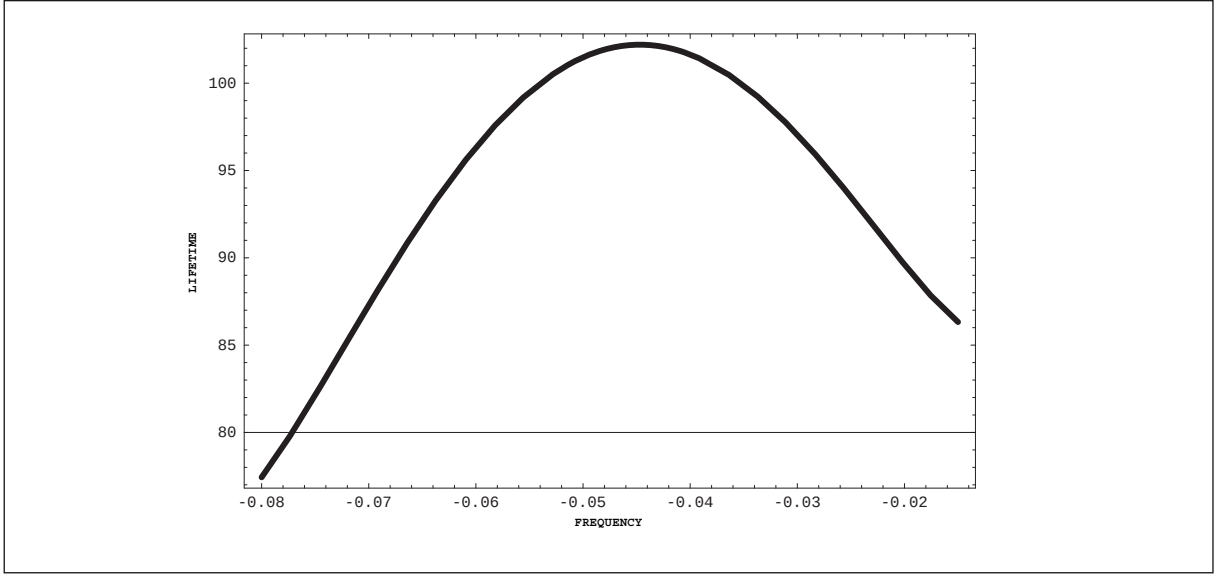


Рис. 20

На рис. 24 приведены результаты расчета времени жизни ДМ в частотном интервале, где выполняется условие $|q|L \gg 1$. В частности, как показывает рис. 24 (на котором приведены расчеты по формуле (53) времени жизни ДМ, обезразмеренное временем пролета света ДМС с $N=40$, как функции положения частоты дефектной моды ω_D в ОСО, центру которой на оси абсцисс рисунка соответствует -0,05), время жизни дефектной моды, определяемое как $\tau = 1/|\text{Im}\omega_D|$, экспоненциально возрастает с ростом толщины ХЖК слоя и достигает максимума для частоты дефектной моды в центре ОСО при фиксированной толщине ХЖК слоя.

Выполняя разложение знаменателей (36, 37) относительно малого параметра Δ , можно найти аналитически закон роста времени жизни τ при увеличении толщины слоев ХЖК, т.е. величину Δ (в пределе $|q|L \gg 1$), соответствующую расходимости коэффициентов пропускания и отражения ДМС как функции Δ .

Соответствующее выражение для Δ как функции L дается формулой:

$$\Delta = \Delta q / [iqF(\delta^2)], \quad (51)$$

где Δq – изменение q связанное с мнимой добавкой к частоте дефектной моды ω_D , обеспечивающее расходимости коэффициентов пропускания и отражения ДМС.

$$F(\delta^2) = \tau 1 + \{1/(2[(\tau/\kappa)^2 + \delta^2]^{1/2}) - (\tau/2\kappa)^2\} / (1 - [(\tau/\kappa)^2 + \delta^2]^{1/2} + (\tau/2\kappa)^2)$$

и

$$\Delta q = [2\kappa^2/(q\tau L)] \exp[-|q|L].$$

Т.к. время жизни дефектной моды $\tau_m = 1/\text{Im}\omega_D$, выражение (51) дает экспоненциальное возрастание τ_m с ростом толщины ХЖК слоев L , показывая при этом сильную зависимость скорости возрастания ω_D , частоты ДМ, от ее положения внутри ОСО. Если ω_D расположена точно по центру ОСО выражение (51) для Δ принимает следующий вид:

$$\Delta = -(2/3\pi)(p/L) \exp[-2\pi\delta(L/p)]. \quad (52)$$

Зависимость времени жизни DM от положения ω_D , частоты DM, внутри ОСО, рассчитанные по формуле (51), приведены на рис. 20.

Найденные по формулам (51, 52) величины Δ можно рассматривать как исходное приближение в численных расчетах для случаев произвольной толщины ХЖК слоев L. Те же результаты для τ_m , времени жизни DM для толстых ХЖК слоев L в ДМС ($|q|L \gg 1$) дает выражение Eq. (45), определяющее время жизни τ_m через утечку энергии через поверхности ДМС:

$$\tau_m = [(\delta\kappa^2/\tau q)^2] (L\epsilon_0^{1/2}/2c)[1/(\delta^2 q L)] \{ [(\tau/2\kappa)^2 + (q/\kappa)^2 - 1]^2 + [(\tau q/\kappa^2)^2] \} \exp[2|q|L]. \quad (53)$$

В случае положения ω_D точно в середине ОСО уравнение (53) дает:

$$\tau_m = [(3\pi/c\tau)(L/p)\epsilon_0^{1/2} \exp[2\pi\delta L/p]. \quad (54)$$

И, как следовало ожидать, максимум τ_m , времени жизни DM, соответствует положению частоты DM точно в середине ОСО, т.е. при $k=\tau/2$, где $|.$ достигает своего максимума.

4.3.6. ДМС с поглощающими слоями ХЖК

Применим теперь формулы (36, 37) к ДМС (см. рис. 11) с поглощающими ХЖК слоями. Этот случай, например, имеет прямое отношение к лазерной генерации в ХЖК: на частоте генерации ХЖК должен быть усиливающим, и в тоже время поглощающим на частоте волны накачки. Чтобы учесть поглощение введем так же, как в рассмотренном случае ЕМ, малый параметр γ , равный отношению мнимой части диэлектрической проницаемости к действительной части, т.е. $\epsilon = \epsilon_0(1+i\gamma)$. Отметим, что в реальных ситуациях $\gamma \ll 1$. Естественным следствием ненулевого поглощения, т.е. $\gamma > 0$, является уменьшение коэффициентов пропускания $T(d)$ и отражения $R(d)$ ДМС. Однако, кроме того проявляются интересные особенности оптических характеристик, рассматриваемой нами структуры (рис. 11). Результаты расчетов полного поглощения в ДМС в зависимости от значений γ , представленные на рис. 25-28 ($N=33$, $d/p=0,1$), выявляют эти особенности. Для поглощающих структур $|T(d,L)|^2 + |R(d,L)|^2 < 1$ и представленная на рис. 25-28 величина $A_{tot} = 1 - |T(d,L)|^2 - |R(d,L)|^2$ дает суммарное поглощение в структуре. До относительно сильного поглощения ($\gamma = 0.005$ на рис. 21) спектральные формы отражения и пропускания сохраняют типичные для ДМС минимумы и максимумы в отражении и пропускании, соответственно, однако отличающиеся от соответствующих величин для случая непоглощающих ХЖК слоев (см. рис. 13, 14).

При уменьшении γ до малых величин спектральная форма отражения и поглощения почти приближается к соответствующим формам (см. рис. 17, 18) для случая непоглощающих ХЖК, однако, суммарное поглощение $(1 - |T(d,L)|^2 - |R(d,L)|^2)$ на частоте DM ведет себя необычно.

Что касается суммарного поглощения, то оно демонстрирует необычную частотную зависимость. При небольших γ для частот, совпадающих с частотами DM, суммарное поглощение оказывается намного больше, чем поглощение вне ОСО (см. рис. 22-24).

Если величина γ не слишком мала (рис. 21, $\gamma = 0.005$), то возрастание суммарного поглощения проявляет себя на границе ОСО.

Это является проявлением, так называемого, «эффекта аномально сильного поглощения» для совершенных ХЖК слоев на частоте ЕМ (см. (24-25)). Для меньших γ

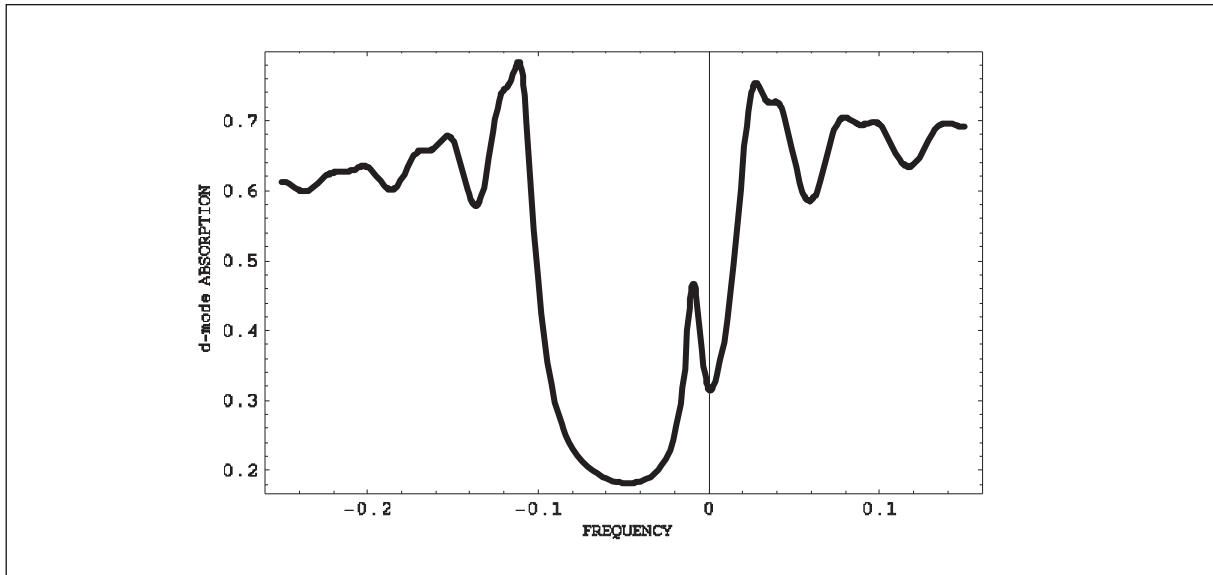


Рис. 21

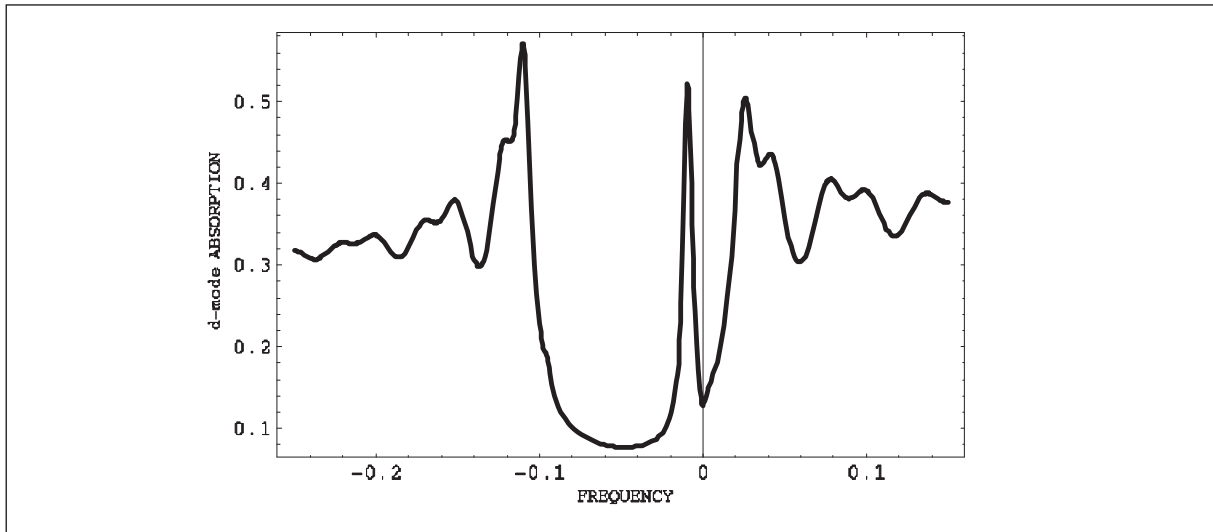


Рис. 22

суммарное поглощение начинает превосходить поглощение вне ОСО на частоте дефектной моды ω_D , оказываясь примерно таким же, как для ЕМ (рис. 23, $\gamma = 0.002$). При дальнейшем уменьшении γ эффект anomalно сильного поглощения становится сильнее на частоте дефектной моды, чем на частоте краевой моды (рис. 23, $\gamma = 0.001$; рис. 24, $\gamma = 0.0003$). Таким образом, на ω_D , частоте DM, существует эффект anomalно сильного поглощения, подобный эффекту на частоте краевой моды (см. (23-25)), более того, усиление поглощения на DM при малых γ оказывается больше чем для ЕМ. Ясно, что эффект anomalно сильного поглощения на частоте DM обязан своим происхождением локализованным DM, существующим на ДМС. Его реализация предполагает наличие некоторого соотношения между γ и другими параметрами ХЖК. Соответствующее соотношение определяется условием:

$$\partial(1 - |T(d,L)|^2 - |R(d,L)|^2)/\partial\gamma = 0. \quad (55)$$

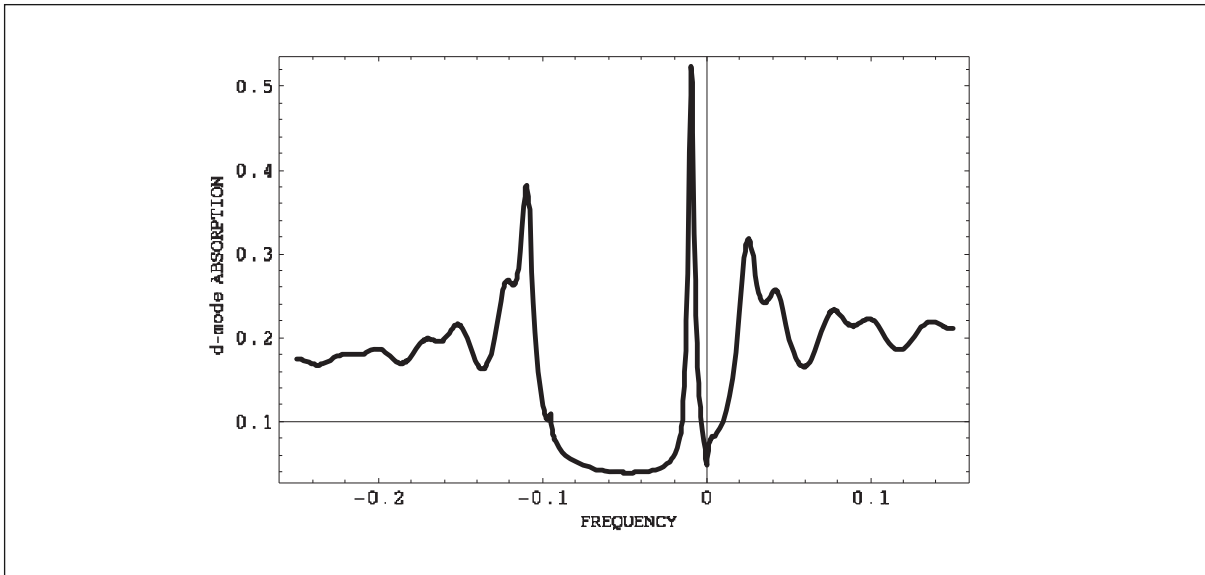


Рис. 23

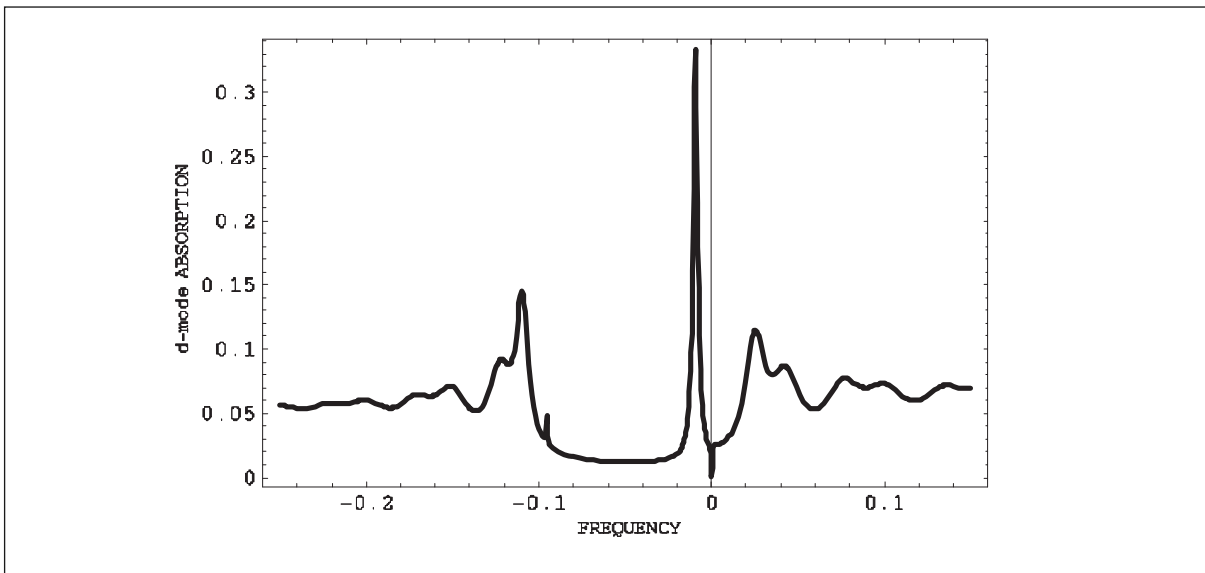


Рис. 24

В общем случае для решения уравнения (55) требуется применение численных методов. Однако, в случае толстых ХЖК слоев ($|q|L \gg 1$) зависимость γ от L и других параметров, обеспечивающая максимальное суммарное поглощение, может быть найдена аналитически:

$$\gamma = 2[2\kappa^2/(q\tau L)] \exp[|q|L] (1/iq) / \{1 + \{1/(2[(\tau/\kappa)^2 + \delta^2]^{1/2}) - (\tau/2\kappa)^2\} / (1 - [(\tau/\kappa)^2 + \delta^2]^{1/2} + (\tau/2\kappa)^2)\} \} \quad (56)$$

Величина γ , даваемая (56), может рассматриваться как начальное приближение в численных расчетах для произвольной толщины ХЖК слоев L . На рис. 25 (для ДМС с $N=40$) приведены результаты расчетов частотной зависимости γ по формуле (56) для толстых ХЖК слоев в ДМС в пределе $|q|L \gg 1$ как функции положения частоты дефектной моды ω_D в ОСО, центру которой на оси абсцисс рисунка соответствует -0,05.

