Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Факультет вычислительной математики и кибернетики
Кафедра вычислительных методов

Педан Евгений Викторович

Математическое моделирование процесса отражения фемтосекундных импульсов от разупорядоченной слоистой структуры

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА

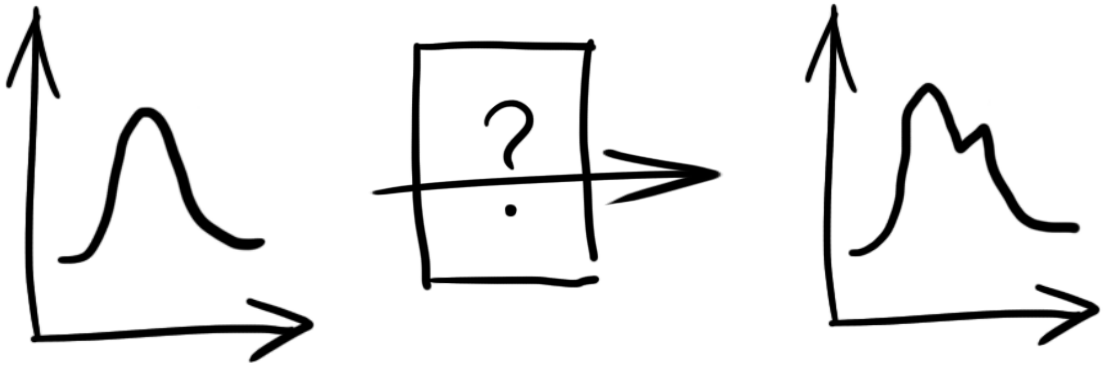
Научный руководитель:
д.ф-м.н., профессор
В.А. Трофимов

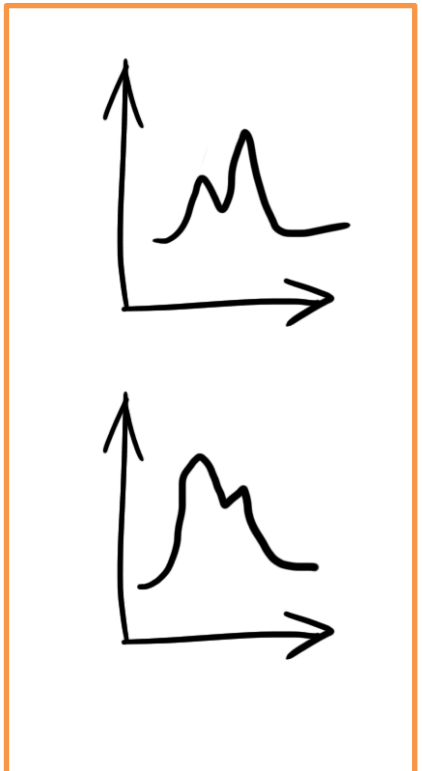
Спектроскопия веществ

- Терагерцовая спектроскопия – способ определения вещества с помощью коротких импульсов терагерцового излучения.

Спектроскопия веществ

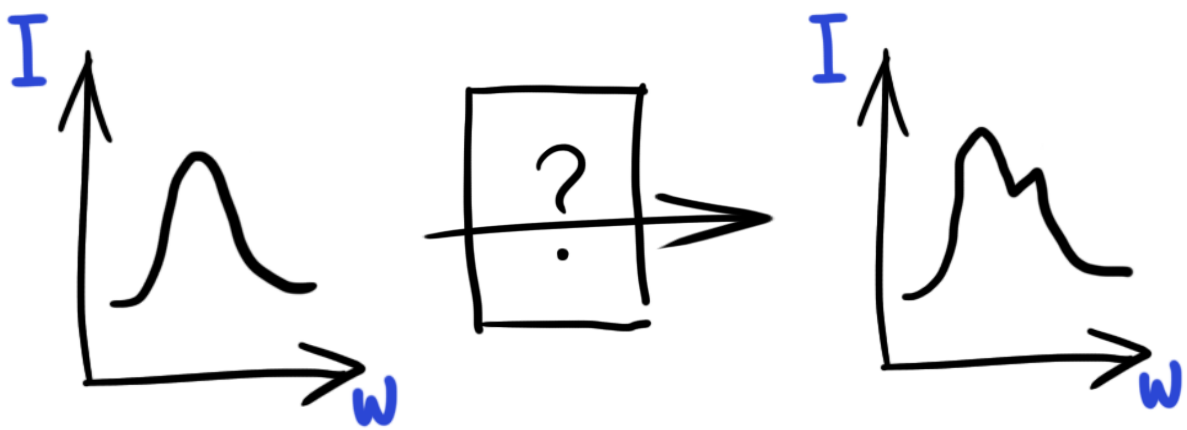
- Терагерцовая спектроскопия – способ определения вещества с помощью коротких импульсов терагерцового излучения.

