

УДК 535+532.783

В. В. Румянцев, С. А. Федоров, К. В. Гуменник

ОПТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ НЕИДЕАЛЬНЫХ ЖК СВЕРХРЕШЕТОК
OPTICAL ROTATION OF A NONIDEAL LIQUID CRYSTAL SUPERLATTICE

Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины
83114 Донецк, ул. Р. Люксембург, д. 72

Задача о нахождении поляритонных состояний (необходимых для расчета гиротропных характеристик) в пространственно диспергирующих сверхрешетках в настоящее время является нерешенной. В то же время, очевидно, что расчет указанных величин может быть выполнен приближенно при толщинах слоев многослойника значительно больших соответствующих характерных масштабов пространственной дисперсии. В этом случае вклад каждого слоя в гиротропию можно рассматривать как независимый. Последнее дает возможность выразить соответствующие оптические величины через слоевые гиротропные характеристики. Данный подход применен в настоящей работе к расчету удельного угла вращения плоскости поляризации света, распространяющегося в неидеальной оптически активной 1D-сверхрешетке, содержащей произвольное число инородных слоев, отличающихся от базовых (для идеальной сверхрешетки) по составу или по толщине.

Ключевые слова: 1D-сверхрешетка, гиротропия, жидкий кристалл, примесный слой.

The problem of finding polariton states (necessary for calculating of gyrotropic characteristics) in space-dispersive superlattices is not solved yet. At the same time the specified quantities can be approximately evaluated if the widths of layers comprising a multilayer material are much bigger than the characteristic scales of space dispersion. In that case the contribution of each layer to gyrotropy can be regarded as independent. Thus the corresponding optical quantities can be expressed through the layers' gyrotropic characteristics. In the present research this approach is applied to the calculating of the specific rotation angle of plane of polarization of light propagating through a nonideal optically active 1D-superlattice, containing arbitrary number of foreign layers, which varies in composition as well as in layers' width.

Key words: 1D-superlattice, gyrotropy, liquid crystal, impurity layer.

Введение

В настоящее время имеется большое количество сложных органических комплексов и полимеров, которые являются оптически активными вследствие особенностей структуры или оптической активности входящих в их состав молекул [1 – 3]. Значительное число работ [4 – 8] посвящено исследованиям оптических свойств идеальных и неидеальных сверхрешеток на основе полимеров и жидких кристаллов (ЖК). Особый интерес к исследованию этих объектов обусловлен их высокой чувствительно-

стью к внешним полям и сильной анизотропией диэлектрической проницаемости. Разработанная в [7] методика учета особенностей концентрационной зависимости показателя преломления света неидеальной лиотропной ламеллярной системой оказывается полезной при моделировании композитных материалов на основе жидких кристаллов с заданными параметрами (без учета пространственной дисперсии). В то же время, учет пространственной дисперсии дает возможность расширить спектр изучаемых явлений и рассматривать такие эффекты, как естественная оптическая активность, электрогирация, круговой дихроизм и т. п. Кроме того, гиротропия часто является единственно возможным способом определения стерео- и кристаллохимических характеристик, а также тонких деталей строения соответствующих пространственно диспергирующих структур.

Задача о нахождении характеристик нормальных электромагнитных волн (необходимых для расчета гиротропных характеристик) в пространственно диспергирующих сверхрешетках в настоящее время является нерешенной. В то же время, очевидно, что расчет указанных величин может быть выполнен приближенно при толщинах слоев многослойника значительно больших соответствующих характерных масштабов пространственной дисперсии. В этом случае вклад каждого слоя в гиротропию можно рассматривать как независимый. Последнее дает возможность выразить соответствующие оптические величины через слоевые гиротропные характеристики. Данный подход применен в настоящей работе к расчету удельного угла вращения плоскости поляризации света, распространяющегося в неидеальной жидкокристаллической 1D-сверхрешетке, содержащей произвольное число инородных слоев, отличающихся от базовых (для идеальной сверхрешетки) по составу или по толщине.

Ниже рассмотрено распространение света вдоль слоевых оптических осей, перпендикулярных плоскости этих слоев. Получено аналитическое выражение для удельного угла вращения в зависимости от концентрации примесных слоев.