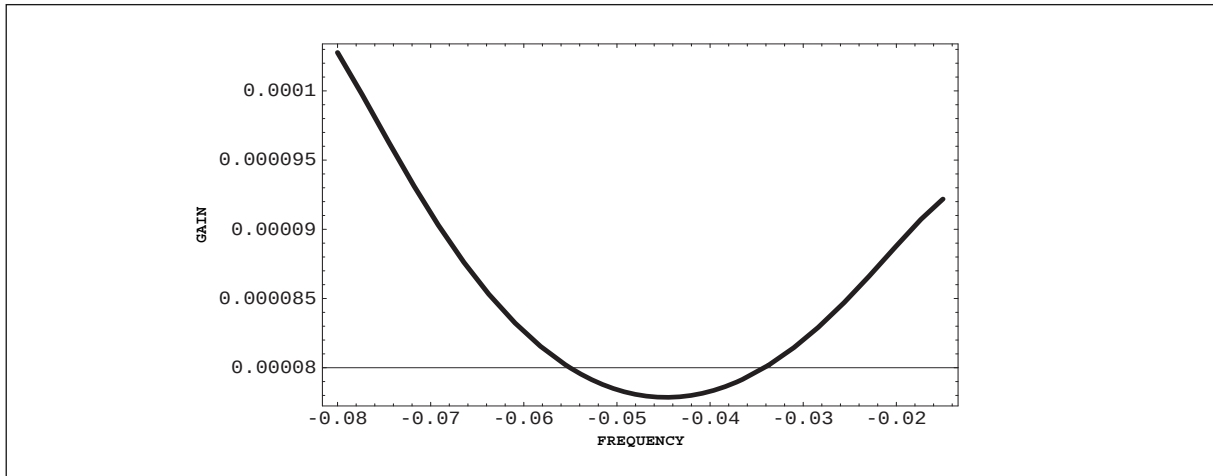


Рис. 25

рис. 29 демонстрирует, что максимальное усиление поглощения происходит в центре ОСО.

Для положения ω_D в центре ОСО выражение (56) для γ принимает следующий вид

$$\gamma = (4/3\pi)(p/L) \exp[-2\pi\delta(L/p)] \quad (57)$$

Заметим, что «эффект аномально сильного поглощения» на частоте DM и его реализация в условиях определенной взаимосвязи между γ и другими параметрами обнаруживает себя в вычислениях суммарного поглощения на частоте DM как функции γ .

4.3.7. ДМС с усиливающими слоями ХЖК

Рассмотрим теперь формулы (36, 37) для коэффициентов отражения и прохождения в случае усиливающих ХЖК слоев. Как и выше мы представим диэлектрическую проницаемость той же формулой $\varepsilon = \varepsilon_0(1 + i\gamma)$, однако теперь при $\gamma < 0$. Результаты вычислений коэффициентов прохождения $|T(d,L)|^2$, отражения $|R(d,L)|^2$ и суммарного поглощения при $\gamma < 0$ представлены на рис. 26-26 ($N=33$, $d/p=0,1$). Для небольших по абсолютной величине γ форма коэффициентов прохождения $|T(d,L)|^2$ и отражения $|R(d,L)|^2$ остается качественно той же, что и в отсутствии усиления ($\gamma = 0$) (рис. 13, 14). Поглощение теперь оказывается небольшой отрицательной величиной (что означает усиление) на всех частотах с некоторым увеличением усиления на частотах дефектной и краевой мод (рис. 26, $\gamma = -0,00005$).

При возрастании абсолютной величины γ форма коэффициента отражения $|R(d,L)|^2$ изменяется при некотором значении γ (типичный минимум в $|R(d,L)|^2$ заменяется на небольшой максимум, близкий к 1, а прохождение $|T(d,L)|^2$ значительно превосходит 1 (рис. 27, $\gamma = -0,0006$).

При дальнейшем возрастании абсолютной величины γ коэффициенты прохождения и отражения на частоте дефектной моды для выбранных значений параметров задачи для рис. 28 ($\gamma = -0,00117$) превосходят сотню без каких-либо следов заметных максимумов на других частотах. Соответствующее значение γ можно считать близким к пороговому значению лазерной РОС генерации на частоте дефектной моды. Продолжая увеличивать абсолютное значение величины γ мы обнаруживаем, что возникают расходящиеся максимумы $|R(d,L)|^2$ на частоте краевой моды (без каких-нибудь следов максимумов на частоте дефектной моды) с порогом (γ) в пять раз более высоким, чем для дефектной моды (рис. 29, $\gamma = -0,0045$). При дальнейшем увеличении абсолютного

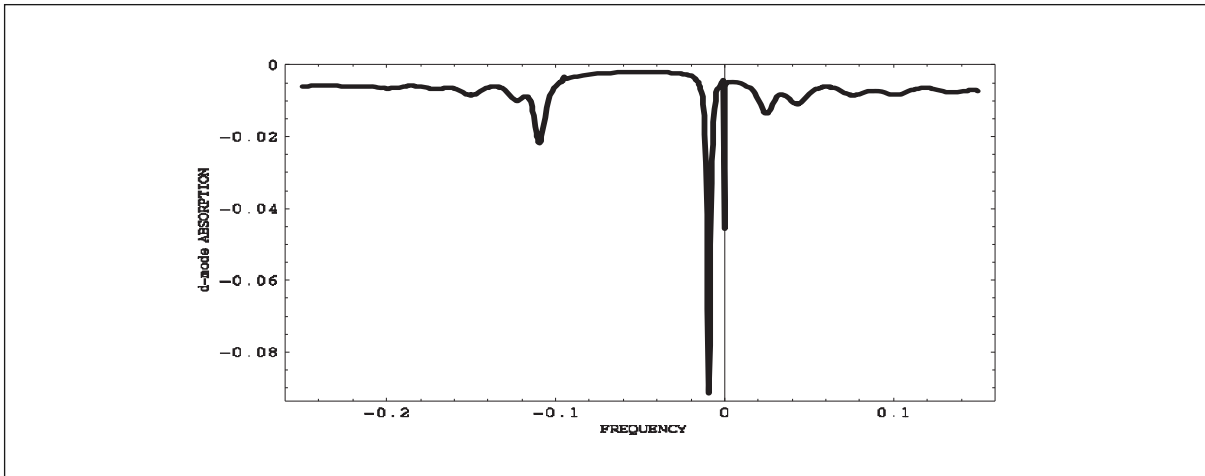


Рис. 26

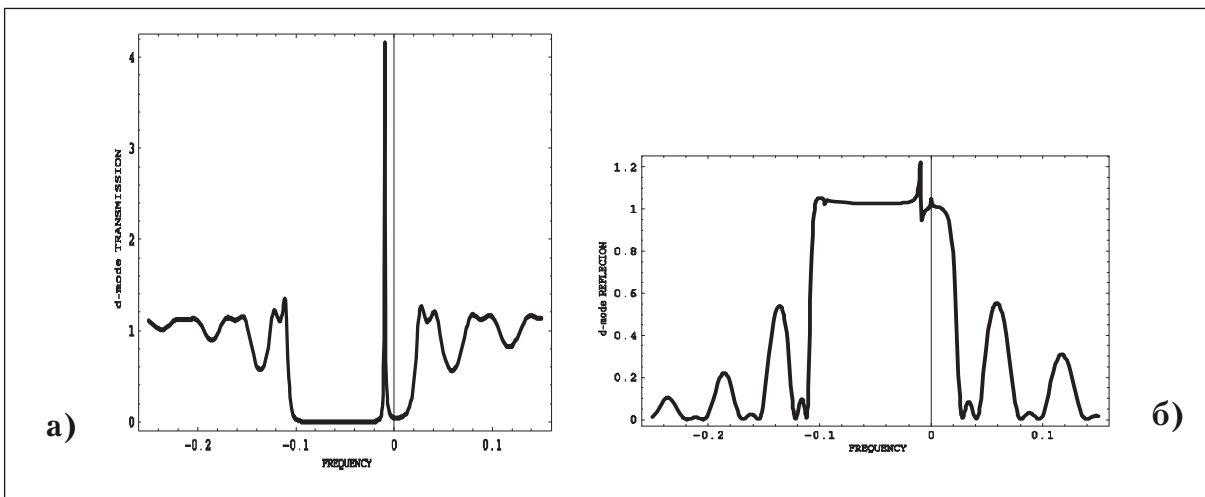


Рис. 27

значения γ обнаруживается, что возникают максимумы $|R(d, L)|^2$, более удаленные от границы ОСО, соответствующие новым краевым модам с $n > 1$ (см. раздел **Локализованные краевые моды**).

Выявленные закономерности показывают, что **порог лазерной генерации на частоте дефектной моды оказывается ниже, чем соответствующий порог на частоте краевой моды**. Другой вывод состоит в том, что **существует определенная взаимосвязь между пороговым γ и параметрами жидкого кристалла**, которая для случая толстых ХЖК слоев была найдена аналитически (для DM см. (57)) и для EM (см. (27)). Действительно, при непрерывном увеличении γ результатом оказывается последовательное возникновение лазерной генерации на частотах новых краевых мод с исчезновением генерации на предыдущих модах, с меньшим n , соответствующих генерации с более низким порогом.

Чтобы найти обсуждаемую связь между пороговым γ и параметрами жидкого кристалла следует решить дисперсионное уравнение для DM (41) в предположении, что ХЖК слои являются усиливающими ($\gamma < 0$). В общем случае для этого следует применять численные методы. Однако, в случае толстых ХЖК слоев ($|q|L \gg 1$) зависимость порогового γ от L и других параметров может быть найдена аналитически. Например, если ω_D , частота DM, расположена в центре ОСО соответствующая связь порогового γ с другими параметрами дается формулой:

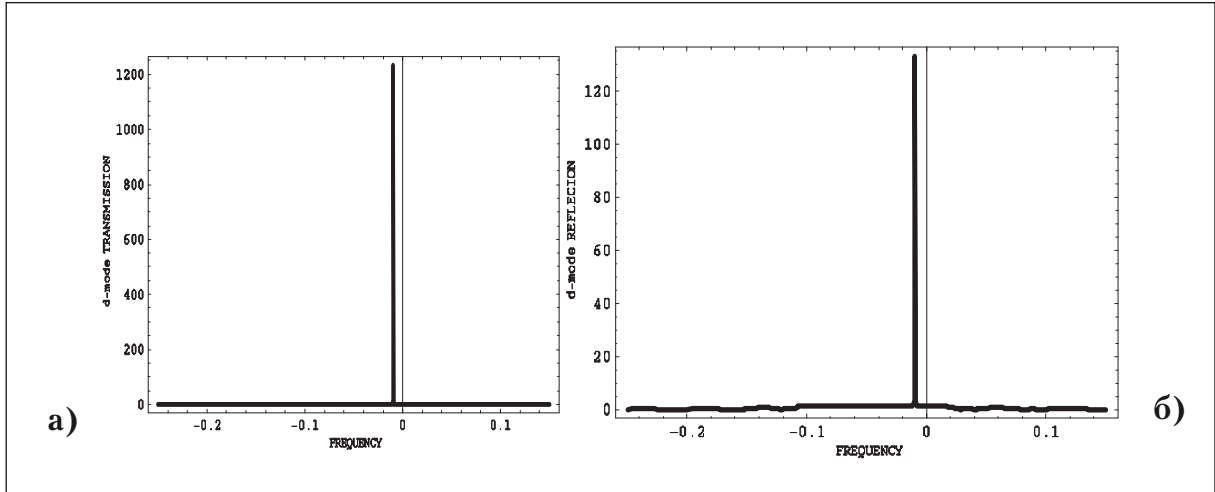


Рис. 28

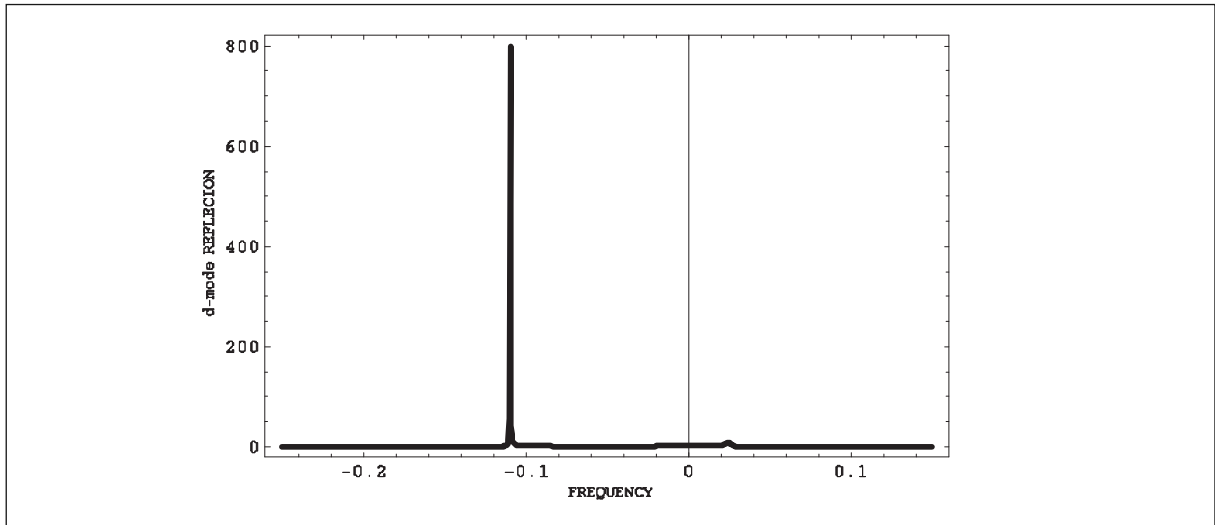


Рис. 29

$$\gamma = -(4/3\pi)(p/L) \exp[-2\pi\delta(L/p)], \quad (58)$$

которая только знаком отличается от выражения (57). Следующая из (58) экспоненциальная малость $|\gamma|$ в случае толстых ХЖК слоев подтверждает сделанное выше утверждение, о более низком пороге лазерной генерации на частоте ДМ, чем на частоте ЕМ. Действительно, как было показано выше, лазерный порог на частоте ЕМ $|\gamma|$ для толстых ХЖК слоев уменьшается не экспоненциально с ростом толщины ХЖК слоя L , а только обратно пропорционально третьей степени L .

4.4. ДМС с активным дефектным слоем

Пока что мы считали, что дефектный слой в ДМС является слоем изотропного материала. Такая ситуация вполне типична, однако встречаются ситуации, в которых это предположение не соблюдается, так как дефектный слой обладает двупреломлением, либо может быть поглощающим или усиливающим. Например, последняя возможность может быть актуальной для РОС лазерной генерации в ситуациях, когда краситель (основной элемент активной среды) проще вводить в материал дефектного слоя, чем в ХЖК слои ДМС [11, 14-17]. Поэтому ниже будет рассмотрена ДМ в ДМС с активным дефектным слоем. Начнем со случая двупреломляющего дефектного слоя в ДМС [15, 16].

