

АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ОПТИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ СЛОИСТЫХ АНИЗОТРОПНЫХ СРЕД

*С. П. Палто**

*Институт кристаллографии Российской академии наук
117333, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 2 ноября 2000 г.

Рассматривается алгоритм решения уравнений Максвелла для распространения света через анизотропные слоистые среды, использующий матрицы Берремана размером 4×4 . В отличие от численных методов, предложенных Берреманом, предлагаемый метод является точным. Теорема Сильвестра для вычисления функции от матрицы и метод Лагерра для нахождения собственных значений позволяют предложить алгоритм, эффективность которого сравнима с эффективностью алгоритмов, использующих аналитические решения, которые, однако, существуют лишь в частном случае одноосной оптической среды. Предлагаемый метод позволяет рассчитывать сложные оптические системы, в которых важную роль играют эффекты двуосности, магнитной анизотропии или оптической активности.

PACS: 42.79.-e; 42.25.-p; 07.05.Tr; 03.50.De, 41.20.-q

1. ВВЕДЕНИЕ

Метод вычисления пропускания и отражения в слоистых анизотропных средах был практически одновременно предложен Тейтлером, Хенвисом [1] и Берреманом [2–4]. Математически, методы, предложенные в [1] и [3], эквивалентны, хотя в подходе авторов имеются различия. Берреман рассматривает оптическую среду с непрерывно меняющимися параметрами, что позволило сформулировать уравнения Максвелла в дифференциальной матричной форме. В отличие от широко применяемого приближенного метода матриц Джонса [5] размером 2×2 в методе Берремана матрицы имеют размер 4×4 . Это увеличение в размере является платой за точность и универсальность. Матрица Берремана определяет линейное преобразование между четырьмя тангенциальными компонентами электрического и магнитного полей на входе оптической системы с соответствующими компонентами на выходе и позволяет с учетом интерференционных эффектов многократного отражения одновременно находить как пропускание, так и отражение при произвольном угле падения световой волны на планарную оптическую среду.

С момента упомянутых публикаций метод Берремана получил всеобщее признание и нашел широкое применение, особенно для расчета оптики жидких кристаллов, где учет отражения является необходимым условием. Развитие метода привело к тому, что для одноосной оптической среды были получены аналитические решения для нахождения матриц Берремана [6–8]. Тем не менее, в случае двуосной оптической среды аналитические решения в общем случае отсутствуют, что оставляет в качестве наиболее эффективных методов нахождения матрицы приближенные алгоритмы, которым была посвящена работа [4]. Эти методы основаны на разложении экспоненты от матрицы в конечный ряд Тейлора. Таким образом, даже однородная анизотропная среда должна быть разделена на очень тонкие подслои, для которых ряд Тейлора дает приемлемую точность. По-видимому, именно дополнительная сложность и емкость алгоритмов вычисления матриц Берремана обуславливают постоянное развитие альтернативного метода матриц Джонса [9], хотя последний в своей основе является приближенным.

В настоящей работе предлагается точный и эффективный алгоритм нахождения матрицы Берремана. В его основе лежит теорема Сильвестра о представлении функции от матрицы [10] в форме

*E-mail: palto@online.ru; lbf@ns.crys.ras.ru

конечного ряда, а также метод Лагерра для нахождения комплексного корня полинома произвольной степени [11]. Алгоритм был апробирован автором при решении задачи моделирования электрооптики жидких кристаллов в оптических схемах, реально применяющихся при создании жидкокристаллических дисплеев. Метод является общим в том смысле, что не ограничивает возможности численного моделирования одноосной оптической средой. Он одинаково эффективен в ситуациях, когда требуется учесть двуосность, магнитную анизотропию или оптическую активность среды.

2. ТЕОРИЯ И МЕТОД

Напомним основные результаты, полученные Берреманом на основании точных преобразований уравнений Максвелла для линейной среды к матричной форме.

Пусть плоская монохроматическая волна падает в плоскости xz на плоскопараллельную анизотропную пластину под произвольным углом α по отношению к нормали (см. рис. 1). Для краткости на рисунке показан только эллипсоид диэлектрической проницаемости, хотя в общем случае может иметь место анизотропия магнитной восприимчивости и оптической активности. Оптические параметры пластины в общем случае считаются плавно зависящими от

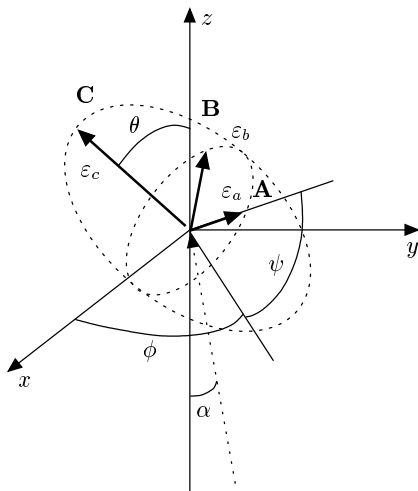


Рис. 1. Схема ориентации главных осей **A, B, C** диэлектрического эллипсоида; xy — плоскость поверхности оптической среды; xz — плоскость падения света, α — угол падения; θ, ϕ, ψ — углы Эйлера; $\epsilon_a, \epsilon_b, \epsilon_c$ — главные значения компонент диэлектрического тензора

z , что позволило Берреману использовать дифференциальный формализм. Согласно [3] для тангенциальных компонент электрического и магнитного полей световой волны имеет место следующее матричное соотношение:

$$\frac{\partial}{\partial z} \chi = \frac{i\omega}{c} \Delta \chi, \quad (1)$$

где

$$\chi = \begin{pmatrix} E_x \\ H_y \\ E_y \\ -H_x \end{pmatrix}, \quad \Delta = \begin{pmatrix} \Delta_{11} & \Delta_{12} & \Delta_{13} & \Delta_{14} \\ \Delta_{21} & \Delta_{22} & \Delta_{23} & \Delta_{24} \\ \Delta_{31} & \Delta_{32} & \Delta_{33} & \Delta_{34} \\ \Delta_{41} & \Delta_{42} & \Delta_{43} & \Delta_{44} \end{pmatrix},$$

E_x, E_y, H_x, H_y — тангенциальные x - и y -компоненты соответственно электрического и магнитного полей. В общем случае компоненты матрицы Δ выражаются через компоненты диэлектрического и магнитного тензоров и тензора оптического вращения (см. Приложение).

