

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт теоретической и прикладной механики
им. С. А. Христиановича
Сибирского отделения Российской академии наук

На правах рукописи



Галёв Роман Владимирович

**ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПОГЛОЩЕНИЯ
И ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В
ТВЕРДЫХ И ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛОШНЫХ
СРЕДАХ**

1.1.9 – Механика жидкости, газа и плазмы

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
доктор физико-математических наук
Кудрявцев Алексей Николаевич

Новосибирск – 2022

Оглавление

Введение	5
Глава 1. Методы численного решения уравнений распространения света в анизотропных пространственно неоднородных средах	15
1.1. Уравнения Максвелла для анизотропной пространственно неоднородной среды	15
1.2. Метод FDTD для анизотропной среды	17
1.3. Постановка начальных и граничных условий в методе FDTD	23
1.3.1. Генерация оптических пучков в методе FDTD	23
1.3.2. Метод полностью согласованного слоя для постановки неотражающих граничных условий	27
1.4. Параллельный расчетный код для решения уравнений Максвелла	29
1.5. Верификация и валидация расчетного кода	33
1.6. Приближение геометрической оптики, метод трассировки лучей	37
Глава 2. Численное моделирование процессов поглощения и преобразования лазерного излучения в задачах лазерной обработки материалов	42
2.1. Моделирование взаимодействия излучения с веществом при лазерной резке	42
2.2. Моделирование взаимодействия излучения с веществом при лазерном сверлении	48
2.3. Моделирование взаимодействия излучения с веществом при селективном лазерном спекании	50
Глава 3. Численное моделирование взаимодействия света с нематическими жидкокристаллическими средами	55
3.1. Жидкие кристаллы и их оптические свойства	55
3.2. Дисклинации в НЖК	58

3.3.	Взаимодействие лазерного излучения, распространяющегося по оптоволокну с нематическим ЖК	59
3.4.	Генерация оптических вихрей при прохождении света через НЖК .	63
Глава 4. Моделирование взаимного влияния поля ориентации нематического жидкого кристалла и электромагнитного поля пучка лазерного излучения		
4.1.	Численный метод совместного решения уравнений Максвелла и уравнений ориентационной динамики	74
4.1.1.	Решаемые уравнения	76
4.1.2.	Алгоритм решения уравнений ориентационной динамики и его верификация	79
4.1.3.	Алгоритм совместного решения полевых и материальных уравнений	83
4.1.4.	Количество временных итераций отдельно для «прохождения света» и для «релаксации директора»	86
4.1.5.	Критерии сходимости расчета «совместного прохождения света и релаксации директора»	87
4.1.6.	Интерполяция векторов в методе «совместного прохождения света и релаксации директора»	88
4.2.	Исследование электроориентационного эффекта	91
4.2.1.	Влияние поляризации пучка лазерного излучения на направление вектора-директора	91
4.2.2.	Влияние знака диэлектрической анизотропии НЖК на сходимость численного расчета	93
4.3.	Моделирование гигантской оптической нелинейности	96
Заключение		109
Список литературы		112
Приложение А		117

Аналитическое решение задачи распределения поля в оптоволокне круглого сечения с сердцевинной	117
Алгоритм вычисления компонент поля на основании аналитического решения	123
Приложение Б	127
Аналитическая задача о распространении плоской волны в холестерическом жидком кристалле (ХЖК) вдоль оси холестерической спирали	127
Аналитическая задача прохождения плоской волны через слой ХЖК . . .	132
Формулировка задачи	132
Несколько пояснений и определений	134
Решение задачи	136
Отражение и пропускание плоской волны стопкой пластин ХЖК	139

Введение

Создание лазера стало одним из наиболее важных изобретений XX века. Появление источников когерентного оптического излучения привело к подлинной революции в оптике, сравнимой по своим последствиям только с разработкой волновой теории света. Уникальные свойства лазерного излучения не только нашли широкое применение в самых различных областях науки и техники, но и позволили создать многие устройства, постоянно используемые нами в повседневной жизни [1, 2].

В очень широком круге научных, технических и промышленных приложений приходится иметь дело со взаимодействием лазерного излучения с веществом. В частности, лазеры широко применяются для обработки материалов (сверление, резка, спекание и пр.). Возможность надежного численного моделирования процессов взаимодействия и поглощения лазерного излучения в сплошных средах могло бы привести к лучшему пониманию физических закономерностей, а также позволить существенно повысить качество обработки материалов [3].

Одной из наиболее интересных и актуальных задач современной лазерной техники и фотоники является преобразование лазерного излучения и управление свойствами световых пучков. Один из перспективных способов динамического управления параметрами лазерного излучения состоит в пропускании луча через среды, оптические свойства которых могут претерпевать значительные изменения даже при слабых энергетических воздействиях. Такие среды обычно называют «мягкой материей» (soft matter) [4]. Типичным представителем мягкой материи являются жидкие кристаллы (ЖК), текучие среды, обладающие свойствами как жидкостей, так и кристаллических твердых тел [5]. Оптические характеристики ЖК могут быть легко изменены приложением к ним внешних электромагнитных полей, это уникальное свойство обусловило их широчайшее применение в качестве средств отображения информации, таких как жидкокристаллические дисплеи [6, 7]. В последние годы все большее внимание исследователей привлекает возможность использования ЖК как управляющих элементов в оптоволоконных системах — оптических линиях связи, оптоволоконных лазерах и пр. [8, 9, 10].

ЖК могут быть также использованы для формирования оптических пучков с заданными свойствами, в частности «закрученного света» (оптических вихрей) [11].

В перечисленных отраслях деятельности, в связи с необходимостью определения особенностей сочетания физических процессов, влияющих на конечный материальный результат, существенную роль играет численное моделирование. В этой связи актуальными являются вопросы, связанные с выбором численных методов и границ их применимости, с методикой расчетов и применяемыми в расчетах формулами, с выбором технических параметров и разработкой кодов.

Целями диссертационной работы являются:

1. Разработка вычислительных программ, позволяющих проводить расчеты с высоким пространственным разрешением взаимодействия электромагнитного излучения со сложными пространственно неоднородными и анизотропными средами;
2. Исследование пространственного распределения поглощаемого излучения при лазерной обработке материалов для улучшения качества технологических процессов;
3. Получение данных о преобразовании лазерного излучения в оптоволокне при взаимодействии с объемом, заполненным жидкокристаллической средой, играющей роль элемента управления;
4. Исследование возможности генерации «закрученного света» (оптических вихрей) с использованием жидких кристаллов;
5. Исследование взаимного влияния анизотропной среды и пучка лазерного излучения.

Предметами исследования в диссертационной работе являются:

1. Влияние изотропных и анизотропных сред на электромагнитное поле в конкретных задачах;
2. Изменение анизотропии жидкокристаллической среды под действием переменного электромагнитного поля в конкретных задачах;

3. Особенности численных методов, разрешающих уравнения, описывающих поведение электромагнитного поля и поведение анизотропии нематического жидкого кристалла.

В диссертационной работе использованы следующие методы. Для расчета электромагнитного поля использованы уравнения Максвелла, для расчета геометрической оптики использованы формулы Френеля и законы Снеллиуса, для расчета изменения анизотропии нематического жидкого кристалла использовано уравнение ориентационной динамики нематического жидкого кристалла. Для численных расчетов использовался как персональный компьютер, так и вычислительный кластер. Коды реализованы на языке Фортран. Параллелизация расчетов на кластере осуществлена с помощью библиотеки MPI.

Новизна диссертационной работы состоит в следующем:

1. Разработан параллельный расчетный код для решения методом FDTD (Finite Difference Time Domain) уравнений Максвелла для анизотропной неоднородной среды, способный моделировать взаимодействие лазерного излучения с твердыми и жидкокристаллическими сплошными средами.
2. При численном моделировании задач лазерной резки показана необходимость учета всех преотражений для правильного вычисления теплового потока; в задаче о лазерном сверлении продемонстрирована важность учета интерференции; в задаче о лазерном спекании объяснены причины различного поведения керамических и металлических частиц. Метод FDTD впервые применен к задачам лазерного сверления и селективного лазерного спекания.
3. В оптоволоконных системах управления электромагнитным излучением с помощью полости, заполненной нематическим ЖК, показана предпочтительность использования определенной формы полости, как обеспечивающей меньшее рассеяние и избегающей фокусировки пучка.
4. Предложен способ управления величиной углового момента оптического

вихря путем изменения толщины слоя и/или силы дисклинации нематического жидкого кристалла.

5. Разработан расчетный код для совместного решения уравнений Максвелла и уравнений динамики ЖК-среды, показана возможность возникновения стохастических режимов при определенных поляризации и знаке диэлектрической анизотропии; воспроизведено в численном расчете явление самофокусировки лазерного пучка в нелинейной среде.

На защиту выносятся:

1. Алгоритмы и расчетные программы для моделирования взаимодействия электромагнитного излучения с твердыми и жидкокристаллическими сплошными средами, реализующие метод FDTD для решения уравнений Максвелла, метод трассировки лучей для задач геометрической оптики, совместное решение уравнений Максвелла и уравнений ориентационной динамики нематического жидкого кристалла.
2. Результаты численного решения задач лазерной обработки материалов: резки, сверления, селективного спекания.
3. Результаты численного моделирования оптоволоконных систем управления с ЖК-вставками.
4. Результаты численного моделирования оптических вихрей и управления их параметрами.
5. Вычислительные данные о нелинейных эффектах при прохождении излучения через нематические жидкокристаллические среды: отклонении пучка и его самофокусировке.

Результаты, представленные в диссертации, докладывались и обсуждались на научных конференциях:

1. Международная конференция «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики 2014», Новосибирск, 2014,

2. Международная конференция «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики 2015», Новосибирск, 2015,
3. Международная конференция «17-th International Conference «Laser Optics 2016». Санкт-Петербург, 2016,
4. Международная конференция «Russian Supercomputing Days 2017», Москва, 2017,
5. Международная конференция «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики 2017», Новосибирск, 2017,
6. XXV Всероссийская конференция с международным участием «Высокоэнергетические процессы в механике сплошной среды», Новосибирск, 2017,
7. XXVII Всероссийская конференция с международным участием «Высокоэнергетические процессы в механике сплошной среды», Новосибирск, 2020,

а также на научном семинаре ИТПМ СО РАН под руководством академика В.М. Фомина, на научном семинаре лаб.7 ИТПМ СО РАН под руководством зав.лаб. Е.А. Бондаря, на научном семинаре ИАиЭ СО РАН учебно-научного центра «Квантовая оптика» под руководством академика А.М. Шалагина, на научном объединенном семинаре ФИЦ ИВТ, кафедры математического моделирования НГУ и кафедры вычислительных технологий НГТУ «Информационно-вычислительные технологии» под руководством академика Ю.И. Шокина, профессоров М.В. Ковени и В.Б. Барахнина, на научном семинаре ИФ СО РАН им. Л.В. Киренского под руководством академика В.Ф. Шабанова, на научном семинаре Жидкокристаллического общества «Содружество» под руководством д.ф.-м.н. А.В. Казначеева.

По материалам диссертации опубликовано 14 работ, в том числе 7 работ, удовлетворяющих требованиям ВАК:

1. Галёв Р.В., Ковалев О.Б. Об использовании уравнений Максвелла при численном моделировании взаимодействия лазерного излучения с материалами // Вестник НГУ. Серия: Физика. 2014. Т. 9. С. 55-64.

2. Kovalev O.B., Galjov R.V. The application of Maxwell's equations for numerical simulation of processes during laser treatment of materials // J. Phys. D: Appl. Phys. 2015. 305501. 12 p.
3. Galev R., Kudryavtsev A., Trashkeev S. Numerical simulation of light propagation through composite and anisotropic media using supercomputers. In: Supercomputing, V. Voevodin and S. Sobolev (Eds.): RuSCDays 2017, Springer, CCIS 793, Chapter 18, 12 p.
4. Galev R., Kudryavtsev A., Trashkeev S. Numerical simulation of generation of optical vortices at light beam propagation through a layer of a nematic liquid crystal. Proceedings of the XXV conference on high-energy processes in condensed matter (HEPCM 2017, Novosibirsk, Russia, June 5-9, 2017), AIP Conference Proceedings, Vol. 1893, 2017, 030045, 11 p.
5. Galev R., Kudryavtsev A., Trashkeev S. Numerical simulation of laser beam interaction with a liquid crystal medium in a miniature fiber-optical system. Proceedings of the XXV conference on high-energy processes in condensed matter (HEPCM 2017, Novosibirsk, Russia, June 5-9, 2017), AIP Conference Proceedings, Vol. 1893, 2017, 030044, 8 p.
6. Orishich A.M., Golyshev A.A., Shulyatyev V.B., Galev R.V., Kudryavtsev A.N. Beam polarization effect on the surface quality during steel cutting by CO₂ laser // Journal of Laser Applications. 2018. Vol. 30, No. 1. 012006. 7 p.
7. Galev R.V., Kudryavtsev A.N. Numerical method for simulation of orientation dynamics of nematic liquid crystals in electromagnetic fields. Proceedings of the XXVII Conference on High-Energy Processes in Condensed Matter (HEPCM 2020, Novosibirsk, Russia). AIP Conference Proceedings, Vol. 2288, 2020, 030001, 6 p.

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы из 63 наименований, двух приложений. Общий объем диссертации составляет 146 страниц, включая 85 рисунков и 4 таблицы.

Во **Введении** описана актуальность темы исследования, сформулированы цели диссертационной работы, перечислены полученные в диссертации новые результаты и положения, выносимые на защиту, описана структура диссертации.

В **Главе 1** описан метод численного решения уравнений Максвелла (FDTD), который используется в работе тогда, когда метод геометрического приближения неприменим в силу условий задачи (характерные размеры сравнимы с длиной волны, имеется развитая пористая поверхность раздела двух сред). Описана реализация FDTD на кубической декартовой сетке для анизотропной среды. Описан собственный способ генерации излучения — с помощью «ограниченной токовой площадки». Предложена задача для верификации анизотропного кода. Подробно описан метод численного моделирования для расчета энергии лазерного излучения поглощенной поверхностью металла в канале реза. Метод основан на положениях геометрической оптики и использует трассировку луча. Так как в литературе широко распространен подобный метод, с тем отличием, что трассировкой пренебрегают без дополнительных слов обосновывающих это пренебрежение, то в главе отдельно приведен расчет, который показывает существенную разницу в результатах с трассировкой и без трассировки, из чего делается вывод, что в общем случае при моделировании нельзя пренебрегать трассировкой луча, а если трассировкой решено пренебречь, то следует это решение обосновывать.

В **Главе 2** описан личный вклад в работу, посвященную резке металлов. Личный вклад состоял в численном моделировании, которое дополняло экспериментальную часть работы. Кратко представлены выводы коллективной работы.

Кроме того в **Главе 2** проведено моделирование распределения лазерного излучения в изотропных средах. На примере задачи о лазерном сверлении металла сравнены два метода: FDTD и геометрическая оптика. Показаны области совпадения и различия расчетов. Наглядно показана важность учета интерференции отраженного излучения. Сделано предположение о том, что сокращение длины волны излучения или увеличение поперечного радиуса пучка способно уменьшить размер «гофра» в канале сверления и, за счет этого, улучшить качество поверхности отверстия при лазерном сверлении металлов. На примере задачи о селективном

спекании сравнены два модельных материала и сделано предположение, что для равномерного прогрева важно учитывать совокупное влияние двух явлений (фокусировки и скин-эффекта). Если же материал уже задан, то для равномерного прогрева нужно подбирать или длину волны, или радиус шаровых частиц, а в случае спекания смеси шаровых частиц из разных материалов (металл и керамика) одним лазерным пучком (длина излучения уже задана единой), для вариативного управления равномерностью прогрева смеси остается только радиус шаровых частиц.

Глава 3 посвящена некоторым вопросам изменения электромагнитного излучения в неподвижной анизотропной среде. Смоделированы два варианта исполнения полости в оптоволокне для разрабатываемой экспериментаторами системы управления свойствами лазерного излучения. Сравнены две формы полости в оптоволокне (круглое отверстие поперек оптоволокна, поперечный разрез оптоволокна), заполненные нематическим жидким кристаллом (НЖК), через которые проходит лазерное излучение. Показано, что на рассеяние излучения влияет кривизна поверхности полости — плоские стенки разреза рассеивают меньше чем боковая цилиндрическая поверхность отверстия, и потому поперечный разрез предпочтительнее сквозного отверстия. Кроме того показано, что от ширины зазора разреза также зависит пропускная способность системы — в этом отношении система ведет себя как «оптический резонатор с потерями», что указывает на возможность управления излучением при помощи ширины зазора.

Кроме влияния формы полости на излучение в главе исследована способность НЖК изменять способность пучка света закручивать экран-мишень. Способность закручивания рассматривается в работе как z -компонента момента вектора Пойнтинга — на основании интерпретации вектора Пойнтинга как плотности импульса электромагнитного поля. Применены методы численного моделирования для исследования зависимости момента вектора Пойнтинга пучка света, пропущенного через слой НЖК, от силы дисклинации, от ширины слоя НЖК, а также от первоначального момента вектора Пойнтинга. Показано, что имеется возможность управления моментом вектора Пойнтинга путем пропускания излучения че-

рез слой НЖК с заданными параметрами.

Так как ненулевой момент вектора Пойнтинга является свойством «оптического вихря» — геометрического места точек, в которых фаза неопределена, обычно совпадающего с осевой линией пучка света — то, с целью выявления «оптического вихря», момент вектора Пойнтинга рассмотрен совместно с распределением фаз компонент электромагнитного поля. Определение «оптического вихря» в литературе введено для параксиального приближения, где рассматривается одна компонента поля. В данной работе используется все шесть компонент электромагнитного поля, и возникшая трудность с выбором компоненты поля для рассмотрения фазы, привела к предложению рассматривать не фазу одной компоненты, а фазу экстремального значения электрического вектора за период колебания. Определение «оптического вихря» не через фазу компоненты поля, а через фазу экстремального значения величины электрического вектора является законным, так как очевидно сводится к определению в параксиальном приближении, как к частному случаю. Однако новое определение допускает возможность существования оптического вихря, которая исключается параксиальным приближением — фаза экстремального значения величины электрического вектора может быть неопределена в точках с ненулевым полем в случае, если поле имеет круговую поляризацию (в параксиальном однокомпонентном приближении в точках с неопределенной фазой поле обязано равняться нулю). Приведен пример — аналитическое решение уравнений Максвелла «собственная мода оптоволокна» имеет на оси пучка максимальное значение электрического поля с круговой поляризацией, и момент вектора Пойнтинга этого пучка не равен нулю.

В **Главе 4** описан численный метод для моделирования взаимного воздействия электромагнитного излучения и среды НЖК. Кроме уравнений Максвелла, решаются «материальные» уравнения, где подвижность НЖК выражается в изменении вектора-директора, тогда как скорость самой среды НЖК принята равной нулю. Рассмотрены некоторые вопросы, связанные с методологией (формулы вычисления данных, условия на временной шаг, критерии сходимости расчета), а также реализацией и верификацией кода.

Замечено, что для сходимости расчета без учета упругости НЖК необходима круговая поляризация проходящего пучка при положительной анизотропии НЖК — при линейной поляризации проходящего пучка света и в отсутствие упругости численные расчеты расходятся. В этой связи отмечено сходство численного расчета и экспериментальных результатов — в статьях о «нематиконах» (пространственных структурах НЖК в пучке света) экспериментаторы упоминают оба параметра: и поляризацию излучения, и знак анизотропии НЖК, стремясь (для сохранения стабильной структуры НЖК) подбирать их точно в такой же комбинации, как в данной главе эти параметры подбираются для сходимости численных расчетов. Поэтому в данной работе проведен качественный анализ аналитического выражения для электроориентационного эффекта, выражающегося в изменении направления вектора-директора под действием переменного электромагнитного поля в некоторой точке пространства. Выяснен характер эффекта — при положительной анизотропии НЖК (заданное свойство конкретного НЖК), вектор-директор стремится «упасть» в плоскость «поляризации» (плоскость, в которой лежит эллипс, заметаемый электрическим вектором излучения за период колебания, взятым в некоторой точке пространства); при отрицательной анизотропии НЖК, вектор-директор стремится сориентироваться по нормали к плоскости «поляризации». Сделано предположение о том, что расхожимость численных расчетов отражает реальную нестабильность.

Проведено моделирование прохождения пучка лазерного излучения через слой нематического жидкого кристалла. Полученные результаты сравнены с результатом оценочной формулы Б.Я. Зельдовича. Сделан вывод о важности учета не только изменения параметров среды, но и изменения параметров излучения, закономерно следующим за изменением среды.

В Заключении изложены результаты работы.

В Приложении А описано аналитическое решение задачи «собственные моды оптоволокна» и предложен компьютерный алгоритм для построения решения.

В Приложении Б описано оригинальное аналитическое решение задачи «падение плоской волны на слой холестерического жидкого кристалла» и предложен

метод построения поля плоской электромагнитной волны проходящей через стопку пластин с анизотропией холестерического типа.

Автор выражает глубокую признательность за всестороннюю поддержку научному руководителю А.Н. Кудрявцеву и С.И. Трашкееву.

Глава 1

Методы численного решения уравнений распространения света в анизотропных пространственно неоднородных средах

1.1. Уравнения Максвелла для анизотропной пространственно неоднородной среды

Распространение электромагнитных волн в материальной среде описывается уравнениями Максвелла. В системе единиц физических величин СГС уравнения Максвелла имеют вид [12]:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = -\frac{4\pi}{c} (\mathbf{J} + \hat{\sigma}_e \mathbf{E}) + \text{rot } \mathbf{H}, \quad \mathbf{D} = \hat{\epsilon} \mathbf{E}, \quad (1.1)$$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\frac{4\pi}{c} (\mathbf{M} + \hat{\sigma}_m \mathbf{H}) - \text{rot } \mathbf{E}, \quad \mathbf{B} = \hat{\mu} \mathbf{H}. \quad (1.2)$$

При этом пара уравнений Максвелла: $\text{div } \mathbf{D} = 4\pi\rho$, $\text{div } \mathbf{B} = 0$ — должна удовлетворяться автоматически (далее в работе полагается равной нулю величина ρ — объемная плотность свободного электрического заряда), так как имеет характер ограничений, накладываемых на начальные условия. Здесь $\hat{\epsilon}(\mathbf{r})$ — тензор диэлектрической проницаемости, $\hat{\mu}(\mathbf{r})$ — тензор магнитной проницаемости, $\hat{\sigma}_e(\mathbf{r})$ — тензор электрической проводимости, $\hat{\sigma}_m(\mathbf{r})$ — тензор проводимости магнитного заряда (магнитный заряд используется специфически для задания граничных условий), $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ — объемная плотность стороннего тока электрического заряда (используется для задания источника излучения) и $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ — объемная плотность стороннего тока магнитного заряда (используется как альтернатива электрическому току для задания источника излучения).

В рассматриваемых в диссертации оптически одноосных средах, в частности одноосных жидких кристаллах, тензор диэлектрической проницаемости имеет вид [13]

$$\hat{\epsilon}_{ij} = \epsilon_{\perp} \delta_{ij} + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) n_i n_j, \quad (1.3)$$

где n_i — компоненты единичного вектора \mathbf{n} , задающего направление оптической оси (в жидких кристаллах он совпадает с вектором-директором, указывающим преимущественное направление ориентации молекул), δ_{ij} — символ Кронекера, ε_{\parallel} , ε_{\perp} — продольная и поперечная диэлектрические проницаемости.

При этом обратный тензор имеет вид:

$$\varepsilon_{ij}^{-1} = \frac{1}{\varepsilon_{\perp}} \delta_{ij} + \left(\frac{1}{\varepsilon_{\parallel}} - \frac{1}{\varepsilon_{\perp}} \right) n_i n_j. \quad (1.4)$$

В диссертации не рассматриваются магнитные материалы, поэтому тензор магнитной проницаемости всюду предполагается единичным.

Под выделением частоты подразумевается подстановка в уравнения Максвелла (1.1, 1.2) функций \mathbf{D} , \mathbf{E} , \mathbf{B} , \mathbf{H} , \mathbf{J} , \mathbf{M} , с временной зависимостью типа $\mathbf{E}(t) = \hat{\mathbf{E}}(t) \exp(-i\omega t)$. Векторные величины с крышками будем называть «комплексными медленно меняющимися амплитудами функций» или, для простоты невзирая на зависимость от времени, «комплексными амплитудами». Подстановка указанной выше временной зависимости в уравнения (1.1, 1.2) дает уравнения Максвелла на комплексные амплитуды:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \hat{\mathbf{D}}}{\partial t} = -\frac{4\pi}{c} (\hat{\mathbf{J}} + \hat{\sigma}_e \hat{\mathbf{E}}) + \frac{i\omega}{c} \hat{\mathbf{D}} + \text{rot} \hat{\mathbf{H}}, \quad \hat{\mathbf{D}} = \hat{\varepsilon} \hat{\mathbf{E}}, \quad (1.5)$$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \hat{\mathbf{B}}}{\partial t} = -\frac{4\pi}{c} (\hat{\mathbf{M}} + \hat{\sigma}_m \hat{\mathbf{H}}) + \frac{i\omega}{c} \hat{\mathbf{B}} - \text{rot} \hat{\mathbf{E}}, \quad \hat{\mathbf{B}} = \hat{\mu} \hat{\mathbf{H}}. \quad (1.6)$$

Мгновенные вещественные значения компонент поля вычисляются как реальные части комплексных значений и потому выражаются через комплексные амплитуды формулами, типа:

$$\text{Re}[\mathbf{E}(t)] = \text{Re}[\hat{\mathbf{E}}(t) \exp(-i\omega t)]. \quad (1.7)$$

Смысл выделения частоты состоит в том, что во многих случаях комплексная амплитуда меняется с течением времени намного медленнее, чем исходная величина, и тогда такой прием позволяет значительно повысить точность вычислений. В задачах, где все величины зависят от времени гармонически с круговой частотой ω , комплексные амплитуды, очевидно, вообще от времени не зависят, и

интегрирование уравнений Максвелла по времени сводится к нахождению, методом установления, стационарного решения уравнений для амплитуд.

При численном моделировании уравнения Максвелла удобно решать в безразмерном виде. Для обезразмеривания уравнений Максвелла в качестве характерных величин выбираются: $T = 2\pi/\omega$ — период колебания электромагнитного излучения и c — скорость света в вакууме. Кроме того, так как рассматриваются среды с линейным откликом на поле, выбирается характерное скалярное значение компоненты электромагнитного поля E_0 . Тогда безразмерные величины можно выразить через размерные (в системе СГС) следующим образом:

$$\begin{aligned} \tilde{t} &= t/T, & \tilde{\mathbf{r}} &= \mathbf{r}/cT, & \tilde{\omega} &= \omega T \equiv 2\pi, & \tilde{\sigma} &= \sigma \cdot 4\pi T, \\ \tilde{\mathbf{J}} &= \mathbf{J} \cdot 4\pi T/E_0, & \tilde{\mathbf{E}} &= \mathbf{E}/E_0, & \tilde{\mathbf{H}} &= \mathbf{H}/E_0, \end{aligned} \quad (1.8)$$

где волной помечены безразмерные величины.

Стоит отметить, что при таком выборе характерных величин, безразмерная длина волны в вакууме $\tilde{\lambda} = \lambda/cT \equiv 1$. То есть, во всех безразмерных задачах единица длины совпадает с длиной волны в вакууме. Безразмерная длина волны в среде зависит от параметров среды:

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{\epsilon\mu}}.$$

После подстановки выражений (1.8) в уравнения (1.5, 1.6) получаются безразмерные уравнения Максвелла на комплексные амплитуды:

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{D}}}{\partial t} = -(\hat{\mathbf{J}} + \hat{\sigma}_e \hat{\mathbf{E}}) + 2\pi i \hat{\mathbf{D}} + \text{rot } \hat{\mathbf{H}}, \quad \hat{\mathbf{D}} = \hat{\epsilon} \hat{\mathbf{E}}, \quad (1.9)$$

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{B}}}{\partial t} = -(\hat{\mathbf{M}} + \hat{\sigma}_m \hat{\mathbf{H}}) + 2\pi i \hat{\mathbf{B}} - \text{rot } \hat{\mathbf{E}}, \quad \hat{\mathbf{B}} = \hat{\mu} \hat{\mathbf{H}}, \quad (1.10)$$

где символ волны опущен для простоты записи.

1.2. Метод FDTD для анизотропной среды

Для численного решения уравнений Максвелла было предложено очень большое число различных подходов, основанных на методах конечных разностей, конечных объемов, конечных элементов, спектральных методах. В течение многих

лет, однако, наиболее популярным остается метод FDTD (Finite-Difference Time-Domain), предложенный в работе в работе К.С. Йи [14]. Этот метод и его многочисленные модификации используется едва ли не в подавляющем большинстве работ, посвященных численному решению уравнений Максвелла. Используемое название метода трудно признать удачным, поскольку по смыслу английской аббревиатуры оно может относиться к любой конечноразностной схеме для решения уравнений Максвелла во временной области. Возможно более точным было бы название «схема Йи», однако к настоящему времени название «метод FDTD» стало общепризнанным, в том числе и в русской литературе. Из многочисленных статей и монографий, в которых рассматривается данный метод и его применение к численному моделированию распространения электромагнитных волн и их взаимодействий с материальными средами укажем книгу [15], настоящую энциклопедию данного подхода, за сравнительно короткое время вышедшую тремя изданиями (в 1995, 2000 и 2005 гг.) и насчитывающую в последнем издании более тысячи страниц. Существует ряд свободно распространяемых расчетных кодов, в которых реализован метод FDTD, таких как MEEP [16], openEMS [17], GSvit [18] и др. а также большое количество коммерческих пакетов.

Одной из целей настоящей работы была разработка основанного на методе FDTD параллельного вычислительного кода для моделирования взаимодействия света с пространственно неоднородными анизотропными средами. Ниже в данной главе излагаются детали используемого численного алгоритма и его программной реализации для вычислений на многопроцессорных вычислительных кластерах.

Алгоритм решения уравнений Максвелла, предложенный К.С. Йи, является достаточно простой, но в то же время изобретательно сконструированной конечноразностной схемой. Ее отличительной особенностью является использование разнесенной (шахматной) пространственно-временной сетки — разные компоненты электрического и магнитного полей хранятся в различных узлах сетки, кроме того временные слои, на которых определены электрическое и магнитное поле сдвинуты относительно друг друга. Это позволяет очень простым и естественным образом, со вторым порядком точности, аппроксимировать центральными

разностями входящие в уравнения пространственные и временные производные. Изменение со временем компонент электромагнитного поля находится путем интегрирования двух векторных (содержащих роторы \mathbf{E} и \mathbf{H}) уравнений Максвелла. Скалярные уравнения, содержащие дивергенции полей, при этом не используются — эти уравнения имеют характер ограничений, накладываемых на начальные условия.

Используемая в методе FDTD пространственная сетка показана на рис. 1. Как видно, она состоит из одинаковых ячеек с размерами Δx , Δy , Δz вдоль соответствующих осей декартовой системы координат. В данном случае ячейка выбрана так, что компоненты электрического поля хранятся в центрах граней параллелепипеда, а компоненты магнитного поля — в серединах его ребер.

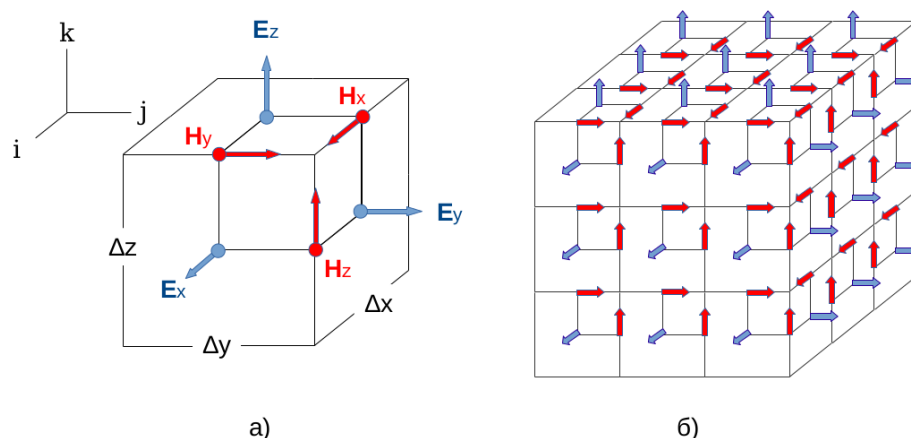


Рис. 1: Пространственная ячейка (а) и пространственная сетка (б).

Формулы для вычисления компонент поля в изотропных средах с электрической проводимостью приведены например в [15]. Формулы для вычисления компонент поля в анизотропных средах приведены например в [19]. В частном случае анизотропных сред: с заданным тензором диэлектрической проницаемости $\hat{\epsilon}(\mathbf{r})$, с изотропной электрической проводимостью $\sigma \equiv 0$, с изотропной магнитной проницаемостью $\mu \equiv 1$ — для безразмерных уравнений Максвелла с выделенной частотой (1.9, 1.10) формулы в декартовой системе координат имеют следующий вид («крышки» над комплексными амплитудами компонент электромагнитного поля

опущены для простоты записи):

$$\text{rot}_x \mathbf{H} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^n = \frac{H_z \Big|_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n - H_z \Big|_{i,j-1,k-\frac{1}{2}}^n}{\Delta y} - \frac{H_y \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k}^n - H_y \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k-1}^n}{\Delta z}, \quad (1.11)$$

$$\text{rot}_y \mathbf{H} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^n = \frac{H_x \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k}^n - H_x \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k-1}^n}{\Delta z} - \frac{H_z \Big|_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n - H_z \Big|_{i-1,j,k-\frac{1}{2}}^n}{\Delta x}, \quad (1.12)$$

$$\text{rot}_z \mathbf{H} \Big|_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^n = \frac{H_y \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k}^n - H_y \Big|_{i-1,j-\frac{1}{2},k}^n}{\Delta x} - \frac{H_x \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k}^n - H_x \Big|_{i-\frac{1}{2},j-1,k}^n}{\Delta y}, \quad (1.13)$$

$$D_x \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} = m_r \left(\text{rot}_x \mathbf{H} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^n - J_x \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^n \right) + m_f D_x \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{n-1/2}, \quad (1.14)$$

$$D_y \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} = m_r \left(\text{rot}_y \mathbf{H} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^n - J_y \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^n \right) + m_f D_y \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{n-1/2}, \quad (1.15)$$

$$D_z \Big|_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{n+1/2} = m_r \left(\text{rot}_z \mathbf{H} \Big|_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^n - J_z \Big|_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^n \right) + m_f D_z \Big|_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{n-1/2}, \quad (1.16)$$

$$D_{y,i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}} = \frac{1}{4} \left(D_y \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} + D_y \Big|_{i-\frac{1}{2},j-1,k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} + D_y \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} + D_y \Big|_{i+\frac{1}{2},j-1,k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} \right), \quad (1.17)$$

$$D_{z,i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}} = \frac{1}{4} \left(D_z \Big|_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{n+1/2} + D_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{n+1/2} + D_z \Big|_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-1}^{n+1/2} + D_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-1}^{n+1/2} \right), \quad (1.18)$$

$$\begin{aligned} E_x \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} &= \\ &= \varepsilon_{xx,i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{-1} D_x \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} + \varepsilon_{xy,i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{-1} D_{y,i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}} + \varepsilon_{xz,i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{-1} D_{z,i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (1.19)$$

$$D_{x,i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}} = \frac{1}{4} \left(D_x \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} + D_x \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} + D_x \Big|_{i-1,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} + D_x \Big|_{i-1,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} \right), \quad (1.20)$$

$$D_{z,i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}} = \frac{1}{4} \left(D_z \Big|_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{n+1/2} + D_z \Big|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^{n+1/2} + D_z \Big|_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-1}^{n+1/2} + D_z \Big|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-1}^{n+1/2} \right), \quad (1.21)$$

$$\begin{aligned}
E_y \Big|_{i-\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} &= \\
&= \varepsilon_{yx, i-\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2}}^{-1} D_{x, i-\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2}} + \varepsilon_{yy, i-\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2}}^{-1} D_y \Big|_{i-\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} + \varepsilon_{yz, i-\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2}}^{-1} D_{z, i-\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2}},
\end{aligned} \tag{1.22}$$

$$D_{x, i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k} = \frac{1}{4} \left(D_x \Big|_{i, j-\frac{1}{2}, k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} + D_x \Big|_{i, j-\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}^{n+1/2} + D_x \Big|_{i-1, j-\frac{1}{2}, k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} + D_x \Big|_{i-1, j-\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}^{n+1/2} \right), \tag{1.23}$$

$$D_{y, i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k} = \frac{1}{4} \left(D_y \Big|_{i-\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} + D_y \Big|_{i-\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}}^{n+1/2} + D_y \Big|_{i-\frac{1}{2}, j-1, k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} + D_y \Big|_{i-\frac{1}{2}, j-1, k+\frac{1}{2}}^{n+1/2} \right), \tag{1.24}$$

$$\begin{aligned}
E_z \Big|_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k}^{n+1/2} &= \\
&= \varepsilon_{zx, i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k}^{-1} D_{x, i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k} + \varepsilon_{zy, i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k}^{-1} D_y \Big|_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k}^{n+1/2} + \varepsilon_{zz, i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k}^{-1} D_z \Big|_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k}^{n+1/2},
\end{aligned} \tag{1.25}$$

$$\text{rot}_x \mathbf{E} \Big|_{i-\frac{1}{2}, j, k}^{n+1/2} = \frac{E_z \Big|_{i-\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k}^{n+1/2} - E_z \Big|_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k}^{n+1/2}}{\Delta y} - \frac{E_y \Big|_{i-\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}}^{n+1/2} - E_y \Big|_{i-\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2}}^{n+1/2}}{\Delta z}, \tag{1.26}$$

$$\text{rot}_y \mathbf{E} \Big|_{i, j-\frac{1}{2}, k}^{n+1/2} = \frac{E_x \Big|_{i, j-\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}}^{n+1/2} - E_x \Big|_{i, j-\frac{1}{2}, k-\frac{1}{2}}^{n+1/2}}{\Delta z} - \frac{E_z \Big|_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k}^{n+1/2} - E_z \Big|_{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k}^{n+1/2}}{\Delta x}, \tag{1.27}$$

$$\text{rot}_z \mathbf{E} \Big|_{i, j, k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} = \frac{E_y \Big|_{i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} - E_y \Big|_{i-\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2}}^{n+1/2}}{\Delta x} - \frac{E_x \Big|_{i, j+\frac{1}{2}, k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} - E_x \Big|_{i, j-\frac{1}{2}, k-\frac{1}{2}}^{n+1/2}}{\Delta y}, \tag{1.28}$$

$$B_x \Big|_{i-\frac{1}{2}, j, k}^{n+1} = -m_r \left(\text{rot}_x \mathbf{E} \Big|_{i-\frac{1}{2}, j, k}^{n+1/2} + M_x \Big|_{i-\frac{1}{2}, j, k}^{n+1/2} \right) + m_f B_x \Big|_{i-\frac{1}{2}, j, k}^n, \tag{1.29}$$

$$H_x \Big|_{i-\frac{1}{2}, j, k}^{n+1} = B_x \Big|_{i-\frac{1}{2}, j, k}^{n+1}, \tag{1.30}$$

$$B_y \Big|_{i, j-\frac{1}{2}, k}^{n+1} = -m_r \left(\text{rot}_y \mathbf{E} \Big|_{i, j-\frac{1}{2}, k}^{n+1/2} + M_y \Big|_{i, j-\frac{1}{2}, k}^{n+1/2} \right) + m_f B_y \Big|_{i, j-\frac{1}{2}, k}^n, \tag{1.31}$$

$$H_y \Big|_{i, j-\frac{1}{2}, k}^{n+1} = B_y \Big|_{i, j-\frac{1}{2}, k}^{n+1}, \tag{1.32}$$

$$B_z \Big|_{i, j, k-\frac{1}{2}}^{n+1} = -m_r \left(\text{rot}_z \mathbf{E} \Big|_{i, j, k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} + M_z \Big|_{i, j, k-\frac{1}{2}}^{n+1/2} \right) + m_f B_z \Big|_{i, j, k-\frac{1}{2}}^n, \tag{1.33}$$

$$H_z \Big|_{i, j, k-\frac{1}{2}}^{n+1} = B_z \Big|_{i, j, k-\frac{1}{2}}^{n+1}. \tag{1.34}$$

Здесь множители:

$$m_r = \frac{\Delta t}{1 - \hat{i}\pi\Delta t}, \quad m_f = \frac{1 + \hat{i}\pi\Delta t}{1 - \hat{i}\pi\Delta t}, \quad \hat{i} \text{ — мнимая единица.}$$

Нижний индекс обозначает координату сеточного узла, а верхний индекс обозначает момент времени. Например, индексу $\{i - \frac{1}{2}, j, k\}$ соответствует координата $(i\Delta x - \frac{1}{2}\Delta x, j\Delta y, k\Delta z)$, а индексу $\{n\}$ соответствует момент времени $n\Delta t$.

Применением формул вычисляется электромагнитное поле через временной интервал Δt в узлах сетки:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}(t = n\Delta t - \frac{1}{2}\Delta t) \\ \mathbf{D}(t = n\Delta t - \frac{1}{2}\Delta t) \\ \mathbf{B}(t = n\Delta t) \\ \mathbf{H}(t = n\Delta t) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \mathbf{E}(t = n\Delta t + \frac{1}{2}\Delta t) \\ \mathbf{D}(t = n\Delta t + \frac{1}{2}\Delta t) \\ \mathbf{B}(t = n\Delta t + \Delta t) \\ \mathbf{H}(t = n\Delta t + \Delta t) \end{pmatrix}.$$

Расстояние между соседними узлами по оси O_x : Δx — задается как можно меньше, исходя из вычислительных возможностей. То есть так, чтобы было как можно больше N_λ — разрешение длины волны λ в среде пространственной сеткой:

$$N_\lambda = \lambda / \Delta x.$$

Удовлетворительным полагается «двадцать точек на волну»: $N_\lambda \simeq 20$.

Расстояния между соседними узлами вдоль других осей задаются равными между собой:

$$\Delta x = \Delta y = \Delta z,$$

чтобы уменьшить влияние «сеточной анизотропии», вызванной численной дисперсией. Для формул справедливо численное дисперсионное соотношение [15]:

$$\epsilon\mu \left[\frac{\sin(\omega\Delta t/2)}{c\Delta t} \right]^2 = \left[\frac{\sin(k_x\Delta x/2)}{\Delta x} \right]^2 + \left[\frac{\sin(k_y\Delta y/2)}{\Delta y} \right]^2 + \left[\frac{\sin(k_z\Delta z/2)}{\Delta z} \right]^2. \quad (1.35)$$

Для уравнений Максвелла справедливо аналитическое дисперсионное соотношение:

$$\epsilon\mu \frac{\omega^2}{c^2} = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2, \quad (1.36)$$

При $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta y \rightarrow 0$, $\Delta z \rightarrow 0$ и $\Delta t \rightarrow 0$ очевидно, что численное дисперсионное соотношение (1.35) совпадает с аналитическим дисперсионным соотношением (1.36).

Однако шаги дискретизации Δt , Δx , Δy , Δz хоть и малы, но не стремятся к нулю — фазовая скорость, $\omega/|\mathbf{k}|$, в численном расчете зависит от шага. В случае $\Delta x \neq \Delta y \neq \Delta z$ скорость зависит еще и от направления — имеет место «сеточная анизотропия».

Шаг по времени, Δt , определяется условием устойчивости FDTD-схемы [15]:

$$\Delta t \leq \frac{1}{u \sqrt{(1/\Delta x)^2 + (1/\Delta y)^2 + (1/\Delta z)^2}},$$

где $u = 1/\sqrt{\epsilon\mu}$ — скорость света в изотропной среде.

1.3. Постановка начальных и граничных условий в методе FDTD

1.3.1. Генерация оптических пучков в методе FDTD

В FDTD для задания излучения в расчетном объеме имеется несколько способов, описанных например в монографиях [20, 15].

Излучение можно создавать с помощью «жесткого источника», то есть с помощью присвоения желаемой функции f конкретным компонентам E или H в выбранных узлах пространственной сетки. Например, для одномерной задачи, в которой решаются уравнения Максвелла без выделения частоты (1.1, 1.2) можно задать $E_x|_{i_s}^n = \sin(n\Delta t)$. Тогда в расчете побежит симметрично вправо и влево от узла i_s синусоидальная волна.

Вообще, в расчетных задачах иногда задаются неоднородности или поверхности, от которых падающее на них излучение частично отражается и способно распространяться обратно в сторону источника излучения. Однако в случае с «жестким источником» в излучающих узлах сетки электромагнитное поле не рассчитывается с помощью формул (1.11 – 1.33), а считается заданной. Это приводит к тому, что падающее на поверхность «жесткого источника» излучение чувствует эту поверхность как идеальный проводник — излучение отражается от источника. То есть «жесткий источник», наряду с испусканием излучения, искажает падающее на него излучение, что вносит в расчет погрешность.

