

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**

Кафедра Оптики и биофотоники.

Оптические свойства многослойных структур,
содержащих жидкие кристаллы,
в терагерцовом диапазоне.

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студента 4 курса 4082 группы

направление 12.03.04 Медицинская Фотоника

Институт Физики

Морозовского Михаила Андреевича

Научный руководитель (руководитель)

профессор, доктор ф.-м.н., доцент
должность, уч. степень, уч. звание


подпись, дата

Г.В. Симоненко
инициалы, фамилия

Зав. кафедрой

профессор, доктор ф.-м.н., член кор. РАН
должность, уч. степень, уч. звание


подпись, дата

В.В Тучин
инициалы, фамилия

Саратов 2026

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования. Терагерцовый диапазон электромагнитного спектра занимает промежуточное положение между микроволновым и инфракрасным участками и до недавнего времени оставался одним из наименее освоенных. За последние два десятилетия интерес к нему существенно возрос: зондирующее ТГц-излучение безопасно для биологических тканей, способно проникать сквозь многие непрозрачные в видимом диапазоне материалы и обеспечивает высокое контрастное разрешение при формировании изображений. Всё это делает его перспективным для медицинской визуализации, систем контроля безопасности, неразрушающего контроля, широкополосной передачи данных и молекулярной спектроскопии.

Вместе с тем практическое освоение ТГц-диапазона по-прежнему сдерживается нехваткой эффективных, управляемых и технологически доступных функциональных элементов — фильтров, модуляторов, фазовых пластин. Многослойные жидкокристаллические структуры представляют собой перспективный путь к решению этой задачи: жидкие кристаллы обладают управляемой анизотропией оптических параметров, низкими потерями и отработанной технологией производства тонкоплёночных ячеек. Показатель преломления необыкновенной волны нематического жидкого кристалла меняется под действием электрического поля, что позволяет строить электрически перестраиваемые фильтры и модуляторы.

Для проектирования подобных устройств необходим точный расчёт коэффициента пропускания многослойной системы с учётом многолучевой интерференции. Матричный метод (метод трансфер-матриц) позволяет строго описать распространение волны через произвольный набор слоёв, не прибегая к упрощениям: он учитывает граничные условия на каждом

интерфейсе, фазовые сдвиги в слоях и суперпозицию многократно отражённых волн. Разработка программного инструмента, реализующего этот метод, и систематическое исследование влияния конструктивных параметров на спектральные характеристики являются необходимым шагом на пути от теоретического описания к инженерным расчётам и составляют актуальность данной работы.

Цель и задачи исследования. Целью работы является исследование оптических характеристик многослойных жидкокристаллических структур в терагерцовом диапазоне.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

1. Изучить теоретические основы распространения электромагнитных волн в многослойных анизотропных средах.
2. Разработать математическую модель расчёта оптических характеристик многослойной жидкокристаллической структуры.
3. Реализовать программный алгоритм для численного анализа спектральных характеристик системы.
4. Провести исследование влияния параметров структуры (число слоёв, толщина слоёв, показатели преломления, длина волны) на коэффициент пропускания.
5. Выполнить интерпретацию результатов и определить перспективы практического применения исследуемых структур.

Краткая характеристика материалов исследования.

Теоретическую основу работы составляет матричный формализм Абелеса. Объектом моделирования является многослойная структура на основе нематических ЖК π -ячеек с антисимметричными граничными условиями. Численные расчёты выполнены на языке Python с использованием библиотеки NumPy; для верификации модели результаты расчётов

сопоставлены с экспериментальными измерениями коэффициента пропускания в видимом диапазоне.

Структура работы. Выпускная квалификационная работа состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка использованной литературы (31 источник) и четырёх приложений. Первая глава посвящена теоретическим основам интерференции и многослойных структур; вторая — модели модулятора и методу расчёта коэффициента пропускания; третья — определению параметров структуры и выбору программной среды; четвёртая — численному моделированию спектров в видимом и терагерцовом диапазонах.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В первой главе «Теоретические основы» изложены физические принципы, лежащие в основе функционирования многослойных оптических структур. Рассмотрена природа интерференции электромагнитных волн: показано, что устойчивая интерференционная картина формируется лишь при выполнении условия когерентности, а её характер — конструктивный или деструктивный — определяется фазовым соотношением складываемых колебаний. Особо выделена интерференция в тонких плёнках как основа большинства интерференционных покрытий.