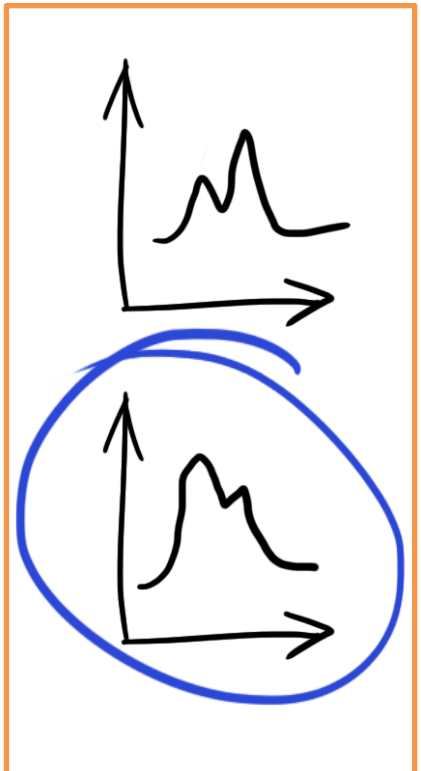




Спектроскопия веществ

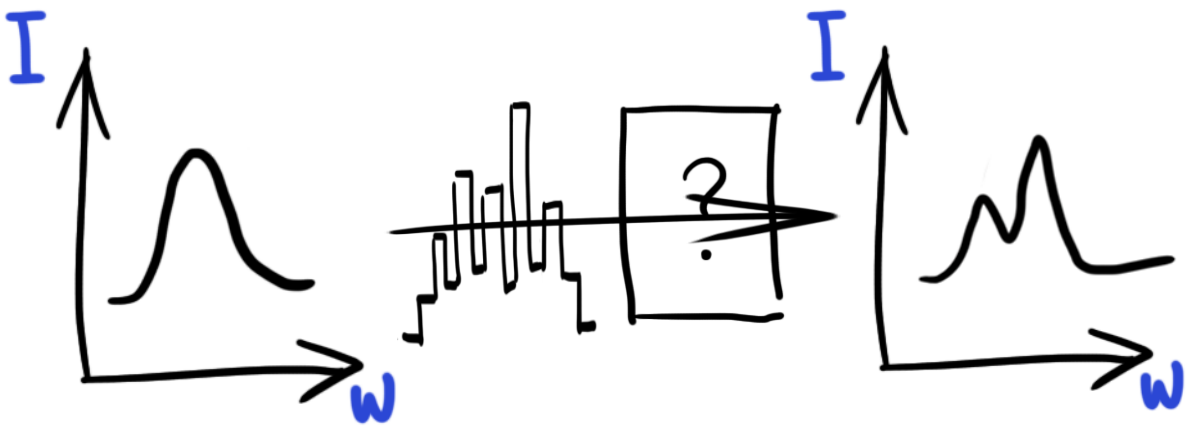
- Спектры прошедшего и отражённого импульсов сравнивается со спектрами из базы данных для прошедшего сигнала.