Проблема отражения не стоит в случае генерации короткого импульса — после того как импульс сгенерирован, источник «отключают», то есть в точках, где находился источник, начинают рассчитывать поле с помощью итерационных формул. Для длительных импульсов проблема отражения от источника решается с помощью плотности стороннего тока электрических зарядов J или плотности стороннего тока гипотетических магнитных зарядов J_m , входящих в уравнения Максвелла в виде слагаемых — желаемая функция f присваивается не компонентам поля, а компонентам сторонних токов. В этом случае электромагнитное поле рассчитывается итерационными формулами, и падающее излучение, не чувствуя излучатель, проходит сквозь него. Следует упомянуть, что сторонние токи способны вносить в расчетную область заряд, то есть, если включить в пространстве элемент тока, который в течение некоторого времени имеет одно направление, а потом элемент тока выключить, то в расчетном пространстве останется постоянное электрическое поле, которое соответствует разноименным точечным зарядам, находящимся на концах элемента тока. Величина этих зарядов равна заряду, протекшему посредством заданного тока. Однако в случае гармонического тока электрические заряды почти не накапливаются в расчетном объеме и сгенерированное поле почти не искажается — не дополняется статической компонентой от электрических зарядов.

Для генерации плоской волны обычно используется техника «total-field/scattered-field» (TF/SF). Расчетный объем делится на внутренний и внешний. Во внутреннем объеме предполагается рассчитывать полное поле, а во внешнем объеме — только отраженное, так как падающее на внутренний объем излучение считается известным. В силу этого предположения следует сшить поле на границе между объемами, что довольно легко сделать, если известно падающее на внутренний объем поле (например плоская волна) — на замкнутой границе между объемами следует добавлять тангенциальные компоненты известного падающего поля к рассчитанным компонентам, как E , так и H . Особенностью этой техники является необходимость знать падающее поле на замкнутой поверхности, окружающей область, в которой рассчитывается полное поле. Техника TF/SF хорошо

подходит для падающих плоских волн, однако она вызывает погрешность в расчете, если компоненты падающего поля нельзя задать точно на замкнутой поверхности, окружающей область полного поля.

В диссертации рассматривается излучение в виде пучков, условно ограниченных в поперечном сечении — строго говоря, поле всюду не равно нулю, однако вдали от оси пучка оно настолько мало, что им можно пренебречь.

Ограниченность пучка позволяет модифицировать технику TF/SF. Модификация предложена в диссертации. Падающее на оптическую неоднородность поле задается не на всей замкнутой поверхности, а лишь на ограниченной площадке, расположенной перпендикулярно распространению пучка. При этом, на ограниченной площадке достаточно знать не шесть, а две компоненты поля. Причем, вместо компонент падающего поля используются компоненты токов. Поэтому техника названа «генерация токовой поверхностью».

Техника генерации токовой поверхностью состоит в следующем. Выбирается площадка $z = z_0$, перпендикулярная направлению распространения пучка O_z . В узлах площадки задаются компоненты \mathbf{J} :

$$\begin{aligned} J_x(z_0) &= -\frac{2H_y(z_0 + \Delta z/2)}{\Delta z}, \\ J_y(z_0) &= \frac{2H_x(z_0 + \Delta z/2)}{\Delta z}. \end{aligned} \quad (1.37)$$

Либо можно задавать компоненты плотности магнитного тока \mathbf{M} :

$$\begin{aligned} M_x(z_0) &= \frac{2E_y(z_0 + \Delta z/2)}{\Delta z}, \\ M_y(z_0) &= -\frac{2E_x(z_0 + \Delta z/2)}{\Delta z}. \end{aligned} \quad (1.38)$$

Здесь компоненты H_y , H_x или E_y , E_x — это компоненты желаемого генерируемого поля. Следует подчеркнуть, что для генерации во всем расчетном объеме шести компонент желаемого электромагнитного поля достаточно задать лишь две компоненты поля на поверхности, отстоящей от токовой поверхности $z = z_0$ на расстояние $\Delta z/2$.

Вывод формул (1.37, 1.38) аналогичен выводу граничных условий для поверхностного тока в классической электродинамике.

Пространственные узлы для компонент **J** совпадают с узлами для компонент **E** и **D**. Узлы для компонент **M** совпадают с узлами для компонент **B** и **H**.

Генерирующую токовую площадку в некотором смысле можно сравнить с отверстием в экране. Чем меньше поперечный размер площадки, тем заметнее эффект «дифракции на отверстии» при генерации излучения. В этой связи, для уменьшения отличий реально сгенерированного излучения от желаемого, следует задавать площадку как можно шире, однако это влечет за собой увеличение поперечного размера расчетной области. Таким образом имеется противоречие — желательная точность генерации против желательного уменьшения поперечного размера расчетного объема. Компромисс достигается индивидуально в каждой задаче.

При резких изменениях тока в расчетном объеме появляется электромагнитное поле, искажающее расчет. Чтобы уменьшить искажающее поле при заданном начальном нулевом электромагнитном поле следует ток включать плавно, например, повышая от нуля в течение периода колебаний электромагнитного излучения в начале расчета.

Излучение лазера в ряде случаев принято моделировать гауссовым пучком [21]:

$$\Psi(r, z, t) = \frac{l_0 \exp\left\{-\frac{r^2}{2\sigma^2(z)}\right\}}{\sqrt{l_0^2 + z^2}} \exp\left\{ikzn(r, z) - i \arctg \frac{z}{l_0} - i\omega t\right\}, \quad (1.39)$$

где введены следующие обозначения:

$$l_0 = \sigma_0^2 k, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \sigma(z) = \sigma_0 \sqrt{1 + \left(\frac{z}{l_0}\right)^2}, \quad n(r, z) = 1 - \frac{r^2}{2(l_0^2 + z^2)}.$$

Если в формуле (1.37) положить

$$H_y = \Psi(x, y, z = z_0, t = 0), \quad H_x = 0,$$

то в расчетном объеме сгенерируется поле гауссова пучка с линейной поляризацией. Если положить

$$H_y = \Psi(x, y, z = z_0, t = 0), \quad H_x = \pm i\Psi(x, y, z = z_0, t = 0),$$

то сгенерируется поле гауссова пучка с круговой поляризацией. Если выбрать $z_0 < 0$, то сгенерируется сходящийся гауссов пучок (в расчетном объеме можно задать перетяжку).

Кроме гауссова пучка в диссертации используется аналитическое решение уравнений Максвелла «собственные моды оптоволокна». Аналитическое решение и алгоритм вычисления компонент поля на основании аналитического решения приведены в Приложении А.

Для моделирования пучка с круговой поляризацией в формуле (1.37) используются компоненты H_x , H_y поля «собственной моды HE_{11} ». Для моделирования пучка с линейной поляризацией используется сумма двух мод с противоположной закруткой: $HE_{11} + HE_{-11}$. Таким образом моделируется пучок, выходящий из оптоволокна.

Сгенерированное поле собственной моды HE_{11} внешне похоже на сгенерированное поле гауссова пучка с круговой поляризацией, а поле суммы двух мод похоже на поле гауссова пучка с линейной поляризацией. Несмотря на схожесть, генерировать собственные моды в расчетах предпочтительнее, чем гауссовы пучки, так как гауссов пучок является приближенным решением. В частности, гауссов пучок с круговой поляризацией, сгенерированный описанным выше способом, не имеет осевой симметрии, хотя в формуле (1.39) отсутствует зависимость от аксиального угла. Эффект нарушения осевой симметрии незаметен при генерации пучка с линейной поляризацией, однако хорошо заметен при генерации пучка с круговой поляризацией. Нарушение симметрии обуславливается существованием ненулевых компонент поля, которыми пренебрегается при выводе формулы.

1.3.2. Метод полностью согласованного слоя для постановки неотражающих граничных условий

Многие задачи моделирования взаимодействия электромагнитных волн с веществом определены в «открытых» областях, где пространственная область не ограничена в одном или в нескольких направлениях. Однако в численных расчетах нет возможности задать бесконечную пространственную сетку.

Для имитации бесконечности на границе расчетной области используются различные методы. Около десяти из них описаны в [15].

В диссертации используется метод «полностью согласованного слоя» или Perfectly Matched Layer (PML). Метод состоит в том, чтобы окружить расчетную область $[(x_{min}, x_{max}), (y_{min}, y_{max}), (z_{min}, z_{max})]$ тонким слоем «псевдо-вещества» (слоем PML), поглощающего любое падающее излучение. Слой PML задается с помощью параметров κ , σ :

$$\begin{aligned} \kappa_x(x) &= \begin{cases} \kappa'_x(x) & x \leq x_{min}, x \geq x_{max} \\ 1, & x_{min} < x < x_{max} \end{cases}, & \sigma_x(x) &= \begin{cases} \sigma'_x(x) & x \leq x_{min}, x \geq x_{max} \\ 0, & x_{min} < x < x_{max} \end{cases}, \\ \kappa_y(y) &= \begin{cases} \kappa'_y(y) & y \leq y_{min}, y \geq y_{max} \\ 1, & y_{min} < y < y_{max} \end{cases}, & \sigma_y(y) &= \begin{cases} \sigma'_y(y) & y \leq y_{min}, y \geq y_{max} \\ 0, & y_{min} < y < y_{max} \end{cases}, \\ \kappa_z(z) &= \begin{cases} \kappa'_z(z) & z \leq z_{min}, z \geq z_{max} \\ 1, & z_{min} < z < z_{max} \end{cases}, & \sigma_z(z) &= \begin{cases} \sigma'_z(z) & z \leq z_{min}, z \geq z_{max} \\ 0, & z_{min} < z < z_{max} \end{cases}, \end{aligned}$$

По сути в слое PML решаются модифицированные уравнения Максвелла — при подходящих параметрах «поглощающего псевдо-вещества» модифицированные уравнения совпадают с уравнениями Максвелла для изотропной среды без токов. Например, уравнение PML

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \\ \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \\ \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \end{pmatrix} = \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \kappa_y & 0 & 0 \\ 0 & \kappa_z & 0 \\ 0 & 0 & \kappa_x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_x \\ D_y \\ D_z \end{pmatrix} + \frac{1}{\epsilon_0} \begin{pmatrix} \sigma_y & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_z & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_x \\ D_y \\ D_z \end{pmatrix},$$

совпадает в расчетном внутреннем объеме: $[(x_{min}, x_{max}), (y_{min}, y_{max}), (z_{min}, z_{max})]$ с уравнением Максвелла

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{H}.$$

Подробный вывод уравнений и итерационных формул для PML содержится в [15].

Стоит заметить, что несмотря на то, что PML должен поглощать все падающее излучение, в численной реализации он все-таки отражает малую часть излучения. Эта отраженная малая часть вносит погрешность в рассчитанное поле.

Погрешность накапливается за время расчета. К этой погрешности не чувствительны абсолютные значения компонент поля, однако чувствительно например пространственное распределение «фазы максимального поля» — такого момента безразмерного времени в течение периода гармонического колебания, в который величина вектора электрического поля максимальна.

Погрешность, вызванная отражением, уменьшается с толщиной слоя PML — в диссертации эта толщина задается равной половине длины волны в вакууме.

1.4. Параллельный расчетный код для решения уравнений

Максвелла

Алгоритм в виде расчетного кода состоит из трех блоков: блок инициализации, блок итераций, блок вывода данных.

В блоке инициализации задаются параметры сетки, параметры сред, параметры генерации излучения. Также задается количество итераций для итерационного блока. Кроме того резервируются 12 трехмерных массивов для компонент электромагнитного поля: $E_x, E_y, E_z, D_x, D_y, D_z, B_x, B_y, B_z, H_x, H_y, H_z$. Начальное значение всех элементов массивов компонент поля полагается равным нулю. Размеры массивов согласованы с расстановкой узлов, приведенной на рис. 1(б). Количество элементов в массивах следующее:

$$\text{для } E_x \text{ и } D_x : (N_x + 1) \times N_y \times N_z,$$

$$\text{для } E_y \text{ и } D_y : N_x \times (N_y + 1) \times N_z,$$

$$\text{для } E_z \text{ и } D_z : N_x \times N_y \times (N_z + 1),$$

$$\text{для } B_x \text{ и } H_x : N_x \times (N_y + 1) \times (N_z + 1),$$

$$\text{для } B_y \text{ и } H_y : (N_x + 1) \times N_y \times (N_z + 1),$$

$$\text{для } B_z \text{ и } H_z : (N_x + 1) \times (N_y + 1) \times N_z,$$

где N_x, N_y, N_z — количество ячеек по соответствующему направлению координатной оси.

В блоке итераций производится расчет полей либо по итерационным формулам (1.11-1.33) либо по формулам PML [15] — в зависимости от координат сеточного узла. Требуемые в формулах значения тензоров и компонент тока вычисляются в каждой итерации с помощью специально реализованных вспомогательных функций и подпрограмм — это замедляет расчет, однако экономит компьютерную память. В противном случае пришлось бы задавать еще 12 массивов: 3 массива — для компонент \mathbf{J} и 9 массивов — для компонент тензора $\hat{\epsilon}$. Без задания этих массивов в расчете требуется в два раза меньше памяти.

В блоке вывода данных, используя рассчитанные компоненты поля, производятся вычисления различных величин, таких как вектор Пойнтинга, момент импульса поля, плотность энергии, с дальнейшим выводом результатов в файлы. Результаты выводятся в файлы либо в виде двумерных сечений трехмерного объема, либо в трехмерном виде.

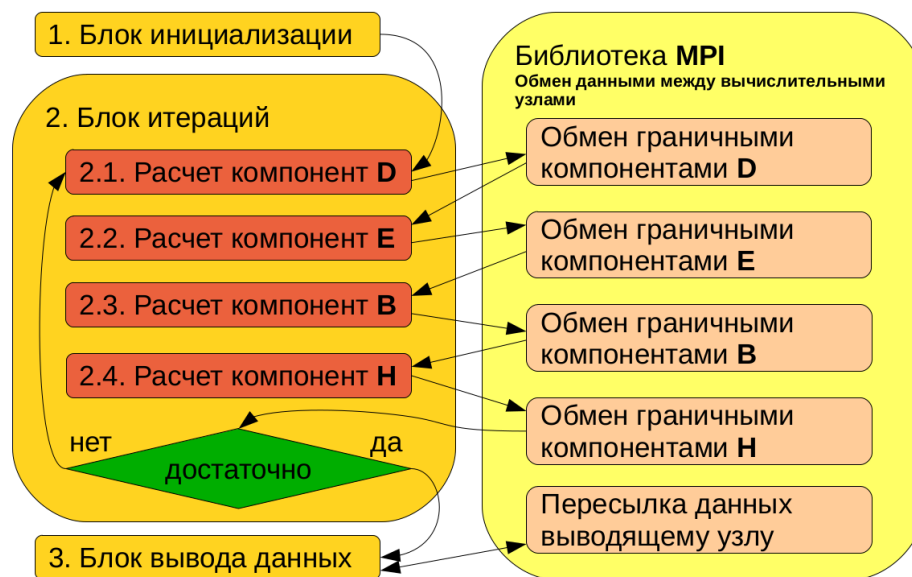


Рис. 2: Схема параллельного алгоритма

Для расчета может потребоваться большое количество оперативной памяти. Поэтому имеет смысл использовать вычислительные мощности кластеров, где вычисления производятся на независимых вычислительных узлах-процессорах.

Для постановки вычислительной задачи кластеру, расчетный объем разбивается на блоки в виде прямоугольных параллелепипедов. Вычислительный узел исполняет алгоритм в одном блоке. Для объединения в единый расчет независи-

мых расчетов, во-первых, блоки полагаются утопленными друг в друга на глубину одной пространственной сеточной ячейки, а во-вторых, для обмена граничными данными между вычислительными узлами на кластере используется библиотека MPI. Схема параллельного алгоритма представлена на рис. 2.

Для обращения к вычислительному узлу, функционал библиотеки MPI снабжает каждый вычислительный узел-процессор порядковым номером I_{proc} , начиная с нуля. Это позволяет поставить в соответствие номеру узла номер блока. Однако для определения блоков-соседей при обмене граничными данными, удобнее пользоваться целочисленными «координатами» блоков: X_{proc} , Y_{proc} , Z_{proc} . Если разбить расчетный объем на блоки так, что по O_x окажется NP_x блоков, по O_y окажется NP_y блоков, а по O_z окажется NP_z блоков, и пронумеровать их по схеме «сначала вдоль O_x , потом вдоль O_y , потом вдоль O_z », то формулы для вычисления координат:

$$X_{proc} = MOD(I_{proc}, NP_x) + 1,$$

$$Y_{proc} = INT(MOD(I_{proc}, NP_x * NP_y) / NP_x) + 1,$$

$$Z_{proc} = INT(I_{proc} / (NP_x * NP_y)) + 1,$$

где $MOD(a, b)$ — остаток от целочисленного деления a на b , $INT(a)$ — целая часть числа a . Обратная формула для вычисления номера блока (и номера вычислительного узла, необходимого в качестве адреса для функций библиотеки MPI):

$$I_{proc} = (Z_{proc} - 1) * NP_x * NP_y + (Y_{proc} - 1) * NP_x + X_{proc} - 1.$$

Если расчетную нагрузку распределять между несколькими расчетными узлами, то можно ожидать уменьшение времени расчета. В идеале должна получаться линейная зависимость величины, обратной времени расчета, от количества расчетных узлов. Однако реальная зависимость оказывается меньше идеальной, в частности, за счет времени, необходимого для обмена данными между расчетными узлами (с увеличением расчетных узлов растет внутренняя граница между узлами и, соответственно, количество граничных данных). Для характеристики ускорения расчета численной схемы за счет параллелизации принято использовать «эффективность параллелизации».

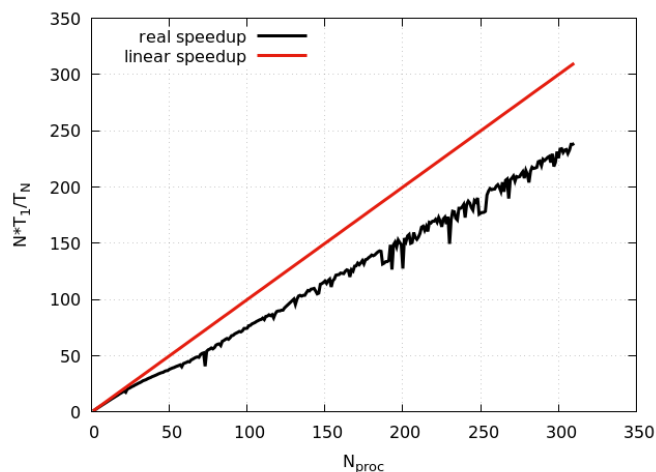


Рис. 3: График эффективности параллелизации

Эффективность параллелизации в данной работе определялась путем измерения времени T_N , затраченного на расчет, в зависимости от количества узлов N_{proc} . Каждый расчетный узел содержал пространственную сетку из 10^6 сеточных ячеек, расчет составлял 10 шагов. Количество расчетных узлов менялось от 1 до 310. Геометрически расчетные узлы располагались последовательно вдоль оси Z , что позволяло запускать расчет с любым количеством расчетных узлов, преодолевая тем самым известное ограничение, появляющееся в случае попытки расположить узлы геометрически компактно по всем трем пространственным направлениям (в этом случае возможно не любое количество узлов, а только кратное количеству узлов по всем трем пространственным направлениям). В данной работе реализация обмена данными между узлами такова, что если сосед отсутствует (расчетный узел находится на краю расчетной области), то данные все равно пересылаются, но на противоположный край расчетной области — реализованы периодические граничные условия. Такая реализация, даже при наращивании расчетных узлов всего лишь в одном направлении, позволяет говорить об эффективности параллелизации, так как, при отсутствии соседей, данные все равно передаются, и таким образом время на эту передачу затрачивается точно так же, как если бы сосед был.

График эффективности параллелизации (рис. 3) приведен так, как это принято в литературе: по оси абсцисс откладывается количество расчетных узлов, по

оси ординат откладывается отношение времени расчета на одном узле T_1 к времени расчета на N узлах T_N , с тем лишь отличием, что в силу увеличения расчетной области (расчетная нагрузка на один расчетный узел не меняется), для соблюдения традиционной формы графика, отношение умножено на количество расчетных узлов N : $N \cdot T_1/T_N$. Можно видеть, что относительно идеального линейного ускорения расчета реальное ускорение составляет около 80%. Таким образом эффективность параллелизации близка к 80%, что характерно для явных численных схем. Скачки на графике видимо обусловлены физической архитектурой расчетного кластера.

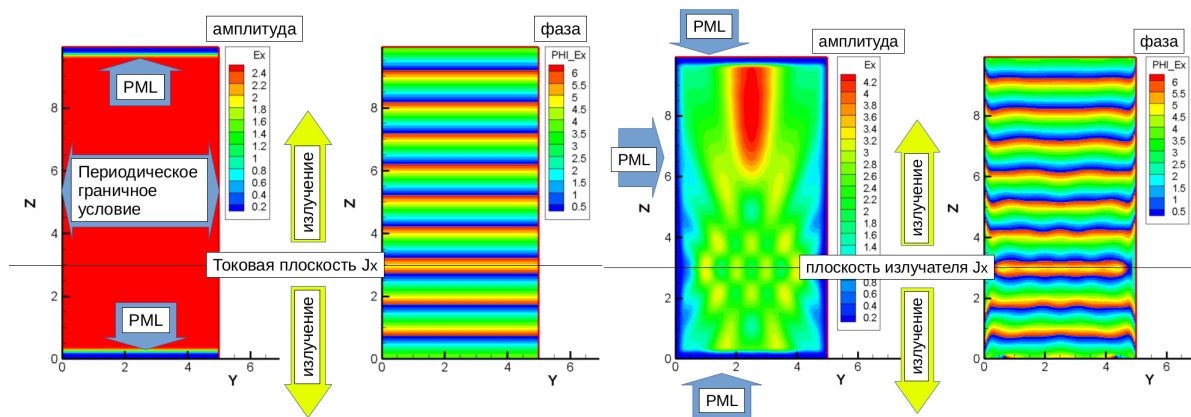
1.5. Верификация и валидация расчетного кода

Для генерации излучения плоской волны методом «генерации токовой поверхностью» ток во всех узлах генерирующей площадки задавался одинаковым: одной амплитуды и в одной фазе. При этом для имитации бесконечности излучающей токовой плоскости на боковой поверхности расчетной области задавались периодические граничные условия (рис. 4(а)). Под периодическим граничным условием здесь понимается трансляция численно вычисленных значений вблизи одной боковой поверхности на противоположную боковую поверхность. Если граничное условие на боковой поверхности задать в виде PML, то генерируется излучение, эквивалентное излучению плоской волны, прошедшей через квадратное отверстие в экране (рис. 4(б)).

Качество генерации излучения Гауссова пучка проверялось сравнением численного расчета (рис. 5) с аналитическим выражением (1.39).

Качество генерации излучения собственной моды оптоволокна проверялось сравнением с аналитическим выражением (рис. 6). При этом в расчете задавались параметры сердцевин и оболочек оптоволокна, соответствующие аналитическому выражению (см. Приложение А).

Проверка второго порядка сходимости (рис. 7) проведена на четырех расчетах моды HE_{11} , отличающиеся густотой пространственной сетки: $\Delta h = 1/10\lambda, 1/15\lambda, 1/20\lambda, 1/30\lambda$.



(а) На боковой поверхности периодическое граничное условие.

(б) На боковой поверхности слой PML.

Рис. 4: Продольное сечение расчетной области. Излучение сгенерировано токовой площадкой.

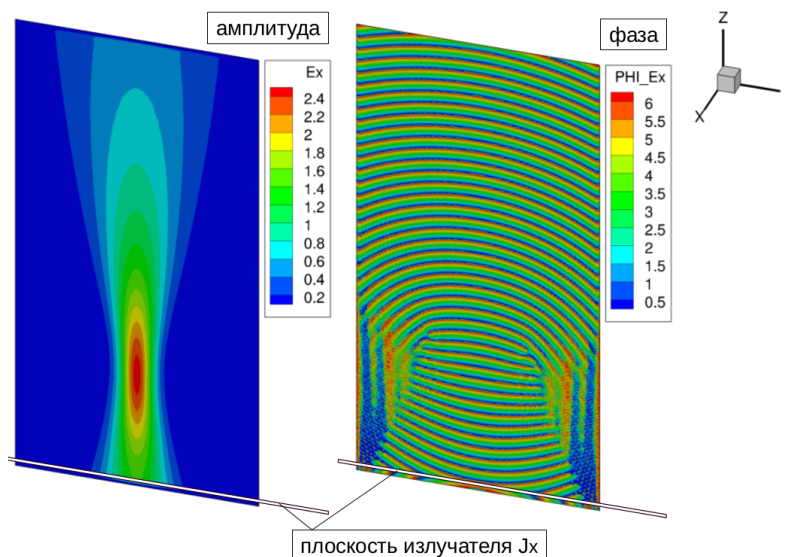


Рис. 5: Продольный центральный разрез расчетной области. Гауссов пучок в вакууме сгенерирован токовой площадкой.

Код верифицировался на задачах, имеющих как аналитическое решение, так и качественное описание. Для изотропных сред примеры верификационных задач приведены на рис. 8. Для анизотропных сред использовалось аналитическое решение задачи прохождения плоской волны через слой холестерического жидкого кристалла (см. Приложение Б).

Верификация реализации PLM осуществлялась путем сравнения двух расчетов. В первом случае в двумерном пространстве, в центре квадрата включал-

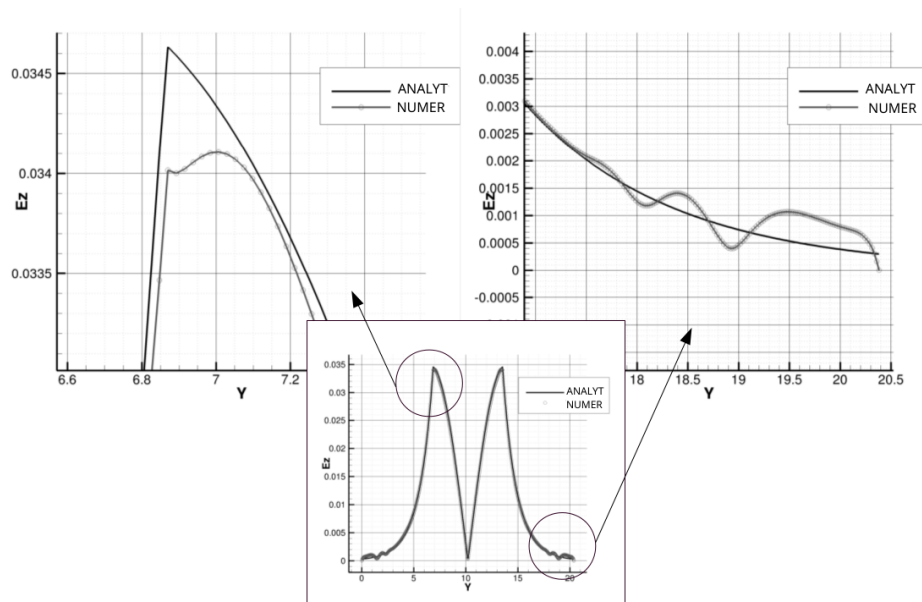


Рис. 6: Амплитуда компоненты E_z поля HE_{11} , отложенная вдоль O_y на некотором расстоянии от плоскости генерации.

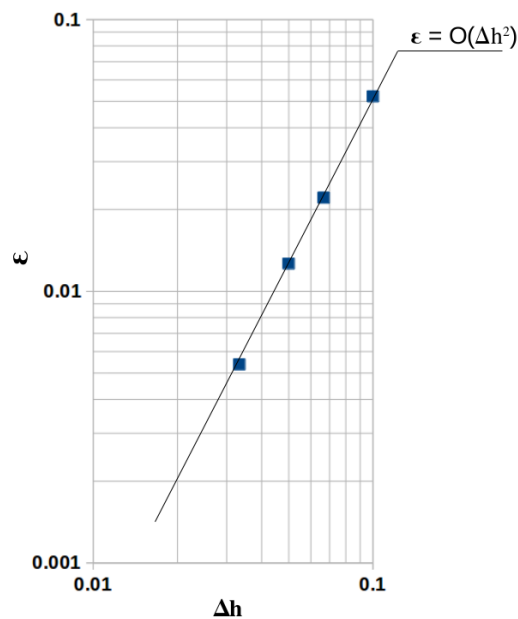


Рис. 7: Квадратичный характер зависимости относительной ошибки ϵ от пространственного шага сетки Δh .

ся сторонний гармонический ток, генерирующий цилиндрическую волну, и расчет заканчивался до того, как волна достигнет границ квадрата. Во втором случае источник излучения и время расчета сохранялись, но задавался уменьшенный квадрат со слоем PML на границе. На рис. 9 представлен результат сравнения. Можно видеть, что в общей расчетной области значение компоненты E_z совпадает, при

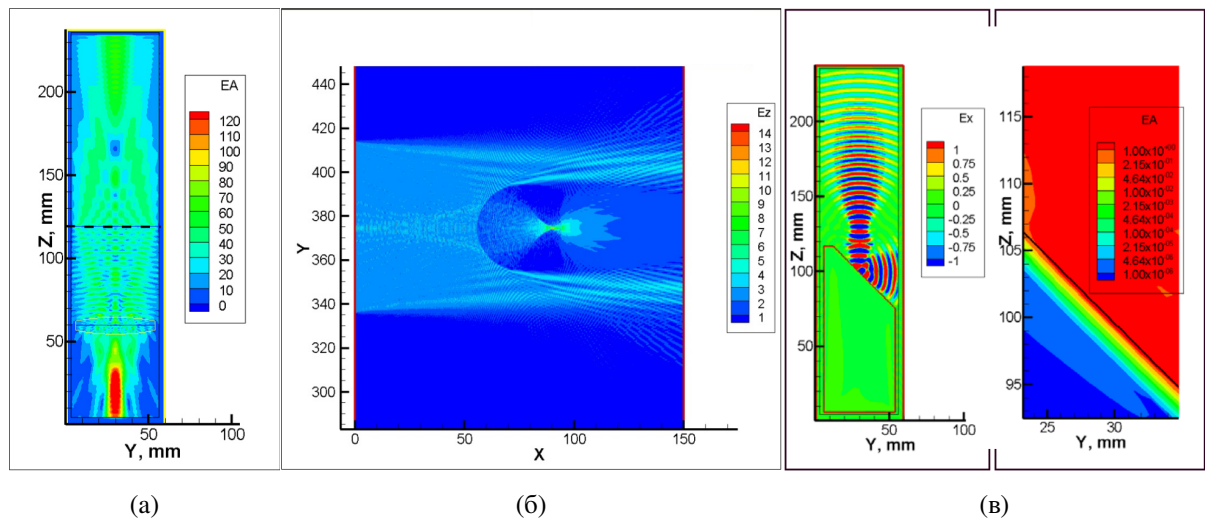


Рис. 8: Примеры верификационных задач для изотропных сред. (а) — 3D-расчет, излучатель в центре, излучение вверх свободно (дифракция), излучение вниз через линзу (фокусировка). (б) — 2D-расчет, плоский излучатель слева, в центре диэлектрический цилиндр (фокусировка). (в) — 3D-расчет, излучатель в центре, излучение вверх свободно (гауссов пучок), излучение вниз встречает металлическое препятствие (угол отражения, скин-слой).

этом в слое PML излучение уменьшается до нуля. Таким образом, слой PML не отражает излучение в расчетную область, поглощая падающее излучение. Первый расчет проводился на сетке 400 на 400 точек, второй расчет проводился на сетке 200 на 200 точек, при этом оба — с разрешением 30 точек на длину волны.

1.6. Приближение геометрической оптики, метод трассировки лучей

Метод FDTD имеет ограничение, связанное с необходимостью разрешать длину волны в пространстве не менее десяти сеточных узлов на длину волны λ . В трехмерном случае это означает, что кубический объем с ребром 10λ , требует пространственную сетку с количеством узлов не менее 1 млн. шт. В каждом узле необходимо сохранять данные о шести компонентах поля.

Сохранение этих значений требует такого размера машинной памяти, которая в настоящее время близка к пределу вычислительного узла. Использо-

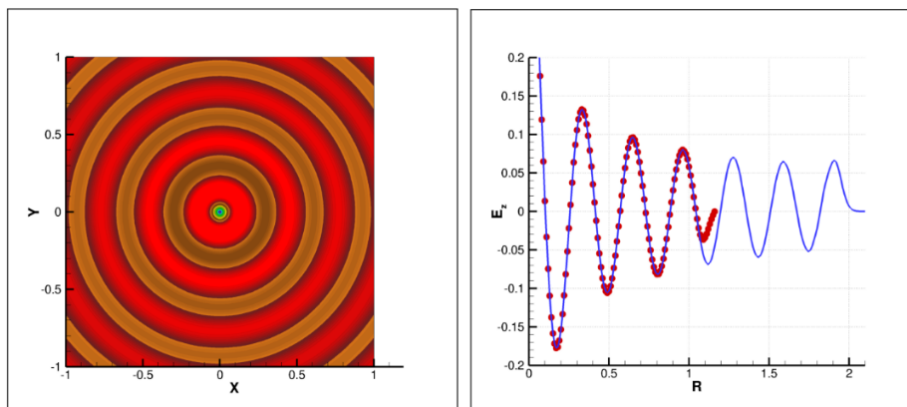


Рис. 9: Слева — мгновенное значение компоненты E_z поля, излучаемого элементом тока. Справа — зависимость E_z от расстояния от излучающего элемента: синей линией — без PML , красными точками — область ограничена слоем PML .

ние параллельных вычислений на кластерах расширяет возможность моделирования незначительно. Обычно на кластерах можно использовать для расчета около 100 — 200 вычислительных узлов, что увеличивает максимальный возможный расчетный объем трехмерной задачи в $\sqrt[3]{200} \approx 6$ раз.

Таким образом, метод FDTD, в свете современного состояния доступных вычислительных мощностей, фактически неприменим для моделирования задач с характерным размером, превышающим десятки длин волн. По этой причине для моделирования задач с объемами, имеющими характерный размер в сотни и тысячи длин волн, используются другие методы.

Один из таких методов основывается на приближении геометрической оптики с применением трассировки лучей.

В методе трассировки лучей используются положения классической электродинамики [22, 12] (рис. 10). Полагается что пучок лазерного излучения можно представить как пучок лучей, луч в изотропной однородной среде без поглощения распространяется прямолинейно, вдоль луча сохраняется переносимая энергия и поляризация. Кроме того на границе сред луч отражается и преломляется по законам Снеллиуса:

$$\begin{aligned} \varphi &= \varphi_1, \\ n_1 \sin \varphi_1 &= n_2 \sin \varphi_2, \end{aligned} \tag{1.40}$$

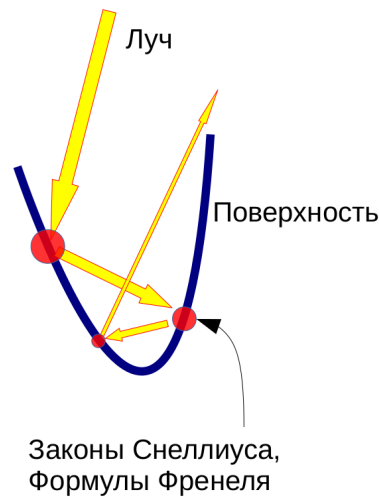


Рис. 10: Иллюстрация к методу трассировки лучей

где $n = \sqrt{\epsilon\mu} \in \mathbb{C}$ — комплексный, в общем случае, показатель преломления (из-за поглощения среды), φ — угол падения, отражения или преломления в зависимости от индекса (см. рис. 11). Далее полагается, что электромагнитное поле локаль-

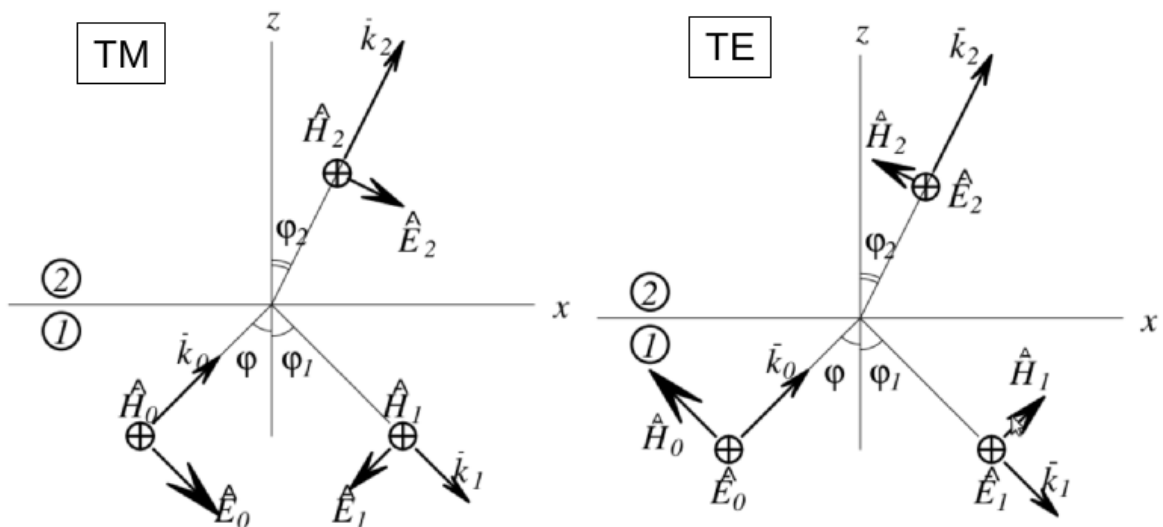


Рис. 11: Векторы электромагнитного поля в ТМ и ТЕ волнах.

но представляет собой плоскую волну и, таким образом, на границе раздела сред справедливы формулы Френеля для комплексных амплитуд ТМ и ТЕ волн (см.

рис. 11):

$$\begin{aligned}\hat{E}_{1, TM} &= \hat{E}_{0, TM} \frac{\sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}} \cos \varphi - \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} \cos \varphi_2}{\sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}} \cos \varphi + \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} \cos \varphi_2} \Rightarrow \hat{E}_{0, TM} \frac{n_2 \cos \varphi - n_1 \cos \varphi_2}{n_2 \cos \varphi + n_1 \cos \varphi_2}, \\ \hat{E}_{1, TE} &= \hat{E}_{0, TE} \frac{\sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} \cos \varphi - \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}} \cos \varphi_2}{\sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} \cos \varphi + \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}} \cos \varphi_2} \Rightarrow \hat{E}_{0, TE} \frac{n_1 \cos \varphi - n_2 \cos \varphi_2}{n_1 \cos \varphi + n_2 \cos \varphi_2},\end{aligned}\quad (1.41)$$

где « \Rightarrow » при условии $\mu \equiv 1$.

Метод состоит в следующем. Задается совокупность лучей — начальные точки и направляющие векторы \mathbf{k} . Каждому лучу присваивается начальная энергия, W , и электрический комплекснозначный вектор — для учета поляризации.

Задается исследуемая металлическая поверхность. Поверхность дополняется «внешней» сферой большого радиуса так, чтобы сфера содержала весь исследуемый участок металлической поверхности.

Далее для каждого луча производится трассировка: ищется точка пересечения с поверхностью, в точке вычисляется новый вектор \mathbf{k}' — и так до тех пор, пока луч не пересечет «внешнюю» сферу. В каждой точке отражения на исследуемой металлической поверхности при трассировке вычисляется поглощенная энергия.

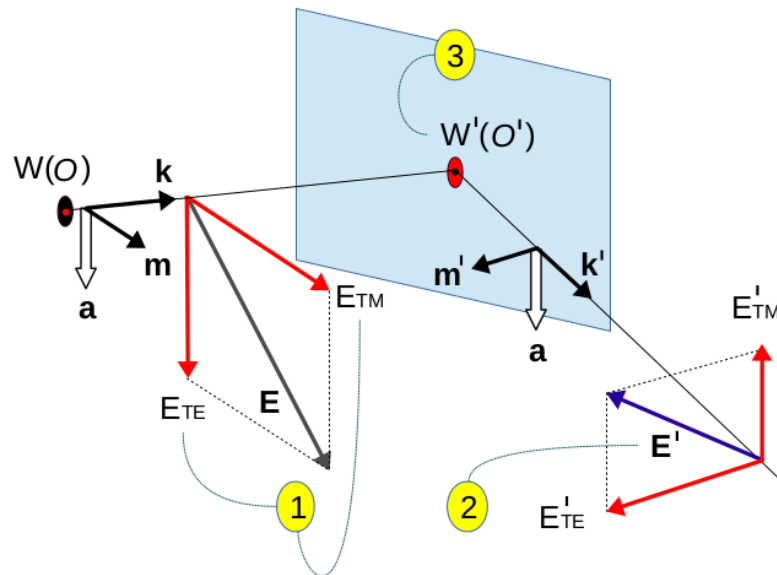


Рис. 12: Геометрические построения для вычислений в точке отражения. Порядок вычисления: «1» — разложение E , «2» — вычисление E' , «3» — вычисление отраженной от поверхности энергии W' в точке O' .

Энергия в точке вычисляется следующим образом. В точке пересечения поверхности с лучом строится два базиса — для падающего на поверхность луча $(\mathbf{k}, \mathbf{m}, \mathbf{a})$ и для отраженного луча $(\mathbf{k}', \mathbf{m}', \mathbf{a})$ (см. рис. 12). Электрический вектор падающего на поверхность луча $\hat{\mathbf{E}}$ раскладывается по базису:

$$E_{0,TM} = (\hat{\mathbf{E}}, \mathbf{m}), \quad E_{0,TE} = (\hat{\mathbf{E}}, \mathbf{a}).$$

Угол преломления φ_2 вычисляется из закона Снеллиуса (1.40). К вычисленным величинам применяются формулы Френеля (1.41), и далее вычисляется суммарный электрический вектор отраженного от поверхности луча:

$$\hat{\mathbf{E}}' = \mathbf{m}'E_{1,TM} + \mathbf{a}E_{1,TE}.$$

Далее вычисляется коэффициент отражения ρ :

$$\rho = \frac{(\hat{\mathbf{E}}', \hat{\mathbf{E}}'^*)}{(\hat{\mathbf{E}}, \hat{\mathbf{E}}^*)},$$

где $*$ обозначено комплексное сопряжение. Энергия отраженного луча:

$$W' = \rho W,$$

где W — энергия падающего луча. Энергия W_A , поглощенная в точке O' :

$$W_A = (1 - \rho)W.$$

Для построения поверхностной плотности поглощенной энергии на исследуемой поверхности эта поверхность разбивается на элементы поверхности ds_i . Поглощенная в точке энергия луча присваивается соответствующему элементу ds_i . Энергия элемента ds_i накапливается с каждым попаданием луча в элемент ds_i . После того, как произведена трассировка всех лучей, в элементе ds_i накоплена энергия W_i . Тогда поверхностная плотность поглощенной энергии:

$$dw_i = W_i/ds_i.$$

Особенностью реализации метода является проведение полной трассировки луча.

Другой особенностью реализации является способ задания исследуемой поверхности — поверхность составляется из небольшого числа кусков аналитических функций: плоскость, сфера, эллипсоид, параболоид, цилиндр, кривые Безье и т.д. Точка пересечения находится либо аналитически, либо, в случае сложной поверхности, численно — в силу параметрического задания луча задача сводится к вычислению корней уравнения с одной переменной (параметр луча), среди которых выбирается корень, соответствующий точке, ближайшей к точке испускания луча. Выбранный способ по сравнению со способом триангуляции поверхности — уменьшает нагрузку на оперативную память при хранении данных о поверхности, удешевляет нахождение точки пересечения с лучом и делает более точным вычисление нормали к поверхности в точке пересечения.

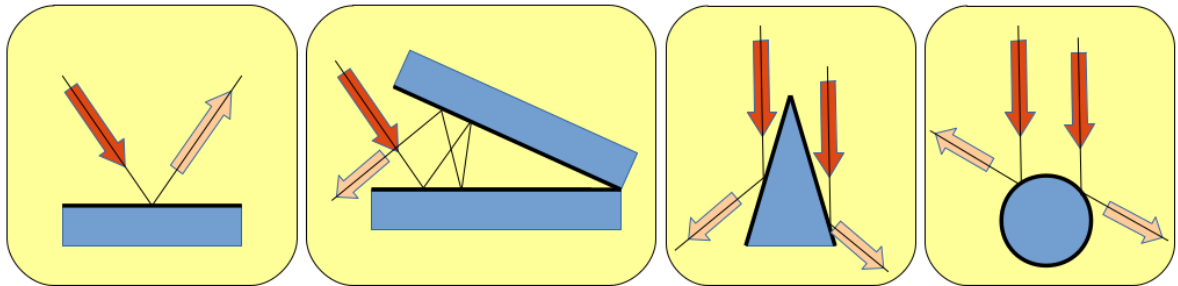


Рис. 13: Иллюстрации к вариантам задач для верификации кода. Слева направо: «отражение от плоскости», «отражение внутри острого угла между двумя плоскостями», «рассеяние на конусе», «рассеяние на сфере».

Реализация алгоритма в виде расчетного кода верифицировалась на задачах «отражение от плоскости», «отражение внутри острого угла между двумя плоскостями», «рассеяние на конусе», «рассеяние на сфере» при разных начальных параметрах пучка лучей: \mathbf{k}_i , $\hat{\mathbf{E}}_i$, W_i и точки испускания O_i (рис. 13). При этом обращалось внимание на угол отражения и на коэффициент поглощения, которые в подобных случаях можно вычислить аналитически.

Глава 2

Численное моделирование процессов поглощения и преобразования лазерного излучения в задачах лазерной обработки материалов

2.1. Моделирование взаимодействия излучения с веществом при лазерной резке

В настоящее время технологии лазерной обработки материалов приобрели большое распространение в связи с возможностью управления параметрами лазерного излучения в широком диапазоне. Однако, наряду с удобством, применение лазера вызывает некоторые сложности.