Во многих практически важных случаях магнитной анизотропией и оптической активностью можно пренебречь, тогда число ненулевых компонент матрицы Δ сокращается до 10 [4]:

$$\Delta_{11} = -\frac{ck_x(\epsilon_{13} \cos \phi - \epsilon_{23} \sin \phi)}{\omega \epsilon_{33}}, \quad (2.1)$$

$$\Delta_{12} = 1 - \frac{1}{\epsilon_{33}} \left(\frac{ck_x}{\omega} \right)^2, \quad (2.2)$$

$$\Delta_{13} = -\frac{ck_x(\epsilon_{13} \sin \phi + \epsilon_{23} \cos \phi)}{\omega \epsilon_{33}}, \quad (2.3)$$

$$\Delta_{21} = [\beta \cos 2\phi - \gamma \sin 2\phi] + \eta, \quad (2.4)$$

$$\Delta_{23} = \beta \sin 2\phi + \gamma \cos 2\phi, \quad (2.5)$$

$$\Delta_{43} = -[\beta \cos 2\phi - \gamma \sin 2\phi] + \eta - \left(\frac{ck_x}{\omega} \right)^2, \quad (2.6)$$

$$\Delta_{34} = 1, \quad (2.7)$$

$$\Delta_{22} = \Delta_{11}, \quad (2.8)$$

$$\Delta_{41} = \Delta_{23}, \quad (2.9)$$

$$\Delta_{42} = \Delta_{13}, \quad (2.10)$$

$$\Delta_{14} = \Delta_{24} = \Delta_{31} = \Delta_{32} = \Delta_{33} = \Delta_{44} = 0, \quad (2.11)$$

$$\beta = \frac{\epsilon_{11} - \epsilon_{22}}{2} - \frac{\epsilon_{13}^2 - \epsilon_{23}^2}{2\epsilon_{33}}, \quad \gamma = \epsilon_{12} - \frac{\epsilon_{13}\epsilon_{23}}{\epsilon_{33}},$$

$$\eta = \frac{\epsilon_{11} + \epsilon_{22}}{2} - \frac{\epsilon_{13}^2 + \epsilon_{23}^2}{2\epsilon_{33}}, \quad (2.12)$$

$$\varepsilon_{11} = \varepsilon_a \cos^2 \psi + \varepsilon_b \sin^2 \psi, \quad (2.13)$$

$$\varepsilon_{12} = (\varepsilon_a - \varepsilon_b) \sin \psi \cos \psi \cos \theta, \quad (2.14)$$

$$\varepsilon_{13} = (\varepsilon_a - \varepsilon_b) \sin \psi \cos \psi \sin \theta, \quad (2.15)$$

$$\varepsilon_{22} = (\varepsilon_a \sin^2 \psi + \varepsilon_b \cos^2 \psi) \cos^2 \theta + \varepsilon_c \sin^2 \theta, \quad (2.16)$$

$$\varepsilon_{23} = (\varepsilon_a \sin^2 \psi + \varepsilon_b \cos^2 \psi - \varepsilon_c) \sin \theta \cos \theta, \quad (2.17)$$

$$\varepsilon_{33} = (\varepsilon_a \sin^2 \psi + \varepsilon_b \cos^2 \psi) \sin^2 \theta + \varepsilon_c \cos^2 \theta. \quad (2.18)$$

В (2.1)–(2.18) k_x — x -компонента волнового вектора падающей волны, ω — круговая частота световой волны; θ , ϕ и ψ — углы Эйлера, характеризующие ориентацию диэлектрического эллипсоида, а ε_a , ε_b , ε_c — главные значения тензора диэлектрической проницаемости (см. рис. 1). Значения компонент диэлектрической проницаемости предполагаются комплексными. Таким образом, принимается во внимание и анизотропия поглощения.

В том случае, когда параметры оптической пластины толщиной h не зависят от z , интегрирование (1) дает

$$\chi(h) = \exp(i\omega h \Delta / c) \chi(0) \equiv \mathbf{P}(h) \chi(0), \quad (3)$$

где $\mathbf{P}(h)$ соответствует матрице Берремана для однородной среды.

Таким образом, в случае однородной оптической среды нахождение матрицы Берремана сводится к вычислению экспоненты от матрицы Δ . В общем случае, когда оптические параметры среды зависят от z , среду разбивают на n слоев, в пределах которых оптические параметры рассматриваются постоянными и интегрирование уравнения (1) сводится к перемножению соответствующих матриц для индивидуальных слоев:

$$\chi(h) = \prod_{i=1}^n \mathbf{P}(h_i) \chi(0). \quad (4)$$

Соотношение (4) справедливо и для случая сложной оптической системы, состоящей из дискретных оптических элементов (поляриды, фазовые пластинки и т. д.). Физические основы полноты выражения (4) заключаются в непрерывности тангенциальных компонент электрического и магнитного полей. Поэтому даже в случае слоистой системы разнородных оптических сред не требуются дополнительные граничные условия. Таким образом, и в самом общем случае задача численного интегрирования сводится к нахождению функции (экспоненты) от матрицы Δ .

