

**ГЕНЕРАЦИЯ ПУЧКОВ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧНЫХ ИОНОВ
ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ СВЕРХСИЛЬНОГО ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ
С РАЗРЕЖЕННЫМИ МИШЕНЯМИ**

А.В. Коржиманов

Институт прикладной физики РАН

Высокоэнергетичные ионы находят широкое применение в большом количестве приложений, например, в таких, как инерциальный термоядерный синтез или лечение раковых опухолей. Поэтому проблема генерации пучков ионов при взаимодействии сверхсильного лазерного излучения с веществом чрезвычайно актуальна.

Целью данной работы является развитие нового подхода к ускорению пучков протонов и лёгких ионов до энергий уровня сотен МэВ и выше. В основе рассматриваемого механизма лежит тот факт, что при нормальном облучении твердотельной мишени лазерным излучением релятивистской интенсивности ($I > 10^{18}$ Вт/см² для длины волны порядка 1 мкм) под действием ponderomotorной силы, действующей со стороны излучения, происходит смещение электронной компоненты относительно ионов. При этом возможно создание огромных полей разделения зарядов, сравнимых с лазерным полем (т.е. порядка десятков МВ/мкм). Эти поля будут существовать до тех пор, пока либо не кончится импульс, либо ионы не сдвинутся значительно со своих первоначальных позиций. В любом случае, пока такое поле существует, можно получить ускорение легкого иона, помещенного в облучаемый слой. Проведены соответствующие численные расчеты, которые показали особую эффективность предлагаемого метода для интенсивностей излучения порядка $I = 10^{20} - 10^{22}$ Вт/см², что является вполне достижимым на современном этапе развития лазерных технологий. Построена простая аналитическая модель взаимодействия излучения с плоским слоем плазмы.

Эта модель показала, что для эффективного ускорения легких ионов необходимо использование максимально разреженной плазмы. При этом нижняя граница возможных значений плазменной концентрации определяется эффектом просветления, когда плазма становится прозрачной для излучения на данной частоте и заданной интенсивности. Эта граница зависит от амплитуды падающей волны вследствие релятивистских эффектов, в частности, из-за изменения эффективной плазменной частоты по причине лоренцевского увеличения массы электрона при его движении в поле волны. При меньших концентрациях плазмы отжатие электронов не происходит, и не создается необходимая для ускорения разность потенциалов в слое. При оптимальном выборе плотности облучаемой плазмы разность потенциалов определяется формулой:

$$\Delta\varphi[\text{МВ}] \approx 0.40(I[\text{Вт/см}^2])^{3/4}(\lambda[\text{мкм}])^{3/2},$$

где I, λ – интенсивность и длина волны лазерного излучения соответственно.

Результаты аналитических расчетов были проверены численным моделированием, которое показало хорошее качественное и количественное согласование.

Возможной проблемой на пути реализации предлагаемого механизма ускорения является то, что в оптимальном режиме плотность облучаемого вещества должна быть в десятки раз ниже твердотельной. Это, по всей видимости, может быть достигнуто в нанопористых материалах, технология производства которых на сегодняшний день хорошо развита.

МНОГОФОТОННАЯ ФЛУОРЕСЦЕНТНАЯ МИКРОСКОПИЯ СИЛЬНОРАССЕИВАЮЩИХ ОБЪЕКТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

А.Р. Катичев, Е.А. Сергеева

Институт прикладной физики РАН

Многофотонная флуоресцентная микроскопия (МФМ) – один из наиболее перспективных методов изучения структуры сильно рассеивающих сред, таких как биологические ткани, обладающий субмикронным разрешением и значительной глубиной визуализации. Метод МФМ основан на нелинейном двух- или трехфотонном возбуждении флуорофоров в исследуемом образце лазерным излучением ИК диапазона (700-1000 нм) и регистрации флуоресценции в видимом диапазоне длин волн [1]. За счет низкой вероятности двухфотонного возбуждения поглощение света локализовано в фокальном объеме, что обеспечивает пространственное разрешение метода на субмикронном уровне. Большая проникающая способность ИК-излучения (по сравнению с видимым излучением) в биологические ткани дает возможность сохранять такое разрешение вплоть до глубин в несколько сотен микрон. Вышеперечисленные свойства обеспечивают методу МФМ преимущество перед традиционной конфокальной флуоресцентной микроскопией в задачах оптической диагностики живых клеток и структуры биологических тканей.

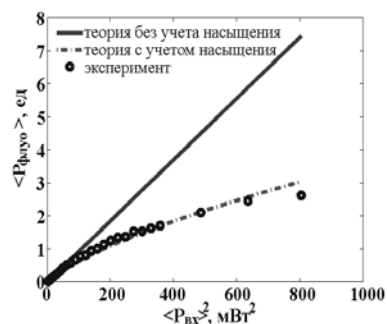
Основной проблемой применения МФМ в биомедицинских исследованиях является подбор флуорофоров. Сравнительно недавно была продемонстрирована перспективность использования полупроводниковых нанокристаллов (квантовых точек) в качестве флуорофоров для МФМ. Квантовые точки имеют широкую полосу поглощения в синей области спектра и узкую полосу флуоресценции, параметрами которой можно управлять, меняя размер нанокристалла. Кроме того, квантовые точки являются наиболее «яркими» флуорофорами: они обладают сечением двухфотонного поглощения, на два порядка превышающим таковое для типичных химических флуоресцентных красителей и флуоресцирующих белков, что делает их привлекательными для исследования толстых образцов рассеивающих биологических тканей *in vivo*. Вместе с тем, использование квантовых точек в биомедицинской диагностике требует детального изучения особенностей их взаимодействия с высокоинтенсивным лазерным излучением, а также выявления ограничений на макси-

мальную глубину визуализации структуры маркированных ими рассеивающих объектов.

Для оценки возможностей применения квантовых точек в многофотонной микроскопии сильно рассеивающих объектов проведена серия модельных экспериментов на установке лазерной сканирующей микроскопии Carl Zeiss LSM 510, оснащенной фемтосекундным Ti:Sa лазером с перестраиваемой длиной волны. В первом эксперименте исследована зависимость интенсивности флуоресценции коллоидного раствора квантовых точек от мощности накачки последовательностью импульсов с длительностью 100 фс и частотой следования 80 МГц на длине волны 800 нм. Выявлен эффект насыщения флуоресценции, проявляющийся в отклонении указанной зависимости от квадратичного закона. Этот эффект наблюдался ранее [2], но не был объяснен количественно. В настоящей работе предложено оригинальное теоретическое описание этого явления.

В рамках кинетических уравнений рассмотрено нелинейное возбуждение двухуровневой квантовой системы последовательностью импульсов ИК-излучения. При этом учтено, что характерное время релаксации возбужденного состояния у квантовых точек в несколько раз превышает период следования фемтосекундных импульсов накачки. В результате получено выражение для средней по времени мощности флуоресценции ($\langle P_{\text{флюо}} \rangle$) как функции средней мощности двухфотонной накачки ($\langle P_{\text{вх}} \rangle$). Показано хорошее соответствие теоретической и экспериментальной зависимостей (см. рисунок). Продемонстрировано, что эффект насыщения вызван совокупным влиянием двух факторов: большим сечением двухфотонного поглощения и медленной релаксацией возбужденного состояния. Важным следствием насыщения явилось увеличение эффективной области двухфотонной засветки, приводящее к снижению пространственного разрешения.

Во втором эксперименте исследованы границы применимости метода МФМ для глубинного имиджинга структуры рассеивающих объектов с субмикронным разрешением. Исследования проводились на модельной рассеивающей среде, представляющей собой макроскопически однородную водно-глицериновую суспензию полистироловых микросфер диаметром 1 мкм с добавлением квантовых точек в физиологически допустимой концентрации [3]. По своим оптическим характеристикам такая среда близка к биологическим тканям. В ходе эксперимента продемонстрировано, что структура флуоресцирующей модельной среды, обладающей сильным рассеянием, визуализируется вплоть до глубин в 150 мкм с сохранением пространственного разрешения.



[1] Denk W., Stricker J.H., Webb W.W. //Science, 1990. V.248. P. 73.

- [2] Heuf R.F., Marrocco M., Cramb D.T. //J. Phys. Chem, 2007. V.111. P. 18942.
[3] www.probes.invitrogen.com/products/qdot

БЛИЖНЕПОЛЬНАЯ СВЧ ЛОКАЦИЯ ОБЪЕКТА СФЕРИЧЕСКОЙ ФОРМЫ

М.А. Галин¹⁾, А.Н. Резник²⁾

¹⁾Нижегородский госуниверситет

²⁾Институт физики микроструктур РАН

Ближнепольная (БП) локация является эффективным методом зондирования сред и применяется для поиска дефектов в материалах, обнаружения опухолей в биологических тканях и др. Особенностью данного метода является высокая разрешающая способность, обычно превышающая длину волны на несколько порядков. В работах [1, 2] была развита теория БП локации плоскостойкой среды, позволившая изучить дальное действие устройства [3]. В данной работе построена модель диагностики объекта сферической формы, на основе которой исследован ряд новых явлений, которые не могли быть изучены в рамках плоской модели.