Удельный угол вращения плоскости поляризации света в 1D-сверхрешетке

В соответствии с вышеуказанным подходом угол поворота плоскости поляризации света неидеальной топологически упорядоченной одномерной сверхрешетки, состоящей из N элементарных ячеек, описывается следующим выражением:

$$\rho(\omega) = \sum_{n=1}^N \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \rho_{n\alpha}(\omega) a_{n\alpha} . \quad (1)$$

Полагаем, что количество ячеек N достаточно велико (чтобы можно было пренебречь эффектами влияния границ образца). В (1) $a_{n\alpha}$ и $\rho_{n\alpha}(\omega)$ – конфигурационно зависящие соответственно толщина α -го слоя n -ой элементарной ячейки и удельный угол вращения плоскости поляризации света частоты ω для этого слоя, σ – число слоев элементарной ячейки.

Согласно общим принципам физики неупорядоченных систем экспериментально измеряемый угол вращения должен равняться $\hat{P}\rho(\omega) \equiv \langle \rho(\omega) \rangle$, где \hat{P} – оператор конфигурационного усреднения [7, 9, 10], действующий на конфигурационно зависящую функцию $\rho(\omega)$. В рассматриваемой неидеальной 1D-сверхрешетке имеется два типа разупорядочения, следовательно, и два типа конфигурационной зависимости. Первое разупорядочение обусловлено наличием в сверхрешетке инородных (дефектных) слоев, отличающихся от соответствующих слоев идеальной системы по физико-химическому

составу (соответствующая конфигурационно зависимая величина – $\rho_{n\alpha}(\omega)$). Второе – обусловлено наличием в системе слоев-дефектов, отличающихся от идеальной сверхрешетки по толщине (соответствующая конфигурационно зависимая величина – $a_{n\alpha}$). В дальнейшем полагаем, что эти факторы разупорядочения независимы друг от друга.

Связь $\rho_{n\alpha}(\omega)$ и $a_{n\alpha}$ с конфигурационно зависимыми случайными величинами $\eta_{s\alpha}^{\mu(\alpha)}$, $\eta_{s\alpha}^{v(\alpha)}$ имеет следующий вид :

$$\rho_{n\alpha}(\omega) = \sum_{\mu(\alpha)=1}^{r(\alpha)} \rho_{\alpha}^{\mu(\alpha)} \eta_{n\alpha}^{\mu(\alpha)}, \quad a_{n\alpha} = \sum_{v(\alpha)=1}^{s(\alpha)} a_{\alpha}^{v(\alpha)} \eta_{n\alpha}^{v(\alpha)}, \quad (2)$$

Причем

$$\sum_{\mu(\alpha)=1}^{r(\alpha)} \eta_{n\alpha}^{\mu(\alpha)} = 1, \quad \sum_{v(\alpha)=1}^{s(\alpha)} \eta_{n\alpha}^{v(\alpha)} = 1. \quad (3)$$

Где $\eta_{n\alpha}^{\mu(\alpha)} = 1$, если α -й слой n -й элементарной ячейки является слоем $\mu(\alpha)$ -й сорта ($\mu(\alpha) = 1, 2, \dots, r(\alpha)$) и $\eta_{n\alpha}^{\mu} = 0$ – в любом другом случае; $\eta_{n\alpha}^{v(\alpha)} = 1$, если толщина α -го слоя n -й элементарной ячейки равна $a_{\alpha}^{v(\alpha)}$ ($v(\alpha) = 1, 2, \dots, s(\alpha)$) и $\eta_{n\alpha}^{v} = 0$ – в любом ином случае. $\rho_{\alpha}^{\mu(\alpha)}(\omega)$ – удельный угол вращения α -го слоя $\mu(\alpha)$ -го сорта. Здесь и далее индекс μ нумерует слои с переменным составом, v – с переменной толщиной.

Используя формулы (1), (2), а также правила усреднения [9] для $\langle \rho(\omega) \rangle$, получаем следующее выражение:

$$\begin{aligned} \langle \rho(\omega) \rangle = & N \sum_{\alpha=1}^{\sigma} [\rho_{\alpha}^{(1)}(\omega) a_{\alpha}^{(1)} + a_{\alpha}^{(1)} \sum_{\mu(\alpha)=1}^{r(\alpha)} \Delta \rho_{\alpha}^{\mu(\alpha)}(\omega) C_{\alpha}^{\mu(\alpha)} + \rho_{\alpha}^{(1)}(\omega) \sum_{v(\alpha)=1}^{s(\alpha)} \Delta a_{\alpha}^{v(\alpha)} C_{\alpha}^{v(\alpha)} + \\ & + \sum_{\mu(\alpha)=1}^{r(\alpha)} \sum_{v(\alpha)=1}^{s(\alpha)} \Delta \rho_{\alpha}^{\mu(\alpha)}(\omega) \Delta a_{\alpha}^{v(\alpha)} C_{\alpha}^{\mu(\alpha)} C_{\alpha}^{v(\alpha)}] \quad (4) \end{aligned}$$