Хорошо известный точный алгоритм нахождения функции от матрицы заключается в применении преобразования подобия

$$\Delta = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{D} \mathbf{S} \quad (5)$$

и вычисления функции от элементов диагональной матрицы \mathbf{D} . Это, однако, требует определения собственных значений матрицы Δ , матрицы характеристических векторов \mathbf{S} , а также вычисления обратной матрицы \mathbf{S}^{-1} . Хотя экспонента от (5) имеет «прозрачный» физический смысл, так как отражает распространение четырех характеристических волн в прямом и обратном направлениях, метод требует значительных вычислительных затрат. Эффективность метода увеличивается лишь в случае одноосной оптической среды, для которой имеются аналитические выражения для собственных значений и характеристических векторов [8]. По-видимому, только сложность и неэффективность (с точки зрения вычислительных ресурсов) применявшихся алгоритмов вычисления матриц для преобразования подобия обусловили развитие приближенных методов [3, 4]. Например, один из методов, предложенных Берремано, заключается в том, что экспонента может быть представлена в виде разложения в ряд Тейлора:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(h) &= \exp(i\omega h \Delta / c) \approx \\ &\approx \mathbf{I} + \frac{i\omega h}{c} \Delta - \frac{1}{2} \left(\frac{\omega h}{c} \right)^2 \Delta^2, \quad (6) \end{aligned}$$

где \mathbf{I} — единичная матрица.

Берреман показал, что получение сходящегося решения возможно при учете члена второго порядка в разложении. Однако, так как (6) является приближением, его применение даже для однородных участков среды требовало разбиения последней на тонкие подслои толщиной много меньше длины волны. Процедура становится неэффективной для расчета оптики толстых (сотни микрон) однородных оптических элементов, таких, например, как поляриды и фазовые пластинки. Развитию численного метода интегрирования и его применению для расчета оптики жидкокристаллической «твист-ячейки» посвящена более поздняя работа [4], где видоизмененная процедура позволяла выбор больших значений h , однако принципиально метод оставался приближенным и требовал осторожности в выборе шага дискретизации h .

В данной работе предлагается точная процедура. Первый важный момент состоит в том, что существует теорема Сильвестра [10], которая в случае различных собственных значений дает исчерпывающее выражение для функции от матрицы \mathbf{A} размером $n \times n$:

$$f(\mathbf{A}) = \sum_{k=1}^n f(\lambda_k) \frac{\prod_{i \neq k} (\mathbf{A} - \lambda_i \mathbf{I})}{\prod_{i \neq k} (\lambda_k - \lambda_i)}, \quad (7)$$

где λ_k — собственные значения матрицы \mathbf{A} .

Применительно к нашему случаю (7) дает четыре слагаемых:

$$\mathbf{P}(h) = \exp(i\omega h \mathbf{\Delta}/c) \equiv \sum_{k=1}^4 \left(\exp(i\omega h \lambda_k/c) \frac{\prod_{i \neq k} (\mathbf{\Delta} - \lambda_i \mathbf{I})}{\prod_{i \neq k} (\lambda_k - \lambda_i)} \right), \quad (8)$$

что практически эквивалентно по вычислительным затратам выражению (6), если известны собственные значения матрицы $\mathbf{\Delta}$. Так как (8) является точным представлением функции, исключается необходимость разбиения однородной оптической среды на систему подслоев. В отличие от точного метода, основанного на преобразовании подобия (5), здесь не требуются вычисления матрицы характеристических векторов и соответствующей обратной матрицы, что значительно увеличивает эффективность.

Таким образом, наличие выражения (8) сводит решение проблемы к поиску эффективного метода определения собственных значений матрицы $\mathbf{\Delta}$. В случае одноосной оптической среды ($\varepsilon_b = \varepsilon_a$) для собственных значений найдены аналитические выражения [6–8]:

$$\lambda_{1,2} = \pm \left(\varepsilon_a - \left(\frac{ck_x}{\omega} \right)^2 \right)^{1/2}, \quad (9.1)$$

$$\lambda_{3,4} = -\frac{1}{\varepsilon_{33}} \left\{ \varepsilon \cos \theta \sin \phi \frac{ck_x}{\omega} \pm \left[\varepsilon_a \left(\varepsilon_c \varepsilon_{33} - (\varepsilon_c - \varepsilon \sin \theta \cos^2 \phi) \left(\frac{ck_x}{\omega} \right)^2 \right) \right]^{1/2} \right\}, \quad (9.2)$$

где $\varepsilon = (\varepsilon_c - \varepsilon_a) \sin \theta$, а ε_{33} определяется (2.18) с учетом одноосности ($\varepsilon_a = \varepsilon_b$).

В общем случае собственные значения являются корнями полинома четвертой степени

$$\det(\mathbf{\Delta} - \lambda \mathbf{I}) = 0 \quad (10)$$

или эквивалентного уравнения в векторном представлении:

$$\mathbf{\Lambda} \mathbf{A} = 0, \quad (11)$$

где

$$\mathbf{\Lambda} = (1 \ \lambda \ \lambda^2 \ \lambda^3 \ \lambda^4), \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix}, \quad (12)$$

$a_0 - a_4$ — комплексные коэффициенты полинома. Если элементы матрицы $\mathbf{\Delta}$ определяются соотношениями (2.1)–(2.11), то значения коэффициентов полинома определяются из следующих выражений:

$$a_0 = 2\Delta_{11}\Delta_{13}\Delta_{23}\Delta_{34} + \Delta_{21}\Delta_{12}\Delta_{34}\Delta_{43} - \Delta_{11}^2\Delta_{34}\Delta_{43} - \Delta_{13}^2\Delta_{21}\Delta_{34} - \Delta_{23}^2\Delta_{12}\Delta_{34}, \quad (13.1)$$

$$a_1 = 2(\Delta_{11}\Delta_{34}\Delta_{43} - \Delta_{13}\Delta_{23}\Delta_{34}), \quad (13.2)$$

$$a_2 = \Delta_{11}^2 - \Delta_{34}\Delta_{43} - \Delta_{21}\Delta_{12}, \quad (13.3)$$

$$a_3 = -2\Delta_{11}, \quad (13.4)$$

$$a_4 = 1. \quad (13.5)$$

Вторым важным моментом в данной работе является применение метода Лагерра [11]. Мощность этого метода заключается в том, что при любом нулевом приближении для корня комплексного полинома произвольной степени метод обеспечивает быструю сходимость к одному из корней, обеспечивая высокую точность, ограниченную, фактически, разрядностью машинного представления чисел с плавающей точкой. Очевидно, это свойство можно использовать для нахождения всех собственных значений в нашей задаче, если дополнить метод Лагерра процедурой исключения уже найденных корней.

