

3. Крокко Л. Теория неустойчивости горения в жидкостных ракетных двигателях / Л. Крокко, Чжен Синь-и. – М.: Изд-во иностр. литерат., 1958. – 351 с.
4. Гоцуленко В. В. Управление автоколебаниями колеблющегося пламени при одновременном действии механизмов их возбуждения / В. В. Гоцуленко, Б. И. Басок // Промышленная теплотехника. – 2009. – Т. 31, № 3. – С. 101 – 107.
5. Басок Б. И. Проблема термоакустических колебаний и вибрационного горения / Б. И. Басок, В. В. Гоцуленко // Техническая теплофизика и промышленная теплоэнергетика: сборник научных трудов. – Д., 2009. – Выпуск 1. – С. 5 – 15.
6. Reiees P. Das Anblasen offener Rohren durch eine Flame / P. Reiees // Ann. Phys. und Chem. – 1859. – Vol. 107. – P. 339 – 345.
7. Беляев Н. М. Термоакустические колебания газожидкостных потоков в сложных трубопроводах энергетических установок / Беляев Н. М., Белик Н. П., Польшин А. В. – К.: Высшая школа, 1985. – 160 с.
8. Меркин Д. Р. Введение в теорию устойчивости движения / Меркин Д. Р. – М.: Наука, 1971. – 312 с.

пост. 18.10.10

## Численное моделирование частотно-концентрационной зависимости оптической активности неидеальных сверхрешеток

*РУМЯНЦЕВ В.В., ФЕДОРОВ С.А., ПРОСКУРЕНКО М.В.*

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

Проведено феноменологическое рассмотрение естественной оптической активности и выполнено численное моделирование концентрационной зависимости удельного угла вращения неидеального 1D-многослойника. В качестве модельной системы выбрана двухподрешеточная система терпеновых алкоголятов алюминия. Выявлены различные механизмы гиротропии, обусловленные соответствующим типом разупорядочения исследуемых систем, и особенности его влияния на концентрационную зависимость оптической активности. На основе развитой феноменологической теории изучена частотная зависимость удельного угла вращения плоскости поляризации линейно поляризованного света для случая молекулярнокристаллического многослойника, содержащего примесные слои с точечными дефектами. Последнее создает дополнительные возможности моделирования оптически активных многослойных композитных материалов.

Проведено феноменологічний огляд природничої оптичної активності та виконано чисельне моделювання концентраційної залежності питомого куту обертання неідеального багатослойника. В якості модельної системи вибрана двохнадрітчасточна система терпенових алкоголятів алюмінію. Виявлені різноманітні механізми гиротропії, які зумовлені відповідним типом разупорядкування досліджуваних систем, і особливості його впливу на концентраційну залежність оптичної активності. На основі розвиненої феноменологічної теорії вивчена частотна залежність питомого куту обертання площини поляризації лінійно поляризованого світла у випадку молекулярнокристалічного багатослойника, який містить домішкові шари з точковими дефектами. Останій створює доповіжні можливості моделювання оптично активних багатослойникових композитних матеріалів.

The problem of finding polariton modes (necessary for calculating gyrotropic characteristics) in space-dispersed superlattices is not yet solved. 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 such a case the contribution of individual layers 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 calculating the specific rotation angle of plane of polarization of light propagating through a nonideal 1D-superlattice, which varies in composition as well as in layers' width.

**Введение.** В настоящее время имеется значительное число работ [1-3], посвященных исследованиям оптических свойств идеальных и неидеальных диэлектрических сверхрешеток. Актуальность таких исследований обусловлена потребностями электротехники и электроники в слоистых структурах, а также прогрессом в развитии теории оптических свойств сверхрешеток. Разработанные в [4,5] методики расчета коэффициентов прохождения и показателей преломления света позволяют выявлять их частотно-концентрационную зависимость и, следовательно, оказываются полезными при моделировании композитных материалов 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. Актуальность таких исследований тем более очевидна, поскольку 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 [6,7]. Кроме того, гиротропия часто является единственно возможным

способом [8] определения стерео- и кристаллохимических характеристик, а также тонких деталей строения соответствующих пространственно диспергирующих структур.

