Гирин № 2-6

ЖУРНАЛ ПРИКЛАДНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

3

МАРТ

1987

ТОМ 46

4. **Блюменфельд Л. А., Черняковская К. А., Черняковский Ф. П.** // Журн. физ. хим. 1973. Т. 47, № 8. С. 2118—2120.
5. **Pergushov V. I., Bormotko O. N., Gurman V. S.** // Chem. Phys. Lett. 1977. V. 51, N 2. P. 269—272.
6. **Tadamasa Shida.** // J. Phys. Chem. 1978. V. 82, N 2. P. 991—994.
7. **Eisenbash C. D.** // Makromol. Chem. 1979. V. 180. P. 565—571.
8. **Eisenbach C. D.** // Ber. Bunsenges. Phys. Chem. 1980. V. 84, N 7. P. 680—690.
9. **Воробьев А. Х., Гурман В. С.** // Докл. АН СССР. 1980. Т. 253, № 1. С. 138—142.
10. **Арсенов В. Д., Мальцев С. В., Маревцев В. С.** и др. // Высокомолек. соед. 1982. Т. 24А, № 11. С. 2298—2303.

Поступило в редакцию 16.09.85.

УДК 535.543

Б. В. Бокуть, С. С. Гиргель

НОВЫЕ ФОРМЫ УРАВНЕНИЯ НОРМАЛЕЙ ДЛЯ БИАНИЗОТРОПНЫХ СРЕД

При решении задач наклонного падения и отражения света на границе раздела двух сред обычно приходится из уравнения нормалей определять нормальные составляющие η_i векторов рефракции [1]

$$\mathbf{m}_i = \mathbf{b} + \eta_i \mathbf{q}. \tag{1}$$

В ряде случаев (для изотропных сред, одно- и двуосных кристаллов, при совпадении плоскости падения света с плоскостью симметрии кристалла) уравнение нормалей разлагается на два множителя, что позволяет легко его решить. Однако при переходе к низкосимметричным двуосным, а также гиротропным кристаллам уравнение нормалей становится, вообще говоря, полным уравнением четвертой степени относительно компонентов η_i, что создает известные математические затруднения для аналитического решения. Поэтому автором работы [1] для немагнитных сред была предложена итерационная методика расчета векторов рефракции отраженных и преломленных волн, использующая аксиальное представление тензора ε^{-1}. Суть ее заключается в том, что величины η_i вычисляются сначала в приближении изотропной среды, пренебрегая анизотропией тензора ε^{-1}. Затем влияние анизотропии вследствие ее малости учитывается простым методом последовательных приближений.

В работе [2] получена новая ковариантная форма уравнения нормалей для анизотропных сред, характеризуемых симметричным тензором ε, и на ее основе предложен другой, более эффективный метод расчета коэффициентов η_i.

Плодотворная идея работы [2] о целесообразности выделения в уравнении нормалей двух множителей, дающих приближенные значения корней, может быть реализована различными путями. Мы воспользуемся этой идеей, несколько ее модифицировав, и применим к средам, характеризующимся несимметричными тензорами ε^{-1} и μ, описывающими, например, оптические свойства ряда магнитоупорядоченных кристаллов в ближней инфракрасной области спектра.

Векторы рефракции $\mathbf{m}_i$ собственных плоских монохроматических волн в таких бианизотропных средах удовлетворяют уравнению нормалей [3]

$$\det(1 + \tau_c + \overline{\tau}_c) = 0, \quad \tau = \mu^{-1}\mathbf{m}^{\times}\varepsilon^{-1}\mathbf{m}^{\times}. \tag{2}$$

Заметим, что при наклонном падении света на кристалл физически выделенными являются три вектора: $\mathbf{n}$ — единичный вектор нормали световой волны, $\mathbf{a}=[\mathbf{mq}]$ и $[\mathbf{na}]$. Целесообразно поэтому записать тензор τ в ортонормированном базисе $\{\mathbf{a}_1=\mathbf{a}/|\mathbf{a}|,\ [\mathbf{na}_1],\mathbf{n}]\}$. Вычисляя далее (2), после некоторых преобразований получаем уравнение нормалей в следующей форме:

$$([\mathbf{ma}_1]\,\mu^{-1}\mathbf{m}^{\times}\varepsilon^{-1}\mathbf{a}_1-1)(\mathbf{a}_1\mu^{-1}\mathbf{m}^{\times}\varepsilon^{-1}\mathbf{a}_1^{\times}\mathbf{m}-1)=$$
$$=\mathbf{a}_1\mu^{-1}\mathbf{m}^{\times}\varepsilon^{-1}\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{ma}_1^{\times}\mu^{-1}\mathbf{m}^{\times}\varepsilon^{-1}\mathbf{a}_1^{\times}\mathbf{m}. \tag{3}$$