4.4.1 Дефектная мода на двупреломляющем дефектном слое

Чтобы описать ДМ в случае двупреломляющего дефектного слоя в ДМС (рис. 15) требуется решить Уравнения Максвелла и граничную задачу, соответствующую рис. 11 с двупреломляющим дефектным слоем. Соответствующая задача решается аналогично тому, как это было сделано в предыдущих разделах для случая изотропного дефектного слоя с сохранением всех основных предположений принятых там. Поэтому, не повторяя подробно выводы формул предыдущих разделов, приведем соответствующие формулы для рассматриваемого случая, включая в них некоторые физически ясные поправки, относящиеся к случаю двупреломляющего дефектного слоя в ДМС. Теперь справедливое выше предположение об отсутствии преобразования круговой дифрагирующей поляризации в ДМС (обязанное тому, что усредненная диэлектрическая проницаемость ХЖК ϵ_0 совпадает как с диэлектрической проницаемостью дефектного слоя, так и с диэлектрической проницаемостью среды вне ДМС) и достаточно принимать во внимание только дифрагирующую круговую поляризацию оказывается нарушенным. Действительно, благодаря двупреломлению дефектного слоя поляризация света, вообще говоря, изменяется в ходе его распространения от одной поверхности дефектного слоя до другой его поверхности и поляризация света после прохождения дефектного слоя отличается от поляризации света на его входе в дефектный слой. Поэтому в ДМС оказывается представленной волна недифрагирующей поляризации и происходит утечка из структуры света недифрагирующей поляризации. Естественным следствием этой утечки оказывается, в общем случае, уменьшение времени жизни ДМ в случае ДМС с двупреломляющим дефектным слоем.

Как мы видели выше, спектры пропускания $|T(d,L)|^2$ и отражения $|R(d,L)|^2$ ДМС содержат богатую информацию о ДМ. Поэтому приведем выражения для этих величин в случае ДМС с двупреломляющим дефектным слоем. В пренебрежении многократным рассеянием света недифрагирующей поляризации в ДМС для света дифрагирующей поляризации коэффициенты пропускания $|T(d,L)|^2$ и отражения $|R(d,L)|^2$ ДМС с двупреломляющим дефектным слоем даются формулами:

$$|T(d,L)|^2 = | [T_e T_d M(k,d,\Delta n)(\sigma_e \sigma_{ed}^*)] / [1 - M^2(k,d,\Delta n)(\sigma_r \sigma_{ed}^*)^2 (R_d R_u)] |^2, \quad (59)$$

$$|R(d,L)|^2 = | \{ R_e + R_d T_e T_u M^2(k,d,\Delta n) | (\sigma_e \sigma_{ed}^*) |^2 / [1 - M^2(k,d,\Delta n) | (\sigma_r \sigma_{ed}^*)^2 R_d R_u] \} |^2, \quad (60)$$

где σ_e , σ_r и σ_{ed} – это вектора поляризации света, выходящего в дефектный слой из ХЖК слоя через внутреннюю поверхность ХЖК слоя, отраженного от внутренней нижней границы ХЖК слоя при падении на нее света из дефектного слоя и света, чей вектор поляризации σ_{ed} преобразуется в вектор поляризации σ_e при прохождении двупреломляющего дефектного слоя толщины d , соответственно, Δn – разность двух показателей преломления в двупреломляющем дефектном слое и $M(k,d,\Delta n)$ – фазовый фактор, определяемый разностью фаз пучков света двух собственных линейных поляризаций при прохождении двупреломляющего дефектного слоя толщины d . При получении (59, 60) предполагалось, что внешний пучок падает на ДМС (рис. 11) сверху. При наличии границы ХЖК слоев с двупреломляющим дефектным слоем при прохождении (отражения от) этой границы из ХЖК слоя света дифрагирующей круговой поляризации его поляризация перестает быть чисто круговой дифрагирующей поляризацией. Соответствующий вектор поляризации может быть найден [5-8] так же, как и вектор поляризации σ_{ed} , если известны d и Δn . То же самое может быть сказано о поляризации внешнего пучка света, который возбуждает в ДМС только дифрагирующие собственные волны ХЖК при своем падении на ДМС. Соответствующую поляризацию

внешнего пучка света будем называть далее дифрагирующей поляризацией. Поляризацию, ортогональную дифрагирующей поляризации будем называть недифрагирующей поляризацией. Свет недифрагирующей поляризацией при своем падении извне на ДМС возбуждает в ХЖК слоях только недифрагирующие собственные волны. Вектора поляризации σ_e , σ_r и σ_{ed} могут быть представлены в виде:

$$\sigma_i = (\cos \alpha_i \mathbf{e}_x + e^{i\beta} \sin \alpha_i \mathbf{e}_y), \quad (61)$$

где $\mathbf{e}_x$ и $\mathbf{e}_y$ являются единичными векторами вдоль осей x и y , а α_i , β_i — параметры, определяющие вид поляризации. Так, например, $\alpha_i = \pi/4$ и $\beta_i = \pi/2$ ($-\pi/2$) соответствуют правой (левой) круговой поляризации.

В общем случае отраженный и прошедший через ДМС пучки не обладают круговой дифрагирующей поляризацией в случае двупреломляющего дефектного слоя и поэтому в отраженном и прошедшем пучках света имеются составляющие с недифрагирующей поляризацией даже в случае падения на ДМС света с дифрагирующей круговой поляризацией. Пренебрегая многократным рассеянием света недифрагирующей поляризации, можно получить следующее выражение для коэффициентов отражения $R(d, L)^-$ и прохождения $T(d, L)^-$ света с недифрагирующей поляризацией (для падающего пучка с дифрагирующей круговой поляризацией):

$$\left| T(d, L)^- \right|^2 = \left| [T_e T_d \{M(k, d, \Delta n)(\sigma_e \sigma_{ed}^\perp)^* + (\sigma_r \sigma_{ed}^*)(\sigma_e \sigma_{ed}^*)(\sigma_r \sigma_{ed}^\perp)^* M^2(k, d, \Delta n) / [1 - M^2(k, d, \Delta n)(\sigma_r \sigma_{ed}^*)^2 R_d R_u]\} \right|^2, \quad (62)$$

$$\left| R(d, L)^- \right|^2 = \left| \{R_e^- + R_d T_e T_u M^2(k, d, \Delta n) (\sigma_e \sigma_{ed}^*)(\sigma_r \sigma_{ed}^\perp)^* / [1 - M^2(k, d, \Delta n)(\sigma_r \sigma_{ed}^*)^2 R_d R_u]\} \right|^2, \quad (63)$$

где R_e^- — это коэффициент отражения от слоя ХЖК света недифрагирующей поляризации с учетом диэлектрической границы при падении света дифрагирующей поляризации, T^- — коэффициент прохождения слоя ХЖК света недифрагирующей поляризации с учетом диэлектрической границы при падении света дифрагирующей поляризации и $\sigma_{ed}^\perp$ — вектор поляризации, ортогональный вектору поляризации σ_{ed} . Заметим, что амплитудные коэффициенты прохождения T_d^- и T_u^- равны приблизительно $\exp[ikL n_0 / n_0]$, где n_0 — показатель преломления света недифрагирующей поляризации в слое ХЖК.

Вычисление коэффициентов отражения и прохождения по формулам (59-60, 62-63) может быть выполнено аналитически в общем случае, однако оказывается очень громоздким. Поэтому ниже обсуждается в деталях случай малого двупреломления и представлены выражения для $\left| T(d, L)^- \right|^2$ и $\left| R(d, L)^- \right|^2$, учитывающие трансформацию поляризации только в дефектном слое и пренебрегающие трансформацией поляризации на диэлектрических границах.

При сделанных выше упрощениях и в предположении, что показатель преломления вне ДМС совпадает со средним показателем преломления ХЖК и что показатель преломления двупреломляющего дефектного слоя может быть представлен в виде

$$n_{\max} = n_0 + \Delta n / 2, \quad n_{\min} = n_0 - \Delta n / 2, \quad (64)$$

где n_0 совпадает со средним показателем преломления ХЖК, а Δn мало, фазовый фактор $M(k, d, \Delta n)$ может быть записан в следующем виде:

$$M(k, d, \Delta n) = \exp[ikd] \cos(\Delta \phi / 2), \quad (65)$$

где разность фаз двух составляющих пучка с различными собственными линейными поляризации на толщине дефектного слоя составляет $\Delta\varphi = \Delta nkd/n_0$.

Окончательно выражения для коэффициентов отражения и прохождения света с дифрагирующей круговой поляризацией для падающего пучка с дифрагирующей круговой поляризацией в случае малого двупреломления получаются подстановкой (65) в (59-60):

$$|T(d,L)|^2 = |T_e T_d \exp[ikd] \cos(\Delta\varphi/2) / [1 - \exp[i2kd] \cos^2(\Delta\varphi/2) R_d R_u]|^2, \quad (66)$$

$$|R(d,L)|^2 = \{R_e + R_d T_e T_u \exp[i2kd] \cos^2(\Delta\varphi/2) / [1 - \exp[i2kd] \cos^2(\Delta\varphi/2) R_d R_u]\}^2 \quad (67)$$

Уравнения (66, 67) показывают, что, если величина $\Delta\varphi/2\pi$ является целым числом, уравнения (66, 67) оказываются идентичными соответствующим уравнениям для ДМС с изотропным дефектным слоем (36, 37), так как в этом случае отсутствует конверсия дифрагирующей круговой поляризации в недифрагирующую круговую поляризацию, однако, если $\Delta\varphi/2\pi$ не является целым числом, происходит конверсия дифрагирующей круговой поляризации в недифрагирующую круговую поляризацию и, следовательно, имеет место утечка света из ДМС и, в частности, оказывается, что время жизни DM становится меньше, чем время жизни DM для соответствующей ДМС с изотропным дефектным слоем. Эта зависимость характеристик DM от разности фаз волн собственных поляризаций на толщине дефектного при их прохождении этого слоя открывает возможности для управления свойствами DM. Простейший такой способ связан с вариациями величины двупреломления или толщины дефектного слоя.

Конверсия поляризации света в ДМС приводит к появлению компонент недифрагирующей круговой поляризации в прошедшем ДМС и отраженном пучках. В случае малого двупреломления, который соответствует условию $\Delta n/n_0 < \delta$, амплитудные коэффициенты прохождения и отражения света недифрагирующей круговой поляризации (при падающем свете дифрагирующей круговой поляризации) описываются выражениями:

$$T(d,L)^- = [T_e \exp[ikLn/n_0] \exp[ikd] \sin(\Delta\varphi/2) / [1 - \exp[i2kd] \cos^2(\Delta\varphi/2) R_d R_u], \quad (68)$$

$$R(d,L)^- = \frac{1}{2} R_u T_e \exp[ikLn/n_0] \exp[i2kd] \sin(\Delta\varphi) / [1 - \exp[i2kd] \cos^2(\Delta nkd/2n_0) R_d R_u], \quad (69)$$

где n_- – коэффициент преломления света недифрагирующей круговой поляризации в слое ХЖК.

Результаты вычисления коэффициента прохождения $|T(d,L)|^2$ света дифрагирующей круговой поляризации в случае слабого двупреломления представлены на рис. 30 ($N=33$, $d/p=0,25$) для нескольких различных значений разности фаз $\Delta\varphi$ соответствующего однократному прохождению пучка через двупреломляющий дефектный слой. Рис. 30 ($\Delta\varphi = \pi/20$ (а); $\pi/16$ (b); $\pi/12$ (c); $\pi/8$ (d); $\pi/6$ (e); $\pi/4$ (f); $\pi/2$ (g); 0 (h)) демонстрирует, что при малых значениях фазового сдвига между собственными волнами дефектного слоя при однократном прохождении пучка через двупреломляющий дефектный слой ($\Delta\varphi < \pi/2$) форма кривой пропускания очень близка к форме соответствующей кривой для ДМС с изотропным дефектным слоем (для $\Delta\varphi/2\pi$, равном целому числу или нулю она просто совпадает с кривой для ДМС с изотропным дефектным слоем). Однако, при приближении $\Delta\varphi$ к $\pi/2$ (см. рис. 34 e-g) типичное для случая изотропного