Шар располагался в однородной поглощающей среде на произвольном удалении от антенны локатора. Рассматриваемое устройство представляло собой СВЧ резонатор, нагрузкой которого служила антенна с входным импедансом $Z=R+iX$. Наличие исследуемого объекта в ближней зоне антенны вызывало возмущение импеданса Z . Отклик устройства на это возмущение фиксировался по частотной зависимости коэффициента отражения на входе резонатора $\Gamma(f)$ в виде сдвига резонансной частоты f_0 и изменения параметра согласования $\Gamma_m=\Gamma(f_0)$. Расчет импеданса Z производился при помощи теоремы Пойнтинга. Волновые и квазистатические поля излучения антенны локатора генерировались поверхностными электрическими токами, пространственная структура которых считалась заданной в плоскости апертуры. Искомые поля представлялись в виде суперпозиции невозмущенных и дифрагированных полей. Первые рассчитывались при помощи функции Грина свободного пространства. Вторые вычислялись в приближении Рэлея, которое справедливо при $d_s < D$, где d_s и D – диаметры шара и апертуры антенны соответственно. С вычислительной точки зрения, за счет оптимального выбора области интегрирования полей в теореме Пойнтинга, задача сведена к расчету двукратных интегралов, а в частном случае, когда центр шара находится на оси симметрии антенны – однократных интегралов.

Первая наша задача состояла в изучении радиационного эффекта (РЭ), экспериментально обнаруженного и интерпретированного при помощи «плоской» модели в [3]. РЭ состоит в том, что реактанс антенны X формируется под воздействием лишь квазистатических полей антенны, а сопротивление R – как квазистатических, так и волновых. Это приводит к тому, что при достаточно слабом поглощении в окружающей среде зависимость R от расстояния h между антенной и объектом имеет более медленный характерный масштаб, чем зависимость $X(h)$. Иллюстрирующие РЭ расчеты показаны на рис. нормированными функциями $R_n=(R(h)-R(\infty))/(R(0)-R(\infty))$, $X_n=(X(h)-X(\infty))/(X(0)-X(\infty))$ при различных значениях тангенса угла потерь в

среде (рис. (а) соответствует среде с сильным поглощением: $tg\delta=10^{-1}$, рис. (б) – среде со слабым поглощением: $tg\delta=10^{-4}$). Сплошными линиями показаны результаты для шара (шар – на оси антенны), пунктирными – для плоского слоя. Расчеты выполнены для диапазона волн $\lambda=30$ см при $D=1$ см. Предполагалось, что диэлектрические проницаемости исследовавшихся объектов одинаковы, а диаметр шара равен толщине плоского слоя. Из рис. можно видеть существенную разницу масштабов изменения функций $R_n(h)$ и $X_n(h)$ для слабопоглощающей среды, которая имеет место при зондировании как плоского, так и сферического тел.

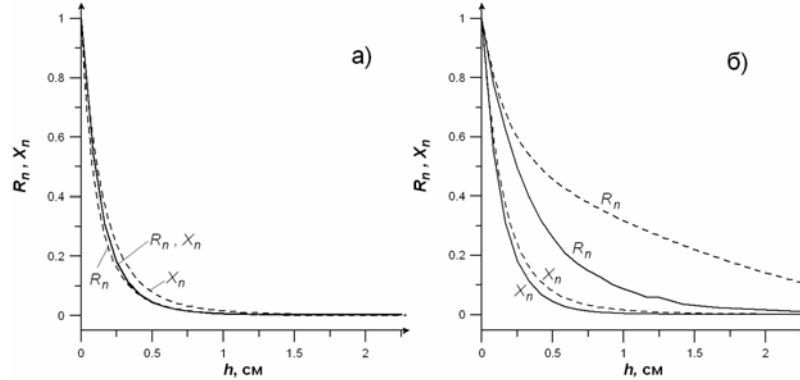


Рис.

Развитая модель позволила исследовать разрешающую способность БП локатора в плоскости апертуры антенны (x, y). При этом обнаружены обусловленные РЭ особенности двумерных распределений $X(x, y)$ и $R(x, y)$, которые не могли быть изучены в рамках «плоской» модели. В частности, эти распределения анизотропны и различным образом ориентированы относительно направления тока антенны. Выяснилось также, что измерение параметра Γ_m обеспечивает в 2–3 раза лучшее разрешение БП локатора, нежели измерение f_0 .

Изучены перспективы применения БП локатора для обнаружения злокачественной опухоли молочной железы – карциномы, которая моделировалась сферической неоднородностью в однородной окружающей среде. Диэлектрические проницаемости ϵ здоровой и пораженной тканей взяты из литературы, при этом контраст ϵ карциномы составляет 5:1. Найдено оптимальное значение размера апертуры БП локатора – D_0 , обеспечивающее обнаружение опухоли на максимальной глубине d_m . В диапазоне частот $\sim 0,5$ ГГц значение $D_0 \approx 2$ см, при этом опухоли диаметром 0.5–1 см обнаруживаются на глубинах $d_m \approx 0.7$ –0.8 см. Сделанные оценки d_m оказались в 2–4 раза меньше тех значений, которые были получены в [1, 2], где карцинома моделировалась плоским слоем.

Работа поддержана РФФИ, грант N 02-06-16669.

[1] Reznik A.N., Yurasova N.V. // J. Appl. Phys. 2005. V.98. P. 114701.

[2] Резник А.Н., Юрасова Н.В. // ЖТФ. 2006. Т.76, № 1. С. 90.

[3] Резник А.Н., Шерешевский И.А., Вдовичева Н.К. // Радиотехника и электроника. 2008. Т.53, № 6. С. 656.

НЕЛИНЕЙНЫЙ АНАЛИЗ ТЕРМОНАВЕДЕННЫХ ИСКАЖЕНИЙ ПУЧКА В ДИСКОВОМ Yb:YAG КРИОГЕННОМ ЛАЗЕРНОМ УСИЛИТЕЛЕ

А. Г. Вяткин

Институт прикладной физики РАН

Дисковая геометрия активного элемента с торцевыми накачкой и криогенным охлаждением является одной из наиболее перспективных для создания твердотельных лазеров высокой средней и пиковой мощности с высоким качеством пучка [1]. При этом легко масштабируется мощность, и сохраняется эффективный теплоотвод. Охлаждение до низких температур значительно улучшает характеристики активной среды. При температуре ниже 150 К Yb:YAG хорошо описывается четырехуровневой схемой (при комнатной температуре — квазитрехуровневой). Кроме того, при охлаждении до низких температур у многих материальных сред значительно возрастает теплопроводность и снижается модуль линейного расширения и $\partial n/\partial T$, что способствует получению пучков высокого качества даже при больших тепловых нагрузках.

Для расчётов принята следующая конфигурация. Диск Yb:YAG $0,6 \times \varnothing 10$ мм (допирование Yb 10% at., ориентация [001]) накачивается полупроводниковым лазером, диаметр пучка 6 мм. Мощность тепловыделения составляет 100 Вт. В качестве хладопроводов используются сапфировый диск $3 \times \varnothing 30$ мм и медный цилиндр размером ~ 60 мм, охлаждаемые жидким азотом (см. рис. 1).

Методом конечных разностей с использованием итерационных схем численно рассчитано распределение температуры во всей системе, упругие напряжения и термонаведенная линза в активном элементе и тепловая линза в сапфире в изотропном приближении. Учтены зависимости коэффициента теплопроводности, $\partial n/\partial T$ и коэффициента теплового расширения тел от температуры. Для расчетов применены эффективные итерационные схемы, основанные на методах прогонки, существенно сокращающие время счета по сравнению с методами простой итерации и Зейделя [2]. Так, при расчете температуры одиночного диска в линейном приближении на сетке 100×100 точек времена работы алгоритмов различаются в 20 раз, при этом относительная разница решений не превышает 1% в области пучка. При расчете системы с хладопроводами выигрыш в скорости менее ощутим, но по-прежнему существенен (разница в 2–3 раза).

При тепловых нагрузках порядка 100 Вт нелинейные эффекты существенно влияют на решение, поскольку теплопроводность YAG уменьшается в 2 раза при изменении температуры от 77 К (температура конденсации азота) до 107 К [3]. Так,

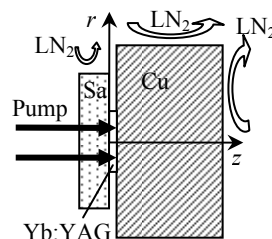


Рис. 1

при охлаждении активного элемента только с одного торца (при помощи медного хладопровода) максимальная температура в кристалле превышает 150 К уже при тепловой мощности 60 Вт (рис.2, кривая 1). Применение второго хладопровода позволяет при той же пиковой температуре повысить мощность до 125 Вт, а при тепловой нагрузке 100 Вт температура не превышает 135 К (кривая 2; кривые 3 и 4 – средние по области пучка температуры при охлаждении одним и двумя хладопроводами соответственно, горизонтальная линия соответствует температуре хладагента). При этом упругие напряжения в активном элементе в 10 раз меньше предельно допустимых. На рис.3 представлена стигматичная составляющая набега фазы за один проход излучения в зависимости от радиуса. Наибольший вклад в термонаведенную линзу вносит искривление торцов активного элемента (кривая 1).