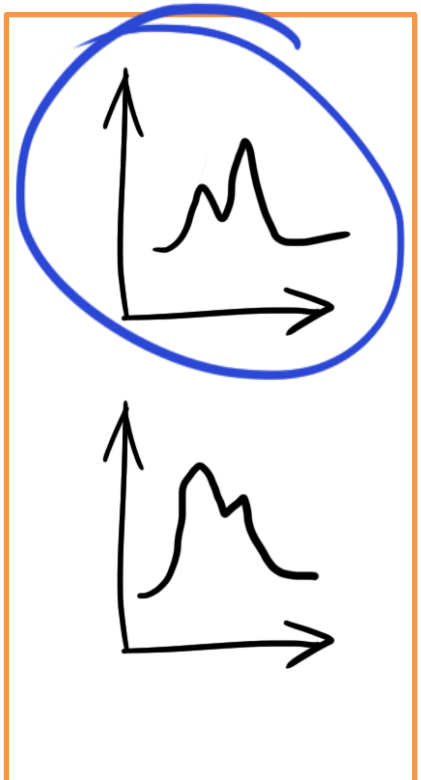




Спектроскопия веществ

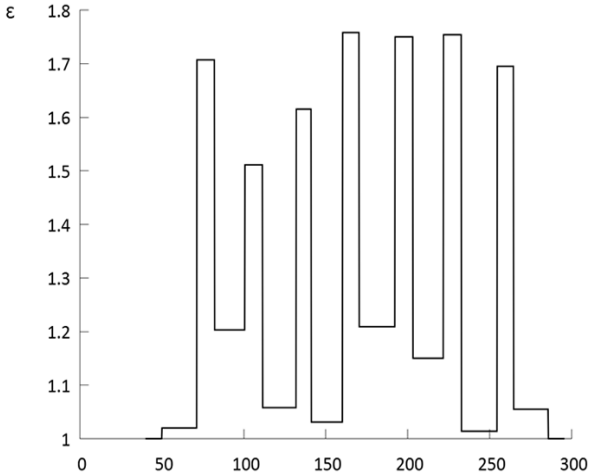
- Разупорядоченная структура может внести помехи или даже привести к появлению ложных частот поглощения веществ из базы данных.





Рассматриваемая проблема

- В данной работе изучается взаимодействие терагерцовых (пикосекундных) и оптических (фемтосекундных) импульсов с разупорядоченной слоистой структурой.
- Структура строится следующим образом: задаются параметры средней регулярной структуры и пределы флуктуаций каждого из них. Для каждой реализации эксперимента генерируется новая структура в указанных рамках. Затем результаты усредняются.
- Рассматриваются флуктуация ширины слоя и диэлектрической проницаемости вместе и по отдельности.



Постановка задачи

- Процесс описывается одномерными безразмерными уравнениями Максвелла:

$$\frac{\partial D}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial z}, \quad \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial E}{\partial z}, \quad -L_z < z < L_z, 0 < t < L_t$$

- Начальные условия:

$$E_0(z) = H_0(z) = \exp\left(-{z^2}/{a^2}\right)\cos(\omega z + \varphi), -L_z < z < L_z,$$

- Краевые условия:

$$E(z,t)|_{z=-L_z} = E(z,t)|_{z=L_z} = 0,$$

$$H(z,t)|_{z=-L_z} = H(z,t)|_{z=L_z} = 0,$$

$$0 < t < L_t$$

Инварианты задачи

Рассмотрим первое уравнение:

$$\frac{\partial D}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial z}.$$

Проинтегрируем по координате z:

$$\int_{-L_z}^{L_z} \frac{\partial D}{\partial t} dz = -\int_{-L_z}^{L_z} \frac{\partial H}{\partial z} dz.$$

Преобразуем:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-L_z}^{L_z} D dz = -(H|_{L_z} - H|_{-L_z}).$$

Правая часть равна нулю из краевых условий, следовательно:

$$I_1 = \int_{-L_z}^{L_z} D dz = const.$$

Аналогично для второго уравнения:

$$I_2 = \int_{-L_z}^{L_z} H dz = const.$$

Умножим первое уравнение на E, а второе – на H:

$$E\frac{\partial D}{\partial t} = -E\frac{\partial H}{\partial z},$$

$$H\frac{\partial H}{\partial t} = -H\frac{\partial E}{\partial z}.$$

Преобразуем с учётом того, что $D = \varepsilon E$, а $\varepsilon(t) = const$:

$$\frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial (E^2)}{\partial t} = -E\frac{\partial H}{\partial z},$$

$$\frac{1}{2}\frac{\partial (H^2)}{\partial t} = -H\frac{\partial E}{\partial z}.$$

Сложим уравнения:

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\partial (H^2)}{\partial t} + \varepsilon\frac{\partial (E^2)}{\partial t}\right) = -\left(H\frac{\partial E}{\partial z} + E\frac{\partial H}{\partial z}\right).$$

Свернём производные:

$$\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}(H^2 + \varepsilon E^2) = -\frac{\partial}{\partial z}(EH).$$

Проинтегрировав от $-L_z$ до L_z, получим:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-L_z}^{L_z} (H^2 + \varepsilon E^2) dz = -2((EH)|_{L_z} - (EH)|_{-L_z}).$$

Окончательно:

$$I_3 = \int_{-L_z}^{L_z} (H^2 + \varepsilon E^2) dz = const.$$

Разностная схема

- Вводятся две равномерные сетки для *E* и *H*. Разностная схема принимает вид:

$$E_{j+1}^{i+1} = E_{j+1}^{i} - \frac{1}{\varepsilon_{j+1}} \frac{\tau}{h} \left(H_{j+1,5}^{i+0,5} - H_{j+0,5}^{i+0,5} \right),$$

$$H_{j+0,5}^{i+1,5} = H_{j+0,5}^{i+0,5} - \frac{\tau}{h} \left(E_{j+1}^{i+1} - E_{j}^{i+1} \right).$$

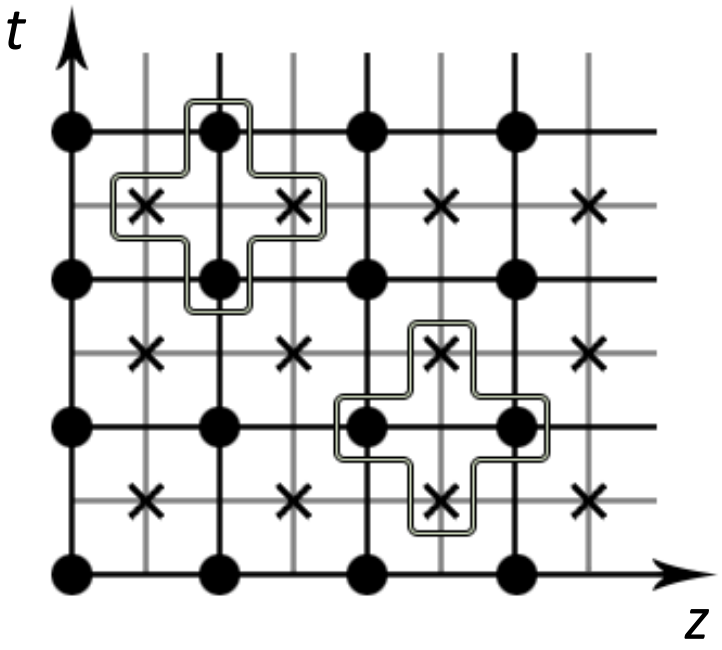
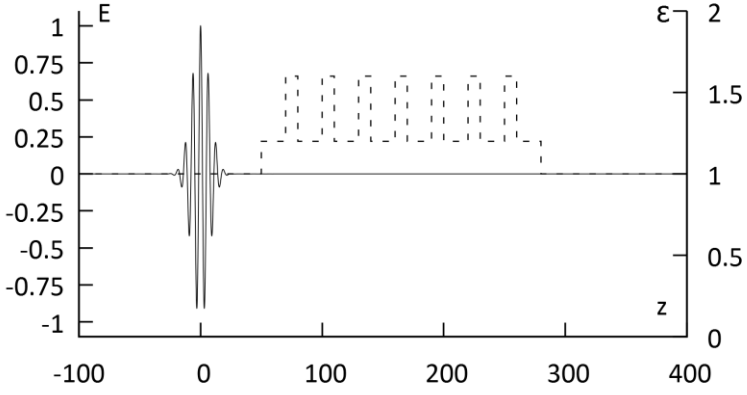