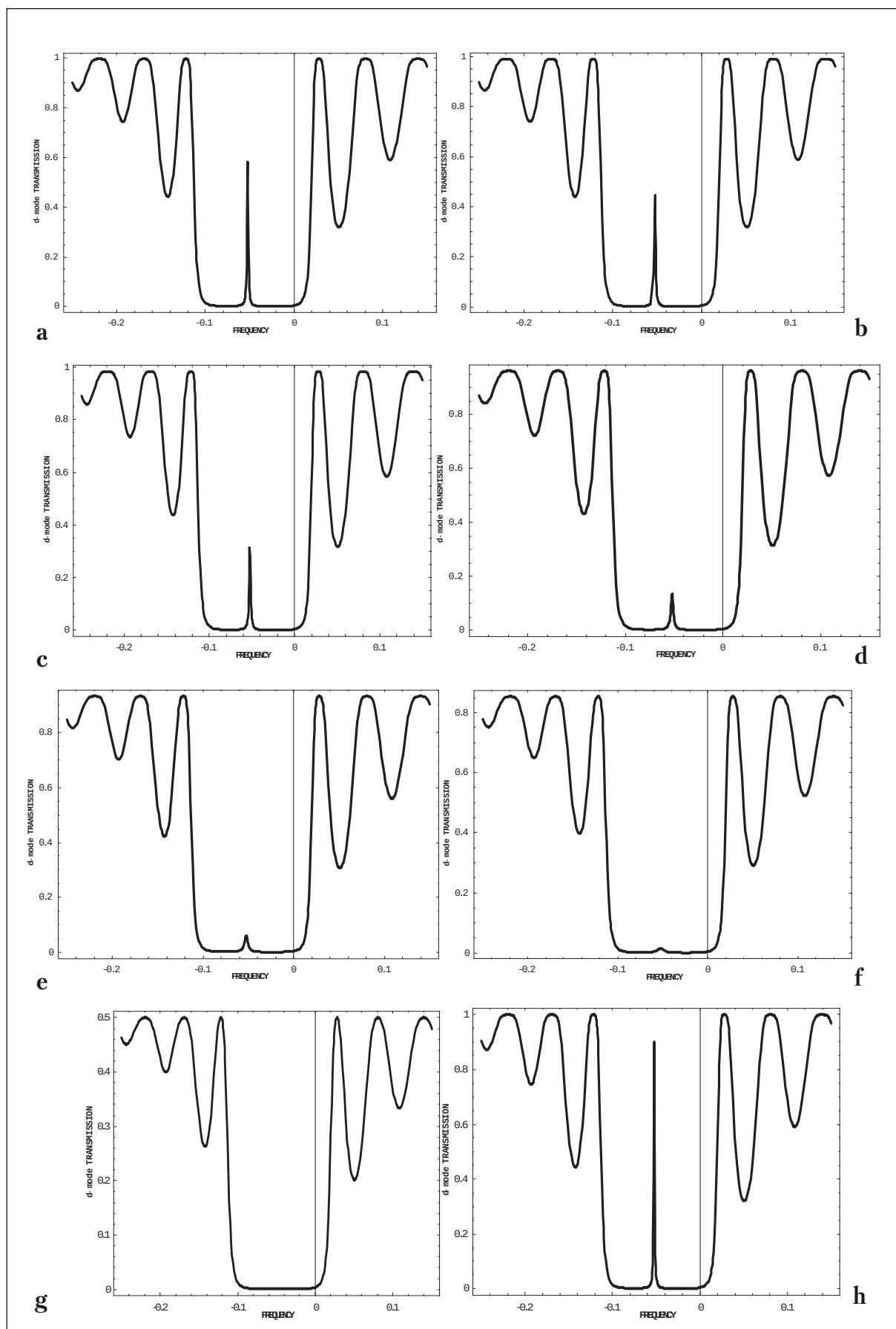


Рис. 30

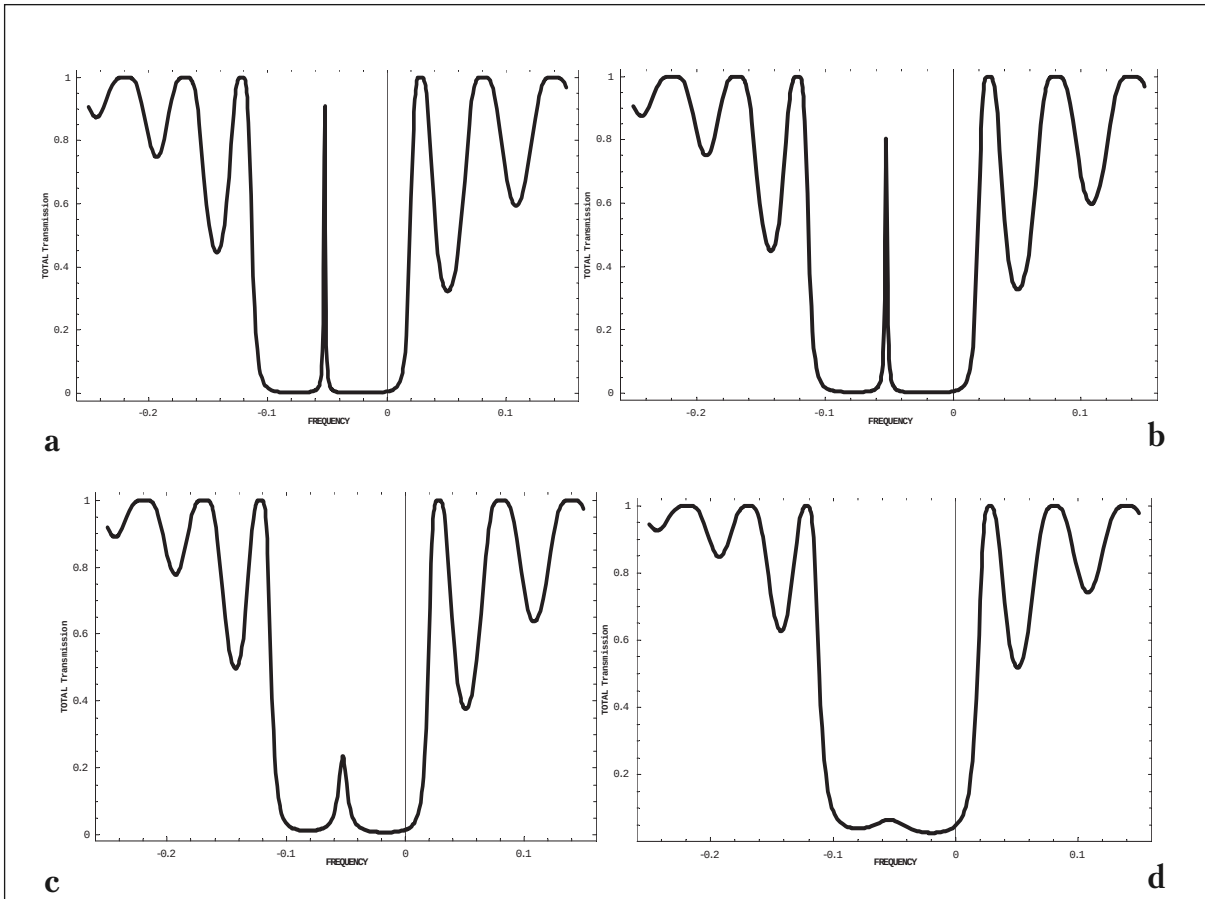


Рис. 31

дефектного слоя увеличение коэффициента пропускания на частоте DM постепенно исчезает и при $\Delta\varphi = \pi/2$ (рис. 34(g)) вообще не проявляется себя.

Это, в частности, может быть воспринято как указание на то, что время жизни DM уменьшается с увеличением разности фаз двух собственных волн при их прохождении дефектного слоя, и, начиная с некоторого значения этой разности фаз DM вообще не существует.

Если учесть частичную конверсию света дифрагирующей поляризации в свет недифрагирующей поляризации, ситуация не изменяется коренным образом. Действительно, представленные на рис. 31 ($N=33$, $d/p=0,25$, $\Delta\varphi = \pi/20$ (a); $\pi/12$ (b); $\pi/4$ (c); $\pi/2$ (d)) спектры пропускания для суммарной интенсивности света, проходящего через ДМС (сумма интенсивностей свет для обеих круговых поляризаций, вычисленная с использованием (68, 69)) выявляет сохранение общего уменьшения пропускания на частоте DM ω_d при увеличении $\Delta\varphi$, однако более медленное, чем для дифрагирующей поляризации, и только при $\Delta\varphi$ близком к $\pi/2$ наступает практическое отсутствие пропускания (это демонстрирует конверсию света дифрагирующей поляризации в свет недифрагирующей поляризации в двупреломляющем дефектном слое). Как было показано выше, положение частоты DM ω_d в ОСО определяется частотой максимума (минимума) в пропускании (отражении) ДМС, поэтому представленные на рис. 34, 35 спектры пропускания позволяют определить действительную часть частоты DM. Однако, поскольку DM является квазистационарной модой ее частота комплексна и требуется еще определить мнимую составляющую частоты DM.

Прямой способ нахождения мнимой составляющей частоты DM – это решение дисперсионного уравнения для DM. Дисперсионное уравнение для DM в случае дву-

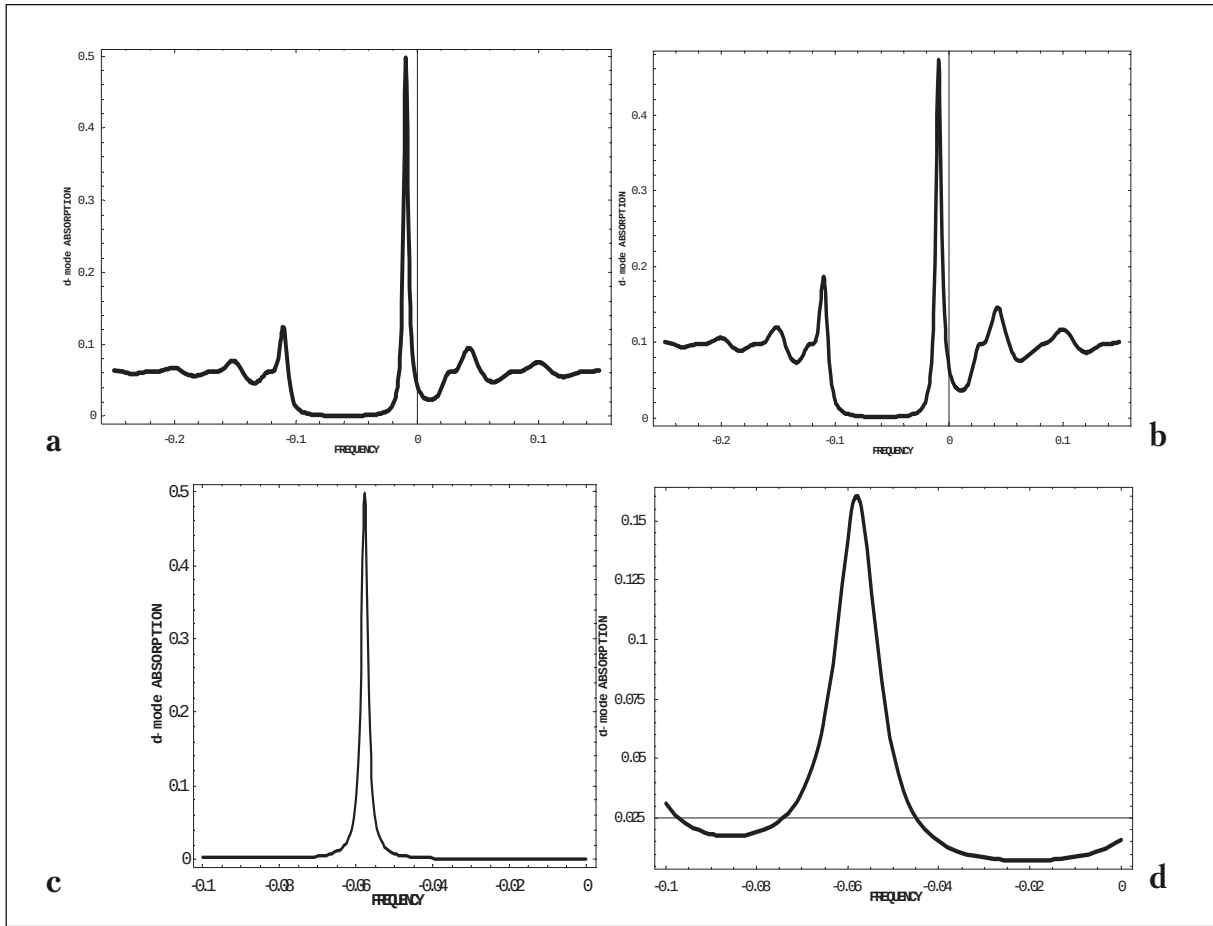


Рис. 32

преломляющего дефектного слоя может быть найдено аналогично случаю изотропного дефектного слоя. В пренебрежении многократным рассеянием света недифрагирующей поляризации в ДМС дисперсионное уравнение для DM в случае двупреломляющего дефектного слоя имеет вид:

$$\{M^2(k,d,\Delta n)\sin^2 qL - \exp(-i\tau L)[(\tau q/\kappa^2)\cos qL + i((\tau/2\kappa)^2 + (q/\kappa)^2 - 1)\sin qL]^2/\delta^2\} = 0. \quad (70)$$

В общем случае решение уравнения (70) требует применения численных методов так же, как решение уравнения (41) для ДМС с изотропным дефектным слоем. Некоторые упрощения уравнения (70) имеют место в случае малого двупреломления дефектного слоя, когда фазовый фактор $M(k,d,\Delta n)$ в (70) определяется выражением (65).

В случае поглощающих (усиливающих) ХЖК слоев в ДМС с двупреломлением дефектного слоя проявляются обсуждавшиеся выше эффекты аномально сильного поглощения (усиление), однако, вообще говоря, их проявление оказывается ослабленным по сравнению со случаем изотропного дефектного слоя.

4.4.2. DM на поглощающем (усиливающем) дефектном слое

В настоящем разделе будут рассмотрены DM в ДМС с поглощающими и усиливающими дефектными слоями и совершенными непоглощающими ХЖК слоями [11, 17]. Мотивацией рассмотрения DM в таких структурах, кроме общефизического интереса, являются исследования по лазерной РОС генерации в фотонных кристаллах. Так, например, введение красителя (активной среды для лазерной генерации) в ХЖК

часто сталкивается с проблемой плохой растворимости красителя в жидком кристалле. Трудности могут существенно уменьшиться, если вводить краситель в изотропную жидкость – проблема растворения красителя в изотропной жидкости, как правило, решается гораздо проще. Поэтому в исследованиях по лазерной РОС генерации в ХЖК используют ДМС с поглощающими и усиливающими жидкими дефектными слоями, в которые введен краситель, т.е. дефектный слой в такой ДМС является поглощающим или усиливающим изотропным дефектным слоем. Задачу о ДМ в таких структурах надо решать аналогично рассмотренному выше случаю изотропного дефектного слоя. При этом (см. рис. 11) ХЖК слои следует считать непоглощающими, требуется только учесть, что дефектный слой обладает поглощением (усилением), индуцированным красителем.

Результатом такого рассмотрения при тех же допущениях и обозначениях, что и выше, являются следующие выражения для коэффициентов отражения и пропускания рассматриваемой ДМС:

$$|T(d,L)|^2 = |T_e T_d \exp(ikd(1+ig)) / [1 - \exp(2ikd(1+ig)) R_d R_u]|^2, \quad (71)$$

$$|R(d,L)|^2 = |\{R_e + R_u T_e T_u \exp(2ikd(1+ig)) / [1 - \exp(2ikd(1+ig)) R_d R_u]\}|^2, \quad (72)$$

Выражения (71, 72) отличаются от соответствующих выражений (36, 37) для случая непоглощающего изотропного дефектного слоя тем, что толщина слоя d в них входит умноженной на фактор $(1+ig)$. Малая величина g описывает здесь поглощение (усиление) в изотропном дефектном слое, так как диэлектрическая проницаемость поглощающего (усиливающего) дефектного слоя ϵ связана с ней следующим соотношением $\epsilon = \epsilon_0(1+2ig)$ с положительным g для поглощающего дефектного слоя и отрицательным g для усиливающего слоя.

ω_D , частота ДМ определяется следующим дисперсионным уравнением:

$$\{\exp(2ikd(1+ig))\sin^2 qL - \exp(-i\tau L)[(\tau q/\kappa^2)\cos qL + i((\tau/2\kappa)^2 + (q/\kappa)^2 - 1)\sin qL]^2 / \delta^2\} = 0. \quad (73)$$

Частота ДМ ω_D оказывается комплексной величиной, которая определяет время жизни ДМ и может быть найдена численным решением уравнения (74). Отметим, что при стремлении толщины ХЖК слоев к бесконечности мнимая составляющая частоты ДМ не обращается в ноль в отличие от случая непоглощающего дефектного слоя. Это связано с тем, что в рассматриваемом случае затухание поля ДМ происходит не только за счет утечки энергии через поверхности ДМС, но и за счет поглощения в дефектном слое, которое не определяется толщиной ХЖК слоев. Сказанное означает, что независимо от толщины ХЖК слоев время жизни ДМ в случае поглощающего дефектного слоя остается конечным. Для очень малых величин параметра g спектры отражения и прохождения ДМС очень близки к соответствующим спектрам ДМС с непоглощающим дефектным слоем (см. рис. 13-15). В частности, положение провалов в отражении и максимумов пропускания внутри ОСО как раз соответствует значению действительной части частоты ДМ $\text{Re}[\omega_D]$ и это обстоятельство очень полезно при численном решении дисперсионного уравнения (74). Что касается времени жизни ДМ, то оно уменьшается для случая поглощающего дефектного слоя по сравнению со случаем непоглощающего дефектного слоя.