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.

Ниже рассмотрено распространение света вдоль слоевых оптических осей, перпендикулярных плоскости этих слоев. Получено аналитическое выражение для удельного угла вращения, которое позволяет выявлять частотно-концентрационную зависимость этой величины.

**1. 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:

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

В (1)  $\rho_{n\alpha}(\omega)$  и  $a_{n\alpha}(\omega)$  – конфигурационно зависимые удельный угол вращения плоскости поляризации света и толщина  $\alpha$ -го слоя  $n$ -ой элементарной ячейки;  $\sigma$  – 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 [9], действующий на конфигурационно зависимую функцию

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

$$\Delta \rho_{\alpha}^{\mu(\alpha)} = \rho_{\alpha}^{\mu(\alpha)} - \rho_{\alpha}^{(1)}, \quad \Delta a_{\alpha}^{v(\alpha)} = a_{\alpha}^{v(\alpha)} - a_{\alpha}^{(1)}.$$

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.

$\rho(\omega)$ . 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:

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

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

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

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.

тарную ячейку. Эти углы, в отличие от  $\rho_{n\alpha}^{\mu(\alpha), \nu(\alpha)}$  (который измеряется в единицах град./ед. длины) имеют размерность «градус».  $C_{\alpha}^{\mu(\alpha)}, C_{\alpha}^{\nu(\alpha)}$  – концентрации дефектов-слоев, отличных от слоев базового вещества по составу и толщине соответственно.

Для конкретизации результатов рассмотрим распространение электромагнитного излучения в несовершенной алюминийорганической 1D-сверхрешетке с двумя элементами-слоями в ячейке: первый слой которой – ментилат алюминия  $Al(O-Ment)_3$  ( $\rho_1^{(1)} = -61,2$ ), а второй – борниллат алюминия  $Al(O-Born)_3$  ( $\rho_2^{(1)} = -36,7$ ). Пусть первая подрешетка содержит примесные слои  $I-MentOH$  ( $\rho_1^{(2)} = -45,5$ ), а вторая –  $I-$

$$\rho = a_1^{(1)} [\rho_1^{(1)} + a\rho_2^{(1)} + \rho_1^{(1)} f_1 C_{T1}^{(2)} + \rho_2^{(1)} f_2 a C_{T2}^{(2)} + (\rho_1^{(2)} - \rho_1^{(1)}) (1 + f_1 C_{T1}^{(2)}) C_{C1}^{(2)} + (\rho_2^{(2)} - \rho_2^{(1)}) (1 + f_2 a C_{T2}^{(2)}) C_{C2}^{(2)}] \quad (5)$$

В формуле (5) приняты следующие обозначения:

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

Графически концентрационная зависимость  $\rho = \rho(C_{1C(T)}^{(2)}, C_{2C(T)}^{(2)})$  удельного угла вращения плоско-

$BornOH$  ( $\rho_2^{(2)} = -35,4$ ). Используемые в нашей работе значения величин углов удельного вращения получены авторами [7]. 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  $C(T)$  обозначена вариация примесей-слоев по составу или по толщине). Несложные преобразования позволяют на основе формулы (4) получить следующую концентрационную зависимость удельного угла вращения  $\rho = \rho(C_{1C(T)}^{(2)}, C_{2C(T)}^{(2)}) \equiv \langle \rho \rangle / N$  плоскости поляризации света в двухподрешеточной неидеальной 1D-сверхрешетке:

сти поляризации света в исследуемой неидеальной сверхрешетке представлена на рис. 1 и 2. В случае а) на рис. 1 представлена вариация слоев сверхрешетки только по толщине, а в случае б) – слои варьируются лишь по составу. Рис.2. отражает наличие примесных слоев только в первой подрешетке (для простоты), различающихся как по составу, так и по толщине.