При $\mu=1$ уравнение (3) можно несколько упростить. Используя тождество

$$\mathbf{n}(\varepsilon_c^{-1}-\varepsilon^{-1})\,\mathbf{n}=[\mathbf{a}_1\mathbf{n}]\,\varepsilon^{-1}\,[\mathbf{a}_1\mathbf{n}]+\mathbf{a}_1\varepsilon^{-1}\mathbf{a}_1 \tag{4}$$

и учитывая, что, с другой стороны, анизотропная среда характеризуется уравнением нормалей [3]

$$\mathbf{m}^2\cdot\mathbf{m}\overline{\varepsilon^{-1}}\mathbf{m}+\mathbf{m}(\varepsilon^{-1}-\varepsilon_c^{-1})\,\mathbf{m}+1=0, \tag{5}$$

выражение (3) преобразуем к следующему виду:

$$(\mathbf{m}\overline{\varepsilon^{-1}}\mathbf{m}-\mathbf{a}_1\varepsilon^{-1}\mathbf{a}_1)(m^2\cdot\mathbf{a}_1\varepsilon^{-1}\mathbf{a}_1-1)=$$
$$=[\mathbf{a}_1\mathbf{m}]\,\varepsilon^{-1}\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{a}_1\varepsilon^{-1}\,[\mathbf{a}_1\mathbf{m}], \tag{6}$$

что при $\varepsilon=\tilde{\varepsilon}$ совпадает с (13) работы [2].

Возвратимся к (3). Эта форма уравнения нормалей отличается от стандартной [3, 4] тем, что левая часть уравнения (3) разложена на два множителя — квадратные уравнения относительно η_i. Правая же часть — малая величина, обращающаяся в нуль при пренебрежении анизотропией и гиротропией тензоров ε^{-1} и μ^{-1}. Точнее говоря, правая часть соотношения (3) представляет собой величину второго порядка малости по анизотропии и гиротропии. В частности, если плоскость падения света является плоскостью симметрии кристалла, т. е. $\mathbf{a}_1$ — собственный вектор тензоров μ^{-1} и ε^{-1}, тогда правая часть (3) обращается в нуль и уравнение (3) разлагается на множители не приближенно, а точно.

Далее будет показано, что найденная форма (3) уравнения нормалей для бианизотропных сред позволяет применить простой метод последовательных приближений для расчета компонентов η_i векторов рефракции, обладающий быстрой обязательной сходимостью.

Известно [3], что в одноосных кристаллах (в которых $\mu=1$ или $\mu\neq1$) уравнение нормалей можно разложить на множители точно. Однако непосредственно такое разложение выражений (3) и (6) затруднено. Поэтому получим другую инвариантную форму уравнения нормалей для бианизотропных сред, свободную от отмеченного недостатка.

Предварительно представим тензор τ следующим образом:

$$\tau=\mathbf{d}^{\times}\gamma\mathbf{m}^{\times},\quad \mathbf{d}=\mathbf{m}\overline{\mu^{-1}},\quad \gamma=\tilde{\mu}\varepsilon^{-1}, \tag{7}$$

тогда (2) принимает вид

$$1+\mathbf{m}(\gamma-\gamma_c)\,\mathbf{d}+\mathbf{m}\overline{\gamma}\mathbf{d}\cdot\mathbf{dm}=0, \tag{2a}$$

который эквивалентен предложенному ранее в [4].