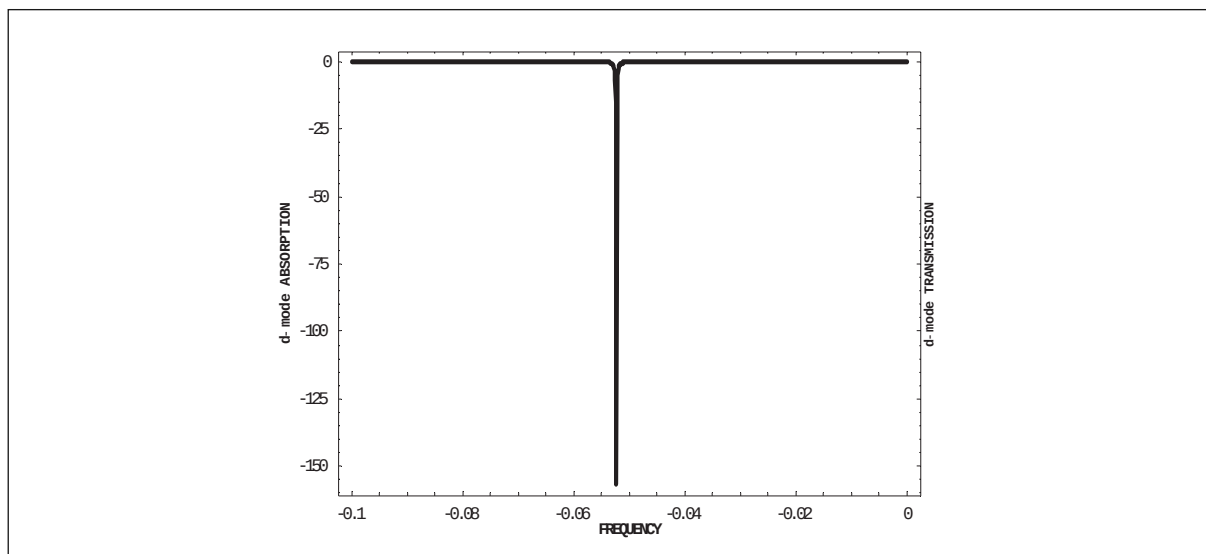


Рис. 33

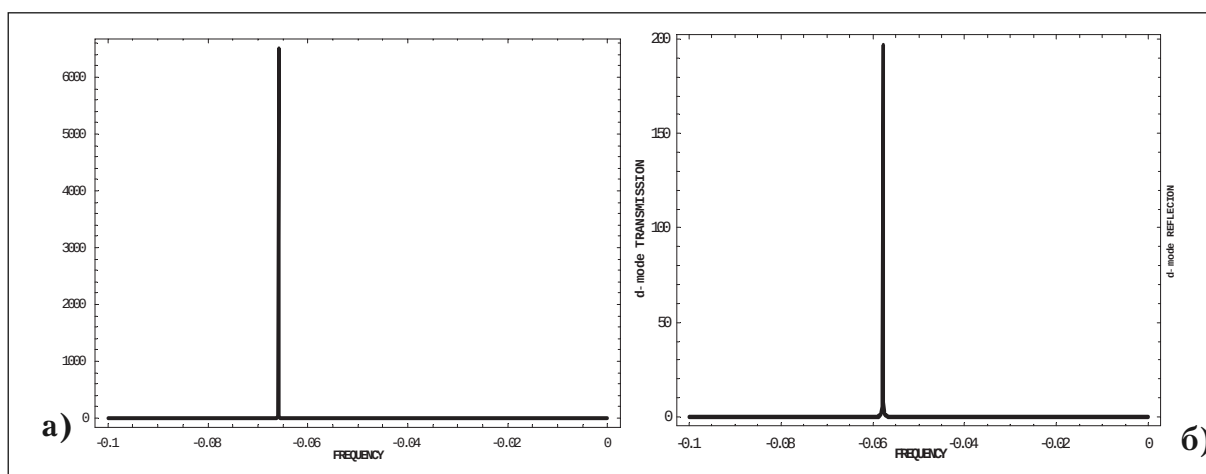


Рис. 34

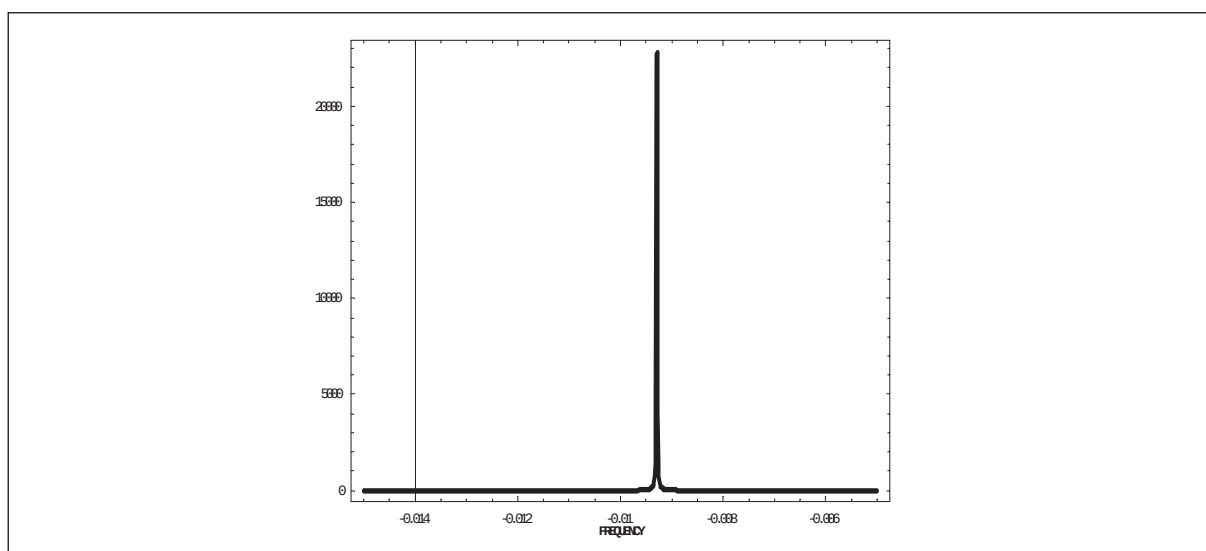


Рис. 35

4.4.3 Поглощающий дефектный слой

Так же, как и в случае рассмотренных выше ДМС с поглощающими ХЖК слоями в ДМС с поглощающими дефектными слоями реализуется эффект аномально сильного поглощения. Эффект обнаруживается на частоте ДМ и достигает своего максимума (максимума $1 - |T(d,L)|^2 - |R(d,L)|^2$) для определенного значения g , которое может быть найдено из выражений (71, 72) для $|T(d,L)|^2$ и $|R(d,L)|^2$. Рис. 36 ($N=33$) демонстрирует эффект аномально сильного поглощения. Как следует из Рис.36 ($d/p=0,1$: $g=0,04976$ (a), $g=0,08$ (b); $d/p=22,25$: $g=0,00008891$ (c), $g=0, 0,0008891$ (d)), g , соответствующее максимальной величине аномального поглощения (максимум $1 - |T(d,L)|^2 - |R(d,L)|^2$), зависит от отношения толщины слоя к шагу ХЖК d/p и для двух различных значениях отношения d/p достигается при $g=0.04978$ и $g=0.00008891$

В случае толстых ХЖК слоев ($|q| L \gg 1$) в ДМС величина g , обеспечивающая максимум поглощения может быть найдена аналитически:

$$g_t = (L/d)[2\kappa^2/(q^2\tau L)]\exp[-2|q|L] \{1 + \{1/(2[(\tau/\kappa)^2 + \delta^2]^{1/2}) - (\tau/2\kappa)^2\} / (1 - [(\tau/\kappa)^2 + \delta^2]^{1/2} + (\tau/2\kappa)^2)\}^{-1} \quad (74)$$

Для частоты ДМ ω_D , находящейся в середине ОСО, максимальное поглощение соответствует следующему значению g_t :

$$g_t = (2/3\pi)(p/d) \exp[-2\pi\delta(L/p)]. \quad (75)$$

Как показывают вычисления и формулы (74, 75), величина g , соответствующая максимуму поглощения, оказывается приблизительно обратно пропорциональной толщине дефектного слоя d .

4.4.4 УСИЛИВАЮЩИЙ ДЕФЕКТНЫЙ СЛОЙ

В случае ДМС с усиливающим дефектным слоем ($g < 0$) при некотором значении $|g|$ происходит расходимость коэффициентов отражения и пропускания [18]. Соответствующее значение g является порогом лазерной генерации. Значения порогов лазерной генерации могут быть найдены в численном подходе с использованием выражений (72, 73) для $|T(d,L)|^2$ и $|R(d,L)|^2$ или найдены приближенно путем построения графиков $|T(d,L)|^2$ и $|R(d,L)|^2$ для варьируемых g . Вторая возможность проиллюстрирована рис. 33-36 ($N=33$), на которых представлены “почти расходящиеся” значения $|T(d,L)|^2$, $|R(d,L)|^2$ или $(1 - |T(d,L)|^2 - |R(d,L)|^2)$ для ДМС с усиливающим дефектным слоем. И использованные значения g на рис. 33 ($d/p=0,25$, $g=-0,0065957$), рис. 34 ($d/p=2,25$, $g=-0,001000$ (a); ($d/p=22,25$, $g=-0,00008891$ (b)), рис. 35 ($d/p=0,01$, $g=-0,04978$)) близки к их пороговым значениям, обеспечивающим расходимости $|T(d,L)|^2$ и $|R(d,L)|^2$. Результаты вычислений также демонстрируют, что минимальные значения порогов $|g|$ соответствуют расположению ω_D как раз по середине ОСО и $|g|$ оказываются почти обратно пропорциональными толщине дефектного слоя. Действительно, рис. 33, 34 соответствуют значениям ω_D близким к середине ОСО и демонстрируют падение порога лазерной генерации с увеличением толщины дефектного слоя. Рис. 39 соответствует значению частоты ДМ ω_D вблизи границы ОСО и демонстрирует возрастание порога лазерной генерации с приближением значения частоты ДМ ω_D к границе ОСО.

Аналитический подход к проблеме для толстых ХЖК слоев в ДМС ($|q| L \gg 1$) приводит к аналогичным предсказаниям, а именно, значение пороговой величины g дается формулами (75, 76) с отрицательным знаком правой части соотношения. Для

толстых ХЖК слоев ДМС при ω_D в середине ОСО пороговое значение g дается выражением:

$$g_t = -(2/3\pi)(p/d) \exp[-2\pi\delta(L/p)]. \quad (76)$$

Так что, как следует из формулы (76), чем тоньше дефектный слой, тем больше оказывается пороговое значение g .

Аналогичный результат, как было показано выше, также относится и к эффекту аномально сильного поглощения (формулы (74, 75)). А именно, чем тоньше дефектный слой, тем больше оказывается значение $|g|$, обеспечивающее максимальное поглощение в ДМС с поглощающим дефектным слоем.

Заключение

Изложенная выше информация об оптических свойствах фотонных кристаллов (на примере фотонных жидких кристаллов) демонстрирует, как многообразны и порой неожиданны оказываются оптические эффекты, проявляющиеся в фотонных кристаллах. Основное качество жидких кристаллов, делающее их особенно привлекательными при изучении оптики фотонных кристаллов и приводящее к многочисленным приложениям ЖК, это их податливость к внешним относительно слабым воздействиям и, как следствие, возможность легко изменять их оптические характеристики. Весьма существенным является то, что за изменениями оптических характеристик ЖК часто стоят фундаментальные общефизические эффекты, актуальные также для других разделов физики конденсированного состояния. Это сочетание прикладной и общефизической значимости оптики фотонных ЖК делает ознакомление с ней совершенно естественным и актуальным для специалистов смежных областей.

Полезно иметь ввиду, что общефизическая значимость ознакомления с оптикой фотонных кристаллов на примере ЖК связана также со следующим обстоятельством. Исследование некоторых явлений на примере ЖК, свойства которых легко поддаются изменениям под влиянием внешних воздействий, может рассматриваться как удобное модельное изучение явления в целом с целью оптимизации параметров для приложений с последующим использованием оптимизированной схемы на других объектах, предпочтительных в приложениях. Хорошим примером такого модельного использования ЖК являются исследования по РОС лазерам в холестериках, результаты которых переносятся на твердотельные РОС лазеры [3].

Существенным моментом для экспериментального наблюдения рассмотренных эффектов, в частности, эффекта аномально сильного поглощения волны накачки и аномально высокого усиления генерируемого лазерного излучения (понижение порога генерации) является требование высокого совершенства образца, такого, что в эксперименте наблюдаются осцилляции коэффициента отражения вне области селективного отражения (см. рис. 6). Недостаточное совершенство фотонного кристалла приводит к ослаблению эффекта аномально сильного поглощения. Аналогичное видимое ослабление эффекта аномально сильного поглощения может быть связанным с большой частотной шириной линии излучения волны накачки. В этом случае причиной видимого ослабления эффекта аномально сильного поглощения является происходящее в эксперименте усреднение по частоте в пределах ширины линии накачки выражений, описывающих эффект аномально сильного поглощения. Подобным образом несовершенство фотонного кристалла приводит к более слабому понижению порога лазерной генерации по сравнению со случаем совершенной структуры. Следует также отметить, что принятое выше предположение об отсутствии френелевского отражения на диэлектрических границах (равенство усредненной диэлектрической проницаемости

ХЖК диэлектрической проницаемости внешней среды) для своей реализации в эксперименте требует принятия специальных мер. Если же это условие не выполняется в эксперименте, отражения на диэлектрических границах приводит к частичному преобразованию дифрагирующей круговой поляризации в недифрагирующую, что также ослабляет эффект аномально сильного поглощения и изменяет поляризационные характеристики явления.

Надо также иметь в виду важное обстоятельство, что изложенные выше результаты для спиральных сред качественно справедливы для любых периодических сред, а аналитические формулы, относящиеся к спиральным средам, могут быть применены как полезное руководство для других периодических сред.

Немаловажно также то, что локализованные моды, рассмотренные здесь в приложении к РОС лазерам, проявляются и в других оптических явлениях. Например, в нелинейной оптике, проявляясь в повышении эффективности нелинейной генерации высших оптических гармоник и эффективности генерации Черенковского излучения в периодических средах [5].

В целом следует констатировать, что проведенное выше аналитическое рассмотрение проблемы локализованных мод в фотонных кристаллах проясняет физику локализованных мод и находится в полном согласии с соответствующими результатами, полученными в численном подходе к этой проблеме.

Работа поддержана грантами РФФИ № 12-02-01016-а, 14-02-92601-КО_а и 14-02-90008-Бел-а.

Литература

1. *Sakoda K.* Optical Properties of Photonic Crystals // Springer-Verlag, Berlin- Heidelberg, 2005.
2. *Шабанов В.Ф., Ветров С.Я., Шабанов А.В.* Оптика реальных фотонных кристаллов // Изд. СО РАН, Новосибирск, 2005.
3. *Манцизов Б.И.* Когерентная и нелинейная оптика фотонных кристаллов // ФИЗМАТЛИТ, М., 2009.
4. *Де Жен П.* Физика жидких кристаллов // М., Мир, 1977.
5. *Беляков В.А.* Дифракционная оптика периодических сред сложной структуры // М., Наука, 1988.
6. *Беляков В.А., Сонин А.С.* Оптика холестерических жидких кристаллов // М., Наука, 1982.
7. *Belyakov V.A., and Dmitrienko V.E.* Optics of Chiral Liquid Crystals // Harwood Academic Publisher, 1989, p.54 in Soviet Scientific reviews / Section A, Physics Reviews (ed. I.M.Khalatnikov), v.13, p.1-203.
8. *Belyakov V.A.* Diffraction Optics of Complex Structured Periodic Media // Springer-Verlag, New York, 1992.
9. *Звелто О.* Принципы работы лазеров (пер. с англ., 2 изд.) // МИР, М., 1984.
10. *Kopp V. I., Zhang Z.-Q., and Genack A. Z.* Lasing in chiral photonic structures // Prog. Quant. Electron., 2003, **27(6)**, 369.
11. *Belyakov V.A.* Localized Optical Modes in Optics of Chiral Liquid Crystals // in book (ed. by P.K.Choudry): New Developments in Liquid Crystals and Applications, Nova Publishers, New York, 2013, Chp. 7, p.199.
12. *Belyakov V.A., Semenov S.V.* Optical edge modes in photonic liquid crystals // JETP, 2009, **109**, 687.
13. *Belyakov V.A., Semenov S.V.* Optical defect modes in photonic chiral liquid crystals // JETP, 2011, **112**, 694.
14. *Song M.H., Park B., Takanishi Y., et al.* Defect modes in chiral liquid crystals with active defect layer // Jap.Jn.Appl.Phys., 2005, v.44, p.8165.
15. *Gevorgyan A.H., and Haratyunyan* Defect modes in chiral liquid crystals with a birefringent defect layer // Phys.Rev.E, 2007, **76**, 031701.
16. *Belyakov V.A.* Optical defect modes in chiral liquid crystals at birefringent defect layer // MCLC, 2012, **559**, 50.
17. *Belyakov V.A.* Optical defect modes in chiral liquid crystals at active defect layer // MCLC, 2012, **559**, 39.

LOCALIZED MODES IN OPTICS OF PHOTONIC LIQUID CRYSTALS

V.A. Belyakov

Landau Institute for Theoretical Physics, Moscow, Russia

bel1937@mail.ru

Received 10.04.2014

Optical properties of photonic crystals are studied with a special attention to the role of localized optical modes. It is why the presentation of unusual properties of the localized optical modes in structures of finite size and their manifestation in the optics of photonic crystals and, in particular, in the distributed feedback lasing are the main subject of the paper. To be specific the presentation is performed for the spiral media. Namely, the analytic theory of chiral liquid crystals being nowadays a popular object for the linear and nonlinear optics investigations is presented.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В СЛОЖНЫХ БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ: ФЕРМЕНТАТИВНЫЙ ГИДРОЛИЗ ЦИКЛИЧЕСКОГО ДИГУАНОЗИНМОНОФОСФАТА

Б.Л. Григоренко^{1,2}, М.А. Князева¹, Е.В. Исаева¹,
Д.А. Новичкова¹, А.В. Немухин^{1,2}

¹*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
химический факультет*

²*Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН*

anemukhin@yahoo.com

Поступила 21.04.2014

Компьютерные реализации метода квантовой механики – молекулярной механики (КМ/ММ) позволяют моделировать все более сложные явления в наноразмерных молекулярных системах, включая химические реакции в белках. Иллюстрация возможностей современных приемов моделирования в приближении КМ/ММ дана на примере одной из важнейших биохимической реакций, а именно, реакции гидролиза циклического дигуанозинмонофосфата фосфодиэстеразами – ферментами, регулирующими концентрацию вторичных посредников при передачах сигналов в клетках. Кратко описаны оригинальные алгоритмы варианта КМ/ММ с конформационно-подвижными эффективными фрагментами. Рассчитанные структуры комплексов фермента с субстратом и продуктами реакции сопоставлены с результатами рентгеноструктурного анализа.

УДК 517.15

1. Введение

Предложенный лауреатами Нобелевской премии по химии за 2013 г. А. Варшелом, М. Левитом и М. Каплюсом метод квантовой механики – молекулярной механики (КМ/ММ) спустя примерно 35 лет после формулировки его основных идей (см. напр., [1]) становится чуть ли не рутинным способом моделирования свойств наноразмерных молекулярных систем. Основная идея комбинированного метода КМ/ММ – использо-

вать разные уровни описания сложной молекулярной системы, подразделив ее на подсистемы. Для подсистемы, представляющей наибольший интерес в конкретном приложении (КМ-подсистемы), энергии и силы, действующие на атомы, предполагается вычислять по уравнениям квантовой механики; для остальной части (ММ-подсистемы) – по уравнениям молекулярной механики (ММ). В приложении к важнейшим наноразмерным молекулярным системам – биомолекулам, метод КМ/ММ чаще всего применяется для расчетов энергетических профилей химических реакций в белках [2]. В этом случае к КМ-подсистеме относят те молекулярные группы (молекулы субстрата, боковые цепи аминокислотных остатков, молекулы воды, ионы металлов), которые предположительно вовлечены в химические превращения. Обычно в КМ-подсистему включают не более двух сотен атомов, а остальная часть белковой матрицы с числом атомов до нескольких тысяч относится к ММ-подсистеме. Другое важное направление моделирования методом КМ/ММ – расчеты биомолекулярных систем с учетом электронно-возбужденных состояний; в этом случае к КМ-области относят фоторецепторные молекулярные группы и их ближайшее окружение [3].