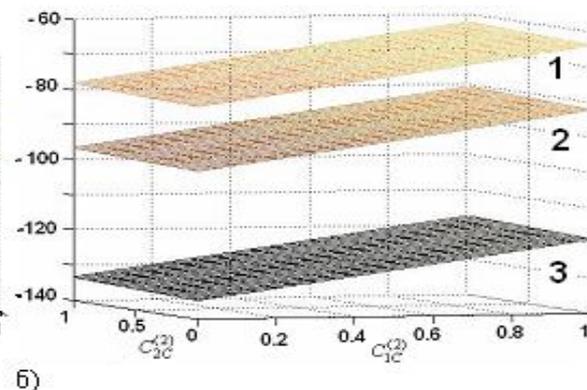
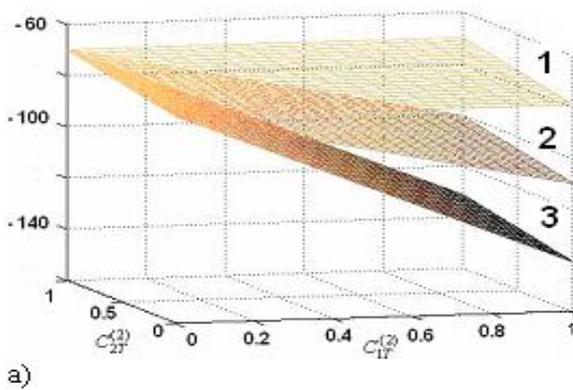


Рис. 1. Концентрационная зависимость  $\rho = \rho(C_{1C(T)}^{(2)}, C_{2C(T)}^{(2)})$  удельного угла вращения плоскости поляризации света в исследуемой неидеальной сверхрешетке: в случае а)  $a = 0,5$ , причем 1 соответствует значению  $a_1^{(2)} / a_1^{(1)} = 1$ ; 2 – значению отношения  $a_1^{(2)} / a_1^{(1)} = 1,5$ ; а 3 –  $a_1^{(2)} / a_1^{(1)} = 2$ ; в случае б)  $a_1^{(2)} / a_1^{(1)} = 0,9$ , причем величина  $a$  равна 0,5; 1; и 2 соответственно для 1, 2 и 3.

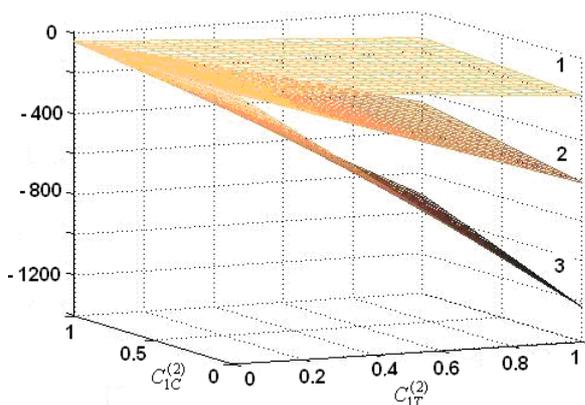


Рис. 2. Концентрационная зависимость  $\rho = \rho(C_{1C(T)}^{(2)}, C_{2C(T)}^{(2)})$ , для  $a = 0,1$ , причем случай 1 соответствует значению  $a_1^{(2)} / a_1^{(1)} = 3$ , 2 –  $a_1^{(2)} / a_1^{(1)} = 10$ , 3 –  $a_1^{(2)} / a_1^{(1)} = 20$ .

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  $\langle \rho(\omega) \rangle$  может изменяться в широких пределах (см., например, рис. 1 и 2). Последнее раскрывает дополнительные возможности моделирования оптически активных многослойных композитных материалов.

$$\rho(\omega, C_{mi}, C_{or}, C^{(1)}, C^{(2)}) = \rho_{mi}(\omega, C_{mi})(a_1 + \Delta a_1 C^{(1)}) + \rho_{or}(\omega, C_{or})(a_2 + \Delta a_2 C^{(2)}) \quad (7)$$

где  $\rho_{mi}(\omega, C_{mi})$ ,  $\rho_{or}(\omega, C_{or})$  - удельные углы вращения смешанного и ориентационно разупорядоченного молекулярных кристаллов;  $a_1$ ,  $a_2$  - толщины первого и второго слоев соответствующей идеальной сверхрешетки;  $C_{mi}$ ,  $C_{or}$  - концентрации изотопических примесей и ориентационно разупорядоченных молекул, а  $C^{(1)}$ ,  $C^{(2)}$  - концентрации инородных слоев в соответствующих подрешетках, толщины которых отличаются от толщин слоев идеальной системы на величины  $\Delta a_1$ ,  $\Delta a_2$ . Каждое из слагаемых (7) имеет смысл угла вращения (соответствующей подрешеткой), приходящегося на одну элементарную ячейку.