Рис. 14: Металлический лист, разрезанный лазером.

В частности, имеет место задача повышения качества реза металла большой толщины. Такая задача не стоит при разрезании листов с толщиной менее 5 мм. На рис. 14 можно видеть, что нижняя часть кромки реза имеет шероховатость. Эта шероховатость нежелательна, так как такая поверхность требует дальнейшей технологической обработки. Под увеличением качества реза понимается уменьшение шероховатости посредством выбора параметров процесса лазерной резки.

Принципиальная схема процесса лазерной резки представлена на рис. 15. Режущая головка движется над листом металла, лазерный луч расплавляет металл,

газовая струя удаляет расплав. Таким образом, управляемых параметров процесса имеется множество.

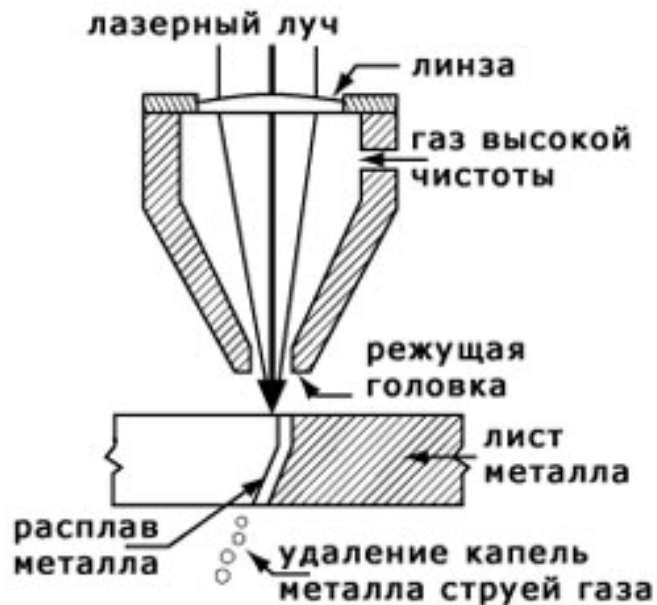


Рис. 15: Принципиальная схема лазерной резки металла.

С целью повышения качества реза широко проводится компьютерное моделирование процесса резки. Эта задача не перестает быть актуальной, так как появляются новые лазеры и новые материалы, а так же, в связи с развитием вычислительной техники, становится возможным моделировать задачи более точно и учитывать большее количество факторов процесса резки.

Первой задачей моделирования процесса резки является вычисление распределения по поверхности металла плотности теплового потока, вызванного поглощением лазерного излучения поверхностью металла.

В диссертации задача вычисления распределения плотности теплового потока рассматривается в рамках исследования особенностей резки металла двумя типами лазеров — CO_2 -лазера и волоконного лазера, отличающихся длиной волны. Показатель преломления металла зависит от длины волны, и эта зависимость сказывается на поглощении лазерной энергии.

Распределение поглощенной мощности лазерного излучения по поверхности металла можно вычислить в приближении геометрической оптики методом трассировки лучей, описанным в предыдущей главе.

В расчетах задавались три поверхности канала реза (рис. 16). Одинаковыми параметрами для всех поверхностей являлись — толщина металлической пластины: $t = 5$ мм., ширина канала реза: $b = 0,5$ мм., расстояние по оси Ox между верхней и нижней точками передней кромки: $dx = b/2$. Полагалось, что в горизонтальном сечении передняя граница кромки представляет собой полуокружность, а боковые стенки представляют собой вертикальные плоскости. Поверхности раз-

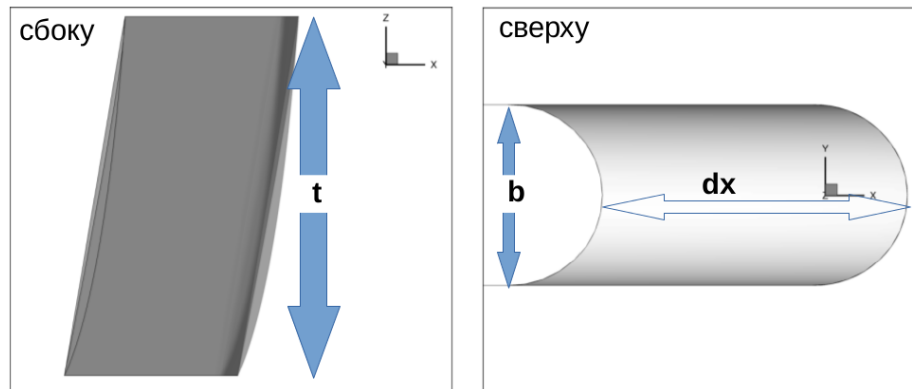


Рис. 16: Задаваемая геометрия поверхностей канала реза

личались углами наклона передней вертикальной огибающей в верхней и нижней точках. Углы откладывались от горизонтальной линии. Поверхность «1»: углы в верхней и нижней точках равны — огибающая представляет собой линию. Поверхность «2»: верхний угол $\alpha_1 = 89^\circ$, нижний угол $\alpha_2 = 79^\circ$. Поверхность «3»: верхний угол $\alpha_1 = 86^\circ$, нижний угол $\alpha_2 = 66^\circ$. Углы взяты из фотографий реальных шлифов каналов реза, предоставленных лабораторией Лазерных Технологий ИТПМ.

Источник излучения моделировался набором лучей, исходящих из задаваемого фокуса — центра сферы. Каждому лучу присваивалось значение переносимой энергии в согласии с гауссовым распределением плотности энергии $\sim \exp(-2r^2/\sigma^2)$, где r — поперечный радиус пучка на верхней горизонтальной поверхности металла. При этом $\sigma = b/2$. В силу прямой пропорциональной зависимости поглощенной энергии от энергии падающего пучка, полная энергия падающего пучка была принята за единицу. Таким образом, поглощенная энергия в расчетах выражена в доле к полной падающей энергии.

Кроме того от расчета к расчету менялась поляризация лучей: линейная

вдоль канала реза, линейная поперек канала реза, линейная под углом 45° к направлению канала реза, круговая правая и круговая левая.

Поглощательная способность металла в расчетах задавалась с помощью комплексного показателя преломления n , который для длины волны волоконного лазера $n_1 = 5,46 + i \cdot 3,96$, а для длины волны CO_2 -лазера $n_2 = 15,5 + i \cdot 15,1$.

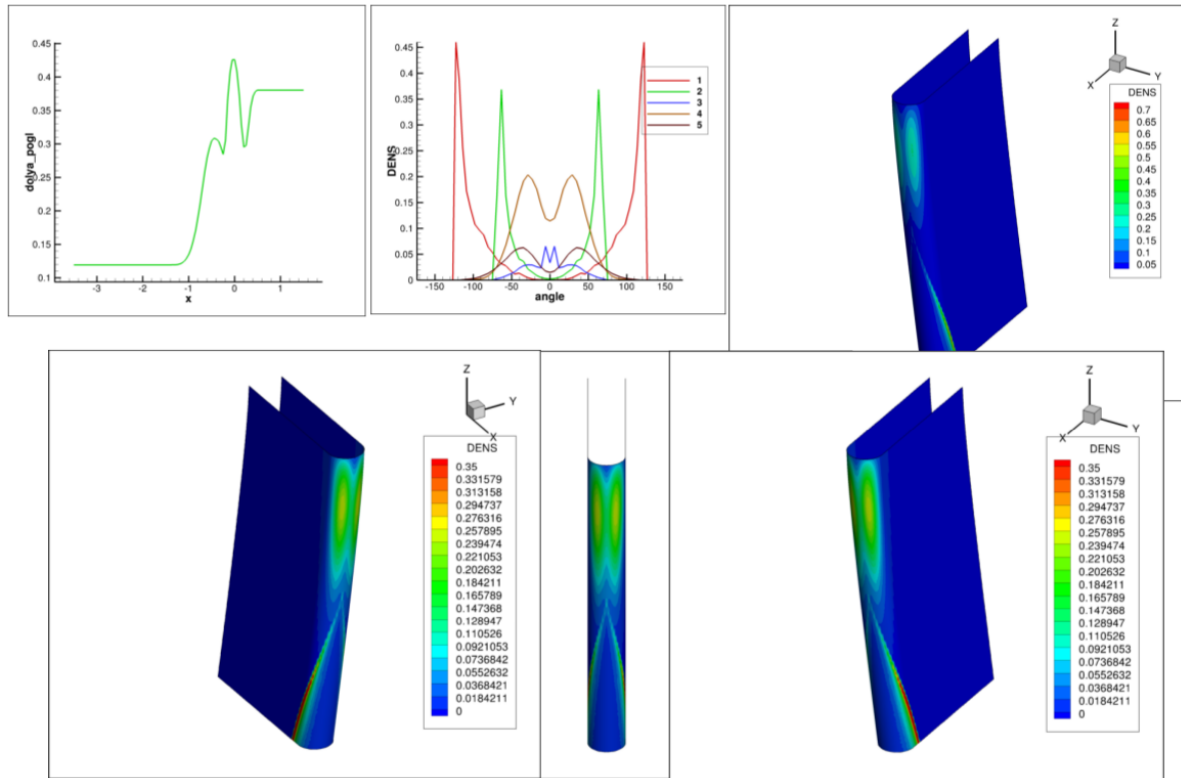


Рис. 17: Пример расчета. Поверхность «2», поляризация «линейная поперек канала реза», лазер волоконный. Представлены: график зависимости доли поглощенной энергии от x -координаты центра падающего пучка, далее, при фиксированной координате x , детальные распределения: графики плотности поглощенной энергии на разных высотах, внешний вид распределения по поверхности реза поглощенной плотности энергии с разных ракурсов и с разным цветовым диапазоном обозначения плотности

Полученные результаты расчетов представляют собой как детальные картины распределения поглощенной энергии по поверхности канала реза, так и интегральные значения доли поглощенной энергии, например в зависимости от «прицеливания» — x -координаты центра падающего пучка. На рис.17 представлен пример получаемых данных.

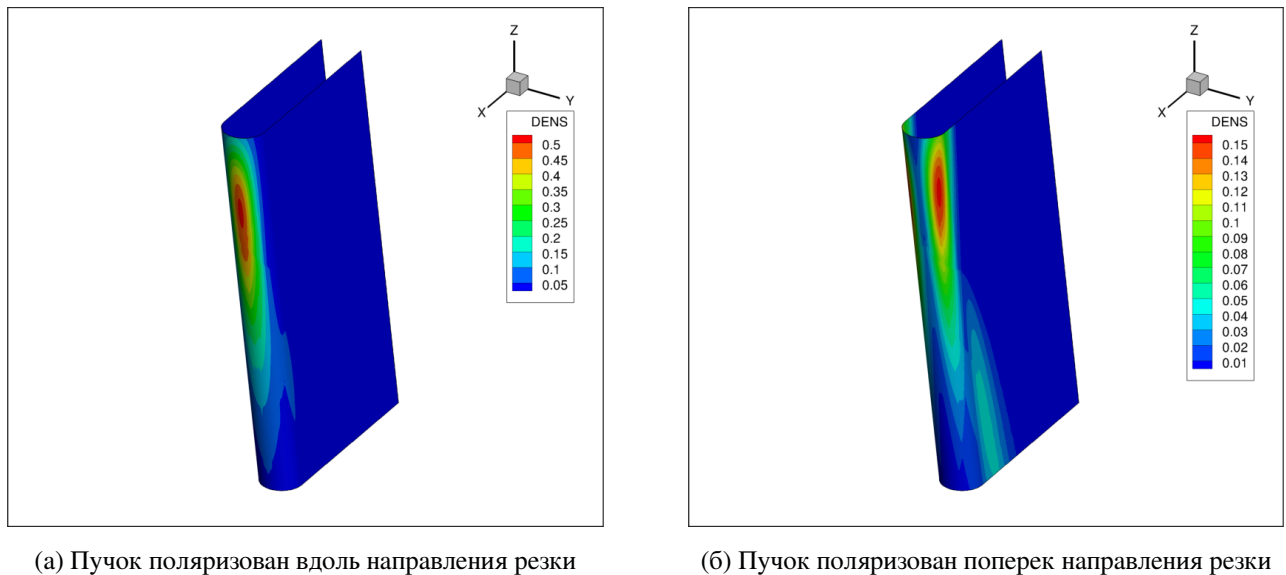


Рис. 18: Внешний вид распределений поглощенной плотности энергии по поверхности реза

Сравнительные расчеты при разных поляризациях исходного пучка (рис.18) показали, что передняя кромка поверхности реза поглощает значительно меньше энергии, если пучок поляризован поперек направления резки. Эти расчеты послужили основанием для проведения экспериментов, где было показано, что при линейной поляризации минимальная величина шероховатости достигается при ориентации вектора электрического поля волны перпендикулярно направлению резки, а также сделан вывод о существенном влиянии распределения поглощенной мощности на качество поверхности и о том, что для получения меньшей шероховатости желательно прогревать излучением боковые стенки канала реза. Результаты совместной с экспериментаторами работы опубликованы [23].

В литературе встречается описание расчетов, основанных на методе лучей, в которых учитывается только первая встреча луча с поверхностью (напр. [24]). В некоторых статьях полагается, что после первого отражения луч «исчезает», что последующие отражения не вносят существенного изменения в картину поглощенной энергии. Однако, вообще говоря, если в расчете не проводится трассировка, то следует это дополнительно обосновывать. В общем случае учитывать нужно все отражения. Например, в рамках данной работы проведен ряд расчетов, из которых видно, что учёт всех отражений существенно влияет на картину

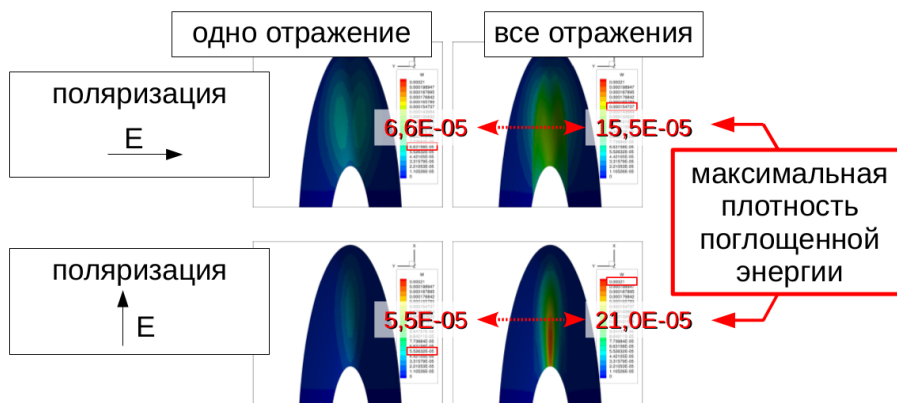


Рис. 19: Пример численных расчетов. Вид сверху на модельную переднюю кромку канала лазерной резки листа металла. Отличия в распределении плотности поглощенной энергии пучка лучей в зависимости от поляризации и учета количества отражений.

распределения поглощенной энергии. Из рис. 19 можно видеть, что в некоторых случаях учет всех отражений способен увеличить расчетную величину поглощенной энергии в несколько раз (в два раза, в четыре раза) по сравнению с учетом только первого отражения.

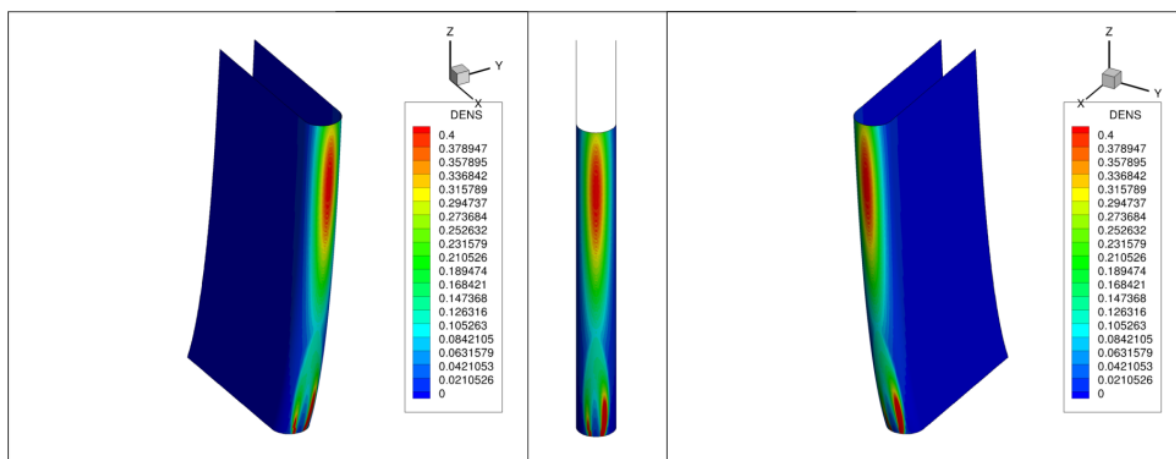


Рис. 20: Численный расчет плотности потока энергии лазерного излучения круговой поляризации поглощенной в канале реза.

Можно отметить, что известным эффектом является несохранение симметрии распределения поглощенной мощности по поверхности в случае круговой поляризации пучка. На рис. 20 этот эффект продемонстрирован. В представленной задаче пучок падает сверху строго симметрично относительно центральной плос-

кости канала реза. Однако в связи с заданной круговой поляризацией пучка, картина распределения несимметрична относительно центральной плоскости канала, что хорошо видно в нижней части передней кромки — правый и левый «лепестки» высокой плотности поглощения имеют разные размеры. Этот эффект является одной из причин, по которой при резке металла стараются не использовать круговую поляризацию.

2.2. Моделирование взаимодействия излучения с веществом при лазерном сверлении

Перед тем, как начать резать металл лазером, бывает необходимо просверлить начальное отверстие. Такое сверление тоже делается лазером.

Задача моделирования лазерного сверления также начинается с вычисления плотности потока энергии лазерного излучения по поверхности металла.

На начальном этапе сверления, когда геометрические размеры задачи не превосходят нескольких десятков длин волн лазерного излучения, вычисление распределения плотности потока можно производить не только в геометрическом приближении, но и методом FDTD. Это дает возможность сравнить два метода.

Схематично задача представлена на рис. 21. Гауссов пучок попадает в заданный канал в модельном веществе (металле). Особенностью задачи является то, что размер перетяжки гауссова пучка сравним с длиной волны.

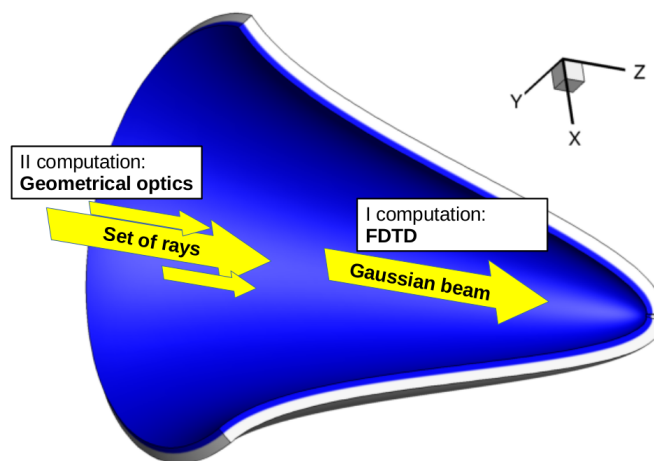


Рис. 21: Схема моделирования сверления металла лазерным лучом

Для метода FDTD задача состоит в том, чтобы рассчитать электромагнитное поле лазерного излучения в заданном канале. Расчет проводился на сетке $16 \cdot 10^6$ ячеек. Понадобилось 16 процессоров и 10 Гб. оперативной памяти.

После вычисления распределения поля, поглощенная мощность вычислялась исходя из формулы, выражающей закон сохранения электромагнитной энергии в дифференциальной форме в классической электродинамике:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{S} = -(\mathbf{E}, \mathbf{j}),$$

где w — объемная плотность энергии электромагнитного поля, \mathbf{S} — вектор Пойнтинга, (\mathbf{E}, \mathbf{j}) — скалярное произведение вектора электрического поля на вектор плотности электрического тока, определяющая мощность, развиваемую электрическим полем над зарядами, отнесенную к единице объема.

После усреднения по периоду колебаний электромагнитного поля, формула приобретает вид:

$$\langle \operatorname{div} \mathbf{S} \rangle = -\langle (\mathbf{E}, \mathbf{j}) \rangle,$$

так как в гармоническом процессе $\langle \partial w / \partial t \rangle = 0$.

Таким образом, сначала вычислялся безразмерный вектор Пойнтинга, усредненный по периоду колебаний электромагнитного поля:

$$\langle \mathbf{S}(t) \rangle = \langle \operatorname{Re}[\mathbf{E}] \times \operatorname{Re}[\mathbf{H}] \rangle = \frac{1}{4} (\mathbf{e} \times \mathbf{h}^* + \mathbf{e}^* \times \mathbf{h}), \quad (2.1)$$

где звездочкой обозначено комплексное сопряжение, а маленькими буквами \mathbf{e} , \mathbf{h} — комплексные амплитуды векторов электромагнитного поля в некоторой точке пространства.

Далее вычислялась дивергенция вектора Пойнтинга:

$$\operatorname{div} \langle \mathbf{S} \rangle = \frac{\partial}{\partial x} S_x + \frac{\partial}{\partial y} S_y + \frac{\partial}{\partial z} S_z, \quad (2.2)$$

где частные производные были заменены формулой центральной разности.

Дивергенция вектора Пойнтинга приравнивалась к объемной плотности мощности поглощенной энергии с обратным знаком, согласно закону сохранения энергии, приведенному выше. Полученная величина численно интегрировалась по x, y :

$$p(z) = \iint -\operatorname{div} \langle \mathbf{S} \rangle dx dy.$$

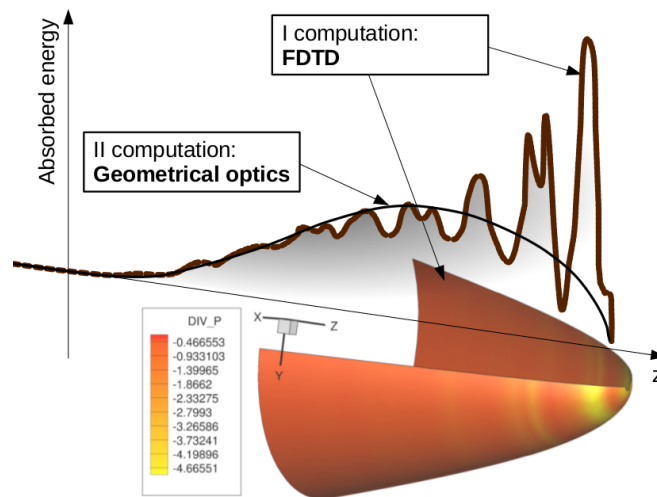


Рис. 22: Результат моделирования сверления металла лазерным лучом, донная область

В методе трассировки лучей в приближении геометрической оптики, зависимость поглощенной мощности p от координаты z вычислялась численным интегрированием по кольцевому элементу поверхности канала, расположенному горизонтально на высоте z .

Сравнение $p(z)$ полученное двумя методами приведено на рис. 22. Можно видеть существенное качественное отличие решения уравнений Максвелла и приближения геометрической оптики там, где размеры канала сопоставимы с длиной волны. Можно видеть, что расчет методом геометрической оптики не позволяет учесть влияние интерференции, в отличие от метода FDTD. Кроме того, FDTD-расчет указывает на возможную причину ухудшения качества сверления — из-за неравномерного прогрева возможно неравномерное же плавление и кольцевое гофрирование дна канала сверления, с последующим развитием несимметричности канала и возбуждения вихрей газа, обдувающего область плавления.

2.3. Моделирование взаимодействия излучения с веществом при селективном лазерном спекании

Лазеры используются в изготовлении трехмерных объектов. В частности технология селективного лазерного спекания в некоторых случаях может успешно заменить фрезеровку (рис. 23). Особенности технологии селективного лазерно-



Рис. 23: Стоматологическое изделие, выполненное селективным лазерным спеканием

го спекания являются: возможность использования различных материалов в одном изделии (например, одни части изделия могут состоять из металла, а другие части из керамики), возможность изготовления трехмерных объектов настолько пространственно сложных, что их невозможно изготовить фрезеровкой.

Схематично технология 3D-печати методом селективного лазерного спекания представлена на рис. 24. Порошок из шаровых частиц материала наносится



Рис. 24: Схема технологии 3D-печати методом селективного лазерного спекания

тонким слоем. Слой порошка в нужных областях расплавляется лазером. После застывания расплава сверху наносится новый слой порошка. Таким образом, слой за слоем, происходит печать 3D-объекта.

В промышленности уже применяются порошки из металлов (технология DMLS), пластиков, керамик и стекол. Требования к качеству изделий (и к механическим характеристикам спекшегося материала и к поверхности изделия) постоянно растут, так как изделия находят всё новое применение. Делаются попытки комбинировать материалы в рамках одного изделия. Качество готового изделия определяется плотностью спеченного материала, прочностью, а также шероховатостью поверхности с требуемой последующей механической обработкой. Для управления качеством готового изделия в процессе изготовления нужно знать детали процесса плавления и затвердевания материала. В этой связи имеет смысл проводить численное моделирование.

Для численного решения уравнения теплопроводности необходимо вычислить в слое порошка шаровых частиц объемное выделение тепла, вызванное поглощением лазерного излучения. Объемный источник тепла связан с распределением электромагнитного поля лазерного излучения в слое порошка.

Распределение электромагнитного поля лазерного излучения в слое порошка шаровых частиц можно вычислить методом FDTD. В диссертации ставилась следующая задача (рис. 25). Гауссов пучок с круговой поляризацией взаимодействует с плотноупакованными шарообразными частицами одинакового радиуса и одинакового состава с заданными параметрами (диэлектрическая проницаемость и проводимость). Радиус шариков равняется длине волны гауссова пучка. Требуется найти пространственное распределение мощности поглощенной энергии электромагнитного поля, которая с точностью до знака совпадает с дивергенцией вектора Пойнтинга, усредненной по периоду колебания электромагнитного поля. Расчет проводился на сетке $4 \cdot 10^6$ узлов. Понадобилось 4 процессора и 3 Гб. оперативной памяти. Результат расчета (рис. 26, 27) показывают, что в данном случае сочетаются два эффекта — фокусировка излучения за счет сферической формы поверхности частицы и скин-слой.

На основании проведенных расчетов можно объяснить экспериментально наблюдаемый факт того, что керамические частицы плавятся изнутри, в то время как металлические плавятся с краев.

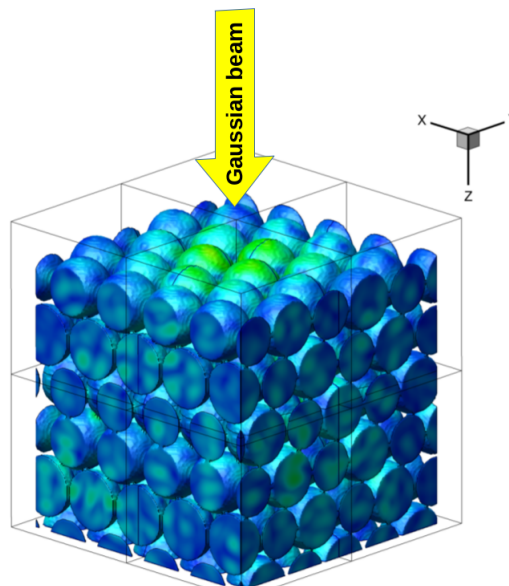


Рис. 25: *Схема задачи спекания*

Можно предположить, что если размер зерна сравним с толщиной скинслоя, то частица будет плавиться по всему объему равномерно, и зернистая среда будет поглощать электромагнитное излучение на толщине, превосходящей линейный размер зерна.

Кроме того, имеющуюся реализацию алгоритма численного расчета уравнений Максвелла можно использовать для расчета объемных источников тепла в численном решении уравнения теплопроводности в задачах о динамике воздействия лазерного излучения на зернистую среду.

В ряде работ имеются попытки оценить значение электромагнитных полей и их пространственное распределение в зернистой пористой среде [25]-[28]. Однако, в случае дальнейшего решения уравнения теплопроводности — когда необходимо учитывать распределение энергии не только интегральное, но и локальное внутри частиц — не представляется осмысленным использование аналитического приема усреднения параметров среды.

Приближение геометрической оптики в данном случае оказывается неприменимым, так как характерные размеры неоднородностей среды могут быть сравнимы с длиной волны.

Кроме того, если граница раздела между воздухом и материалом довольно развита, как в слое порошка, то для моделирования поглощения лазерного из-

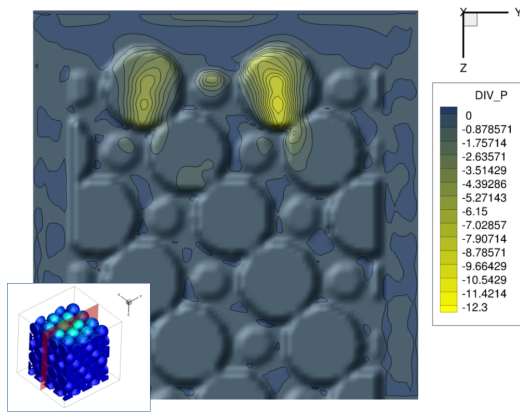


Рис. 26: *Центральный срез, «Керамика»*

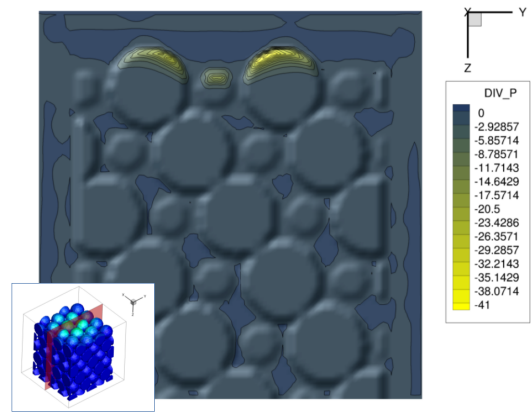


Рис. 27: *Центральный срез, «Металл»*

лучения непросто использовать геометрическую оптику или метод переизлучения вторичных волн. Задать сложную поверхность — отдельная трудоемкая задача. Преимуществом FDTD-схемы является то, что поверхности не задаются: нет нужды триангулировать поверхность и решать задачу трассировки луча, который, распространяясь, разделяется (дробится, множится) в каждой точке встречи с границей. В FDTD-схеме нужно указать лишь пространственное распределение диэлектрической проницаемости, магнитной проницаемости и проводимости.

Глава 3

Численное моделирование взаимодействия света с нематическими жидкокристаллическими средами

3.1. Жидкие кристаллы и их оптические свойства

Одним из наиболее интересных и интенсивно изучаемых в настоящее время объектов физики конденсированного состояния являются среды, объединяемые общим названием «мягкая материя» [29]. Под этим термином понимают материалы, физические свойства которых могут существенно меняться при относительно слабых внешних воздействиях. Хорошо известным примером таких материалов являются жидкие кристаллы (ЖК), уникальные оптические свойства которых находят широкое применение в технике.

Жидкими кристаллами принято называть жидкие среды, имеющие внутреннее упорядоченное расположение молекул, наподобие кристаллической решетки. Упорядоченная структура вызывает анизотропию — в разных направлениях могут быть различными теплопроводность, скорость звука, диэлектрическая проницаемость и так далее. В настоящее время известно несколько тысяч жидкостей, обладающих анизотропными свойствами.

Структура молекулярного порядка в жидких кристаллах способна значительно меняться при крайне незначительном воздействии — механическом, температурном, электрическом, магнитном, химическом (взаимодействие с примесями). Структура чувствительна к материалу и форме контактной поверхности. В этой связи выглядит заманчивой возможность фиксировать сверхмалые воздействия с помощью наблюдаемого изменения структуры, а также возможность управлять структурой, а следовательно и свойствами среды, с помощью малых воздействий, как это делается, например, в жидкокристаллическом экране или в пленках, капсулированных полимером нематических жидких кристаллов [30]. Кроме того, вызывает интерес то, что реакция жидких кристаллов на воздействие нелинейна и специфична. Дополнительно следует отметить, что живой организм

состоит из молекул — таких как, например, липиды (из которых состоит мембрана клетки) или ДНК (структура чувствительна к примесям) — которые способны выстраиваться упорядоченно, т.е. образовывать жидкие кристаллы.

Наличие кристаллических свойств у жидкого вещества можно определить по способности частично поляризовать свет: потери интенсивности линейнополяризованных электромагнитных волн, пройденных через образец ЖК, различны для волн, отличающихся поляризацией вдоль оптической оси ЖК и поперек нее. Для наблюдения оптической оси образец жидкости, зажатый стеклянными пластинками, дополнительно обкладывается взаимно перпендикулярными поляризаторами и помещается на предметный столик микроскопа, либо образец не обкладывается поляризаторами, а используются модели микроскопов, в которых скрещенные поляризаторы уже встроены. При отсутствии у образца жидкости оптической оси (изотропная жидкость), свет от подсвечивающей лампы под предметным столиком микроскопа не может пройти через скрещенные поляризаторы и в окуляре микроскопа наблюдается темнота. При наличии у образца оптической оси, в окуляре микроскопа наблюдается свето-теневое изображение (рис. 28), зависящее от пространственного распределения оптической оси кристалла в образце. Распределения оптической оси в свою очередь зависит от наличия примесей и посторонних твердых частиц в образце, от состояния контактной поверхности обжимающих стекол; и способно меняться — со временем, а также под воздействием внешних причин, таких как акустические волны, поле механического давления, изменение толщины слоя образца, поле температуры, электрические или магнитные стационарные поля, переменное электромагнитное поле, лазерные пучки.

Жидкие кристаллы принято разделять на два типа по способу проявления анизотропных свойств: на темотропные и лиотропные. Термотропные жидкие кристаллы проявляют анизотропные свойства в некотором диапазоне температур, а лиотропные — в диапазоне концентраций раствора одного вещества в другом.

Молекулы жидкого кристалла имеют либо вытянутую, либо сплюснутую, дисковую форму (вещества-«дискотики»), однако одна лишь форма молекул не гарантирует появления анизотропии. Остается открытым вопрос о том, какими

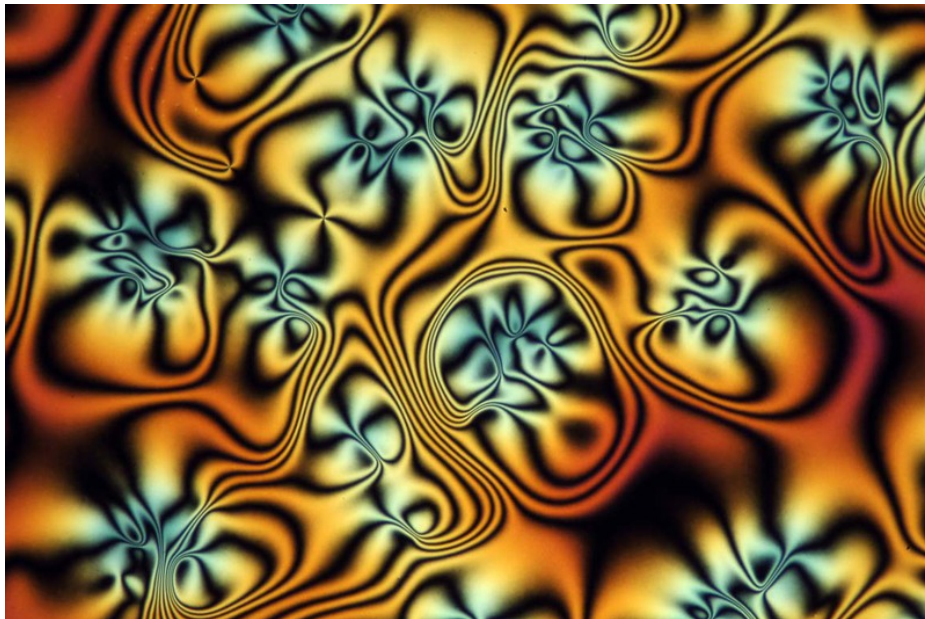


Рис. 28: Фото изображения в микроскопе. Слой жидкого кристалла находится между двумя стеклами. Микроскоп оборудован взаимно перпендикулярными поляризаторами и подсветкой.

дополнительными свойствами должны обладать молекулы, составляющие анизотропную жидкость. Сейчас отсутствует теория создания жидких кристаллов. Однако есть различные наблюдения, повышающие вероятность синтеза вещества с анизотропными свойствами. Например, есть данные, что наличие бензольного кольца в молекуле повышает вероятность того, что вещество, состоящее из таких молекул, будет обладать анизотропными свойствами.

В термотропном жидком кристалле в зависимости от значения температуры молекулы могут организовывать различные структуры. Такие структуры называются жидкокристаллическими фазами. Основными фазами являются: нематическая, смектическая, холестерическая (рис. 29). Набор фаз и характер смены фаз при изменении температуры определяются веществом жидкого кристалла.

Нематическая фаза характеризуется одним выделенным направлением. Жидкость находящаяся в нематической фазе принято называть «нематический жидкий кристалл» (НЖК). В рамках модели «Эриксона-Лесли» выделенное направление описывается единичным вектором \mathbf{n} , который называют «вектор-директор».

Пространственное распределение вектора \mathbf{n} участвует в формуле тензора ди-



Рис. 29: Основные жидкокристаллические фазы.

электрической проницаемости (1.3).

3.2. Дисклинации в НЖК

В среде НЖК из всевозможных распределений вектора \mathbf{n} выделяют дисклинации — области, в которых вектор-директор не определен. Дисклинация может состоять из одной точки, из линии, из поверхности. Дисклинации, состоящие из линий, называют линейными.

Распределение вектора \mathbf{n} должно удовлетворять условию минимума свободной энергии НЖК. Вблизи линейных дисклинаций такие распределения описываются формулой [31]:

$$\varphi = s \cdot \theta + \varphi_0. \quad (3.1)$$

Обозначения следующие (рис. 30). Вектор \mathbf{n} лежит в плоскости Ω , перпендикулярной линейной дисклинации γ . Точкой O обозначена точка пересечения плоскости Ω с дисклинацией γ . В плоскости Ω из точки O произвольным образом выбирается начальный вектор \mathbf{r}_0 . Вектор \mathbf{r} проводится из точки O в точку начала вектора \mathbf{n} . Угол θ откладывается от \mathbf{r}_0 до \mathbf{r} . Угол φ откладывается от \mathbf{r}_0 до $\mathbf{n}(\mathbf{r})$. Согласно формуле (3.1), угол θ линейно связан с углом φ . Параметрами являются число s и φ_0 — угол между \mathbf{r}_0 и $\mathbf{n}(\mathbf{r}_0)$.

Величина φ_0 значительно влияет на вид распределения \mathbf{n} , и, вообще говоря, может меняться вдоль дисклинации от одной плоскости Ω к другой. Примеры

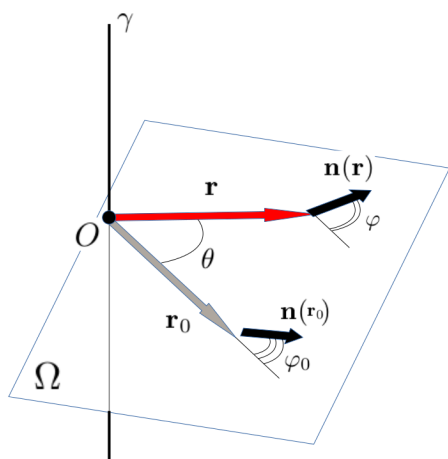


Рис. 30: Обозначения при описании распределения \mathbf{n} вблизи дисклинации γ

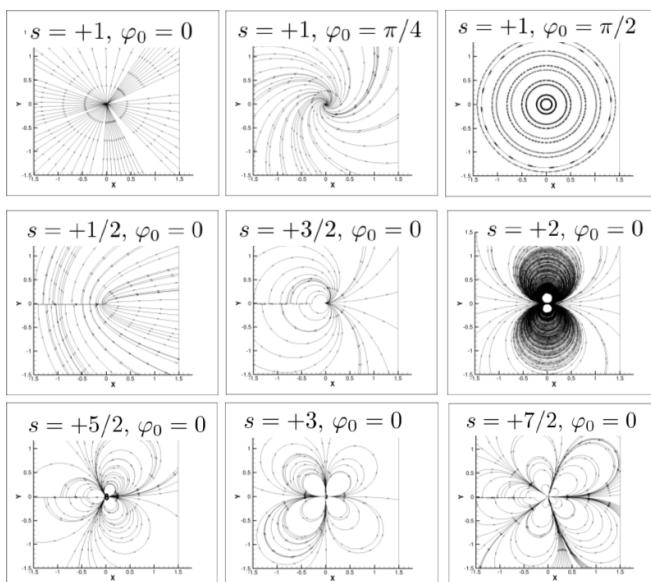


Рис. 31: Распределения \mathbf{n} в плоскости Ω вблизи точки O при различных значениях s и φ_0

распределений \mathbf{n} в плоскости Ω при некоторых значениях s и φ_0 представлены на рис. 31.

При этом, для конкретной дисклинации γ величина s , в силу топологических особенностей [32], остается постоянной в любой поперечной плоскости Ω . На этом основании величина s приписывается самой дисклинации и называется «силой дисклинации».

Сила дисклинации s — это количество оборотов вектора \mathbf{n} при прохождении замкнутого контура на плоскости Ω вокруг точки O . Из-за того, что молекулы НЖК неполярны (конец и начало вектора \mathbf{n} равнозначны, замена $\mathbf{n} \rightarrow -\mathbf{n}$ не меняет анизотропных свойств НЖК), s может принимать не только целые, но и полуцелые значения. Знак при s указывает на направление вращения \mathbf{n} при положительном обходе контура.

3.3. Взаимодействие лазерного излучения, распространяющегося по оптоволокну с нематическим ЖК

Наряду с другими замечательными свойствами, ЖК также характеризуются наличием аномально высоких нелинейных восприимчивостей. В частности, в ЖК была экспериментально продемонстрирована светоиндуцированная квадратичная оптическая нелинейность с показателем восприимчивости на несколько порядков выше, чем в твердых кристаллах [33]. Некоторые жидкие кристаллы способны переизлучать с увеличением частоты — невидимое инфракрасное излучение, пройдя через каплю жидкого кристалла, становится видимым (рис. 32).

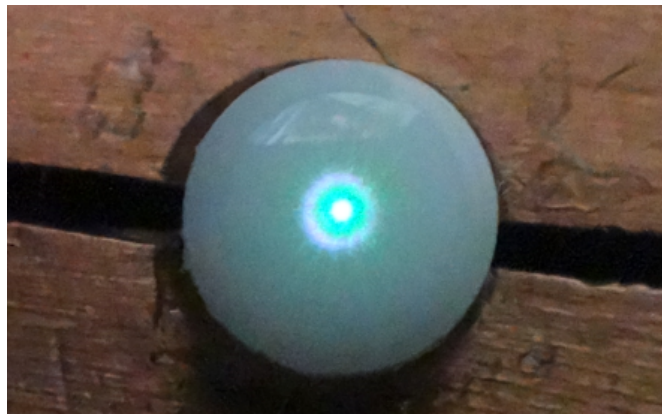


Рис. 32: Фото эксперимента. Инфракрасное излучение становится видимым после прохождения через каплю НЖК.

Использование жидких кристаллов в лазерных системах в качестве активного элемента описано в обзорной статье журнала «Nature Photonics» [34], где приведено множество примеров исследований на эту тему и перечислены перспективные области практического применения лазерных систем. Сверхвысокая эффективность позволяет использовать ЖК в микроскопических объемах для преобразования и управления когерентным излучением [35, 36].

Недавно коллективом исследователей из Института лазерной физики СО РАН, Новосибирского государственного университета и Института фотонных технологий (Астон, Великобритания) была предложена жидкокристаллическая система, размещаемая внутри оптического волокна с характерными размерами 2-8 мкм [37] (рис. 33). Кроме того, в Институте лазерной физики СО РАН ве-

дуться работы по реализации жидкокристаллических систем, размещаемых внутри оптического волокна, в качестве преобразователя электромагнитного излучения [38], которая от предыдущей системы отличается формой полости (рис. 34).

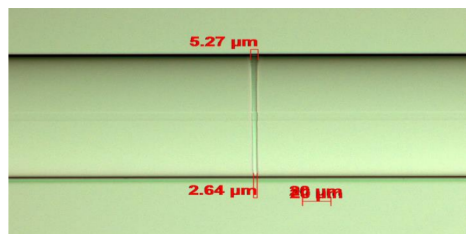


Рис. 33: Микрофотография цилиндрической полости в оптоволокне.

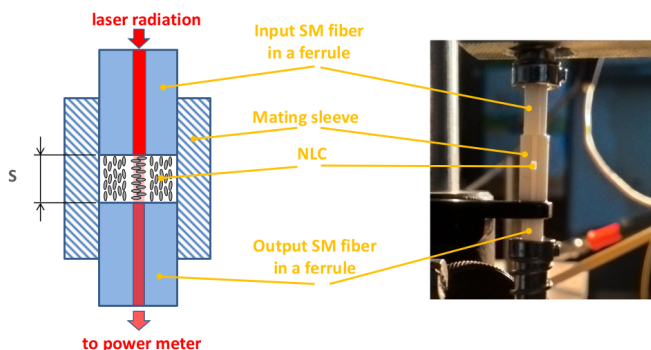


Рис. 34: Схема и фотография установки с полостью с плоскими стенками.