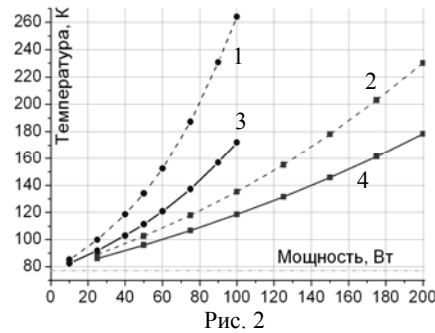


Рис. 2

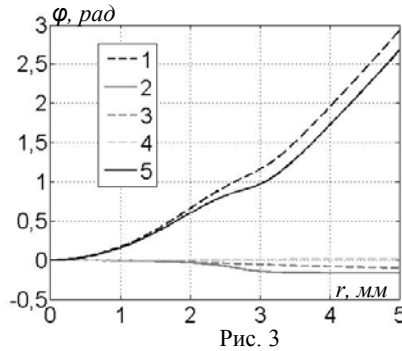


Рис. 3

Кривые 2 и 3 – вклад $\partial n/\partial T$ Yb:YAG и сапфира соответственно. Искажения, вызванные упруго-оптическим эффектом, малы (кривая 4). Кривая 5 – суммарная фаза. Фокусное расстояние термонаведенной линзы ~ 20 м, коэффициент деполяризации при оптимальной ориентации кристалла 0,025%.

Таким образом, при мощности тепловыделения 100 Вт и охлаждении активного элемента двумя хладопроводами можно ожидать высокое качество лазерного пучка. Рост мощности ограничивается быстро уменьшающейся с ростом температуры теплопроводностью активного элемента, но возможно незначительное (в 1,5–2 раза) увеличение тепловой нагрузки при неизменных размерах активного кристалла.

- [1] Контаг К., Каршевский М., Стивен К., Гисен А., Хюгель Г. // Квантовая электроника. 1999. Т.28, №12. С. 139.
- [2] Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1977. 656 с.
- [3] Brown D.C. // IEEE Journal of Quantum Electronics. 1997. V.33, №5. P. 861.

КОМПРЕССИЯ ОПТИЧЕСКИХ ИМПУЛЬСОВ В РЕЗОНАНСНОЙ ДВУХУРОВНЕВОЙ СРЕДЕ

В.А. Половинкин^{1), 2)}, Е.В. Радионычев^{1), 2)}

¹⁾Нижегородский госуниверситет

²⁾Институт прикладной физики РАН

Получение ультракоротких лазерных импульсов является актуальной задачей современной оптики. Компрессия оптических импульсов достигается при распространении излучения в диспергирующих оптических волокнах методами Фурье-оптики (в системах дифракционных решёток, экранов и призм), а также при отражении излучения от зеркал с программируемой дисперсией. Перечисленные методы решают задачу полной компенсации слабо нелинейной зависимости фаз гармоник поля от их номера и работают в области прозрачности среды.

Компрессия частотно модулированного излучения в условиях резонансного поглощения исследовалась применительно к гамма-диапазону [1, 2] для случая ступенчатой модуляции фазы излучения.

В настоящей работе исследуется компрессия частотно модулированного импульсно-периодического электромагнитного излучения в резонансной двухуровневой среде для широкого диапазона значений несущей частоты и произвольного закона модуляции частоты излучения.

Показано, что основными преимуществами резонансной компрессии являются возможность одновременной компенсации разности фаз и фильтрации гармоник, а также возможность сильного преобразования поля при малой толщине вещества. При этом реализуется возможность компенсации сильной нелинейности в зависимости фаз гармоник от их номера, недостижимая нерезонансными методами.

Компрессия в резонансном поглотителе исследована для импульсов, сформированных в гармонически модулированной резонансной двухуровневой среде. Указанные импульсы возникают при взаимодействии монохроматического излучения с резонансными частицами, параметры которых (частота квантового перехода либо скорость движения) гармонически меняются во времени [3].

Результаты проведённой численной оптимизации показывают, что для рассмотренных импульсов компрессия в резонансном поглотителе позволяет достичь больших значений пиковой интенсивности, чем компрессия в нерезонансной среде с квадратичной дисперсией. Показано, что пиковая интенсивность импульсов, сформированных в частотно модулированной среде и резонансном поглотителе, может превышать интенсивность падающего монохроматического излучения более чем в семь с половиной раз. Резонансный компрессор позволяет существенно улучшить форму импульсов (см. рис.).

Показано, что основным достоинством метода резонансной компрессии является большая величина дисперсионных параметров $k^{(2)}$, $k^{(3)}$, $k^{(4)}$, ... недостижимая традиционными методами.

Эффективная компрессия в резонансной двухуровневой среде может быть осуществлена тогда, когда в нерезонансной диспергирующей среде она сопряжена с

сильным поглощением либо нелинейным преобразованием поля (гамма диапазон, оптические волокна).

Нами произведены оценки резонансной компрессии импульсов гамма излучения, сформированных в частотно модулированной резонансной двухуровневой среде. Показано, что требуемые значения параметров экспериментально реализуемы.

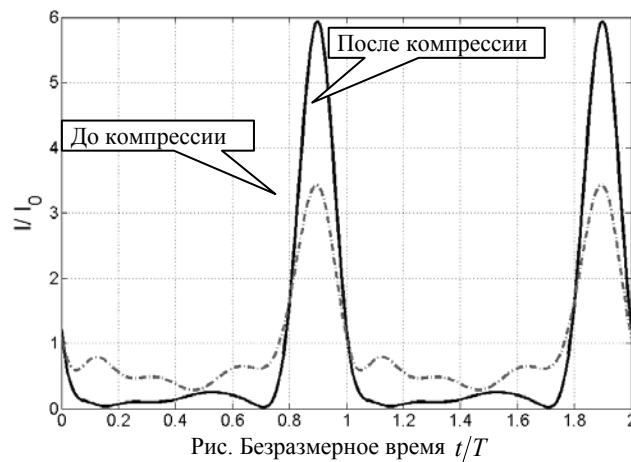


Рис. Безразмерное время t/T

- [1] Helistö P., Ikonen E., Katila T., and Riski K. // Phys. Rev. Lett. 1982. V.46. P. 1209.
 [2] Ikonen E., Helistö P., Katila T., and Riski K. // Phys. Rev. A. 1985. V. 32. P. 2298.
 [3] Половинкин В.А., Радионьчев Е.В. //В кн.: Тр. 11-й научн. конф. по радиофизике. 7 мая 2007 г. /Ред. А.В. Кудрин, А.В.Якимов. Н.Новгород: ННГУ, 2007. С.109.

УПРАВЛЕНИЕ ОПТИЧЕСКИМИ ПАРАМЕТРАМИ БИОЛОГИЧЕСКИХ СРЕД

П.Д. Агрба¹⁾, И.В. Балалаева¹⁾, В.А. Каменский²⁾

¹⁾Нижегородский госуниверситет

²⁾Институт прикладной физики РАН

Развитие неинвазивных методов структурной и функциональной визуализации, мониторинга и управление оптическими параметрами биотканей важны для диагностики и контроля лечения различных тяжелых заболеваний [1,2]. Условием неинвазивности и достаточного разрешения, которые необходимы для мониторинга биологических процессов, отвечает оптическая когерентная томография (ОКТ) – метод наблюдения структуры рассеивающих объектов на глубинах до нескольких мм, основанный на принципах низкокогерентной интерферометрии [3–5]. Принципиальная схема метода ОКТ представлена на рис.1.

Основным элементом установки является интерферометр Майкельсона, в одном из плеч которого расположен источник низкокогерентного излучения с временным масштабом корреляции порядка 100 фс. В опорном плече интерферометра находится движущееся зеркало, которое обеспечивает периодическое изменение длины опорного плеча. В третье плечо помещается рассеивающий образец. Результат интерференции выходящего из среды рассеянного излучения и отраженного от зеркала регистрируется квадратичным фотодетектором. Глубина, с которой приходит сигнал обратного рассеяния, определяется переменной длиной референтного плеча интерферометра с точностью до продольного масштаба когерентности. По измеренным значениям фототока, определяемого мощностью рассеянного назад сигнала, можно восстановить одномерное продольное распределение неоднородностей внутри среды вдоль оси z (А-скан). При сканировании в поперечном направлении из одномерных А-сканов можно получить двумерное распределение мощности принятого сигнала – оптическую томограмму.

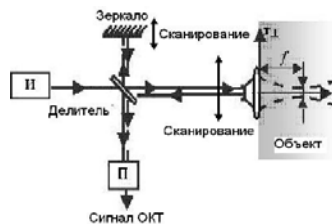


Рис. 1

Одним из актуальных приложений метода ОКТ является оценка структурного состояния кожи в норме и при патологических состояниях. Однако ОКТ-изображения могут иметь как хорошо структурированный вид, так и быть в значительной степени размытыми и нечеткими. Увеличение информативности ОКТ-изображений может быть достигнуто путем управления оптическими характеристиками биотканей, которое, в нашем случае, сводится к изменению их рассеивающих свойств. Для этого рассматривались такие эффекты как иммерсия (выравнивание показателя коэффициента преломления в приповерхностном слое биоткани); просветление (выравнивание показателя коэффициента преломления непосредственно в биоткани); использование контрастирующих агентов, которые позволяют выделить слои и включения на ОКТ-изображениях, создавая градиент концентрации на границах из-за разных коэффициентов диффузии в этих слоях.