$\Delta \rho_{\alpha}^{\mu(\alpha)} = \rho_{\alpha}^{\mu(\alpha)} - \rho_{\alpha}^{(1)}$, $\Delta a_{\alpha}^{v(\alpha)} = a_{\alpha}^{v(\alpha)} - a_{\alpha}^{(1)}$. $C_{\alpha}^{\mu(\alpha)}$, $C_{\alpha}^{v(\alpha)}$ – концентрации дефектов-слоев, отличных от слоев базового вещества по составу и толщине соответственно. Первое слагаемое в (4) соответствует углу вращения плоскости поляризации света идеальной 1D-сверхрешетки, составленной из слоев (1)-го сорта (это вещество полагаем базовым). Второе слагаемое обусловлено разупорядочением сверхрешетки по составу – оно обращается в нуль при отсутствии вариации состава. Третье слагаемое отражает разупорядочение по толщине (при его отсутствии это слагаемое обращается в нуль). Последнее слагаемое обусловлено одновременным разупорядочением сверхрешетки и по составу и по толщине слоев. Отсутствие хотя бы одного из разупорядочений приводит к обращению в нуль четвертого слагаемого (4). Каждое из четырех слагаемых (4) имеет смысл угла вращения, приходящегося на одну элементарную ячейку. Эти углы, в отличие от $\rho_{n\alpha}^{\mu(\alpha), v(\alpha)}$ (который измеряется в единицах град./ед. длины) имеют размерность «градус».

Результаты и обсуждение

Для конкретизации результатов рассмотрим распространение электромагнитного излучения в несовершенной 1D-сверхрешетке с двумя элементами-слоями в ячейке: первый слой которой – SiO_2 (α -кварц) ($\rho_1^{(1)} = 780$ град/мм, $\lambda = 152,3$ нм), а второй – модельный жидкий кристалл ($\rho_2^{(1)} = 2000$ град/мм). Пусть первая подрешетка содержит примесные слои, отличные от базовой (идеальной) подрешетки лишь по толщине, а вторая жидкокристаллическая подрешетка варьируется как по толщине, так и по составу ($\rho_2^{(2)} = 2500$ град/мм). Концентрацию и толщину слоя базового вещества в первой и второй подрешетках обозначим соответственно $C_1^{(1)}$, $a_1^{(1)}$ и $C_2^{(1)}$, $a_2^{(1)}$, а примеси – $C_{1C(T)}^{(2)}$, $a_1^{(2)}$ и $C_{2C(T)}^{(2)}$, $a_2^{(2)}$ (индексом С(Т) обозначена вариация примесей-слоев по составу или по толщине). Несложные преобразования позволяют на основе формулы (4) получить следующую концентрационную зависимость удельного угла вращения $\rho = \rho(C_{1C(T)}^{(2)}, C_{2C(T)}^{(2)}) \equiv \langle \rho \rangle / N \langle d \rangle$ плоскости поляризации света в данной двухподрешеточной неидеальной 1D-сверхрешетке ($C_{1C}^{(2)} = 0$):

$$\rho = \left(1 + a + f_1 C_{1T}^{(2)} + f_2 a C_{2T}^{(2)}\right)^{-1} \left[\rho_1^{(1)} \left(1 + f_1 C_{1T}^{(2)}\right) + a \rho_2^{(1)} \left(1 + f_2 C_{2T}^{(2)}\right) + \left(\rho_2^{(2)} - \rho_2^{(1)}\right) \left(1 + f_2 a C_{2T}^{(2)}\right) C_{2C}^{(2)} \right] \quad (5)$$

Здесь $\langle d \rangle = a_1^{(1)} + a_2^{(1)} + (a_1^{(2)} - a_1^{(1)}) C_{1T}^{(2)} + (a_2^{(2)} - a_2^{(1)}) C_{2T}^{(2)}$ – усредненный период ячейки 1D-сверхрешетки. В формуле (5) приняты следующие обозначения:

$$a = a_2^{(1)} / a_1^{(1)}, \quad f_1 = (a_1^{(2)} / a_1^{(1)}) - 1, \quad f_2 = (a_2^{(2)} / a_2^{(1)}) - 1. \quad (6)$$