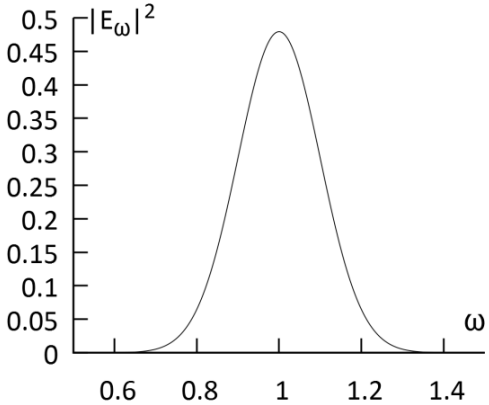
Схема эксперимента

- Падающий импульс имеет гауссову форму:

$$E_0(z) = H_0(z) = \exp\left(-{z^2}/{a^2}\right)\cos(\omega z + \varphi), -L_z < z < L_z,$$

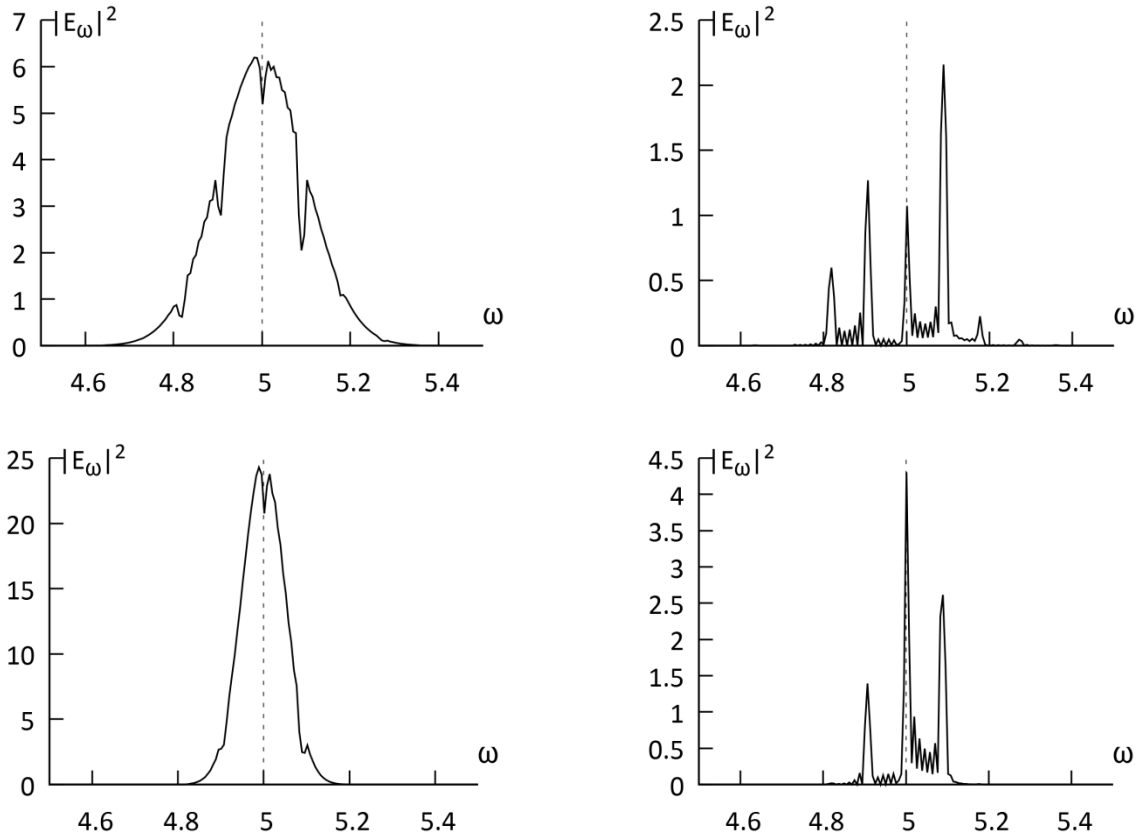
где a обозначает длительность лазерного импульса, ω — несущую частоту волнового пакета. Параметр φ обозначает абсолютную фазу лазерного импульса.





Регулярная структура

Спектр прошедшего и отражённого импульсов.