При исследовании повышения информативности с помощью иммерсионного эффекта в качестве иммерсионной жидкости была выбрана вода. На рис.2 представлена зависимость глубины проникновения зондирующего излучения от времени. На графике выделяется характерное время максимальной глубины – около 120 минут.

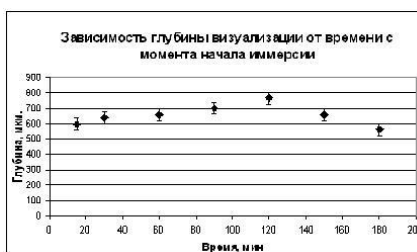


Рис. 2

Другим способом повышения информативности ОКТ-изображения является использование контрастирующих агентов. В качестве агентов были выбраны золотые наноболочки, которые представляют собой кремниевое ядро диаметром 150 нм с золотой оболочкой диаметром 25 нм. У частиц с такими параметрами существует максимум обратного рассеяния на расстоянии 900 нм. Данная длина волны совпадает с центральной длиной волны зондирующего излучения, используемого в установке. На рис. 3 представлена зависимость контраста между эпителиальным и стромальным слоями ОКТ-изображений биоткани в зависимости от времени с момента нанесения суспензии наноболочек.

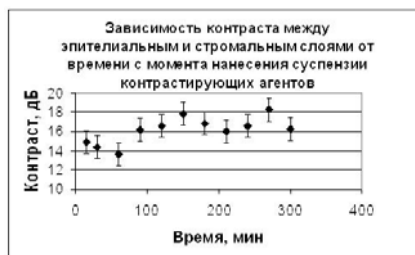


Рис. 3

- [1] Ghosn, Tuchin V.V., Larin K.V. // Optics Letters. 2006. V.31. P. 2314.
 [2] Vargas G., Readinger A., Barton J. K., Dozier S. S., Welch A. J. // Lasers in Surgery and Medicine. 2002. P. 3.
 [3] Fujimoto J.G., Pitris C., Boppart S.A., et al. // Neoplasia. 2000. V. 2. P. 9.
 [4] Gelikonov V.M., Gelikonov G.V., Dolin L.S., Kamensky V.A., Sergeev A.M., Shakhova N.M., Gladkova N.D., Zagaynova E.V. // Laser Physics. 2003. V.13, No 5. P. 692.
 [5] Sergeev A.M., Dolin L.S., Reitze D.N. // Optics & Photonics News. 2001. P. 28.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА СТЫКОВКИ ОДНОМОДОВЫХ СТУПЕНЧАТЫХ СВЕТОВОДОВ В ФПК

В.Б. Махалов¹⁾, С.Н. Менсов^{1,2)}, Ю.В. Полуштайцев²⁾

¹⁾Нижегородский госуниверситет

²⁾Институт металлоорганической химии РАН

Развитие волоконной оптики обуславливает интерес к задачам оптической стыковки световодов в слабопоглощающих фотополимеризующихся композициях (ФПК). Коннектирующие элементы, синтезированные видимым излучением, выходящим из торцов световодов, устойчивы к стандартно используемому для передачи информации инфракрасному излучению благодаря тому, что фотополимеры обладают красной границей фоточувствительности.

Процессы оптической стыковки градиентных волокон в ФПК были исследованы в [1]. Высокая эффективность оптического соединения таких световодов обусловлена согласованием синтезируемой структуры и самих световодов – поперечный профиль полимерного канала близок к распределению показателя преломления в градиентном световоде. Однако в волоконной оптике, как правило, применяются

ступенчатые световоды. В данной работе численно и экспериментально исследована эффективность оптической стыковки в ФПК ($\lambda=0.63 \mu m$) ступенчатых одномодовых световодов для инфракрасного излучения ($\lambda=1.55 \mu m$).

Численное моделирование процесса формирования волноведущих структур в ФПК было основано на решении параболического уравнения (1). Распределение показателя преломления в световодах и в среде задавалось системой уравнений (2). При моделировании были использованы следующие параметры световодов SMF28 и CS980: $2\tilde{a}_1 = 10 \mu m$ $\Delta\tilde{n}_{\max 1} = 0.37\%$. $2\tilde{a}_2 = 3.5 \mu m$ $\Delta\tilde{n}_{\max 2} = 1\%$, соответственно.

$$\pm 2ik \frac{\partial E(x, y, z)}{\partial z} = \Delta_{\perp} E(x, y, z) + 2k^2 \frac{\Delta n(x, y, z, H)}{n_0} E(x, y, z) \quad (1)$$

$$\Delta n(x, y, z, H) = \begin{cases} \Delta n_{\max} \cdot [1 - \exp\{-H(x, y, z, t)^{\gamma}\}], & |z| \leq l \\ \tilde{\Delta n}_{\max 1} \cdot \exp\{-(x + \rho)^2 + y^2\}^{16} / \tilde{a}_1^{32}, & z > l \\ \tilde{\Delta n}_{\max 2} \cdot \exp\{-(x - \rho)^2 + y^2\}^{16} / \tilde{a}_2^{32}, & z < -l \end{cases} \quad (2)$$

где ρ – поперечное смещение осей стыкуемых световодов, n_0 – показатель преломления до экспозиции, Δn_{\max} – максимальное изменение показателя преломления ФПК, H – суммарная экспозиция двух некогерентных источников.

Для экспериментального исследования процессов оптической стыковки световодов в фотополимеризующей среде была использована установка [1].

Выявлено, что до начала полимеризации передача энергии во встречное волокно при наличии зазора между торцами происходит с существенными потерями. При воздействии света, выходящего из торца ступенчатого световода, в среде формируется градиентный полимерный канал, который способен локализовать как видимое, так и инфракрасное излучение. Рост полимерного канала в зазоре между торцами световодов сопровождается монотонным возрастанием коэффициента передачи с увеличением экспозиции. Однако продолжительное экспонирование приводит к полимеризации на удалении от оси сформированной структуры. Следствием утолщения световода является увеличение ширины светового распределения, что приводит к возрастанию потерь при переходе излучения из полимерного коннектора в световод (рис.1 и рис.2). Синтезируемые в ФПК градиентные полимерные волноведущие структуры могут быть и непрямолинейными – допускается существенное осевое смещение стыкуемых волокон. Сформированный коннектор способен эффективно направлять излучение во встречное волокно.

Следует отметить, что формирующиеся при самоканализировании видимого света градиенты показателя преломления могут оказаться малыми для компенсации дифракционной расходимости более длинноволнового (ИК) излучения при его распространении в полимерном канале. Так, существует предельное значение диаметра световода, определяемое параметрами композиции, для создания высокоэффективного коннектора.

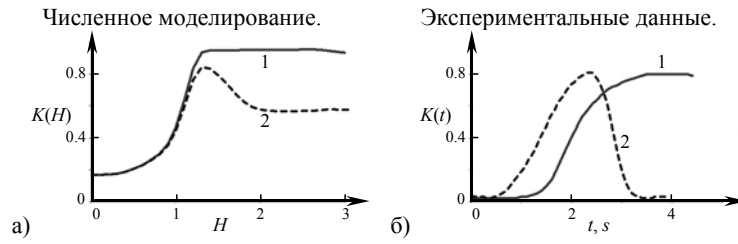


Рис. 1. Динамика коэффициента передачи полимерного коннектора для SMF28.
1) $2l \approx 2 \text{ mm}$, $\rho \approx 0$; 2) $2l \approx 1 \text{ mm}$, $2\rho \approx 15 \mu\text{m}$.

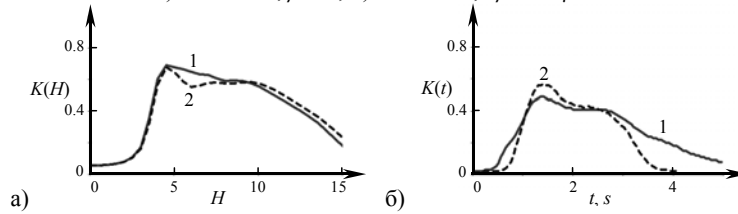


Рис. 2. Динамика коэффициента передачи полимерного коннектора для CS980.
1) $2l \approx 2 \text{ mm}$, $\rho \approx 0$; 2) $2l \approx 1 \text{ mm}$, $2\rho \approx 15 \mu\text{m}$.

[1] Менсов С.Н., Полуштайцев Ю.В. // Квантовая электроника, 2007. Т.37, №9. С.881.