Это послужило причиной для попытки численно исследовать влияние формы полости, занятой ЖК, на распространение излучения. Задача сводится к расчету взаимодействия распространяющегося по оптоволокну лазерного излучения с заполняющим микроскопический объем некоторой заданной формы ЖК. Размеры объема сравнимы с длиной волны лазерного излучения. Следует также учесть, что кристаллическая структура ЖК в таких условиях сложная и, как правило, имеет особенности ориентационной упорядоченности — дисклинации и фазовые неоднородности. В результате моделирование распространения излучения в подобной системе требует решения уравнений Максвелла в смешанной изотропно-анизотропной среде с переменным направлением оптических осей.

Такие расчеты были выполнены для двух конкретных форм полости в оптоволокне (рис. 35, 36). Одна близка к той, что использовалась в эксперименте [37], другая — в эксперименте [38]. В обоих случаях через полость распространяется линейнополяризованный Гауссов пучок и полость заполнена нематическим ЖК с клиновой дисклинацией силы «+1». В цилиндрической полости (рис. 35) дисклинация вызвана нормальным ориентированием твердой стенкой. В полости с параллельными стенками (рис. 36) дисклинация вызвана тепловым потоком. Для расче-

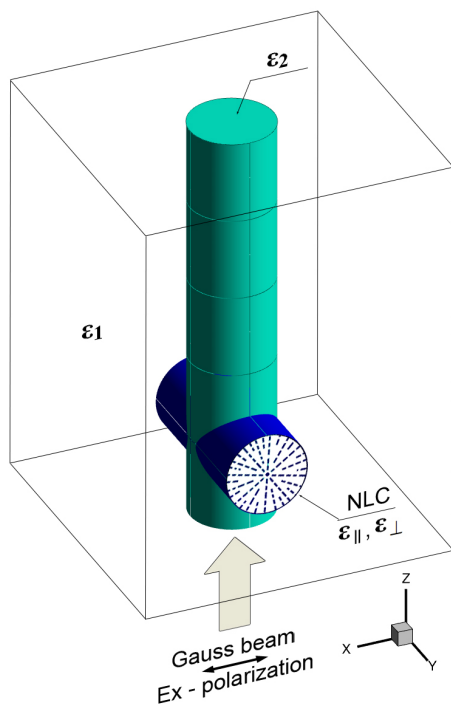


Рис. 35: Схема задачи с цилиндрической полостью

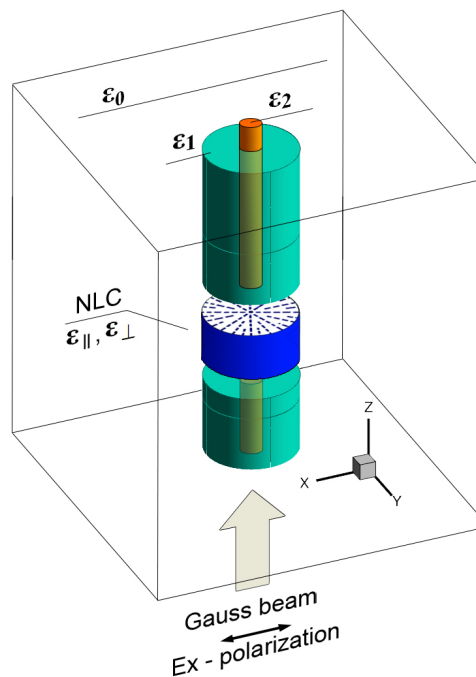


Рис. 36: Схема задачи с полостью с плоскими стенками

тов распределения электромагнитного поля использовался метод FDTD.

Расчет задачи с цилиндрической полостью проводился на сетке $27 \cdot 10^7$ узлов. Понадобилось 80 процессоров и 80 Гб. оперативной памяти.

На основании расчета цилиндрической полости (рис. 37) делается вывод о недостатках цилиндрической формы полости: вследствие возникающей фокусировки излучения за полостью, оптоволокно может перегореть при предельных нагрузках, имеющих место в импульсном режиме.

Кроме того, большая часть энергии излучения рассеивается за пределы оптоволокна, что также нежелательно (рис. 38).

На основании серии проведенных расчетов с полостью с плоскими стенками (рис. 39, 40), отличающихся шириной полости h , можно сделать следующие выводы. Во-первых, зазор ведет себя, как легко управляемый «резонатор с потерями». Во-вторых, энергия практически не рассеивается через боковую поверхность. Расчеты этой серии проводились на сетке $48.5 \cdot 10^7$ узлов. Понадобилось 144 процессора и 145 Гб. оперативной памяти.

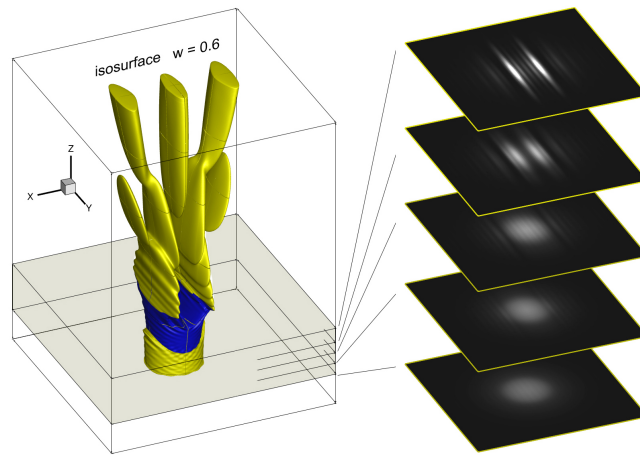


Рис. 37: Распределение объемной плотности энергии в задаче с цилиндрической полостью. Исоповерхность и сечения. Излучение распространяется снизу вверх. Область НЖК обозначена синим цветом.

Таким образом полость, заполненная ЖК, с плоскопараллельными стенками предпочтительнее цилиндрической полости. В случае использования цилиндрической полости, для уменьшения рассеяния видимо стоит подбирать НЖК так, чтобы нивелировать границу раздела — с максимально похожими диэлектрическими проницаемостями НЖК и оптоволокна.

Следует отметить, что в настоящей работе задача решается в постановке, когда свойства среды считаются заданными и не зависят от проходящего через среду электромагнитного излучения. Основным предметом исследования является преобразование лазерного пучка в высоко неоднородной и анизотропной среде заполняющей полости различной формы. Подобная постановка является достаточно стандартной, она была использована во многих работах по вычислительной фотонике, в частности посвященных электродинамике метаматериалов. Из многочисленных работ назовем лишь недавнее и близкое нашей статье по тематике исследование [39]. Ясно, что такой подход является оправданным, когда интенсивность излучения не очень высока, так что нелинейными эффектами можно пренебречь.



Рис. 38: Зависимость потока вектора Пойнтинга через поперечное сечение сердцевины оптоволокна от координаты вдоль оптоволокна в задаче с цилиндрической полостью.

3.4. Генерация оптических вихрей при прохождении света через НЖК

Получение, изучение и использование «оптических вихрей», то есть пучков света с винтовыми дислокациями волнового фронта является одним из наиболее быстро развивающихся направлений современной оптики [40]. Такие пучки, несущие в дополнение к обычному спиновому моменту фотонов также дополнительный орбитальный угловой момент, находят приложения в самых разнообразных областях науки и техники, от микроскопии и манипуляции микроскопическими объектами до повышения скорости передачи информации и обработки изображений астрономических объектов [41], [42].

Одним из эффективных методов генерации оптических вихрей может служить взаимодействие света с жидкокристаллическими средами. Преимуществом такого подхода является возможность динамического изменения параметров выходного пучка с помощью малых внешних электромагнитных, механических, тепловых и др. воздействий на жидкий кристалл [43].

В настоящее время в Институте лазерной физики СО РАН проводятся экспериментальные исследования свойств волоконно-оптической системы (рис. 34). Между двумя торцами оптоволокна, разведенными на расстояние $h = 10 \div 500$

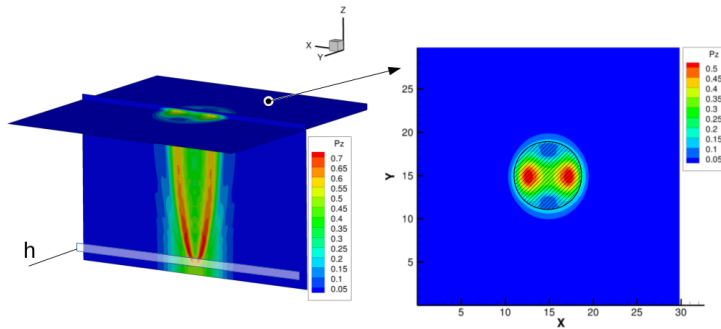


Рис. 39: z -компонента плотности потока энергии в задаче с полостью с плоскими стенками.

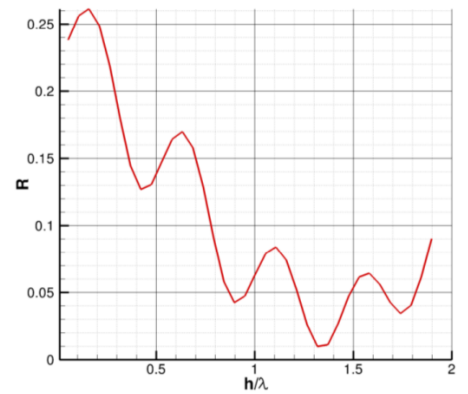


Рис. 40: Зависимость коэф. отражения от ширины полости в задаче с полостью с плоскими стенками.

мкм, помещен НЖК. По оптоволокну распространяется пучок излучения с длиной волны $\lambda = 1480$ нм от волоконного лазера с мощностью до 0.4 Вт. Измеряются характеристики излучения, прошедшего через слой НЖК.



Рис. 41: Аналитическая мода HE_{11} .

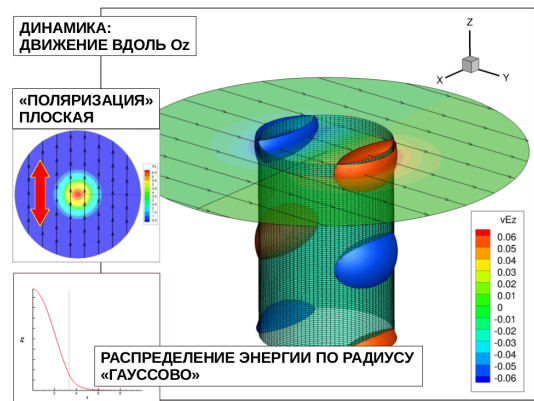


Рис. 42: Аналитическая сумма двух мод с противоположным вращением: $HE_{11} + HE_{-11}$.

В рамках исследования оптоволоконной системы с полостью, заполненной НЖК, была проведена серия численных расчетов. Целью расчетов являлось выяснение влияния силы дисклинации и ширины полости, заполненной НЖК, на мо-

мент импульса пройденного пучка. Ставилась следующая задача (рис. 43). В зазор между плоскопараллельными торцами оптоволоконна помещен НЖК. Предполагается, что НЖК образует линейную дисклинацию. Ось дисклинации совпадает с осью оптоволоконна. Параметры, постоянные во всех расчетах, сведены в таб. 1. По оптоволоконну распространяется собственная мода HE_{11} (рис. 41) или сумма двух мод (рис. 42) (аналитическое выражение собственных мод приведено в Приложении А). От расчета к расчету (рис. 44) меняется ширина зазора h и сила дисклинации s (ф-ла 3.1).

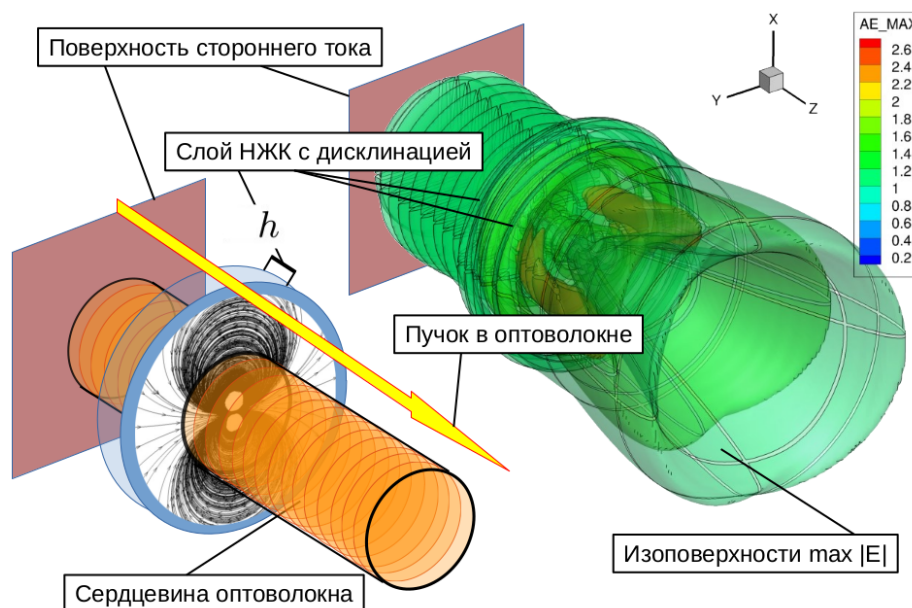


Рис. 43: Распространение излучения, сила дисклинации $s = 2$

Величина	Значение
Диэлектрическая проницаемость сердцевины оптоволоконна, ϵ_1	2.1556
Диэлектрическая проницаемость оболочки оптоволоконна, ϵ_2	2.1400
Радиус сердцевины оптоволоконна, a	3.33λ
Продольная диэлектрическая проницаемость НЖК, ϵ_{\parallel}	2.8224
Поперечная диэлектрическая проницаемость НЖК, ϵ_{\perp}	2.2801

Таблица 1: Постоянные параметры расчетов

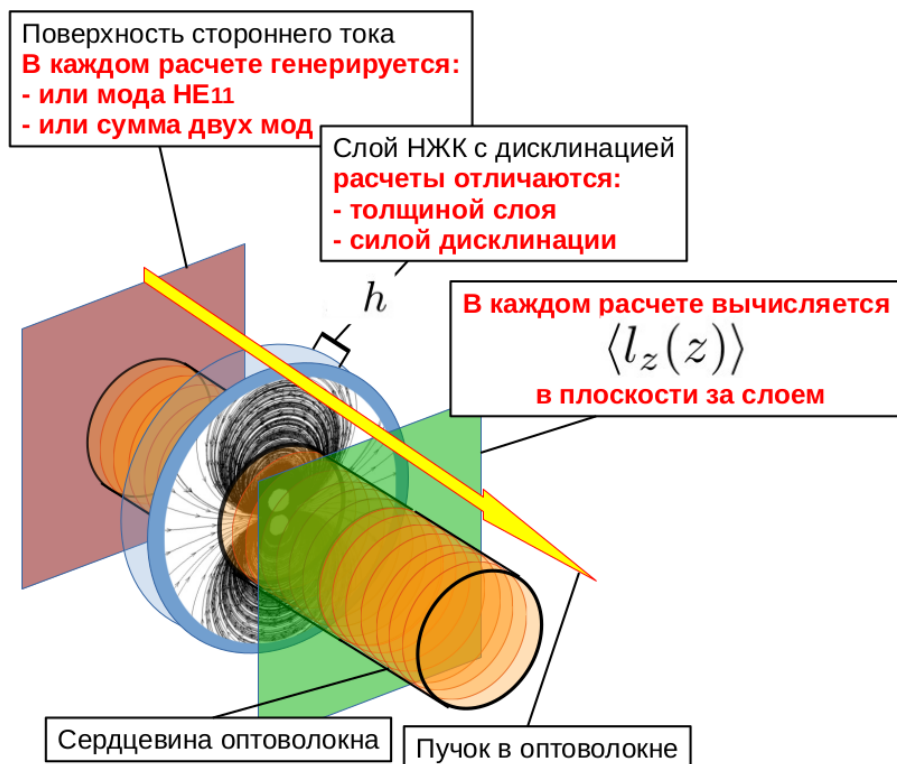


Рис. 44: Пояснение к параметрам, изменяемым от расчета к расчету

При анализе результатов использовались следующие величины. Безразмерный, усредненный за период вектор Пойнтинга:

$$\mathbf{P} = \langle \mathbf{E} \times \mathbf{H} \rangle.$$

Безразмерный момент импульса относительно оси пучка в точке z вычисляется по формуле:

$$L_z(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} [xP_y(x, y, z) - yP_x(x, y, z)] dx dy.$$

Безразмерный поток энергии:

$$W_z(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} P_z(x, y, z) dx dy.$$

Безразмерный, нормированный на поток энергии, момент импульса:

$$LP_z(z) = L_z(z)/W_z(z).$$

Момент импульса сохраняется в изотропном пространстве, и он не обязан сохраняться в анизотропном пространстве — это и показывает численный расчет.

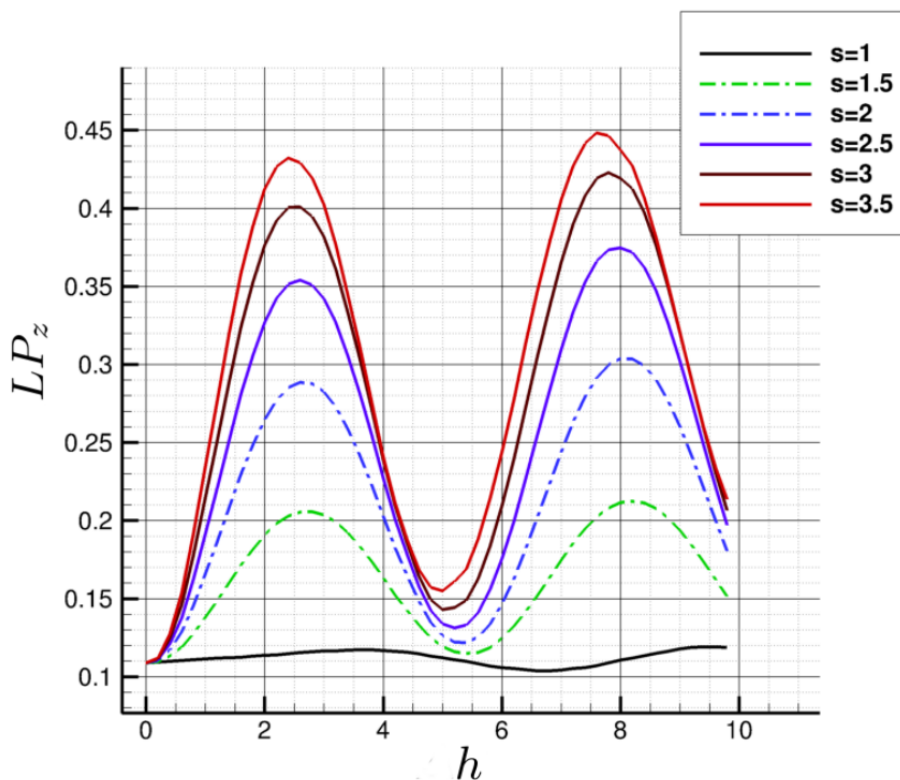


Рис. 45: Зависимость LP_z от ширины зазора h при различной силе дисклинации

Однако особого внимания заслуживает (рис. 45) немонотонный, периодический характер зависимости $LP_z(z)$: пучок «раскручивается» и «закручивается» периодически. Такое поведение заслуживает нескольких дополнительных слов. Казалось бы, что если свет закручивается в тонком слое НЖК, то-есть слой действует на свет «закручивающим» образом, то увеличение толщины слоя должно увеличить «закручивание» и с увеличением толщины слоя, «закручивание» LP_z должно расти монотонно. Расчеты показывают, что такое представление ошибочно.

Поведение системы внешне похоже на поведение резонатора с тем отличием, что в резонаторе периодически по ширине зазора меняется поле и энергия пройденного излучения, а в данном случае — момент импульса. Это позволяет управлять величиной LP_z в некотором диапазоне, изменяя ширину зазора. Расстояние между максимумами и минимумами может быть оценено примерно, если пренебречь неоднородностью поля директора и считать НЖК просто пластиной из двоякопреломляющего материала, а падающий пучок заменить плоской волной, которая разделяется в кристалле на обыкновенную и необыкновенную, имеющие разные скорости распространения и, потому, разные длины волн — интерференция

этих волн вызывает пространственные «биения» электромагнитного поля. Такой подход приводит к формуле

$$\delta h = \frac{\lambda/2}{\sqrt{\epsilon_{\parallel}} - \sqrt{\epsilon_{\perp}}}. \quad (3.2)$$

В нашей задаче $\delta h = 2.941\lambda$. Оказалось, что первый и второй максимумы на рис. 45 примерно соответствуют $h = \delta h$ и $3\delta h$, первый минимум — $h = 2\delta h$. Таким образом, зная диэлектрические проницаемости материала и длину волны, используя формулу (3.2) можно примерно оценить, какой должна быть толщина слоя НЖК для генерации максимального/минимального момента импульса.

Кроме расчетов с одной модой HE_{11} (рис. 41), проводились расчеты с суммой двух мод (рис. 42), отличающихся направлением «закрутки». Суммарный пучок в этом случае обладает нулевым моментом импульса. В этом случае прохождение пучка через слой НЖК не меняет значение момента импульса пучка: вне зависимости от силы дисклинации и ширины слоя НЖК, суммарная величина z -компоненты момента импульса электромагнитного поля пучка остается нулевой. Таким образом можно заключить, что для увеличения момента импульса пучка путем пропускания через слой НЖК с дисклинацией, нужно чтобы момент импульса базового пучка изначально отличался от нуля. Линейная поляризация базового пучка в смысле генерации оптического вихря с большим орбитальным моментом (или моментом импульса) хуже круговой.

Оптический вихрь в параксиальном приближении принято определять как совокупность геометрических точек (осевая линия), в которых не определена фаза электромагнитного поля [44]. В параксиальном приближении это правомерно, так как рассматривается фаза «скалярного поля» (удовлетворяющего волновому уравнению, но не являющейся компонентой векторного поля). При этом полагается, что в точке неопределенной фазы, в центре пучка, поле обязано равняться нулю.

В нашем случае так определить вихрь невозможно так как имеет место шесть компонент поля, и точки с неопределенной фазой для разных компонент могут не совпадать (рис. 46).

Чтобы иметь возможность определять оптический вихрь так же, как это де-

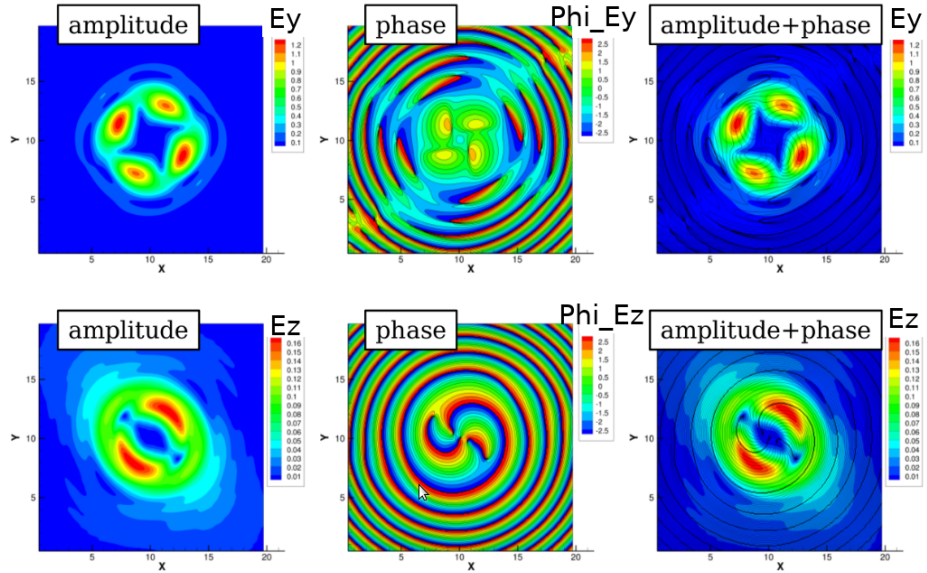


Рис. 46: Пример численного расчета. Поперечное сечение. Точки неопределенной фазы для разных компонент не совпадают.

лается в параксиальном приближении, в диссертации под «скалярным полем» параксиального приближения понимается величина вектора электрического поля, и на этом основании вводится фаза экстремального значения электрического вектора. Вектор $\mathbf{E}(t) = \text{Re}[\hat{\mathbf{E}} \exp(i\omega t)]$ в общем случае за период колебаний описывает эллипс. При этом величина поля $|\mathbf{E}|$ колеблется, имея максимум и минимум. Фаза $\varphi := \omega t$. Фаза φ_{Emax} определяется как фаза между настоящим положением вектора \mathbf{E} и его максимальным значением (рис. 47). Для простоты полагается, что настоящий момент времени $t^{now} = 0$ — пространственная картина поверхностей постоянной фазы от этого не изменяется.

Далее, из условия

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} |\mathbf{E}|^2 = 0, \quad (3.3)$$

находится экстремальное значение фазы, соответствующее максимуму или минимуму $|\mathbf{E}|$:

$$\varphi^* = \frac{1}{2} \arctan \left[\frac{2(\alpha\beta)}{(\beta^2 - \alpha^2)} \right] + \frac{\pi k}{2}, \quad k \text{ — целое}, \quad (3.4)$$

где $\alpha = \text{Re}[\hat{\mathbf{E}}]$, $\beta = \text{Im}[\hat{\mathbf{E}}]$ — вещественная и мнимая части комплексной амплитуды $\hat{\mathbf{E}}$. Подстановкой значения φ^* в выражение:

$$|\mathbf{E}|^2 = \alpha^2 \cos^2(\varphi) - (\alpha\beta) \sin(2\varphi) + \beta^2 \sin^2(\varphi) \quad (3.5)$$

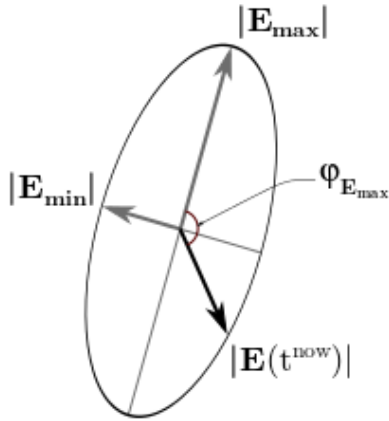


Рис. 47: Иллюстрация к обозначению $\varphi_{E_{max}}$.

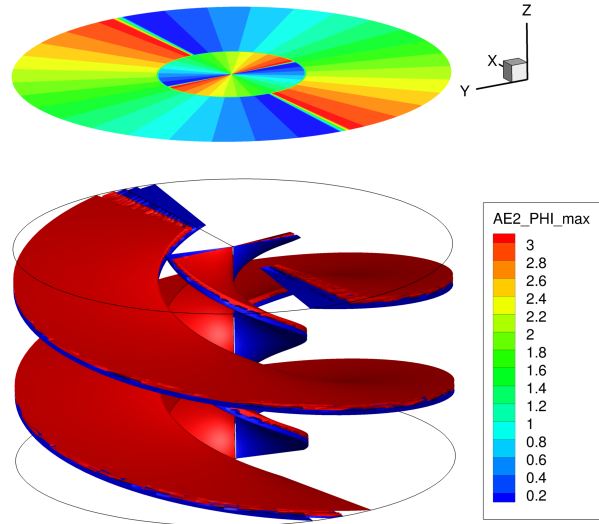


Рис. 48: Распределение $\varphi_{E_{max}}$ для моды HE_{11} в оптоволокне.

выясняется, соответствует она $|\mathbf{E}|_{max}$ или $|\mathbf{E}|_{min}$.

Вообще говоря, несмотря на бесконечную область определения арктангенса в (3.4), фаза φ^* не определена однозначно, если отсутствует собственно вытянутый эллипс — в точках пространства, где: или электрическое поле нулевое $|\mathbf{E}|_{max} = 0$, или вектор описывает окружность $|\mathbf{E}|_{max} = |\mathbf{E}|_{min}$; при этом в случае, когда описываемый эллипс вырожден в отрезок: $|\mathbf{E}|_{min} = 0$, имеется вполне конкретная φ^* . Если значение поля выражается через комплексную амплитуду с противоположным знаком (как в русскоязычной литературе): $\mathbf{E} := \text{Re} [\hat{\mathbf{E}} \exp(-i\omega t)]$, то в формулах (3.4) и (3.5) следует сделать формальную замену: $\varphi \rightarrow -\varphi$. Формулы (3.4) и (3.5) по форме применимы не только для значения вектора \mathbf{E} , а также и для значений векторов: \mathbf{H} , \mathbf{D} , \mathbf{V} , так как эти векторы за период колебания тоже описывают свои эллипсы.

На рис. 48 для примера приведено распределение $\varphi_{E_{max}}$ для моды HE_{11} в оптоволокне: изоповерхность $\varphi_{E_{max}} = 0$ (поверхность постоянной фазы) и значение $\varphi_{E_{max}}$ в некотором поперечном сечении — наблюдается винтовая структура изоповерхности, разрыв поверхности на границе между сердцевиной и оболочкой вызван граничными условиями на \mathbf{E} .

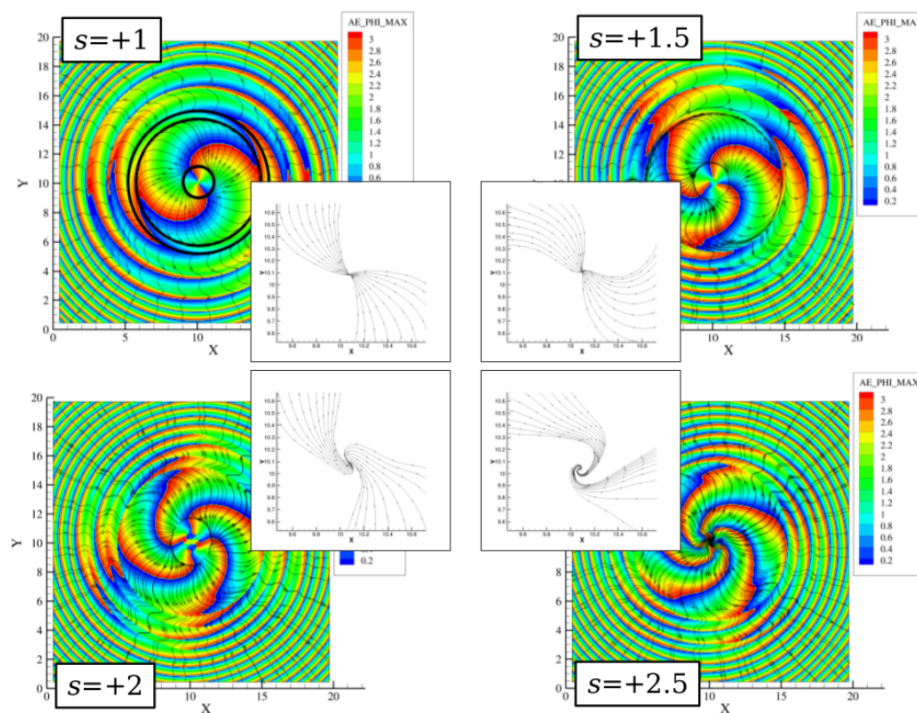


Рис. 49: Численный расчет прохождения пучка HE_{11} через слои НЖК с дисклинациями разной силы s . Поперечное сечение. Распределение $\Phi_{E_{max}}$ и касательные линии к вектору Пойнтинга

Распределение φ^* для пучка HE_{11} , прошедшего через слои НЖК с дисклинациями разной силы, представлено на рис. 49. Можно видеть, что топологический заряд вихря (количество цветных лепестков), определенного как совокупность геометрических точек неопределенной фазы φ^* , в два раза больше силы дисклинации, через которую прошел пучок.

С другой стороны, пучок, образованный двумя модами с противоположной закруткой, « $HE_{11} + HE_{-11}$ », изначально имеет момент импульса равный нулю. Прохождение такого пучка через слои НЖК с дисклинациями разной силы не меняет момента импульса (рис. 50) — момент импульса и топологический заряд остаются нулевыми.

Таким образом продемонстрировано, что оптический вихрь можно определять как совокупность геометрических точек с неопределенной фазой экстремальной величины электрического вектора, φ^* . Это определение является более широким, учитывая все три компоненты электрического поля, и сводится к параксиальному определению, оперирующему «скалярным полем». Кроме того, наше

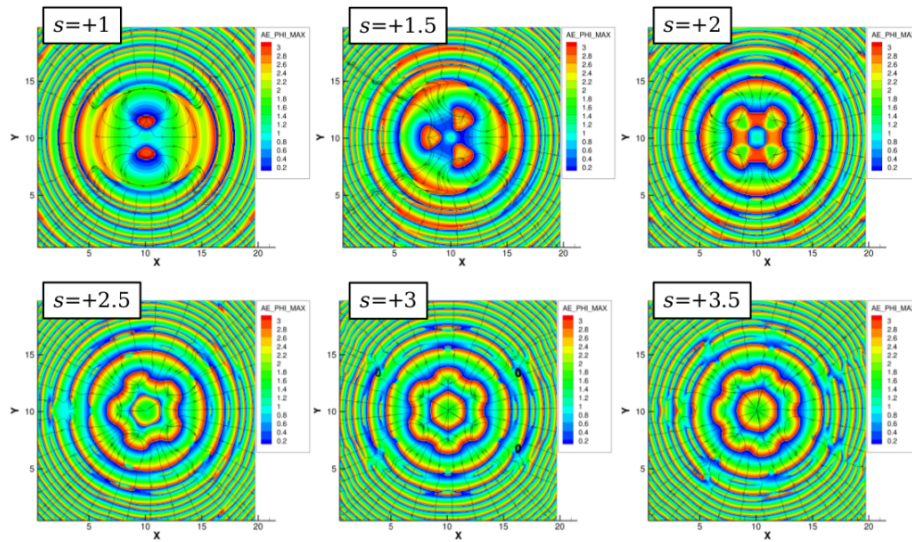


Рис. 50: Численный расчет прохождения пучка $HE_{11} + HE_{-11}$ через слой НЖК с дисклинациями разной силы s . Поперечное сечение. Распределение $\Phi_{E_{max}}$ и касательные линии к вектору Пойнтинга

определение более широкое, так как допускает ненулевое значение поля в центре вихря: если поле в центре вихря описывает строгую окружность (например в случае круговой поляризации), то φ^* не определена, и тогда вихрь имеет место, однако поле не равно нулю. Таковым например является поле HE_{11} , которое обладает ненулевым моментом импульса, как это было показано ранее (рис. 41, рис. 48, значение при нулевой координате на рис. 45).

Расчеты проводились на сетке $6 \cdot 10^8$ узлов. Понадобилось 180 процессоров и 185 Гб. оперативной памяти.

Следует отметить, что расчет подобной геометрии уже делался другими авторами [39]. Была получена пространственная периодичность полей. Однако авторы статьи [39] не ставили вопрос о моменте импульса.

Глава 4

Моделирование взаимного влияния поля ориентации нематического жидкого кристалла и электромагнитного поля пучка лазерного излучения

Как отмечалось во Введении, оптические свойства некоторых сред, известных как «мягкая материя», могут существенно меняться даже при достаточно слабых энергетических воздействиях. К числу таких сред относятся жидкие кристаллы. Проходя через жидкий кристалл, лазерное излучение вызывает переориентацию молекул жидкокристаллической среды, что, в свою очередь, ведет к изменению ее оптических свойств. Возникает нелинейный эффект, причем оптические нелинейности в жидких кристаллах на много порядков превышают те, что наблюдаются в твердых телах. Поэтому данное явление получило название гигантской оптической (иногда — ориентационной) нелинейности (ГОН) жидких кристаллов [45].

После экспериментального обнаружения ГОН, проявлявшейся в виде самофокусировки лазерного пучка, проходившего через слой НЖК [46, 47], она стала предметом многочисленных экспериментальных и теоретических исследований, продолжающихся до настоящего времени. Было показано, что взаимодействие лазерного излучения с жидкокристаллической средой сопровождается широким спектром самых разнообразных нелинейных эффектов, включая образование особого рода солитонов — нематиконов [48] и возникновение хаотических режимов [49].

При теоретическом рассмотрении нелинейного взаимодействия лазерного излучения с ЖК неизбежно вводятся те или иные упрощающие предположения — падающий пучок заменяется плоской волной, изменение ориентации считается малым и т. п. [50, 51]. Такие предположения часто неприменимы при решении практических задач, в частности связанных с моделированием и разработкой различных устройств, включающих жидкокристаллические элементы. В этом слу-

чае существенную помощь могло бы оказать численное моделирование. Такое моделирование в идеале должно было бы включать совместное решение уравнений Максвелла и уравнений динамики ЖК среды, описывающих как изменение ориентации ее молекул, так и ее макроскопическое движение — течение. Решение подобной задачи значительно осложняется большой разницей между временем прохождения светового пучка через образец ЖК и временем релаксации ориентации молекул среды к воздействию электромагнитного излучения.

В настоящей главе развивается численный метод решения уравнений электромагнитного поля и уравнений ориентационной динамики, то есть уравнения теории упругости НЖК. За пределами рассмотрения остаются уравнения гидродинамики, то есть возможность возникновения макроскопического движения ЖК среды не учитывается.

Разработанный метод используется далее для того, чтобы промоделировать взаимодействие узкого пучка электромагнитного излучения, выходящего из оптоволокна, с тонким слоем НЖК (рис. 51). Рассматривается случай нормального падения. Предполагается, что поверхности, между которыми заключен НЖК обработаны таким образом, что направление вектора-директора \mathbf{n} на границах фиксировано и образует заданный угол с первоначальным направлением распространения пучка. В результате находится установившееся распределение электромагнитного поля и вектора \mathbf{n} в заданном трехмерном объеме.



Рис. 51: Иллюстрация к постановке задачи

4.1. Численный метод совместного решения уравнений Максвелла и уравнений ориентационной динамики

4.1.1. Решаемые уравнения

Взаимное влияние электрического поля пучка света $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ и поля вектора $\mathbf{n}(\mathbf{r}, t)$ описывается уравнениями Максвелла и уравнениями ориентационной динамики НЖК.

Безразмерные, с выделенной частотой, уравнения Максвелла для медленно меняющихся во времени комплексных амплитуд, имеют вид:

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{D}}}{\partial t} = -(\hat{\mathbf{J}} + \hat{\sigma}_e \hat{\mathbf{E}}) + 2\pi i \hat{\mathbf{D}} + \text{rot } \hat{\mathbf{H}}, \quad \hat{\mathbf{D}} = \hat{\varepsilon} \hat{\mathbf{E}}, \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{B}}}{\partial t} = -(\hat{\mathbf{M}} + \hat{\sigma}_m \hat{\mathbf{H}}) + 2\pi i \hat{\mathbf{B}} - \text{rot } \hat{\mathbf{E}}, \quad \hat{\mathbf{B}} = \hat{\mu} \hat{\mathbf{H}}. \quad (4.2)$$

Вектор $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ в этих уравнениях присутствует в тензоре диэлектрической проницаемости:

$$\hat{\varepsilon}_{ij} = \varepsilon_{\perp} \delta_{ij} + (\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}) n_i n_j. \quad (4.3)$$

Рассматривая динамику НЖК, мы пренебрегаем его возможным макроскопическим движением (течением), описываемым, в общем случае, уравнениями Навье–Стокса со сложным видом тензора вязких напряжений [32]. Таким образом, скорость среды $\mathbf{v} = 0$, плотность и давление предполагаются постоянными, $\rho = \text{const}$, $p = \text{const}$.

Уравнение, описывающее изменение ориентации вектора-директора, может быть получено путем варьирования свободной энергии \mathcal{F} :

$$\mathcal{F} = \int (F_{\text{упр}} + F_{E^\circ} + F_{H^\circ} + F_{\text{дин}}) dV. \quad (4.4)$$

Энергия деформации поля ориентации равна [32]

$$F_{\text{упр}} = \frac{1}{2} K_1 (\text{div } \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_2 (\mathbf{n} \cdot \text{rot } \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_3 (\mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{n})^2, \quad (4.5)$$

где K_1, K_2, K_3 — упругие константы Франка.

Энергия, связанная со взаимодействием среды с электромагнитным полем, может быть разложена на часть, отвечающую наложенным постоянным полям

$$F_{E^\circ} + F_{H^\circ} = -\frac{1}{8\pi} (\varepsilon_{ik}^\circ E_i^\circ E_k^\circ + 4\pi \chi_{ik}^\circ H_i^\circ H_k^\circ),$$

где $\varepsilon_{ik}^\circ, \chi_{ik}^\circ$ — компоненты тензоров статической диэлектрической и статической магнитной проницаемостей для стационарных полей, часть соответствующую быстро меняющемуся полю световой волны [50]:

$$F_{\text{din}} = -\frac{1}{16\pi} \cdot \varepsilon_{ij} E_i E_j^*. \quad (4.6)$$

В последнем выражении E_i — компоненты комплексной амплитуды вектора электрического поля, E_j^* — сопряженные компоненты, ε_{ij} — компоненты тензора диэлектрической проницаемости для переменного электрического поля. Диэлектрическая и магнитная проницаемости существенно зависят от частоты и могут сильно отличаться для статических полей и электромагнитного поля световой волны.

