

Границы применимости приближения прямых лучей при моделировании оптических свойств жидкокристаллических дифракционных решёток

Д.Д. Яковлев¹, Д.А. Яковлев¹

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», Саратов, Россия

Аннотация

С помощью компьютерного моделирования оцениваются границы применимости приближения прямых лучей для расчёта оптических характеристик жидкокристаллических дифракционных решёток с плавной пространственной модуляцией ориентации локальной оптической оси в жидкокристаллическом слое. Представленные данные, касающиеся влияния скорости и характера модуляции локальной оптической оси, а также величины коэффициента двулучепреломления среды на точность результатов, получаемых в указанном приближении, являются полезными и при рассмотрении слоёв с непериодическим характером вариации локальной оптической оси.

Ключевые слова: дифракция и решётки, оптические устройства, физическая оптика, двулучепреломляющие дифракционные решётки, приближение прямых лучей, модальный метод решёток.

Цитирование: Яковлев, Д.Д. Границы применимости приближения прямых лучей при моделировании оптических свойств жидкокристаллических дифракционных решёток / Д.Д. Яковлев, Д.А. Яковлев // Компьютерная оптика. – 2020. – Т. 44, № 1. – С. 40-52. – DOI: 10.18287/2412-6179-CO-562.

Citation: Yakovlev DD, Yakovlev DA. Limits of applicability of the direct ray approximation in modeling optical properties of liquid-crystal diffraction gratings. Computer Optics 2020; 44(1): 40-52. DOI: 10.18287/2412-6179-CO-562.

Введение

Появление доступных фотоуправляемых материалов для ориентации жидких кристаллов (ЖК) [1–21] и фотоуправляемых жидкокристаллических материалов [22–25], позволяющих относительно просто создавать условия для формирования разнообразных латерально периодических структур в жидкокристаллических слоях и управлять ими, открыло возможность создания новых типов поляризационно-дифракционных (ПД) устройств [1–25], в частности ПД-решёток, перенастраиваемых или переключаемых с помощью светового воздействия и/или внешнего низкочастотного электрического поля [2–5, 7, 8, 10, 12, 14–17, 21, 24, 25]. В литературе можно найти многочисленные упоминания о создании на основе ПД-решёток на жидких кристаллах высококонтрастных электроуправляемых спектральных фильтров [8, 12], поляриметров [13], делителей пучка, дефлекторов [5] и использовании таких решёток в устройствах отображения и защиты информации [7, 26]. Несмотря на достигнутые успехи, благодаря огромному разнообразию возможностей, предоставляемых современными материалами и технологиями, поиск новых типов и конструкций ПД-устройств на ЖК в настоящее время только расширяется.

Анализ оптических свойств ЖК-решёток с относительно большим периодом латеральной модуляции ориентации локальной оптической оси в условиях, когда отражение в объёме слоя ЖК является прене-

брежимо малым, часто осуществляется с помощью подхода, опирающегося на приближение прямых лучей (*direct ray approximation*, DRA) [3–10, 12, 13, 15–20, 27–30]. В этом приближении слой ЖК считается достаточно тонким, а латеральные вариации материальных параметров достаточно медленными, чтобы можно было приближённо считать, что при нормальном падении на слой плоской волны локальные характеристики проходящего через слой волнового поля в произвольной точке слоя A полностью определяются свойствами этого поля в точке A_0 , являющейся проекцией точки A на плоскость границы слоя, от которой это поле распространяется, и материальными свойствами среды на отрезке A_0A . В этом приближении рассчитывается распределение напряжённости электрического поля в плоскости, расположенной непосредственно за задней границей модулирующего слоя (или тонкослойной системы, содержащей этот слой), по которому стандартными методами Фурье-оптики вычисляются характеристики прошедшего поля в точках, расположенных вдали от модулирующего слоя. Этот подход, который мы будем условно называть здесь DRA-методом, очень удобен при решении оптимизационных задач и во многих интересных случаях позволяет получать аналитические выражения для характеристик поля дифракции через параметры падающей волны и модулирующего слоя.

Поскольку DRA опирается на лучевую картину распространения света в модулирующем слое, а это

представление становится неадекватным при приближении периода решётки к величинам порядка длины волны падающего света, с уменьшением латерального периода структуры модулирующего слоя точность DRA-метода ухудшается. Для компьютерного моделирования свойств ЖК-решёток с периодом порядка длины волны используются строгие методы, основанные на численном решении уравнений Максвелла для периодических структур [27, 31–42], такие как модальный метод решёток [27, 31–37]. Строгие методы требуют гораздо больших вычислительных затрат, чем DRA-метод, и объём этих затрат быстро возрастает с увеличением периода решётки. Поскольку использование DRA сильно упрощает и анализ свойств ЖК-решёток, и решение оптимизационных задач для них, знание границ применимости этого приближения и порядка погрешности DRA-метода в конкретных ситуациях очень важно. Погрешность сильно зависит не только от периода решётки, но и от характера и степени модуляции ориентации локальной оптической оси, толщины ЖК-слоя и показателя двулучепреломления ЖК-материала. Выяснение границ применимости DRA-метода при рассмотрении различных типов ЖК-решёток и явилось основной целью исследования, результаты которого представляются в настоящей работе.

Оценки погрешности DRA-метода производились нами посредством сравнения результатов, полученных с его помощью, с результатами, полученными с помощью модального метода решёток. Описание используемых вариантов модального метода решёток и DRA-метода дано в параграфе 2. В параграфе 3 на конкретных примерах мы показываем, как влияет на точность DRA-метода характер модуляции локальной оптической оси, и для разных случаев очерчиваем область параметров модулирующего слоя, подходящую для применения DRA-метода. Для того, чтобы дать более полное представление о влиянии характера неоднородности слоя на точность DRA-метода, мы приводим оценки и для некоторых типов периодических структур, в принципе реализуемых, но в настоящее время не используемых в практических устройствах. Полученные оценки предельных скоростей вариации локальной оптической оси, допускающих применение DRA, могут быть полезны и при рассмотрении ЖК-слоёв с произвольным характером латеральной неоднородности. Знание пределов применимости DRA-методов для таких слоёв тоже нередко бывает необходимым (см. напр. [43, 44]). Заметим, что точное решение оптической задачи для таких слоёв часто получить не удаётся, поэтому осуществить прямую оценку точности DRA-методов, как в случае периодических сред, не представляется возможным.

1. Рассматриваемые типы ЖК-решёток

В настоящей работе мы будем рассматривать ЖК-решётки трёх типов, отличающиеся характером

латеральной модуляции ориентации локальной оптической оси (ЛОО): 1) решётки с латеральной модуляцией только азимутальной ориентации ЛОО, 2) решётки с латеральной модуляцией только наклона ЛОО и 3) решётки с латеральной модуляцией как наклона, так и азимутальной ориентации ЛОО.

Решётки первого типа мы будем называть АМОА-решётками (*azimuthally-modulated-optic-axis gratings*). Для АМОА-решёток с линейным изменением угла азимутальной ориентации ЛОО (см. подпараграф 3.1) – планарный вариант структуры такой решётки показан на рис. 1а (цилиндры показывают ориентацию ЛОО) – с помощью DRA был теоретически предсказан ряд практически интересных свойств [3, 5, 7, 8, 10, 12, 13], таких как сильная зависимость дифракционной эффективности нулевого порядка от длины волны [3, 8, 12], циркулярная поляризация дифрагированных волн порядков +2 и –2 [3, 13] и сильная зависимость дифракционных эффективностей порядков +2 и –2 от степени и знака циркулярной поляризации падающей волны [3]. Эти предсказания нашли своё подтверждение в экспериментах, выполненных на слоях нематических жидких кристаллов (ЖК), модуляция азимутальной ориентации локальной оптической оси (ЖК директора) в которых задавалась с помощью фотоориентируемых покрытий [2–13].

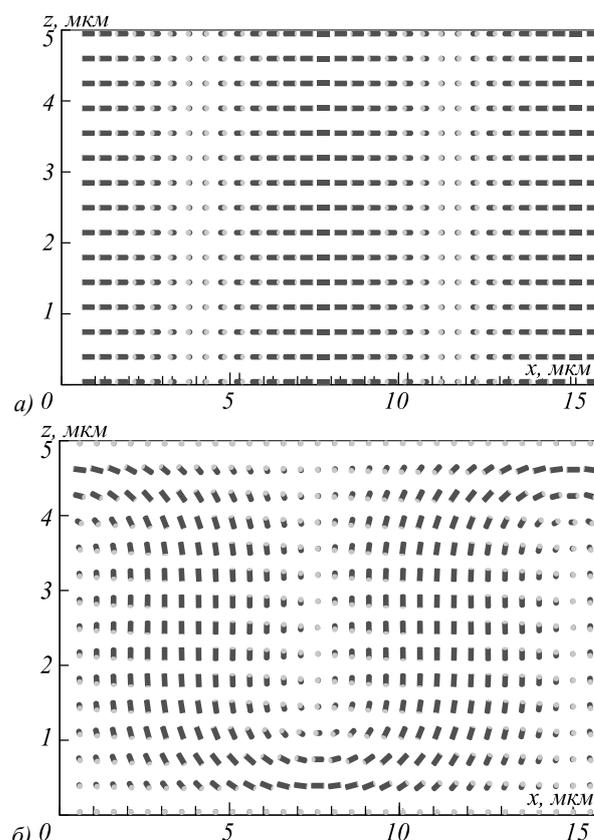


Рис. 1. Примеры латерально-периодических двулучепреломляющих слоёв: АМОА-решётка ($\theta_{max} = 0$; см. подпараграф 3.1) (а); SFLH-решётка (б). Толщина слоя – 5 мкм, период – 15 мкм

Решётки с латеральной вариацией только наклона ЛОО мы будем условно называть ТМОА-решётками (*tilt-modulated-optic-axis gratings*). Такой тип модуляции характерен, например, для ЖК-слоёв с так называемыми доменами Вильямса (один из видов периодических структур, возникающих в слоях нематических ЖК под действием электрического поля) [28, 45].

Разнообразные и многочисленные примеры структур с одновременной периодической латеральной модуляцией как азимутальной ориентации ЛОО, так и её наклона, – слои с таким характером модуляции мы будем называть СМОА-решётками (*complexly-modulated-optic-axis gratings*) – можно найти среди структур, возникающих в слоях холестерических ЖК под действием внешнего электрического или магнитного поля [25, 46–52]. В частности, к такого типа структурам относятся структуры типа «поверхностно-возмущенная лежащая спираль» (SFLH, *surface-frustrated lying-helix*) [25, 52] (рис. 1б).

2. Методы

2.1. Общая постановка задачи

Пусть на латерально-модулированный слой двулучепреломляющей немагнитной ($\mu = 1$) среды, имеющий толщину d и ограниченный плоскостями $z = z_0$ и $z = z_d$ ($z_d - z_0 = d$) декартовой системы координат (x, y, z) , в нормальном направлении из полупространства $z < z_0$ падает плоская монохроматическая волна с вектором электрической напряженности

$$\mathbf{E}_{\text{inc}}(z, t) = \mathbf{E}_{0\text{inc}}(z) \exp(-i\omega t),$$

где ω – круговая частота и t – время. Будем считать, что среды, с которыми граничит слой, являются однородными и изотропными и имеют показатель преломления n_{sur} . Волновой вектор решетки \mathbf{k}_g считаем направленным вдоль оси x . В этом случае тензор диэлектрической проницаемости среды $\boldsymbol{\varepsilon}$ не зависит от y и является периодической функцией от x : при любых заданных значениях x и z

$$\boldsymbol{\varepsilon}(x, z) = \boldsymbol{\varepsilon}(x + \Lambda, z),$$

где Λ – период решетки. Будем считать, что слой является локально-одноосным и его главные показатели преломления, n_{\parallel} и n_{\perp} , не зависят от пространственных координат. Ориентацию ЛОО в слое будем характеризовать единичным вектором-столбцом

$$\mathbf{c}(x, z) = \begin{pmatrix} c_x(x, z) \\ c_y(x, z) \\ c_z(x, z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi(x, z) \cos \theta(x, z) \\ \sin \varphi(x, z) \cos \theta(x, z) \\ \sin \theta(x, z) \end{pmatrix},$$

где φ – угол азимутальной ориентации ЛОО (угол между осью x и проекцией вектора \mathbf{c} на плоскость (x, y)) и θ – угол наклона ЛОО (угол, который ЛОО составляет с плоскостью (x, y)). Тензор диэлектрической проницаемости $\boldsymbol{\varepsilon}(x, z)$ выражается через $\mathbf{c}(x, z)$ следующим образом:

$$\boldsymbol{\varepsilon}(x, z) = \varepsilon_{\perp} \mathbf{I} + \Delta \varepsilon \mathbf{c}(x, z) \otimes \mathbf{c}^T(x, z),$$

$$\Delta \varepsilon = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}, \quad \varepsilon_{\perp} = n_{\perp}^2, \quad \varepsilon_{\parallel} = n_{\parallel}^2,$$

где \mathbf{I} – единичная 3×3 матрица, \otimes – символ кронекерского умножения матриц и T – символ транспонирования. В силу своей периодичности функция $\boldsymbol{\varepsilon}(x, z)$ может быть представлена в виде ряда:

$$\boldsymbol{\varepsilon}(x, z) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \boldsymbol{\varepsilon}_m(z) \exp(imk_0 px), \quad (1)$$