В наиболее общем случае, как показано в [10], удельный угол вращения  $\rho(\omega, \{C\})$  многокомпонент-

$$A^{\nu\mu} = \left[ (E_\nu / E_\mu)^{1/2} P_{0f}^{i\nu} Q_{f0}^{j\mu} + (E_\mu / E_\nu)^{1/2} Q_{of}^{z\nu} P_{f0}^{l\mu} \right] e_{ilz} \quad (9)$$

$$F^{\nu\mu}(\omega, \{C\}) = \left[ \frac{1}{\hbar^2 \omega^2 - (E_\nu)^2} \right]^{1/2} \left\{ \left[ \hat{\sigma}^{-1}(\omega, \{C\}) - \hat{U}(\omega) \right]^{\nu\mu} \right\} \left[ \frac{1}{\hbar^2 \omega^2 - (E_\mu)^2} \right]^{1/2} \quad (10)$$

В формулах (9), (10)  $E_\nu$ ,  $E_\mu$  - энергии возбуждения молекул,  $\bar{P}_{of}^\nu$ ,  $\bar{P}_{f0}^\mu$  - матричные элементы операторов дипольных моментов, а  $\hat{Q}_{of}^\nu$ ,  $\hat{Q}_{f0}^\mu$  - матричные элементы операторов производных от операторов молекулярных токов соответственно  $V$ -го и  $\mu$ -го сортов молекул, явный вид матричных функций  $\hat{\sigma}$  (локаторной

**2. Микроскопическая теория оптической активности неидеальных сверхрешеток.** Выражение для удельного угла вращения  $\rho(\omega, C_{mi}, C_{or}, C^{(1)}, C^{(2)})$  плоскости поляризации линейно поляризованного света, проходящего через неидеальную двухслойную молекулярную сверхрешетку (первый слой - смешанный молекулярный кристалл, а второй - ориентационно разупорядоченный), как следует из (4), имеет вид:

ного топологически упорядоченного примесного (в том числе, как смешанного, так и ориентационно разупорядоченного) молекулярного кристалла с примитивной решеткой в экситонной области спектра в рамках одноуровневой модели имеет вид:

$$\rho(\omega, \{C\}) = \frac{2\pi\omega^2 \hbar}{\nu c^2} \sum_{\nu, \mu=1}^r A^{\nu\mu} F^{\nu\mu}(\omega, \{C\}). \quad (8)$$

Здесь  $V$  - объем элементарной ячейки молекулярного кристалла,  $r$  - число молекулярных групп, каждая из которых соответствует определенному  $V$ -му или  $\mu$ -му сорту молекул;  $\{C\} \equiv C_1, C_2, \dots, C_r$ . Величины

$A^{\nu\mu}$  и  $F^{\nu\mu}$  соответственно равны:

функции) и  $\hat{U}$  (пропорциональной матрице  $W^{\nu\mu}$  резонансного межмолекулярного взаимодействия) приведен в работе [10],  $e_{ilz}$  - тензор Леви - Чевита.