РЕЗОНАНСНЫЕ ПРОЦЕССЫ В ОБЪЕМНЫХ РЕШЕТКАХ ИЗ ФОТОПОЛИМЕРОВ С ИНЕРТНОЙ КОМПОНЕНТОЙ

А.И. Красильников¹⁾, С.Н. Менсов^{1,2)}, А.В. Романов²⁾

¹⁾Нижегородский госуниверситет

²⁾Институт металлоорганической химии РАН

Традиционной схемой положительной обратной связи лазерных систем является резонатор Фабри-Перо с высоким коэффициентом отражения зеркал, внутри которого амплитуда поля намного больше амплитуды поля вне резонатора даже без учёта усиления в активной среде. Аналогичного результата можно достичь в среде, в которой периодически изменяется показатель преломления, при длинах волн излучения, близких к периоду среды, что позволяет получить требуемую для генерации положительную обратную связь на резонансных частотах такой системы.

Распределение комплексной амплитуды поля E в одномерной периодической активной среде определяется численным решением волнового уравнения:

$$\frac{d^2 E}{dz^2} + k_0^2 n_0^2 \cdot [1 + \Delta n \cdot \sin(2\pi / \Lambda \cdot z) + i\alpha]^2 E = 0,$$

где k_0 – волновое число, n_0 – среднее значение показателя преломления среды, Δn – амплитуда периодического распределения показателя преломления, Λ – пространственный период изменения показателя преломления, α – коэффициент усиления среды. Получено, что амплитуда поля внутри диэлектрика с периодически изменяющимся показателем преломления без учёта усиления в среде ($\alpha=0$) значительно превосходит амплитуду падающего поля. Причём значение резонансной частоты отличается от π/Λ на величину δ_1 (рис.1,2). Наряду с основной резонансной частотой существуют частоты, отличающиеся от π/Λ на величины $\delta_j > \delta_1$, на которых также наблюдается резонансное увеличение поля.

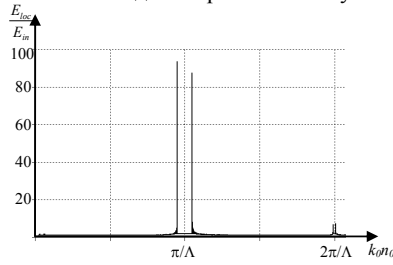


рисунок 1

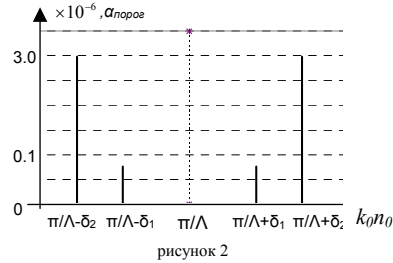


рисунок 2

Учёт усиления в среде ($\alpha \neq 0$) позволил оценить пороговые значения коэффициента усиления α , при которых возникает генерация на резонансных частотах (рис.2). Результаты численного моделирования показали, что пороговые значения коэффициента усиления для резонансных частот с большим отклонением δ_j возрастают по сравнению с минимальной величиной на первой резонансной частоте (рис.2). Следовательно, исходя из свойств периодичности, можно создавать маломодовые режимы работы лазерной системы.

Численно были получены следующие параметры системы, необходимые для возникновения генерации на длине волны 0.58 мкм: длина волны накачки 0.53 мкм, глубина модуляции показателя преломления $\Delta n = 0.05$, длина структуры 1 мм, пороговый уровень накачки $\sim 50 \text{ Вт/мм}^2$. Увеличивая длину периодической структуры, можно получить генерацию на более высоких пространственных частотах сигнала, соответствующих значениям $m\pi/\Lambda$, где m – целое число.

Одним из методов создания таких периодических диэлектрических сред является экспонирование фотополимеризующихся композиций (ФПК) неоднородным распределением интенсивности светового поля. Формируемая решётка показателя преломления повторяет вид профиля распределения интенсивности, но имеет глубину модуляции меньше процента от среднего значения. Для создания резонатора высокой добротности необходима глубина модуляции показателя преломления порядка нескольких процентов. Для увеличения амплитуды неоднородного распределения показателя преломления в композицию добавляют нейтральную компоненту, которая не участвует в процессе фотополимеризации и значительно отличается плотностью от формирующегося полимера. Анализ процесса записи объёмных полимерных решёток [1] показал, что при записи на ФПК периодического распределения интенсивности со средним значением 50 мВт/см^2 формируемое распре-

ление показателя преломления имеет глубину модуляции порядка 5%. В качестве активной среды использовался спиртовой раствор органического красителя, являющийся нейтральной компонентой для реакции фотополимеризации.

Таким образом, процесс полимеризации неоднородным световым полем позволяет формировать активные среды с периодическим распределением показателя преломления, способные к генерации излучения на резонансных частотах системы.

- [1] Батенькин М.А., Менсов С.Н., Романов А.В. // Оптика и спектроскопия. 2008. Т.104, №1. С. 145.

ВАРИАЦИОННЫЕ РАСЧЕТЫ СПЕКТРОВ ТРЁХ ОСНОВНЫХ ИЗОТОПОМЕРОВ МОЛЕКУЛЫ ВОДЫ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ТОЧНОСТЬЮ В ДИАПАЗОНЕ 0-20000 см⁻¹

С.В. Ширин¹, Н.Ф. Зобов¹, Р.И. Овсянников¹, О.Л. Полянский¹, J. Tennyson²

¹*Институт прикладной физики РАН*

²*University College of London*

Результаты исследования спектра молекулы воды находят применение во многих областях науки и техники. Поглощение солнечного излучения в парах воды в инфракрасном и оптическом диапазонах оказывают существенное влияние на радиационный баланс Земли. В ближнем инфракрасном диапазоне вода является основным источником непрозрачности атмосфер холодных, богатых кислородом звезд. Определенные спектроскопические характеристики молекулы воды также находят применение при исследовании процессов горения, в лазерной физике, производстве сверхчистых материалов и т.д.

При анализе поглощения в широком диапазоне физических параметров теоретический спектр имеет ряд преимуществ по сравнению с экспериментальным. Например, любой экспериментальный спектр получен лишь при конкретном значении температуры. Причём при некоторых температурах произвести измерения спектра технически сложно. Теоретический спектр достаточно легко можно рассчитать для широкого диапазона температур. Кроме того, из-за конечной чувствительности и разрешающей способности спектрометров в эксперименте видны не все линии (например, слабые или близко расположенные линии). Тогда как при вариационных расчётах можно получить все линии спектра.

В данной работе представлен спектр колебательно-вращательных переходов основных изотопомеров молекулы воды H_2^{16}O , H_2^{17}O и H_2^{18}O , рассчитанный в области частот 0 – 20000 см⁻¹ и с вращательными квантовыми числами до $J = 20$ ($J = 30$ для H_2^{16}O). Расчёты основаны на новой теоретической поверхности потенциальной энергии [1], полученной в результате оптимизации высокоточного *ab initio* потенциала с использованием экспериментальных уровней энергии. Данный потенциал воспроизводит уровни энергии для $J = 0, 2$ и 5 , использованные в процедуре оптимизации, со стандартным отклонением 0.025 см⁻¹. Интенсивности перехо-

дов рассчитаны с использованием *ab initio* поверхности дипольного момента [2]. Полученный расчетный спектр является превосходным инструментом для спектроскопического моделирования и анализа экспериментальных колебательно-вращательных спектров.

В работе проведено сравнение теоретического спектра с недавними высокоточными измерениями, представленными в работе [3]. Теоретические интенсивности сильных линий совпадают с экспериментальными с точностью 3 %. Причём теоретический расчёт интенсивностей является более точным, чем лабораторные измерения, поскольку в эксперименте трудно поддерживать концентрацию водяных паров и другие параметры с большой точностью.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ через гранты 06-02-16082а и 08-07-00318а.

- [1] Shirin S.V., Zobov N.F., Ovsyannikov R.I., Polyansky O.L., Tennyson J. // *J. Chem. Phys.* 2008 (принято к публикации).
- [2] Lodi L., Tolchenov R.N., Tennyson J., Lynas-Gray A.E., Shirin S.V., Zobov N.F., Polyansky O.L., Csaszar A.G., Van Stralen J.N.P., Visscher L. // *J. Chem. Phys.* 2008. Т. 128. P. 044304.
- [3] Lisak D., Hodges J.T. // *J. Molec. Spectrosc.* 2008 (принято к публикации).

НОВЫЕ ПРЕЦИЗИОННЫЕ ИЗМЕРЕНИЯ АТМОСФЕРНОГО КОНТИНУАЛЬНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В МИЛЛИМЕТРОВОМ ДИАПАЗОНЕ

М.А. Чурбанов¹), М.Ю. Третьяков²), В.В. Паршин²), М.А. Кошелев²),
И.А. Коваль²), Д.С. Макаров²)

¹) *Нижегородский госуниверситет*

²) *Институт прикладной физики РАН*

Прецизионная информация о величине поглощения в зависимости от параметров атмосферы является основой для построения моделей распространения излучения. Эти данные необходимы для таких прикладных дисциплин, как дистанционное зондирование атмосферы и океана, радиосвязь, радиолокация и др. Помимо прикладных задач уже более 70 лет существует фундаментальная проблема избыточного или континуального поглощения, не имеющего однозначного объяснения. Таким образом, получение новых более точных экспериментальных данных о континууме актуально как для уточнения эмпирических моделей, так и для понимания его природы. В ходе наших экспериментов [1] был обнаружен источник систематических ошибок, присущий всем наиболее известным и признанным в мире предшествующим лабораторным исследованиям континуума, связанный с осаждением молекул воды на зеркала измерительного резонатора, что приводило к не учитываемому методикой увеличению собственных потерь резонатора и, как следствие, к завышенному результату измерений. Цель настоящей работы – выработка новой мето-

дики прецизионных измерений параметров континуума, связанного с влажностью, учитывающей изменение коэффициента отражения зеркал от влажности.