Графически концентрационная зависимость удельного угла вращения $\rho = \rho(C_{1C(T)}^{(2)}, C_{2C(T)}^{(2)})$ плоскости поляризации света в исследуемой неидеальной сверхрешетке представлена на рис. 1 и 2. Рис. 1 отражает вариацию слоев сверхрешетки только по толщине, а рис. 2 представляет зависимость $\rho = \rho(C_{2C}^{(2)}, C_{2T}^{(2)})$. Причем случай (рис. 2, а) свидетельствует о значительном изменении удельного угла ρ в зависимости от относительных толщин $a_2^{(1)} / a_1^{(1)}$, $a_1^{(2)} / a_1^{(1)}$, $a_2^{(2)} / a_2^{(1)}$ слоев при постоянном значении $C_{1T}^{(2)}$, а случай на рис. 2, б позволяет сделать вывод о том, что для конкретных значений относительных толщин слоев ρ зависит достаточно слабо от вариации сверхрешетки по составу.

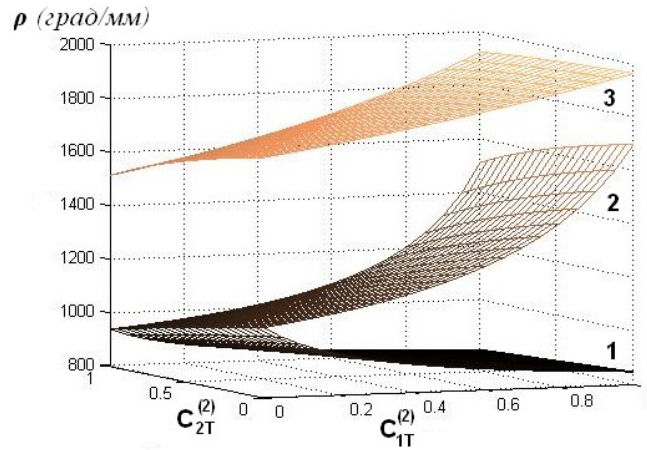


Рис. 1. Концентрационная зависимость $\rho = \rho(C_{1T}^{(2)}, C_{2T}^{(2)})$ удельного угла вращения плоскости поляризации света в исследуемой неидеальной сверхрешетке, причем $a_2^{(2)} / a_2^{(1)} = 0.5$, а величины $a_2^{(1)} / a_1^{(1)}$ и $a_1^{(2)} / a_1^{(1)}$ равны соответственно в случае 1: 0,3 и 0,5, в случае 2: 0,3 и 0,1, а в случае 3: 3 и 0,1