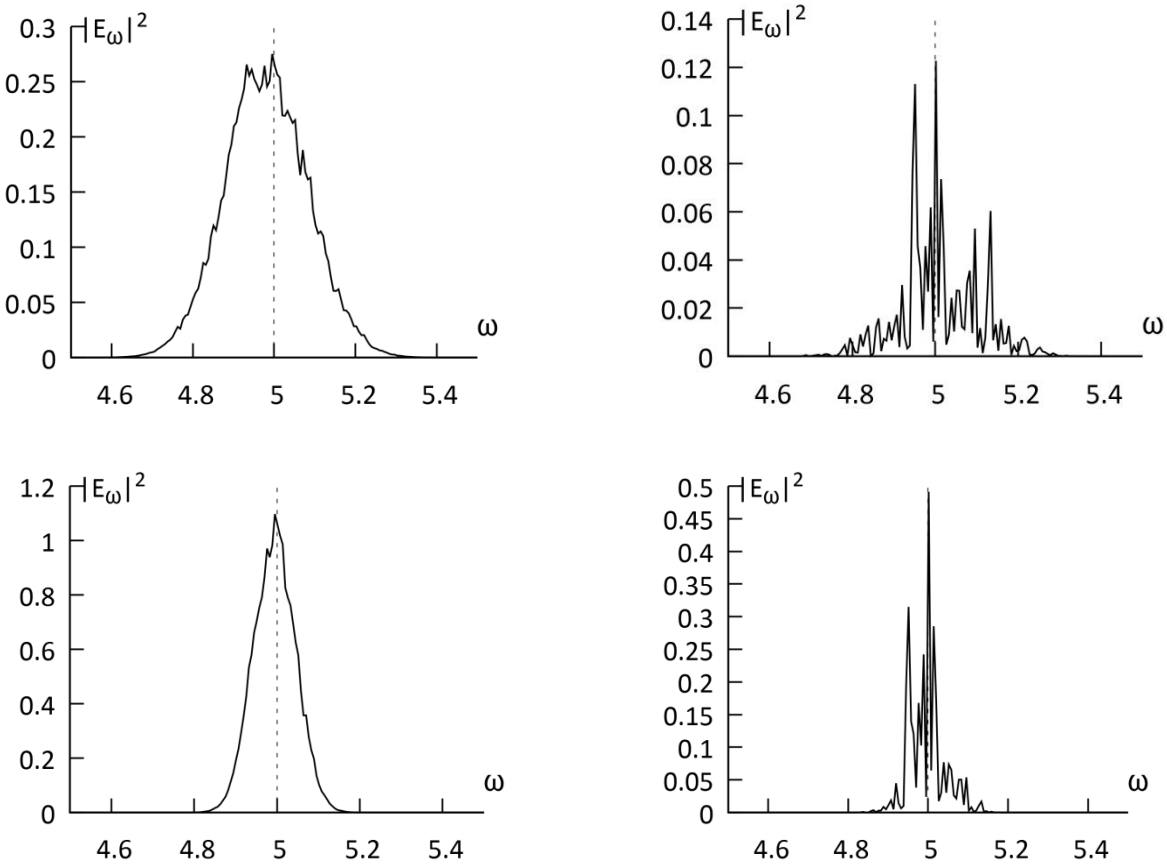


Несколько ярко выраженных впадин – частот «поглощения» – на спектре прошедшего импульса и пиков на спектре отражённого.

Несущая частота ω = 5, длительность a = 10, 20.

Разупорядоченная структура

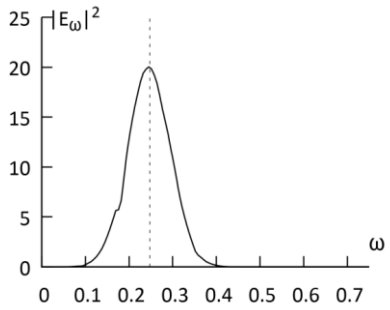
Спектр усреднённых прошедшего и отражённого импульсов.



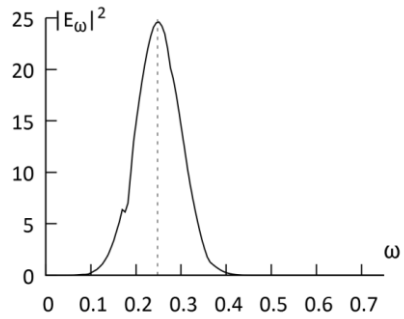
Частоты «поглощения» по всей ширине спектра.

Несущая частота ω = 5, длительность a = 10, 20.