Вычисляя вариацию свободной энергии:

$$\delta \int F dV = \int \left\{ \frac{\partial F}{\partial n_i} - \partial_k \frac{\partial F}{\partial (\partial_k n_i)} \right\} \delta n_i dV + \oint \frac{\partial F}{\partial (\partial_k n_i)} \delta n_i df_k,$$

где символ $\partial_i := \partial / \partial x_i$, получаем основное уравнение ориентационной динамики

$$\frac{d\mathbf{n}}{dt} = \mathbf{h} / \gamma. \quad (4.7)$$

Здесь γ — коэффициент с размерностью вязкости, \mathbf{h} — поперечная (по отношению к вектору \mathbf{n}) часть так называемого молекулярного поля \mathbf{H} :

$$\mathbf{h} = \mathbf{H} - \mathbf{n}(\mathbf{nH}), \quad (4.8)$$

$$\mathbf{H} = - \left\{ \frac{\partial F}{\partial n_i} - \partial_k \frac{\partial F}{\partial (\partial_k n_i)} \right\} = \mathbf{H}_S + \mathbf{H}_T + \mathbf{H}_B + \mathbf{H}_{st} + \mathbf{H}_{din}. \quad (4.9)$$

Отдельные слагаемые в последнем выражении равны

$$\mathbf{H}_S = K_1 \nabla (\text{div } \mathbf{n}), \quad \nabla (\text{div } \mathbf{n}) = \begin{pmatrix} \partial_x \partial_x n_x + \partial_x \partial_y n_y + \partial_x \partial_z n_z \\ \partial_y \partial_x n_x + \partial_y \partial_y n_y + \partial_y \partial_z n_z \\ \partial_z \partial_x n_x + \partial_z \partial_y n_y + \partial_z \partial_z n_z \end{pmatrix}, \quad (4.10)$$

$$\mathbf{H}_T = -K_2 \{A \operatorname{rot} \mathbf{n} + \operatorname{rot} (A \mathbf{n})\}, \quad \text{где } A = \mathbf{n} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{n}, \quad (4.11)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{n} &= \begin{pmatrix} \partial_y n_z - \partial_z n_y \\ \partial_z n_x - \partial_x n_z \\ \partial_x n_y - \partial_y n_x \end{pmatrix}, \\ \operatorname{rot} A \mathbf{n} &= \begin{pmatrix} \partial_y A n_z - \partial_z A n_y \\ \partial_z A n_x - \partial_x A n_z \\ \partial_x A n_y - \partial_y A n_x \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \partial_y n_z - \partial_z n_y \\ \partial_z n_x - \partial_x n_z \\ \partial_x n_y - \partial_y n_x \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} n_z \partial_y A \\ n_x \partial_z A \\ n_y \partial_x A \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} n_y \partial_z A \\ n_z \partial_x A \\ n_x \partial_y A \end{pmatrix} = \\ &= A \operatorname{rot} \mathbf{n} + \\ &+ \operatorname{rot}_x \mathbf{n} \begin{pmatrix} n_z \partial_y n_x \\ n_x \partial_z n_x \\ n_y \partial_x n_x \end{pmatrix} + n_x \begin{pmatrix} n_z \partial_y \partial_y n_z - n_z \partial_y \partial_z n_y \\ n_x \partial_z \partial_y n_z - n_x \partial_z \partial_z n_y \\ n_y \partial_x \partial_y n_z - n_y \partial_x \partial_z n_y \end{pmatrix} + \\ &+ \operatorname{rot}_y \mathbf{n} \begin{pmatrix} n_z \partial_y n_y \\ n_x \partial_z n_y \\ n_y \partial_x n_y \end{pmatrix} + n_y \begin{pmatrix} n_z \partial_y \partial_z n_x - n_z \partial_y \partial_x n_z \\ n_x \partial_z \partial_z n_x - n_x \partial_z \partial_x n_z \\ n_y \partial_x \partial_z n_x - n_y \partial_x \partial_x n_z \end{pmatrix} + \\ &+ \operatorname{rot}_z \mathbf{n} \begin{pmatrix} n_z \partial_y n_z \\ n_x \partial_z n_z \\ n_y \partial_x n_z \end{pmatrix} + n_z \begin{pmatrix} n_z \partial_y \partial_x n_y - n_z \partial_y \partial_y n_x \\ n_x \partial_z \partial_x n_y - n_x \partial_z \partial_y n_x \\ n_y \partial_x \partial_x n_y - n_y \partial_x \partial_y n_x \end{pmatrix} - \\ &- \operatorname{rot}_x \mathbf{n} \begin{pmatrix} n_y \partial_z n_x \\ n_z \partial_x n_x \\ n_x \partial_y n_x \end{pmatrix} - n_x \begin{pmatrix} n_y \partial_z \partial_y n_z - n_y \partial_z \partial_z n_y \\ n_z \partial_x \partial_y n_z - n_z \partial_x \partial_z n_y \\ n_x \partial_y \partial_y n_z - n_x \partial_y \partial_z n_y \end{pmatrix} - \\ &- \operatorname{rot}_y \mathbf{n} \begin{pmatrix} n_y \partial_z n_y \\ n_z \partial_x n_y \\ n_x \partial_y n_y \end{pmatrix} - n_y \begin{pmatrix} n_y \partial_z \partial_z n_x - n_y \partial_z \partial_x n_z \\ n_z \partial_x \partial_z n_x - n_z \partial_x \partial_x n_z \\ n_x \partial_y \partial_z n_x - n_x \partial_y \partial_x n_z \end{pmatrix} - \\ &- \operatorname{rot}_z \mathbf{n} \begin{pmatrix} n_y \partial_z n_z \\ n_z \partial_x n_z \\ n_x \partial_y n_z \end{pmatrix} - n_z \begin{pmatrix} n_y \partial_z \partial_x n_y - n_y \partial_z \partial_y n_x \\ n_z \partial_x \partial_x n_y - n_z \partial_x \partial_y n_x \\ n_x \partial_y \partial_x n_y - n_x \partial_y \partial_y n_x \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

$$\mathbf{H}_B = K_3 \{ \mathbf{B} \times \operatorname{rot} \mathbf{n} + \operatorname{rot} (\mathbf{n} \times \mathbf{B}) \}, \quad \text{где } \mathbf{B} = \mathbf{n} \times \operatorname{rot} \mathbf{n}, \quad (4.12)$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{n}) &= \mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \text{rot } \mathbf{n}) - \text{rot } \mathbf{n} \cdot 1 \quad (\text{так как } \mathbf{n}^2=1), \\
\text{rot}(\mathbf{n} \times \mathbf{B}) &= \text{rot}(\mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \text{rot } \mathbf{n}) - \text{rot } \mathbf{n}) = \text{rot } \mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \text{rot } \mathbf{n}) - \text{rot rot } \mathbf{n} = \dots \\
&= \text{rot } \mathbf{A} \mathbf{n} - \begin{pmatrix} \partial_y \text{rot}_z \mathbf{n} - \partial_z \text{rot}_y \mathbf{n} \\ \partial_z \text{rot}_x \mathbf{n} - \partial_x \text{rot}_z \mathbf{n} \\ \partial_x \text{rot}_y \mathbf{n} - \partial_y \text{rot}_x \mathbf{n} \end{pmatrix} = \\
&= \text{rot } \mathbf{A} \mathbf{n} - \begin{pmatrix} \partial_y \text{rot}_z \mathbf{n} \\ \partial_z \text{rot}_x \mathbf{n} \\ \partial_x \text{rot}_y \mathbf{n} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \partial_z \text{rot}_y \mathbf{n} \\ \partial_x \text{rot}_z \mathbf{n} \\ \partial_y \text{rot}_x \mathbf{n} \end{pmatrix} = \\
&= \text{rot } \mathbf{A} \mathbf{n} - \begin{pmatrix} \partial_y(\partial_x n_y - \partial_y n_x) \\ \partial_z(\partial_y n_z - \partial_z n_y) \\ \partial_x(\partial_z n_x - \partial_x n_z) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \partial_z(\partial_z n_x - \partial_x n_z) \\ \partial_x(\partial_x n_y - \partial_y n_x) \\ \partial_y(\partial_y n_z - \partial_z n_y) \end{pmatrix} = \\
&= \text{rot } \mathbf{A} \mathbf{n} - \begin{pmatrix} \partial_y \partial_x n_y \\ \partial_z \partial_y n_z \\ \partial_x \partial_z n_x \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \partial_y \partial_y n_x \\ \partial_z \partial_z n_y \\ \partial_x \partial_x n_z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \partial_z \partial_z n_x \\ \partial_x \partial_x n_y \\ \partial_y \partial_y n_z \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \partial_z \partial_x n_z \\ \partial_x \partial_y n_x \\ \partial_y \partial_z n_y \end{pmatrix}, \\
\mathbf{H}_{st} &= \frac{\varepsilon_{\parallel}^{\circ} - \varepsilon_{\perp}^{\circ}}{4\pi} \mathbf{E}^{\circ}(\mathbf{n}, \mathbf{E}^{\circ}) + (\chi_{\parallel}^{\circ} - \chi_{\perp}^{\circ}) \mathbf{H}^{\circ}(\mathbf{n}, \mathbf{H}^{\circ}), \tag{4.13}
\end{aligned}$$

$$\mathbf{H}_{din} = \frac{\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}}{8\pi} \text{Re} \left[\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{n}, \hat{\mathbf{E}}^*) \right]. \tag{4.14}$$

Поле пучка \mathbf{E} присутствует в (4.14).

4.1.2. Алгоритм решения уравнений ориентационной динамики и его верификация

Обычно при решении уравнений ориентационной динамики в качестве зависимых переменных используются два угла θ , φ , определяющих направление директора: $\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ [51, 52, 53]. Особенностью нашей работы является то, что в качестве основных переменных выбраны компоненты вектора $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$.

Правая часть уравнения (4.7), \mathbf{h}/γ , вычисляется на 19-точечном шаблоне (пространственный аналог одномерного трехточечного шаблона) разностной сетки $x_i = i\Delta x$, $y_j = j\Delta y$, $z_k = k\Delta z$ с помощью центральноразностной схемы 2-го порядка для аппроксимации пространственных производных. Приведем пример рас-

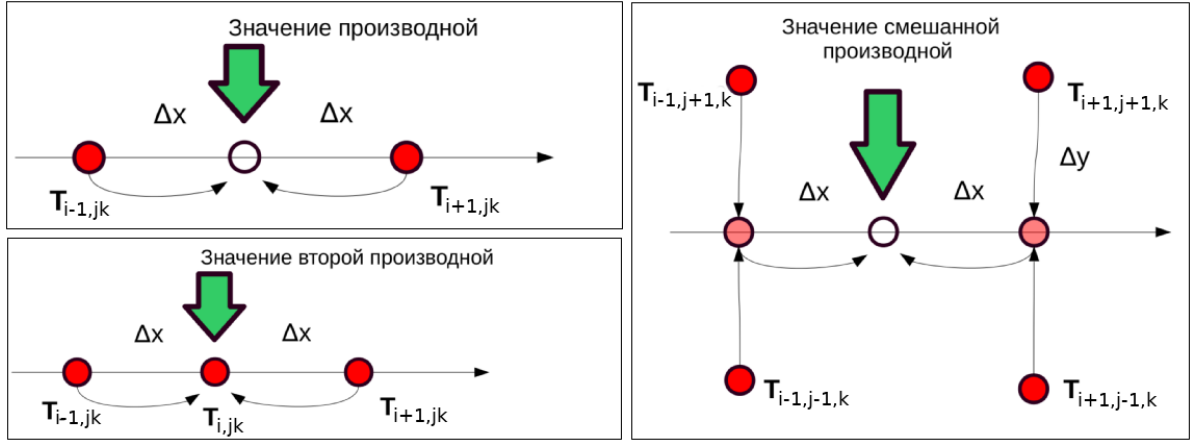


Рис. 52: Иллюстрация к трехточечному шаблону на примере скалярного поля T .

чета производных для скалярного поля T , где T играет роль компонент вектора $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ (рис.52):

$$\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{ijk} = \frac{T_{i+1,j,k} - T_{i-1,j,k}}{2\Delta x}, \quad \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \Big|_{ijk} = \frac{T_{i+1,j,k} - 2T_{i,j,k} + T_{i-1,j,k}}{(\Delta x)^2},$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x \partial y} \Big|_{ijk} = \frac{1}{4\Delta x \Delta y} (T_{i+1,j+1,k} + T_{i-1,j-1,k} - T_{i+1,j-1,k} - T_{i-1,j+1,k}).$$

Для того, чтобы при интегрировании по времени не нарушалось обязательное условие $|\mathbf{n}| = 1$, изменение вектора \mathbf{n} рассчитывается как поворот в плоскости, образованной векторами \mathbf{n} , \mathbf{h} , на угол, определяемый величиной правой части:

$$\mathbf{n}_{new} = \mathbf{n} \cdot \cos(|\mathbf{h}|\Delta t/\gamma) + \mathbf{h}/|\mathbf{h}| \cdot \sin(|\mathbf{h}|\Delta t/\gamma). \quad (4.15)$$

Величина временного шага Δt определяется из условия, чтобы угол поворота директора за один шаг ни в одной точке сетки не превышал заданное пороговое значение α_{max} :

$$\Delta t \leq \frac{\gamma \alpha_{max}}{|\mathbf{h}|}. \quad (4.16)$$

К сожалению, для верификации алгоритма решения уравнений ориентационной динамики имеется не так много задач, допускающих аналитическое решение. Эти задачи в основном связаны с поведением директора в стационарном электрическом или магнитном поле $\mathbf{E}^\circ, \mathbf{H}^\circ$. Одной из таких задач является эффект Фредерикса, рассчитываемый в одноконстантном приближении [54].

Условия задачи таковы: ищется стационарное, зависящее только от координаты z поле директора $\mathbf{n} = (\cos \theta, 0, \sin \theta)$ в плоском слое НЖК, к которому приложено постоянное электрическое поле $\mathbf{E} = (0, 0, E)$. На границах слоя $\theta = 0$. Все константы Франка равны между собой, $K_1 = K_2 = K_3 = K$.

В этом случае уравнение ориентационной динамики (4.7) приобретает вид:

$$\ddot{\theta} + \frac{\Delta\epsilon E^2}{4\pi K} \sin \theta \cos \theta = 0, \quad \Delta\epsilon \equiv \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}.$$

Это нелинейное автономное уравнение второго порядка, решение которого может быть выписано в эллиптических функциях. Его также легко решить численно, используя например схему Рунге–Кутты четвертого порядка и метод стрельбы для решения краевой задачи. Полученное таким образом решение сравнивалось с полученным методом установления по времени результатом работы верифицируемого трехмерного кода. На рис. 53 показаны оба распределения на интервале, охватывающем половину толщины слоя ЖК. Решения визуально неотличимы.

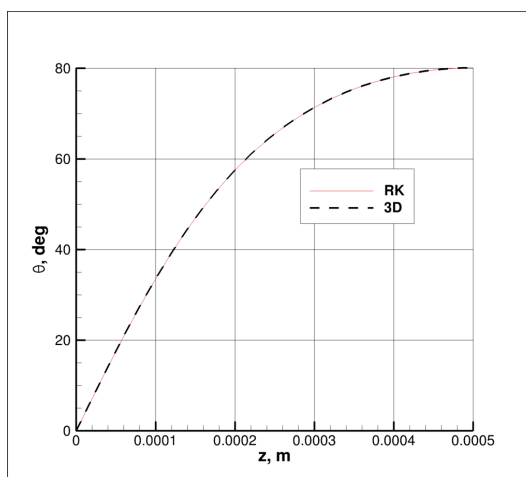


Рис. 53: Сравнение угла отклонения директора, полученного при решении уравнений ориентационной динамики, с точным решением для эффекта Фредерикса в одноконстантном приближении.

Для верификации реализации в коде динамического электроориентационного эффекта (4.14) не найдено задач, имеющих аналитическое выражение, поэтому использовалось свойство электроориентационного эффекта: вектор \mathbf{n} стремится сориентироваться коллинеарно молекулярному полю \mathbf{H} . Так, принудительно отключалась упругость (упругие константы Франка приравнявались нулю), накладывалось внешнее переменное поле и производился расчет вектора \mathbf{n} до установления невязки, после которого во всех узлах трехмерной сетки сравнивалось численно вычисленное направление \mathbf{n} и направление большой оси эллипса \mathbf{e} , описываемого электрическим вектором за период колебания, полученное аналитически с использованием формул (3.4, 3.5). В рамках данной работы для верификации реализации динамического электроориентационного эффекта задавалось поле $\hat{\mathbf{E}}$ собственной моды оптоволоконна HE_{11} , по формуле (3.4) вычислялась фаза φ^* , фаза использовалась для нахождения максимального за период вектора электрического поля: $\mathbf{E} = \text{Re}[\exp(i\varphi^*)]$, далее вектор \mathbf{E} использовался для нахождения единичного вектора \mathbf{e} , направленного вдоль большой полуоси эллипса, задаваемого электрическим вектором за период колебания электромагнитного поля: $\mathbf{e} = \mathbf{E}/|\mathbf{E}|$. Поле вектора \mathbf{e} показано на рис. 54. Расчет показал, что установившееся распределение поля директора \mathbf{n} в слое ЖК полностью с ним совпадает.

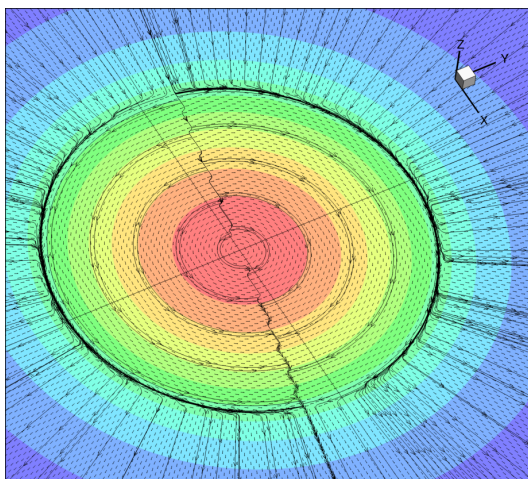


Рис. 54: Распределение вектора \mathbf{e} в поперечном сечении пучка собственной моды оптоволоконна HE_{11} . Вместе с ним показаны линии, касательные к которым направлены вдоль \mathbf{e} ; цветом изображена величина большой полуоси эллипса (амплитуда переменного электрического поля).

4.1.3. Алгоритм совместного решения полевых и материальных уравнений

Схема алгоритма совместного решения уравнений, описывающих прохождение света и релаксацию директора, приведена на рис. 55. Следует отметить, что система уравнений, описывающих прохождение света и ориентационную динамику ЖК решалась ранее в [52, 53]. В отличие от [52], где вектор \mathbf{n} предполагался зависящим только от одной координаты, мы решаем полную трехмерную задачу. Кроме того, мы не используем, как в [53] одноконстантное приближение, допуская возможность того, что все константы Франка K_1, K_2, K_3 отличны друг от друга.

Целью расчета является итерационное нахождение стационарного решения уравнений. Уравнения (4.1, 4.2, 4.7) на каждой итерации решаются последовательно. На этапе 1, «прохождение света», уравнения Максвелла (4.1),(4.2) решаются методом FDTD [20], особенности реализации которого подробно описаны во второй главе данной работы. На этапе 2, «релаксация директора», решаются уравнения ориентационной динамики (4.7).

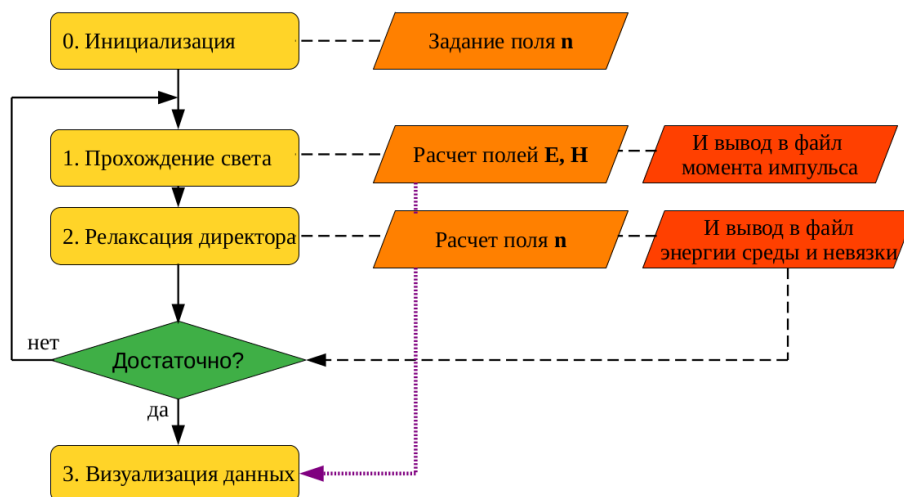


Рис. 55: Схема алгоритма совместного решения уравнений.

Отметим, что физически время релаксации среды много больше времени установления электромагнитного поля.

Для системы уравнений Максвелла и уравнения ориентационной динамики (4.1, 4.2, 4.7), проблематично найти аналитическое выражение критерия сходимости расчета, подобное числу Куранта, накладывающего ограничение на временной

шаг. Поэтому в данной работе, для ограничения шага по времени Δt используется прямое численное исследование. Во-первых, шаг по времени ограничивается не явно — задается α_{max} , максимально допустимый угол поворота директора (4.16). Во-вторых, в качестве индикатора сходимости расчета выбирается невязка η_n , максимальное значение абсолютной величины правой части уравнения ориентационной динамики (4.7), $|\mathbf{h}|/\gamma$, по всем узлам i, j, k расчетного объема на временной итерации n :

$$\eta_n = \text{MAX}_{i,j,k}^n \left\{ \frac{|\mathbf{h}|}{\gamma} \right\}.$$

Так как правая часть уравнения (4.7) является скоростью поворота директора, то представляется логичным, что в сходящемся расчете «релаксации директора» максимальная скорость η_n должна уменьшаться до нуля.

Предварительные расчеты показали, что, при прочих неизменных параметрах, на поведение невязки η_n влияет как величина электрического поля $|\mathbf{E}|_{max}$, так и α_{max} . Поведение невязки исследовалось на задаче прохождения пучка света «с линейной поляризацией» (сумма двух мод HE_{11}) через слой НЖК с директором, расположенным под углом 45° к направлению распространения пучка. Параметры взяты из статьи Зельдовича Б.Я. и Табиряна Н.В. [50]. В зависимости от

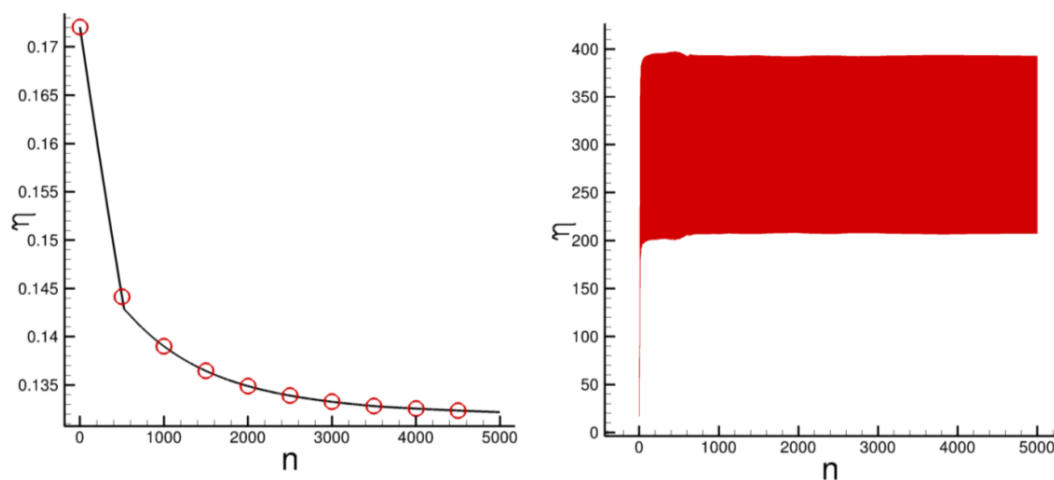


Рис. 56: Типы поведения невязки. «Хорошее» поведение (слева) и «плохое» поведение (справа). Красными кружками отмечены точки работы кода «прохождения света»

задаваемых $|\mathbf{E}|_{max}$, α_{max} невязка может в течение временных итераций или па-

дать, или же возрастать с дальнейшим болтанием в некотором коридоре значений. На рис. 56 показаны оба эти случая. На левом графике рис. 56 видно, что в начале второго расчета «релаксации директора» (после второго красного кружка, обозначающего расчет «прохождения света») имеет место излом (здесь стоит отметить, что изломы наблюдаются и в каждом красном кружке — это кажется вполне нормальным — после «прохождения света» изменяется электрическое поле, которое для кода «релаксации директора» является новым внешним условием). На правом графике рис. 56 видно, что невязка резко растет в течении нескольких первых расчетов (расчет кодом «релаксации директора» длится пятьсот временных итераций, отмеченных по горизонтали) и далее болтается в коридоре значений от 200 до 400.

Для чистовых расчетов левый график представляется более приемлемым, чем правый. Для выбора адекватных параметров $|\mathbf{E}|_{max}$, α_{max} , анализировалась рассчитанная кодом «релаксации директора» разница между невязкой на первом и десятом итерационных временных шагах:

$$\delta\eta = \eta_{10} - \eta_1.$$

Кроме того, замечено, что если строить зависимость от «величины в квадрате», $|\mathbf{E}|_{max}^2$, то зависимость приобретает удобный «прямолинейный» вид — изломы поверхности являются прямыми линиями, выходящими из нуля (рис. 57).

Очевидно, что выбор адекватных параметров $|\mathbf{E}|_{max}$, α_{max} связан с отрицательным знаком величины $\delta\eta$. Обычно в задаче уже задан параметр $|\mathbf{E}|_{max}$. Поэтому, для того, чтобы попасть в область с отрицательным знаком величины $\delta\eta$ (в цветную область на рис. 57) остается подбирать параметр α_{max} . В конкретном случае (рис. 57)

$$\alpha_{max} [\text{рад}] \leq 7,35 \cdot 10^{-5} \cdot |\mathbf{E}|_{max}^2 [\text{СГС}].$$

Такое, как на рис. 57, предварительное численное исследование $\delta\eta$ проводится для каждого нового набора параметров задачи. На основании этого исследования в расчете задается α_{max} — максимально допустимый угол поворота директора за один временной шаг.

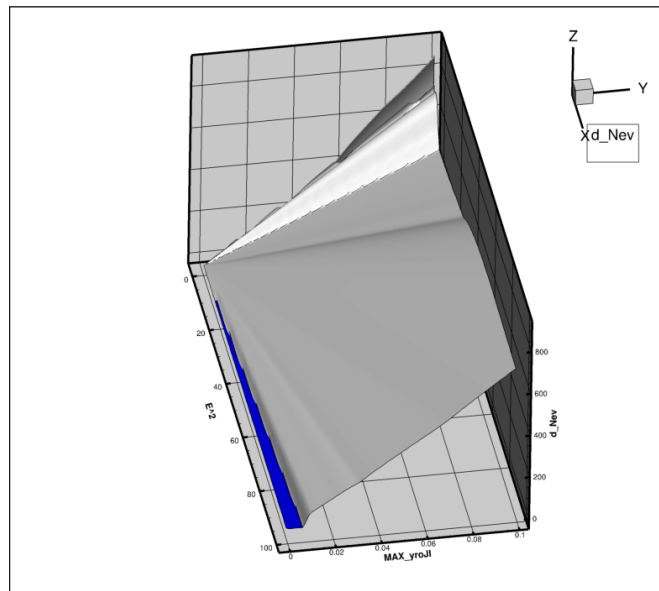


Рис. 57: Зависимость $\delta\eta$ от параметров $|E|_{max}^2$, α_{max} . Цветом обозначена отрицательная область

4.1.4. Количество временных итераций отдельно для «прохождения света» и для «релаксации директора»

Для «прохождения света» устанавливается такое количество временных итераций, которого достаточно, чтобы свет прошел путь равный удвоенной длине расчетной области, «туда и обратно». Выбирается наибольший показатель $n = c/v$, где c — скорость света в вакууме, v — скорость света в среде. Расчетный объем имеет длину, высоту и ширину. Из этих трех, выбирается максимальное значение l . Время t , необходимое для преодоления максимальной длины расчетного объема «туда-обратно» со скоростью, с которой свет распространяется в наиболее оптически-плотной среде, из тех, что используются в расчете: $t = 2l/v$. Правомерность такого подхода к оценке длительности расчета неоднократно проверялась ранее в расчетах — после истечения этого времени электромагнитное поле практически не меняется от шага к шагу. Количество итераций для «прохождения света»:

$$N_n \simeq t/\Delta t.$$

Для «релаксации директора» пока есть только одно соображение: расчет «совместного прохождения света и релаксации директора» должен побыстрее сойтись. Поэтому для «релаксации директора» выбирается количество шагов по

времени, чтобы физическое время машинного расчета «релаксации директора» было сравнимым со временем расчета «прохождения света». Это почти всегда выполняется в силу того, что «прохождение света» более ресурсоемко, чем «релаксация директора». В работе всюду для «релаксации директора» выбирается 500 итераций — за это количество итераций, с учетом ограничивающего угла поворота директора за одну итерацию α_{max} , директор поворачивается на величину, ощутимую для последующего расчета «прохождения света».

4.1.5. Критерии сходимости расчета «совместного прохождения света и релаксации директора»

Так как уравнение ориентационной динамики выведено из условия на экстремальное значение интеграла свободной энергии \mathcal{F} (4.4), то использование интеграла свободной энергии, вычисленного численно на каждом итерационном шаге для определения сходимости расчета — вполне естественно:

$$\mathcal{F}_n = \sum_{i,j,k} \Delta x \Delta y \Delta z (F_{упр}(i, j, k) + F_{E^\circ}(i, j, k) + F_{H^\circ}(i, j, k) + F_{din}(i, j, k)),$$

где i, j, k — индексы сеточного узла.

Плотность энергии статического поля равна нулю, так как статические поля использовались лишь для верификации кода и далее в работе не рассматриваются: $F_{E^\circ} + F_{H^\circ} = 0$, а плотность энергии динамического поля пучка вычисляется по формуле, эквивалентной (4.6), но более удобной:

$$F_{din} = -\frac{1}{16\pi} \hat{\epsilon}_{ij} E_i E_j^* = -\frac{1}{16\pi} \left(\epsilon_{\perp}(\hat{\mathbf{E}}, \hat{\mathbf{E}}^*) + \epsilon_a(\hat{\mathbf{E}}, \mathbf{n})(\hat{\mathbf{E}}, \mathbf{n})^* \right),$$

при $\hat{\epsilon}_{ij} = \epsilon_{\perp} \delta_{ij} + \epsilon_a n_i n_j$, $\epsilon_a = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$.

Кроме того, для определения сходимости используется невязка, η_n .

На рис. 58 приведен пример зависимости \mathcal{F}_n и η_n от итерационного шага n в коде, «релаксации директора». Считается, что расчет сошелся, если функции вышли на полку.

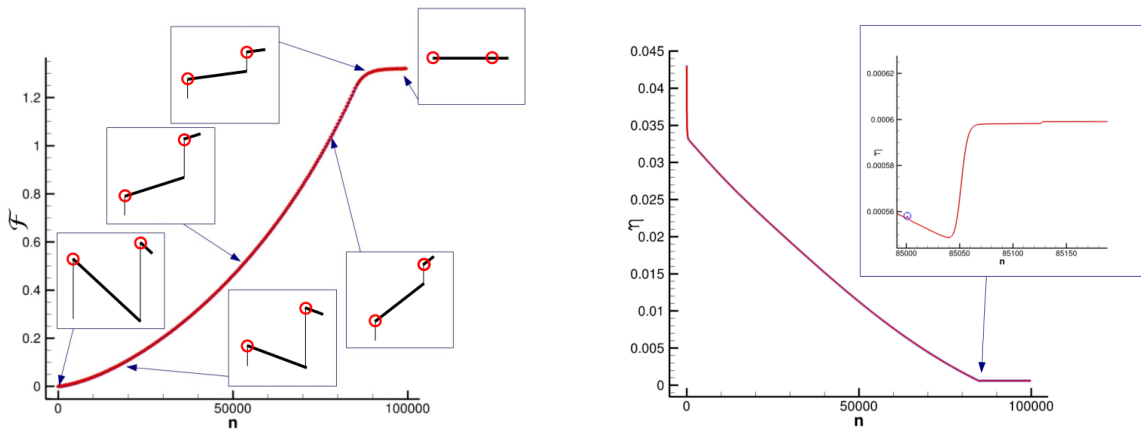


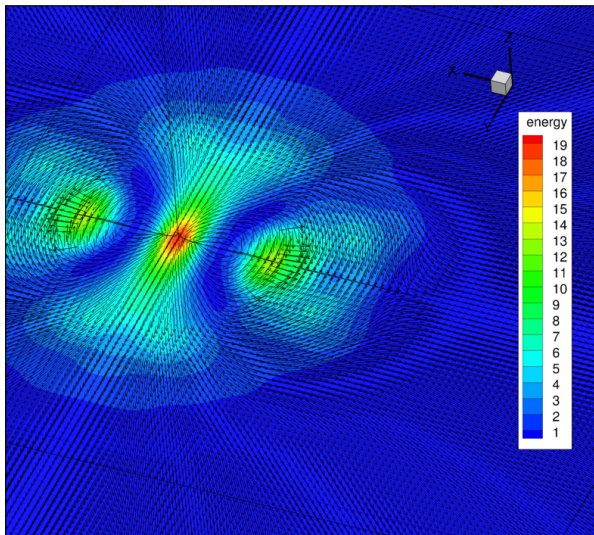
Рис. 58: Расчет задачи Б.Я. Зельдовича методом «совместного прохождения света и релаксации директора». Интеграл свободной энергии \mathcal{F}_n (слева) и невязка η_n (справа) как функции от номера итерации n . Красными окружностями обозначены паузы в итерациях «релаксации директора», в которых новое электромагнитное поле вычислялось алгоритмом «прохождения света»

4.1.6. Интерполяция векторов в методе «совместного прохождения света и релаксации директора»

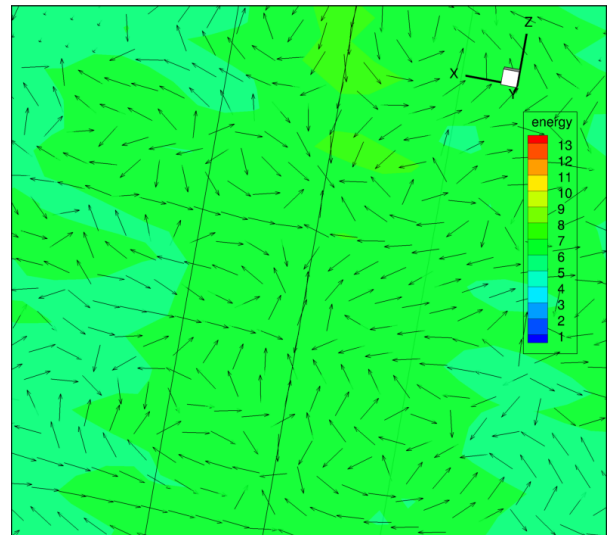
При решении уравнений Максвелла (1.9),(1.10) методом FDTD («прохождения света»), так как сетка шахматная, а значения векторов \mathbf{E} и \mathbf{n} нужны в единой геометрической точке, то нужно или интерполировать векторы, или решать уравнения ориентационной динамики («релаксации директора») на сетке, которая мельче сетки FDTD в два раза по каждому направлению.

Для интерполяции в нужной точке пространства значений обычных векторов, таких как \mathbf{E} , в методе «релаксация директора» используется трилинейная интерполяция их компонент. Если, как в нашем случае, векторы заданы в восьми вершинах куба, а требуется значение в центре куба, или векторы заданы в четырех углах квадрата, а требуется значение в центре квадрата, то трилинейная интерполяция сводится к простому усреднению векторов.

Так как противоположные направления директора \mathbf{n} и $-\mathbf{n}$ отвечают одному и тому же физическому состоянию (см. напр. ф-лу 4.3: $\hat{\mathbf{e}}(\mathbf{n}) = \hat{\mathbf{e}}(-\mathbf{n})$), то задача интерполяции методом усреднения векторов путем векторного сложения при рас-



(а) Первый пример



(б) Второй пример

Рис. 59: Сечение, поперечное распространению пучка в расчете. Демонстрация интерполяции вектора \mathbf{n} методом векторного усреднения, дающей неправильный результат — существуют области, где вектор \mathbf{n} необоснованно направлен перпендикулярно соседям

чете «прохождения света» дает неправильный результат в случае, если угол между векторами оказывается больше $\pi/2$. Такие «проблемные» углы между векторами \mathbf{n} в соседних ячейках возможны вблизи дисклинации. Особенно часто такая ситуация встречается с полуцелым значением силы дисклинации — тогда в пространстве имеют место не отдельные «проблемные» точки, а «проблемные» поверхности, разделяющие области с противоположными направлениями вектора-директора (рис. 59).

Таким образом перед нами встает следующая задача интерполяции: нужно найти средний отрезок для пучка из восьми отрезков (рис. 60). Искомый «отрезок», $\mathbf{e} \sim -\mathbf{e}$, предлагается находить из требования максимальной суммы проекций всех единичных векторов \mathbf{n}_i :

$$\mathbf{e} : \sum_i (\mathbf{n}_i, \mathbf{e})^2 = \max.$$

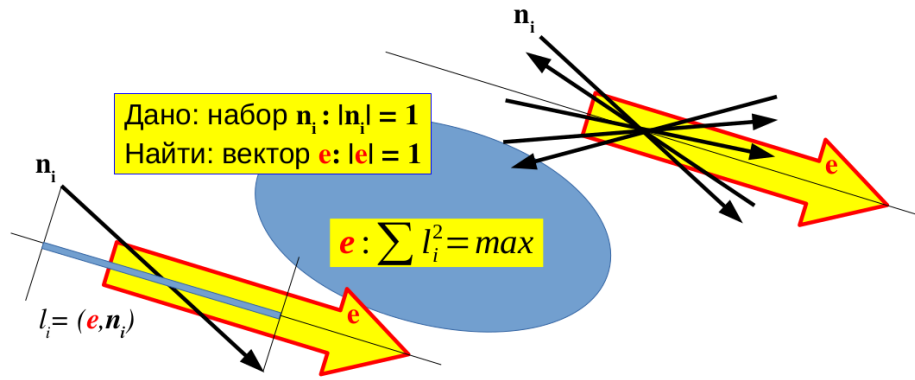


Рис. 60: Иллюстрация к усреднению неполярных единичных векторов.

Требование формально можно видоизменить:

$$\begin{aligned} \sum_i (\mathbf{n}_i, \mathbf{e})^2 &= \sum_i (\mathbf{e}, \mathbf{n}_i) (\mathbf{n}_i, \mathbf{e}) = \sum_i (e_x, e_y, e_z) \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} (n_x, n_y, n_z) \begin{pmatrix} e_x \\ e_y \\ e_z \end{pmatrix} = \\ &= (e_x, e_y, e_z) \begin{pmatrix} \sum n_x n_x & \sum n_y n_x & \sum n_z n_x \\ \sum n_x n_y & \sum n_y n_y & \sum n_z n_y \\ \sum n_x n_z & \sum n_y n_z & \sum n_z n_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_x \\ e_y \\ e_z \end{pmatrix} = \mathbf{e} \hat{\sigma} \mathbf{e}, \end{aligned}$$

где

$$\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \sum n_x n_x & \sum n_y n_x & \sum n_z n_x \\ \sum n_x n_y & \sum n_y n_y & \sum n_z n_y \\ \sum n_x n_z & \sum n_y n_z & \sum n_z n_z \end{pmatrix}.$$

Далее к квадратичной форме $\mathbf{e} \hat{\sigma} \mathbf{e}$ применяется теорема из линейной алгебры, утверждающей, что экстремумы достигаются на собственных векторах матрицы $\hat{\sigma}$, в соответствии с собственными значениями. То есть, далее находится максимальное собственное число λ_{max} матрицы $\hat{\sigma}$. Требованию максимальной суммы удовлетворяет собственный вектор \mathbf{e} :

$$\hat{\sigma} \mathbf{e} = \lambda_{max} \mathbf{e}. \quad (4.17)$$

Вычисленный вектор \mathbf{e} : $|\mathbf{e}| = 1$ считается средним для набора единичных векторов $\{\mathbf{n}_i\}$. Простой формулы (4.17) применительно к расчетам вектора \mathbf{n} в литературе ранее встречено не было.

4.2. Исследование электроориентационного эффекта

4.2.1. Влияние поляризации пучка лазерного излучения на направление вектора-директора

Исключение эффекта влияния упругости НЖК из анализа есть ситуация в большей степени гипотетическая, так как с одной стороны упругость можно исключить только при большом электромагнитном поле, но с другой стороны, мы используем уравнения, которые предполагают что электромагнитное поле невелико (уравнения не описывают нелинейные эффекты). Несмотря на это, исключение упругости из рассмотрения позволяет увидеть, как именно действует чистый электроориентационный эффект.

Выражение для аддитивного слагаемого молекулярного поля, описывающего воздействие электромагнитного поля пучка на директор (4.14):

$$\mathbf{H}_{din} = \frac{\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}}{8\pi} \operatorname{Re} \left[\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{n}, \hat{\mathbf{E}}^*) \right]$$

получено применением операции варьирования к компоненте плотности энергии (4.6), которая содержится в [50].

Далее для анализа используется два соображения: во-первых, вектор комплексной амплитуды $\hat{\mathbf{E}}$ всегда задает эллипс (с двумя вырожденными случаями: «окружность» и «отрезок»), который описывает в пространстве в течении периода колебаний электрический вектор $\operatorname{Re} [\mathbf{E} \exp(-i\omega t)]$, во-вторых система координат в нашей власти и поэтому мы в праве выбрать систему координат так, чтобы электрический эллипс располагался в плоскости O_{xy} , причем большая ось была направлена вдоль O_x :

$$\mathbf{E} = E_0 \begin{pmatrix} 1 \\ ia \\ 0 \end{pmatrix},$$

при $0 \leq a \leq 1$.

Тогда

$$\mathbf{H}_{din} = \frac{\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}}{8\pi} E_0^2 \operatorname{Re} \left[(n_x - ian_y) \begin{pmatrix} 1 \\ ia \\ 0 \end{pmatrix} \right] = \frac{\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}}{8\pi} E_0^2 \begin{pmatrix} n_x \\ a^2 n_y \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Тогда вектор \mathbf{h} :

$$\mathbf{h} \equiv \mathbf{H} - \mathbf{n}(\mathbf{nH}) = \frac{\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}}{8\pi} E_0^2 \left[\begin{pmatrix} n_x \\ a^2 n_y \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} (n_x^2 + a^2 n_y^2) \right].$$

Если $h_z > 0$, значит вектор \mathbf{n} , согласно уравнению ориентационной динамики (4.7), отклонится вверх, в противном случае — вниз.

$$h_z = \frac{\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}}{8\pi} E_0^2 (n_x^2 + a^2 n_y^2) \cdot (-n_z) = \operatorname{Const}_+ (\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}) (-n_z).$$

Из выражения видно, что для вектора \mathbf{n} , находящегося в верхней полуплоскости

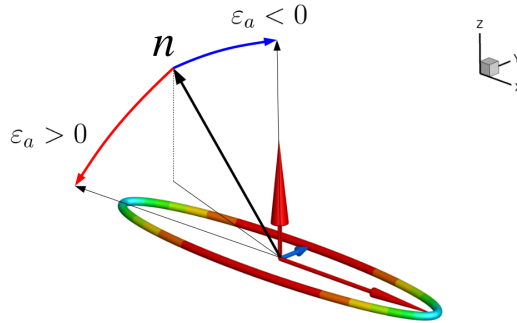


Рис. 61: Иллюстрация к действию электроориентационного эффекта.

($n_z > 0$), его отклонение зависит от знака $\varepsilon_a = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}$: при $\varepsilon_a > 0$, вектор \mathbf{n} стремится в плоскость O_{xy} , при $\varepsilon_a < 0$ вектор \mathbf{n} стремится напротив — выстроиться вдоль оси O_z .

Таким образом, анализ показывает, что в общем случае, при $\varepsilon_a > 0$, вектор \mathbf{n} стремится в плоскость эллипса, заметаемого вектором $\mathbf{E} \exp(-i\omega t)$ (падает в плоскость), а при $\varepsilon_a < 0$, вектор \mathbf{n} стремится напротив — выстроиться поперек плоскости эллипса.

Дальнейший анализ показывает, что вектор \mathbf{n} стремится выстроиться вдоль большой оси эллипса, а при $\varepsilon_a < 0$ — перпендикулярно и большой, и малой оси

(рис. 61). Если же эллипс вырожден в окружность, то при $\epsilon_a > 0$ в плоскости эллипса электромагнитное поле не влияет на директор. То же самое, поле не влияет на директор в плоскости, перпендикулярной электрическому вектору, при вырождении эллипса в отрезок, если $\epsilon_a < 0$.

4.2.2. Влияние знака диэлектрической анизотропии НЖК на сходимость численного расчета

В ряде работ, [55], [56], исследуются нематиконы — пространственные структуры поля директора, создаваемые пучком света и в свою очередь создающие оптический канал в среде НЖК, сходный с оптоволокном, так, что пучок не рассеивается в среде НЖК, а продолжает распространяться в виде уединенной, пространственно ограниченной волны. В некоторых работах уделяют особое внимание отрицательной диэлектрической анизотропии НЖК $\epsilon_a = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp} < 0$ [57].

Чтобы исследовать влияние знака ϵ_a на сходимость расчетов, был проведен ряд численных расчетов методом «совместного прохождения света и релаксации директора» как с положительной, так и с отрицательной анизотропией.

Постановка задач стандартна (рис. 51): в полости, заполненной НЖК, вдоль оси O_z распространяется пучок излучения. В случае круговой поляризации пучка (одна мода HE_{11}) начальное положение вектора \mathbf{n} — вдоль O_z (поперек плоскости поляризации). В случае линейной поляризации пучка (сумма мод $HE_{11} + HE_{-11}$) начальное положение вектора \mathbf{n} — вдоль O_y (вдоль линии поляризации пучка).

При выборе адекватного максимального угла поворота директора α_{max} и мощности электрического поля, путем задания E_{max} , расчеты с учетом упругости НЖК сходятся вполне удовлетворительно и при отрицательной, и при положительной анизотропии. Однако при константах Франка положенными равными нулю ($K_1 = K_2 = K_3 = 0$ — отключена упругость) расчеты показывают, что пучок с круговой поляризацией, HE_{11} , рассеивается в среде НЖК с $\epsilon_a > 0$, но не рассеивается при $\epsilon_a < 0$ (рис. 62, 63). Критерии сходимости при этом показывают, что в случае отсутствия упругости ($K_1 = K_2 = K_3 = 0$) при круговой поляризации пучка (мода HE_{11}), положительная диэлектрическая анизотропия $\epsilon_a > 0$ не

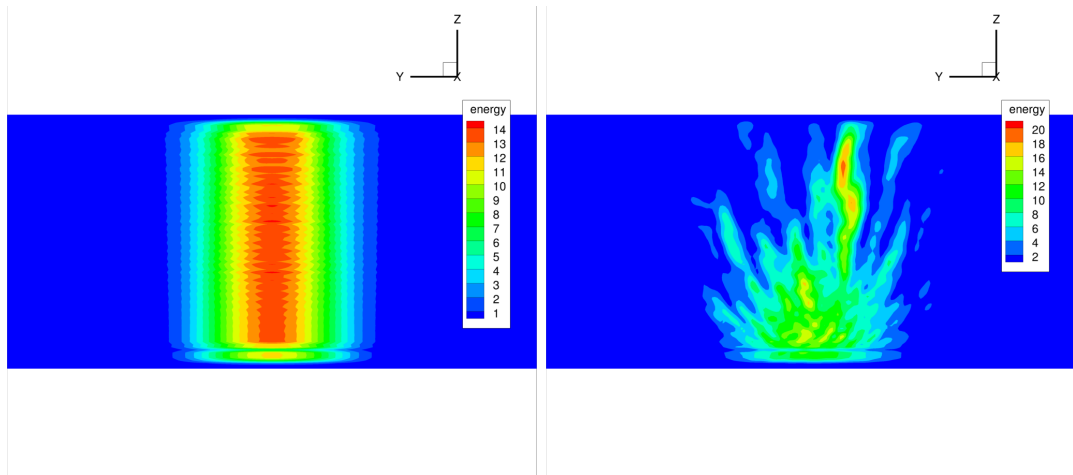


Рис. 62: *Центральный продольный срез. Плотность энергии электромагнитного поля пучка при круговой поляризации пучка. Слева случай « $\epsilon_a < 0$ », справа случай « $\epsilon_a > 0$ ».*

позволяет расчету установиться ни при каких, самых малых значениях угла максимально допустимого поворота директора α_{max} (рис. 64, 65). Однако, если обратить внимание на выводы предыдущего параграфа, «Влияние поляризации пучка лазерного излучения на направление вектора-директора», то можно надеяться объяснить расчетную нестабильность пучка и вектора \mathbf{n} тем, что нестабильная ситуация в расчетах вызвана большой свободой вектора \mathbf{n} при положительной анизотропии в пучке с круговой поляризацией — электрический эллипс вырожден в окружность, вектор \mathbf{n} падает в плоскость поляризации, а далее в плоскости поляризации он свободно перемещается. С целью проверки гипотезы объясняющей расчетную нестабильность пучка появлением свободы для вектора \mathbf{n} , проведено еще два расчета, где пучок с круговой поляризацией заменен на пучок с линейной поляризацией — на сумму двух мод с противоположной закруткой $HE_{11} + HE_{-11}$. Предполагалось, что ситуация изменится на противоположную — положительная диэлектрическая анизотропия укажет директору одно единственно направление, вдоль линии поляризации, а отрицательная диэлектрическая анизотропия позволит директору свободу в плоскости, поперек линии поляризации. Таким образом, если причина расходимости расчетов заключается в свободе, то мы увидим, что разойдется расчет, который сходился при круговой поляризации, и наоборот, сойдется тот расчет, который расходился при круговой поляризации.