Чтобы приближенно разложить (2а) на множители, умножим (2а) на некоторый скаляр $a_к$ и прибавим результат к правой части тождества

$$\mathbf{m}\overline{\gamma}\mathbf{d}=\mathbf{m}(\overline{\gamma-a_к})\,\mathbf{d}-a_к\mathbf{m}(\gamma-\gamma_c)\,\mathbf{d}-a_к^2\cdot\mathbf{dm}. \tag{8}$$

После элементарных преобразований окончательно находим еще одну форму уравнения нормалей для бианизотропных сред

$$(1 - a_{\text{к}}\mathbf{dm})(\mathbf{m}\overline{\gamma}\mathbf{d} - a_{\text{к}}) = \mathbf{m}\,\overline{(\gamma - a_{\text{к}})}\,\mathbf{d}. \tag{9}$$

Будем полагать далее, что $a_{\text{к}}$ — некоторое собственное значение тензора $\gamma = \tilde{\mu}\varepsilon^{-1}$, т. е.

$$\gamma\mathbf{u}_{\text{к}} = a_{\text{к}}\mathbf{u}_{\text{к}}, \tag{10}$$

тогда $\overline{\gamma - a_{\text{к}}}$, а следовательно, и правая часть (9) — снова величина второго порядка малости по анизотропии и (или) гиротропии. В нулевом приближении из (9) имеем

$$\mathbf{m}\overline{\varepsilon^{-1}}\mathbf{m} = a_{\text{к}}, \tag{11}$$

$$\mathbf{m}\overline{\mu^{-1}}\mathbf{m} = 1/a_{\text{к}}, \tag{12}$$

причем $\mathbf{m}\,\overline{(\gamma - a_{\text{к}})}\,\mathbf{d} = \mathbf{m}\,\overline{(\varepsilon^{-1} - a_{\text{к}}\tilde{\mu}^{-1})}\,\mathbf{m}$.

Пусть тензор $\gamma = \tilde{\mu}\varepsilon^{-1}$ — одноосный, т. е. имеет двукратное собственное значение $a_{\text{к}}$. Тогда, как известно [3], $\overline{\gamma - a_{\text{к}}} = 0$ и поэтому для одноосных кристаллов уравнение (9) «автоматически» разлагается на множители, т. е. в таких случаях (11) и (12) — точные уравнения нормалей для каждой из собственных волн. Это соответствует результатам для одноосных кристаллов, изложенным в [3, § 5].

Если плоскость падения света является плоскостью симметрии кристалла, то удобнее всего в (9) взять $a_{\text{к}}$, которому соответствует собственный вектор $\mathbf{u}_{\text{к}} = \mathbf{a}_1$. Тогда $\mathbf{m}\,\overline{(\gamma - a_{\text{к}})}\,\mathbf{d} = 0$ и снова (9) раскладывается на множители точно.

Перейдем сейчас к вопросу об итерационных методах расчета нормальных составляющих η_i векторов рефракции собственных волн на основе найденных выше новых форм (3) и (9) уравнения нормалей. Поскольку (3) и (9) обладают одинаковой структурой, достаточно ограничиться рассмотрением (9). В соответствии с (9) уравнения (11) и (12) квадратные относительно η_i и дают нулевые приближения для искомых корней $\eta_i \equiv x_i$ $(i = 1, 2, 3, 4)$. Поэтому (9) можно представить в форме, предложенной в [2]:

$$f(x) = (x - x_1^{(0)})(x + x_3^{(0)})(x - x_2^{(0)})(x + x_4^{(0)}) - \delta(x) = 0, \tag{13}$$

где $(x_1^{(0)}, -x_3^{(0)})$ и $(x_2^{(0)}, -x_4^{(0)})$ соответственно корни уравнений (11) и (12) нулевого приближения, причем $x_i^{(0)} \geqslant 0$.

В [2] рекомендуется также эффективная методика уточнения найденных корней по итерационной формуле (ИФ) касательных Ньютона

$$x^{(n+1)} = \varphi(x^{(n)}) \equiv x^{(n)} - f(x^{(n)})/f'(x^{(n)}), \tag{14}$$

обладающей, вообще говоря, квадратичной сходимостью. Однако при приближении нормалей преломленных волн к оптическим осям кристалла корни уравнения (9) становятся кратными. Это резко замедляет сходимость последовательности $x^{(0)}, x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots$ при расчетах. Кроме того, поскольку тогда $f/f' \to 0/0$, то вычислительный процесс (14) становится неустойчивым и чувствительным к ошибкам округления и др. Поэтому в таких случаях целесообразнее, по нашему мнению, применять следующий прием. Записав (13) иначе

$$(x - x_1^{(0)})(x - x_2^{(0)}) = \delta(x)/\psi(x),$$
$$\psi(x) = (x + x_3^{(0)})(x + x_4^{(0)}), \tag{15}$$

видим, что искомые корни x_1, x_2 легко находятся по итерационной схеме (16), аналогичной предложенной ранее в [5]:

$$2x_{1,2}^{(n+1)} = 2\varphi_{1,2}(x_{1,2}^{(n)}) \equiv x_1^{(0)} + x_2^{(0)} \pm [(x_1^{(0)} - x_2^{(0)})^2 + 4\delta(x_{1,2}^{(n)})/\psi(x_{1,2}^{(n)})]^{1/2}. \tag{16}$$

Оставшиеся два корня x_3 и x_4 вычисляем аналогично.