Для бинарных систем величины  $F^{11}$ ,  $F^{22}$ ,  $F^{12}$ ,  $F^{21}$  в одноузельном приближении равны:

$$F^{\nu\mu} = \frac{1}{\varphi(\omega, C_1, C_2)} \begin{bmatrix} C_1 (\hbar^2 \omega^2 - E_2^2 - 2C_2 E_2 W^{22}) & 2C_2 C_1 (E_1 E_2)^{1/2} W^{12} \\ 2C_2 C_1 (E_1 E_2)^{1/2} W^{21} & C_2 (\hbar^2 \omega^2 - E_1^2 - 2C_1 E_1 W^{11}) \end{bmatrix}, \quad (11)$$

$$\varphi(\omega, C_1, C_2) \equiv \left\| \hat{\sigma}^{-1}(\omega, \{C\}) - \hat{U}(\omega) \right\| = \hbar^4 \omega^4 - \hbar^2 \omega^2 (2E_1 C_1 W^{11} + 2E_2 C_2 W^{22} + E_1^2 + E_2^2) + 4E_1 E_2 C_1 C_2 (W^{11} W^{22} - W^{12} W^{21}) + 2E_1 E_2^2 W^{11} C_1 + 2E_2 E_1^2 W^{22} C_2 + E_1^2 E_2^2 \quad (12)$$

$$C_1 + C_2 = 1.$$

В (12)  $C_1$  - концентрация молекул базового вещества смешанного или ориентационно разупорядоченного молекулярного кристалла, а  $C_2 \equiv C_{mi(or)}$ , нули функции  $\varphi(\omega, C_1, C_2)$  определяют перенормированные экситонные уровни энергии  $E_1^{ex}(C_{mi(or)})$ ,  $E_2^{ex}(C_{mi(or)})$  молекулярного кристалла, каждая из которых лежит в определенном интервале значений концентраций.

Характер частотно-концентрационной зависимости вращательной способности определяется взаимным расположением экситонных энергий и значениями параметров

$A^{\nu\mu}$ ,  $C_{mi}$ ,  $C_{or}$ ,  $C^{(1)}$ ,  $C^{(2)}$ ,  $a_1$ ,  $\Delta a_1$ ,  $a_2$ ,  $\Delta a_2$ . Из формулы (12) следует, что для частот света, попадающих в одну из областей значений функций  $E_1^{ex}(C_{mi(or)})$ ,  $E_2^{ex}(C_{mi(or)})$  вращательная способ-

ность  $\rho(\omega, C_{mi}, C_{or}, C^{(1)}, C^{(2)})$  при неучете затухания расходятся. В конкретных численных расчетах из большого множества вариантов концентрационной зависимости оптической активности при определенных частотах электромагнитной волны ограничимся лишь следующим случаем. В конкретных расчетах учтено, что для смешанного молекулярного кристалла с хорошей точностью можно допустить [11]

$$W^{11} \approx W^{12} \approx W^{21} \approx W^{22} \equiv W_{mi}, \quad \bar{P}_{of}^1 \approx \bar{P}_{f0}^2, \\ \hat{Q}_{of}^1 \approx \hat{Q}_{f0}^2 \quad (\text{а, следовательно, все}$$

$A^{vu} = const \equiv A^{mi}$ ). Для ориентационно разупорядоченного молекулярного кристалла [12]  $E_1 \approx E_2$ .

Полагаем, что для смешанного молекулярного кристалла  $E_1^{mi} = 3 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$ ,  $E_2^{mi} = 4 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$ ,

$W_{mi} = 2 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$ , а для ориентационно разупорядоченного  $E_1^{or} \approx E_2^{or} = 4,01 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$ ,

$W_{or}^{11} \approx W_{or}^{22} = 0,8 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$ ,

$W_{or}^{12} \approx W_{or}^{21} = 0,3 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$ ,

причем  $A_{or}^{12} / A^{mi} \approx A_{or}^{21} / A^{mi} = 3$ ,

$$A_{or}^{11} / A^{mi} \approx A_{or}^{22} / A^{mi} = 2.$$

Численное моделирование в работе выполнено при следующих значениях величин концентрации инородных слоев сверхрешетки:  $C^{(1)} = 0,2$ ;  $C^{(2)} = 0,3$ ,

при относительных толщинах  $\Delta a_1 / a_1 = \Delta a_2 / a_2 = 0,1$  ( $a_1 = a_2$ ). Графики концентрационных зависимостей удельного угла вращения света изображены на рис. 3 в относительных единицах  $\rho / K$ , где  $K = \frac{2\pi a_1 A^{mi}}{v c^2 \hbar}$  (см. (8)). Частотная зави-

симость удельного угла вращения  $\rho = \rho(\omega, C_{or}, C_{mi})$  при конкретных значениях концентраций  $C_{or}$  и  $C_{mi}$  отражена на рис. 3 (а, б).