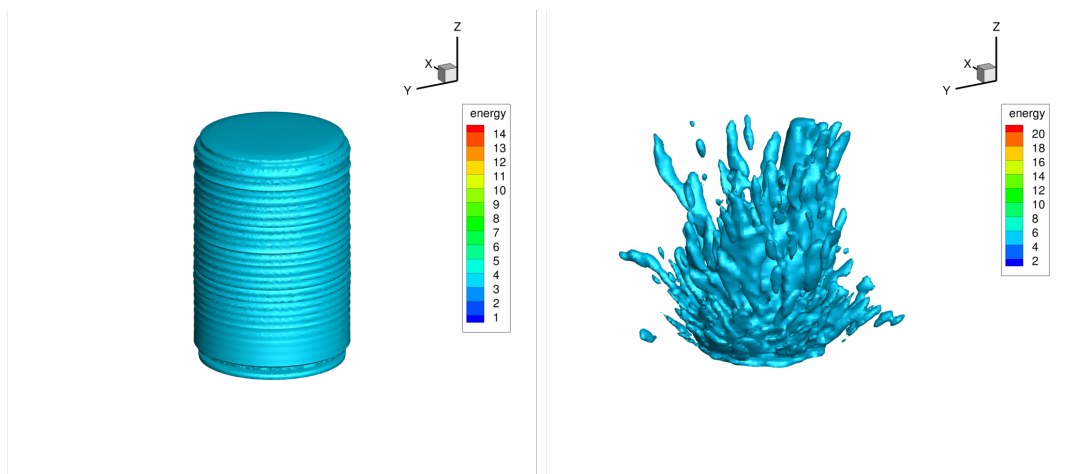


Рис. 63: Изоповерхность плотности энергии электромагнитного поля пучка при круговой поляризации пучка. Слева случай « $\epsilon_a < 0$ », справа случай « $\epsilon_a > 0$ ».

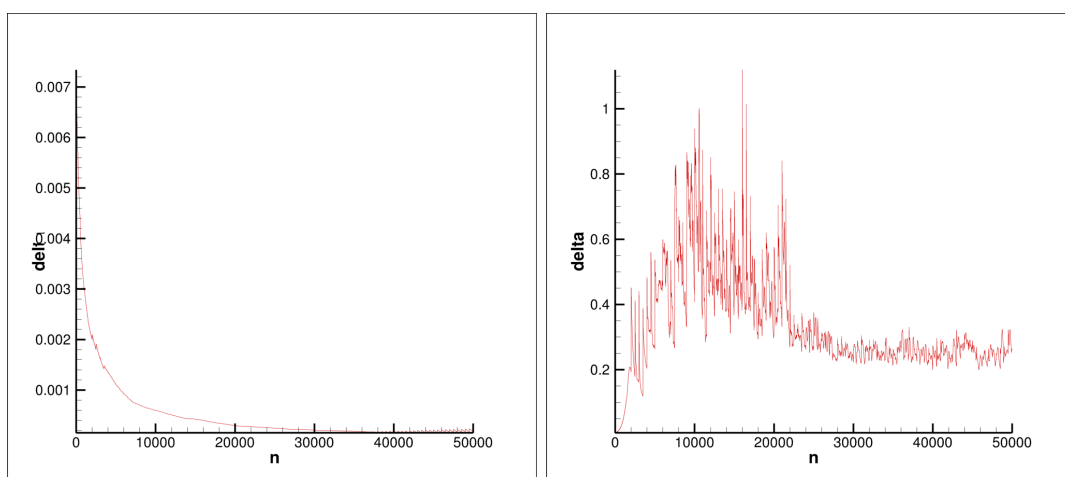


Рис. 64: Невязка при круговой поляризации пучка. Слева случай « $\epsilon_a < 0$ », справа случай « $\epsilon_a > 0$ ».

Результаты расчетов при линейной поляризации пучка несколько отличаются от ожиданий. Действительно, тот расчет (« $\epsilon_a > 0$ »), который при круговой поляризации пучка расходился, теперь, при линейной поляризации, сошелся — об этом говорит и гладкая форма изоповерхности плотности энергии (пучок не рассеивается), и критерии расчета (справа на рис. 66, 67, 68). Однако нельзя сказать, что расчет « $\epsilon_a < 0$ », который хорошо сходился при круговой поляризации пучка, теперь, при линейной поляризации, полностью разошелся. Хотя и невязка остается далекой от нуля, и изоповерхность плотности энергии не выглядит гладко (слева на рис. 66, 67, 68), но пучок рассеивается значительно хуже и потому расчет вы-

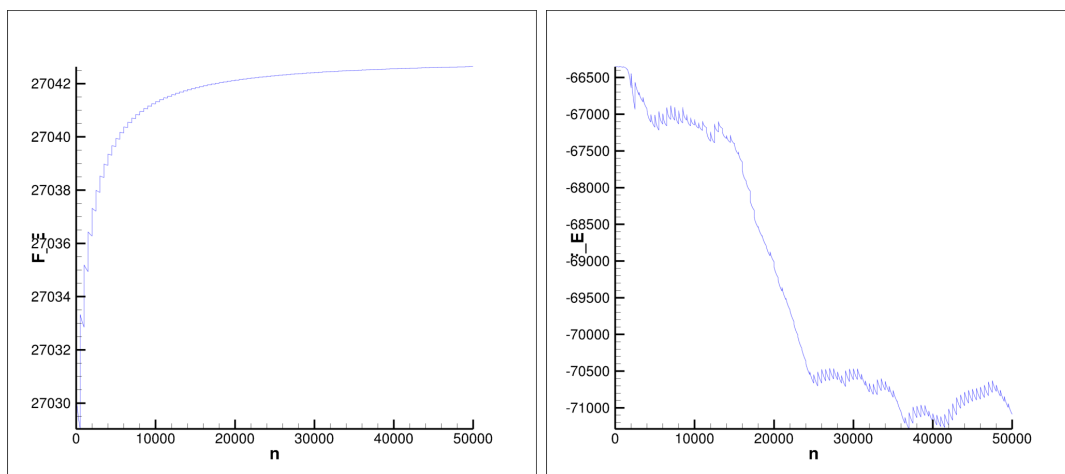


Рис. 65: Интеграл плотности энергии при круговой поляризации пучка. Слева случай « $\epsilon_a < 0$ », справа случай « $\epsilon_a > 0$ »

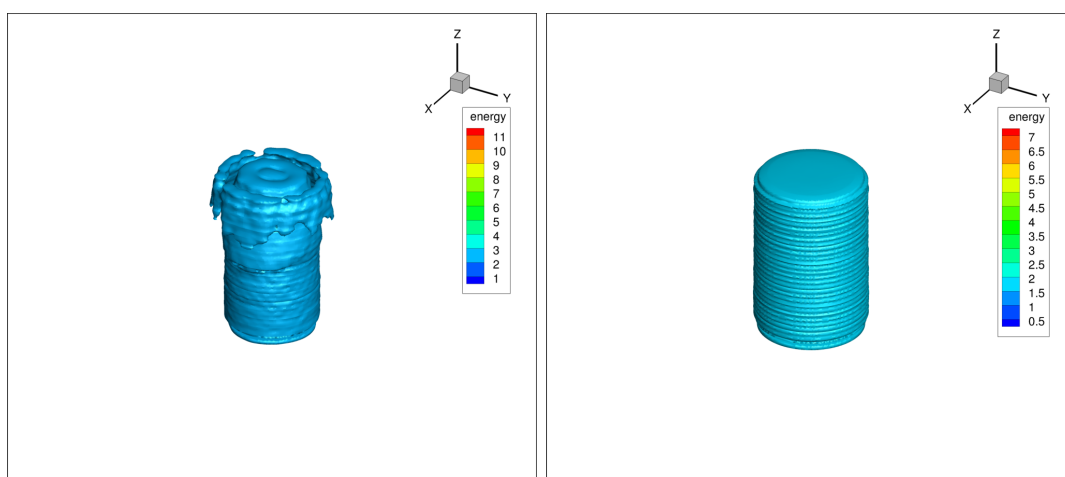


Рис. 66: Изоповерхность плотности энергии электромагнитного поля при линейной поляризации пучка. Слева случай « $\epsilon_a < 0$ », справа случай « $\epsilon_a > 0$ »

глядит лучше, чем расчет, представленный слева на рис. 63, 64, 65. Таким образом можно сказать, что гипотеза о влиянии поляризации пучка и, как следствие, влияние свободы вектора \mathbf{n} на расходимость расчета — подтверждена условно. То есть, поляризация пучка очевидно влияет на сходимость расчета, но существуют еще не выявленные причины, которые также влияют на сходимость.

4.3. Моделирование гигантской оптической нелинейности

В статье Б.Я. Зельдовича и Н.В. Табиряна [50] рассмотрена задача о прохождении пучка света через слой НЖК. Рассматривается эффект нелинейной за-

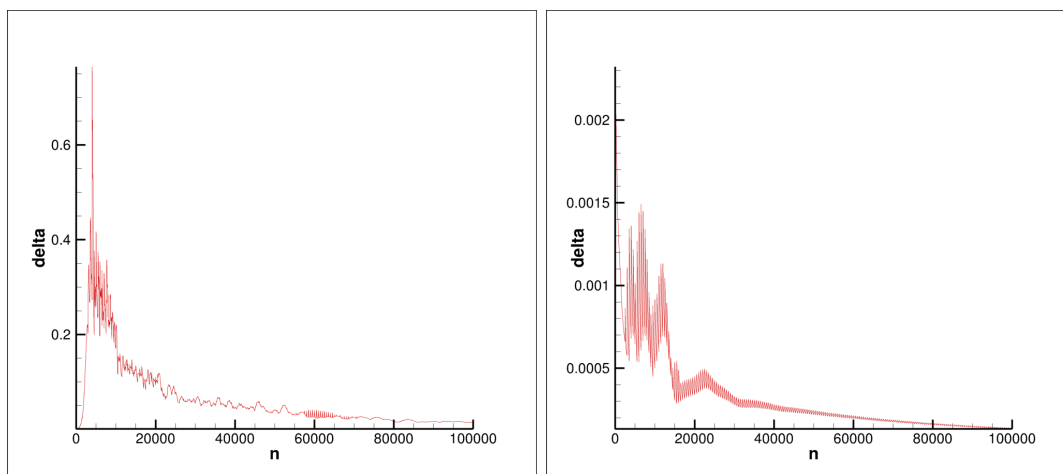


Рис. 67: Невязка при линейной поляризации пучка. Слева случай « $\epsilon_a < 0$ », справа случай « $\epsilon_a > 0$ »

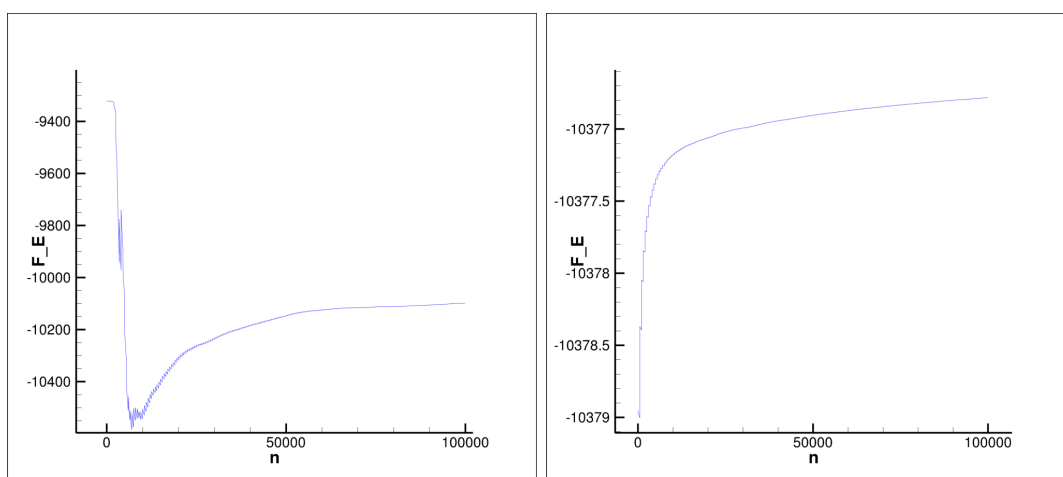


Рис. 68: Интеграл плотности энергии при линейной поляризации пучка. Слева случай « $\epsilon_a < 0$ », справа случай « $\epsilon_a > 0$ »

зависимости диэлектрической проницаемости нематической среды вдоль направления распространения лазерного пучка от величины электрического поля пучка. Нелинейная зависимость объясняется поворотом вектора-директора под действием электрического поля пучка. Такая ориентационная нелинейность названа «гигантской», так как она на много порядков превосходит нелинейность в твердых кристаллах.

В статье приведены конкретные параметры и проведена оценка угла отклонения вектора \mathbf{n} от первоначального положения под действием света:

$$\theta = \frac{\epsilon_a |E|^2 L^2}{32\pi K}, \quad (4.18)$$

где ϵ_a — диэлектрическая анизотропия, $|E|$ — величина электрического поля в системе СГС, L — длина полости, заполненной НЖК, $K = K_1 = K_2 = K_3$ — упругая константа Франка в одноконстантном приближении.

В статье [50] при оценке того, как НЖК меняет волновой фронт пучка, все же не предполагалось, что НЖК изменяет интенсивность излучения и направление пучка. В настоящее время, с появлением компьютерных кластеров, есть возможность провести численный расчет с учетом взаимного влияния пучка света и среды НЖК, и сравнить численные результаты с оценочной формулой (4.18).

Условия модельной задачи следующие. Через слой жидкого кристалла вдоль e_z проходит пучок света. Пучок составлен из суммы двух собственных мод оптоволокна HE_{11} . Свет поляризован по e_y . Вектор \mathbf{n} лежит в плоскости O_{yz} под углом $\pi/4$ к вектору e_y . На границах кюветы вектор \mathbf{n} задан жестко. Кювета с НЖК имеет вид шайбы (рис. 69). Высота кюветы $L = 8\lambda$, радиус кюветы $R = 9\lambda$, при длине волны в вакууме $\lambda = 10^{-3}$ см.

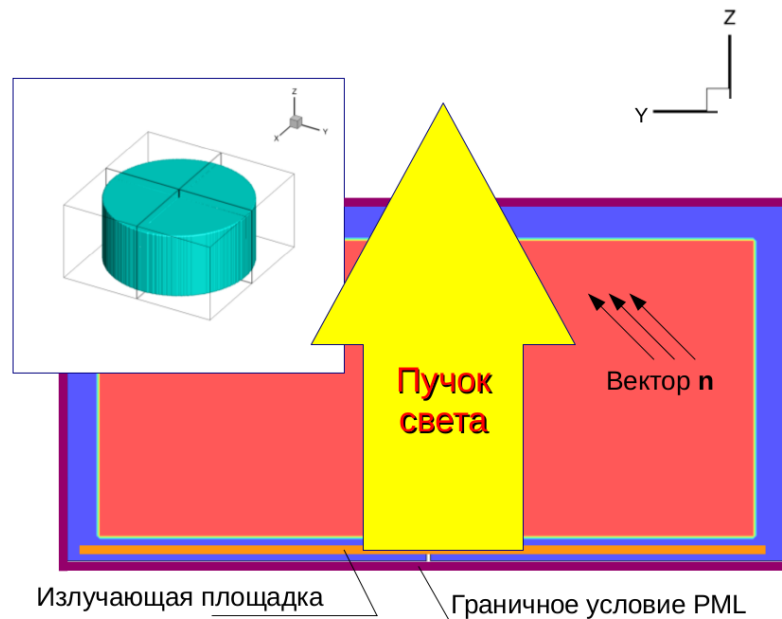


Рис. 69: Геометрия задачи.

Параметры задачи сведены в таб. 2.

Количество сеточных узлов в расчете $4 \cdot 10^6$ шт. Длина волны разрешалась с точностью 10 точек на длину волны. Критерии сходимости расчета задачи представлены на рис. 58.

Величина	Значение
Продольная диэл. проницаемость НЖК, ϵ_{\parallel}	$(1,71)^2 = 2,9241$
Поперечная диэл. проницаемость НЖК, ϵ_{\perp}	$(1,51)^2 = 2,2801$
Диэл. проницаемость сердцевины волокна, ϵ_1	2,15561124
Диэл. проницаемость оболочки волокна, ϵ_2	2,1400118776
Длина волны света, λ	10^{-3} см
Радиус сердцевины оптоволокна, a	$3,33\lambda$
Величина макс. электрического поля, $ \mathbf{E} _{max}$	0,5 CGSE
Макс. угол поворота за временной шаг, α_{max}	10^{-7} рад
Упругие константы Франка, $K_1 = K_2 = K_3$	10^{-6} эрг/см
Вязкость, γ	10^{-1} пуаз

Таблица 2: Параметры задачи

Расчет показывает (рис. 70), что в среде НЖК пучок отклоняется по направлению вектора \mathbf{n} , и величина электрического поля, $|\mathbf{E}|$, оказывается несколько выше чем в расчете без НЖК.

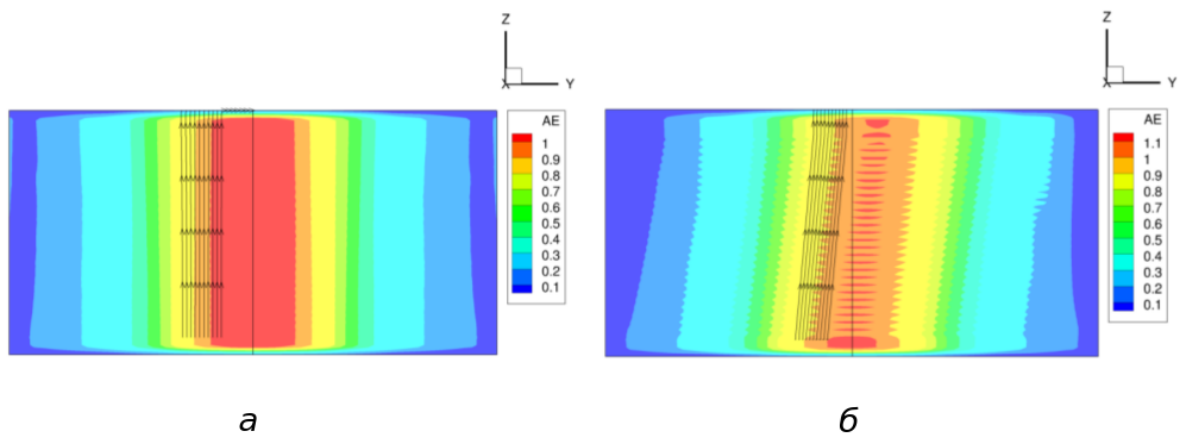


Рис. 70: Два расчета: а) — в изотропной среде, б) — в среде НЖК. Центральные продольные сечения. Цветом обозначена $|\mathbf{E}|$. Пучок черных линий со стрелками обозначает линии тока вектора Пойнтинга.

Угол отклонения вектора \mathbf{n} от начального положения под воздействием поля пучка, θ , представлен на рис. 71. Линейка цветов показывает, что максимальный

расчетный угол θ_{max}^* :

$$\theta_{max}^* = 0,00875 \text{ рад} \sim 10^{-2} \text{ рад.}$$

Рассчитанный по формуле (4.18) θ :

$$\theta = 0,64 \cdot 0,5^2 (8 \cdot 10^{-3})^2 / (32 \cdot \pi \cdot 10^{-6}) \sim 10^{-1} \text{ рад.}$$

Угол θ_{max}^* , рассчитанный численно, и угол θ , оцененный аналитически, отличаются на порядок.

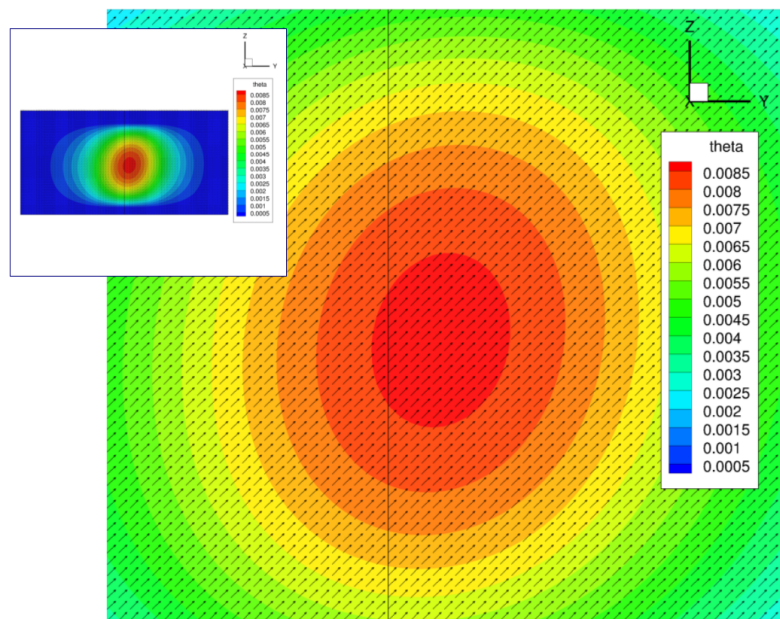


Рис. 71: Угол отклонения θ и поле вектора \mathbf{n} в продольном центральном сечении.

Оценочная формула получена без учета изменения параметров излучения после изменения параметров среды НЖК. Сравнение результата расчета с оценочной формулой указывает на важность численных методов, которые учитывают не только отклонение вектора-директора, но и изменение электромагнитного поля.

Ориентационная нелинейность НЖК за счет переориентации вектора \mathbf{n} в поле лазерного пучка приводит к фокусировке пучка — к «самофокусировке», которая наблюдалась в экспериментах, описанных в статье [50]. В настоящей работе предпринята попытка смоделировать численно самофокусировку узкого пучка, поперечный размер которого $\sim 6\lambda$. Задаваемые параметры совпадают с па-

раметрами предыдущей задачи (рис. 69, таб. 2), за исключением высоты кюветы НЖК ($L = 2\lambda$) и напряженности электрического поля в центре генерируемого пучка ($|\mathbf{E}|_{max} = 12,0 \text{ CGSE}$). Количество сеточных узлов в расчете составило $37,5 \cdot 10^6$. Геометрические размеры расчетной области в длинах волн в вакууме: $L_x = L_y = 20\lambda$, $L_z = 6\lambda$. На длину волны в вакууме пришлось 25 сеточных узлов. Использовалось 300 расчетных узлов кластера.

В результате расчета получено распределение вектора-директора \mathbf{n} в полости, занимаемой НЖК (рис. 72), а также распределение компонент электромагнитного поля во всем расчетном объеме (рис. 73).

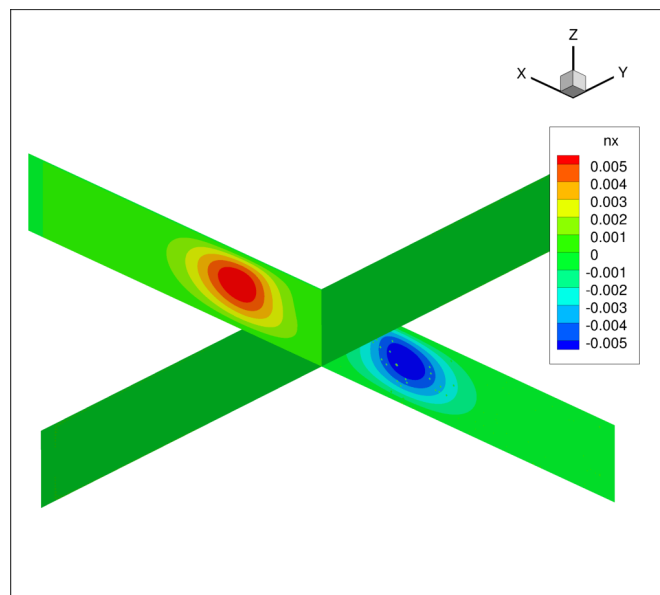


Рис. 72: Распределение x -компоненты вектора \mathbf{n} в объеме, занимаемом НЖК

На рис. 72 можно видеть, что n_x имеет значение малое, по сравнению с единицей. Это говорит о том, что вектор \mathbf{n} : $|\mathbf{n}| = 1$ практически лежит в плоскости O_{yz} .

На рис. 73 данные представлены в безразмерных величинах — в расчете задавался пучок с основной компонентой E_y (аналитическое решение суммы двух собственных мод HE_{11}), значения компонент нормированы на максимум исходной компоненты E_y , что позволяет наглядно видеть увеличение или уменьшение поля в локальных областях пространства в следствии взаимодействия пучка с заданной сложносоставной средой, сравнивая значения с единицей. Электромагнитное поле имеет пучности и узлы, характерные для распределения при интерференции волн,

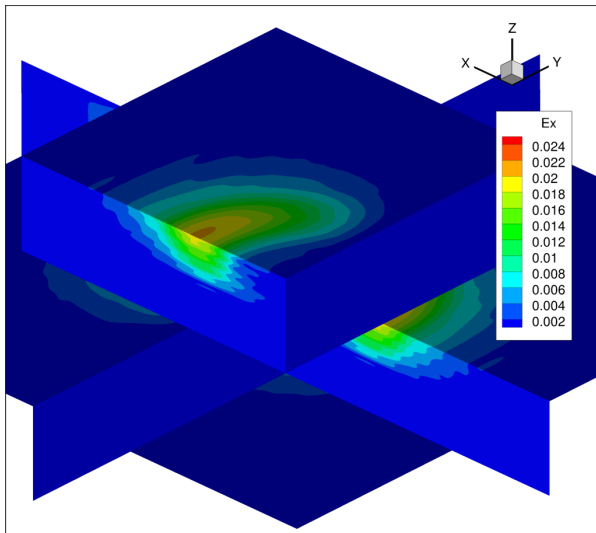
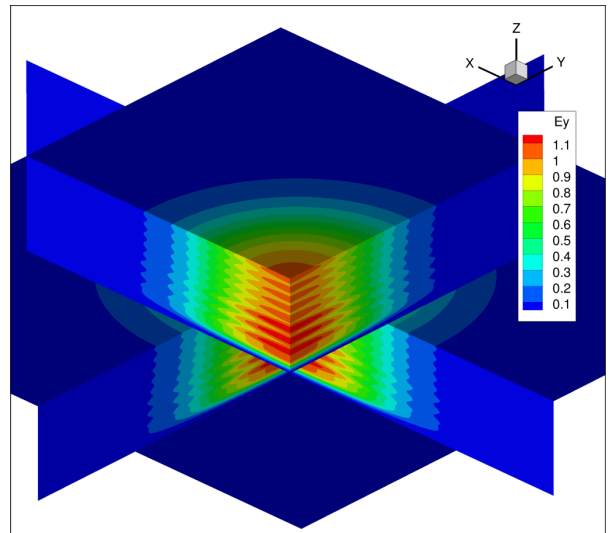
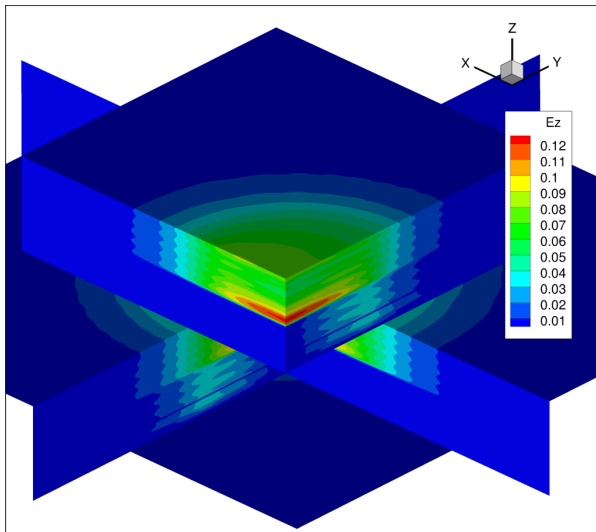
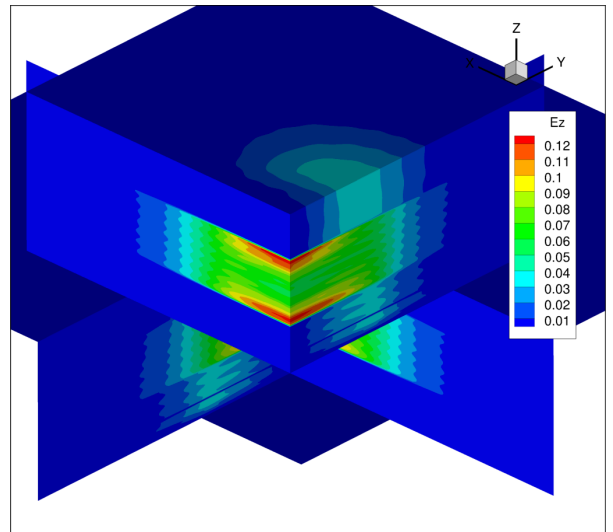
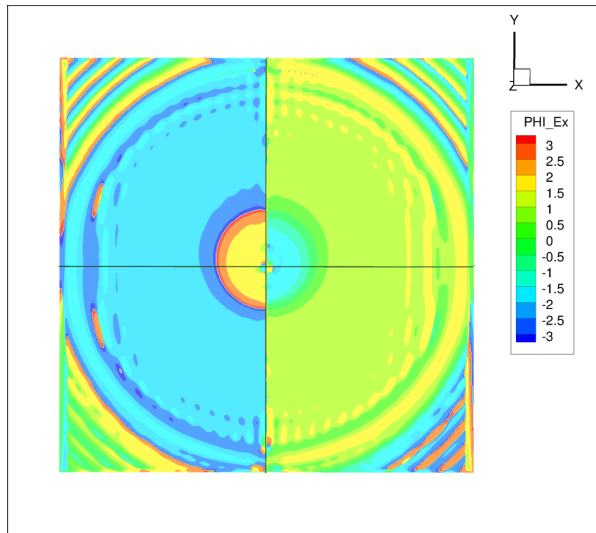
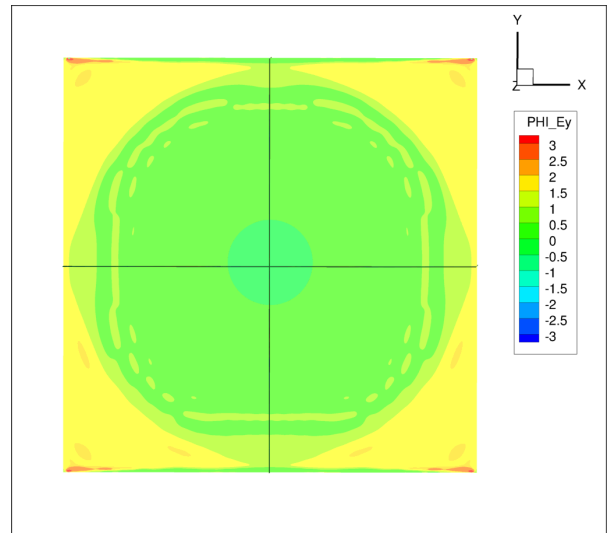
(а) амплитуда E_x (б) амплитуда E_y (в) амплитуда E_z (горизонтальное сечение пересекает полость с НЖК)(г) амплитуда E_z (горизонтальное сечение выше полости с НЖК)

Рис. 73: Амплитуды компонент электрического поля в сечениях

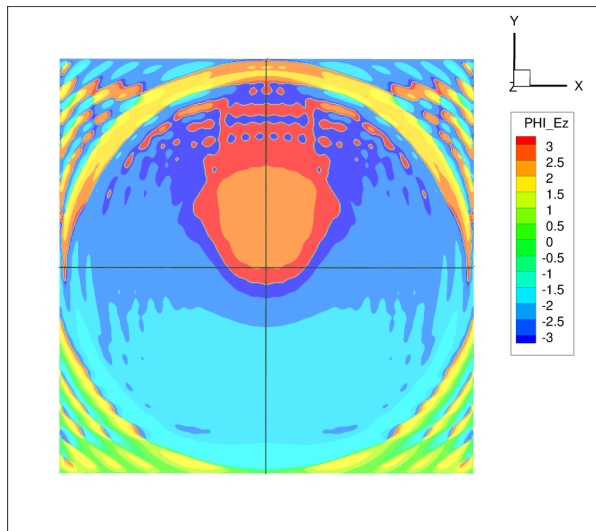
проходящих и отраженных от параллельных границ (рис. 73,б). В нижней части можно видеть узкую горизонтальную полосу — место излучателя электромагнитного поля (рис. 73,в,г). В центральной части (рис. 73,г) заметно утолщение цветной области с резкими горизонтальными границами — место занимаемое НЖК. Преимущество в величине амплитуды имеет компонента E_y (рис. 73,б), так как в расчете задавался пучок, поляризованный вдоль оси O_y . В области, занятой НЖК, компонента E_z (рис. 73,в,г) имеет большие значения (при том, что задавался пучок, где E_z значительно меньше основной компоненты: $E_y \sim 1$).



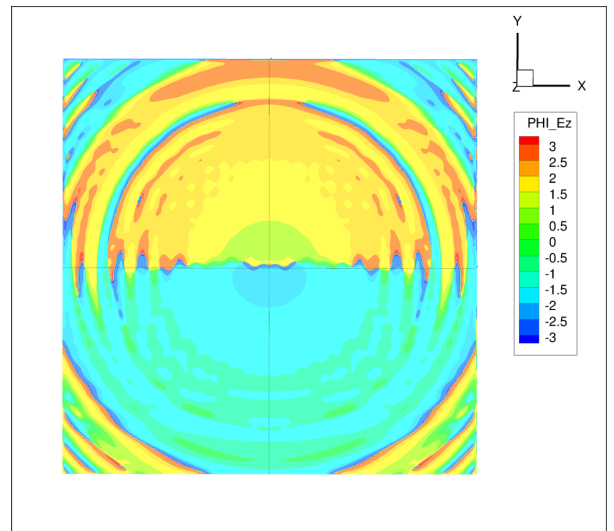
(а) фаза E_x (горизонтальное сечение пересекает полость с НЖК)



(б) фаза E_y (горизонтальное сечение пересекает полость с НЖК)



(в) фаза E_z (горизонтальное сечение пересекает полость с НЖК)

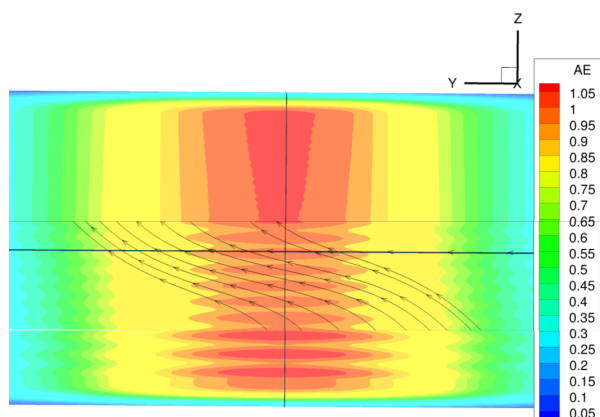


(г) фаза E_z (горизонтальное сечение выше полости с НЖК)

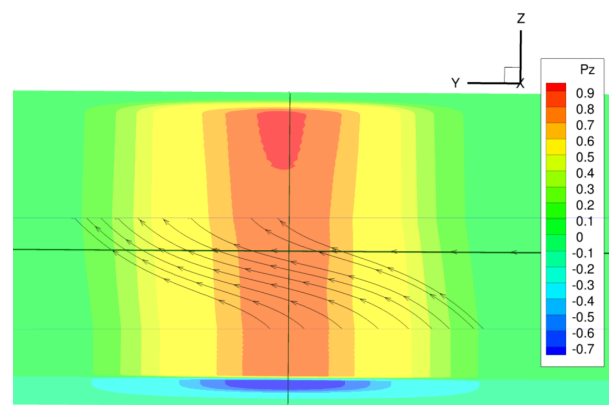
Рис. 74: Фаза компонент электрического поля в горизонтальных сечениях

Если принять во внимание «фазовую топологию распределений», под которой в данном случае понимается характерный вид фазовой картины в горизонтальном сечении, заключающийся в том, что компонента с осевой симметрией имеет фазовое распределение в виде концентрических окружностей с общим центром на оси пучка (рис. 74, б), а компонента с антисимметрией относительно плоскости имеет фазовое распределение в виде двух полуколец, разделенных центральной линией на две области, отличающиеся противоположным по знаку значением фазы (цветом) (рис. 74, а), то можно также заметить, что компонента E_z (рис. 74, в, г)

распределена качественно отлично от компонент E_x (рис. 74, а) и E_y (рис. 74, б) — в области НЖК компонента E_z (рис. 74, в), хоть и не имеет осевой симметрии, но распределение топологически схоже с распределением имеющим осевую симметрию, а вне этой области оно топологически схоже с распределениями, имеющими антисимметрию относительно плоскости, с нулевым значением амплитудного значения в центре, тогда как компонента E_x всюду распределена топологически схожим образом с распределениями, антисимметричными относительно плоскости, а E_y — с распределениями с осевой симметрией.



(а) Распределение максимального за период колебаний значения вектора электрического поля и линии, касательные к вектору \mathbf{n} , ограниченные областью, занятой НЖК



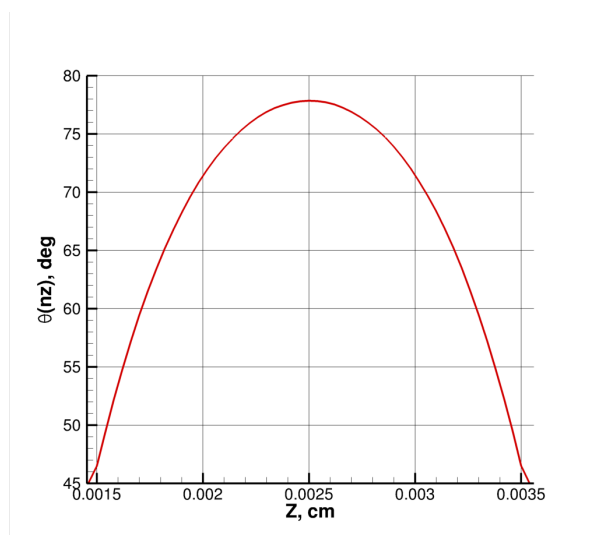
(б) Распределение z -компоненты вектора Пойнтинга и линии, касательные к вектору \mathbf{n} , ограниченные областью, занятой НЖК

Рис. 75: Отдельные параметры электромагнитного поля пучка и распределение вектора \mathbf{n} в центральном продольном сечении

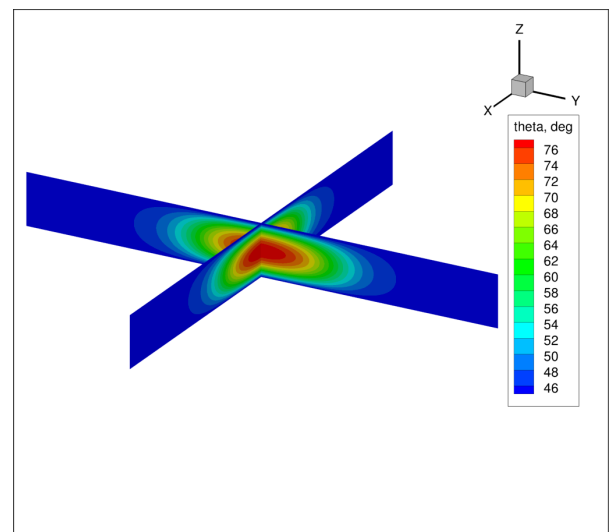
Из распределения параметров электромагнитного поля пучка (рис. 75) можно видеть, что в результате прохождения слоя НЖК пучок отклоняется от оси O_z в сторону роста координаты на оси O_y (на рисунке — влево), а также образует в объеме стоячую волну, за счет отражений от двух горизонтальных границ, играющих роль резонатора. Также можно заметить, что в пучке с ростом координаты z увеличивается значение поля на оси пучка в области за слоем НЖК, что указывает на фокусировку пучка. С другой стороны можно видеть, что вектор \mathbf{n} в центре области, занятой НЖК, существенно отклоняется от первоначального распределения ($n_y = \sin \pi/4$, $n_z = \cos \pi/4$) от оси O_z в сторону оси O_y , при этом вблизи

горизонтальных границ объема, занятого НЖК, за счет жестких граничных условий, вектор \mathbf{n} отклоняется незначительно, оставаясь близким к первоначальному распределению.

Более детально распределение вектора \mathbf{n} представлено на рис. 76. С учетом того, что компонента $n_x \sim 0$, достаточно представлять единичный вектор одним параметром — углом между вектором \mathbf{n} и осью O_z : $\theta = \arccos(|n_z|)$. Можно видеть, что за счет прохождения пучка электромагнитного излучения, вектор \mathbf{n} отклоняется от O_z в центре области почти до 80° , при том, что начальное задаваемое отклонение составляет в 45° (рис. 76, а). Таким образом пучок деформирует поле вектора \mathbf{n} , и горизонтальные размеры области деформированного поля вектора \mathbf{n} соотносятся с поперечным размером пучка электромагнитного поля (рис. 76, б).



(а) вдоль оси O_z в пределах дискообразной области, занятой НЖК



(б) в центральных продольных сечениях дискообразной области, занятой НЖК

Рис. 76: Распределение угла между осью O_z и вектором \mathbf{n}

Так как $\epsilon_{\parallel} > \epsilon_{\perp}$, а электрический вектор \mathbf{E} обычно направлен преимущественно перпендикулярно направлению распространения, и, таким образом, при отклонении вектора \mathbf{n} в сторону электрического вектора \mathbf{E} , должна увеличиваться условная (относительно направления распространения) диэлектрическая проницаемость среды $\tilde{\epsilon}$: $|\mathbf{D}| = \tilde{\epsilon}|\mathbf{E}|$, то в рамках моделируемой задачи, в свою очередь, за счет деформации поля вектора \mathbf{n} (поворота вектора в локальной области), образуется локальная область с повышенной условной диэлектрической проница-

емостью $\tilde{\epsilon}$, в некотором смысле играющая роль диэлектрической линзы. Так объясняется в литературе явление самофокусировки пучка при прохождении слоя НЖК.

Обнаруживать явление самофокусировки в численных расчетах принято по изменению величины энергетических параметров пучка (амплитуда, плотность энергии, компоненты вектора Пойнтинга) на оси пучка с ростом координаты вдоль распространения пучка. Однако при прохождении толщины слоя НЖК, сопоставимого с несколькими длинами волн излучения, как в данной модельной задаче, энергетические параметры излучения изменяются незначительно, тогда как фазовые распределения отображают самофокусировку более явно. На рис. 77 распределения фазы максимального значения вектора электрического поля в зависимости от z -координаты указывают, что первоначально плоский волновой фронт пучка после прохождения через слой НЖК представляет собой вогнутую поверхность (т.к. выпуклость значения фазы на горизонтальной прямой означает вогнутость изоповерхности фазы), из чего можно сделать вывод о присутствии самофокусировки излучения.

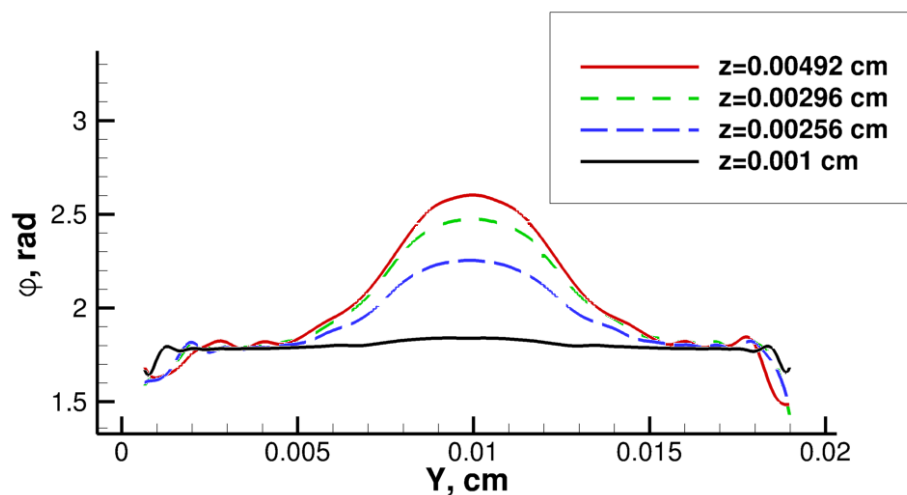


Рис. 77: Распределение фазы максимального электрического поля в одномерных поперечных (горизонтальных) центральных сечениях на различных высотах, черная линия — до НЖК, красная линия — после НЖК

Можно сделать вывод, что основную роль в явлении самософокусировки играет форма и размер переходной области деформации НЖК («приповерхност-

ный слой»). На фокусировку могут влиять два эффекта: фокусировка за счет неравномерной оптической плотности, вызванная разницей в набегах фазы в оптических путях: в центре и на боковом краю области (боковая часть «приповерхностного слоя»), фокусировка, вызванная преломлением излучения на границе оптических сред при неплоской форме диэлектрической линзы («приповерхностный слой» вблизи горизонтальных границ). Другими словами, плоская электромагнитная волна не сможет вызвать эффект самофокусировки, так как будет единообразно, без пространственных неоднородностей в горизонтальных направлениях, деформировать НЖК. На этом основании можно предполагать, что, чем пучок шире, тем проявление самофокусировки должно выражаться менее.