Оценим скорости сходимости для ИФ, определяемых формулами (14) и (16). Согласно [6], если $|\varphi'(x)|<1$, то ИФ $x^{(n+1)}=\varphi(x^{(n)})$ сходится и тогда можно ввести соотношением

$$C=\lim_{x^{(n)}\to x}\frac{|x^{(n+1)}-x|}{|x^{(n)}-x|^{p}} \qquad (17)$$

следующие характеристики ИФ: p — порядок сходимости, C — константа асимптотики погрешности.

ИФ Ньютона (14) при $|f''/(f')^2|<1$ имеет квадратичную $(p=2)$ сходимость, причем [6] $C=|f''/(2f')|$. В случае же кратного корня получаем линейную $(p=1)$ очень медленную $(C=0{,}5)$ сходимость.

Иначе дело обстоит в отношении сходимости ИФ (16), которая обладает хотя и линейной, но быстрой $(C\ll 1)$ сходимостью. Действительно, пусть параметр α характеризует анизотропию тензора γ, т. е. $(\gamma-a_{\text{к}})\sim\alpha$. Тогда $\delta(x)\sim\alpha^2$, $\varphi(x)\sim\alpha^2$ и константа асимптотики погрешности ИФ (16) независимо от кратности корня по порядку величины равна

$$C=|\varphi'_{1,2}|=\left|\frac{(\delta/\psi)'}{2x_{1,2}-x_1^{(0)}-x_2^{(0)}}\right|\sim\alpha. \qquad (18)$$

Пусть, например, параметр анизотропии $\alpha\sim 10^{-3}$. Тогда каждая итерация по (16) дополнительно дает 3 верных десятичных знака корня.

Применяя ИФ (16) вместо ИФ (14) при вычислении кратного корня, мы резко ускоряем сходимость в

$$k=-\lg a/\lg 2 \qquad (19)$$

раз. Так, при $a\sim 10^{-2}\div 10^{-3}$ получаем $k\sim 7\div 10$.

Существенно также, что сходимость ИФ (16) остается прежней вблизи угла полного внутреннего отражения, когда некоторые из корней $x_i\to 0$. Наконец, если имеются нулевые корни, то $\delta(x)=0$, и поэтому все корни определяются сразу.

Таким образом, выражения (3) и (9) — искомые новые формы уравнения нормалей для бианизотропных сред, позволяющие применить простую методику их решения, обладающую быстрой линейной сходимостью и в случаях кратных корней. Отметим, что выражения (9) несколько проще первого варианта (3), поскольку они не зависят от вектора $\mathbf{a}_1$. Нулевые приближения по (3) и (9) эквивалентны приближениям плоскости симметрии и одноосного кристалла соответственно.

В заключение отметим также, что предлагаемый подход сохраняет силу и при наличии поглощения и может быть обобщен на кристаллы других типов с учетом возможных явлений оптической активности и магнитоэлектрического эффекта.

Summary

For bianisotropic media new forms of dispersion equations are found which allow a simple iteration procedure to be used for their solution. This procedure has the rapid obligatory linear convergence for any directions of light propagation in crystals. According to the estimations performed, even in the case of multiple roots, each iteration gives supplementarily about 2—4 precision decimal signs of the root in dependence on the crystal anisotropy.

Литература

1. **Федоров Ф. И.** Оптика анизотропных сред. Минск, 1958.
2. **Федоров Ф. И.** // ЖПС. 1982. Т. 37, № 6. С. 941—949.
3. **Федоров Ф. И.** Теория гиротропии. Минск, 1976.
4. **Барковский Л. М.** // Опт. и спектр. 1975. Т. 38, № 1. С. 115—119.
5. **Бокуть Б. В., Гиргель С. С.** // Опт. и спектр. 1980. Т. 49, № 4. С. 738—741.
6. **Трауб Дж.** Итерационные методы решения уравнений. М., 1985.

Поступило в редакцию 06.09.85.