

В.Н. Старков, В.Я. Гайворонский, М.С. Бродин, А.Ю. Боярчук,
М.А. Копыловский, Е.А. Вишняков, И.М. Притула

Математическое моделирование лазерных экспериментальных исследований слаборассеивающих материалов

Предложена математическая модель измерительного тракта лазерной установки для исследования свойств новых нелинейно-оптических материалов. Модель представляет собой интегральное уравнение Фредгольма первого рода. Ядро уравнения построено на основе экспериментальных данных и представлено в аналитическом виде. Достоверность модели подтверждена дополнительными исследованиями с использованием высокоточного оборудования.

A mathematical model of the experimental setup for novel nonlinear optical material property research is suggested. The model is presented as a Fredholm integral equation of the first kind. The core of the equation is based on the experimental data and is presented as an analytical expression. The model integrity is verified by additional experiments with the use of a high-precision equipment.

Запропоновано математичну модель вимірювального тракту лазерної установки для дослідження властивостей нових нелінійно-оптичних матеріалів. Модель являє собою інтегральне рівняння Фредгольма першого роду. Ядро рівняння побудовано на основі експериментальних даних і представлено в аналітичному виді. Достовірність моделі підтверджено додатковими дослідженнями з використанням високоточного обладнання.

Введение. В условиях динамического развития процессов создания новых материалов, в частности нелинейно-оптических, все большее значение приобретает качество обработки результатов экспериментов по определению их свойств. Предельные возможности реальных экспериментальных установок ограничиваются физическими явлениями, формирующими процесс измерений, и не всегда удовлетворяют предъявляемым требованиям к точности результатов эксперимента.

При исследовании оптических свойств нелинейно-оптических материалов существенную роль играет математическая модель измерительного тракта лазерной экспериментальной установки. Такая модель зачастую определяет качество и достоверность получаемых результатов измерений.

Базовыми образцами для измерений служат кристаллы *KDP* (монокристаллы семейства дигидрофосфата калия KH_2PO_4), либо комбинация кристаллов *KDP* с разной концентрацией инкорпорированных наночастиц диоксида титана TiO_2 . Такие гибридные оптические материалы обладают уникальной совокупностью физических свойств и находят широкое применение в современной нелинейной оптике, оптоэлектронике, компьютерной технике.

В ходе экспериментов измеряется распределение интенсивности лазерного излучения, рас-

сеянного образцом. Особенности конструкции измерительного тракта установки таковы, что наблюдаемые результаты распределения интенсивности существенно отличаются от истинных значений. Рассматриваемая модель может быть использована для математической интерпретации экспериментальных данных.

Достоверность модели проверяется экспериментально с применением более точной, но трудоемкой методики измерений.

Схема экспериментальной лазерной установки

В ходе экспериментов исследовался новый нелинейно-оптический материал – монокристаллические матрицы дигидрофосфата калия KH_2PO_4 с инкорпорированными наночастицами диоксида титана TiO_2 [1].

Важная характеристика оптических свойств исследуемых образцов композитных материалов – их индикатриса рассеивания, т.е. угловое распределение интенсивности света, рассеянного образцом, при освещении его коллимированным лазерным пучком. Детали индикатрисы отображают информацию о строении кристалла, размере кластеров наночастиц и ряде других свойств.

В изотропных средах рассеивание аксиально-симметрично. Поэтому для получения индикатрисы образца достаточно измерить угло-

вое распределение интенсивности в любой плоскости рассеивания.

При проведении экспериментальных исследований использовалась установка на базе гониометра Г-5 (рис. 1) с лазером (длина волны $\lambda = 532$ нм, мощность $P = 50$ мВт) на его неподвижном плече. Исследуемый образец размещен на предметном столике на оси гониометра. Измерительный тракт лазерной установки расположен на подвижном плече прибора. Он представляет собой прибор с зарядовой связью (ПЗС)-линейку АМКО *LTI MuLTray* (1024 пикселя 25 мкм \times 200 мкм, цифровая разрешающая способность 12 бит) с прикрепленной к ней широкоапертурной фокусирующей линзой (диаметр $d = 0,96$ см). Рабочей поверхности ПЗС-линейки достигает только излучение, прошедшее через линзу [2].