Одно из отличий модельной задачи от задачи из статьи Б.Я. Зельдовича и Н.В. Табиряна [50] состоит в том, что здесь, в модельной задаче, смоделирован узкий пучок, а в статье рассматривался широкий пучок.

Следует отметить, что величина $|\mathbf{E}|_{max}$, задаваемая в расчете, слишком велика для реальных экспериментов, однако при меньших значениях, эффект самофокусировки в расчете наблюдался слабо. Это вызвано влиянием граничных условий на сопротивление деформации вектора \mathbf{n} за счет упругих сил, задаваемых в уравнении ориентационной динамики константами Франка. Справедливо полагать, что, если увеличить толщину слоя НЖК, то самофокусировку будут вызывать менее мощные пучки.

Также следует отметить, что поверхности стекла в моделируемой задаче задавались горизонтальными (горизонтальные границы объема, занятого НЖК), в отличие от задачи из статьи [50], где не только вектор \mathbf{n} имел с осью O_z угол, равный $\pi/4$, а имела общий угол наклона, по отношению к направлению лазерного пучка, целиком вся экспериментальная кювета, составленная из двух стеклянных пластин и слоя НЖК между ними. Однако, для исследования возможности численно описать с помощью уравнения ориентационной динамики НЖК явление самофокусировки это отличие не считалось определяющим. С другой стороны, в численном решении модельной задачи, где поверхность стекла горизонтальна, явно видно влияние поля вектора \mathbf{n} на направление распространения пучка — тут

нельзя говорить, что пучок изменил направление в силу преломления на границе изотропных сред.

Таким образом, с помощью численного расчета, основанного на последовательном решении уравнений Максвелла и уравнения ориентационной динамики НЖК, показано согласованное с экспериментами поведение взаимодействия НЖК и пучка электромагнитного излучения, заключающееся в том, что узкий пучок электромагнитного излучения может деформировать НЖК вблизи оси пучка, а деформированная область, в свою очередь, способна вызвать фокусировку пучка (самофокусировку). Также отмечено, что НЖК может наклонять весь пучок на некоторый угол, что вообще говоря, следует учитывать при оценочных вычислениях.

Заключение

В данной работе:

1. Разработан код для расчета поглощения световых лучей металлической поверхностью с учетом переотражений.
2. Представлен пример расчета, в котором учет отражений вносит существенное изменение в картину распределения поглощенной мощности. На основании примера сделан вывод, что в общем случае нельзя пренебрегать отраженным излучением — необходимо тщательно обосновывать подобные пренебрежения.
3. Реализован и верифицирован расчетный код для решения уравнений Максвелла для анизотропной пространственно неоднородной среды на современных многопроцессорных ЭВМ. Код позволяет решать задачи воздействия вещества на излучение с высоким пространственным разрешением.
4. В виду малого количества аналитических задач для верификации анизотропного кода FDTD предложено использовать аналитическую задачу о падении по нормали плоской волны на слой холестерического жидкого кристалла. В этой связи аналитическое решение задачи подробно описано.
5. Предложен и реализован метод генерации электромагнитного излучения в коде FDTD, использующий ограниченную площадку с необходимостью задания всего двух компонент электромагнитного поля на плоскости.
6. Реализована генерация пучка как в приближенном решении уравнений Максвелла — в виде «гауссова пучка», так и в аналитически точном решении — в виде «собственных мод оптоволокна». В виде «собственных мод оптоволокна» пучок генерируется впервые.
7. На конкретной задаче о сверлении отверстия лазерным лучом сравнены два метода. Показано, что метод FDTD, решающий уравнения Максвелла, учи-

тывает интерференцию, в отличие от метода лучей, использующего положения геометрической оптики. Методы дают схожие результаты в тех областях расчета, где радиус кривизны поверхности много больше длины волны.

8. В задаче о лазерном спекании слоя порошка заострено внимание на двух явлениях, участвующих в процессе распределения поглощенной мощности: скин-эффект и фокусировка. Предложена физическая модель процесса: в случае малой толщины скин-слоя энергия поглощается на поверхности сферических частиц порошка, в случае большой толщины скин-слоя, энергия фокусируется в центре частицы. Таким образом, равномерным нагревом частиц вещества с заданной поверхностью, проводимостью и диэлектрической проницаемостью, можно управлять с помощью длины волны излучения — чем длина волны меньше, тем меньше толщина скин-слоя.
9. Моделированием прохождения пучка излучения через полости различных форм, заполненные жидким кристаллом, показано, что боковая поверхность цилиндрической полости фокусирует излучение, что влечет рассеивание мощности излучения. Сделан вывод, что в миниатюрных системах целесообразнее использовать полость с плоскими стенками, перпендикулярными направлению распространения излучения.
10. Моделированием прохождения пучка излучения через слои различных толщин, заполненные жидким кристаллом с линейной дисклинацией, показано, что имеется возможность управления параметрами пучка излучения, так как при прохождении слоя изменяется момент импульса пучка в зависимости от толщины слоя и от силы дисклинации.
11. Для анализа момента импульса пучка электромагнитного поля впервые предложена фаза экстремального значения вектора электрического поля.
12. Для удовлетворения условия $|\mathbf{n}| = 1$ при численном решении «релаксации директора» предложено рассчитывать изменение вектора \mathbf{n} по формуле чистого поворота.

13. Для верификации кода «релаксации директора» предложено использовать свойство электроориентационного эффекта выстраивать вектор \mathbf{n} вдоль большой оси эллипса, описываемого электрическим вектором поля пучка. С целью верификации в задаче полагаются равными нулю упругие константы Франка, задается внешнее аналитически известное электромагнитное поле и после установления расчета сравнивается направление рассчитанного численно вектора \mathbf{n} с направлением большой оси эллипса поля $\hat{\mathbf{E}}$, рассчитанной с помощью формул (3.4, 3.5).
14. В методе «совместного прохождения света и релаксации директора» предложено ограничивать временной шаг посредством задания максимально допустимого угла поворота директора за временной шаг α_{max} . Из-за отсутствия аналитических выражений для α_{max} , для определения величины α_{max} предложено использовать прямой численный расчет, опираясь на невязку.
15. Предложены критерии сходимости расчета «совместного прохождения света и релаксации директора».
16. Предложена формула для нахождения вектора, среднего для набора неполярных векторов.
17. Показано, что на расходимость расчетов влияет совместно и поляризация пучка света, и знак диэлектрической анизотропии ϵ_a .
18. Проведено сравнение численных расчетов «совместного прохождения света и релаксации директора» с аналитической оценкой из статьи Б.Я. Зельдовича и Н.В. Табиряна [50]. Показана важность численных расчетов с учетом взаимного влияния среды НЖК и электромагнитного поля пучка излучения.
19. С помощью численного расчета, основанном на решении уравнений Максвелла и уравнения ориентационной динамики нематического жидкого кристалла, показано, что узкий пучок электромагнитного излучения может деформировать нематический жидкий кристалл так, что деформированная область приводит к фокусировке пучка.

Список литературы

1. Крюков П.Г. Лазер — новый источник света. М.: Бюро Квантум, 2009. 176 с.
2. Бертолотти М. История лазера. М.: Долгопрудный: Интеллект, 2011. 336 с.
3. Оришич А.М., Фомин В.М. Актуальные проблемы лазерной резки металлов. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2012. 176 с.
4. Kleman M., Lavrentovich O.D. Soft Matter Physics. New York: Springer, 2003. 637 p.
5. Блинов Л.М. Жидкие кристаллы: структура и свойства. М.: Либроком, 2013. 480 с.
6. Томилин М.Г., Невская Г.Е. Дисплеи на жидких кристаллах. СПб.: СПбГУ, ИТМО, 2010. 108 с.
7. Yang D.-K., Wu S.-T. Fundamentals of Liquid Crystal Devices, 2nd ed. J. Wiley & Sons. 591 p.
8. Vázquez García C., Pérez Garcilópez I., Contreras Lallana P., Vinouze B., Fracasso B. Liquid crystal optical switches. In: Optical Switches. Woodhead Publ., 2010, pp. 206–240.
9. Nyushkov B.N., Pivtsov V.S., Trashkeev S.I., Denisov V.I., Bagayev S.N. Fiber laser systems for applied metrology and photonics. In: Russian-Chinese Workshop on Laser Physics and Photonics (Novosibirsk, Russia, 26–30 August 2015). Tech. Digest. Novosibirsk, Inst. Laser Phys, 2015, pp. 69–70.
10. Trashkeev S.I., Nyushkov B.N., Galev R.V., Kolker D.B., Denisov V.I. Optical trigger based on a fiber-coupled liquid crystal. In: 17th International Conference “Laser Optics 2016” (St. Petersburg, Russia, June 27–July 1, 2016), IEEE, 2016, pp. 69–70.
11. Čancčula M., Ravnik M., Žumer S. Generation of vector beams with liquid crystal disclination lines // Phys. Rev. E. 2014. Vol. 90. 022503.
12. Тамм И.Е. Основы теории электричества. М.: Физматлит. 2003. 615 с.
13. Сонин А.С. Введение в физику жидких кристаллов. М.: Наука, 1983. 320 с.
14. Yee K.S. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell’s equations in isotropic media // IEEE Transactions on Antennas and

- Propagation. 1966. Vol. 14(3). P. 302–307.
15. Taflove A., Johnson S.G., Oskooi A. *Advances in FDTD Computational Electrodynamics: Photonics and Nanotechnology*. Boston, MA et al.: Artech House, Inc. 2013. 638 p.
 16. Oskooi A.F., Roundy D., Ibanescu M., Bermel P., Joannopoulos J. D., Johnson S.G. MEEP: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method // *Comput. Phys. Commun.* 2010. Vol. 181. pp. 687–702. См. также <https://meep.readthedocs.io/en/latest/>.
 17. Liebig T., Rennings A., Held S., Erni D. OpenEMS — a free and open source equivalent-circuit (EC) FDTD simulation platform supporting cylindrical coordinates suitable for the analysis of traveling wave MRI applications // *Int. J. Num. Modelling: Electronic Networks, Devices and Fields*. 2012. Vol. 26, No. 6. P. 680–696. См. также <https://openems.de>.
 18. Klapetek P., Valtr M. Near-field optical microscopy simulations using graphics processing units // *Surf. Interface Analysis*. 2010. Vol. 42. P. 1109–1113. См. также <http://gsvit.net>.
 19. Schneider J., Hudson S. The finite-difference time-domain method applied to anisotropic material // *IEEE Trans. Antennas Propag.* 1993. Vol. 41. pp. 994–999.
 20. A. Taflove, S. Hagness. *Computational electrodynamics: The finitedifference time-domain method*. Boston: Artech House Publishers, 2005. 1006 p.
 21. Kogelnik H., Li T. Laser beams and resonators // *Applied Optics*. 1966. Vol. 5. pp. 1550-1567.
 22. Борн М., Вольф Э. *ОСНОВЫ ОПТИКИ*. М.: Наука. 1973. 720 с.
 23. Orishich A.M., Golyshv A.A., Shulyatyev V.B., Galev R.V., Kudryavtsev A.N. Beam polarization effect on the surface quality during steel cutting by a CO2 laser // *Journal of Laser Applications*. 2018. Vol. 30. pp. 1-7.
 24. Amara E. H., Kheloufi K., Tamsaout T., Fabbro R., Hirano K. Numerical investigations on high-power laser cutting of metals // *Applied Physics A*. 2015. Vol. 119. pp. 1245-1260.
 25. Кривилев М. Д., Харанжевский Е. В., Гордеев Г. А., Анкудинов В. Е. Управ-

- ление лазерным спеканием металлических порошковых смесей // Управление техническими системами и технологическими процессами. Вып. 31. С. 299-322.
26. Гусаров А.В., Ковалев. Е.П. Эффективная теплопроводность свободно насыпанных и слабо спеченных порошков. I. Модель // Физика и химия обработки материалов. 2009. №1, С.70-82.
27. Гусаров А.В., Ковалев. Е.П. Эффективная теплопроводность свободно насыпанных и слабо спеченных порошков. II. Анализ экспериментальных данных // Физика и химия обработки материалов. 2009. №2, С.66-71.
28. McVey R. W., Melnychuk R. M., Todd J. A., Martukanitz R. P. Absorption of laser irradiation in a porous powder layer. // Journal of Laser Applications. 2007. Vol. 19, pp. 214-224.
29. Клеман М., Лаврентович О.Д. Основы физики частично упорядоченных сред. М.: Физматлит, 2007. 679 с.
30. Конколович А.В., Пресняков В.В., Зырянов В.Я., Лойко В.А., Шабанов В.Ф. Интерференционное гашение света, проходящего через монослойную пленку капсулированных полимером нематических жидких кристаллов // Письма в ЖЭТФ. 2000. Т. 71, Вып. 12. С.710-713.
31. де Жен. П. Физика жидких кристаллов. М.: Мир. 1977. 400 с.
32. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: Учеб. пособ.: Для вузов. В 10 т. Т VII. Теория упругости. М.: Физматлит. 2003. 264 с.
33. Трашкеев С.И., Клементьев В.М., Поздняков Г.А. Высокоэффективная генерация разностных частот нематическим жидким кристаллом // Квантовая электроника. 2008. Т. 38, С. 373–376.
34. Coles H. Morris S. Liquid-crystal lasers // Nature photonics. 2010. Vol. 4. pp. 676–685.
35. Gunyakov V.A., Sutormin V.S., Myslivets S.A., Shabanov V.F., Zyryanov V.Ya. Synchronously controlled optical modes in the transmittance and reflectance spectra of multilayer photonic structure with dual-frequency nematic liquid crystal // Phys. Rev. E. 2022. Vol. 105. Iss. 2. 024702. 7 p.

36. Нюшков Б.Н., Трашкеев С.И., Клементьев В.М., Пивцов В.С., Кобцев С.М. Генерация гармоник и суперконтинуума в нематических жидких кристаллах // Квантовая электроника. 2013. Т. 43. С. 107–113.
37. Nyushkov B.N., Pivtsov V.S., Trashkeev S.I., Denisov V.I., Bagayev S.N. Fiber laser systems for applied metrology and photonics // Russian-Chinese Workshop on Laser Physics and Photonics. Novosibirsk, Russia, August 26-30 2015. pp. 69-70.
38. S.I.Trashkeev, B.N. Nyushkov, R.V. Galev, D.B. Kolker, V.I. Denisov Optical trigger based on a fiber-coupled liquid crystal // 17-th International Conference «Laser Optics 2016». St. Petersburg, Russia, 27 June - 1 July, 2016. pp. 69-70.
39. Čančula M., Ravnik M., Žumer S. Generation of vector beams with liquid crystal disclination lines // Physical Review E. 2014. Vol. 90. pp. 022503.
40. Franke-Arnold S., Allen L., Padgett M. Advances in optical angular momentum // Laser & Photon Rev. 2008. Vol. 2. pp. 299-313.
41. Yao A. M. & Padgett M. J. Orbital angular momentum: origins, behavior and applications // Adv. Opt. Photon. 2011. Vol. 3. pp. 161–204.
42. Ritsch-Marte M. Orbital angular momentum light in microscopy // Phil. Trans. R. Soc. A. 2017. Vol. 375. pp. 20150437.
43. Karimi E., Piccirillo B., Nagali E., Marrucci L., Santamato E. Efficient generation and sorting of orbital angular momentum eigenmodes of light by thermally tuned q-plates // Appl. Phys. Lett. 2009. Vol. 94. pp. 231124.
44. Котляр В.В., Ковалёв А.А., Порфирьев А.П. Орбитальный угловой момент эллиптического оптического вихря, внедренного в гауссов пучок // Компьютерная оптика. 2017. Т.41. С. 330-337.
45. Khoo I.C. Nonlinear optics of liquid crystalline materials // Phys. Rep. 2009. Vol. 471. P. 221–267.
46. Зельдович Б.Я., Пилипецкий Н.Ф., Сухов А.В., Табирян Н.В. Гигантская оптическая нелинейность в мезофазе НЖК // Письма в ЖЭТФ. 1980. Т. 31, вып. 5. С. 287–292.
47. Золотко А.С., Китаева В.Ф., Кроо Н., Соболев Н.Н., Чиллаг Л. Влияние поля световой волны на нематическую фазу жидкого кристалла ОЦБФ // Письма в

- ЖЭТФ. 1980. Т. 32, вып. 2. С. 170–174.
48. Assanto G., Peccianti M. Spatial solitons in nematic liquid crystals // *IEEE J. Quant. Electronics*. 2003. Vol. 39, No. 1. P. 13–21.
 49. Demeter G., Krimer D.O. Light-induced dynamics in nematic liquid crystals — a fascinating world of complex nonlinear phenomena // *Phys. Rep.* 2007. Vol. 448. P. 133–162.
 50. Зельдович Б.Я., Табирян Н.В. Ориентационная оптическая нелинейность жидких кристаллов // *УФН*. 1985. Т. 147. С. 633–674.
 51. Трашкеев С.И. Аналитические и численные методы расчета ориентационной нелинейности жидких кристаллов: Дисс. ... канд. физ.-мат. наук. — Новосибирск: ИТПМ СО РАН, 1989.
 52. Pyina I., Cox S.J., Sluckin T.J. A computational approach to the optical Fredericksz transition // *Optics Communications*. 2006. Vol 260. pp. 474–480.
 53. Čančula M., Ravnik M., Muševič I., Žumer S. Liquid microlenses and waveguides from bulk nematic birefringent profiles // *Optics Express*. 2016. Vol. 24. pp. 270613.
 54. Блинов Л.М. Электро- и магнитооптика жидких кристаллов. М.: Наука. 1978. 384 с.
 55. Izdebskaya Y.V., Desyatnikov A.S., Assanto G., Kivshar Y.S. Multimode nematic waveguides // *Optics Letters*. 2011. Vol. 36. pp. 184-186.
 56. Alberucci A., Assanto G. Modeling Nematic Propagation // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 2013. Vol. 572. pp. 2-12.
 57. Laudyn U.A., Kwaśny M., Karpierz M.A., Assanto G. Electro-optic quenching of nematic fluctuations // *Optics Letters*. 2019. Vol. 44. pp. 167-170.
 58. Никольский В.В., Никольская Т.И. Электродинамика и распространение радиоволн. М.: Наука. 1989. 544 с.
 59. Федоров Н.Н. Основы электродинамики. М.: Высшая школа. 1980. 399 с.
 60. Ватсон Г.Н. Теория бесселевых функций. Часть 1. ИЛ 1949.
 61. Berreman D.W. Optics in stratified and anisotropic media: 4×4-matrix formulation // *Journal of the Optical Society of America*. 1972. Vol. 62. pp. 502-510.

62. Kats E.I. Optical properties of cholesteric liquid crystals // Soviet Physics JETP. 1971. Vol. 32. pp. 1004-1007.
63. Wöhler H., Haas G., Fritsch M., Mlynski D. A. Faster 4×4 matrix method for uniaxial inhomogeneous media // J. Opt. Soc. Am. A. 1988. Vol. 5. pp. 1554-1557.

Приложение А

Аналитическое решение задачи распределения поля в оптоволоконне круглого сечения с сердцевинной

Задача распределения поля в оптоволоконне круглого сечения с сердцевинной (рис. 78) имеет точное аналитическое решение [58, 59]. Оптоволоконно состоит из

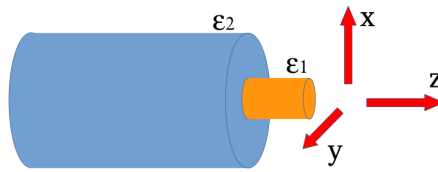


Рис. 78: Схема задачи собственных мод в оптоволоконне.

сердцевинной радиуса a с диэлектрической проницаемостью ϵ_1 и магнитной проницаемостью μ_1 и из оболочки бесконечного радиуса с диэлектрической проницаемостью ϵ_2 и магнитной проницаемостью μ_2 . Решаются уравнения Максвелла для однородной среды без сторонних токов и поглощения:

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \epsilon \mathbf{E}, & \operatorname{div} \mathbf{D} &= 0, & \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\ \mathbf{B} &= \mu \mathbf{H}, & \operatorname{div} \mathbf{B} &= 0, & \operatorname{rot} \mathbf{H} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}. \end{aligned}$$

Граничные условия (в цилиндрической системе координат):

- Компоненты поля на оси O_z — без особенностей,
- компоненты поля при $r \rightarrow \infty$ — интегрируемы с квадратом (энергия поля конечна),
- тангенциальные компоненты поля на поверхности цилиндра $r = a$ непрерывны:

$$\begin{aligned} E_{z,1} \Big|_{r=a} &= E_{z,2} \Big|_{r=a}, & E_{\varphi,1} \Big|_{r=a} &= E_{\varphi,2} \Big|_{r=a}, \\ H_{z,1} \Big|_{r=a} &= H_{z,2} \Big|_{r=a}, & H_{\varphi,1} \Big|_{r=a} &= H_{\varphi,2} \Big|_{r=a}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Предполагается, что поле периодически во времени всюду с единой частотой ω , периодически по z и, в силу непрерывности тангенциальных компонент, пространственная частота k_z для всех компонент поля одинакова и для оболочки и для сердцевин. То есть, компоненты поля имеют вид:

$$\mathbf{E}(x, y, z, t) = \begin{pmatrix} e_x(x, y) \\ e_y(x, y) \\ e_z(x, y) \end{pmatrix} e^{ik_z z - i\omega t}, \quad \mathbf{B}(x, y, z, t) = \begin{pmatrix} b_x(x, y) \\ b_y(x, y) \\ b_z(x, y) \end{pmatrix} e^{ik_z z - i\omega t}. \quad (4.20)$$

Подстановка выражений (4.20) в роторные уравнения Максвелла дает возможность выразить поперечные компоненты поля \mathbf{e}_\perp и \mathbf{b}_\perp , через продольные компоненты e_z и b_z :

$$\mathbf{b}_\perp = \frac{i}{\gamma^2} \left\{ k_z \text{grad}_\perp b_z + \varepsilon \mu \frac{\omega}{c} [\hat{\mathbf{z}} \times \text{grad}_\perp e_z] \right\}, \quad (4.21)$$

$$\mathbf{e}_\perp = \frac{i}{\gamma^2} \left\{ k_z \text{grad}_\perp e_z - \frac{\omega}{c} [\hat{\mathbf{z}} \times \text{grad}_\perp b_z] \right\}, \quad (4.22)$$

где имеют место следующие обозначения: $\hat{\mathbf{z}}$ — единичный вектор вдоль оси O_z ,

$$\text{grad}_\perp = \partial_x \hat{\mathbf{x}} + \partial_y \hat{\mathbf{y}}, \quad \gamma^2 = \varepsilon \mu \frac{\omega^2}{c^2} - k_z^2, \quad \mathbf{e}_\perp = e_x \hat{\mathbf{x}} + e_y \hat{\mathbf{y}}, \quad \mathbf{b}_\perp = b_x \hat{\mathbf{x}} + b_y \hat{\mathbf{y}}.$$

Кроме того, из этой же подстановки следуют уравнения на сами продольные компоненты:

$$\Delta_\perp e_z + \gamma^2 e_z = 0, \quad \Delta_\perp b_z + \gamma^2 b_z = 0, \quad (4.23)$$

где

$$\Delta_\perp = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}.$$

Обозначения grad_\perp и Δ_\perp обеспечивают удобство, связанное с постановкой задачи с граничными условиями в полярных координатах.

Так как оба уравнения (4.23) имеют один вид, то естественно переобозначить искомую функцию:

$$\Delta_\perp \psi + \gamma^2 \psi = 0. \quad (4.24)$$

В полярных координатах оператор Δ_\perp имеет вид:

$$\Delta_\perp = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

Тогда уравнение (4.24) в полярных координатах:

$$r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi + r \frac{\partial}{\partial r} \psi + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \psi + r^2 \left(\frac{\varepsilon \mu}{c^2} \omega^2 - k_z^2 \right) \psi = 0. \quad (4.25)$$

Подстановкой $\psi = u(r)v(\varphi)$ в (4.25) переменные разделяются:

$$\frac{1}{u(r)} r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} u(r) + \frac{1}{u(r)} r \frac{\partial}{\partial r} u(r) + r^2 \left(\frac{\varepsilon \mu}{c^2} \omega^2 - k_z^2 \right) = -\frac{1}{v(\varphi)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} v(\varphi). \quad (4.26)$$

Обозначив константу равенства символом ν^2 получаем два уравнения:

$$-\frac{1}{v(\varphi)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} v(\varphi) = \nu^2,$$

$$\frac{1}{u(r)} r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} u(r) + \frac{1}{u(r)} r \frac{\partial}{\partial r} u(r) + r^2 \left(\frac{\varepsilon \mu}{c^2} \omega^2 - k_z^2 \right) = \nu^2.$$

Первое уравнение имеет решение: $v(\varphi) = \exp\{i\nu\varphi\}$. Из стандартного для аксиальных зависимостей периодического условия $v(\varphi) = v(\varphi + 2\pi)$ следует, что ν — целое: $\exp\{i\nu\varphi\} = \exp\{i\nu(\varphi + 2\pi)\} \Rightarrow 1 = \exp\{i\nu 2\pi\} = \cos(2\pi\nu) + i\sin(2\pi\nu) \Rightarrow \cos(2\pi\nu) = 1, \sin(2\pi\nu) = 0 \Rightarrow \nu = \dots - 1, 0, 1, \dots$ Знак ν определяет направление вращения.

Второе уравнение:

$$r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} u(r) + r \frac{\partial}{\partial r} u(r) + \left[r^2 \left(\frac{\varepsilon \mu}{c^2} \omega^2 - k_z^2 \right) - \nu^2 \right] u(r) = 0,$$

сводится либо к уравнению Бесселя:

$$\rho_1^2 \frac{d^2 u}{d\rho_1^2} + \rho_1 \frac{du}{d\rho_1} + (\rho_1^2 - \nu^2)u = 0, \text{ при } \rho_1 = r \sqrt{\frac{\varepsilon_1 \mu_1}{c^2} \omega^2 - k_z^2},$$

либо к модифицированному уравнению Бесселя (полученное из уравнения Бесселя от чисто мнимого аргумента):

$$\rho_2^2 \frac{d^2 u}{d\rho_2^2} + \rho_2 \frac{du}{d\rho_2} - (\rho_2^2 + \nu^2)u = 0, \text{ при } \rho_2 = r \sqrt{k_z^2 - \frac{\varepsilon_2 \mu_2}{c^2} \omega^2}.$$

Решениями уравнения Бесселя являются функции Бесселя J_ν и функции Неймана Y_ν (рис. 79) Решениями модифицированного уравнения Бесселя являются функции Инфельда I_ν (модифицированные функции Бесселя первого рода)

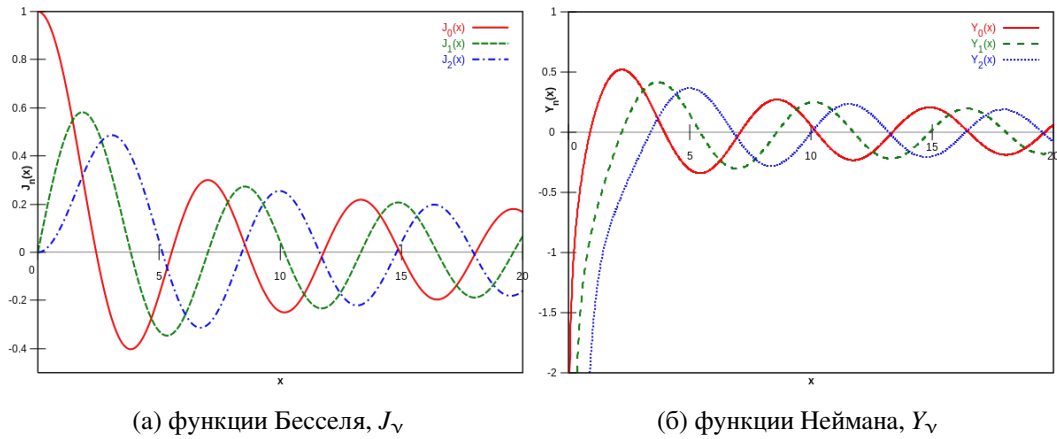


Рис. 79: Решения уравнения Бесселя.

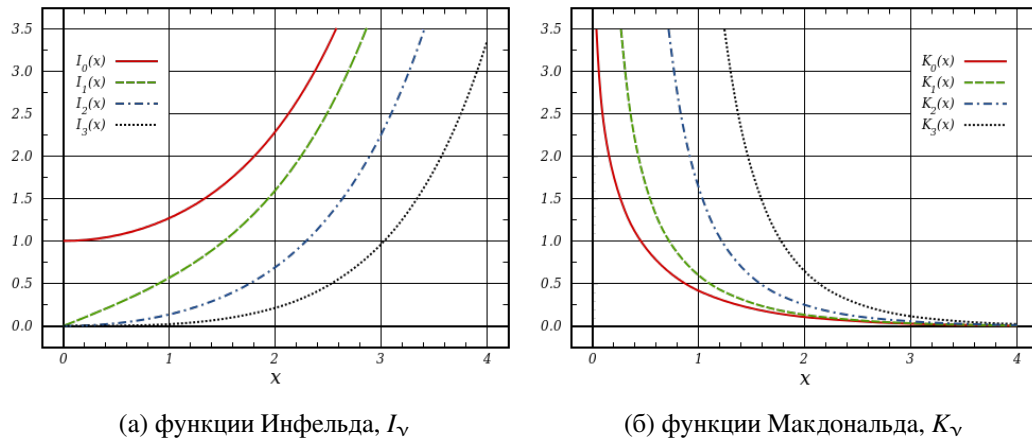


Рис. 80: Решения модифицированного уравнения Бесселя.

и функции Макдональда K_ν (модифицированные функции Бесселя второго рода) (рис. 79)

Согласно граничному условию в области «1» (сердцевина оптоволокна) функции должны быть без особенностей. Этому условию удовлетворяют функции Бесселя $J_\nu(\rho_1)$. Согласно граничному условию в области «2» (оболочка оптоволокна) функции должны интегрироваться с квадратом. Этому условию удовлетворяют функции Макдональда $K_\nu(\rho_2)$. При этом индекс ν — целый и неотрицательный.

Но так как в первом уравнении допускается отрицательный знак индекса ν , а во втором уравнении присутствует лишь ν^2 , далее индекс ν при функциях Бесселя и Макдональда берется по модулю, а сама величина ν допускается отрица-

тельной.

То есть, для удовлетворения граничных условий, предлагается комбинация решений: при $r < a$ — функция Бесселя: $J_{|\nu|}(\rho_1)$, при $r > a$ — функция Макдональда: $K_{|\nu|}(\rho_2)$.

Из предложенной комбинации решений следует, что $\varepsilon_1\mu_1 > \varepsilon_2\mu_2$ — сердцевина оптоволокна должна быть более оптически плотной, чем оболочка :

$$\rho_1 > 0 \Rightarrow \frac{\varepsilon_1\mu_1}{c^2}\omega^2 > k_z^2, \text{ или } \varepsilon_1\mu_1 > \frac{c^2k_z^2}{\omega^2}.$$

$$\rho_2 > 0 \Rightarrow k_z^2 > \frac{\varepsilon_2\mu_2}{c^2}\omega^2, \text{ или } \varepsilon_2\mu_2 < \frac{c^2k_z^2}{\omega^2}.$$

Введя обозначения:

$$\gamma^2 = \frac{\varepsilon_1\mu_1}{c^2}\omega^2 - k_z^2, \quad \kappa^2 = k_z^2 - \frac{\varepsilon_2\mu_2}{c^2}\omega^2, \quad (4.27)$$

продольные компоненты e_z, b_z , как решения уравнений (4.23), записываются в виде:

$$\begin{aligned} e_z &= A_e J_{|\nu|}(\gamma r) \exp\{i\nu\varphi\}, \text{ при } r < a, \\ e_z &= B_e K_{|\nu|}(\kappa r) \exp\{i\nu\varphi\}, \text{ при } r > a, \\ b_z &= A_b J_{|\nu|}(\gamma r) \exp\{i\nu\varphi\}, \text{ при } r < a, \\ b_z &= B_b K_{|\nu|}(\kappa r) \exp\{i\nu\varphi\}, \text{ при } r > a, \end{aligned} \quad (4.28)$$

где ν — целое.

Коэффициенты A_e, A_b, B_e, B_b находятся из граничных условий (4.19) — требования, в силу отсутствия на поверхности зарядов и токов, непрерывности тангенциальных компонент $e_{z,\varphi}, h_{z,\varphi}$ на границе раздела «сердцевина-оболочка»: $r = a$. При этом заметим, что граничные условия непрерывности нормальных компонент d_r, b_r удовлетворяются автоматически. Величины: ω, ν — считаются одинаковыми во всех областях пространства (ν — в силу непрерывности тангенциальных компонент полей на границе).

Далее, если k_z — одинаково в обеих средах (в силу непрерывности тангенциальных компонент полей), то из (4.27) следует связь между γ и κ :

$$\frac{\omega^2}{c^2} = \frac{\kappa^2 + \gamma^2}{\varepsilon_1\mu_1 - \varepsilon_2\mu_2}, \quad (4.29)$$

при этом

$$k_z^2 = \frac{\varepsilon_1 \mu_1 \kappa^2 + \varepsilon_2 \mu_2 \gamma^2}{\varepsilon_1 \mu_1 - \varepsilon_2 \mu_2}. \quad (4.30)$$

В выражения (4.21,4.22), записанные в цилиндрических координатах:

$$\begin{pmatrix} b_r \\ b_\varphi \end{pmatrix} = \frac{i}{\gamma^2} \left\{ k_z \begin{pmatrix} \partial_r \\ \frac{1}{r} \partial_\varphi \end{pmatrix} b_z + \varepsilon \mu \frac{\omega}{c} \begin{pmatrix} -\frac{1}{r} \partial_\varphi \\ \partial_r \end{pmatrix} e_z \right\},$$

$$\begin{pmatrix} e_r \\ e_\varphi \end{pmatrix} = \frac{i}{\gamma^2} \left\{ k_z \begin{pmatrix} \partial_r \\ \frac{1}{r} \partial_\varphi \end{pmatrix} e_z - \frac{\omega}{c} \begin{pmatrix} -\frac{1}{r} \partial_\varphi \\ \partial_r \end{pmatrix} b_z \right\},$$

подставляются выражения e_z, b_z .

Получаются выражения для поперечных компонент полей. При $r < a$:

$$\begin{pmatrix} b_r \\ b_\varphi \end{pmatrix} = \frac{i}{\gamma^2} \left\{ k_z \begin{pmatrix} A_b \gamma J'_{|\nu|}(\gamma r) \\ \frac{1}{r} i \nu A_b J_{|\nu|}(\gamma r) \end{pmatrix} + \varepsilon \mu \frac{\omega}{c} \begin{pmatrix} -\frac{1}{r} i \nu A_e J_{|\nu|}(\gamma r) \\ A_e \gamma J'_{|\nu|}(\gamma r) \end{pmatrix} \right\} \exp(i \nu \varphi), \quad (4.31)$$

$$\begin{pmatrix} e_r \\ e_\varphi \end{pmatrix} = \frac{i}{\gamma^2} \left\{ k_z \begin{pmatrix} A_e \gamma J'_{|\nu|}(\gamma r) \\ \frac{1}{r} i \nu A_e J_{|\nu|}(\gamma r) \end{pmatrix} - \frac{\omega}{c} \begin{pmatrix} -\frac{1}{r} A_b i \nu J_{|\nu|}(\gamma r) \\ A_b \gamma J'_{|\nu|}(\gamma r) \end{pmatrix} \right\} \exp(i \nu \varphi), \quad (4.32)$$

При $r > a$ (при этом дополнительно надо помнить про (4.27), откуда во второй среде следует заменить $\gamma^2 \rightarrow -\kappa^2$):

$$\begin{pmatrix} b_r \\ b_\varphi \end{pmatrix} = -\frac{i}{\kappa^2} \left\{ k_z \begin{pmatrix} B_b \kappa K'_{|\nu|}(\kappa r) \\ \frac{1}{r} i \nu B_b K_{|\nu|}(\kappa r) \end{pmatrix} + \varepsilon \mu \frac{\omega}{c} \begin{pmatrix} -\frac{1}{r} i \nu B_e K_{|\nu|}(\kappa r) \\ B_e \kappa K'_{|\nu|}(\kappa r) \end{pmatrix} \right\} \exp(i \nu \varphi), \quad (4.33)$$

$$\begin{pmatrix} e_r \\ e_\varphi \end{pmatrix} = -\frac{i}{\kappa^2} \left\{ k_z \begin{pmatrix} B_e \kappa K'_{|\nu|}(\kappa r) \\ \frac{1}{r} i \nu B_e K_{|\nu|}(\kappa r) \end{pmatrix} - \frac{\omega}{c} \begin{pmatrix} -\frac{1}{r} B_b i \nu K_{|\nu|}(\kappa r) \\ B_b \kappa K'_{|\nu|}(\kappa r) \end{pmatrix} \right\} \exp(i \nu \varphi). \quad (4.34)$$

Условие непрерывности тангенциальных компонент $e_{z,\varphi}$ и $h_{z,\varphi} = b_{z,\varphi}/\mu$ на

границе $r = a$ приводит к системе алгебраических уравнений (4.19):

$$\begin{pmatrix} J_{|\nu|}(x) & -K_{|\nu|}(y) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J_{|\nu|}(x)/\mu_1 & -K_{|\nu|}(y)/\mu_2 \\ \nu k_z J_{|\nu|}(x)/x^2 & \nu k_z K_{|\nu|}(y)/y^2 & i\frac{\omega}{c} J'_{|\nu|}(x)/x & i\frac{\omega}{c} K'_{|\nu|}(y)/y \\ i\varepsilon_1 \frac{\omega}{c} J'_{|\nu|}(x)/x & i\varepsilon_2 \frac{\omega}{c} K'_{|\nu|}(y)/y & -\frac{k_z \nu}{\mu_1} J_{|\nu|}(x)/x^2 & -\frac{\nu k_z}{\mu_2} K_{|\nu|}(y)/y^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_e \\ B_e \\ A_b \\ B_b \end{pmatrix} = 0, \quad (4.35)$$

где введены обозначения: $x = \gamma a$, $y = \kappa a$.

Для существования нетривиального решения, требуется, чтобы определитель равнялся нулю. При обозначениях:

$$f(x) = \frac{J'_{|\nu|}(x)}{xJ_{|\nu|}(x)}, \quad g(y) = \frac{K'_{|\nu|}(y)}{yK_{|\nu|}(y)}, \quad (4.36)$$

требование нулевого определителя имеет вид:

$$\frac{c^2 \nu^2 k_z^2}{\omega^2} \left(\frac{1}{y^2} + \frac{1}{x^2} \right)^2 = \varepsilon_2 \mu_2 g^2(y) + f(x)g(y) (\varepsilon_2 \mu_1 + \varepsilon_1 \mu_2) + \varepsilon_1 \mu_1 f^2(x),$$

которое с учетом (4.30) преобразуется к равенству

$$\frac{c^2 \nu^2}{\omega^2 a^2} \frac{\varepsilon_1 \mu_1 y^2 + \varepsilon_2 \mu_2 x^2}{\varepsilon_1 \mu_1 - \varepsilon_2 \mu_2} \left(\frac{1}{y^2} + \frac{1}{x^2} \right)^2 = [\varepsilon_2 g(y) + \varepsilon_1 f(x)] [\mu_2 g(y) + \mu_1 f(x)]. \quad (4.37)$$

Таким образом, аналитически решена задача нахождения компонент электромагнитного поля собственных мод в оптоволокне.

Алгоритм вычисления компонент поля на основании аналитического решения

1. *Задание параметров.* Задаются параметры, описанные в таблице 3. При задании параметров следует иметь ввиду, что для распространения волны в волноводе должно соблюдаться условие: $k_z^2 > 0$, из которого (опять же, как и ранее) следует, что сердцевина должна быть оптически плотнее оболочки:

$$k_z^2 = \frac{\varepsilon_1 \mu_1 y^2 + \varepsilon_2 \mu_2 x^2}{(\varepsilon_1 \mu_1 - \varepsilon_2 \mu_2) a^2} \geq 0 \Rightarrow \varepsilon_1 \mu_1 > \varepsilon_2 \mu_2.$$

Наименование	Обозначение
целое число оборотов по азимутальному углу	$\nu = \dots - 1, 0, 1 \dots$
диэлектрические и магнитные проницаемости (см рис.78)	$\varepsilon_1, \mu_1, \varepsilon_2, \mu_2$
частота	ω
радиус сердцевины	a

Таблица 3: Параметры для вычисления компонент полей собственных мод оптоволокна.

2. Поиск пар чисел (x, y) .

Пары чисел (x, y) находятся из системы уравнений:

$$\begin{cases} [\mu_2 g(y) + \mu_1 f(x)] [\varepsilon_2 g(y) + \varepsilon_1 f(x)] - \left(\frac{\varepsilon_1 \mu_1}{x^2} + \frac{\varepsilon_2 \mu_2}{y^2} \right) \left(\frac{1}{x^2} + \frac{1}{y^2} \right) \nu^2 = 0, \\ x^2 + y^2 = (\varepsilon_1 \mu_1 - \varepsilon_2 \mu_2) a^2 \frac{\omega^2}{c^2}, \end{cases} \quad (4.38)$$

при условии: $x \geq 0, y \geq 0$.

В обозначениях для $f(x), g(y)$ (4.36) присутствуют функции Бесселя $J_{|\nu|}(x)$ и Макдональда $K_{|\nu|}(y)$ вместе с производными. В данной работе значения функции Бесселя и функции Макдональда при индексе $\nu = 0, 1$: $J_0(x), J_1(x), K_0(y), K_1(y)$ вычисляются численно. Для $\nu > 1$ используются рекуррентные соотношения [60]:

$$J_{\nu+1}(x) = \frac{2\nu}{x} J_\nu(x) - J_{\nu-1}(x), \quad K_{\nu+1}(y) = \frac{2\nu}{y} K_\nu(y) + K_{\nu-1}(y).$$

Для вычисления производных используются соотношения [60]:

$$J'_\nu(x) = \frac{\nu}{x} J_\nu(x) - J_{\nu+1}(x), \quad K'_\nu(y) = \frac{\nu}{y} K_\nu(y) - K_{\nu+1}(y).$$

Далее, в первом уравнении системы (4.38) анализируется знак левой части (рис. 81(а)) при пробеге вдоль четверти окружности с центром в начале координат, соответствующей второму уравнению системы (4.38). В результате численного пробеге вдоль четверти окружности находятся сначала подходящие области, а после уточнения и сами точки (x, y) , удовлетворяющие с некоторой точностью и первому и второму уравнению (рис. 81(б)).

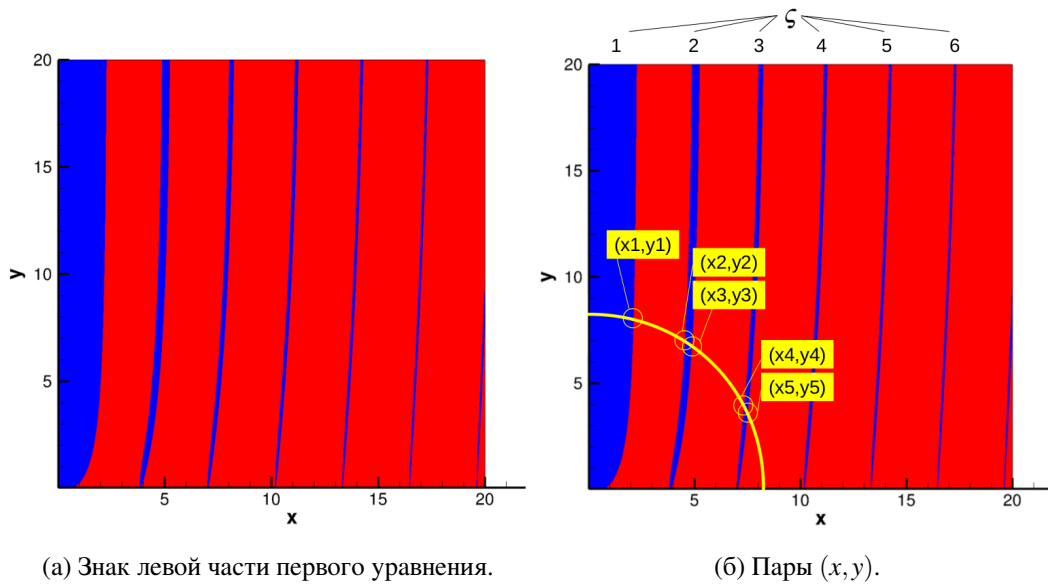


Рис. 81: К численному решению системы уравнений (4.38).

Здесь стоит заметить, что от радиуса окружности (см. второе уравнение (4.38)) зависит количество пар (x, y) . Радиус окружности определяется в частности частотой излучения ω . Возможно задать частоту настолько малой (или радиус сердцевины оптоволокна a), что окружность окажется внутри первой синей области и тогда не окажется ни одной пары (x, y) . При таких параметрах не существует ни одной моды, способной распространяться в оптоволокне. Возможно также подобрать параметры так, чтобы имелась только одна точка пересечения (x, y) — такое оптоволокно называют «одномодовым для некоторого диапазона частот» или, чаще, просто «одномодовым».