Для решения проблемы было предложено использовать известный из радиолокации метод вариации длины трассы. Имеющийся резонаторный спектрометр [1] был дополнен специально разработанным и созданным сдвоенным высокодобротным резонатором Фабри-Перо, в котором длины резонаторов отличаются ровно в 2 раза. Принцип измерения поглощения излучения в газе, заполняющем резонатор, основан на том, что ширина резонансной кривой каждого резонатора прямо пропорциональна величине поглощения. Для определения собственных потерь резонаторов (за исключением потерь, связанных с изменением коэффициента отражения зеркал от влажности), использовалась методика замещения исследуемого газа непоглощающим (азот) [1]. В предположении, что осаждение влаги на все зеркала сдвоенного резонатора происходит одинаково, разность результатов измерений в двух резонаторах представляет собой искомое поглощение в исследуемом газе. Тем самым исключается источник систематических ошибок, присущий предшествующим измерениям.

Для проверки методики был измерен спектр поглощения кислорода в диапазоне 110 – 130 ГГц, содержащий одиночную линию тонкой структуры $N=1$ - с центром на 118.75 ГГц, параметры которой хорошо известны [2], а значит, она может служить индикатором качества проводимого эксперимента. Поглощение, измеренное каждым из резонаторов (рис. слева: треугольники и кресты) совпало между собой и с результатом разностного измерения (квадраты) с точностью до шумов эксперимента, что подтвердило справедливость метода.

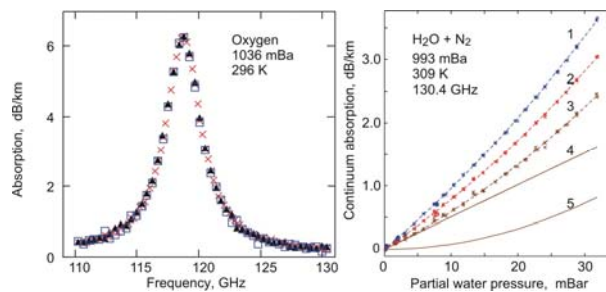


Рис.

В ходе эксперимента исследовалось поглощение смеси чистого азота с парами дистиллированной воды на частоте 130 ГГц при давлении 745 торр, температуре 309 К и двадцати значениях относительной влажности смеси от 0 до 50%. Учет вклада крыльев всех регулярных линий вращательного спектра молекулы воды в измеряемое поглощение, делался в предположении, что линии имеют форму Ван Влека-Вейскопфа. Для расчета использовались параметры линий из современной версии модели MPM (Millimeter-wave Propagation Model) [3]. Учитывались 15 наиболее интенсивных линий, находящихся в частотном диапазоне вплоть до 1 ГГц. Таким образом, из экспериментальных данных было выделено континуальное по-

глощение (рис. справа: 1 – поглощение, измеренное коротким резонатором, 2 – длинным, 3 – разностным методом). Разделение его на линейную (линия 4) и квадратичную (линия 5) часть в зависимости от влажности, позволило определить коэффициенты континуального поглощения, связанного со взаимодействием молекул воды с азотом и молекул воды между собой, соответственно составляющие $3.06(4) \cdot 10^{-9}$ и $4.44(16) \cdot 10^{-8}$ (дБ/км)/(ГГц·гПа)². Сравнение с наиболее признанными в мире данными [4], дающими для условий нашего эксперимента соответственно $2.69 \cdot 10^{-9}$ и $6.94 \cdot 10^{-8}$, показывает хорошее согласие в линейной и значительное (~40%) отличие в квадратичной по влажности части континуума.

В результате исследований разработаны методики прецизионных лабораторных измерений континуума; показано, что влияние вышеупомянутой систематической погрешности значительно; данные, используемые в существующих моделях распространения излучения для параметризации континуума, требуют коррекции, для чего требуется проведение исследований в широком диапазоне температур.

Работа частично поддержана грантом РФФИ 06-02-16082а и грантом Президента РФ МК-1163.2008.2.

[1] Третьяков М.Ю., и др.// Оптика атмосферы и океана. 2007. Т. 20(2). С. 101.

[2] Tretyakov M.Yu., Golubiatnikov G. Yu. et al.// J.Mol.Spectr. 2004. V.223. P. 31.

[3] Liebe H.J., et al. // J. Quant. Spectr. Radiat. Transf. 1992. V.48, No5/6. P. 629.

[4] Kuhn T., Bauer A., et al. // J. Quant. Spectr. Radiat. Transf. 2002. V.74. P. 545.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТОЛКНОВИТЕЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ OCS

А.Е.Кузнецов¹, М.А.Кошелев², М.Ю.Третьяков²

¹Нижегородский госуниверситет

²Институт прикладной физики РАН

Молекула сероокиси углерода (OCS) является основной и наиболее стабильной серосодержащей микропримесью атмосферы Земли. Для обработки данных астрономических измерений и дистанционного зондирования атмосферы требуется прецизионная информация о параметрах спектральных линий. Кроме того, интенсивные, часто и регулярно распределенные по всему миллиметровому и субмиллиметровому диапазону длин волн линии вращательного спектра OCS могут служить эталоном для калибровки различной спектроскопической аппаратуры.

Менее изученной среди всех характеристик вращательного спектра OCS является зависимость ширины линий от вращательного квантового числа J . Поэтому целью нашей работы является измерение столкновительных параметров уширения и сдвига линий давлением N_2 , O_2 , OCS и построение зависимости этих параметров от вращательного квантового числа J .

В данной работе использовались микроволновый спектрометр с синтезатором частоты и акустическим детектированием поглощения (спектрометр РАД) [1] и

методика измерения параметров молекулярных линий [2]. Для уменьшения систематических ошибок эксперимента, связанных с большой интенсивностью измеряемых линий [3], длина ячейки была уменьшена до 0.5 см, так что оптическая толщина не превышала 0.05. Измеряемыми параметрами в эксперименте являлись частота центра и столкновительная ширина. Из серии записей линии при различных давлениях определялись несмещенная давлением центральная частота, параметры сдвига частоты центра и столкновительного уширения давлением газа.

Так как основной вклад в уширение спектральных линий дает вращение, то данные, полученные для различных колебательных состояний должны быть близки как качественно (зависимость от J), так и количественно. Поэтому для повышения надежности измерений дополнительно было проведено исследование параметров самоуширения вращательного спектра молекулы OCS в возбужденном колебательном состоянии ν_2 .

Результаты проведенного исследования приведены на рисунке совместно с данными предшествующих измерений в виде зависимости коэффициента уширения линий OCS собственным давлением (слева) и давлением буферных газов N_2 , O_2 (справа) от квантового числа m . Обозначения данных приведены на рисунке: RAD – измерения на РАД спектрометре, Ti:Sa – измерение на ТГц спектрометре [4], IR – измерения полосы ν_3 в ИК диапазоне [5]. Следует отметить высокую точность полученных данных: статистические ошибки эксперимента, составляют в среднем 0.5%. Плавные зависимости параметров уширения от квантового числа m ($m = -J$ для Р-ветви и $J+1$ для R-ветви) также свидетельствуют о высокой точности эксперимента. Совпадение в пределах погрешностей параметров самоуширения линий основного и возбужденного ν_2 колебательных состояний, полученных в данной работе, показывает, что систематические ошибки эксперимента минимальны. Измеренные параметры самоуширения линий OCS в целом согласуются с предыдущими результатами [4], однако полученные данные обладают значительно более высокой точностью и достоверностью.

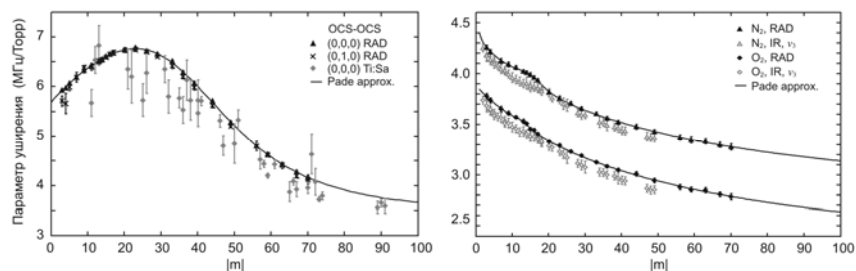


Рис.

Впервые было проведено систематическое исследование параметров уширения линий вращательного спектра OCS давлением азота и кислорода. В литературе отмечаются лишь несколько работ, в которых исследовались эти параметры для

нескольких переходов, поэтому на рисунке приведено сравнение наших результатов с данными для вращательно-колебательной ν_3 полосы [5]. Очевидно, что качественное поведение зависимостей одинаковое, а небольшое отличие возможно связано с влиянием колебаний на время столкновительной релаксации.