Значительное место отведено многослойным изотропным структурам. Показано, что их оптические характеристики определяются совокупностью параметров: толщинами и показателями преломления слоёв, их порядком, углом падения и длиной волны излучения. При падении волны на границу раздела часть энергии отражается, часть проходит дальше — и в многослойной системе суперпозиция многократно отражённых волн формирует сложную спектральную зависимость пропускания. В терагерцовом диапазоне эти интерференционные эффекты приобретают особую значимость, поскольку длины волн сравнимы с характерными толщинами конструктивных элементов, и небольшое изменение геометрии способно кардинально изменить спектральный отклик структуры. Именно данное обстоятельство открывает возможность целенаправленного формирования полос пропускания и подавления путём подбора параметров слоёв.

Вторая глава «Модель модулятора и метод расчёта коэффициента пропускания» посвящена обоснованию выбора типа модулятора и описанию расчётного аппарата.

Для принятия обоснованного конструктивного решения проведён сравнительный анализ трёх типов управляемых оптических элементов: жидкокристаллического модулятора на π -ячейке, графенового модулятора и теплового детектора-модулятора на основе ячейки Голея. Графеновые модуляторы, несмотря на высокое быстродействие (единицы наносекунд) и широкополосность, требуют сложных технологических процессов CVD-синтеза и последующего переноса плёнки, что существенно повышает их стоимость и ограничивает масштабируемость. Ячейка Голея обладает широким спектральным диапазоном и высокой чувствительностью, однако время её теплового отклика составляет десятки миллисекунд, что неприемлемо для большинства задач динамической модуляции. Жидкокристаллический модулятор на π -ячейке обеспечивает наилучшее сочетание оптических параметров (контрастность до 1000:1, коэффициент пропускания до 85–95%), технологической доступности и управляемого быстродействия, что и определило его выбор в качестве основного функционального элемента разрабатываемой системы.

Принятая модель основана на конструкции «классической» π -ячейки — гомогенной нематической ЖК-ячейки с антисимметричными граничными условиями и нулевым углом закручивания молекулярной структуры. Модуляция обеспечивается управляемым двулучепреломлением: при изменении управляющего напряжения ориентация молекул меняется, что влечёт изменение показателя преломления необыкновенной волны от n_e до n_o , а следовательно — изменение разности фаз и коэффициента пропускания. Поскольку для ТГц-излучения выполнение интерференционного условия требовало бы слишком большой толщины одной ячейки (а время отклика пропорционально квадрату толщины), предложена конструкция из N одинаковых тонких π -ячеек с одновременным управлением, что позволяет

сочетать необходимый суммарный фазовый сдвиг с малым временем переключения.

Для расчёта коэффициента пропускания применён матричный формализм Абелеса. Каждому слою структуры ставится в соответствие матрица передачи, учитывающая фазовый сдвиг при прохождении слоя; каждой границе раздела соответствует интерфейсная матрица, определяемая коэффициентами Френеля. Перемножение матриц всех элементов даёт суммарную матрицу системы S , из элемента S_{11} которой коэффициент амплитудного пропускания $t = 1/S_{11}$, а энергетический коэффициент пропускания $T = |t|^2$. Описаны аналитические выражения для отдельного расчёта обыкновенной и необыкновенной волн с последующим некогерентным суммированием вкладов, что корректно отражает физику задачи при нормальном падении излучения.

В третьей главе «Расчёт коэффициента пропускания многослойной периодической структуры с учётом многолучевой интерференции» последовательно рассмотрены два аспекта: задание параметров структуры и выбор программной среды.

Определены основные параметры, задающие спектральное поведение системы: количество слоёв, их толщины и показатели преломления, показатель преломления внешней среды, угол падения и длина волны излучения. Ключевую роль играет фазовый сдвиг $\delta_j = 2\pi n_j d_j / \lambda$, накапливаемый при прохождении j -го слоя: соотношение фазовых сдвигов в соседних слоях определяет характер интерференционной картины — наличие максимумов или минимумов пропускания — и позволяет при правильном выборе параметров формировать просветляющие покрытия, диэлектрические зеркала, узкополосные фильтры и интерференционные резонаторы.