где $k_0 = 2\pi n_{\text{sur}}/\lambda$ и $p = |\mathbf{k}_g|/k_0 = 2\pi/(\Lambda k_0)$. Согласно теореме Блоха–Флоке, векторы напряженности электрического и магнитного полей как снаружи, так и внутри рассматриваемого слоя можно также представить в виде рядов Фурье [32, 33]:

$$\mathbf{E}(x, z, t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathbf{E}_m(z) \exp[i(mk_0 px - \omega t)], \quad (2)$$

$$\mathbf{H}(x, z, t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathbf{H}_m(z) \exp[i(mk_0 px - \omega t)].$$

В соответствии с этим поле за слоем может рассматриваться как суперпозиция плоских волн (разложение Рэлея):

$$\mathbf{E}_{\text{out}}(x, z, t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathbf{E}_{\text{out}m} \exp[i(k_{zm}z + mk_0 px - \omega t)],$$

$$\mathbf{H}_{\text{out}}(x, z, t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathbf{H}_{\text{out}m} \exp[i(k_{zm}z + mk_0 px - \omega t)],$$

$$k_{zm} = k_0 \sqrt{1 - m^2 p^2}.$$

Плосковолновые компоненты прошедшего поля с действительным k_{zm} являются распространяющимися, а компоненты с мнимым k_{zm} – затухающими. Для распространяющихся волн представим $\mathbf{E}_{\text{out}m}$ в виде

$$\mathbf{E}_{\text{out}m} = \mathbf{e}_{1m} A_{1m} + \mathbf{e}_{2m} A_{2m}, \quad (3)$$

где \mathbf{e}_{1m} и \mathbf{e}_{2m} – единичные действительные базисные векторы, такие что \mathbf{e}_{1m} и \mathbf{e}_{2m} образуют правую тройку векторов с волновой нормалью рассматриваемой волны \mathbf{l}_m (направление вектора \mathbf{l}_0 совпадает с направлением волновой нормали падающей волны \mathbf{l}_{inc}), и A_{1m} и A_{2m} – скалярные комплексные амплитуды соответствующих компонент волн. Для $\mathbf{E}_{0\text{inc}}$ будем использовать аналогичное представление

$$\mathbf{E}_{0\text{inc}} = \mathbf{e}_{1\text{inc}} A_{1\text{inc}} + \mathbf{e}_{2\text{inc}} A_{2\text{inc}}, \quad (4)$$

и выберем базисные векторы $\mathbf{e}_{1\text{inc}}$ и $\mathbf{e}_{2\text{inc}}$ сонаправленными с осями x и y , как и векторы \mathbf{e}_{10} и \mathbf{e}_{20} . Для дифрагированных волн с $m \neq 0$ удобно выбрать \mathbf{e}_{1m} параллельным плоскости дифракции (p -поляризация), а \mathbf{e}_{2m} – перпендикулярным плоскости дифракции (s -поляризация). Падающее поле и распространяющиеся плосковолновые компоненты прошедшего поля будем характеризовать векторами Стокса

$$\mathbf{S}_{\text{inc}} = \frac{cn_{\text{sur}}\mathbf{I}_{\text{inc}}\mathbf{z}}{8\pi} \begin{pmatrix} A_{1\text{inc}}A_{1\text{inc}}^* + A_{2\text{inc}}A_{2\text{inc}}^* \\ A_{1\text{inc}}A_{1\text{inc}}^* - A_{2\text{inc}}A_{2\text{inc}}^* \\ 2\text{Re}(A_{1\text{inc}}A_{2\text{inc}}^*) \\ 2\text{Im}(A_{1\text{inc}}A_{2\text{inc}}^*) \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{S}_{\text{out}m} = \frac{cn_{\text{sur}}\mathbf{I}_m\mathbf{z}}{8\pi} \begin{pmatrix} A_{1m}A_{1m}^* + A_{2m}A_{2m}^* \\ A_{1m}A_{1m}^* - A_{2m}A_{2m}^* \\ 2\text{Re}(A_{1m}A_{2m}^*) \\ 2\text{Im}(A_{1m}A_{2m}^*) \end{pmatrix},$$

где \mathbf{z} – единичный вектор в положительном направлении оси z и c – скорость света в вакууме. Первый элемент рассчитываемых таким образом векторов Стокса равен плотности потока энергии рассматриваемой волны через плоскость $z = \text{const}$. Дифракционные свойства слоя будем характеризовать набором матриц Мюллера \mathbf{M}_m , связывающих векторы Стокса дифрагированных волн $\mathbf{S}_{\text{out}m}$ с вектором Стокса падающей волны \mathbf{S}_{inc} :

$$\mathbf{S}_{\text{out}m} = \mathbf{M}_m \mathbf{S}_{\text{inc}}.$$

Значения матриц \mathbf{M}_m , полученные модальным методом решёток, обозначим $\mathbf{M}_{\text{gr}m}$, а их значения, полученные с помощью DRA, $\mathbf{M}_{\text{DRA}m}$.

Меру отклонения значения вектора Стокса дифрагированной волны порядка m , полученного с помощью DRA-метода, от его точного значения можно охарактеризовать следующим параметром:

$$e_{\text{DRA}m} = \frac{\|\mathbf{S}_{\text{out}m} - \mathbf{S}_{\text{DRA}m}\|_{\text{E}}}{\|\mathbf{S}_{\text{inc}}\|_{\text{E}}},$$

где $\mathbf{S}_{\text{DRA}m} = \mathbf{M}_{\text{DRA}m} \mathbf{S}_{\text{inc}}$ и $\|\mathbf{S}\|_{\text{E}}$ – евклидова норма вектора \mathbf{S} . Воспользовавшись общим соотношением $\|\mathbf{A}\mathbf{B}\|_{\text{E}} \leq \|\mathbf{A}\|_{\text{S}} \|\mathbf{B}\|_{\text{E}}$, где \mathbf{A} – матрица, \mathbf{B} – вектор и $\|\mathbf{A}\|_{\text{S}}$ – спектральная норма матрицы \mathbf{A} ($\|\mathbf{A}\|_{\text{S}} = (\lambda_{\text{max}}[\mathbf{A}^\dagger \mathbf{A}])^{1/2}$, где $\lambda_{\text{max}}[\mathbf{A}^\dagger \mathbf{A}]$ – наибольшее собственное значение матрицы $\mathbf{A}^\dagger \mathbf{A}$ и † – символ эрмитова сопряжения), находим, что

$$e_{\text{DRA}m} \leq \chi_m,$$

где $\chi_m = \|\mathbf{M}_m - \mathbf{M}_{\text{DRA}m}\|_{\text{S}}$.

В отличие от $e_{\text{DRA}m}$, параметр χ_m не зависит от состояния поляризации падающей волны, поэтому именно его мы использовали как меру погрешности DRA-метода. В качестве «точных» значений матриц \mathbf{M}_m мы брали оценки, полученные модальным методом решёток (см. подпараграф 2.4).

Во всех рассматриваемых нами примерах доминирующими являются дифракционные порядки с номерами 0 и ± 2 (что характерно для ЖК-решёток), поэтому в качестве основных параметров, характеризующих погрешность расчётов, мы использовали пара-

метры χ_0 и $\chi_{0,2} = \max(\chi_0, \chi_2)$. По величине параметра χ_0 можно судить о применимости DRA для расчёта матрицы \mathbf{M}_0 , по величине $\chi_{0,2}$ – применимо ли DRA для оценки как матрицы \mathbf{M}_0 , так и матрицы \mathbf{M}_2 .

2.2. DRA-метод

Обозначим \mathbf{T}_m матрицу Джонса, связывающую вектор Джонса дифрагированной волны порядка m

$$\mathbf{J}_{\text{out}m} = \begin{pmatrix} A_{1m} \\ A_{2m} \end{pmatrix}$$

с вектором Джонса падающей волны

$$\mathbf{J}_{\text{inc}} = \begin{pmatrix} A_{1\text{inc}} \\ A_{2\text{inc}} \end{pmatrix}$$

($\mathbf{J}_{\text{out}m} = \mathbf{T}_m \mathbf{J}_{\text{inc}}$). В DRA-методе матрица \mathbf{T}_m для параксиальных мод рассчитывается по следующей приближенной формуле:

$$\mathbf{T}_m \approx \mathbf{T}_{\text{DRA}m} = \frac{1}{\Lambda} \int_0^\Lambda \mathbf{T}_{\text{ID}}(x) \exp(-imk_0 px) dx,$$

где $\mathbf{T}_{\text{ID}}(x)$ – матрица локального пропускания слоя [3, 53], вычисляемая как матрица Джонса пропускания слоя с тензором диэлектрической проницаемости ($\boldsymbol{\epsilon}_{\text{ID}x}$), зависящим только от z , $\boldsymbol{\epsilon}_{\text{ID}x}(z) = \boldsymbol{\epsilon}(x, z)$. Обычно матрица \mathbf{T}_{ID} рассчитывается с помощью классического метода фазовых матриц Джонса [3–10, 12, 13, 15–20, 27–30]. Мы для этой цели использовали более точный метод, основанный на методе собственноволновых матриц Джонса [30] и приближении пренебрежимой малости объёмного отражения [54–56]. Матрица \mathbf{T}_{ID} вычислялась как произведение трёх матриц:

$$\mathbf{T}_{\text{ID}} = \mathbf{T}_{\text{int}2x} \mathbf{T}_{\text{bulk}x} \mathbf{T}_{\text{int}1x}, \tag{5}$$

где $\mathbf{T}_{\text{int}1x}$ и $\mathbf{T}_{\text{int}2x}$ – собственноволновые матрицы Джонса пропускания границ раздела $z = z_0$ и $z = z_d$, а $\mathbf{T}_{\text{bulk}x}$ – собственноволновая матрица Джонса, описывающая распространение света в толще слоя от плоскости $z = z_0$ до плоскости $z = z_d$ в приближении пренебрежимой малости объёмного отражения [54–56]. Матрицы $\mathbf{T}_{\text{int}1x}$ и $\mathbf{T}_{\text{int}2x}$ (5) рассчитывались по формулам работы [57]. Матрица $\mathbf{T}_{\text{bulk}x}$ вычислялась методом аппроксимирующего многослойника [54].

Искомая матрица Мюллера $\mathbf{M}_{\text{DRA}m}$ выражается через матрицу $\mathbf{T}_{\text{DRA}m}$ следующим образом:

$$\mathbf{M}_{\text{DRA}m} = \cos \theta_m \mathbf{L} \left(\mathbf{T}_{\text{DRA}m} \otimes \mathbf{T}_{\text{DRA}m}^* \right) \mathbf{L}^{-1},$$

где

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & -i & i & 0 \end{pmatrix}$$

и $\cos \theta_m = \mathbf{l}_m \mathbf{z} = (1 - (m\lambda / (n_{\text{sur}} \Lambda))^2)^{1/2}$ – косинус угла дифракции для дифрагированной волны m -го порядка.

2.3. Модальный метод решёток

Подстановка (1) и (2) в материальные уравнения и уравнения Максвелла приводит к следующему обыкновенному дифференциальному уравнению [32, 33]:

$$\frac{d\Phi}{dz} = ik_0 \hat{\mathbf{D}} \Phi, \quad (6)$$

где Φ – вектор-столбец вида

$$\Phi = \begin{pmatrix} \bar{\mathbf{E}}_x \\ \bar{\mathbf{H}}_y \\ \bar{\mathbf{E}}_y \\ -\bar{\mathbf{H}}_x \end{pmatrix};$$

$$\bar{\mathbf{E}}_x = \begin{pmatrix} \vdots \\ E_{x,-1} \\ E_{x,0} \\ E_{x,1} \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{E}}_y = \begin{pmatrix} \vdots \\ E_{y,-1} \\ E_{y,0} \\ E_{y,1} \\ \vdots \end{pmatrix},$$

$$\bar{\mathbf{H}}_x = \begin{pmatrix} \vdots \\ H_{x,-1} \\ H_{x,0} \\ H_{x,1} \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{H}}_y = \begin{pmatrix} \vdots \\ H_{y,-1} \\ H_{y,0} \\ H_{y,1} \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

Здесь $E_{x,m}$ и $E_{y,m}$ – компоненты вектора \mathbf{E}_m , а $H_{x,m}$ и $H_{y,m}$ – компоненты вектора \mathbf{H}_m (см. (2)). Матрица $\hat{\mathbf{D}}$ в случае нормального падения имеет вид

$$\hat{\mathbf{D}} = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_{11} & \mathbf{D}_{12} & \mathbf{D}_{13} & \mathbf{0} \\ \mathbf{D}_{21} & \mathbf{D}_{22} & \mathbf{D}_{23} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{U} \\ \mathbf{D}_{41} & \mathbf{D}_{42} & \mathbf{D}_{43} & \mathbf{0} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{D}_{11} = -\zeta_x \bar{\epsilon}_{zz}^{-1} \bar{\epsilon}_{xx}, \quad \mathbf{D}_{12} = \mathbf{U} - \zeta_x \bar{\epsilon}_{zz}^{-1} \zeta_x,$$

$$\mathbf{D}_{13} = -\zeta_x \bar{\epsilon}_{zz}^{-1} \bar{\epsilon}_{zy}, \quad \mathbf{D}_{21} = \bar{\epsilon}_{xx} - \bar{\epsilon}_{xz} \bar{\epsilon}_{zz}^{-1} \bar{\epsilon}_{zx},$$

$$\mathbf{D}_{22} = -\bar{\epsilon}_{xz} \bar{\epsilon}_{zz}^{-1} \zeta_x, \quad \mathbf{D}_{23} = \bar{\epsilon}_{xy} - \bar{\epsilon}_{xz} \bar{\epsilon}_{zz}^{-1} \bar{\epsilon}_{zy},$$

$$\mathbf{D}_{41} = \bar{\epsilon}_{yx} - \bar{\epsilon}_{yz} \bar{\epsilon}_{zz}^{-1} \bar{\epsilon}_{zx}, \quad \mathbf{D}_{42} = -\bar{\epsilon}_{yz} \bar{\epsilon}_{zz}^{-1} \zeta_x,$$

$$\mathbf{D}_{43} = \bar{\epsilon}_{yy} - \bar{\epsilon}_{yz} \bar{\epsilon}_{zz}^{-1} \bar{\epsilon}_{zy} - \zeta_{xx},$$

где $\bar{\epsilon}_{lq}$ ($l, q = x, y, z$) – матрицы, составленные из компонентов тензоров ϵ_m :

$$[\bar{\epsilon}_{lq}]_{ij} = [\epsilon_{i-j}]_{lq};$$

ζ_x и ζ_{xx} – диагональные матрицы с элементами $[\zeta_x]_{mm} = m\pi$ и $[\zeta_{xx}]_{mm} = m^2 p^2$, $\mathbf{0}$ – нулевая матрица и \mathbf{U} – единичная матрица.