Для дальнейшего использования полученных результатов в задачах дистанционного зондирования было проведено сглаживание зависимостей с помощью аппроксимант Паде [4] (сплошные линии на рисунке).

Во всех экспериментах не было обнаружено сдвига центра линий в пределах ± 15 кГц/Торр. Полученные значения центральных частот переходов совпали в пределах экспериментальных погрешностей (10-20 кГц) с прецизионными данными [6], что также свидетельствует от высокой точности проведенного исследования.

Работа выполнена при частичной поддержке грантами РФФИ № 08-07-00318а и 06-02-16082а.

- [1] Chantry G.W. Modern Aspects of Microwave Spectroscopy. London: Academic Press, 1979. P. 217.
- [2] Кузнецов А.Е., Кошелев М.А., Третьяков М.Ю. // Тр. 11-й научн. конф. по радиофизике. 7 мая 2007г /Под. ред. А.В. Кудрина, А.В. Якимова. Н.Новгород: ННГУ. 2007. С. 105.
- [3] Golubiatnikov G.Yu., Koshelev M.A., Krupnov A.F.// J. Quant. Spectrosc. Radiative Transfer. 2008. V.109. P. 1828.
- [4] Matton S., Rohart F., Bocquet R., Mouret G., Bigourd D., Cuisset A., Hindle F. // J. Molec. Spectrosc. 2006. V. 239. P. 181.
- [5] Koshelev M.A., Tretyakov M. Yu., Lees R.M., Li-Hong X. // J. Molec. Struct. 2006. V. 780/781. P. 7.
- [6] Golubiatnikov G.Yu., Lapinov A.V., Guarnieri A., Knöchel R.// J. Molec. Spectrosc. 2006. V. 234, No1. P. 190.

РАСЧЕТЫ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ МОМЕНТОВ ПЕРЕХОДОВ МОЛЕКУЛЫ ФОСФИНА В ПРИБЛИЖЕНИИ ПОЛНОГО БАЗИСНОГО НАБОРА

Р.И. Овсянников¹), С.Н. Юрченко²), W. Thiel³), P. Jensen⁴), М.Ю. Третьяков¹)

¹Институт прикладной физики РАН

²Institut für Physikalische Chemie und Elektrochemie (Dresden, Germany)

³Max-Planck-Institut für Kohlenforschung (Mülheim an der Ruhr, Germany)

⁴Theoretische Chemie, Bergische Universität (Wuppertal, Germany)

Дистанционные спутниковые исследования спектров широко используются для определения концентрации молекул в верхних слоях атмосферы Земли, а также в атмосферах звёзд. Подобные измерения проводят с помощью методов спектроскопии высокого разрешения. Концентрации молекул определяют из сравнения полученного спектра со спектрами, найденными в лабораторных условиях при уже известной концентрации. Однако, как правило, подобные лабораторные измерения

весьма сложны. Поэтому теоретические методы моделирования спектров молекул играют важную роль в спектроскопии.

Для расчёта спектра молекулы решается уравнение Шрёдингера. Однако большое число взаимодействующих частиц приводит к невозможности точно решить уравнение Шрёдингера. Поэтому в решении используется набор приближений, от которых зависит точность решения. Большинство приближений используют физические свойства молекулы, позволяющие упростить уравнение Шрёдингера (например, разделить переменные для сведения его к нескольким уравнениям с меньшим числом переменных). Одно из обычно используемых приближений – расчёт с конечным базисным набором, а приближение полного базисного набора служит для уточнения расчётов с конечным базисом.

В данной работе представлен метод вариационного расчёта колебательно-вращательных уровней энергии, применимый к многоатомным молекулам с различными равновесными конфигурациями в изолированном электронном состоянии, реализованный в виде компьютерной программы TROVE (Theoretical ROVibrational Energies) [1]. Метод применен для расчета колебательных уровней энергии молекулы PH_3 , а также колебательных моментов переходов между этими уровнями.

Экстраполяция к «полному базисному набору» (CBS – Complete Basis Set) широко известна из *ab initio* расчётов электронной структуры, однако в данной работе она используется при расчёте колебательно-вращательных уровней энергии ядер. Аналогом так называемого кардинального числа X ($X=D, T, Q, 5\dots$), используемого в описании *ab initio* базисных наборов типа $DZ, TZ, QZ, 5Z$ и т.д., в программе TROVE выступает полиадный номер P_{max} . Эта величина ответственна за размер базисного набора. В работе показано, что даже при высокой плотности уровней энергии, типичной для колебательно-вращательных уровней, CBS экстраполяция достаточно эффективна, хотя и более сложна из-за смешивания уровней. В работе представлены результаты расчетов колебательных уровней энергии молекулы PH_3 , экстраполированных до полного базисного набора. Полученные уровни энергии сравниваются с соответствующими экспериментальными значениями. В расчётах использовалась новая *ab initio* поверхность потенциальной энергии, полученная из теории кластерных взаимодействий [CCSD(T)] (базисные наборы: aug-cc-pVQZ и aug-cc-pV(Q+d)Z). Расчёт в диапазоне до 7000 см^{-1} воспроизводит экспериментальные уровни энергии молекулы фосфина с точностью 1.6 см^{-1} . Следовательно, точность рассчитанных колебательных моментов является величиной того же порядка, что вполне достаточно для однозначной идентификации колебательных переходов, полученных из эксперимента.

Колебательные моменты переходов молекулы PH_3 рассчитаны в диапазоне $0\text{--}8000 \text{ см}^{-1}$. Для расчёта использована модель [2] и ATZfc поверхность дипольного момента из [3].

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ через гранты 06-02-16082а и 08-07-00318а.

[1] Yurchenko S.N., Thiel W., Jensen P. //J. Molec. Spectrosc. 2007. Т.245. С. 126.

- [2] Yurchenko S.N., Carvajal M., Thiel W., Lin H., Jensen P. // Adv. Quant. Chem. 2005. Т.48. С. 209.
- [3] Yurchenko S.N., Carvajal M., Thiel W., Jensen P. // J. Mol. Spectrosc. 2006. Т.239. С. 71.

**ПРЕЦИЗИОННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ
ПАРАМЕТРОВ ДИАГНОСТИЧЕСКОЙ АТМОСФЕРНОЙ ЛИНИИ
МОЛЕКУЛЫ КИСЛОРОДА НА ЧАСТОТЕ 118.75 ГГц**

**Д.С. Макаров, М.Ю. Третьяков, М.А. Кошелев В.В. Паршин, Л.М. Кукин,
И.А. Коваль**

Институт прикладной физики РАН

Линия тонкой структуры молекулы кислорода $N=1$ -, расположенная на частоте 118.75 ГГц, в силу изолированности и малой интенсивности широко используется в задачах глобального мониторинга атмосферы и поверхности Земли. Точность получаемой информации непосредственно зависит от точности параметров линии, которые могут быть определены только из прецизионных лабораторных экспериментов. Параметры линии $N=1$ - исследовались различными методами (см., например, [1] и ссылки там). Менее исследованными остаются температурные зависимости параметров этой линии. Так, для учета зависимости коэффициента уширения от температуры до сих пор используются данные экспериментов Либе 1975 г. [2]. В этих экспериментах температурная зависимость уширения давлением исследовалась в чистом кислороде для линии $N=9+$ в диапазоне от 5°C до 50°C, в то же время известно, что атмосфера состоит на 78% из азота, температурный коэффициент уширения линий зависит от их квантовых чисел, а нижняя граница диапазона атмосферных температур составляет -60°C. Одна лишь экстраполяция экспериментальных температурных зависимостей на отрицательную область может дать существенные ошибки [3]. Таким образом, получение новых прецизионных данных является актуальным.

В данной работе для исследования температурных зависимостей использовался резонаторный спектрометр и методики измерения поглощения, изложенные в работе [1]. Измерительный резонатор помещался в термостат, способный поддерживать температуру от -30°C до +50°C с точностью 0.2 °C. Для извлечения параметров линии, записанный профиль поглощения обрабатывался модельной функцией Розенкранца [1]. Для отдельных записей профиля поглощения соотношение сигнал/шум достигает 800 (рекордное на настоящее время значение для записи этой линии в лабораторных экспериментах), что обеспечивает высокую точность измеряемых параметров линии.

На рис.1 приведены зависимости коэффициента уширения (слева) и коэффициента интерференции (справа) от температуры. На графиках квадратами отмечены значения, полученные с помощью новой установки (статистическая погрешность определения коэффициента уширения примерно соответствует размеру квадратов),

кругами – данные, полученные ранее [4]. Зависимость коэффициента уширения от температуры обычно представляют в виде $\chi(T) = \gamma_0 \cdot (300/T)^x$, где γ_0 – значение коэффициента уширения при 300 К. Для самоуширения линии $N=1$ мы получили уточненные значения $\gamma_0 = 2.231(5)$ МГц/Торр, $x=0.78(1)$, что совпадает в пределах погрешности с данными [4]. В то же время, в недавней работе [5] получено значение $x=0.90(4)$, по-нашему мнению, завышенное из-за не учета систематических ошибок при измерениях при низких давлениях газа, связанных с расщеплением линии в магнитном поле.