Легко видеть, при конкретных значениях концентраций  $C_{or}$  и  $C_{mi}$  отражена на рис. 3 (а,б). Легко видеть, что изменение концентрации  $C_{mi}$  при постоянной  $C_{or}$  приводит к взаимному удалению резонансных частот (случай а), а изменение  $C_{or}$  при постоянной  $C_{mi}$  - напротив, к их сближению (случай б).

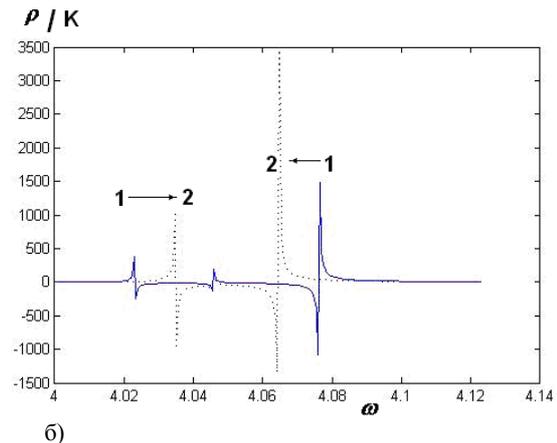
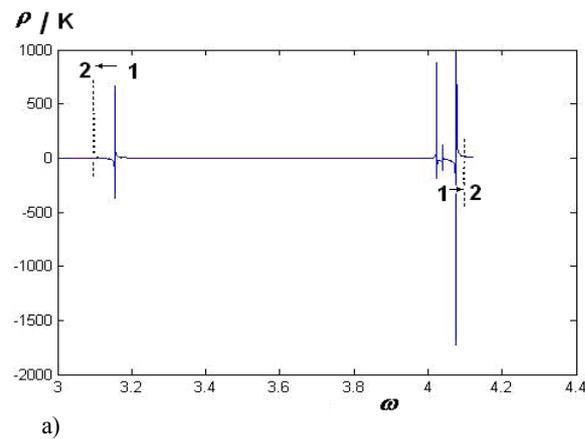


Рис. 3. Частотная зависимость удельного угла вращения  $\rho = \rho(\omega, C_{or}, C_{mi})$  при значениях концентрации  $C_{or}$  и  $C_{mi}$  соответственно равных: в случае а) 1 - 0,2 и 0,17; 2 - 0,2 и 0,45; в случае б) 1 - 0,2 и 0,2; 2 - 0,5 и 0,2.

### Заключение

Проведенное в работе феноменологическое рассмотрение естественной оптической активности неидеального 1D-многослойника позволяет проводить численное моделирование концентрационной зависимости удельного угла вращения для систем с произвольным числом подрешеток (при заданных слоевых значениях удельных углов вращения плоскости поляризации и толщинах слоев). Выбор в качестве модельной двухподрешеточной системы алюминийорганической 1D-сверхрешетки с двумя элементами-слоями в ячейке: первый слой которой – ментилат алюминия  $Al(O-Ment)_3$ , а второй – борниллат алюминия  $Al(O-Born)_3$  обусловлен тем, что она может обладать большим оптическим вращением (например, в случае холестерического ЖК зна-

чение удельного угла вращения плоскости поляризации света может достигать нескольких тысяч градусов на миллиметр [3]). Выявлены различные механизмы гиротропии, обусловленные соответствующим типом разупорядочения исследуемых систем, и особенности его влияния на концентрационную зависимость оптической активности. На основе развитой феноменологической теории в работе изучена частотная зависимость удельного угла вращения  $\rho = \rho(\omega, C_{or}, C_{mi})$  плоскости поляризации линейно поляризованного света для случая молекулярного кристалла. Впервые рассмотрен многослойник, содержащий примесные слои с точечными дефектами. Последнее создает дополнительные возможности моделирования оптически активных многослойных композитных материалов.