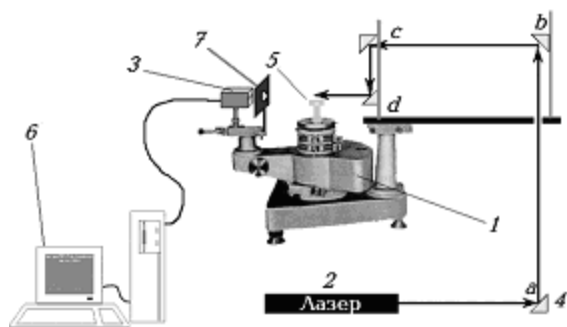


Рис. 1. Схема экспериментальной установки для измерения углового распределения интенсивности рассеянного света. 1 – гониометр Г-5; 2 – лазер; 3 – ПЗС-линейка; 4(a-d) – набор поворотных призм; 5 – предметный столик для образца; 6 – компьютер; 7 – экран с линзой

Закрепленный на оси гониометра образец облучается коллимированным лазерным пучком. Для каждого угла поворота подвижного плеча установки детектор фиксирует интенсивность рассеянного света. Эта величина определяется суммированием значений интенсивности на всех элементах ПЗС-линейки. В результате исследователь получает набор данных, которые можно считать дискретными значениями индикатрисы рассеивания.

Широкая апертура собирающей линзы в приборе приводит к потере точности полученных данных, особенно на малых углах ($\theta_0 \leq 2^\circ$). Поскольку рассматриваемые образцы являются слабоссеивающими, то именно этот диа-

пазон более всего интересует исследователей. Существует два подхода повышения точности измерений для малых углов. Первый – экспериментальный, путем уменьшения размера апертуры и использования более чувствительного детектора. Но при таком подходе значительно увеличиваются затраты труда и времени, необходимые для получения одного набора данных. Второй подход – это применение математической обработки данных для восстановления истинного вида индикатрисы рассеивания.

В статье построена и проверена математическая модель измерительного тракта, которая может служить основой при решении указанной задачи.

Исследования проводились с использованием образцов *KDP* в форме пластинок $10 \times 10 \times 0,8$ мм³, вырезанных перпендикулярно к оптической оси (*Z*-срез) одноосной *KDP* матрицы. Набор образцов для исследований состоял из чистых пластинок кристалла *KDP*, кристаллов *KDP* с инкорпорированными наночастицами *TiO₂* в разных концентрациях в ростовом растворе.

Построение математической модели

При анализе результатов измерений возникает вопрос о соотношении между истинным угловым распределением интенсивности (перед линзой) и измеренной индикатрисой рассеивания.

Бесконечно малое значение зарегистрированной мощности излучения задается приближенно с помощью выражения:

$$\Delta u = \nu G \Delta S,$$

где ν – истинная интенсивность излучения, рассеянного образцом, G – функция прохождения излучения в точке падения пучка на линзу, ΔS – элемент площади апертуры линзы (рис. 2).

Если обозначить через L расстояние от образца до линзы, а через θ_0 – угол поворота плеча гониометра от начального направления пучка, когда центр пучка совпадает с центром линзы, то в качестве координаты центра линзы можно считать $x = L \sin \theta_0 \approx L \theta_0$ и с погрешно-

стью, не превышающей 0,1% ($L = 20$ см, $|x| \leq 0,7$ см), записать соотношение:

$$r^2 = \rho^2 + x^2 - 2\rho x \cos \alpha, \quad (1)$$

где r – полярный радиус произвольной точки апертуры линзы (с началом координат в центре линзы), ρ – полярный радиус этой точки относительно центра лазерного пучка, α – соответствующий полярный угол (рис. 2).