Для дальнейшего рассмотрения удобно ввести оператор \mathbf{L} , назвав его оператором Лагерра, такой что

$$\lambda_1 = \mathbf{L}(\mathbf{A}), \quad (14)$$

т. е. будучи примененным к вектору \mathbf{A} (компоненты \mathbf{A} суть коэффициенты полинома, см. (11)), он возвращает значение одного из корней полинома, которое соответствует одному из собственных значений матрицы $\mathbf{\Delta}$. На рис. 2 алгоритм процедуры, соответствующей оператору Лагерра, представлен со степенью детальности, достаточной для реализации на любом из языков программирования.

Имея один из корней, его легко исключить, перейдя к полиному более низкого порядка. Процедуру исключения и нахождения всех собственных значений можно представить в виде последовательности преобразований

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} b_0 = a_1 + b_1 \lambda_1 \\ b_1 = a_2 + b_2 \lambda_1 \\ b_2 = a_3 + b_3 \lambda_1 \\ b_3 = a_4 \\ \lambda_1 = \mathbf{L}(\mathbf{A}) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} c_0 = b_1 + c_1 \lambda_2 \\ c_1 = b_2 + c_2 \lambda_2 \\ c_2 = b_3 \\ \lambda_2 = \mathbf{L}(\mathbf{B}) \\ \lambda_1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} d_0 = c_1 + d_1 \lambda_3 \\ d_1 = c_2 \\ \lambda_3 = \mathbf{L}(\mathbf{C}) \\ \lambda_2 \\ \lambda_1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} c_2 \\ \lambda_4 = -d_0/d_1 \\ \lambda_3 \\ \lambda_2 \\ \lambda_1 \end{pmatrix}, \quad (15)$$

где

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}. \quad (16)$$

Таким образом, применив оператор Лагерра три раза в соответствии с процедурой (15) слева направо, получаем все собственные значения матрицы Δ . Подставляя их в выражение (8), получаем матрицу Берремана. Процедура (15) помимо оператора Лагерра включает лишь операции сложения и умножения, что в совокупности с быстрой сходимостью метода Лагерра обеспечивает высокую эффективность, сравнимую со случаем использования аналитических выражений (9.1), (9.2) для нахождения собственных значений в случае одноосной среды. Для сравнения отметим, что даже оптимизированная аналитическая процедура, из которой исключены повторные вычисления функций типа $\sin x$, оказывается лишь приблизительно в 1.5 раза быстрее (время вычисления одной матрицы Берремана составляет примерно 100 микросекунд на компьютере с процессором Celeron 500 в среде Windows 98).

Последнее обстоятельство, которое хотелось бы подчеркнуть, заключается в том, что формула (8) требует различных собственных значений. В ряде случаев симметрия среды (например, оптически изотропная среда) или геометрии (строго нормальное падение) обуславливает вырождение собственных значений. В этом случае в (8) возникает неопре-

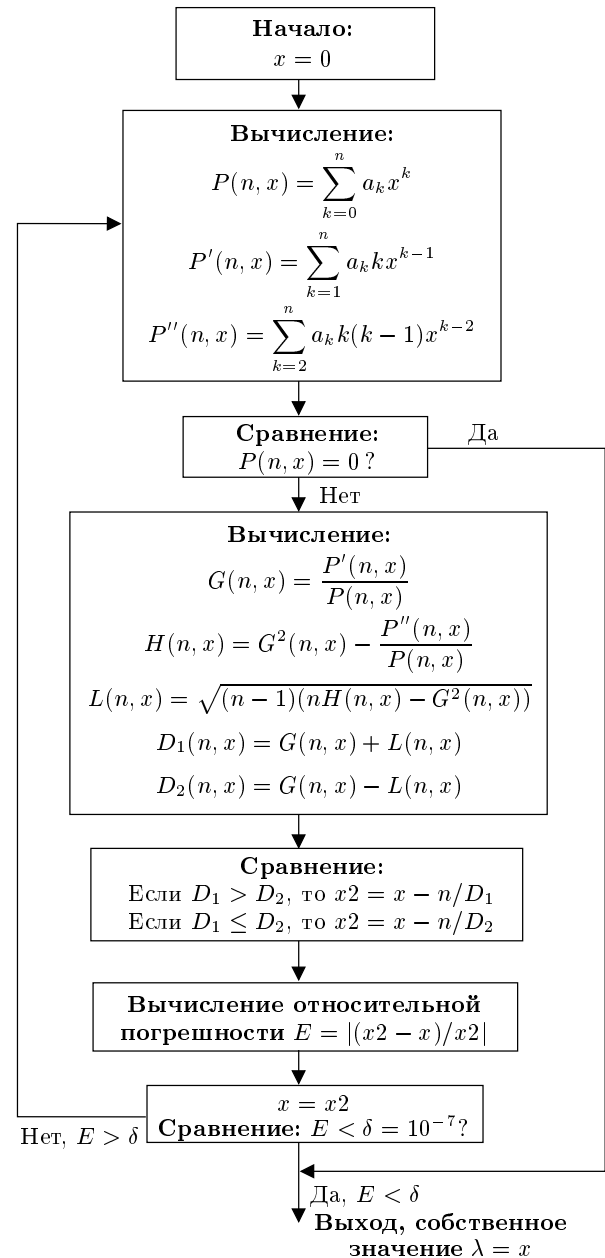


Рис. 2. Схема алгоритма нахождения собственного значения по методу Лагерра. Порядок полинома n и коэффициенты полинома $\{a_0, a_1, \dots, a_n\}$ являются входными параметрами

ленность типа 0/0. Разрешение этой неопределенности возможно, если, например, применить известное правило Лопитала. Это, однако, может несколько усложнить общую процедуру и снизить ее эффективность. Альтернативный вариант заключается в искусственном введении погрешности, которая заведомо не может сказаться на результате вычислений. Например, в случае изотропной среды индексы пре-

ломления можно задать не строго одинаковыми, а различающимися, например, в седьмом десятичном разряде. Даже при толщине элементов в сотни микрон это не сможет заметно повлиять на результат вычислений¹⁾. В случаях нормального падения достаточно просто задать очень малое отклонение, например, точность отсчета угла 10^{-6} рад вряд ли возможна в эксперименте.

3. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРОПУСКАНИЯ И ОТРАЖЕНИЯ

Ниже будут представлены выражения для определения поля в отраженной и прошедшей волнах. Хотя эта задача была рассмотрена Берреманом, в его оригинальной работе в выражениях для поля прошедшей и отраженной волн (выражения (86)–(90) в ссылке [3]) имеется неточность.

Как и в [3], будем полагать, что анизотропная пластина или оптическая система из дискретных элементов, пропускание и отражение для которой нам требуется найти, заключена между двумя непоглощающими изотропными средами с коэффициентами преломления соответственно n_1 и n_2 . Световая волна падает со стороны среды с коэффициентом n_1 под углом α_1 по отношению к нормали поверхности пластины и выходит во вторую среду под углом α_2 . Поле на входе системы определяется суперпозицией падающей и отраженной волн, в то время как на выходе имеется только прошедшая волна:

$$\chi_T = \mathbf{P}(h)(\chi_I + \chi_R). \quad (17)$$

Здесь $\mathbf{P}(h)$ — матрица Берремана, которая в случае неоднородной среды или системы оптических элементов определяется произведением (4), χ_I, χ_T, χ_R — векторы, соответственно, падающей, прошедшей и отраженной волн.

В изотропной среде имеет место однозначная связь между компонентами электрического и магнитного полей, поэтому

$$\chi_I = \begin{pmatrix} E_x \\ r_x E_x \\ E_y \\ r_y E_y \end{pmatrix}, \quad \chi_R = \begin{pmatrix} R_x \\ -r_x R_x \\ R_y \\ -r_y R_y \end{pmatrix}, \quad (18)$$

$$\chi_T = \begin{pmatrix} T_x \\ r_x^* T_x \\ T_y \\ r_y^* T_y \end{pmatrix},$$

где

$$r_x = \frac{n_1}{\cos \alpha_1}, \quad r_y = n_1 \cos \alpha_1,$$

$$r_x^* = \frac{n_2}{\cos \alpha_2}, \quad r_y^* = n_2 \cos \alpha_2,$$

$$\frac{\sin \alpha_2}{\sin \alpha_1} = \frac{n_1}{n_2}. \quad (19)$$

Умножая слева обе части (17) на матрицу, обратную матрице Берремана, $\mathbf{F} = \mathbf{P}^{-1}$, получаем систему линейных уравнений, которую легко разрешить относительно неизвестных компонент поля R_x, R_y, T_x, T_y :

$$T_y = \frac{2(r_y E_y - ac E_x)}{bc + d}, \quad (20.1)$$

$$T_x = 2a E_x + b T_y, \quad (20.2)$$

$$R_x = (F_{11} + F_{12} r_x^*) T_x + (F_{13} + F_{14} r_y^*) T_y - E_x, \quad (20.3)$$

$$R_y = (F_{31} + F_{32} r_x^*) T_x + (F_{33} + F_{34} r_y^*) T_y - E_y, \quad (20.4)$$

где

$$a = \frac{r_x}{(F_{11} + F_{12} r_x^*) r_x + F_{22} r_x^* + F_{21}},$$

$$b = -\frac{(F_{13} + F_{14} r_y^*) r_x + F_{24} r_y^* + F_{23}}{(F_{11} + F_{12} r_x^*) r_x + F_{22} r_x^* + F_{21}}, \quad (20.5)$$

$$c = (F_{31} + F_{32} r_x^*) r_y + F_{42} r_x^* + F_{41},$$

$$d = (F_{33} + F_{34} r_y^*) r_y + F_{44} r_y^* + F_{43},$$

F_{ij} ($i, j = 1, 2, 3, 4$) — компоненты матрицы \mathbf{F} .

Коэффициенты пропускания T и отражения R вычисляются как отношение потоков энергии в прошедшей и отраженной волнах к потоку в падающей волне соответственно. На практике распространенным является простейший случай, когда в качестве первой и второй сред выступает воздух ($n_1 = n_2 \approx 1, \alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$), тогда

$$T = \frac{|T_x / \cos \alpha|^2 + |T_y|^2}{|E_x / \cos \alpha|^2 + |E_y|^2}, \quad (21)$$

$$R = \frac{|R_x / \cos \alpha|^2 + |R_y|^2}{|E_x / \cos \alpha|^2 + |E_y|^2}.$$

¹⁾ Предполагается, что вычисления выполняются с двойной точностью.

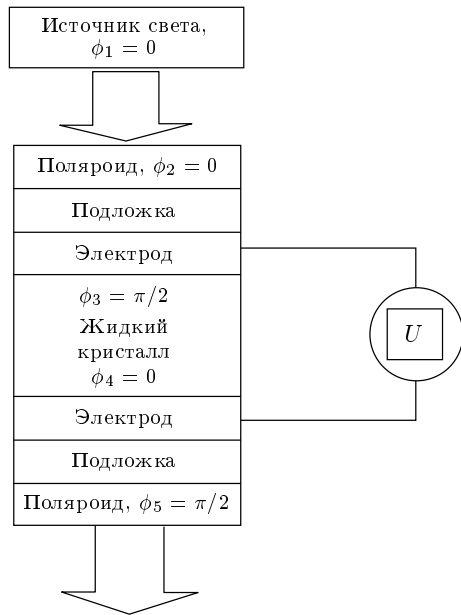


Рис. 3. Схема моделируемой оптической системы с жидким кристаллом. U — источник напряжения, прикладываемого к жидкому кристаллу

Подчеркнем, что все арифметические операции в данной работе выполняются с комплексными числами и вычисление квадрата модуля подразумевает соответствующую процедуру.

4. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ДЛЯ РАСЧЕТА ОПТИКИ «ТВИСТ-ЭФФЕКТА» В ЖИДКОМ КРИСТАЛЛЕ С УЧЕТОМ ВОЗМОЖНОЙ ДВУОСНОСТИ

В качестве примера рассчитаем оптику для системы, представленной на рис. 3. Она включает источник света и жидкокristаллическую ячейку между двумя скрещенными поляриоидами. Сначала мы рассчитаем статическую электрооптику в предположении одноосности жидкого кристалла ($n_b = n_a \equiv n_{\perp}$). Затем искусственно введем два типа двуосности ($n_b < n_a$ и $n_b > n_a$) и рассмотрим ее влияние на электрооптику и угловые характеристики оптического контраста при переключении в электрическом поле.

Определим все параметры, необходимые для расчета оптических элементов.

Поляриоиды. Поляриоиды моделируются одноосной оптической средой ($\varepsilon_a = \varepsilon_b$), которая характеризуется анизотропией коэффициента поглощения $k_c \gg k_a$. Таким образом, главные значения комплексной диэлектрической проницаемости выражаются через индексы показателя преломления n_c, n_a

и коэффициенты поглощения k_c, k_a следующим образом:

$$\varepsilon_{c,a} = \left(n_{c,a} + \frac{i\lambda k_{c,a}}{4\pi} \right)^2, \quad (22)$$

где λ — длина волны света, индексы a и c соответствуют главным осям эллипсоида **A** и **C** (см. рис. 1)²⁾.

Типичные поляриоидные пленки толщиной 200 мкм, используемые в жидкокristаллических дисплеях, хорошо моделируются показателем преломления $n_a \approx n_c = 1.5$ и коэффициентами поглощения $k_a = 0.001 \text{ мкм}^{-1}$ и $k_c = 0.02 \text{ мкм}^{-1}$ на длине волны 550 нм. При этом коэффициент пропускания двух поляриоидов, ориентированных так, что оси малого поглощения параллельны поляризации нормально падающего света, составляет ~ 0.6 . Если поляриоиды скрещены, то коэффициент пропускания оказывается равным ~ 0.01 . При вычислении матрицы Берремана следует иметь в виду, что главная ось **C** лежит в плоскости поляриоидной пленки ($\theta = \pi/2$).

В схеме, показанной на рис. 3, первый поляриоид ориентирован осью слабого поглощения вдоль поляризации источника света ($\phi_2 = \phi_1 = 0$) и перпендикулярно направлению ориентации директора жидкого кристалла на первой поверхности ($\phi_3 = \pi/2$). Второй поляриоид (анализатор) скрещен ($\phi_5 = \pi/2$) по отношению к первому.

Изотропные оптические стекла. Подложки жидкокristаллической ячейки моделируются изотропной средой. Все главные значения диэлектрического эллипсоида одинаковы, а коэффициент поглощения равен нулю. Для стандартных стекол можно задать $\varepsilon_a = \varepsilon_b = \varepsilon_c \approx 1.53^2 \approx 2.34$. В данном моделировании используются стекла толщиной 200 мкм.

Электроды. Электроды являются изотропными ($\varepsilon_a = \varepsilon_b = \varepsilon_c$), однако реальная часть коэффициента преломления выше, чем у стекла, и коэффициент поглощения отличен от нуля. В данной работе для моделирования используются электроды толщиной 0.01 мкм со значением реальной части показателя преломления $n = 1.7$ и значением коэффициента поглощения $k = 0.1 \text{ мкм}^{-1}$.

Распределение молекул жидкого кристалла в электрическом поле. В качестве непоглощающего модельного жидкого кристалла выбрано вещество со следующими параметрами:

²⁾ Иногда из-за другого соглашения о комплексном представлении световой волны второе слагаемое в скобках в выражении (22) записывается со знаком минус. В этом случае знаки всех мнимых чисел в статье должны быть инвертированы.

коэффициенты упругости $K_{11} = 6.4$ пН, $K_{22} = 3$ пН, $K_{33} = 10$ пН;

низкочастотные индексы диэлектрической проницаемости: $\varepsilon_{\perp} = 6.7$, $\varepsilon_{\parallel} = 19.7$;

оптические индексы преломления на длине волны 550 нм: $n_a \equiv n_{\perp} = 1.54$, $n_c \equiv n_{\parallel} = 1.72$, направление директора молекул жидкого кристалла соответствует оси С диэлектрического эллипсоида (см. рис. 1);

условия на границах: угол отклонения директора жидкого кристалла от нормали 89 градусов; зенитальная энергия связи 0.2 мДж/м²; азимутальная энергия связи 0.1 мДж/м²; взаимная азимутальная ориентация директора на противоположных поверхностях 90 градусов (твист-ячейка). При этом директор на первой границе ориентирован перпендикулярно поляризатору, а на второй границе — перпендикулярно анализатору.

Толщина слоя жидкого кристалла выбрана равной 3.1 микрона.

Расчет распределения директора в электрическом поле осуществлялся путем решения нелинейных дифференциальных уравнения баланса моментов сил, полученных в результате минимизации свободной энергии Франка [12].

На рис. 4 показаны расчетные значения зависимости пропускания всей оптической системы от напряжения на жидкокристаллической ячейке при нормальном падении монохроматического света длиной волны $\lambda = 550$ нм. Кривая 1 соответствует одноосному жидкому кристаллу ($n_b = n_a = 1.54$). Введение «положительной» двуосности ($n_b = 1.58 > n_a = 1.54$, $\psi = 0$) приводит к уменьшению крутизны кривой в диапазоне 1–3 В. Если ввести «отрицательную» двуосность ($n_b = 1.50 < n_a = 1.54$, $\psi = 0$), то в зависимости (кривая 3) появляется особенность, заключающаяся в наличии дополнительных экстремумов при напряжениях выше 1 В. Отметим, что подобное поведение в одноосных жидкокристаллических твист-ячейках возможно лишь при наклонном падении света. Поэтому этот вид зависимости (кривая 3) может выступать в качестве характеристического для двуосных жидких кристаллов при нормальном падении.