Уравнение (6) лежит в основе используемого в настоящей работе варианта модального метода реше-

ток. В этом методе ограничиваются учетом конечного числа гармоник разложения $\mathbf{E}(x)$ и $\mathbf{H}(x)$ в ряды Фурье, полагая, что бесконечные ряды в (1) и (2) можно без существенной потери точности заменить отрезками рядов Фурье размерности $m_{\text{hrmn}} = 2m_{\text{aprx}} + 1$, где m_{aprx} – номер высшей гармоники, которая учитывается в вычислениях. Индекс m у $E_{x,m}$, $E_{y,m}$, $H_{x,m}$ и $H_{y,m}$ тогда пробегает значения от $-m_{\text{aprx}}$ до m_{aprx} , а матрица $\hat{\mathbf{D}}$ имеет размер $4m_{\text{hrmn}} \times 4m_{\text{hrmn}}$.

Для вычисления оптических характеристик модулирующего слоя мы, как и в случае DRA-метода, использовали метод аппроксимирующего многослойника. Применимо к решёткам лежащее в основе этого метода приближение часто именуется ступенчатым приближением (*staircase approximation*). В этом приближении рассматриваемый неоднородный слой разбивается на подслои настолько тонкие, чтобы внутри каждого из них ϵ очень мало изменялось с z , и, в пренебрежении этими изменениями, в качестве расчётной модели слоя используется система из однородных по z подслоёв.

При модальном подходе поле внутри каждого из подслоёв рассматривается как суперпозиция собственных волн слоя. В соответствии с этим вектор Φ представляется в виде:

$$\Phi = \Psi \mathbf{A},$$

где Ψ – матрица, столбцами которой являются нормированные собственные векторы Ψ_j ($j = 1, 2, \dots, 4m_{\text{hrmn}}$) матрицы $\hat{\mathbf{D}}$ (соответствующее вектору Ψ_j собственное значение матрицы $\hat{\mathbf{D}}$ обозначим σ_j), и \mathbf{A} – вектор, компоненты A_j которого являются скалярными амплитудами соответствующих собственных волн. Вектор \mathbf{A} рассматривается в качестве основной характеристики состояния поля. Операторы пространственной эволюции вектора \mathbf{A} рассчитываются через собственные векторы и собственные значения матрицы $\hat{\mathbf{D}}$.

Векторы состояния \mathbf{A} внутри q -го подслоя, ограниченного плоскостями $z = z_q$ и $z = z_{q+1}$ ($z_q < z_{q+1}$), у его границ связаны соотношением

$$\mathbf{A}(z_{q+1} - 0) = \tilde{\mathbf{T}}_{\text{bulk}q} \mathbf{A}(z_q + 0),$$

где $\tilde{\mathbf{T}}_{\text{bulk}q}$ – диагональная матрица с элементами

$$[\tilde{\mathbf{T}}_{\text{bulk}q}]_{jj} = \exp(ik_0 \sigma_{jq} (z_{q+1} - z_q)),$$

σ_{jq} – значение σ_j для q -го подслоя. Значения вектора \mathbf{A} в соседних подслоях у границы между подслоями (пусть, например, это будет граница $z = z_q$) связаны следующим образом:

$$\mathbf{A}(z_q + 0) = \tilde{\mathbf{T}}_{\text{int}q} \mathbf{A}(z_q - 0),$$

где

$$\tilde{\mathbf{T}}_{\text{int}q} = \Psi(z_q + 0)^{-1} \Psi(z_q - 0). \quad (7)$$

Зная матрицы $\tilde{\mathbf{T}}_{\text{bulk}q}$ и $\tilde{\mathbf{T}}_{\text{int}q}$ для всех подслоёв, можно найти матричные операторы, связывающие

характеристики плосковолновых компонент прошедшего поля с характеристиками падающего поля. Мы для этой цели использовали алгоритм добавления [30], поскольку он отличается высокой численной стабильностью (хотя и не является самым быстрым среди подобных алгоритмов; см. табл. 1 в работе [34], где этот алгоритм называется $W \rightarrow t \rightarrow s \rightarrow \tilde{s} \rightarrow S$ вариантом алгоритма S-матриц). В этом алгоритме собственноволновый базис задаётся таким образом, чтобы вектор состояния \mathbf{A} имел следующий вид:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}^\downarrow \\ \mathbf{a}^\uparrow \end{pmatrix}, \quad (8)$$

где \mathbf{a}^\downarrow и \mathbf{a}^\uparrow – векторы, содержащие скалярные амплитуды собственных волн, распространяющихся вперед (от полупространства, из которого падает свет), и собственных волн, распространяющихся назад (в сторону полупространства, из которого падает свет) соответственно. Векторы \mathbf{a}^\downarrow и \mathbf{a}^\uparrow состоят из $2m_{\text{hrmn}}$ элементов. Матрицы $\tilde{\mathbf{T}}_{\text{int}q}$ (7) представляются в блочном виде

$$\tilde{\mathbf{T}}_{\text{int}q} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{T}}_{11q} & \tilde{\mathbf{T}}_{12q} \\ \tilde{\mathbf{T}}_{21q} & \tilde{\mathbf{T}}_{22q} \end{pmatrix}.$$

Через блоки $\tilde{\mathbf{T}}_{ijq}$ рассчитываются операторы пропускания и отражения для данной границы раздела:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{T}}_{Bq} &= \tilde{\mathbf{T}}_{22q}^{-1}, \quad \tilde{\mathbf{R}}_{Fq} = -\tilde{\mathbf{T}}_{22q}^{-1} \tilde{\mathbf{T}}_{21q}, \\ \tilde{\mathbf{R}}_{Bq} &= \tilde{\mathbf{T}}_{12q} \tilde{\mathbf{T}}_{22q}^{-1}, \quad \tilde{\mathbf{T}}_{Fq} = \tilde{\mathbf{T}}_{11q} - \tilde{\mathbf{T}}_{12q} \tilde{\mathbf{T}}_{22q}^{-1} \tilde{\mathbf{T}}_{21q}. \end{aligned}$$

Операторы $\tilde{\mathbf{T}}_{Fq}$ и $\tilde{\mathbf{R}}_{Fq}$ являются операторами пропускания и отражения для волновых полей, распространяющихся вперед, а $\tilde{\mathbf{T}}_{Bq}$ и $\tilde{\mathbf{R}}_{Bq}$ – операторами пропускания и отражения для волновых полей, распространяющихся назад. Для всей рассматриваемой системы, включающей в себя L подслоев, такие операторы пропускания и отражения вычисляются с помощью рекуррентных соотношений. Пусть для подсистемы, включающей в себя $j-1$ границ раздела и $j-1$ толщ подслоев известны операторы $\tilde{\mathbf{T}}_{F(j-1)}$, $\tilde{\mathbf{R}}_{F(j-1)}$, $\tilde{\mathbf{T}}_{B(j-1)}$ и $\tilde{\mathbf{R}}_{B(j-1)}$ и известны операторы для j -й границы раздела между этой подсистемой и следующим подслоем (с номером j) $\tilde{\mathbf{T}}_{Fj}$, $\tilde{\mathbf{R}}_{Fj}$, $\tilde{\mathbf{T}}_{Bj}$ и $\tilde{\mathbf{R}}_{Bj}$. Тогда операторы, описывающие подсистему, включающую в себя $j-1$ толщ подслоев и j границ раздела, рассчитываются следующим образом:

$$\tilde{\mathbf{T}}_{F(j)\text{int}} = \tilde{\mathbf{T}}_{Fj} \left(\mathbf{U} - \tilde{\mathbf{R}}_{B(j-1)} \tilde{\mathbf{R}}_{Fj} \right)^{-1} \tilde{\mathbf{T}}_{F(j-1)}, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{R}}_{F(j)\text{int}} &= \tilde{\mathbf{R}}_{F(j-1)} + \\ &+ \tilde{\mathbf{T}}_{B(j-1)} \tilde{\mathbf{R}}_{Fj} \left(\mathbf{U} - \tilde{\mathbf{R}}_{B(j-1)} \tilde{\mathbf{R}}_{Fj} \right)^{-1} \tilde{\mathbf{T}}_{F(j-1)}, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\tilde{\mathbf{T}}_{B(j)\text{int}} = \tilde{\mathbf{T}}_{B(j-1)} \left(\mathbf{U} - \tilde{\mathbf{R}}_{Fj} \tilde{\mathbf{R}}_{B(j-1)} \right)^{-1} \tilde{\mathbf{T}}_{Bj}, \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{R}}_{B(j)\text{int}} &= \tilde{\mathbf{R}}_{Bj} + \\ &+ \tilde{\mathbf{T}}_{Fj} \tilde{\mathbf{R}}_{B(j-1)} \left(\mathbf{U} - \tilde{\mathbf{R}}_{Fj} \tilde{\mathbf{R}}_{B(j-1)} \right)^{-1} \tilde{\mathbf{T}}_{Bj}. \end{aligned} \quad (12)$$

Если j -я граница раздела не является последней ($j \neq N$), то учитывается набег фаз при распространении собственных волн через толщу j -го слоя:

$$\tilde{\mathbf{T}}_{F(j)} = \mathbf{C}_{Fj} \tilde{\mathbf{T}}_{F(j)\text{int}}, \quad \tilde{\mathbf{T}}_{B(j)} = \tilde{\mathbf{T}}_{B(j)\text{int}} \mathbf{C}_{Bj}, \quad (13)$$

$$\tilde{\mathbf{R}}_{B(j)} = \mathbf{C}_{Fj} \tilde{\mathbf{R}}_{B(j)\text{int}} \mathbf{C}_{Bj}, \quad \tilde{\mathbf{R}}_{F(j)} = \tilde{\mathbf{R}}_{F(j)\text{int}}, \quad (14)$$

где \mathbf{C}_{Fj} и \mathbf{C}_{Bj} – диагональные матрицы с элементами $[\mathbf{C}_{Fj}]_{ii} = \exp(ik_0\sigma_{ij}d_j)$ и $[\mathbf{C}_{Bj}]_{ii} = \exp(-ik_0\sigma_{ij}d_j)$, d_j – толщина j -го подслоя. Полубесконечной среде, занимающей полупространство $z < z_0$, приписывается номер $j=0$ и набор операторов $\tilde{\mathbf{T}}_{F(0)} = \mathbf{U}$, $\tilde{\mathbf{T}}_{B(0)} = \mathbf{U}$, $\tilde{\mathbf{R}}_{F(0)} = \mathbf{0}$, $\tilde{\mathbf{R}}_{B(0)} = \mathbf{0}$, а затем по рекуррентным формулам (9–14) вычисляются операторы $\tilde{\mathbf{T}}_{F(N)\text{int}}$, $\tilde{\mathbf{R}}_{F(N)\text{int}}$, $\tilde{\mathbf{T}}_{B(N)\text{int}}$ и $\tilde{\mathbf{R}}_{B(N)\text{int}}$. Матрица $\tilde{\mathbf{T}}_{F(N)\text{int}}$ разбивается на 2×2 матричные блоки

$$\mathbf{T}_{Fm,n} = \left[\tilde{\mathbf{T}}_{F(N)\text{int}} \right]_{m,n},$$

где индексы m и n принимают значения от $-m_{\text{aprx}}$ до m_{aprx} . Если векторы $\boldsymbol{\Psi}_j$ для окружающих сред выбраны так, чтобы входящие в вектор \mathbf{A} собственные амплитуды были эквивалентны собственным амплитудам, используемым в представлениях (3) и (4), то матрица $\mathbf{T}_{Fm,0}$ по сути представляет собой матрицу Джонса \mathbf{T}_m , связывающую вектор Джонса падающего поля \mathbf{J}_{inc} с вектором Джонса m -й плосковолновой компоненты прошедшего поля $\mathbf{J}_{\text{out}m}$. Тогда искомые матрицы Мюллера \mathbf{M}_{grm} могут быть вычислены через матрицы $\mathbf{T}_{Fm,0}$ по формуле

$$\mathbf{M}_{grm} = \cos \theta_m \mathbf{L} \left(\mathbf{T}_{Fm,0} \otimes \mathbf{T}_{Fm,0}^* \right) \mathbf{L}^{-1}.$$