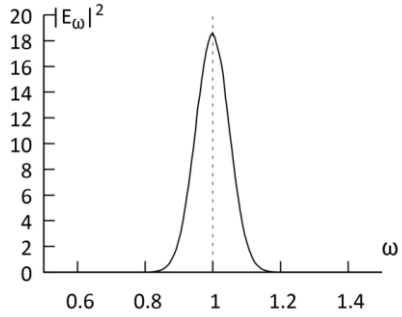
Разупорядоченная структура



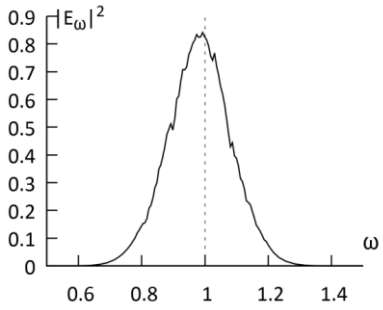
ω = 1, a = 10, флуктуация диэл. проницаемости слоя



ω = 0.25, a = 20, флуктуация ширины слоя



ω = 1, a = 20, флуктуация ширины слоя

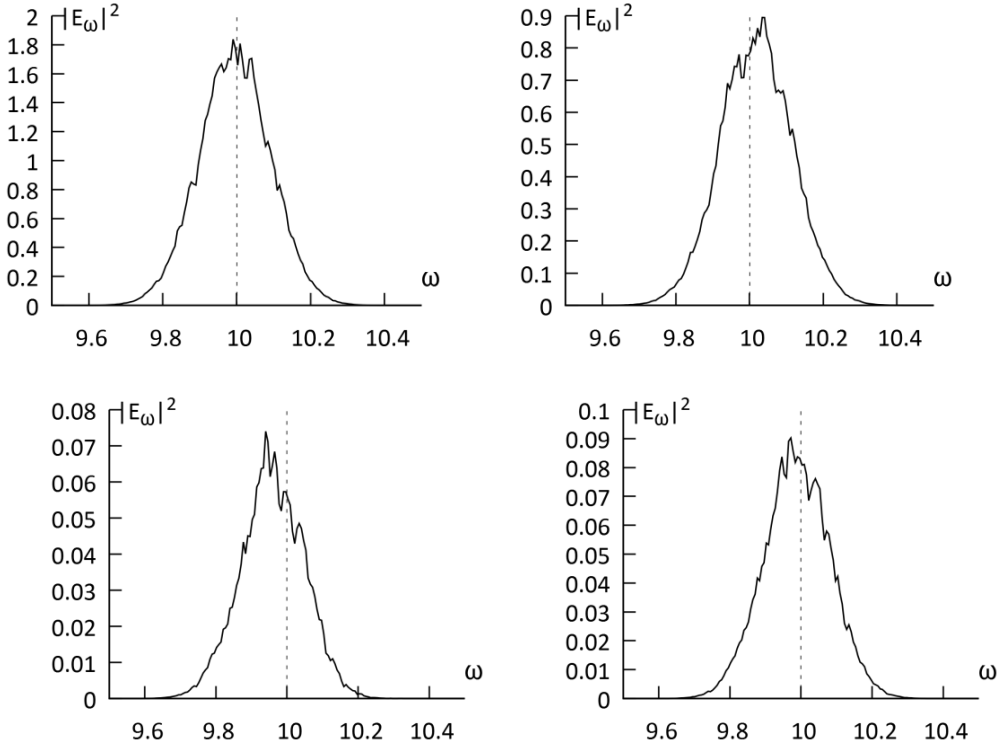


ω = 0.25, a = 20, флуктуация диэл. проницаемости и ширины слоя

Существуют случаи, в которых спектр результирующего импульса близок к спектру исходного!

Число реализаций

Зависимость спектра усреднённого прошедшего импульса от числа реализаций.



С увеличением числа реализаций эксперимента ложные частоты поглощения не исчезают!

Несущая частота ω = 10, длительность a = 10,
спектр усреднённого прошедшего импульса,
8, 16, 32, 48, 64 реализации.

Выводы

- Разупорядоченная структура проявляет себя в виде ложных частот «поглощения».
- Увеличением числа реализаций избавиться от ложных частот «поглощения» не удаётся.
- Существуют параметры импульса, при которых искажения в прошедшем импульсе минимальны.

Спасибо за внимание!