Очень ярко наличие двуосности проявляется в угловых зависимостях оптического контраста (см. рис. 5). Контрастное отношение вычислялось как

$$\gamma = \frac{T_0 - T_1}{T_1}, \tag{23}$$

где T_0 соответствует пропусканию в выключенном (светлом) состоянии, а T_1 — пропусканию во вклю-

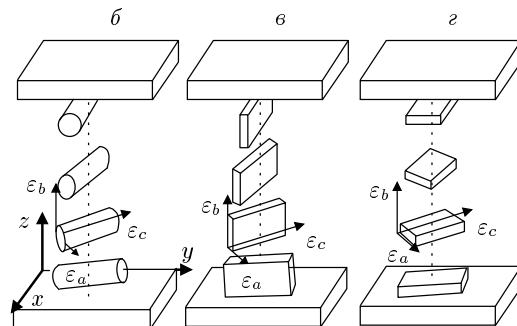
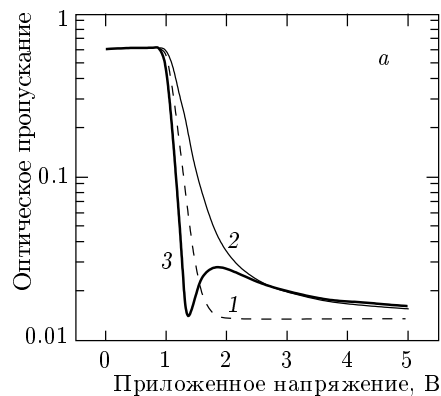


Рис. 4. Зависимости оптического пропускания от приложенного напряжения (а): 1 — одноосный жидкий кристалл; 2 — введена «положительная» двуосность ($n_b = 1.58 > n_a = 1.54$); 3 — введена «отрицательная» двуосность ($n_b = 1.50 < n_a = 1.54$). При вычислениях предполагается, что главная ось А (рис. 1) ориентирована под углом $\psi = 0$. Схематическое изображение начального ($U = 0$) распределения молекул жидкого кристалла: б — одноосный жидкий кристалл; в — «положительная» двуосность; з — «отрицательная» двуосность. Двуосные молекулы жидкого кристалла изображены в форме параллелепипедов. Свет поляризован вдоль оси x и распространяется в направлении z

ченном (темном) состоянии при 4.5 В на ячейке. В случае одноосного жидкого кристалла (рис. 5а) наблюдается хорошо известная асимметричная контрастная характеристика твист-эффекта [12]. Введение двуосности сильно меняет угловые характеристики. Как видно из рис. 5б, «отрицательная» двуосность сильно ухудшает угловые характеристики, в то время как «положительная» (рис. 5в) способствует расширению углов обзора. Таким образом, синтез и использование двуосных жидких кристаллов открывает новую степень свободы для улучшения угловых характеристик жидкокристаллических дисплеев.

Рис. 5. Угловые характеристики контрастного отношения (см. текст) в случае одноосного жидкого кристалла (*a*); в случае «отрицательной» двуосности (*б*) и в случае «положительной» двуосности (*в*). Контрастное отношение представлено интенсивностью в полярных координатах. Вдоль радиуса отложен угол падения света. Угол, отложенный вдоль внешней окружности, соответствует азимутальному углу, определяющему ориентацию плоскости падения света по отношению к оси *x* (см. рис. 4б)

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе описан новый эффективный метод расчета оптики неоднородных анизотропных слоистых сред. Продемонстрировано применение метода к расчету оптической системы, включающей жидкокристаллическую твист-ячейку с оптически двуосным жидким кристаллом.

Автор выражает глубокую благодарность проф. Л. М. Блинову, а также проф. Ф. Мартино-Лягард (Ph. Martinot-Lagarde, Лаборатория физики твердого тела, Орсе, Франция), которые инициировали мою деятельность в области численного моделирования жидких кристаллов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 99-02-16484)

ПРИЛОЖЕНИЕ

В самом общем случае компоненты матрицы Δ выражаются через компоненты диэлектрического тензора

$$\varepsilon = \|\varepsilon_{ij}\|, \quad i, j \in \{x, y, z\}, \quad (\text{П.1})$$

магнитного тензора

$$\mu = \|\mu_{ij}\|, \quad i, j \in \{x, y, z\}, \quad (\text{П.2})$$

и тензоров оптического вращения

$$\rho = \|\rho_{ij}\|, \quad \rho^* = \|\rho_{ij}^*\|, \quad i, j \in \{x, y, z\}, \quad (\text{П.3})$$

следующим образом:

$$\begin{aligned} \Delta_{11} &= \rho_{yx}^* + \left(\rho_{yz}^* + \frac{ck_x}{\omega} \right) a_1 + \mu_{yz} b_1, \\ \Delta_{12} &= \mu_{yy} + \left(\rho_{yz}^* + \frac{ck_x}{\omega} \right) a_2 + \mu_{yz} b_2, \\ \Delta_{13} &= \rho_{yy}^* + \left(\rho_{yz}^* + \frac{ck_x}{\omega} \right) a_3 + \mu_{yz} b_3, \\ \Delta_{14} &= -\mu_{yx} - \left(\rho_{yz}^* + \frac{ck_x}{\omega} \right) a_4 - \mu_{yz} b_4, \\ \Delta_{21} &= \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{xz} a_1 + \rho_{xz} b_1, \\ \Delta_{22} &= \rho_{xy} + \varepsilon_{xz} a_2 + \rho_{xz} b_2, \\ \Delta_{23} &= \varepsilon_{xy} + \varepsilon_{xz} a_3 + \rho_{xz} b_3, \\ \Delta_{24} &= -(\rho_{xx} + \varepsilon_{xz} a_4 + \rho_{xz} b_4), \\ \Delta_{31} &= -(\rho_{xx}^* + \rho_{xz}^* a_1 + \mu_{xz} b_1), \\ \Delta_{32} &= -(\mu_{xy} + \rho_{xz}^* a_2 + \mu_{xz} b_2), \\ \Delta_{33} &= -(\rho_{xy}^* + \rho_{xz}^* a_3 + \mu_{xz} b_3), \\ \Delta_{34} &= \mu_{xx} + \rho_{xz}^* a_4 + \mu_{xz} b_4, \end{aligned}$$

$$\Delta_{41} = \varepsilon_{yx} + \varepsilon_{yz} a_1 + \left(\rho_{yz} - \frac{ck_x}{\omega} \right) b_1,$$

$$\Delta_{42} = \rho_{yy} + \varepsilon_{yz} a_2 + \left(\rho_{yz} - \frac{ck_x}{\omega} \right) b_2,$$

$$\Delta_{43} = \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{yz} a_3 + \left(\rho_{yz} - \frac{ck_x}{\omega} \right) b_3,$$

$$\Delta_{44} = -\rho_{yx} - \varepsilon_{yz} a_4 - \left(\rho_{yz} - \frac{ck_x}{\omega} \right) b_4,$$