Во всех случаях расчеты проводят с использованием компьютеров, на которых должны быть установлены программы квантовой химии, молекулярной механики и интерфейсов, позволяющих сшивать численные решения на границе КМ- и ММ-областей. К настоящему времени известно множество вариантов метода КМ/ММ, различающихся и принципиальными вопросами, как-то трактовкой связи КМ- и ММ-областей, так и техническими характеристиками, в частности, на платформе какой базовой квантово-химической программы реализованы алгоритмы КМ/ММ. В наших работах мы опираемся на оригинальную версию метода КМ/ММ – на вариант с конформационно-подвижными эффективными фрагментами, особенности которого изложены в следующем разделе. Следует отметить, что теория потенциалов эффективных фрагментов [4] принципиально позволяет получать результаты, максимально приближенные к полностью квантовому описанию всей системы. В этом смысле она имеет преимущества перед схемами КМ/ММ механического или электронного внедрения [5], наиболее часто используемыми на практике.

В качестве иллюстрации применения постоянно совершенствующихся алгоритмов метода КМ/ММ, ориентированных на использование суперкомпьютеров, в разделе 3 приведены новые результаты моделирования для одной из важнейших биохимических реакций, а именно, реакции гидролиза циклического дигуанозинмонофосфата фосфодиэстеразами – ферментами, регулирующими концентрацию вторичных посредников при передачах сигналов в клетках. В данной работе обсуждаются лишь структурные аспекты моделирования – строение комплексов фермента с реагентами и продуктами, поскольку результаты компьютерного моделирования могут быть непосредственно сопоставлены с экспериментальными данными, полученными в рентгеноструктурных исследованиях.

2. Метод КМ/ММ с конформационно-подвижными эффективными фрагментами

Расчеты структур комплексов фермента фосфодиэстеразы с субстратом, молекулой дигуанозинмонофосфата (c-di-GMP), и продуктами реакции гидролиза, описанные в следующем разделе, были выполнены по компьютерным программам оригинальной версии [6,7] метода КМ/ММ на основе теории эффективных фрагментов [4].

Рис.1 иллюстрирует принципы подразделения молекулярной системы (в данном случае – лишь малой части всей модельной задачи) на КМ- и ММ-подсистемы в варианте конформационно-подвижных эффективных фрагментов. Для примера выбран один из участков большой молекулярной модели, построенной нами для моделирова-

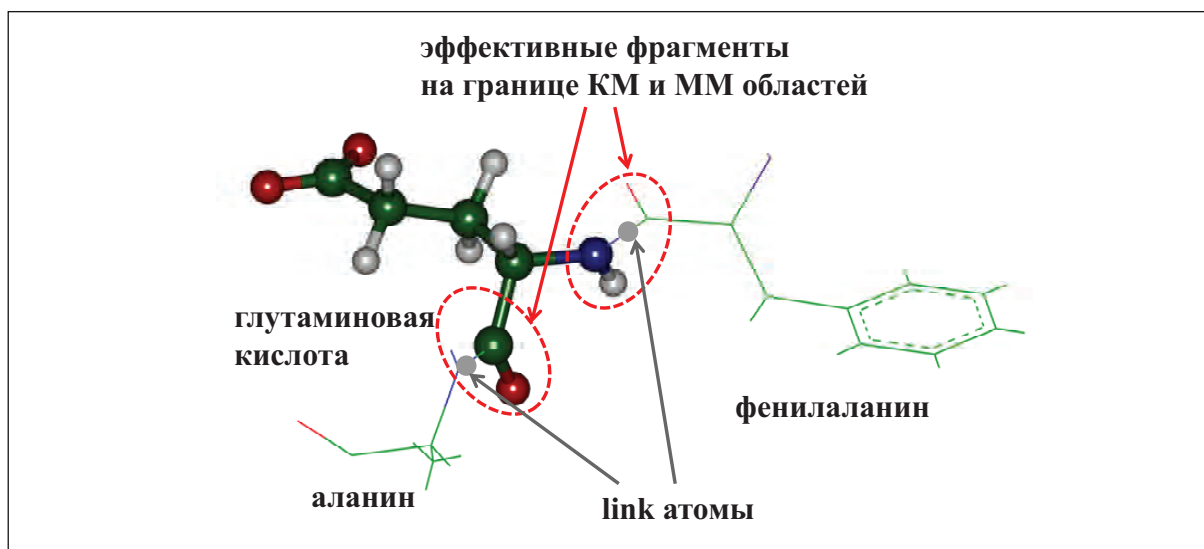


Рис. 1. Иллюстрация подразделения молекулярной системы на КМ- и ММ-подсистемы в варианте конформационно-подвижных эффективных фрагментов. Боковая цепь глутаминовой кислоты отнесена к КМ-части. В цветном изображении этого и следующих рисунков атомы углерода выделены зеленым цветом, кислорода – красным, азота – синим, фосфора – оранжевым, магния – пурпурным.

ния структур вдоль пути реакции. Более конкретно, показан трипептид Phe-Glu-Ala в пептидной цепи, в котором остаток глутаминовой кислоты (Glu) включен в КМ-часть, а остатки фенилаланина (Phe) и аланина (Ala) – в ММ-часть. На рис. 1 группы атомов, относящиеся к квантовой части, изображены шарами и стержнями, а группы ММ-части – линиями.

Под эффективным фрагментом [4] подразумевается группа атомов, внутренние координаты которых не меняются при всевозможных смещениях атомов в процессе поиска стационарных точек на поверхности потенциальной энергии. Другими словами, при переборе всех конформационных состояний биомолекулярной системы эффективные фрагменты перемещаются как твердые тела. Все пептидные цепи из ММ-части разбиваются на малые эффективные фрагменты (группы CH_2 , CH_3 , CONH , CO_2 и т.д.), которые в хорошем приближении могут считаться жесткими. Для примера, показанного на Рис.1, боковая цепь глутаминовой кислоты (шары и стержни) находится в квантовой подсистеме, а боковые цепи фенилаланина и аланина разбиваются на эффективные фрагменты. Электростатическое поле V_m каждого эффективного фрагмента m раскладывается в ряд по принципам мультипольного разложения вплоть до октуполей [8] и вносит вклад в квантовый гамильтониан КМ-части. В нашей реализации подхода КМ/ММ мультипольные моменты от каждого фрагмента предварительно вычисляются методами квантовой химии и содержатся в базе данных. При каждой новой конформации всей макромолекулярной системы, состоящей из КМ- и ММ-частей, пересчитываются координаты каждого атома КМ-части и каждого фрагмента ММ-части. Силы, действующие на каждый атом из КМ-подсистемы, складываются из компонентов, вычисляемых методами квантовой химии внутри КМ-части (с использованием известных пакетов программ GAMESS, NWChem, и т.д.), и вкладов от ММ-подсистемы, т.е. от добавок к матрице одноэлектронных интегралов (также вычисляемых методами квантовой химии внутри КМ-части) потенциалов фрагментов V_m . Силы, действующие на каждый атом из ММ-подсистемы, складываются от вкладов от КМ-подсистемы, действующих на каждый фрагмент, и от вкладов от взаимодействий внутри ММ-части; в последнем случае используются традиционные силовые поля (AMBER, CHARMM, и т.д.).

Особая роль отводится т.н. буферным эффективным фрагментам на границе КМ- и ММ-областей, явно выделенным на рис. 1; в данном случае это группы $-\text{CONH}-$. При проведении границы необходимо разорвать химические связи С-С и N-С внутри буферных фрагментов, но при использовании квантово-химических методик расчетов энергий и сил внутри КМ-части необходимо добавить на соответствующее направление вдоль разорванной связи т.н. связующий (link) атом. В нашей схеме в качестве link атомов используются атомы водорода.

Таким образом, для применения методики КМ/ММ для сканирования поверхностей потенциальной энергии макромолекулярной системы и определения координат стационарных точек, т.е. точек минимумов, отвечающих реагентам, продуктам, интермедиям реакций, или седловых точек, отвечающих переходным состояниям, необходимо выполнить следующие действия.

(1) Сконструировать модельную макромолекулярную систему и задать начальные координаты каждого атома. Как правило, хорошим стартовым набором являются координаты тяжелых атомов белковых молекул, содержащиеся в базе данных белковых структур (Protein Data Bank).

(2) Провести разбиение системы на КМ- и ММ-части. Эта часть проекта является достаточно важной, поскольку увеличение размера КМ-подсистемы, хоть и желательно, но сопровождается увеличением вычислительных затрат.

(3) Выбрать квантово-химический метод расчета энергий и сил в КМ-части. В настоящее время вычисления для основного электронного состояния проводят в рамках теории функционала электронной плотности с базисами не ниже двухэкспонентных наборов с поляризационными функциями на тяжелых атомах. При общем числе атомов в КМ-подсистеме порядка 100, числе базисных функций до 1000 и выборе традиционных функционалов плотности расчеты вполне осуществимы, если пользоваться современными суперкомпьютерными комплексами.

(4) Подразделить пептидные цепи ММ-подсистемы на фрагменты и обеспечить доступ к базе данных потенциалов эффективных фрагментов.

(5) Выбрать библиотеку параметров силовых полей для вычислений энергий и сил в ММ-подсистеме.

(6) Если задачей является установление механизма реакции ферментативного катализа, определить возможную координату реакции, вдоль которой будет оцениваться энергетический профиль.

В следующем разделе описано применение данной программы действий для анализа конкретной биохимической системы.

3. Структуры реагентов и продуктов при реакции гидролиза c-di-GMP, катализируемой фосфодиэстеразами.

Химическая формула циклического дигуанозинмонофосфата (c-di-GMP), субстрата интересующей нас ферментативной реакции, приведена на рис. 2.

На рис. 3 изображена молекулярная модель (шарами и стержнями) молекулы c-di-GMP и проиллюстрирована схема химической реакции: молекула воды атакует атом фосфора (показано жирной черной стрелкой на рисунке), что приводит к разрыву связи P-O3'. Продуктом реакции является нециклическая молекула, называемая pGrG, изображенная на рис. 4.

Следует отметить два обстоятельства: (1) моделирование подобной реакции традиционными методами квантовой химии для 70-атомной системы даже без учета белкового окружения представляет крайне ресурсоемкую задачу; (2) учет белковой матрицы, охватывающей реагенты (Рис.3) и продукты (Рис.4), является абсолютно необходимым, поскольку реакция взаимодействия субстрата с молекулой воды в условиях газовой фазы будет проходить совершенно по другому сценарию, нежели в белке.

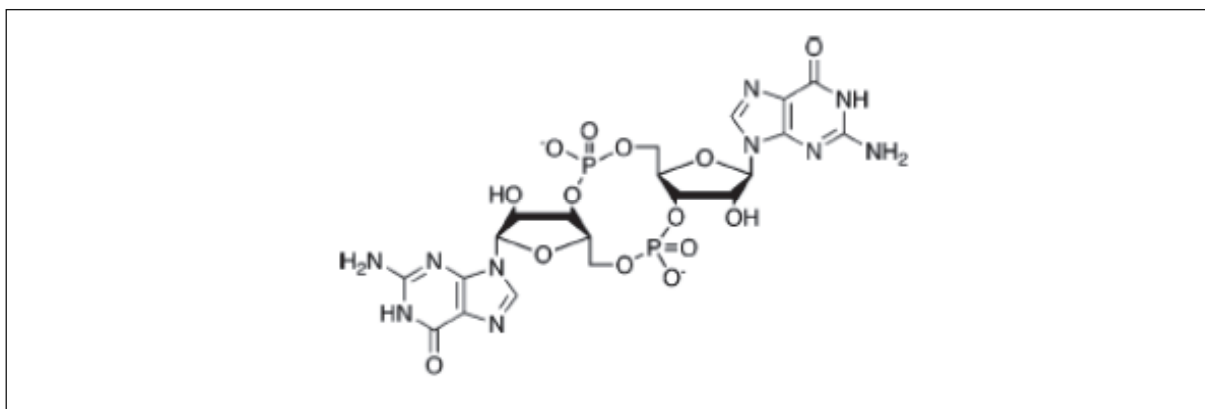


Рис. 2. Химическая формула циклического дигуанозинмонофосфата (c-di-GMP).

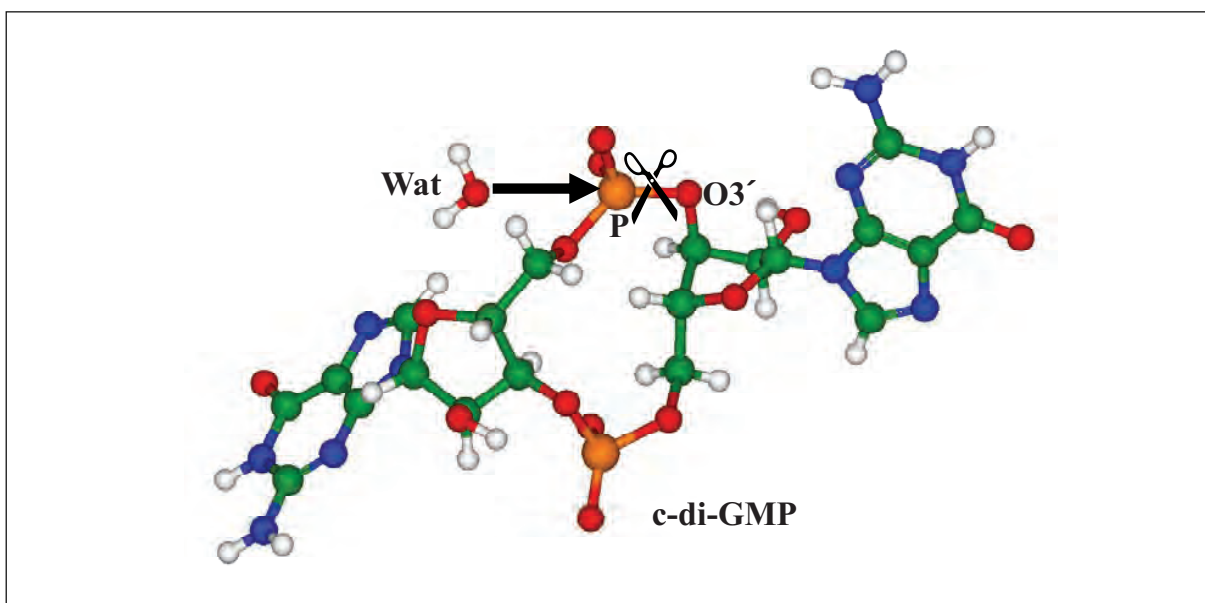


Рис. 3. Иллюстрация молекулярной модели реакции гидролиза c-di-GMP.

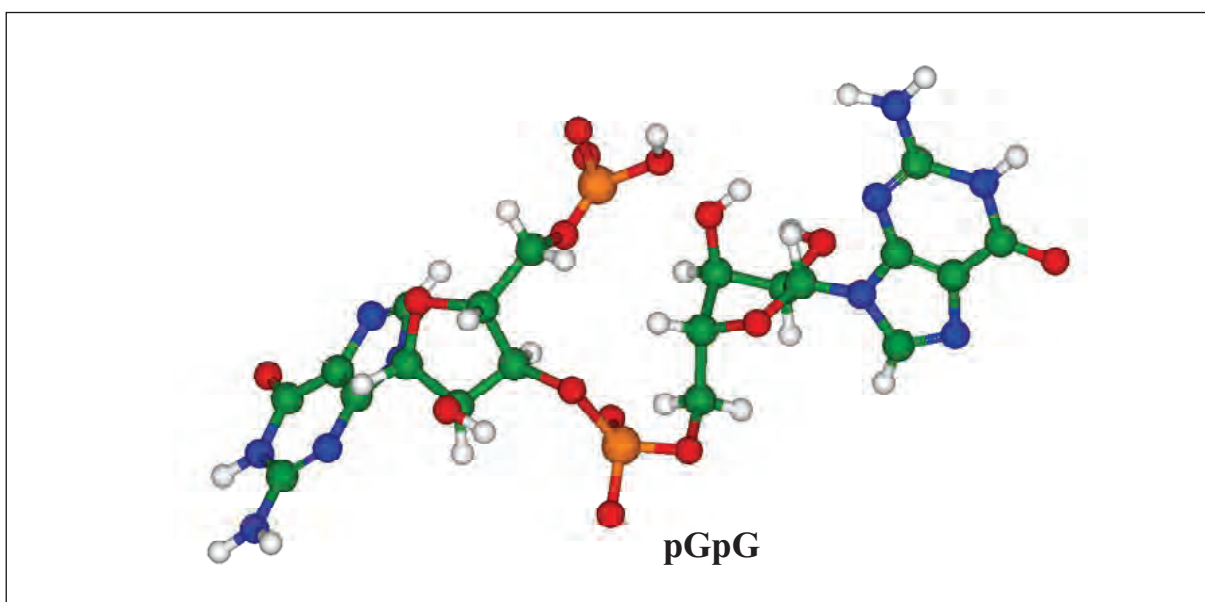


Рис. 4. Продукт реакции гидролиза молекулы c-di-GMP.