Набор решений системы (4.38) состоит из конечного количества точек (x, y) . Каждой точке (x, y) соответствует электромагнитное поле, называемое «собственной модой оптоволокна». Моду оптоволокна принято обозначать двумя буквами H, E и двумя индексами ν, ζ (см. рис. 81(б)). Каждому значению $\zeta > 1$ соответствует синяя область. Синяя область имеет две границы. Если выбранная точка (x, y) находится на левой границе, то буквы в обозначении моды имеют порядок EH , если точка (x, y) находится на правой границе, то буквы в обозначении моды имеют порядок HE . Например на рис. 81(б) ($\nu = 1$) отмечены точки (x_i, y_i) и этим точкам соответствуют моды в таком порядке: $HE_{11}, EH_{12}, HE_{12}, EH_{13}, HE_{13}$.

3. Вспомогательные вычисления.

Из известных пар (x, y) находятся величины:

$$\gamma = x/a,$$

$$\kappa = y/a,$$

$$k_z = \sqrt{\frac{\varepsilon_1 \mu_1 \kappa^2 + \varepsilon_2 \mu_2 \gamma^2}{\varepsilon_1 \mu_1 - \varepsilon_2 \mu_2}}.$$

4. Вычисление A_e, A_b, B_e, B_b .

Величины, вычисленные в предыдущих пунктах, подставляются в систему уравнений (4.35). Из решения системы уравнений находятся $A_{e,b}$ и $B_{e,b}$.

5. Компоненты поля в цилиндрической системе координат.

Компоненты поля собственных мод оптоволокна с сердцевиной радиуса a в цилиндрической системе координат вычисляются следующим образом. Продольные компоненты поля вычисляются по формулам (4.28). Поперечные компоненты поля при $r < a$ вычисляются по формулам (4.31, 4.32), при $r > a$ — по формулам (4.33, 4.34). Так получаются компоненты: $e_r, e_\varphi, e_z, b_r, b_\varphi, b_z$.

6. Компоненты поля в декартовой системе координат.

Компоненты некоторого вектора (ψ_x, ψ_y, ψ_z) в декартовой системе координат связаны с компонентами в цилиндрической системе координат выражением:

$$\begin{pmatrix} \psi_x \\ \psi_y \\ \psi_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_r \\ \psi_\varphi \\ \psi_z \end{pmatrix}.$$

Пользуясь этим выражением, находятся компоненты поля: $e_x, e_y, e_z, b_x, b_y, b_z$.

Для нахождения компонент $\mathbf{E}(x, y, z, t)$ и $\mathbf{B}(x, y, z, t)$, используются выражения (4.20).

На этом завершается алгоритм вычисления компонент поля собственных мод оптоволокна.

Приложение Б

Аналитическая задача о распространении плоской волны в холестерическом жидком кристалле (ХЖК) вдоль оси холестерической спирали

Ось холестерической спирали (рис. 82) называется такая линия в пространстве, на которую «наматывается» вектор-директор \mathbf{n} . Величиной q обозначается пространственная частота вращения директора.

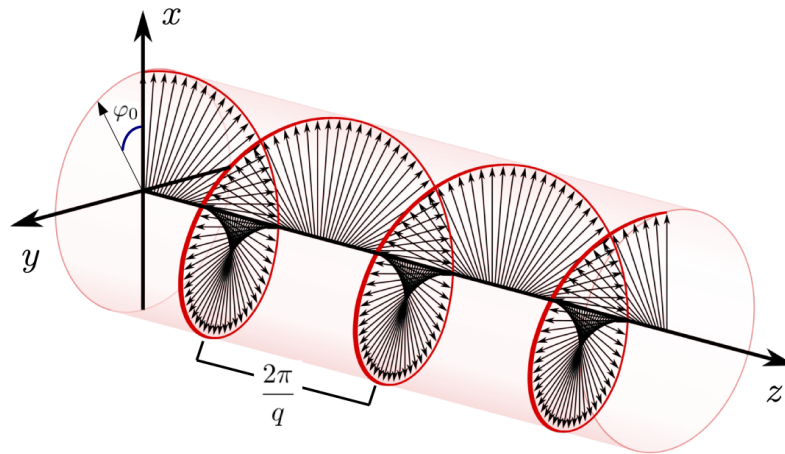


Рис. 82: Распределение \mathbf{n} в ХЖК. Ось холестерической спирали направлена вдоль O_z .

Если ось направить вдоль O_z , то в любой точке некоторой плоскости, параллельной O_{xy} , вектор-директор \mathbf{n} неизменен:

$$n_x(z) := \cos(qz + \varphi_0), \quad n_y(z) := \sin(qz + \varphi_0), \quad n_z(z) := 0, \quad (4.39)$$

где q, φ_0 – константы холестерической спирали. Именно таким пространственным распределением вектора \mathbf{n} и характеризуются жидкие кристаллы холестерического типа (ХЖК).

Задача о распространении плоской волны в ХЖК вдоль оси холестерической спирали в литературе решается с применением теоремы Флоке [61, 62, 63, 54]. Здесь же приведен другой ход решения (не встреченный в литературе для данной задачи), основанный на применении приема вращения системы координат син-

хронно с вращением вектора-директора. Кроме того, в тензорах диэлектрической и магнитной проницаемостей, переходя от вещественных чисел к комплексным, выписывается несколько более общий случай (по сравнению со встреченными в литературе решениями): анизотропия поглощения, как электрических (дихроизм), так и магнитных компонент поля, что может оказаться полезным при изучении свойств метаматериалов.

Задача формулируется следующим образом. Пусть среда описывается вектором-директором \mathbf{n} , распределенным согласно (4.39), и четырьмя комплексными числами: ε_{\perp} , ε_{\parallel} , μ_{\perp} , μ_{\parallel} . Тензоры $\hat{\varepsilon}$, $\hat{\mu}$ при этом имеют вид:

$$\varepsilon_{\alpha\beta} := \varepsilon_{\perp} \delta_{\alpha\beta} + (\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}) n_{\alpha} n_{\beta}, \quad \mu_{\alpha\beta} := \mu_{\perp} \delta_{\alpha\beta} + (\mu_{\parallel} - \mu_{\perp}) n_{\alpha} n_{\beta}, \quad (4.40)$$

где n_{α} - декартовы координаты единичного вектора-директора \mathbf{n} : $|\mathbf{n}| = 1$, описывающего анизотропию, $\delta_{\alpha\beta}$ - символ Кронекера. Гармоническое во времени электромагнитное поле с круговой частотой ω имеет пространственную зависимость только от координаты z :

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) := \mathbf{h}(z) \exp(i\omega t), \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) := \mathbf{e}(z) \exp(i\omega t). \quad (4.41)$$

Значения $\mathbf{h} \Big|_{z=z_0}$, $\mathbf{e} \Big|_{z=z_0}$ известны. С помощью уравнений Максвелла требуется найти компоненты поля в произвольной координате z в произвольный момент времени t .

Здесь отметим, что знак временной фазы « $i\omega t$ » выбран положительным: так, как его принято выбирать в англоязычной литературе. При выборе отрицательного знака: « $-i\omega t$ », принятого в русскоязычной литературе, итоговый ответ получается комплексносопряженный: $\mathbf{E}_{eng} = \mathbf{E}_{rus}^*$, $\mathbf{H}_{eng} = \mathbf{H}_{rus}^*$.

Далее приводится ход решения задачи. Сначала задача обезразмеривается с использованием двух констант: скорости света в вакууме \tilde{c} и некоторой удобной длины \tilde{l} , а также некоторого характерного значения электрического поля \tilde{E}_0 . Формулы перехода от размерных величин (с волной) к безразмерным:

$$\mathbf{E} = \tilde{\mathbf{E}}/\tilde{E}_0, \quad \mathbf{H} = \tilde{\mathbf{H}}/\tilde{E}_0, \quad z = \tilde{z}/\tilde{l}, \quad t = \tilde{t} \cdot \tilde{c}/\tilde{l}, \quad \omega = \tilde{\omega} \cdot \tilde{l}/\tilde{c}, \quad \sigma = \tilde{\sigma} \cdot 4\pi\tilde{l}/\tilde{c}, \quad q = \tilde{q} \cdot \tilde{l}. \quad (4.42)$$

При этом отметим, что реальные части констант ε_{\perp} , ε_{\parallel} , μ_{\perp} , μ_{\parallel} равны соответствующим диэлектрическим и магнитным проницаемостям, а соответствующие проводимости σ в безразмерном виде участвуют в задаче в виде:

$$\text{Im}(\varepsilon_{\perp}) = -\sigma_{\perp}^{el}/\omega, \text{Im}(\varepsilon_{\parallel}) = -\sigma_{\parallel}^{el}/\omega, \text{Im}(\mu_{\perp}) = -\sigma_{\perp}^{mag}/\omega, \text{Im}(\mu_{\parallel}) = -\sigma_{\parallel}^{mag}/\omega.$$

Далее, в безразмерные уравнения Максвелла:

$$\begin{aligned} \text{rot} \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= \hat{\varepsilon}(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \\ \text{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= -\hat{\mu}(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \end{aligned}$$

подставляется поле (4.41). Из подстановки прямо следует:

$$e_z \equiv 0, \quad h_z \equiv 0,$$

$$\frac{d}{dz} \mathbf{a} = [z] \mathbf{a}, \quad (4.43)$$

где:

$$\mathbf{a} := \begin{pmatrix} e_x \\ e_y \\ h_x \\ h_y \end{pmatrix}, [z] := \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i\omega\mu_{yx} & -i\omega\mu_{yy} \\ 0 & 0 & i\omega\mu_{xx} & i\omega\mu_{xy} \\ i\omega\varepsilon_{yx} & i\omega\varepsilon_{yy} & 0 & 0 \\ -i\omega\varepsilon_{xx} & -i\omega\varepsilon_{xy} & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Компоненты тензоров $\varepsilon_{\alpha,\beta}$, $\mu_{\alpha,\beta}$ имеют зависимость по z , что усложняет решение системы уравнений (4.43). Однако, периодический характер зависимости, в силу теоремы Флоке, позволяет искать решение в известном виде [61, 62]. Здесь же мы предлагаем оригинальный ход решения, замечая, что матрица $[z]$ перестает зависеть от z если в выражении (4.43) записать компоненты поля в системе координат, которая вращается синхронно с вектором-директором (см. ф-лу (4.39)).

Для перехода во вращающуюся систему координат используется матрица поворота:

$$[z] := \begin{pmatrix} \cos(qz + \varphi_0) & -\sin(qz + \varphi_0) & 0 & 0 \\ \sin(qz + \varphi_0) & \cos(qz + \varphi_0) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos(qz + \varphi_0) & -\sin(qz + \varphi_0) \\ 0 & 0 & \sin(qz + \varphi_0) & \cos(qz + \varphi_0) \end{pmatrix}, \quad (4.44)$$

При этом обозначения таковы, что обратная матрица $(z) := [z]^{-1}$.

Обозначения для матриц « 4×4 », состоящие из буквы, открывающей и закрывающей скобок выбраны для удобства, по аналогии с обозначениями квантовой механики: $\langle bra || c || ket \rangle$.

В этих обозначениях компактно записывается преобразование уравнения (4.43) из представления в декартовой неподвижной системе координат в представление в декартовой вращающейся системе координат:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{a}}{dz} = [z]\mathbf{a} &\rightarrow (z)\frac{d\mathbf{a}}{dz} = (z)[z]\mathbf{a} \rightarrow \frac{d(z)\mathbf{a}}{dz} - \frac{d(z)}{dz}\mathbf{a} = (z)[z]\mathbf{a} \rightarrow \\ \rightarrow \frac{d(z)\mathbf{a}}{dz} = (z)[z]\mathbf{a} + \frac{d(z)}{dz}\mathbf{a} &\rightarrow \frac{d(z)\mathbf{a}}{dz} = (z)[z]z\mathbf{a} + \frac{d(z)}{dz}z\mathbf{a} \rightarrow \\ &\rightarrow \frac{d(z)\mathbf{a}}{dz} = \left((z)[z][z] + \frac{d(z)}{dz}[z] \right) (z)\mathbf{a}. \end{aligned}$$

Обозначив

$$(z)\mathbf{a} =: \mathbf{b}, \quad \left((z)[z][z] + \frac{d(z)}{dz}[z] \right) =: (m),$$

где вычисленная матрица (m) в явном виде:

$$(m) := \left((z)[z][z] + \frac{d(z)}{dz}[z] \right) = \begin{pmatrix} 0 & q & 0 & -i\omega\mu_{\perp} \\ -q & 0 & i\omega\mu_{\parallel} & 0 \\ 0 & i\omega\varepsilon_{\perp} & 0 & q \\ -i\omega\varepsilon_{\parallel} & 0 & -q & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.45)$$

уравнение (4.43) во вращающейся системе координат приобретает вид:

$$\frac{d\mathbf{b}}{dz} = (m)\mathbf{b}, \quad (4.46)$$

общее решение которого, в силу того, что матрица (m) не зависит от переменной z имеет известный вид:

$$\mathbf{b} = \sum_{i=1}^4 c_i \vec{\beta}_i \exp(\lambda_i z), \quad (4.47)$$

где λ_i — собственные значения матрицы (m) , $\vec{\beta}_i$ — собственные векторы матрицы (m) , соответствующие собственным значениям, c_i — произвольные константы, которые в каждом конкретном случае находятся из заданных граничных условий

задачи (например, при $z = 0$). Собственные значения вычисляются из биквадратного уравнения: $|(m) - \lambda E| = 0$. В явном виде собственные значения:

$$\lambda = \pm i\sqrt{\eta \pm \tau}, \quad (4.48)$$

где

$$\eta = \frac{\omega^2}{2}(\varepsilon_{\perp}\mu_{\parallel} + \varepsilon_{\parallel}\mu_{\perp}) + q^2,$$

$$\tau = \sqrt{\frac{\omega^4}{4}(\varepsilon_{\perp}\mu_{\parallel} - \varepsilon_{\parallel}\mu_{\perp})^2 + \omega^2 q^2(\varepsilon_{\perp}\mu_{\parallel} + \varepsilon_{\parallel}\mu_{\perp} + \varepsilon_{\perp}\mu_{\perp} + \varepsilon_{\parallel}\mu_{\parallel})}.$$

Собственные векторы вычисляются из уравнения: $(m)\vec{\beta} = \lambda\vec{\beta}$.

Выражение (4.47) можно переписать в виде:

$$\mathbf{b} = \sum_{i=1}^4 c_i \vec{\beta}_i \exp(\lambda_i z) := (\beta)\{z\}\mathbf{c}, \quad (4.49)$$

где матрицы (β) , $\{z\}$ определены следующим образом (порядок индексов безусловно важен):

$$\{z\} := \begin{pmatrix} \exp(\lambda_1 z) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp(\lambda_2 z) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \exp(\lambda_3 z) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp(\lambda_4 z) \end{pmatrix},$$

$$(\beta) := \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vec{\beta}_1 & \vec{\beta}_2 & \vec{\beta}_3 & \vec{\beta}_4 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}.$$

Обратные матрицы, как и раньше, обозначаются при помощи обратного порядка скобок: $\langle z \rangle := \{z\}^{-1}$, $\{\beta\} := (\beta)^{-1}$. Присутствие символа z в обозначениях, означает зависимость матрицы от координаты.

С учетом определения вектора $\mathbf{b} := [z]\mathbf{a}$, используя форму записи (4.49), записывается вектор \mathbf{a} :

$$\mathbf{a} = [z](\beta)\{z\}\mathbf{c},$$

или, определяя для краткости

$$[z] := [z](\beta)\{z\}, \quad (4.50)$$

итоговое выражение:

$$\mathbf{a} = [z] \mathbf{c}. \quad (4.51)$$

Из (4.51) выражается вектор \mathbf{c} через заданные значения вектора \mathbf{a}_0 в точке $z = z_0$:

$$\mathbf{c} = \langle z_0] \mathbf{a}_0.$$

Откуда получается выражение для вектора \mathbf{a} в произвольной координате z через известное значение в точке $z = z_0$:

$$\mathbf{a} = [z] \langle z_0] \mathbf{a}_0. \quad (4.52)$$

Что касается собственных векторов $\vec{\beta}$, то можно отметить следующее: каждой базисной электромагнитной волне соответствует один собственный вектор. Базисные волны отличаются направлением фазовой скорости во вращающейся системе координат: «вправо/влево» (знак собственного числа λ) и поляризацией (линейной: « O_x/O_y » (при $q = 0$) или же круговой: «по часовой стрелке/против часовой стрелки» (при $q \neq 0$)) — независимых базисных волн должно быть четыре, чтобы описывать электромагнитное поле данной задачи.

Аналитическая задача прохождения плоской волны через слой ХЖК

Формулировка задачи

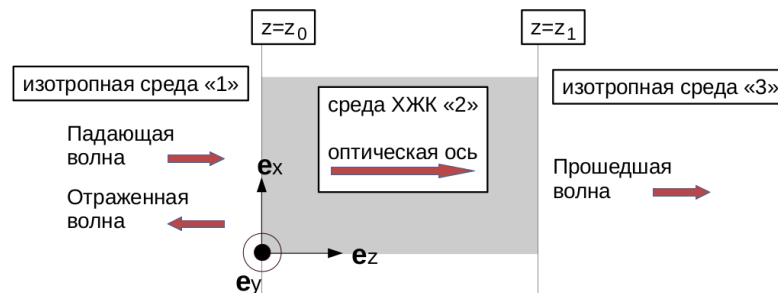


Рис. 83: Иллюстрация к задаче о слое ХЖК.

Плоская волна с частотой ω падает по нормали на слой ХЖК толщины: $z_1 - z_0$, с осью холестерической спирали вдоль O_z , ограниченный справа ($z = z_1$) и

слева ($z = z_0$) изотропными средами (рис. 83). Требуется найти электромагнитное поле во всем пространстве, если известны: частота ω , поляризация и амплитудное значение электрического поля \mathbf{E} падающей волны, а также заданы оптические параметры сред (таб. 4).

среда «1»	среда «2» (слой ХЖК)	среда «3»
$z_{l,1} = -\infty$	$z_{l,2} = z_0$	$z_{l,3} = z_1$
$z_{r,1} = z_0$	$z_{r,2} = z_1$	$z_{r,3} = +\infty$
$\varphi_{0,1} = 0$	$\varphi_{0,2} = 0$	$\varphi_{0,3} = 0$
$q_1 = 0$	$q_2 = q$	$q_3 = 0$
$\varepsilon_{\perp,1} = \varepsilon_1 \in \mathbb{R} \geq 1$	$\varepsilon_{\perp,2} = \varepsilon_{\perp} \in \mathbb{C}$	$\varepsilon_{\perp,3} = \varepsilon_3 \in \mathbb{R} \geq 1$
$\varepsilon_{\parallel,1} = \varepsilon_1 \in \mathbb{R} \geq 1$	$\varepsilon_{\parallel,2} = \varepsilon_{\parallel} \in \mathbb{C}$	$\varepsilon_{\parallel,3} = \varepsilon_3 \in \mathbb{R} \geq 1$
$\mu_{\perp,1} = \mu_1 \in \mathbb{R} \geq 1$	$\mu_{\perp,2} = \mu_{\perp} \in \mathbb{C}$	$\mu_{\perp,3} = \mu_3 \in \mathbb{R} \geq 1$
$\mu_{\parallel,1} = \mu_1 \in \mathbb{R} \geq 1$	$\mu_{\parallel,2} = \mu_{\parallel} \in \mathbb{C}$	$\mu_{\parallel,3} = \mu_3 \in \mathbb{R} \geq 1$

Таблица 4: Параметры сред для вычисления компонент полей в задаче со слоем ХЖК.

Поясним обозначения параметров (таб. 4). Задача решается в безразмерных величинах (см. (4.42)). Символами z_l, z_r обозначены координаты левой и правой границы среды. Далее, что касается второй среды, слоя ХЖК, то начальный угол холестерической спирали $\varphi_{0,2}$ (рис. 82) можно положить равным нулю всегда, полагая, что в нашей власти выбрать систему координат так, чтобы ось O_x совпадала с направлением вектора \mathbf{n} при $z = 0$ (незвизрая на то, что по условию задачи слой ХЖК может не содержать $z = 0$). Параметры второй среды не снабжены индексом «2», чтобы не загромождать запись. Комплекснозначность параметров второй среды выбрана, чтобы подчеркнуть то, что, вообще говоря, аналитическое решение допускает такие параметры: есть возможность учесть анизотропное поглощение и даже «экзотическое» поглощение за счет проводимости гипотетических магнитных зарядов, что может оказаться полезным в свете современного интереса к метаматериалам.

Несколько пояснений и определений

В этой задаче поляризация падающей волны влияет на ответ значительно. В частности, оказывается, что от поляризации падающей волны (правая круговая поляризация или левая круговая поляризация) зависят коэффициенты отражения и прохождения слоя ХЖК.

Поэтому задача решается для двух падающих волн с линейной поляризацией: вектор \mathbf{E} имеет только x -компоненту (O_x -поляризация) и вектор \mathbf{E} имеет только y -компоненту (O_y -поляризация). Из этих двух базовых решений, пользуясь свойством суперпозиции полей, можно собрать решение для падающей волны с любой эллиптической поляризацией, наперед заданной условием конкретной задачи.

Далее несколько слов о векторе \mathbf{c} . Матрицу $[z]$ для изотропной среды можно записать так, что выражение (4.51): $\mathbf{a} = [z]\mathbf{c}$, будет иметь вид:

$$\begin{pmatrix} e_x \\ e_y \\ h_x \\ h_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\omega\rho z} & 0 & e^{i\omega\rho z} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega\rho z} & 0 & e^{i\omega\rho z} \\ 0 & -e^{-i\omega\rho z} \cdot \rho/\mu & 0 & e^{i\omega\rho z} \cdot \rho/\mu \\ e^{-i\omega\rho z} \cdot \rho/\mu & 0 & -e^{i\omega\rho z} \cdot \rho/\mu & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix}, \quad (4.53)$$

где $\rho = \sqrt{\epsilon\mu}$, если среда без поглощения. При конструировании матрицы $[z]$: (4.50), выбор первоначального порядка собственных чисел и, соответственно, собственных векторов находится в нашей власти. Для изотропных сред матрица (m) имеет два собственных числа λ кратности «два», каждому собственному числу соответствует два независимых собственных вектора $\vec{\beta}$ — следует выбрать порядок двух собственных чисел и для каждого числа упорядочить два собственных вектора. Для того, чтобы матрица $[z]$ имела удобный вид: (4.53), нужно выбрать конкретный порядок собственных чисел в матрице $\{z\}$ и конкретный порядок собственных векторов в матрице $\{\beta\}$.

В случае, если матрица $[z]$ сконструирована в виде: (4.53), об интерпретации компонент вектора \mathbf{c} стоит отметить следующее. Матрица $[z]$ состоит из столбцов, с компонентами поля, описывающих базовые плоские волны с единичной амплитудой электрической компоненты, отличающиеся направлением распространения

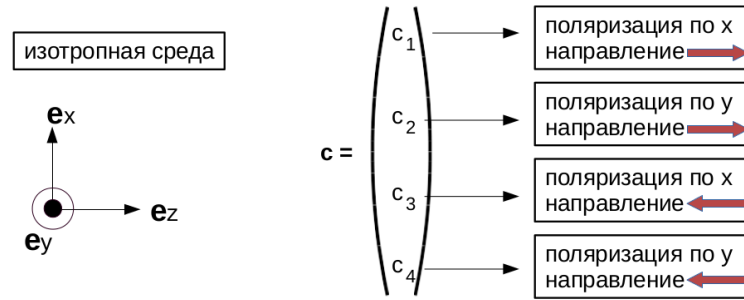


Рис. 84: Связь компонент вектора \mathbf{c} с амплитудами электрических компонент базовых электромагнитных волн.

энергии и поляризацией. Это значит, что, к примеру, вектор $\mathbf{c} = (1, 0, 0, 0)$ определяет вектор \mathbf{a} , компоненты которого описывают электромагнитную волну, распространяющуюся вправо и с линейной поляризацией O_x (напомним, что временная фаза выбрана с положительным знаком). В целом, компоненты вектора \mathbf{c} равны амплитудным значениям электрической компоненты всех базовых волн в таком порядке, как представлено на рис. 84.

Итак, конкретный вид матрицы $[z]$ (4.53) нужен для удобства дальнейших вычислений. Такая матрица обуславливает удобный порядок компонент вектора \mathbf{c} , — из них далее будут составляться прямоугольные матрицы, над которыми будут проводиться алгебраические операции.

Далее о связи векторов \mathbf{c} в соседних средах. На границе раздела двух сред обязано выполняться условие непрерывности тангенциальных компонент поля:

$$\mathbf{a}^{\langle 1 \rangle}(z = z^*) = \mathbf{a}^{\langle 2 \rangle}(z = z^*), \quad (4.54)$$

где верхним индексом в кавычках обозначены номера соседствующих сред, $z = z^*$ — координата плоскости границы. В каждой из сред должны выполняться уравнения Максвелла, и, соответственно, имеет место решение (4.51). Поэтому (4.54) можно представить так:

$$[z^*]^{\langle 1 \rangle} \mathbf{c}^{\langle 1 \rangle} = [z^*]^{\langle 2 \rangle} \mathbf{c}^{\langle 2 \rangle}.$$

Откуда следует связь векторов \mathbf{c} в соседних средах:

$$\mathbf{c}^{\langle 1 \rangle} = \langle z^* \rangle^{\langle 1 \rangle} [z^*]^{\langle 2 \rangle} \mathbf{c}^{\langle 2 \rangle}. \quad (4.55)$$

Явный вид матрицы $\langle z \rangle$, обратной к матрице $[z]$, для изотропной среды:

$$\langle z \rangle := \langle z \rangle \{ \beta \} (z) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{i\omega\rho z} & 0 & 0 & e^{i\omega\rho z} \cdot \mu/\rho \\ 0 & e^{i\omega\rho z} & -e^{i\omega\rho z} \cdot \mu/\rho & 0 \\ e^{-i\omega\rho z} & 0 & 0 & -e^{-i\omega\rho z} \cdot \mu/\rho \\ 0 & e^{-i\omega\rho z} & e^{-i\omega\rho z} \cdot \mu/\rho & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.56)$$

где $\rho = \sqrt{\varepsilon\mu}$, если среда без поглощения.

Стоит отметить, что в выражениях (4.53, 4.56) величина ρ записана для случая без поглощения: $\text{Im } \varepsilon = 0$, $\text{Im } \mu = 0$. Если же имеется ненулевая электрическая проводимость σ : $\text{Im } \varepsilon = -\sigma/\omega$, то

$$\rho = \frac{\sqrt{\mu}}{r\sqrt{2}} \left(\varepsilon_0 \sqrt{\varepsilon_0 + r} + \frac{\sigma}{\omega} \sqrt{r - \varepsilon_0} + i \left(\varepsilon_0 \sqrt{r - \varepsilon_0} - \frac{\sigma}{\omega} \sqrt{\varepsilon_0 + r} \right) \right),$$

при

$$r = \sqrt{\varepsilon_0^2 + \left(\frac{\sigma}{\omega} \right)^2},$$

где $\varepsilon_0 = \text{Re } \varepsilon$, $\mu \in \mathbb{R}$.

Возвращаясь к формуле (4.53), отметим, что вообще, изотропная среда позволяет нам задать любые, не равные нулю, вещественные значения q и φ_0 . В частности, если q положить равной длине волны в среде, то это приводит к базовым волнам не с линейной, а с круговой поляризацией.

Решение задачи

Имеется три среды (рис. 83). Третья среда отличается тем, что, при любых условиях, в ней отсутствуют волны, распространяющиеся влево — у вектора $\mathbf{c}^{\langle 3 \rangle}$ последние две компоненты равны нулю: $\mathbf{c}^{\langle 3 \rangle} = (c_1^3, c_2^3, 0, 0)$. По условию задачи известна поляризация падающей волны, т.е. достаточно решить две задачи: из первой среды падает волна, поляризованная по O_x (тогда на первом месте единица, на втором месте ноль и неизвестные пока амплитуды отраженных волн: $\mathbf{c}^{\langle 1 \rangle} = (1, 0, c_3^1, c_4^1)$), из первой среды падает волна, поляризованная по O_y (тогда на первом месте ноль, на втором месте единица, и далее неизвестные пока амплитуды отраженных волн: $\mathbf{c}^{\langle 1 \rangle} = (0, 1, c_3^1, c_4^1)$).

Выразим вектор $\mathbf{c}^{\langle 1 \rangle}$ через $\mathbf{c}^{\langle 3 \rangle}$, используя (4.55). Выражение (4.55) на границах: $z = z_0, z = z_1$:

$$\mathbf{c}^{\langle 1 \rangle} = \langle z_0 \rangle^{\langle 1 \rangle} [z_0]^{\langle 2 \rangle} \mathbf{c}^{\langle 2 \rangle}, \quad \mathbf{c}^{\langle 2 \rangle} = \langle z_1 \rangle^{\langle 2 \rangle} [z_1]^{\langle 3 \rangle} \mathbf{c}^{\langle 3 \rangle}.$$

Откуда следует, что

$$\mathbf{c}^{\langle 1 \rangle} = \langle z_0 \rangle^{\langle 1 \rangle} [z_0]^{\langle 2 \rangle} \langle z_1 \rangle^{\langle 2 \rangle} [z_1]^{\langle 3 \rangle} \mathbf{c}^{\langle 3 \rangle},$$

или, в более компактных обозначениях:

$$\mathbf{c}^{\langle 1 \rangle} = \langle U \rangle \mathbf{c}^{\langle 3 \rangle}, \quad (4.57)$$

где

$$\langle U \rangle := \langle z_0 \rangle^{\langle 1 \rangle} [D] [z_1]^{\langle 3 \rangle}, \quad (4.58)$$

при

$$[D] := [z_0]^{\langle 2 \rangle} \langle z_1 \rangle^{\langle 2 \rangle}. \quad (4.59)$$

Сразу для двух задач, выражение (4.57) можно записать так:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ r_{11} & r_{12} \\ r_{21} & r_{22} \end{pmatrix} = \langle U \rangle \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.60)$$

При этом матрица $\langle U \rangle$ известна (4.58). И для решения осталось записать выражения для восьми чисел: $r_{11}, r_{12}, r_{21}, r_{22}$ и $t_{11}, t_{12}, t_{21}, t_{22}$. Здесь заметим, что линейная комбинация решений тоже является решением: мы вправе совершать линейные операции с векторами \mathbf{c} — со столбцами. Поэтому принудительно выберем специфические, удобные векторы $\mathbf{c}^{\langle 3 \rangle}$: $(1, 0, 0, 0)$ и $(0, 1, 0, 0)$, и выразим через них векторы $\mathbf{c}^{\langle 1 \rangle}$, посредством (4.57):

$$\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \\ u_{31} & u_{32} \\ u_{41} & u_{42} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} & u_{34} \\ u_{41} & u_{42} & u_{43} & u_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

которое приведем к виду: (4.60), через линейные комбинации со столбцами — нам нужны единицы и нули слева. Линейные комбинации со столбцами производятся умножением справа на матрицу 2×2 . Так, умножив предыдущее выражение справа на T :

$$T := \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix}, \quad (4.61)$$

получим нужный вид: (4.60), и, как бы между прочим, получим и то, что требуется: искомые выражения для коэффициентов t , r , через элементы матрицы $\langle U \rangle$.

$$\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \\ u_{31} & u_{32} \\ u_{41} & u_{42} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} & u_{34} \\ u_{41} & u_{42} & u_{43} & u_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} \rightarrow$$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ r_{11} & r_{12} \\ r_{21} & r_{22} \end{pmatrix} = \langle U \rangle \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

где

$$\begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} \\ r_{21} & r_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{31} & u_{32} \\ u_{41} & u_{42} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} =: R. \quad (4.62)$$

Итак, первый столбец в (4.60) выражает решение для падающей волны, поляризованной по O_x , а второй столбец — по O_y . Теперь известны $\mathbf{c}^{\langle 1 \rangle}$ и $\mathbf{c}^{\langle 3 \rangle}$, и чтобы найти $\mathbf{c}^{\langle 2 \rangle}$ можно использовать, например, (4.55).

Далее, имея два полных набора векторов \mathbf{c} во всех трех средах (два решения) можно единообразно комбинировать эти наборы для получения нужной в задаче поляризации падающей волны:

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ \mathbf{c}_{need}^{\langle 1 \rangle} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots \\ \mathbf{c}_{Ox}^{\langle 1 \rangle} & \mathbf{c}_{Oy}^{\langle 1 \rangle} \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix} \hat{A}$$

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ \mathbf{c}_{need}^{\langle 2 \rangle} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots \\ \mathbf{c}_{Ox}^{\langle 2 \rangle} & \mathbf{c}_{Oy}^{\langle 2 \rangle} \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix} \hat{A}$$

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ \mathbf{c}_{need}^{\langle 3 \rangle} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots \\ \mathbf{c}_{Ox}^{\langle 3 \rangle} & \mathbf{c}_{Oy}^{\langle 3 \rangle} \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix} \hat{A},$$

где \hat{A} — некоторая единая матрица « 2×2 », описывающая одинаковые для всех сред линейные комбинации столбцов.

По значению вектора \mathbf{c} в соответствующей среде находится поле в любой координате z в пределах границ среды из (4.51).

Отметим, что в данной работе матрицы для второй анизотропной среды — $[z]^{\langle 2 \rangle}$, $\langle z \rangle^{\langle 2 \rangle}$, — вычисляются численно, в соответствии с определениями матриц: ищутся собственные числа λ и собственные векторы $\vec{\beta}$, составляются соответствующие матрицы (порядок собственных чисел и собственных векторов какой-то есть, но он нас не интересует настолько, насколько интересовал порядок в крайних изотропных средах), для каждой $z \in [z_0, z_1]$ матрицы перемножаются, в случае необходимости находятся обратные матрицы. В случае же вычисления коэффициентов пропускания и отражения, поле внутри пластины знать не нужно, поэтому матрицы вычисляются только в двух граничных точках.

Отражение и пропускание плоской волны стопкой пластин

ХЖК

Вместо одного слоя ХЖК возможно решить задачу для некоторого конечного числа слоев N с различными оптическими свойствами — для стопки пластин.

В этом случае лишь усложняется вычисление матрицы $[D]$, присутствующей в определении матрицы $\langle U \rangle$: (4.58). После вычисления $\langle U \rangle$ дальнейшие операции для нахождения r, t выглядят в точности также, как и для одного слоя ХЖК.

Алгоритм для вычисления коэффициентов отражения и пропускания следующий. Для каждой пластинки составляется матрица (m) : (4.45). Для матрицы

(m) находятся собственные числа и собственные векторы. Из собственных чисел и собственных векторов составляется матрица $[z]$ на левой границе пластинки, при $z = z_l$: $[z_l]$ и обратная матрица $\langle z \rangle$ на правой границе пластинки, при $z = z_r$: $\langle z_r \rangle$. Далее вычисляется матрица $[D]$, как последовательное произведение соответствующих матриц $[z]$ и $\langle z \rangle$ в порядке следования слоев вдоль O_z :

$$[D] = [z_{Left}^1]^{«1»} \langle z_r^1 \rangle^{«1»} \dots [z_l^i]^{«i»} \langle z_r^i \rangle^{«i»} [z_l^{i+1}]^{«i+1»} \langle z_r^{i+1} \rangle^{«i+1»} \dots [z_l^N]^{«N»} \langle z_{Right}^N \rangle^{«N»}, \quad (4.63)$$

где верхний индекс обозначает номер среды, и кроме того, отметим, что правая граница z_r^i совпадает с левой границей следующей пластинки z_l^{i+1} — пластины всегда располагаются вплотную (случившийся зазор из вакуума в данной задаче представляется как изотропная пластина — частный упрощенный случай анизотропной пластины холестерического типа). Далее, из (4.58) находится матрица $\langle U \rangle$, включающая матрицы $\langle z_{Left} \rangle^{«0»}$ и $[z_{Right}]^{«N+1»}$ для ограничивающих стопку изотропных полубесконечных сред — явный вид матриц представлен в (4.53) и (4.56). Далее находятся матрицы R и T из (4.62), (4.61). Далее отдельно выписываются векторы \mathbf{c} для падающей («I»), отраженной («R») и прошедшей («T») волн, для двух случаев линейной поляризации (x, y):

$$\mathbf{c}_{x,I} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}_{x,R} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ r_{11} \\ r_{21} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}_{x,T} = \begin{pmatrix} t_{11} \\ t_{21} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.64)$$

$$\mathbf{c}_{y,I} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}_{y,R} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ r_{12} \\ r_{22} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}_{y,T} = \begin{pmatrix} t_{12} \\ t_{22} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.65)$$

После чего, по формуле (4.51) вычисляются компоненты поля (вектор \mathbf{a}): e_x, e_y, h_x, h_y . При этом матрица $[z]$ для падающей и отраженной волны берется в левой изотропной среде, обозначаемой номером «0», а для прошедшей волны — в правой изотропной среде, обозначаемой номером « $N + 1$ ». Координата z при этом должна

принадлежать соответствующим средам, включая границы: z_{Left} , z_{Right} . Если нужна не линейная поляризация падающей волны, а круговая (правая « r » или левая « l »), то соответствующие компоненты поля выражаются по формулам:

$$\mathbf{a}_{r,I} = \mathbf{a}_{x,I} + i\mathbf{a}_{y,I}, \quad \mathbf{a}_{r,R} = \mathbf{a}_{x,R} + i\mathbf{a}_{y,R}, \quad \mathbf{a}_{r,T} = \mathbf{a}_{x,T} + i\mathbf{a}_{y,T}. \quad (4.66)$$

$$\mathbf{a}_{l,I} = \mathbf{a}_{x,I} - i\mathbf{a}_{y,I}, \quad \mathbf{a}_{l,R} = \mathbf{a}_{x,R} - i\mathbf{a}_{y,R}, \quad \mathbf{a}_{l,T} = \mathbf{a}_{x,T} - i\mathbf{a}_{y,T}. \quad (4.67)$$

Найденные компоненты поля используются для вычисления усредненного по периоду колебаний электромагнитной волны значения вектора Пойнтинга:

$$\langle \mathbf{S}(t) \rangle = \langle \text{Re}[\mathbf{E}] \times \text{Re}[\mathbf{H}] \rangle = \frac{1}{4} (\mathbf{e} \times \mathbf{h}^* + \mathbf{e}^* \times \mathbf{h}), \quad (4.68)$$

имеющего в данной задаче ($e_z \equiv 0$, $h_z \equiv 0$) только z -компоненту. Вычислив $\langle \mathbf{S}(t) \rangle$ для падающих, $\langle \mathbf{S}(t) \rangle_I$, отраженных, $\langle \mathbf{S}(t) \rangle_R$, и прошедших, $\langle \mathbf{S}(t) \rangle_T$ волн, находятся коэффициенты отражения R и прохождения T :

$$T_\alpha = \frac{|\langle \mathbf{S} \rangle_{T,\alpha}|}{|\langle \mathbf{S} \rangle_{I,\alpha}|}, \quad R_\alpha = \frac{|\langle \mathbf{S} \rangle_{R,\alpha}|}{|\langle \mathbf{S} \rangle_{I,\alpha}|}, \quad (4.69)$$

где α обозначает поляризацию падающей волны. При этом коэффициент поглощения, A (в случае без поглощения — это ошибка вычисления), находится из закона сохранения энергии:

$$A + T + R = 1.$$

На этом описание алгоритма завершено.

Следует отметить вычислительную особенность для пластинок с поглощением (или крайних сред с поглощением). Если в стопке пластинок имеется пластинка с поглощением ($\sigma \neq 0$), то в показателях экспонент (имеющих место в матрицах) появляются реальные числа, которые зависят от z . И несмотря на то, что пластинка тонкая и поглощение слабо, — только за счет того, что пластинка находится далеко от начала координат, экспонента может оказаться численно невычислима. Потому имеет смысл для каждой такой пластинки вводить свою локальную систему координат, с локальным нулем по z' включенным в область пластинки, или, скажем, на левой границе пластинки. Это ничему не противоречит: матрицы

позволяет перемножать не единая координатная ось, а условие равенства тангенциальных компонент на границах сред: (4.54).

Дополнительно приведем явный вид матрицы $[D_k] := [z_l]^{(k)} \langle z_r \rangle^{(k)}$ для изотропной пластинки, с номером « k », толщины d_k и параметрами: $q = 0$, $\varphi_0 = 0$, $\mu_{\perp} = \mu_{\parallel} = \mu \in R$, $\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{\parallel} = \varepsilon - i\sigma/\omega$, при $\varepsilon, \sigma, \omega \in R$:

$$[D_k] = \begin{pmatrix} C & 0 & 0 & iS\mu/\rho \\ 0 & C & -iS\mu/\rho & 0 \\ 0 & -iS\rho/\mu & C & 0 \\ iS\rho/\mu & 0 & 0 & C \end{pmatrix},$$

где

$$C = \frac{e^{i\omega\rho d_k} + e^{-i\omega\rho d_k}}{2}, \quad S = \frac{e^{i\omega\rho d_k} - e^{-i\omega\rho d_k}}{2i},$$

$$\rho = \frac{\sqrt{\mu}}{r\sqrt{2}} \left(\varepsilon\sqrt{\varepsilon+r} + \frac{\sigma}{\omega}\sqrt{r-\varepsilon} + i \left(\varepsilon\sqrt{r-\varepsilon} - \frac{\sigma}{\omega}\sqrt{\varepsilon+r} \right) \right), \quad r = \sqrt{\varepsilon^2 + \left(\frac{\sigma}{\omega} \right)^2},$$

и если $\sigma = 0$, то $\rho = \sqrt{\varepsilon\mu}$. Эта матрица свободна от особенности, описанной в предыдущем абзаце: координата z отсутствует явно, имеется лишь толщина пластины. Кроме того можно заметить, что матрица составлена из двух блоков: «сердинка» и «кайма», которые, если не обращать внимания на «нули», похожи с точностью до знака — это следствие того, что поляризация в изотропных средах сохраняется: для изотропных сред нет нужды оперировать матрицами « 4×4 », достаточно матриц « 2×2 » (рассматривая лишь две базовые волны, различаемые только направлением переноса энергии).

Пример применения матриц для изотропных сред без поглощения представлен на рис. 85. Построено три зависимости от частоты: для первого построения взята стопка из одной пары «стеклянных» пластинок, отличающихся диэлектрической проницаемостью ε , для второго построения взята стопка из пяти таких пар, расположенных последовательно — итого десять пластин, для третьего построения взята стопка из 25 точно таких же пар «стеклянных» пластин. Материал пластинок — модельный. Можно видеть, что с увеличением количества пластин, частотная характеристика пропускания для стопки качественно меняется — появляется непрерывный диапазон частот, в котором стопка не пропускает. Набор

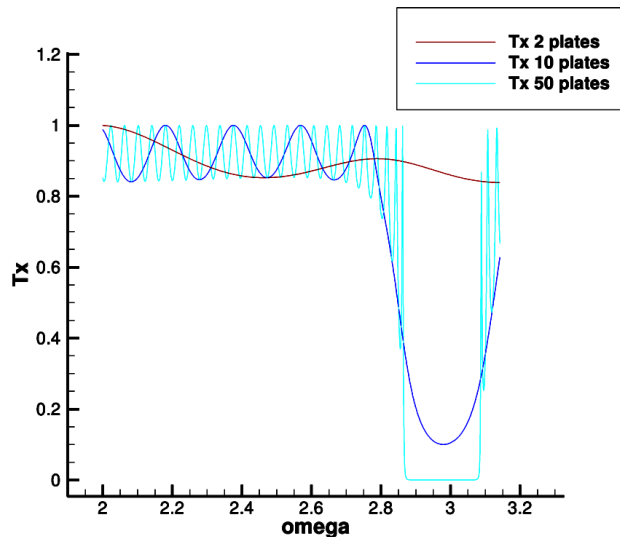


Рис. 85: Коэффициент пропускания в зависимости от частоты падающей волны на «фотонный кристалл» для различного количества изотропных пластинок.

пластинок с периодическим повторением диэлектрической проницаемости, имеющий провал в пропускании, называется «фотонный кристалл».

Заключительные слова по «стопке пластин»

В стопке могут находиться вперемешку пластинки из совершенно разных материалов и разных толщин: изотропные и анизотропные, с различными параметрами холестерической спирали, пластинки из одноосных кристаллов и стёкол, с анизотропным поглощением (дихроизмом) и без него, и даже с экзотическим поглощением магнитного поля за счет гипотетических магнитных зарядов (гипотетичность не мешает моделированию метаповерхностей и метаматериалов). Таким образом, алгоритм решения задачи «стопка пластин» — довольно мощный инструмент для исследования композитных, слоистых сред.

Минуса видится два: ограничение по условию (задача одномерна и вектор \mathbf{n} обязан лежать в плоскости O_{xy}) и множественное перемножение матриц (что затрудняет аналитический вывод ответа в явном виде и, соответственно, анализ финальных выражений).

Уравнение (4.43), с которого началась одномерная задача, можно решить численно, например прямым интегрированием методами Рунге-Кутты. И чтобы

получить ответ конкретной задачи с очень большим количеством пластин, может оказаться дешевле, с точки зрения количества машинных операций и требуемой машинной памяти, интегрировать численно, чем использовать аналитический метод, описанный в данном приложении.