Классификация собственных мод подслоев на распространяющиеся вперед и назад при задании собственноволновых базисов для представления вектора \mathbf{A} в виде (8) осуществлялась нами с использованием одного из двух следующих критериев в зависимости от того, равняется нулю мнимая часть константы распространения моды σ (собственного значения матрицы \mathbf{D}) или нет. При $\text{Im}(\sigma) \neq 0$ волны с $\text{Im}(\sigma) > 0$ считались распространяющимися вперед, а волны с $\text{Im}(\sigma) < 0$ – распространяющимися назад. При $\text{Im}(\sigma) = 0$ направление распространения собственной волны определялось по знаку величины

$$s_z = \left\langle 2 \text{Re} \left(\mathbf{z} \left(\mathbf{E}(x) \times \mathbf{H}(x) \right) \right) \right\rangle_\Lambda = \boldsymbol{\Psi}^\dagger \mathbf{I}_0 \boldsymbol{\Psi},$$

где $\langle \dots \rangle_\Lambda$ обозначает усреднение по периоду:

$$\langle f(x) \rangle_\Lambda = \frac{1}{\Lambda} \int_{-\Lambda/2}^{\Lambda/2} f(x) dx.$$

Поскольку s_z всегда совпадает по знаку с усреднённой по времени и по периоду решётки z -компонентой вектора Пойнтинга рассматриваемой собственной волны, волны с $s_z > 0$ считались распространяющимися вперёд, а волны с $s_z < 0$ – распространяющимися назад. Заметим, что в литературе часто используются и другие критерии определения направления распространения собственных волн, основанные только на анализе собственных значений. Например, в работе [34] распространяющимися вперёд считаются собственные волны, для которых $\text{Im}(\sigma) + \text{Re}(\sigma) > 0$, а распространяющимися назад – волны, для которых $\text{Im}(\sigma) + \text{Re}(\sigma) < 0$. Использование этого критерия может привести к физически некорректным результатам вблизи так называемых аномальных сингулярностей [30], когда собственная волна может иметь, например, $\text{Im}(\sigma) = 0$ и $\text{Re}(\sigma) > 0$, но $s_z < 0$.

Программа для расчётов была написана на языке Fortran 90. Для вычислений DRA-методом использовались процедуры из библиотеки LMOPTICS [30].

2.4. Исходные параметры и анализ результатов

Расчёты проводились для слоёв двулучепреломляющих материалов с $n_{\perp} = 1,5$ при $\Delta n \equiv n_{\parallel} - n_{\perp} = 0,05, 0,1$ и $0,2$ (типичные значения Δn для ЖК-материалов), d от $0,1$ мкм до 15 мкм и с длиной волны падающего света $\lambda = 550$ нм. Для минимизации влияния отражений на внешних границах слоя на результаты значение n_{sur} бралось равным $(n_{\perp} n_{\parallel})^{1/2}$ [30]. И в случае DRA-метода, и в случае модального метода решётки слой ЖК аппроксимировался стопой из 201 подслоя, однородного по z . Толщины приграничных подслоёв (с номерами 1 и 201) задавались в два раза меньшими, чем толщины остальных подслоёв. Используемые в расчётах значения параметра $m_{\text{аргх}}$, определяющего число учитываемых гармоник, для рассматриваемых типов слоёв приведены в таблице в приложении. Точность расчёта элементов матриц \mathbf{M}_0 и \mathbf{M}_2 для аппроксимирующих многослойников при указанных значениях $m_{\text{аргх}}$ была не хуже, чем 10^{-4} .

Для каждого набора значений d и Δn определялись наименьшие (критические) значения периода решётки, Λ_{cr0} и $\Lambda_{\text{cr0,2}}$, для которых выполнялись условия $\chi_0 \leq 0,01$ при всех $\Lambda \geq \Lambda_{\text{cr0}}$ и $\chi_{0,2} \leq 0,01$ при всех $\Lambda \geq \Lambda_{\text{cr0}}$. В случаях, когда функции $\Lambda_{\text{cr0}}(d)$ и $\Lambda_{\text{cr0,2}}(d)$ имели узкие локальные минимумы, в качестве оценок Λ_{cr0} и $\Lambda_{\text{cr0,2}}$ мы брали несколько завышенные, но остающиеся надёжными и при малых изменениях структурных параметров слоя значения, определённые по значениям истинных функций $\Lambda_{\text{cr0}}(d)$ и $\Lambda_{\text{cr0,2}}(d)$ в соседних локальных максимумах. Поскольку для рассматриваемого в каждом из примеров параметрического множества слоёв одновременное изменение толщины слоя d , периода структуры Λ и длины волны λ , сохраняющее величину отношений d/λ и Λ/λ , при фиксированных n_{\perp} и n_{\parallel} не изменяет ре-

зультатов вычислений, полученные результаты представляются с использованием приведённых параметров $d\lambda = d/\lambda$, $\Lambda\lambda = \Lambda/\lambda$, $\Lambda_{\text{cr0}}\lambda = \Lambda_{\text{cr0}}/\lambda$ и $\Lambda_{\text{cr0,2}}\lambda = \Lambda_{\text{cr0,2}}/\lambda$.

Под периодом решётки Λ во всех примерах мы понимали период векторного поля $\mathbf{c}(x, z)$ (см. подпараграф 3.4).

3. Результаты

3.1. АМОА-решётки

Для данного случая численные тесты проводились на множестве слоёв со следующим видом поля локальной оптической оси:

$$\mathbf{c}(x, z) = \begin{pmatrix} \cos \varphi(x) \cos \theta(z) \\ \sin \varphi(x) \cos \theta(z) \\ \sin \theta(z) \end{pmatrix}$$

с φ , линейно зависящим от x :

$$\varphi(x) = 2\pi x / \Lambda.$$

Слои с такой структурой рассматриваются в качестве моделей ЖК-слоя при моделировании электрооптического отклика нематических АМОА-решёток [2–13]. При рассмотрении ЖК-слоёв в отсутствие приложенного электрического поля значения функции $\theta(z)$ обычно принимаются равными нулю при всех z [3–5, 7–10, 12] (рис. 1а). Искажённые приложенным электрическим полем структуры характеризуются функциями $\theta(z)$, которые обращаются в ноль при $z = z_0$ и $z = z_d$ и имеют максимальное значение θ_{max} при $z = (z_0 + z_d)/2$ [3, 6–8, 10, 12] (рис. 2).

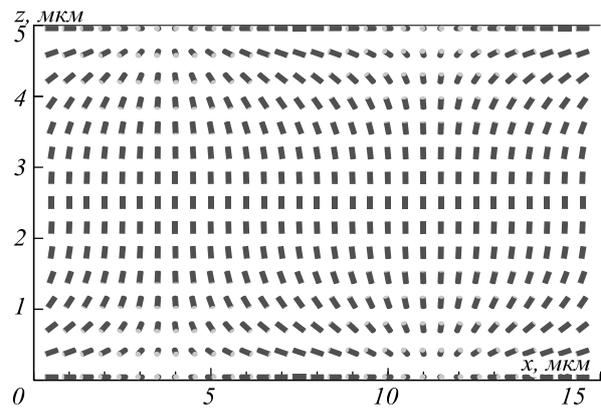


Рис. 2. АМОА-решётка с $\theta_{\text{max}} = 90^\circ$

В данном случае больший интерес представляют не критические значения периода решётки, Λ_{cr0} и $\Lambda_{\text{cr0,2}}$, а соответствующие критические значения скорости латерального изменения азимутальной ориентации локальной оптической оси $\varphi_{x\lambda} = 360^\circ/\Lambda\lambda$ (эта величина показывает, на сколько изменяется угол азимутальной ориентации локальной оптической оси при изменении x на величину λ), $\varphi_{x\lambda 0} = 360^\circ/\Lambda_{\text{cr0}}\lambda$ и $\varphi_{x\lambda 0,2} = 360^\circ/\Lambda_{\text{cr0,2}}\lambda$. На рис. 3 представлены полученные оценки $\varphi_{x\lambda 0}$ и $\varphi_{x\lambda 0,2}$ для слоёв с

$$\theta(z) = \theta_{\max} \sin[\pi(z - z_0) / d]$$

при $\theta_{\max} = 0^\circ$ и 90° . Из рис. 3 видно, что для очень тонких слоёв (с толщиной до 2λ в случае $\theta_{\max} = 0^\circ$ и до 4λ в случае $\theta_{\max} = 90^\circ$) DRA является применимым даже при $\varphi_{x\lambda} > 90^\circ$. Для слоёв с толщиной больше 15λ $\varphi_{x\lambda,0}$ и $\varphi_{x\lambda,0,2}$ очень медленно уменьшаются с увеличением d , и DRA является надёжным, если $\varphi_{x\lambda}$ не превышает 11° и 5° при $\theta_{\max} = 0^\circ$ и 90° соответственно. Практически используемые нематические АМОА-решётки обычно имеют толщину d от 6λ до 10λ . В этом диапазоне $\varphi_{x\lambda,0}$ и $\varphi_{x\lambda,0,2}$ сильно зависят от d . Согласно данным, представленным на рис. 3, для этого диапазона толщин DRA является применимым при выполнении условия $\lambda(d\varphi/dx) < 8^\circ$.

3.2. ТМОА-решётки

Для данного типа решёток оценки проводились на слоях со структурой вида

$$\mathbf{c}(x, z) = \begin{pmatrix} \cos(\theta(x, z)) \\ 0 \\ \sin(\theta(x, z)) \end{pmatrix}. \quad (15)$$

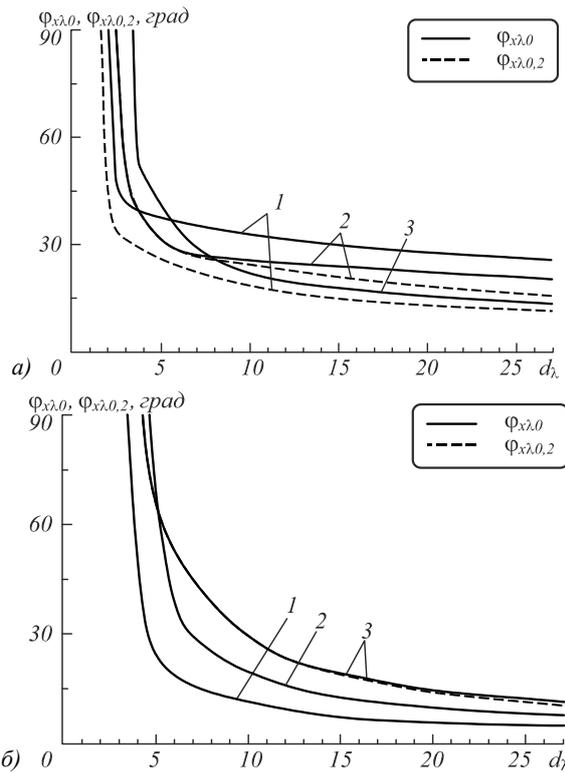


Рис. 3. Зависимости $\varphi_{x\lambda,0}$ и $\varphi_{x\lambda,0,2}$ от d_λ для АМОА-решёток с $\theta_{\max} = 0^\circ$ (а) и 90° (б) при $\Delta n = 0,2$ (1), $0,1$ (2) и $0,05$ (3)

Сначала приведём результаты для слоёв с θ , не зависящим от z и линейно зависящим от x :

$$\theta(x, z) = 2\pi x / \Lambda \quad (16)$$

(рис. 4а). Как показали расчёты, для данного типа слоёв при всех значениях d_λ и Δn χ_2 меньше, чем χ_0

($\Lambda_{\text{кр}0,2} = \Lambda_{\text{кр}0}$), то есть в условиях применимости DRA-метода для оценки характеристик 0-го порядка дифракции он применим и для оценки характеристик 2-го порядка дифракции. На рис. 5 показана зависимость максимальной приемлемой для DRA скорости изменения угла θ , $\theta_{x\lambda,0} = 360^\circ / \Lambda_{\text{кр}0}$, от d_λ . Из сравнения рис. 3а и 5 видно, что при всех d_λ максимальная приемлемая для DRA скорость изменения θ в данном случае, когда модулируется только θ , оказывается меньше, чем соответствующая критическая скорость изменения φ в случае модуляции только φ . Этот пример указывает на то, что латеральная вариация угла наклона локальной оптической оси является более критичной с точки зрения DRA, чем вариация её азимутальной ориентации.