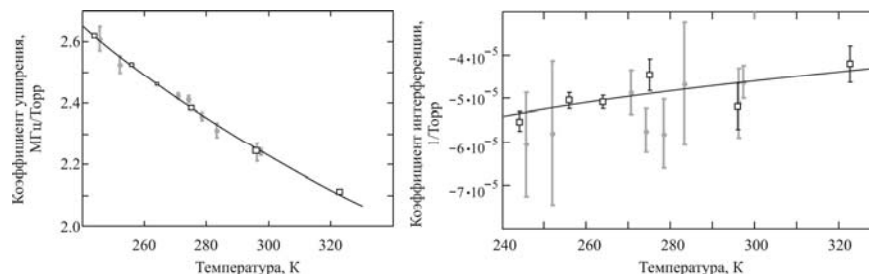


Рис. 1

Температурная зависимость коэффициента интерференции в силу столкновительной природы эффекта интерференции должна быть подобна зависимости коэффициента уширения. Наши измерения позволили не только вдвое уточнить значение этого параметра, но и измерить степень его температурной зависимости. Полученное значение $x=0.73(34)$ является первым экспериментальным подтверждением существующих представлений.

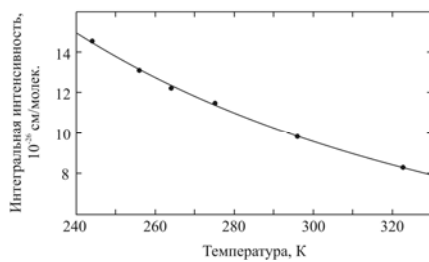


Рис. 2

На рис.2 приведена зависимость интегральной интенсивности линии от температуры. Наши экспериментальные точки очень хорошо согласуются с теоретической зависимостью. Значение интегральной интенсивности линии $N=1$, рассчитанное по полученным данным для температуры 297К, всего на 0.2% отличается от значения, приведенного в базе данных HITRAN, что является подтверждением высокой точности и

надежности полученных данных.

Работа частично поддержана грантом РФФИ 06-02-16082а.

- [1] Tretyakov M.Yu., Koshelev M.A., Dorovskikh V.V., Makarov D.S., Rozenkranz P.W. //J. Mol. Spectrosc. 2005. V. 231. P. 1.
 [2] Liebe H.J. //Rev. Sci. Instrum. 1975. V. 46, No.7. P. 631.

- [3] Boukabara S.-A. et al //IEEE Transaction on geoscience and remote sensing, 2005. V.43, No.5. P. 1109.
- [4] Tretyakov M.Yu., Koshelev M.A., Koval I.A., Parshin V.V., Kukin L.M., Fedoseev L.I., Dryagin Yu.A., Andrianov A.F. //J. Mol. Spectrosc. 2007. V. 241. P. 109.
- [5] Drouin Brian J. //J. Quant. Spectrosc. Rad. Transfer. 2007. V. 105. P. 450.

ПРИМЕНЕНИЕ ВОЛОКОННОГО ФЕМТОСЕКУНДНОГО ЛАЗЕРА ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ СТАБИЛЬНОСТИ ЧАСТОТЫ НЕПРЕРЫВНЫХ ИСТОЧНИКОВ ИЗЛУЧЕНИЯ ММ-СУБММ ДИАПАЗОНА

А.В. Андрианов, С.В. Муравьев, А.В. Ким, С.Б. Бодров, М.Ю. Третьяков

Институт прикладной физики РАН

Высокостабильные и узкополосные синтезаторы частоты миллиметрового и субмиллиметрового (мм-субмм) диапазонов длин волн (терагерцового диапазона частот) необходимы для создания высококачественных контрольно-измерительных приборов, используемых в радиоастрономии, молекулярной газовой спектроскопии, спектроскопии органических (био-)молекул и полупроводниковых материалов, в том числе материалов для нанотехнологий. Перспективными приложениями являются точное измерение частотных характеристик устройств, разрабатываемых для телекоммуникации, беспроводной связи компьютеров и периферийных устройств внутри зданий, систем безопасности на основе терагерцового видения и др.

Традиционным способом синтеза узкополосного когерентного терагерцового (ТГц) излучения является привязка частоты имеющегося источника с помощью системы фазовой автоподстройки к опорному сигналу, являющемуся гармоникой высокостабильного радиочастотного генератора, синхронизованного в свою очередь по сигналу стандарта частоты и времени [1]. Однако такой способ обладает существенным недостатком. С ростом частоты мощность гармоник падает, поэтому необходима стабилизация промежуточных источников и использование их сигналов для последующего умножения. Для создания опорных частот в терагерцовом диапазоне требуется от 2 до 4 промежуточных перестраиваемых генераторов в зависимости от необходимого уровня мощности опорного сигнала. Из-за многократного умножения спектр опорного сигнала, получаемого таким образом, становится значительно хуже исходного.

В недавней работе [2] был предложен и продемонстрирован новый метод создания стабильной сетки ТГц частот путем оптико-терагерцовой конверсии излучения фемтосекундного источника, стабилизированного по частоте повторения импульсов. Идея метода довольно проста: при оптико-терагерцовой конверсии стабилизированная гребенка оптических частот фемтосекундного генератора переносится в терагерцовый диапазон, при этом сохраняется стабильность и эквидистантность частотных гармоник. Для экспериментальной проверки метода в данной работе был использован фемтосекундный Ti:sapphire лазер, а оптико-терагерцовая

конверсия осуществлялась с помощью фотопроводящих антенн. Была продемонстрирована стабильность ТГц сетки частот $\sim 2.5 \cdot 10^{-7}$.

В настоящей работе предлагается использовать аналогичный метод создания стабильной сетки терагерцовых частот для стабилизации непрерывного источника ТГц излучения – лампы обратной волны (ЛОВ). В качестве фемтосекундного лазера предлагается волоконный лазер, а преобразование лазерного излучения в терагерцовое – в объеме электрооптического кристалла. Преимущество волоконного лазера по сравнению с Ti:Sapphire состоит в возможности перестройки частоты повторения вплоть до 1 ГГц, что существенно для дальнейшего использования и калибровки по частоте полученного опорного сигнала. Использование электрооптического кристалла для оптико-терагерцового преобразования обусловлено возможностью более эффективной энергетической конверсии.

Блок-схема экспериментальной установки для стабилизации ЛОВ приведена на рисунке. Волоконный лазер с синхронизацией мод генерирует оптические импульсы длительностью около 100 фс на центральной длине волны 1.5 мкм, следующие с частотой повторения, определяемой длиной резонатора (типичные значения составляют десятки и сотни мегагерц). С помощью изменения длины резонатора (в волоконном лазере это достигается растяжением световода, уложенного на пьезопластинку) частота повторения синхронизирована с опорным сигналом стандарта частоты и времени

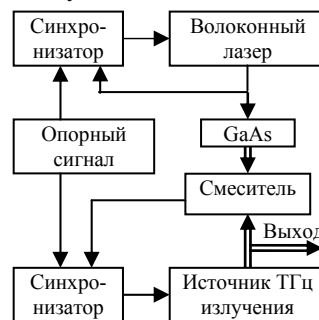


Рис.

посредством системы фазовой автоподстройки, что было реализовано в предварительных экспериментах. Оптическое излучение направляется на электрооптический кристалл, где преобразуется в последовательность импульсов (длительностью несколько пс) терагерцового излучения, которые имеют в точности такую же частоту повторения. Таким образом, спектр терагерцового сигнала представляет собой стабильную гребенку частот, кратных частоте повторения волоконного лазера. Синхронизация ЛОВ с одной из гармоник опорной сетки частот осуществляется с помощью системы фазовой автоподстройки.

В докладе обсуждаются преимущества предлагаемого подхода и его перспективы, приводятся необходимые энергетические оценки. Отдельное внимание уделено выбору электрооптического кристалла для оптико-терагерцовой конверсии. Теоретические оценки [3] предсказывают, что для диапазона длин волн около 1.5 мкм наиболее оптимальным (и доступным) является кристалл GaAs. Возможная проблема двухфотонного поглощения в кристалле GaAs и генерации свободных носителей, сильно поглощающих ТГц излучение, может быть обойдена при использовании накачки в диапазоне 1.6–1.9 мкм от перестраиваемой по длине волны волоконной системы [4]. Результирующая мощность ТГц излучения по оценкам является достаточной для работы системы фазовой автоподстройки частоты лампы обратной волны, что подтверждает возможность реализации предложенной схемы.

Работа поддержана грантом РФФИ 08-02-99052.

- [1] Krupnov A.F. //Spectrochimica Acta, Part A: Molecular & Biomolecular Spectroscopy. 1996. V.52. P. 967.
- [2] Yasui T., et al. //Appl. Phys. Lett. 2006. V.88. P. 241104.
- [3] Bakunov M.I., et al. //Phys. Rev. B. 2007. V.76. P. 085346.
- [4] Андрианов А.В. и др. //Письма в ЖЭТФ. 2006. Т.85, №8. С. 446.