Реакции гидролиза, приводящие к преобразованию циклических форм как мономерного гуанозинмонофосфата (с-GMP), так и димерного дигуанозинмонофосфата (с-di-GMP) в соответствующие нециклические формы, осуществляются ферментами семейства фосфодиэстераз, активный центр которых включает т.н. EAL домен [9,10], содержащий консервативные аминокислотные остатки E(Glu), A(Ala) и L(Leu). Кристаллографические структуры бактериальных белков с EAL доменом стали доступными лишь в последнее время, напр. [11,12]. Характерная структура многодоменного белка BlrP1 с EAL доменом (PDBid:3GG0) [12] показана на рис. 5.

Авторам работы [12] удалось закристаллизовать и расшифровать структуру фермента вместе с молекулой субстрата с-di-GMP, тяжелые атомы которой показаны шарами на рис. 5. Анализ этой структуры дает подсказку относительно выбора КМ-подсистемы для компьютерных расчетов, проводимых с целью установить механизм реакции гидролиза.

При построении модели для расчетов за основу были взяты координаты тяжелых атомов структуры PDBid:3GG0 [12]. После добавления атомов водорода в предположении общепринятого состояния протонирования полярных аминокислотных остатков, приводящего к отрицательно заряженным боковым цепям Asp, Glu и положительно заряженным Lys, Arg, и предварительной оптимизации координат методом молекулярной механики, система была подразделена на КМ и ММ части. В КМ подсистему были включены все атомы субстрата (рис. 2, 3), боковые цепи Asp302, Asp303, Glu359 (по нумерации PDBid:3GG0), катионы магния и 12 молекул воды. Модельная система проиллюстрирована на рис.6; для того чтобы не перегружать рисунок явно показана только одна молекула воды, которой по результатам моделирования отведена роль нуклеофильного агента в реакции гидролиза.

Вычисления энергий и сил в КМ-части проводились в приближении теории функционала электронной плотности в варианте PBE0/6-31G*. Функционал PBE0 [13,14] получил широкое распространение при расчетах свойств органических соединений [15]. Для описания ММ части использовалось силовое поле AMBER [16]. Энергии и силы, действующие на атомы квантовой подсистемы вычислялись по программам GAMESS(US) [17]; энергии и силы в ММ-подсистеме по программе TINKER [18]; оригинальный КМ-ММ интерфейс описан в работах [6,7].

Компьютерная реализация КМ/ММ позволяет рассчитывать координаты атомов всей системы, отвечающие стационарным точкам на поверхности потенциальной энергии; другими словами проводить оптимизация геометрических параметров по минимуму энергии: либо без каких-либо ограничений (безусловная оптимизация), либо при наложении ограничений на некоторые параметры (условная оптимизация). В нашем случае фиксировались координаты атомов молекулярных групп из ММ-подсистемы на периферии (внешней стороне) белковой макромолекулы, т.е. сохранялись координаты соответствующих атомов из кристаллографической структуры PDBid:3GG0. Подобное ограничение не влияет на подвижность молекулярных групп внутри белка.

На рис. 6 изображена часть модельной системы с равновесными геометрическими параметрами, отвечающими фермент-субстратному комплексу – субстрату с-di-GMP в окружении молекулярных групп белка. Группы КМ-подсистемы показаны шарами и стержнями, группы ММ-части – линиями. На рисунке сопоставлены результаты расчетов и экспериментальных данных только для некоторые расстояний между атомами (в ангстремах), которые важны в данном приложении. Приведенные числа до разделительной косой черты – результаты расчета, после разделительной черты – экспериментальные данные из структуры PDBid:3GG0 [12]. Следует подчеркнуть, что общее согласие между равновесными геометрическими конфигурациями, полученными в КМ/ММ расчетах, и структурой кристалла PDBid:3GG0 является более чем удовлетворительным.

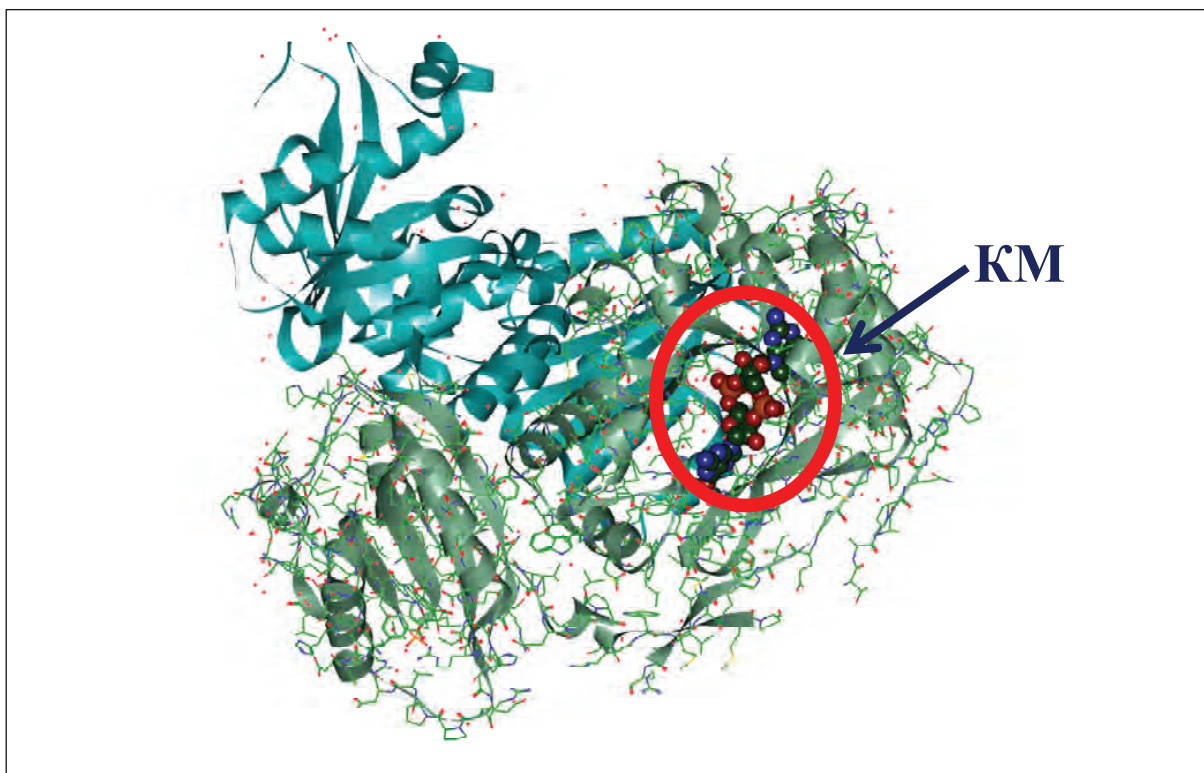


Рис. 5. Структура белка с EAL доменами и субстратом c-di-GMP (PDBid:3GG0 [12]). Молекула субстрата выделена шарами.

Важная роль в химических превращениях в EAL домене принадлежит катионам металла (магния или марганца) [12]; в нашем моделировании были рассмотрены ионы магния. Как видно на Рис.6, ионы металла (Mg_1 , Mg_2), расположенные на расстоянии 3.8 Å друг от друга, координируют атомы кислорода фосфатной группы PO_4 и атомы кислорода аминокислотных остатков Asp и Glu - расстояния Mg-O находятся в пределах 2.0-2.2 Å по результатам расчетов. Также один из ионов магния, Mg_2 , помогает позиционировать молекулу воды (Wat на Рис.6) для нуклеофильной атаки на фосфатную группу c-di-GMP.

Анализ расположения молекулярных групп в равновесной геометрической конфигурации модельной системы фермент-субстратного комплекса (Рис.6) подсказывает перспективный механизм реакции гидролиза. При приближении молекулы воды к фосфатному центру будет образовываться интермедиат с пентакоординированным фосфором с передачей протона от воды на акцептор по сетке водородных связей. Последующее перераспределение протонов по цепи обеспечит разрыв связи P-O и формирование продуктов реакции гидролиза (Рис.4).

Компьютерное моделирование позволяет осуществить эти преобразования и построить равновесную геометрическую конфигурацию комплекса фермента с продуктами. На рис. 7 показан фрагмент соответствующей структуры, содержащий нециклическую молекулу нуклеозидфосфата pGrG. Продукт реакции по-прежнему зажат белковой матрицей; ионы магния удерживают расположенные рядом молекулярные группы с кислородными атомами.

Интересно сопоставить рассчитанную структуру комплекса фермента с продуктом реакции гидролиза с результатами рентгеноструктурных исследований [19] комплекса EAL домена от другого белка FimX от другого организма с молекулой pGrG (PDBid:4AFY). Авторы отмечают, что они фиксируют лишь один катион магния в

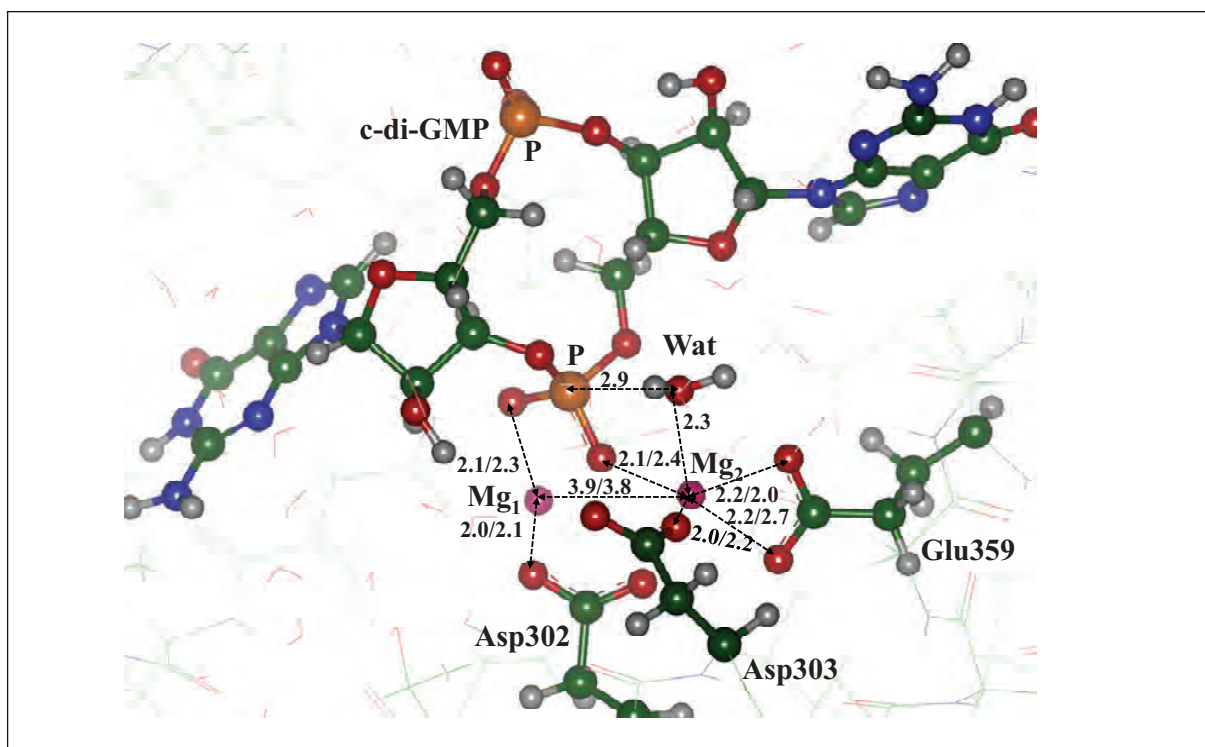


Рис. 6. Модельная система для структуры фермент-субстратного комплекса каталитического EAL домена с c-di-GMP методом КМ/ММ. Группы, включенные в квантовую подсистему выделены шарами и стержнями (показана лишь одна из 12 молекул воды). Группы молекулярно-механической подсистемы показаны линиями. Расстояния между атомами приведены в ангстремах: до разделительной косой черты – результаты расчета, после разделительной черты – экспериментальные данные из структуры PDBid:3GG0 [12].

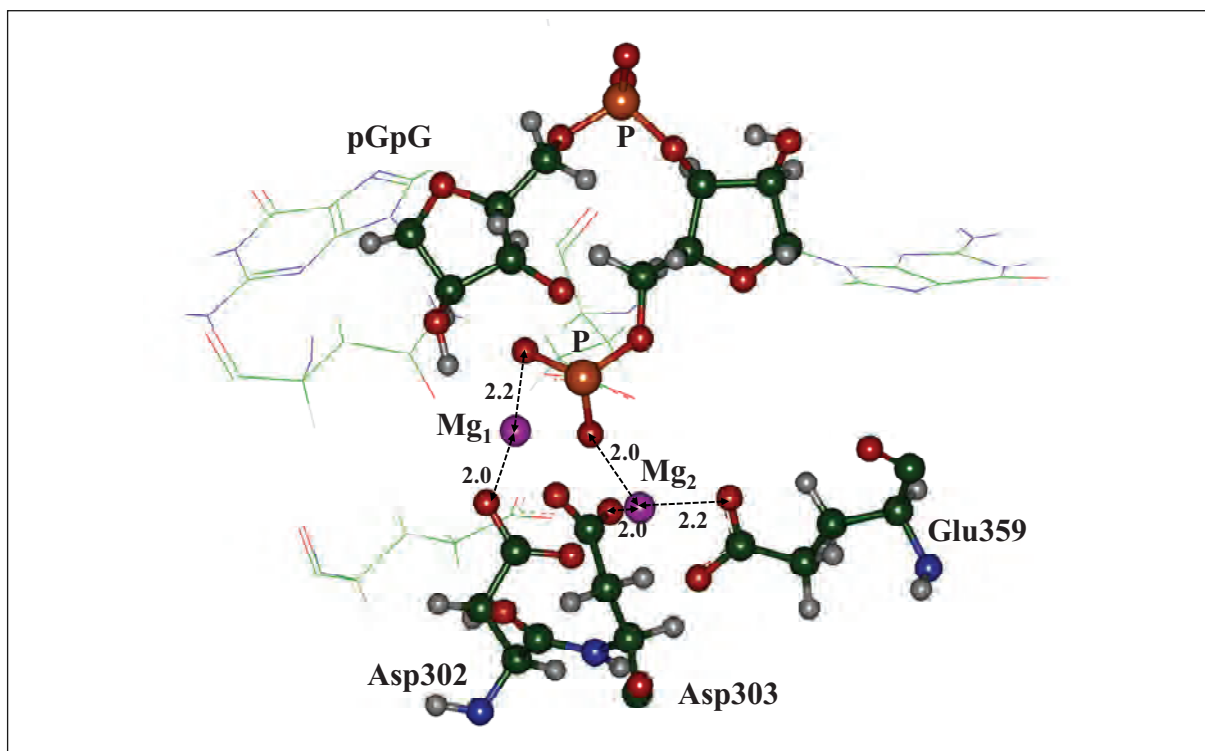


Рис. 7. Рассчитанная методом КМ/ММ структура комплекса фермента с продуктами реакции гидролиза c-di-GMP. Расстояния приведены в ангстремах.

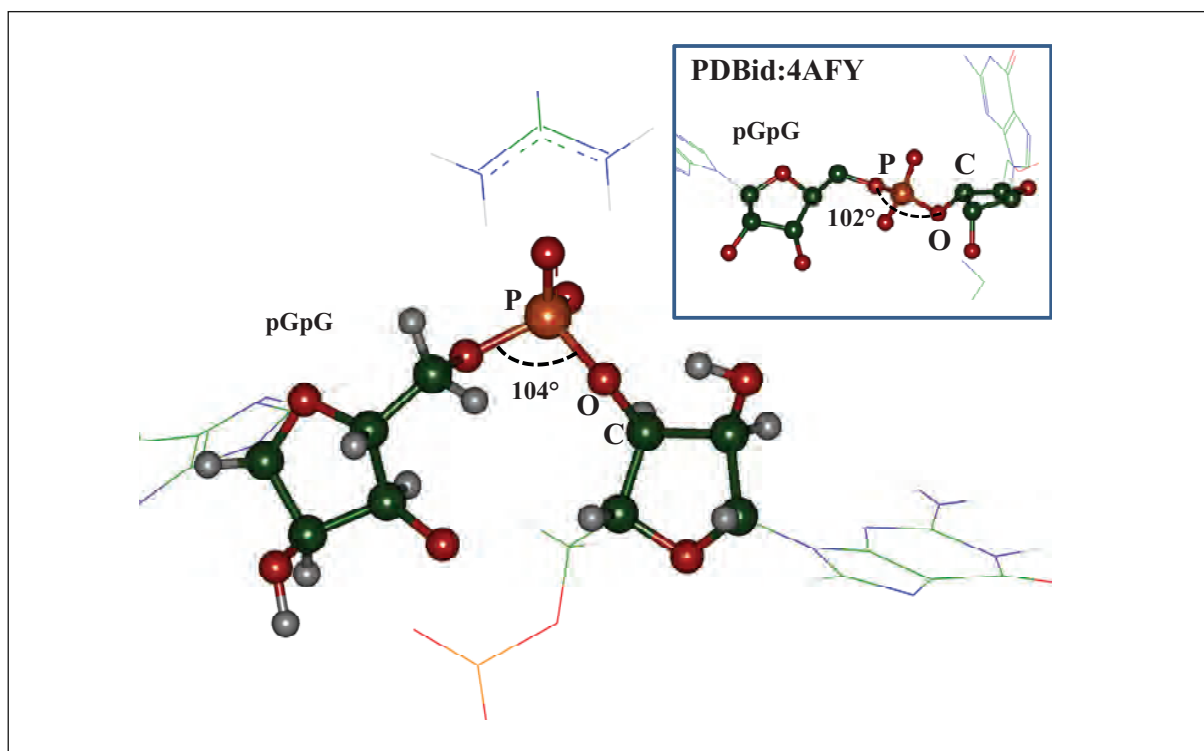


Рис. 8. Конформации нециклического нуклеозидфосфата в EAL доменах фосфоэстераз: основной рисунок – результат расчета, вставка – фрагмент кристаллографической структуры PDBid:4AFY [19].