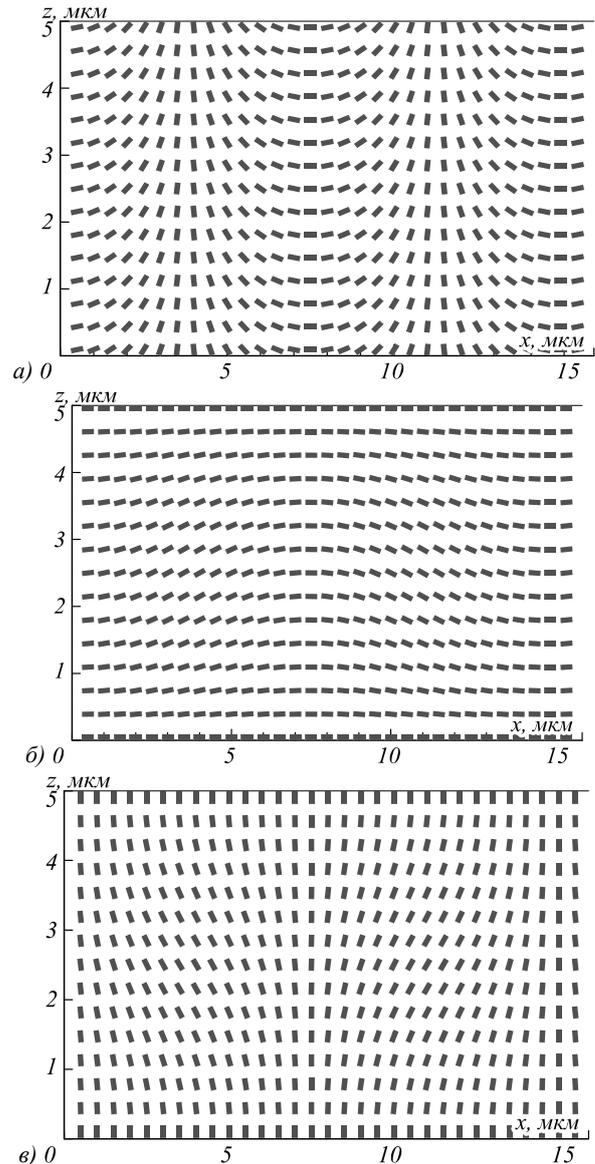


Рис. 4. ТМОА-решётки с линейной зависимостью θ от x (а) и синусоидальной зависимостью θ от x при $\theta_0 = 0^\circ$ (б) и 90° (в)

Далее мы приведём результаты для ТМОА-слоёв вида (15), у которых θ является периодической функцией от x :

$$\theta(x, z) = \theta_0 + \theta_a \sin(\pi z / d) \sin(2\pi x / \Lambda) \quad (17)$$

(см. примеры на рис. 4). ТМОА-слои с такой структурой часто рассматриваются в качестве моделей нематических ЖК-слоёв с доменами Вильямса [28, 45]. Параметр θ_a характеризует амплитуду модуляции, а θ_0 – ориентацию локальной оптической оси на границах слоя. $\theta_0=0$ соответствует планарной ориентации (рис. 4б), а $\theta_0=90^\circ$ – гомеотропной ориентации (рис. 4в).

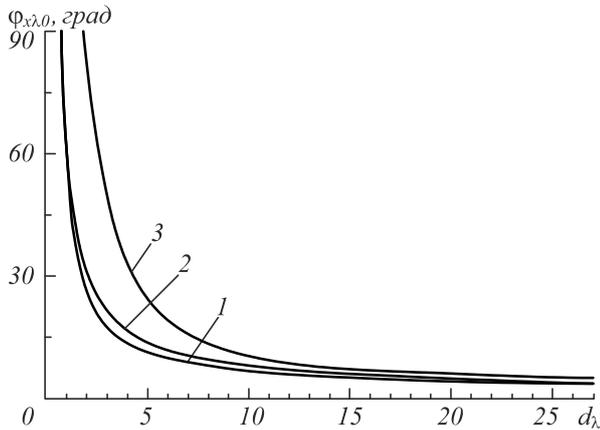


Рис. 5. Функции $\theta_{x\lambda_0}(d_\lambda)$ для ТМОА-решёток с линейной зависимостью θ от x при $\Delta n=0,2$ (1), 0,1 (2) и 0,05 (3)

На рис. 6 показаны рассчитанные кривые $\Lambda_{\lambda_{cr0}}(d_\lambda)$ и $\Lambda_{\lambda_{cr0,2}}(d_\lambda)$ для случаев $\theta_0=0$ (рис. 6а) и $\theta_0=90^\circ$ (рис. 6б) при $\theta_a=30^\circ$. Из рисунка видно, что в обоих случаях критические значения периода решётки увеличиваются как с увеличением Δn , так и с увеличением d_λ (это не является общим правилом; см., например, рис. 3). Отметим, что для $\theta_0=90^\circ$ кривые $\Lambda_{\lambda_{cr0}}(d_\lambda)$ и $\Lambda_{\lambda_{cr0,2}}(d_\lambda)$ совпадают при всех Δn , а для $\theta_0=0^\circ$ они не совпадают только в случае наибольшего Δn ($\Delta n=0,2$).

3.3. СМОА-решётки

В данном случае мы рассматривали слои с модуляцией, характерной для полосатых доменных структур в слоях холестерических ЖК, возникающих под действием электрического поля, а именно, SFLH структур [25,52] (рис. 1б) и полосатых доменов Хелффриха–Гуро (НН-решётки; *Helfrich–Hurault gratings*) [25, 46–51] (рис. 7). На рис. 7а приведен пример НН-деформации, при которой слой оказывается однородным в направлении, параллельном вектору ориентации локальной оптической оси на границах слоя (НН||), а на рис. 7б – пример НН-деформации с перпендикулярным этому вектору направлением однородности (НН⊥). Поля $\mathbf{c}(x, z)$ для слоёв, показанных на рис. 1б и 7, были взяты нами как базовые. При вариации толщины слоя и периода структуры эти базовые поля подвергались соответствующим масштабным преобразованиям. Результаты расчётов представлены на рис. 8.

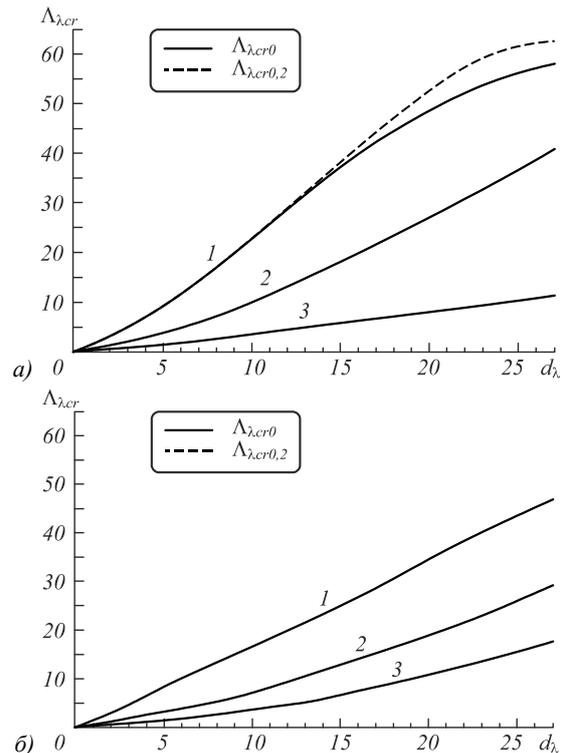


Рис. 6. Функции $\Lambda_{\lambda_{cr0}}(d_\lambda)$ и $\Lambda_{\lambda_{cr0,2}}(d_\lambda)$ для ТМОА-решёток с синусоидальной зависимостью θ от x при $\theta_0 = 0^\circ$ (а) и 90° (б) при $\Delta n=0,2$ (1), 0,1 (2) и 0,05 (3)

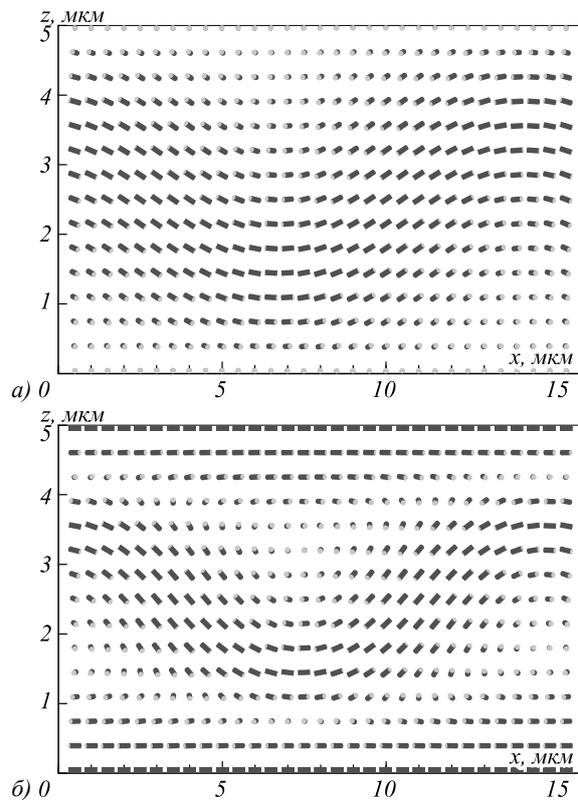


Рис. 7. Структура НН|| (а) и НН⊥ (б) решёток

На этом рисунке критические значения Λ_λ приводятся как функции от параметра $\delta_\lambda = \Delta n d_\lambda$, поскольку значения $\Lambda_{\lambda_{cr0}}$ и $\Lambda_{\lambda_{cr0,2}}$ для слоёв с разными Δn и d_λ , но

одинаковыми δ_λ , оказались очень близкими друг к другу. Существенное отличие наблюдалось только в области малых значений параметра δ_λ : когда толщина d была меньше 2λ , а $\Delta n = 0,2$, условие $\chi_0 \leq 0,01$ не выполнялось ни при каких значениях Λ , тогда как при меньших значениях Δn такого не наблюдалось. Это связано с тем, что в рассматриваемых условиях при малых значениях δ_λ вариация азимутальной ориентации локальной оптической оси в направлении z является столь быстрой, что при достаточно больших Δn , в том числе при $\Delta n = 0,2$, объёмное отражение, которое не учитывается в DRA-методе, может быть существенным. Исключая область существенных объёмных отражений, $\Lambda_{\lambda,cr0}$ и $\Lambda_{\lambda,cr0,2}$ для всех трёх типов модуляции являются возрастающими функциями от δ_λ . Отметим, что для реальных SFLH-структур Λ обычно составляет от d до $2d$ [25]. Из рис. 8в следует, что DRA применимо к SFLH-слоям с таким периодом только при очень малых Δn . Для реальных слоёв с НН-структурой условия применимости DRA часто удовлетворяются, поскольку период НН-структур бывает во много раз большим, чем толщина слоя.

3.4. Эффективность дифракции в нечётные порядки

Говоря о DRA-методе, нельзя не отметить следующую его особенность. Для всех рассмотренных подвидов АМОА- и ТМОА-решёток DRA даёт нулевые матрицы \mathbf{M}_m для нечётных m , как если бы период структуры (период тензорного поля $\boldsymbol{\varepsilon}(x, z)$) равнялся $\Lambda/2$. В двух из рассмотренных случаев период структуры действительно равнялся не Λ , а $\Lambda/2$. Это случай АМОА-решёток с планарной структурой ($\theta(z)=0$; рис. 1а) и случай ТМОА-слоёв с линейной зависимостью θ от x (рис. 4а). В этих случаях оба метода давали нулевые матрицы \mathbf{M}_m для нечётных m . Для АМОА-решёток с $\theta_{max} \neq 0^\circ$ (рис. 2) и ТМОА-решёток с синусоидальной зависимостью θ от x (рис. 4б, в) – в этих случаях реальный период структуры равнялся Λ – наблюдалась иная картина: модальный метод решёток при относительно малых Λ давал существенно ненулевые значения для матриц \mathbf{M}_m с $m = \pm 1$, в то время как DRA-метод при любых Λ давал строго нулевые значения для этих матриц. Последнее связано с тем, что в этих случаях, в силу выполнения соотношений

$$\begin{aligned} c_z(x + \Lambda/2, z) &= c_z(x, z), \\ c_x(x + \Lambda/2, z) &= -c_x(x, z), \\ c_y(x + \Lambda/2, z) &= -c_y(x, z), \end{aligned}$$

период функции $\mathbf{T}_{1D}(x)$ равнялся $\Lambda/2$, то есть был в два раза меньшим, чем период поля $\boldsymbol{\varepsilon}(x, z)$. Такая ситуация типична для ЖК-решёток, и указанная особенность DRA упоминалась в литературе [28, 45].

На рис. 9 в качестве примера приведена зависимость дифракционной эффективности первого порядка $\eta_1 = [\mathbf{M}_1]_{11}$, рассчитанной модальным методом решёток, от Λ_λ для АМОА-решёток с $\theta_{max} = 0^\circ$ (период структуры равен $\Lambda/2$) и $\theta_{max} = 90^\circ$ (период структуры равен Λ) при

$\Delta n = 0,2$ и $d = 20\lambda$. Из этого рисунка видно, что в случае $\theta_{max} = 0^\circ$ при всех Λ $\eta_1 = 0$, в то время как в случае $\theta_{max} = 90^\circ$ в большой области значений Λ ($\Lambda < 40\lambda$) значения η_1 являются существенно ненулевыми, причём при $\Lambda < 20\lambda$ η_1 достигает больших значений. DRA-метод в обоих случаях даёт нулевое значение η_1 .