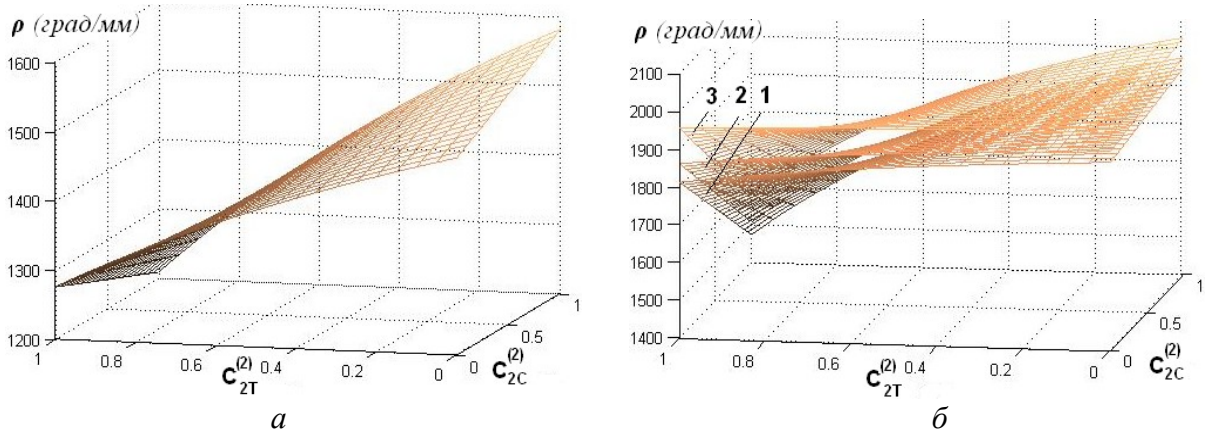


Рис. 2. Концентрационная зависимость $\rho = \rho(C_{2C}^{(2)}, C_{2T}^{(2)})$ удельного угла вращения плоскости поляризации света в исследуемой неидеальной сверхрешетке:
 а – $a_2^{(1)} / a_1^{(1)} = 3$, $a_1^{(2)} / a_1^{(1)} = 5$, $a_2^{(2)} / a_2^{(1)} = 0.5$, $C_{1T}^{(2)} = 0.3$,
 б – $a_2^{(1)} / a_1^{(1)} = 10$, $a_1^{(2)} / a_1^{(1)} = 0.1$, $a_2^{(2)} / a_2^{(1)} = 0.5$, а концентрация $C_{1T}^{(2)}$ равна 0,1; 0,3; 0,9 соответственно в случаях 1, 2, и 3

Заключение

Исследование полимерных композиционных материалов и ЖК-сверхрешеток актуально, благодаря разнообразию их функциональных свойств и широкой области применения. Особый интерес к этому классу материалов появился, с одной стороны, в связи с потребностями электротехники и электроники в тонких пленках и слоистых структурах, а с другой – он обусловлен прогрессом в создании таких структур и разви-

тии теории оптических свойств идеальных и неидеальных слоистых сверхрешеток, достижениями в нанотехнологиях и фотонике [1, 4, 5, 8, 11, 12].

В работе представлено численное моделирование концентрационной зависимости угла поворота плоскости поляризации света в неидеальном 1D-многослойнике с произвольным числом подрешеток. Выбор в качестве модельного материала исследований ЖК-структуры обусловлен тем, что она может обладать большим оптическим вращением (например, в случае холестерического ЖК значение удельного угла вращения плоскости поляризации света может достигать нескольких тысяч градусов на миллиметр [6]). Относительный вклад каждого из четырех слагаемых соотношения (4) в зависимости от слоевых значений удельных углов вращения плоскости поляризации и толщины слоев может быть различным, следовательно, концентрационная зависимость $\rho = \rho(C_{1C(T)}^{(2)}, C_{2C(T)}^{(2)})$ может изменяться в широких пределах. Изученная в работе концентрационная зависимость угла поворота раскрывает дополнительные возможности моделирования оптически активных многослойных композитных материалов.

Список литературы

1. Ryan A. J., Jones R. A. L. // *Materials Today*. 2008. Vol. 11. № 7/8. P. 21 – 23.
2. Матвеев Ю. С., Катаева Н. А., Кучин А. В. // *Химия растительного сырья*. 1999. № 1. С. 13 – 26.
3. Кизель В. А., Бурков В. И. *Гиротропия кристаллов*. М. : Наука, 1980. 304с
4. Chun Zhang, Hirt D.E. // *Polymer*. 2007. Vol. 48. № 23. P. 6748 – 6754.
5. Pucci A., Bernabò M., Elvati P., et al. // *J. Mater. Chem*. 2006. Vol. 16. P. 1058 – 1066.
6. Шабанов В. Ф., Ветров С. Я., Шабанов А. В. *Оптика реальных фотонных кристаллов. Жидкокристаллические дефекты, неоднородности*. Новосибирск : СО РАН, 2005. 240с.
7. Румянцев В. В., Федоров С. А. // *Жидкие кристаллы и их практическое использование*. 2007. Вып. 1. С. 67 – 74.
8. Tolmachov V. A., Perova T. S., Astrova E. V. // *Phys. Stat. Sol. (RRL)*. 2008. Vol. 2. № 3. P. 114 – 116.
9. Румянцев В. В., Федоров С. А. // *Оптика и спектроскопия*. 2009. Т. 106. № 4. С. 700 – 795.
10. Займан Дж. *Модели беспорядка*. М. : Мир, 1982. 592 с.
11. Sierra M. L., Kumar R., De Mel V. S. J, Oliver J. P. // *Organometallics*. 1992. Vol. 11. № 1. P. 206 – 214 .
12. Joannopoulos J. D., Johnson S. G., Winn J. N., Meade R. D. *Photonic Crystals*. Princeton : Princeton University Press, 2008.

Поступила в редакцию 10.09.2009 г.

Авторы:

Румянцев Владимир Васильевич,

д. ф.-м. н., зав. физико-технологическим отделением

Федоров Станислав Афанасьевич,

к. ф.-м. н., с.н.с.,

Гуменник Константин Вадимович,

вед. инженер

Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина НАН Украины

ул. Р.Люксембург, 72,

83114 Донецк, Украина

E-mail: rumyants@teor.fti.ac.donetsk.ua