структуре EAL домена как с субстратом, так и продуктом реакции гидролиза, что контрастирует со всеми другими экспериментальными результатами для EAL домена. Однако, структура PDBid:4AFY – это единственный источник координат для продукта ферментативной реакции $c\text{-di-GMP} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{pGpG}$.

Наиболее заметное различие между экспериментальными и теоретическими результатами относится к конформации молекулы pGpG, что проиллюстрировано на рис. 8.

Интересно, что локальные конфигурации фосфатной группы PO_4 , не участвовавшей в реакции, практически совпадают; однако, молекула продукта в кристалле (вставка к рис. 8) кажется существенно более «развернутой». Понятно, что эти две конформации молекулы pGpG переходят друг в друга при учете внутреннего вращения вокруг связи C-O, отмеченной на рис. 8. Движения столь большой амплитуды крайне трудно описать методом КМ/ММ, для этого больше подходят методы молекулярной динамики, поэтому мы не пытались добиться совпадения теоретической и экспериментальной структур. Даже более важным аспектом представляется наличие двух катионов металла в теоретической модели (что согласуется с большинством экспериментальных результатов для EAL домена [11]), и как видно на рис. 7, электростатическое взаимодействие «разорванной» фосфатной группы с катионами магния явно будет препятствовать внутреннему вращению в молекуле продукта.

4. Выводы

Показано, что современные суперкомпьютерные технологии позволяют применять метод квантовой механики – молекулярной механики (КМ/ММ) в варианте конформационно-подвижных эффективных фрагментов для моделирования структур на пути реакций ферментативного катализ. Анализ рассчитанных структур белковых комплексов, отвечающих реагентам и продуктам для реакции гидролиза циклического дигуанозинмонофосфата каталитическим доменом фосфодиэстераз, позволяет соотнести получен-

ные вычислительные результаты с экспериментальными данными рентгеноструктурных исследований.

Работа частично поддержана Российским Фондом Фундаментальных Исследований (проект 13-03-00210-а). Авторы выражают благодарность суперкомпьютерным центрам МГУ им. М.В. Ломоносова и РАН за возможность использовать вычислительные ресурсы.

Литература

1. Warshel A., Levitt M. Theoretical studies of enzymic reactions: Dielectric, electrostatic and steric stabilization of the carbonium ion in the reaction of lysozyme // *J. Mol. Biol.*, 1976, **103** 227-249.
2. Nemukhin A.V., Grigorenko B.L., Lushchekina S.V., Varfolomeev S.D. Quantum chemical modelling in the research of molecular mechanisms of enzymatic catalysis // *Rus. Chem. Rev.*, 2012, **81**, 1011-1025.
3. Немухин А.В., Григоренко Б.Л., Савицкий А.П. Компьютерное моделирование строения и спектров флуоресцирующих белков // *Acta Naturae*, 2009, №2, 41-52.
4. Gordon M.S., Freitag M.A., Bandyopadhyay P., Jensen J.H., Kairys V., Stevens W.J. The effective fragment potential method: A QM-based MM approach to modeling environmental effects in chemistry // *J. Phys. Chem. A*, 2001, **105** (2) 293-307.
5. Bakowies D., Thiel W. Hybrid models for combined quantum mechanical and molecular mechanical approaches // *J. Chem. Phys.*, 1996, **100** 10580-10594.
6. Grigorenko B.L., Nemukhin A.V., Topol I.A., Burt S.K. Modeling of biomolecular systems with the quantum mechanical and molecular mechanical method based on the effective fragment potential technique: Proposal of flexible fragments. // *J. Phys. Chem. A*, 2002, **106**(44), 10663-10672.
7. Nemukhin A.V., Grigorenko B.L., Topol I.A., Burt S.K. Flexible effective fragment QM/MM method: Validation through the challenging tests // *J. Comput. Chem.*, 2003, **24**(12), 1410-1420.
8. Stone A.J., Alderton M. Distributed polarizabilities // *Mol. Phys.*, 1985, **56** 1065-1082.
9. Galperin M.Y., Anastasia N., Nikolskaya A.N., Koonin E.V. Novel domains of the prokaryotic two-component signal transduction systems // *FEMS Microbiol. Lett.*, 2001, №1, 11-12.
10. Schmidt A.J., Ryjenkov D.A., Gomelsky M. The ubiquitous protein domain EAL is a cyclic diguanylate-specific phosphodiesterase: Enzymatically active and inactive EAL domains // *J. Bacteriol.*, 2005, **187**(14), 4774-4781.
11. Tarnowski M., Barends T.R.M., Hartmann E., Schlichting I. Structures of the catalytic EAL domain of the Escherichia coli direct oxygen sensor // *Acta Crystallorg. Sec. D*, 2013, **69** (6) 1045-1053.
12. Barends T. R., Hartmann E., Griesse J. J., Beitlich T., Kirienko N.V., Ryjenkov D.A., Reinstein J., Shoeman R.L., Gomelsky M., Schlichting I. Structure and mechanism of a bacterial light-regulated cyclic nucleotide phosphodiesterase // *Nature (London)*, 2009, **459** 1015-1018.
13. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // *Phys. Rev. Lett.*, 1996, **77**, 3865 - 3868.
14. Adamo C., Barone V. Toward reliable density functionals without adjustable parameters: the PBE0 model // *J. Chem. Phys.*, 1999, **110** 6158 – 6170.
15. Del Campo J.M., Gázquez J. L., Trickey S.B., Vela A. Nonempirical improvement of PBE and its hybrid PBE0 for general description of molecular properties // *J. Chem. Phys.*, 2012, **136** 104108.
16. Cornell W.D., Cieplak P., Bayly C.I., Gould I.R., Merz K.M., Ferguson D.M., Spellmeyer D.C., Fox T., Caldwell J.W., Kollman P.A. A Second Generation Force Field for the Simulation of Proteins, Nucleic Acids, and Organic Molecules // *J. Am. Chem. Soc.*, 1995, **117**, 5179–5197.
17. Schmidt M. W., Baldridge K. K., Boatz J. A., Elbert S. T., Gordon M. S., Jensen J. H., Koseki S., Matsunaga N., Nguyen K. A., Su S., Windus T. L., Dupuis M., Montgomery J. A. General Atomic and Molecular Electronic Structure System // *J. Comput. Chem.* 1993, **14** 1347–1363.
18. Ponder J. W. TINKER Molecular Modeling Package, V5.1; Washington University Medical School: St. Louis, MO, 2010.
19. Robert-Paganin J., Nonin-Lecomte S., Réty S. Crystal structure of an EAL domain in complex with reaction product 5'-pGpG // *PLOS ONE*, 2012, **7**(12), e52424(1-13).

COMPUTER MODELING OF CHEMICAL REACTIONS IN COMPLEX BIOLOGICAL SYSTEMS: ENZYMATIC HYDROLYSIS OF CYCLIC DIGUANOSINE MONOPHOSPHATE

B.L. Grigorenko^{1,2}, M.A. Knyazeva¹, E.V. Isaeva¹,
D.A. Novichkova¹, A.V. Nemukhin^{1,2}

¹*Lomonosov Moscow State University, Chemistry Department*

²*Emanuel Institute of Biochemical Physics, Russian Academy of Sciences*

anemukhin@yahoo.com

Received 21.04.2014

Computer implementations of the quantum mechanics – molecular mechanics (QM/MM) method allows one to simulate increasingly complex phenomena in nano-size molecular systems, including chemical reactions in proteins. Achievements of modern approaches in QM/MM simulations are illustrated by taking one of the most important biochemical reactions as an example. Specifically, the hydrolysis reaction of cyclic diguanosine monophosphate by phosphodiesterases, the enzymes that regulate concentration of second messengers upon signal transduction in cells is considered. Original algorithms of the QM/MM version with flexible effective fragments are briefly described. The computed structures of the enzyme-substrate and enzyme-product complexes are compared with the results of X-ray studies.

Информация и правила для авторов

Общие положения

Журнал «Наноструктуры. Математическая физика и моделирование» (сокращенно: НМФМ) публикуется с 2009 года и является периодическим научным изданием. Электронная версия журнала размещается на сайте <http://www.nano-journal.ru>. Основная цель издания: представление новых теоретических и вычислительных методов моделирования наноструктур и мягкой материи, общих подходов в исследовании мезосистем, а также ключевых экспериментальных результатов в данной области и связанных с этим проблем математической физики.

Журнал НМФМ имеет междисциплинарный характер и в силу этого несет определенную образовательную направленность, а не только узко научную. Работы, представляемые в журнал, должны содержать вводные сведения, которые обеспечат понимание постановок задач и восприятие результатов не только прямыми специалистами. Определения понятий, объяснение обозначений и терминов, оценки характерных параметров, теоретические предпосылки и идеи, используемые методы, и т.п., должны быть кратко объяснены в тексте статьи, имея в виду читателей, специализирующихся в иных направлениях. Должны быть описаны базовые математические модели и уравнения. Во Введении и в последующих разделах очерчивается стратегия и основные трудности, это увязывается с используемыми моделями. Структура статьи ориентируется на прояснение общей логики и методики исследования, содержит резюмирующие выводы. В тексте должны быть рассмотрены характерные примеры (хотя бы, методические), ясно иллюстрирующие предлагаемые алгоритмы.

Журнал публикует научные обзоры, исследовательские статьи и краткие научные сообщения, а также избранные аналитические и информационно-образовательные материалы, тексты докладов и циклов лекций, прочитанных в университетах, научных центрах, на школах-семинарах, конференциях, нигде ранее не публиковавшиеся и не принятые к публикации в других изданиях. Язык публикации в журнале НМФМ, как правило, русский. Работы, представляемые в журнал, не могут иметь научно-популярный или компилятивный характер. Все статьи рецензируются и могут быть отклонены редколлегией журнала. В случае принятия работы к печати ее авторы передают издателью журнала НМФМ право на разовую безвозмездную публикацию текста и его размещение в электронной версии на сайте журнала. Перевод опубликованных в журнале статей на другие языки может осуществляться только с разрешения и при участии авторов.

Порядок представления статей

- В редакцию изначально представляются:
 - файл статьи, файлы с иллюстрациями;
 - сопроводительное письмо, можно в электронной форме, содержащее сведения об объеме статьи и обо всех авторах (фамилии, имена, отчества, полные названия мест работы, почтовый адрес с индексом, номер контактного телефона с кодом города, электронный адрес автора, ответственного за переписку с редакцией); предпочтительно, чтобы это письмо было выполнено на бланке учреждения, в котором работает кто-то из авторов, было заверенное печатью и содержало утверждение о возможности открытого опубликования статьи;
 - файл с переводом на английский язык названия статьи, фамилий и инициалов авторов, аннотации, ключевых слов.
- Авторские файлы могут быть присланы на электронный адрес: papers@nano-journal.ru; (резервный адрес в случаях затруднений с пересылкой: nano@miem.edu.ru) или переданы в редакцию на любом электронном носителе. Авторы получают из редакции подтверждение о получении их материалов.
- Телефон (факс) редакции: +7 (495) 916-8876. Адрес редакции: Москва 109028, Б. Трехсвятительский пер., 3/12, Московский институт электроники и математики (МИЭМ), комн. 449.

Общие требования к представляемым файлам

- Допускается использование текстовых редакторов WORD и LATEX. К рабочим файлам должна быть приложена их pdf-копия. В названии файлов используется латинский алфавит, пробелы заменяются знаком `_`. Шапка статьи содержит название, инициалы и фамилии авторов, место работы, электронный адрес, краткую аннотацию, ключевые слова. В аннотации не следует использовать формулы и ссылки на текст работы или список литературы; в конце она должна содержать индекс УДК (к английской версии аннотации можно добавить индексы зарубежных рубрикаторов).
- Объем кратких сообщений 4-8 страниц, исследовательских статей, как правило, до 20 страниц, а обзоров – более 20 страниц. Верхняя граница согласуется с редколлегией. При подсчете объема нужно ориентироваться на страницы формата А4, шрифт 12, знаков в строке 80, интервалов между строками 1.
- Авторы не должны злоупотреблять сокращениями, составленными из заглавных начальных букв терминов. Предпочтительней каждый раз использовать полное наименование объекта. Возможно использование только устоявшихся аббревиатур.

Требования к файлам Word

- Рекомендуемый шрифт – Times New Roman.
- Строки в пределах абзаца не должны разделяться символом возврата каретки (Enter).
- Нельзя использовать автоматическое создание сносков, автоматический перенос или автоматический запрет переносов, создание списков, автоматический отступ и т.п.
- Ссылки на список литературы даются цифрами в квадратных скобках: [1], [5,6,7], [1-9].
- Все без исключения формулы и обозначения размерности, даже состоящие из одной латинской буквы, и в тексте и вынесенные в отдельную строку, всегда набираются в формульном редакторе и никогда – в обычном текстовом редакторе.

- При создании таблицы рекомендуется использовать возможности Word или MS Excel. Таблицы, набранные вручную (с помощью большого числа пробелов), не принимаются.

Требования к иллюстрациям

- Иллюстрации представляются в отдельных файлах, черно-белыми. Они должны иметь разрешение не менее 600 dpi.
- Форматы файлов – TIFF, EPS, PSD, JPEG.

Требования к списку литературы

- Ф.И.О. авторов или редакторов выделяются курсивом.
- Для статей приводится название. Названия отделяются от выходных данных знаком //. Расположение выходных данных указано на образце ниже. Номер тома выделяется жирным шрифтом, номер выпуска дается в скобках. Указываются номера первой и последней страниц статьи, либо уникальный номер статьи и ее объем. Для книг желательно указывать их объем. Если известна ссылка на электронный архив или сайт, то ее желательно указать.

Фамилия И.О. Название статьи // Назв. журн., 2000, **1** (1), 1-6.

Family F.M. and Family F. Title of the paper // Name of the Journal, 2006, **73**, 165313, 9 pp.

Фамилия И.О., Фамилия И.О. Название книги // Наука, С.-П., 1999, 176 стр.

Family F.M. Title of the paper // In book: *Family F.M. (et al. eds)*, Title of the collection, Publisher, Boston, 2005, 9-24.

Family F.M. (ed.), Title of the collection // Publisher, N.Y., 2005, 324 pp.

Фамилия И.О. Название доклада // Доклад на конференции «Название конференции (место и дата проведения)»; ссылка на электронный ресурс.

Наноструктуры. Математическая физика и моделирование

Журнал зарегистрирован

в Министерстве РФ по делам печати,
телерадиовещания и средств массовых коммуникаций.

Свидетельство о регистрации

ПИ № ФС77-34934 от 29 декабря 2008 г.

Учредители

Московский государственный институт электроники и математики (МИЭМ),

ФГУ ГНИИ ИТТ «Информика»,

Европейский центр по качеству

Председатель Совета Учредителей

Тихонов А.Н.

Издатель

Европейский центр по качеству

Верстка и корректура

К.В. Логинов

ПОДПИСКА НА ЖУРНАЛ НМФМ

На второе полугодие 2014 г. подписаться на журнал можно в любом отделении связи по каталогу

Агентства Роспечать «Журналы России»,

рубрика «Физико-математические науки», подписной индекс 70017.

Редакция предлагает подписчикам возможность безвозмездно получить подборку прошлых выпусков журнала. Пришлите на электронный адрес nano@miem.edu.ru (или на почтовый адрес:

109028, Москва, Б. Трехсвятительский пер., 3, к. 452, редакция журнала НМФМ)

копию подписной квитанции, а также адрес для отсылки выпусков.