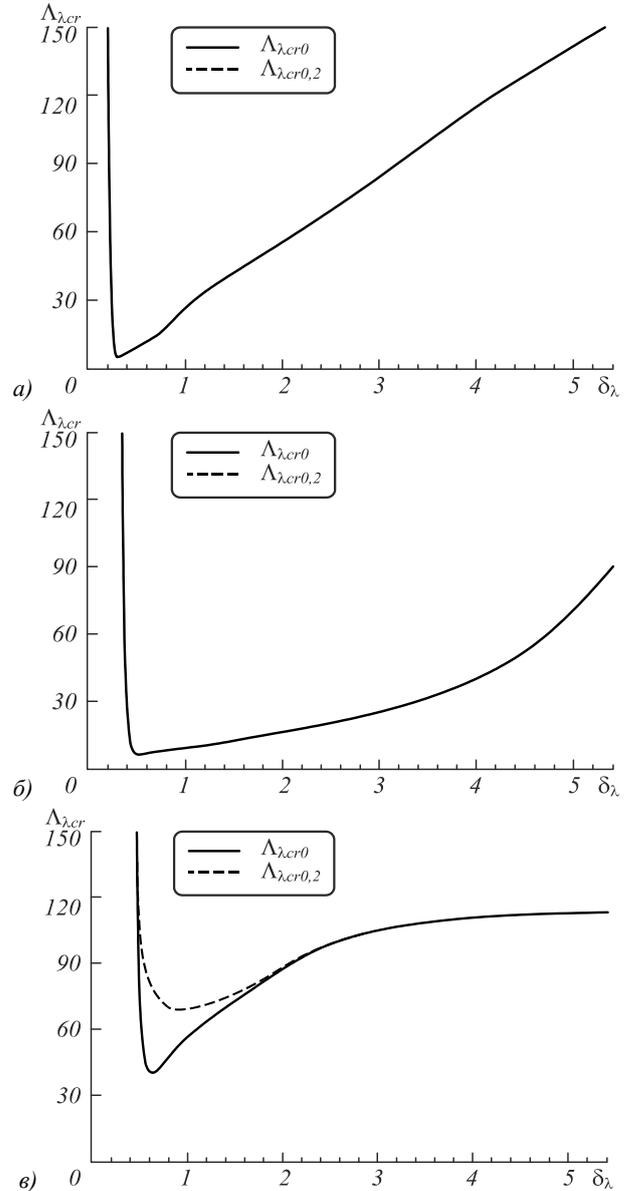


Рис. 8. Зависимости $\Lambda_{\lambda,cr0}$ и $\Lambda_{\lambda,cr0,2}$ от δ_λ для НН|| (а), НН⊥ (б) и SFLH (в) решёток

Заключение

Таким образом, нами представлены оценки границ применимости подхода, основанного на использовании приближения прямых лучей, при моделировании оптических свойств дифракционных решёток на жидких кристаллах. Рассмотрены три типа пространственной модуляции ориентации локальной оптической оси:

- 1) модуляция только азимутальной ориентации локальной оптической оси,

- 2) модуляция только наклона локальной оптической оси и
- 3) модуляция как наклона, так и азимутальной ориентации локальной оптической оси.

Показано, как точность оценок, полученных с помощью DRA-метода, зависит от характера модуляции локальной оптической оси, периода структуры, толщины ЖК-слоя и показателя двулучепреломления ЖК-материала.

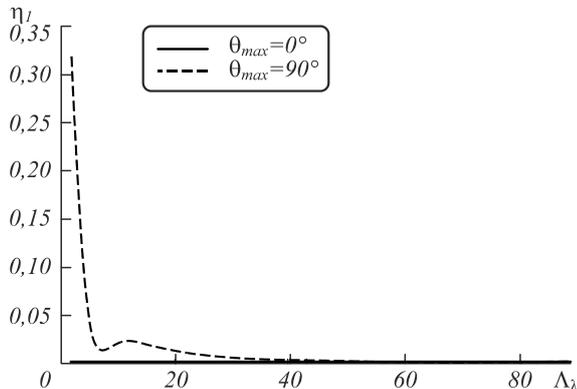


Рис. 9. Дифракционная эффективность первого порядка η_1 для АМОА-решётки как функция от λ_x при $\Delta n = 0,2$ и $d = 20\lambda$

Благодарности

Работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках проекта № 18-52-16025/18 и Минобрнауки РФ в рамках проекта № 3.1586.2017/4.6.

Литература

1. **Schadt, M.** Optical patterning of multi-domain liquid-crystal displays with wide viewing angles / M. Schadt, H. Seiberie, A. Schuster // *Nature*. – 1996. – Vol. 381, Issue 6579. – P. 212-215. – DOI: 10.1038/381212a0.
2. **Eakin, J.N.** Zero voltage Freedericksz transition in periodically aligned liquid crystals / J.N. Eakin, Y. Xie, R.A. Pelcovits, M.D. Radcliffe, G.P. Crawford // *Applied Physics Letters*. – 2004. – Vol. 85, Issue 10. – P. 1671-1673. – DOI: 10.1063/1.1789578.
3. **Escuti, M.J.** Polarization-independent switching with high contrast from a liquid crystal polarization grating / M.J. Escuti, W.M. Jones // *SID Symposium Digest of Technical Papers*. – 2006. – Vol. 37, Issue 1. – P. 1443-1446. – DOI: 10.1889/1.2433259.
4. **Provenzano, C.** Highly efficient liquid crystal based diffraction grating induced by polarization holograms at the aligning surfaces / C. Provenzano, P. Pagliusi, G. Cipparone // *Applied Physics Letters*. – 2006. – Vol. 89, Issue 12. – P. 121105 (3 p.). – DOI: 10.1063/1.2355456.
5. **Sarkissian, H.** Polarization-controlled switching between diffraction orders in transverse-periodically aligned nematic liquid crystals / H. Sarkissian, S.V. Serak, N.V. Tabiryan, L.B. Glebov, V. Rotar, B.Ya. Zeldovich // *Optics Letters*. – 2006. – Vol. 31, Issue 15. – P. 2248-2250. – DOI: 10.1364/OL.31.002248.
6. **Komanduri, R.K.** Elastic continuum analysis of the liquid crystal polarization grating / R.K. Komanduri, M.J. Escuti // *Physical Review E*. – 2007. – Vol. 76, Issue 2. – P. 021701 (8 p.). – DOI: 10.1103/PhysRevE.76.021701.
7. **Komanduri, R.K.** Polarization-independent modulation for projection displays using small-period LC polarization gratings / R.K. Komanduri, W.M. Jones, C. Oh, M.J. Escuti // *Journal of the Society for Information Display*. – 2007. – Vol. 15, Issue 8. – P. 589-594. – DOI: 10.1889/1.2770860.
8. **Nicolescu, E.** Polarization-independent tunable optical filters based on liquid crystal polarization gratings / E. Nicolescu, M.J. Escuti // *Proceedings of SPIE*. – 2007. – Vol. 6654. – P. 665405 (11 p.). – DOI: 10.1117/12.735305.
9. **Serak, S.** High-efficiency 1.5 μm thick optical axis grating and its use for laser beam combining / S. Serak, N. Tabiryan, B. Zeldovich // *Optics Express*. – 2007. – Vol. 32, Issue 2. – P. 169-171. – DOI: 10.1364/OL.32.000169.
10. **Komanduri, R.K.** High efficiency reflective liquid crystal polarization gratings / R.K. Komanduri, M.J. Escuti // *Applied Physics Letters*. – 2009. – Vol. 95, Issue 9. – P. 091106. – DOI: 10.1063/1.3197011.
11. **Nersisyan, S.R.** Characterization of optically imprinted polarization gratings / S.R. Nersisyan, N.V. Tabiryan, D.M. Steeves, B.R. Kimball // *Applied Optics*. – 2009. – Vol. 48, Issue 21. – P. 4062-4067. – DOI: 10.1364/AO.48.004062.
12. **Nicolescu, E.** Polarization-independent tunable optical filters using bilayer polarization gratings / E. Nicolescu, M.J. Escuti // *Applied Optics*. – 2010. – Vol. 49, Issue 20. – P. 3900-3904. – DOI: 10.1364/AO.49.003900.
13. **Kudenov, M.W.** White-light channelled imaging polarimeter using broadband polarization gratings / M.W. Kudenov, M.J. Escuti, E.L. Dereniak, K. Oka // *Applied Optics*. – 2011. – Vol. 50, Issue 15. – P. 2283-2293. – DOI: 10.1364/AO.50.002283.
14. **Crawford, G.P.** Liquid-crystal diffraction gratings using polarization holography alignment techniques / G.P. Crawford, J.N. Eakin, M.D. Radcliffe, A. Callan-Jones, R.A. Pelcovits // *Journal of Applied Physics*. – 2005. – Vol. 98, Issue 12. – P. 123102 (10 p.). – DOI: 10.1063/1.2146075.
15. **Wu, W.Y.** Two-dimensional holographic polarization grating formed on azo-dye-doped polyvinyl alcohol films / W.Y. Wu, M.S. Li, H.C. Lin, A.Y.-G. Fuh // *Journal of Applied Physics*. – 2008. – Vol. 103, Issue 8. – P. 083119 (6 p.). – DOI: 10.1063/1.2907959.
16. **Hu, W.** Polarization independent liquid crystal gratings based on orthogonal photoalignments / W. Hu, A.K. Srivastava, X.-W. Lin, X. Liang, Z.-J. Wu, J.-T. Sun, G. Zhu, V. Chigrinov, Y.-Q. Lu // *Applied Physics Letters*. – 2012. – Vol. 100, Issue 11. – P. 111116 (4 p.). – DOI: 10.1063/1.3694921.
17. **Honma, M.** Twisted nematic liquid crystal polarization grating with the handedness conservation of a circularly polarized state / M. Honma, T. Nose // *Optics Express*. – 2012. – Vol. 20, Issue 16. – P. 18449-18458. – DOI: 10.1364/OE.20.018449.
18. **Kawai, K.** Simple fabrication of liquid crystalline grating cells with homogeneous and twisted nematic structures and effects of orientational relaxation on diffraction properties / K. Kawai, T. Sasaki, K. Noda, N. Kawatsuki, H. Ono // *Applied Optics*. – 2014. – Vol. 53, Issue 17. – P. 3679-3686. – DOI: 10.1364/AO.53.003679.
19. **Kawai, K.** Diffraction properties of a vector grating liquid crystal cell fabricated using a one-step exposure of a nonorthogonal elliptically polarized interference beam / K. Kawai, T. Sasaki, M. Sakamoto, K. Noda, N. Kawatsuki, H. Ono // *Journal of the Optical Society of America B*. – 2015. – Vol. 32, Issue 12. – P. 2435-2440. – DOI: 10.1364/JOSAB.32.002435.
20. **Kawai, K.** Holographic binary grating liquid crystal cells fabricated by one-step exposure of photocrosslinkable pol-