где

$$\begin{aligned} a_1 &= (\rho_{zx}^* \rho_{zz} - \varepsilon_{zx} \mu_{zz}) / (\varepsilon_{zz} \mu_{zz} - \rho_{zz} \rho_{zz}^*), \\ a_2 &= [\mu_{zy} \rho_{zz} - (\rho_{zy} + ck_x/\omega) \mu_{zz}] / (\varepsilon_{zz} \mu_{zz} - \rho_{zz} \rho_{zz}^*), \\ a_3 &= [(\rho_{zy}^* - ck_x/\omega) \rho_{zz} - \varepsilon_{zy} \mu_{zz}] / (\varepsilon_{zz} \mu_{zz} - \rho_{zz} \rho_{zz}^*), \\ a_4 &= (\mu_{zx} \rho_{zz} - \rho_{zx} \mu_{zz}) / (\varepsilon_{zz} \mu_{zz} - \rho_{zz} \rho_{zz}^*), \\ b_1 &= (\rho_{zz}^* \varepsilon_{zx} - \varepsilon_{zz} \rho_{zx}^*) / (\varepsilon_{zz} \mu_{zz} - \rho_{zz} \rho_{zz}^*), \\ b_2 &= [(\rho_{zy} + ck_x/\omega) \rho_{zz}^* - \varepsilon_{zy} \mu_{zy}] / (\varepsilon_{zz} \mu_{zz} - \rho_{zz} \rho_{zz}^*), \\ b_3 &= [\rho_{zz}^* \varepsilon_{zy} - (\rho_{zy}^* - ck_x/\omega) \varepsilon_{zz}] / (\varepsilon_{zz} \mu_{zz} - \rho_{zz} \rho_{zz}^*), \\ b_4 &= (\rho_{zz}^* \rho_{zx} - \varepsilon_{zz} \mu_{zx}) / (\varepsilon_{zz} \mu_{zz} - \rho_{zz} \rho_{zz}^*). \end{aligned}$$

Отметим, что все компоненты в общем случае являются комплексными числами, а тензоры (П.1)–(П.3) определены таким образом, что уравнения состояния, связывающие индукции электрического (\mathbf{D}) и магнитного (\mathbf{B}) полей с их напряженностью, имеют следующий вид:

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} + \rho \mathbf{H}, \quad (\text{П.4})$$

$$\mathbf{B} = \rho^* \mathbf{E} + \mu \mathbf{H}, \quad (\text{П.5})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= (D_x, D_y, D_z)^T, \quad \mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)^T, \\ \mathbf{E} &= (E_x, E_y, E_z)^T, \quad \mathbf{H} = (H_x, H_y, H_z)^T. \end{aligned} \quad (\text{П.6})$$

Заметим, что при наличии оптической активности, например, электрическая индукция определяется не только напряженностью электрического поля, но и напряженностью магнитного поля. Уравнения (П.4), (П.5) являются следствием линейной зависимости между шестью компонентами электромагнитного поля $(E_x, E_y, E_z, H_x, H_y, H_z)^T$ и $(D_x, D_y, D_z, B_x, B_y, B_z)^T$, определяемой матрицей размером 6×6 . Второй и четвертый квадранты этой матрицы определяют диэлектрический и магнитный тензоры, а первый и третий — тензоры оптической активности. С определением элементов тензоров оптической активности в некоторых частных случаях можно познакомиться в [3].

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Teitler and B. W. Henvis, J. Opt. Soc. Amer. **60**, 830 (1970).

2. D. W. Berreman and T. J. Scheffer, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 577 (1970).
3. D. W. Berreman, *J. Opt. Soc. Amer.* **62**, 502 (1972).
4. D. W. Berreman, *J. Opt. Soc. Amer.* **63**, 1374 (1973).
5. R. C. Jones, *J. Opt. Soc. Amer.* **31**, 488 (1941) и послед. работы; А. Джеррард, Дж. М. Берч, *Введение в матричную оптику*, Мир, Москва (1978).
6. F. Cuypers and H. Pauwels, *Liq. Cryst.* **3**, 1157 (1988).
7. P. Allia, M. Arlone, C. Oldano, and L. Trossi, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **179**, 253 (1990).
8. J. Papánek and Ph. Martinot-Lagarde, *J. Phys. II France* **6**, 205 (1996).
9. P. Yeh, *J. Opt. Soc. Amer.* **72**, 507 (1982).
10. Г. Корн, Т. Корн, *Справочник по математике для научных работников и инженеров*, Наука, Москва (1973).
11. С описанием метода можно познакомиться на сайте Интернета <http://mathworld.wolfram.com/LaguerresMethod.htm>, там же даны ссылки: W. H. Flannery, B. P., Teukolsky S. A., and Vetterling W. T., *Numerical Recipes in FORTRAN: The Art of Scientific Computing*, 2nd ed. Cambridge, England: Cambridge University Press, pp. 365-366 (1992). Ralston, A. and Rabinowitz, P. §8.9-8.13 in *A First Course in Numerical Analysis*, 2nd ed. New York: McGraw-Hill (1978).
12. L. M. Blinov and V. G. Chigrinov, *Electrooptic Effects in Liquid Crystal Materials*, Springer-Verlag, New York (1994).