Проведён сравнительный анализ программных сред: Python, Visual Basic, Fortran и Mathcad. Visual Basic исключён из рассмотрения ввиду

ограниченной поддержки в современных операционных системах. На Fortran алгоритм был реализован успешно, однако устаревшая компиляторная база делает распространение программы практически затруднённым. Mathcad продемонстрировал несовместимость файлов между версиями, что существенно снижает воспроизводимость результатов. На начальном этапе работы с Python возникли трудности с обработкой комплексных матриц, однако после дополнительного освоения библиотеки NumPy удалось разработать корректно функционирующую программу. Итоговый выбор Python обусловлен кроссплатформенностью, богатой экосистемой научных библиотек, удобством визуализации результатов и возможностью дальнейшего расширения функционала. Программный код приведён в приложениях к работе.

Четвёртая глава «Моделирование спектров» содержит основные численные результаты работы — параметрическое исследование коэффициента пропускания в видимом (0,4–1,5 мкм) и терагерцовом (10–17 мкм) диапазонах.

В видимом диапазоне проведены четыре серии расчётов для структур из 5, 10 и 15 ЖК-ячеек. В каждой серии один параметр варьировался при неизменных остальных (базовые значения: толщина ЖК-слоя 2 мкм, показатель преломления 1,55, толщина проводящего слоя 0,1 мкм, ориентирующего слоя 0,02 мкм).

При увеличении толщины ЖК-слоя от 2 до 6 мкм число интерференционных минимумов в полосе 0,4–1,5 мкм последовательно возрастает: для 10-слойной структуры при толщине 5 мкм зафиксировано максимальное число минимумов — 24, что свидетельствует об интенсивной многолучевой интерференции. Смещение минимумов при увеличении толщины происходит в длинноволновую область, что согласуется с ростом оптической длины пути. Изменение показателя преломления в диапазоне $n = 1,5–1,7$ приводит к нелинейному смещению положений минимумов и

изменению их контраста: при $n = 1,55$ в видимой области 10-слойной структуры наблюдается 3 минимума, при $n = 1,7$ — уже 5. Варьирование толщины проводящего слоя (0,1–0,5 мкм) существенно влияет на форму спектра, особенно при большом числе ячеек, что связано с вкладом этого слоя в суммарную оптическую толщину и поглощение. Изменение толщины ориентирующего слоя (0,02–0,1 мкм), несмотря на малые абсолютные значения, также даёт измеримый отклик: при толщине 0,1 мкм и 10-слойной структуре получен наибольший результат — 24 минимума на всём диапазоне.

Более детальное параметрическое исследование проведено в терагерцовом диапазоне для структур с 20 ЖК-ячейками. Исследовались четыре управляющих параметра: толщина стеклянных подложек, показатель преломления ЖК-слоя, толщина ЖК-слоя и число слоёв в структуре.

Зависимость числа глубоких интерференционных минимумов от толщины стеклянных подложек (50–500 мкм) имеет немонотонный характер: при толщинах 150–200 мкм возникают выраженные осцилляции (до 3 минимумов), тогда как при ряде других значений (100, 300–350 мкм) спектр практически гладкий. Данный эффект объясняется интерференцией в плоскопараллельной стеклянной пластине: разность хода определяется произведением толщины и показателя преломления, и при определённых соотношениях в рабочем диапазоне длин волн возникают условия деструктивной интерференции.

Повышение показателя преломления ЖК-слоя от 1,45 до 1,70 закономерно сопровождается нарастанием интерференционных осцилляций: при $n = 1,5$ спектр практически ровный (минимумы отсутствуют), при $n \geq 1,65$ наблюдается от 5 до 6 глубоких минимумов. Физическая причина состоит в увеличении оптической толщины слоя и

усилении рассогласования показателей преломления на границах раздела с подложкой, что усиливает многолучевую интерференцию.