- ymmer liquid crystalline alignment substrates to a polarization interference ultraviolet beam / K. Kawai, T. Sasaki, K. Noda, M. Sakamoto, N. Kawatsuki, H. Ono // *Applied Optics*. – 2015. – Vol. 54, Issue 19. – P. 6010-6018. – DOI: 10.1364/AO.54.006010.
21. **Provenzano, C.** Electrically tunable two-dimensional liquid crystals gratings induced by polarization holography / C. Provenzano, P. Pagliusi, G. Cipparrone // *Optics Express*. – 2007. – Vol. 15, Issue 9. – P. 5872-5878. – DOI: 10.1364/OE.15.005872.
 22. **Ringsdorf, H.** Photoreactive chiral liquid-crystalline side-group copolymers containing azobenzene mesogens / H. Ringsdorf, C. Urban, W. Knoll, M. Sawodny // *Die Makromolekulare Chemie*. – 1992. – Vol. 193, Issue 5. – P. 1235-1247. – DOI: 10.1002/macp.1992.021930520.
 23. **Bobrovsky, A.** New azobenzene-based chiral-photochromic substances with thermally stable Z-isomers and their use for the induction of a cholesteric mesophase with a phototunable helix pitch / A. Bobrovsky, A. Ryabchun, M. Cigl, V. Hamplová, M. Kašpar, F. Hampl, V. Shibaev. // *Journal of Materials Chemistry C*. – 2014. – Vol. 2, Issue 40. – P. 8622-8629. – DOI: 10.1039/C4TC01167H.
 24. **Ryabchun, A.** Rotatable diffraction gratings based on cholesteric liquid crystals with phototunable helix pitch / A. Ryabchun, A. Bobrovsky, J. Stumpe, V. Shibaev // *Advanced Optical Materials*. – 2015. – Vol. 3, Issue 9. – P. 1273-1279. – DOI: 10.1002/adom.201500159.
 25. **Ryabchun, A.** Dynamic diffractive patterns in helix-inverting cholesteric liquid crystals / A. Ryabchun, D. Yakovlev, A. Bobrovsky, N. Katsonis // *ACS Applied Materials & Interfaces*. – 2019. – Vol. 11, Issue 11. – P. 10895-10904. – DOI: 10.1021/acsami.8b22465.
 26. **Li, W.S.** Demonstration of patterned polymer-stabilized cholesteric liquid crystal textures for anti-counterfeiting two-dimensional barcodes / W.S. Li, Y. Shen, Z.J. Chen, Q. Cui, S.S. Li, L.J. Chen // *Applied Optics*. – 2017. – Vol. 56, Issue 3. – P. 601-606. – DOI: 10.1364/AO.56.000601.
 27. **Yakovlev, D.A.** 5.4: Advanced tools for modeling of 2D-optics of LCDs / D.A. Yakovlev, V.I. Tsoy, V.G. Chigrinov // *SID Symposium Digest of Technical Papers*. – 2005. – Vol. 36, Issue 1. – P. 58-61. – DOI: 10.1889/1.2036508.
 28. **Carroll, T.O.** Liquid-crystal diffraction grating / T.O. Carroll // *Journal of Applied Physics*. – 1972. – Vol. 43, Issue 3. – P. 767-770. – DOI: 10.1063/1.1661277.
 29. **Desimpel, C.** Optical transmission model for thin two-dimensional layers / C. Desimpel, K. Neyts, D. Olivero, C. Oldano, D.K.G. de Boer, R. Cortie // *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. – 2004. – Vol. 422, Issue 1. – P. 185-195. – DOI: 10.1080/15421400490502526.
 30. **Yakovlev, D.A.** Modeling and optimization of LCD optical performance / D.A. Yakovlev, V.G. Chigrinov, H.-S. Kwok. – Chichester: Wiley, 2015. – 554 p.
 31. **Rokushima, K.** Analysis of anisotropic dielectric gratings / K. Rokushima, J. Yamakita // *Journal of the Optical Society of America A*. – 1983. – Vol. 73, Issue 7. – P. 901-908. – DOI: 10.1364/JOSA.73.000901.
 32. **Matsumoto, K.** Three-dimensional rigorous analysis of dielectric grating waveguides for general cases of oblique propagation / K. Matsumoto, K. Rokushima, J. Yamakita // *Journal of the Optical Society of America A*. – 1993. – Vol. 10, Issue 2. – P. 269-276. – DOI: 10.1364/JOSAA.10.000269
 33. **Galatola, P.** Symmetry properties of anisotropic dielectric gratings / P. Galatola, C. Oldano, P.B. Sunil Kumar // *Journal of the Optical Society of America A*. – 1994. – Vol. 11, Issue 4. – P. 1332-1341. – DOI: 10.1364/JOSAA.11.001332.
 34. **Li, L.** Formulation and comparison of two recursive matrix algorithms for modeling layered diffraction gratings / L. Li // *Journal of the Optical Society of America A*. – 1996. – Vol. 13, Issue 5. – P. 1024-1035. – DOI: 10.1364/JOSAA.13.001024.
 35. **Li, L.** New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings / L. Li // *Journal of the Optical Society of America A*. – 1997. – Vol. 14, Issue 10. – P. 2758-2767. – DOI: 10.1364/JOSAA.14.002758.
 36. **Peaverini, O.A.** Reduced-order model technique for the analysis of anisotropic inhomogeneous media: application to liquid-crystal displays / O.A. Peaverini, D. Olivero, C. Oldano, D.K.G. de Boer, R. Cortie, R. Orta, R. Tascone // *Journal of the Optical Society of America A*. – 2002. – Vol. 19, Issue 9. – P. 1901-1909. – DOI: 10.1364/JOSAA.19.001901.
 37. **Olivero, D.** Numerical methods for light propagation in large LC cells: a new approach / D. Olivero, C. Oldano // *Liquid Crystals*. – 2003. – Vol. 30, Issue 3. – P. 345-353. – DOI: 10.1080/0267829031000080996.
 38. **Moharam, M.G.** Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach / M.G. Moharam, D.A. Pommet, E.B. Grann, T.K. Gaylord // *Journal of the Optical Society of America A*. – 1995. – Vol. 12, Issue 5. – P. 1077-1086. – DOI: 10.1364/JOSAA.12.001077.
 39. **Oh, C.** Time-domain analysis of periodic anisotropic media at oblique incidence: an efficient FDTD implementation / C. Oh, M.J. Escuti // *Optics Express*. – 2006. – Vol. 14, Issue 24. – P. 11870-11884. – DOI: 10.1364/OE.14.011870.
 40. **Xiang, X.** Numerical modeling of polarization gratings by rigorous coupled wave analysis / X. Xiang, M.J. Escuti // *Proceedings of SPIE*. – 2016. – Vol. 9769. – 976918 (7 p.). – DOI: 10.1117/12.2218276.
 41. **Xiang, X.** Bragg polarization gratings for wide angular bandwidth and high efficiency at steep deflection angles / X. Xiang, J. Kim, M.J. Escuti // *Scientific Reports*. – 2018. – Vol. 8, Issue 7202. – P. 1-6. – DOI: 10.1038/s41598-018-25535-0.
 42. Дифракционная нанофотоника / А.В. Гаврилов, Д.Л. Головашкин, Л.Л. Досколович, П.Н. Дьяченко, А.А. Ковалёв, В.В. Котляр, А.Г. Налимов, Д.В. Нестеренко, В.С. Павельев, Р.В. Скиданов, В.А. Соيفер, С.Н. Хонина, Я.О. Шулюпова; под ред. В.А. Соифера. – М.: Физматлит, 2011. – 680 с. – ISBN: 978-5-9221-1237-6.
 43. **Шерман, М.М.** Особенности пропускания света моно-слоем одинаковых по структуре анизотропных доменов со случайной азимутальной ориентацией / М.М. Шерман, Д.А. Яковлев // *Оптика и спектроскопия*. – 2010. – Т. 102, № 2. – С. 206-215.
 44. **Яковлев, Д.Д.** Картины рассеяния ортогонально поляризованных компонент света для статистически вращательно-инвариантных мозаичных двулучепреломляющих слоёв / Д.Д. Яковлев, Д.А. Яковлев // *Оптика и спектроскопия*. – 2019. – Т. 126, № 3. – С. 324-335.
 45. **Kosmopoulos, J.A.** Geometrical optics approach to the nematic liquid crystal grating: numerical results / J.A. Kosmopoulos, H.M. Zenginoglou // *Applied Optics*. – 1987. – Vol. 26, Issue 9. – P. 1714-1721. – DOI: 10.1364/AO.26.001714.
 46. **Helfrich, W.** Deformation of cholesteric liquid crystals with low threshold voltage / W. Helfrich // *Applied Physics Letters*. – 1970. – Vol. 17, Issue 12. – P. 531-532. – DOI: 10.1063/1.1653297.
 47. **Helfrich, W.** Electrohydrodynamic and dielectric instabilities of cholesteric liquid crystals / W. Helfrich // *Journal of Chemical Physics*. – 1971. – Vol. 55, Issue 2. – P. 839-842. – DOI: 10.1063/1.1676151.

48. **Hurault, J.P.** Static distortions of a cholesteric planar structure induced by magnetic or ac electric fields / J.P. Hurault // Journal of Chemical Physics. – 1973. – Vol. 59, Issue 4. – P. 2068-2075. – DOI: 10.1063/1.1680293.

49. **Чигринов, В.Г.** Неустойчивость холестерических жидких кристаллов в электрическом поле / В.Г. Чигринов, В.В. Беляев, С.В. Беляев, М.Ф. Гребенкин // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1979. – Т. 77, № 5. – С. 2081-2091.

50. **Lavrentovich, O.D.** Fast beam steering cholesteric diffractive devices / O.D. Lavrentovich, S.V. Shiyankovskii, D. Voloschenko // Proceedings of SPIE. – 1999. – Vol. 3787. – P. 149-155. – DOI: 10.1117/12.351639.

51. **Senyuk, B.** Electrically-controlled two-dimensional gratings based on layers undulations in cholesteric liquid crystals / B. Senyuk, I. Smalyukh, O. Lavrentovich // Proceedings of SPIE. – 2005. – Vol. 5936. – 59360W (9 p.). – DOI: 10.1117/12.615976.

52. **Scheffer, T.J.** Electric and magnetic field investigations of the periodic gridlike deformation of a cholesteric liquid crystal / T.J. Scheffer // Physical Review Letters. – 1972. – Vol. 28, Issue 10. – P. 593-596. – DOI: 10.1103/PhysRevLett.28.593.

53. **Tervo, J.** Paraxial-domain diffractive elements with 100% efficiency based on polarization gratings / J. Tervo, J. Turunen // Optics Letters. – 2000. – Vol. 25, Issue 11. – P. 785-786. – DOI: 10.1364/OL.25.000785.

54. **Яковлев, Д.А.** Расчёт характеристик пропускания плавно неоднородных анизотропных сред в приближении пренебрежимой малости объёмного отражения. II. Численные методы / Д.А. Яковлев // Оптика и спектроскопия. – 2003. – Т. 94, № 4. – С. 655-662.

55. **Яковлев, Д.А.** Расчёт характеристик пропускания плавно-неоднородных анизотропных сред в приближении пренебрежимой малости объёмного отражения. I. Исходное уравнение / Д.А. Яковлев // Оптика и спектроскопия. – 1999. – Т. 87, № 6. – С. 990-995.

56. **Яковлев, Д.А.** Расчёт характеристик пропускания плавно неоднородных анизотропных сред в приближении пренебрежимой малости объёмного отражения. III. Аналитические решения / Д.А. Яковлев // Оптика и спектроскопия. – 2003. – Т. 95, № 5. – С. 1010-1017.

57. **Яковлев, Д.А.** Простые формулы для амплитудных коэффициентов пропускания и отражения для границы раздела анизотропных сред / Д.А. Яковлев // Оптика и спектроскопия. – 1998. – Т. 84, № 5. – С. 829-834.

Приложение

Таблица. Используемые значения $m_{арх}$ для рассматриваемых видов решёток

	АМОА, $\theta_{max}=0^\circ$	АМОА, $\theta_{max}=90^\circ$	ТМОА (16)	ТМОА (17), $\theta_0=0^\circ$	ТМОА (17), $\theta_0=90^\circ$	НН	НН⊥	SFLH
$\Delta n=0,2$	6	6	26	7	8	8	9	18
$\Delta n=0,1$	4	5	14	5	5	6	7	12
$\Delta n=0,05$	4	4	10	4	4	5	4	8

Сведения об авторах

Яковлев Дмитрий Дмитриевич, 1993 года рождения, в 2015 году окончил Саратовский государственный университет по специальности 010701 «Физика», является аспирантом Саратовского государственного университета. Область научных интересов: поляризационная оптика, фотоника, оптика анизотропных сред. E-mail: ddy-optics@mail.ru.

Яковлев Дмитрий Анатольевич, 1963 года рождения, в 1985 году окончил Саратовский государственный университет по специальности 010701 «Физика», работает старшим научным сотрудником Научно-образовательного института оптики и биофотоники Саратовского государственного университета. Область научных интересов: оптика анизотропных сред, биомедицинская оптика, поляризационная оптика, микроскопия, физика жидких кристаллов. E-mail: yakovlevday@gmail.com.

ГРНТИ: 29.31.15

Поступила в редакцию 16 апреля 2019 г. Окончательный вариант – 14 августа 2019 г.

Limits of applicability of the direct ray approximation in modeling optical properties of liquid-crystal diffraction gratings

D.D. Yakovlev¹, D.A. Yakovlev¹
¹Saratov State University, Saratov, Russia

Abstract

Using computer modeling, we estimate limits of applicability of the direct ray approximation in modeling the optical properties of liquid-crystal diffraction gratings with continuous spatial modulation of the local optic axis orientation in a liquid crystal layer. The data presented concerning the influence of the spatial frequency and character of modulation of the local optic axis, as well as the magnitude of birefringence of the medium, on the accuracy of the results obtained in this approximation are also useful in considering birefringent layers with an aperiodic variation of the local optic axis.

Keywords: diffraction and gratings, optical devices, physical optics, birefringent diffraction gratings, direct ray approximation, modal grating method.

Acknowledgements: This work was supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation under Grant #3.1586.2017/4.6 and the Russian Foundation for Basic Research under Grant #18-52-16025/18.

Citation: Yakovlev DD, Yakovlev DA. Limits of applicability of the direct ray approximation in modeling optical properties of liquid-crystal diffraction gratings. *Computer Optics* 2020; 44(1): 40-52. DOI: 10.18287/2412-6179-CO-562.

References

- [1] Schadt M, Seiberle H, Schuster A. Optical patterning of multi-domain liquid-crystal displays with wide viewing angles. *Nature* 1996; 381(6579): 212-215. DOI: 10.1038/381212a0
 - [2] Eakin JN, Xie Y, Pelcovits RA, Radcliffe MD, Crawford GP. Zero voltage Fredericksz transition in periodically aligned liquid crystals. *Appl Phys Lett* 2004; 85(10): 1671-1673. DOI: 10.1063/1.1789578.
 - [3] Escuti MJ, Jones WM. Polarization-independent switching with high contrast from a liquid crystal polarization grating. *SID Symposium Digest of Technical Papers* 2006; 37(1): 1443-1446. DOI: 10.1889/1.2433259.
 - [4] Provenzano C, Pagliusi P, Cipparrone G. Highly efficient liquid crystal based diffraction grating induced by polarization holograms at the aligning surfaces. *Appl Phys Lett* 2006; 89(12): 121105. DOI: 10.1063/1.2355456.
 - [5] Sarkissian H, Serak SV, Tabiryan NV, Glebov LB, Rotar V, Zeldovich BYa. Polarization-controlled switching between diffraction orders in transverse-periodically aligned nematic liquid crystals. *Opt Lett* 2006; 31(15): 2248-2250. DOI: 10.1364/OL.31.002248.
 - [6] Komanduri RK, Escuti MJ. Elastic continuum analysis of the liquid crystal polarization grating. *Phys Rev E* 2007; 76(2): 021701. DOI: 10.1103/PhysRevE.76.021701.
 - [7] Komanduri RK, Jones WM, Oh C, Escuti MJ. Polarization-independent modulation for projection displays using small-period LC polarization gratings. *Journal of the Society for Information Display* 2007; 15(8): 589-594. DOI: 10.1889/1.2770860.
 - [8] Nicolescu E, Escuti MJ. Polarization-independent tunable optical filters based on liquid crystal polarization gratings. *Proc SPIE* 2007; 6654: 665405. DOI: 10.1117/12.735305.
 - [9] Serak S, Tabiryan N, Zeldovich B. High-efficiency 1.5 μm thick optical axis grating and its use for laser beam combining. *Opt Express* 2007; 32(2): 169-171. DOI: 10.1364/OL.32.000169.
 - [10] Komanduri RK, Escuti MJ. High efficiency reflective liquid crystal polarization gratings. *Appl Phys Lett* 2009; 95(9): 091106. DOI: 10.1063/1.3197011.
 - [11] Nersisyan SR, Tabiryan NV, Steeves DM, Kimball BR. Characterization of optically imprinted polarization gratings. *Appl Opt* 2009; 48(21): 4062-4067. DOI: 10.1364/AO.48.004062.
 - [12] Nicolescu E, Escuti MJ. Polarization-independent tunable optical filters using bilayer polarization gratings. *Appl Opt* 2010; 49(20): 3900-3904. DOI: 10.1364/AO.49.003900.
 - [13] Kudenov MW, Escuti MJ, Dereniak EL, Oka K. White-light channeled imaging polarimeter using broadband polarization gratings. *Appl Opt* 2011; 50(15): 2283-2293. DOI: 10.1364/AO.50.002283.
 - [14] Crawford GP, Eakin JN, Radcliffe MD, Callan-Jones A, Pelcovits RA. Liquid-crystal diffraction gratings using polarization holography alignment techniques. *J Appl Phys* 2005; 98(12): 123102. DOI: 10.1063/1.2146075.
 - [15] Wu WY, Li MS, Lin HC, Fuh AY-G. Two-dimensional holographic polarization grating formed on azo-dye-doped polyvinyl alcohol films. *J Appl Phys* 2008; 103(8): 083119. DOI: 10.1063/1.2907959.
 - [16] Hu W, Srivastava AK, Lin X-W, Liang X, Wu Z-J, Sun J-T, Zhu G, Chigrinov V, Lu Y-Q. Polarization independent liquid crystal gratings based on orthogonal photoalignments. *Appl Phys Lett* 2012; 100(11): 111116. DOI: 10.1063/1.3694921.
 - [17] Honma M, Nose T. Twisted nematic liquid crystal polarization grating with the handedness conservation of a circularly polarized state. *Opt Express* 2012; 20(16): 18449-18458. DOI: 10.1364/OE.20.018449.
 - [18] Kawai K, Sasaki T, Noda K, Kawatsuki N, Ono H. Simple fabrication of liquid crystal-line grating cells with homogeneous and twisted nematic structures and effects of orientational relaxation on diffraction properties. *Appl Opt* 2014; 53(17): 3679-3686. DOI: 10.1364/AO.53.003679.
 - [19] Kawai K, Sasaki T, Sakamoto M, Noda K, Kawatsuki N, Ono H. Diffraction properties of a vector grating liquid crystal cell fabricated using a one-step exposure of a nonorthogonal elliptically polarized interference beam. *J Opt Soc Am B* 2015; 32(12): 2435-2440. DOI: 10.1364/JOSAB.32.002435.
 - [20] Kawai K, Sasaki T, Noda K, Sakamoto M, Kawatsuki N, Ono H. Holographic binary grating liquid crystal cells
-

- fabricated by one-step exposure of photocrosslinkable polymer liquid crystalline alignment substrates to a polarization interference ultraviolet beam. *Appl Opt* 2015; 54(19): 6010-6018. DOI: 10.1364/AO.54.006010.
- [21] Provenzano C, Pagliusi P, Cipparrone G. Electrically tunable two-dimensional liquid crystals gratings induced by polarization holography. *Opt Express* 2007; 15(9): 5872-5878. DOI: 10.1364/OE.15.005872.
- [22] Ringsdorf H, Urban C, Knoll W, Sawodny M. Photoreactive chiral liquid-crystalline side-group copolymers containing azobenzene mesogens. *Die Makromolekulare Chemie* 1992; 193(5): 1235-1247. DOI: 10.1002/macp.1992.021930520.
- [23] Bobrovsky A, Ryabchun A, Cigl M, Hamplová V, Kašpar M, Hampl F, Shibaev V. New azobenzene-based chiral-photochromic substances with thermally stable Z-isomers and their use for the induction of a cholesteric mesophase with a phototunable helix pitch. *J Mater Chem C* 2014; 2(40): 8622-8629. DOI: 10.1039/C4TC01167H.
- [24] Ryabchun A, Bobrovsky A, Stumpe J, Shibaev V. Rotatable diffraction gratings based on cholesteric liquid crystals with phototunable helix pitch. *Adv Opt Mater* 2015; 3(9): 1273-1279. DOI: 10.1002/adom.201500159.
- [25] Ryabchun A, Yakovlev D, Bobrovsky A, Katsonis N. Dynamic diffractive patterns in helix-inverting cholesteric liquid crystals. *ACS Appl Mater Interfaces* 2010; 11(11): 10895-10904. DOI: 10.1021/acsami.8b22465.
- [26] Li WS, Shen Y, Chen ZJ, Cui Q, Li SS, Chen LJ Demonstration of patterned polymer-stabilized cholesteric liquid crystal textures for anti-counterfeiting two-dimensional barcodes. *Appl Opt* 2017; 56(3): 601-606. DOI: 10.1364/AO.56.000601.
- [27] Yakovlev DA, Tsouy VI, Chigrinov VG. 5.4: Advanced tools for modeling of 2D-optics of LCDs. *SID Symposium Digest of Technical Papers* 2005; 36(1): 58-61. DOI: 10.1889/1.2036508.
- [28] Carroll TO. Liquid-crystal diffraction grating. *J Appl Phys* 1972; 43(3): 767-770. DOI: 10.1063/1.1661277.
- [29] Desimpel C, Neyts K, Olivero D, Oldano C, de Boer DKG, Cortie R. Optical transmission model for thin two-dimensional layers. *Molecular Crystals and Liquid Crystals* 2004; 422(1): 185-195. DOI: 10.1080/15421400490502526.
- [30] Yakovlev DA, Chigrinov VG, Kwok H-S. Modeling and optimization of LCD optical performance. Chichester: Wiley; 2015.
- [31] Rokushima K, Yamakita J. Analysis of anisotropic dielectric gratings. *J Opt Soc Am A* 1983; 73(7): 901-908. DOI: 10.1364/JOSA.73.000901.
- [32] Matsumoto K, Rokushima K, Yamakita J. Three-dimensional rigorous analysis of dielectric grating waveguides for general cases of oblique propagation. *J Opt Soc Am A* 1993; 10(2): 269-276. DOI: 10.1364/JOSAA.10.000269.
- [33] Galatola P, Oldano C, Sunil Kumar PB. Symmetry properties of anisotropic dielectric gratings. *J Opt Soc Am A* 1994; 11(4): 1332-1341. DOI: 10.1364/JOSAA.11.001332.
- [34] Li L. Formulation and comparison of two recursive matrix algorithms for modeling layered diffraction gratings. *J Opt Soc Am A* 1996; 13(5): 1024-1035. DOI: 10.1364/JOSAA.13.001024.
- [35] Li L. New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings. *J Opt Soc Am A* 1997; 14(10): 2758-2767. DOI: 10.1364/JOSAA.14.002758.
- [36] Peverini OA, Olivero D, Oldano C, de Boer DKG, Cortie R, Orta R, Tascone R. Reduced-order model technique for the analysis of anisotropic inhomogeneous media: application to liquid-crystal displays. *J Opt Soc Am A* 2002; 19(9): 1901-1909. DOI: 10.1364/JOSAA.19.001901.
- [37] Olivero D, Oldano C. Numerical methods for light propagation in large LC cells: a new approach. *Liquid Crystals* 2003; 30(3): 345-353. DOI: 10.1080/0267829031000080996.
- [38] Moharam MG, Pommert DA, Grann EB, Gaylord TK. Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach. *J Opt Soc Am A* 1995; 12(5): 1077-1086. DOI: 10.1364/JOSAA.12.001077.
- [39] Oh C, Escuti MJ. Time-domain analysis of periodic anisotropic media at oblique incidence: an efficient FDTD implementation. *Opt Express* 2006; 14(24): 11870-11884. DOI: 10.1364/OE.14.011870.
- [40] Xiang X, Escuti MJ. Numerical Modeling of Polarization Gratings by Rigorous Coupled Wave Analysis. *Proc SPIE* 2016; 9769: 976918. DOI: 10.1117/12.2218276.
- [41] Xiang X, Kim J, Escuti MJ. Bragg polarization gratings for wide angular bandwidth and high efficiency at steep deflection angles. *Sci Rep* 2018; 8(7202): 1-6. DOI: 10.1038/s41598-018-25535-0.
- [42] Soifer VA, ed. *Diffractive nanophotonics*. Boca Raton: CRC Press; 2014. ISBN: 978-1-4665-9069-4.
- [43] Sherman MM, Yakovlev DA. Features of light transmission through monolayer of structurally identical anisotropic domains with random azimuthal orientation. *Optics and Spectroscopy* 2010; 109(2): 178-187. DOI: 10.1134/S0030400X10080059
- [44] Yakovlev DD, Yakovlev DA. Scattering patterns of orthogonally polarized light components for statistically rotationally invariant mosaic birefringent layers. *Optics and Spectroscopy* 2019; 126(3): 245-256.
- [45] Kosmopoulos JA, Zenginoglou HM. Geometrical optics approach to the nematic liquid crystal grating: numerical results. *Appl Opt* 1987; 26(9): 1714-1721. DOI: 10.1364/AO.26.001714.
- [46] Helfrich W. Deformation of cholesteric liquid crystals with low threshold voltage. *Appl Phys Lett* 1970; 17(12): 531-532. DOI: 10.1063/1.1653297.
- [47] Helfrich W. Electrohydrodynamic and dielectric instabilities of cholesteric liquid crystals. *J Chem Phys* 1971; 55(2): 839-842. DOI: 10.1063/1.1676151.
- [48] Hurault JP. Static distortions of a cholesteric planar structure induced by magnetic or ac electric fields. *J Chem Phys* 1973; 59(4): 2068-2075. DOI: 10.1063/1.1680293.
- [49] Chigrinov VG, Belyaev VV, Belyaev SV, Grebenkin MF. Instability of cholesteric liquid crystals in an electric field. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics* 1979; 50: 994-999.
- [50] Lavrentovich OD, Shiyankovskii SV, Voloschenko D. Fast beam steering cholesteric diffractive devices. *Proc SPIE* 1999; 3787: 149-155. DOI: 10.1117/12.351639.
- [51] Senyuk B, Smalyukh I, Lavrentovich O. Electrically-controlled two-dimensional gratings based on layers undulations in cholesteric liquid crystals. *Proc SPIE* 2005; 5936: 59360W. DOI: 10.1117/12.615976.
- [52] Scheffer TJ. Electric and magnetic field investigations of the periodic gridlike deformation of a cholesteric liquid crystal. *Phys Rev Lett* 1972; 28(10): 593-596. DOI: 10.1103/PhysRevLett.28.593.
- [53] Tervo J, Turunen J. Paraxial-domain diffractive elements with 100% efficiency based on polarization gratings. *Opt Lett* 2000; 25(11): 785-786. DOI: 10.1364/OL.25.000785.
- [54] Yakovlev DA. Calculation of transmission characteristics of smoothly inhomogeneous anisotropic media in the approximation of negligible smallness of the bulk reflection:

-
- II. Numerical methods. Optics and Spectroscopy 2003; 94(4): 600-606. DOI: 10.1134/1.1570488.
- [55] Yakovlev DA. Calculation of transmission characteristics of smoothly inhomogeneous anisotropic media in the approximation of negligible smallness of the bulk reflection: I. Basic equation. Optics and Spectroscopy 1999; 87(6): 903-908. DOI: 10.1134/1.1635481.
- [56] Yakovlev DA. Calculation of transmission characteristics of smoothly inhomogeneous anisotropic media in the approximation of negligible smallness of the bulk reflection: III. Analytical solutions. Optics and Spectroscopy 2003; 95(6): 944-951. DOI: 10.1134/1.1635481.
- [57] Yakovlev DA. Simple formulas for the amplitude transmission and reflection coefficients at the interface of anisotropic media. Optics and Spectroscopy 1998, 84(5): 748-752.
-

Author's information

Dmitry Dmitrievich Yakovlev (b. 1993) graduated from Saratov State University in 2015, majoring in Physics. He is currently a PhD student at Saratov State University. Research interests are polarization optics, photonics, and optics of anisotropic media. E-mail: ddy-optics@mail.ru.

Dmitry Anatol'evich Yakovlev (b. 1963) graduated from Saratov State University in 1985, majoring in Physics. Currently he works as a senior researcher at Education and Research Institute of Optics and Biophotonics of Saratov State University. His research interests are optics of anisotropic media, biomedical optics, polarization optics, microscopy, and physics of liquid crystals. E-mail: yakovlevday@gmail.com.

Received April 16, 2019. The final version – August 14, 2019.