Зависимость коэффициента пропускания от толщины ЖК-слоя (1–3 мкм) имеет периодический и немонотонный характер. В диапазоне толщин 1,5–1,9 мкм спектр остаётся гладким (минимумы отсутствуют или единичны); при толщинах свыше 2,5 мкм возникают 3–4 глубоких минимума. Это объясняется сменой порядка интерференции при изменении оптической длины пути в слое: при одних толщинах условия деструктивной интерференции в рабочем диапазоне не выполняются, при других — реализуются одновременно для нескольких длин волн.

Влияние числа слоёв (5–40 ячеек) исследовалось как в терминах числа минимумов, так и интегрального пропускания. С ростом N интегральный коэффициент пропускания нелинейно снижается — от 1 при нулевом числе слоёв до $\sim 0,1$ при 40 слоях — и хорошо описывается экспоненциальной моделью с коэффициентом детерминации $R^2 = 0,979$. Оптическая плотность $D(N)$ демонстрирует обратную тенденцию — нелинейный рост, аппроксимируемый экспоненциально-ростовой функцией с $R^2 = 0,988$. Для зависимости коэффициента пропускания от показателя преломления наилучшую аппроксимацию обеспечивает обобщённая логистическая функция ($R^2 = 0,956$), тогда как зависимость $T(d_{\text{ЖК}})$ в силу своего сложного периодического характера описывается полиномом пятой степени ($R^2 = 0,995$).

Достоверность разработанной вычислительной модели подтверждена удовлетворительным совпадением расчётных и экспериментальных спектров пропускания в видимом диапазоне, что свидетельствует о корректности математической постановки задачи и программной реализации алгоритма.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате выполнения выпускной квалификационной работы проведено комплексное исследование оптических характеристик многослойных жидкокристаллических структур в терагерцовом диапазоне. Все поставленные задачи решены, цель достигнута.

Теоретически обоснован выбор метода трансфер-матриц (матричного формализма Абелеса) как наиболее строгого и универсального инструмента для расчёта коэффициентов пропускания многослойных оптических систем. Метод позволяет с высокой точностью учитывать граничные условия на всех интерфейсах, фазовые сдвиги и многолучевую интерференцию при произвольном числе слоёв, что делает его пригодным для задач расчёта и оптимизации как простых тонкоплёночных покрытий, так и сложных ЖК-структур для ТГц-техники.

Проведён сравнительный анализ трёх типов модуляторов — жидкокристаллического, графенового и теплового. Показано, что жидкокристаллический модулятор на π -ячейке представляет собой оптимальный выбор по совокупности критериев: контрастность, пропускание, технологическая зрелость и управляемое быстродействие. В качестве программной среды для реализации матричного алгоритма выбран Python с библиотекой NumPy, обеспечивающей эффективные операции с комплексными матрицами и удобную визуализацию результатов.

В ходе параметрического численного исследования в видимом и терагерцовом диапазонах установлены следующие закономерности. Интегральный коэффициент пропускания нелинейно убывает с ростом числа слоёв и хорошо описывается экспоненциальной моделью ($R^2 \approx 0,98$). Повышение показателя преломления ЖК выше $n \approx 1,65$ приводит к значительному увеличению числа интерференционных минимумов и глубины модуляции спектра. Зависимость пропускания от толщины ЖК-

слоя носит сложный периодический характер, наилучшим образом аппроксимируемый полиномом пятой степени ($R^2 \approx 0,995$). Толщина стеклянных подложек определяет возникновение и положение интерференционных осцилляций немонотонным образом.

Достоверность полученных результатов подтверждена удовлетворительным совпадением расчётных и экспериментальных спектров пропускания в видимом диапазоне, что свидетельствует о корректности принятой математической модели.

Практическая значимость работы заключается в том, что полученные аппроксимирующие зависимости могут непосредственно использоваться при инженерных расчётах ТГц-модуляторов и фильтров на основе многослойных жидкокристаллических структур, сокращая временные и материальные затраты на их экспериментальную разработку и оптимизацию.

Перспективными направлениями дальнейших исследований являются: учёт анизотропии жидких кристаллов и дисперсии их оптических параметров в расширенной модели; распространение расчётного подхода на случай наклонного падения излучения и произвольного состояния поляризации; применение методов машинного обучения для решения обратных задач оптимизации — нахождения параметров структуры, обеспечивающих заданные спектральные характеристики.