В таком случае измеренное детектором значение мощности излучения выражается формулой

$$u(x) = \iint_S v(x; s, t) \tilde{G}(x; s, t) ds dt, \quad x \in [-a, a], \quad (a \leq 0.7 \text{ см}), \quad (2)$$

где начало координат O совмещено с центром луча, x – координата центра линзы, s, t – координаты произвольной точки апертуры линзы: $s = \rho \cos \alpha$, $t = \rho \sin \alpha$.

Благодаря изотропности исследуемых образцов, распределение интенсивности аксиально-симметрично. Поэтому линии уровня интенсивности являют собой круги радиуса $\rho = L \sin \theta \approx L \theta$ (рис. 2), а соотношение (2) целесообразно записать в полярной системе координат

$$u(x) = \int_{\rho_1(x)}^{\rho_2(x)} \rho v(\rho) \int_{\alpha_1(x, \rho)}^{\alpha_2(x, \rho)} G(x; \rho, \alpha) d\rho d\alpha, \quad x \in [-a, a]. \quad (3)$$

При этом предполагается, что функция прохождения излучения $\tilde{G}(x; s, t)$ в точке падения лазерного пучка на линзу является характеристикой линзы и зависит только от расстояния до центра линзы r :

$$\tilde{G}(x; s, t) = \hat{G}(r) =$$

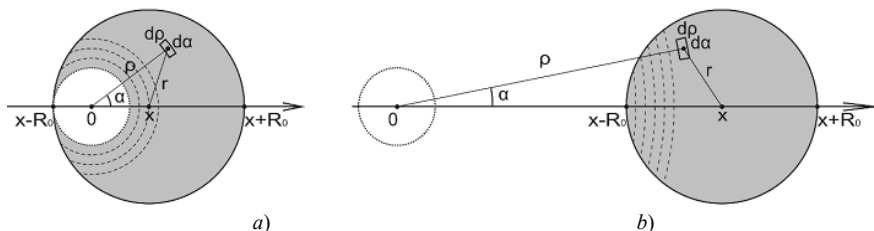


Рис. 2. Линии уровня интенсивности на линзе: а) центр пучка находится внутри линзы, б) центр – вне линзы

$$= \hat{G}((\rho^2 + x^2 - 2\rho x \cos \alpha)^{\frac{1}{2}}) = G(x; \rho, \alpha).$$

Функцию $\hat{G}(r)$ можно непосредственно измерить, если бесконечно тонким лазерным пучком просканировать линзу вдоль ее диаметра. Поскольку диаметр пучка ($\delta \approx 0,09$ см) значительно меньше размера линзы, то при определении функции $\hat{G}(r)$ использовались экспериментальные данные для свободно распространяющегося в воздухе лазерного пучка. Они могут быть аппроксимированы непрерывной функцией, форма которой близка к реальной функции прохождения, так как $\delta \ll d$. Результаты таких измерений и аппроксимации представлены на графике (рис. 3).

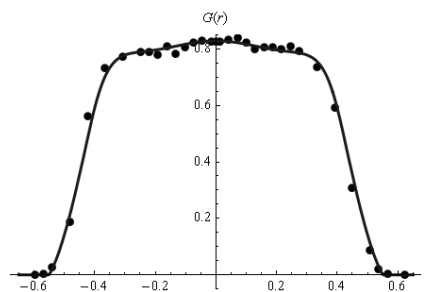


Рис. 3. Функция прохождения $\hat{G}(r)$ (точками обозначены экспериментальные данные)

Для аппроксимации экспериментальных значений использовался следующий набор функций: гауссова функция, парабола и функция «шапочка» [3]. Поэтому искомую функцию $\hat{G}(r)$ приближенно можно записать так:

$$\hat{G}(r) = \chi(R_1^2 - r^2) \left(A \exp((r/r_A)^2) - (r/r_B)^2 - C \exp\left(-\frac{(r/r_C)^2}{1 - (r/r_H)^2}\right) \chi(r_H^2 - r^2) \right), \quad (4)$$

где $R_1 = 0,55089$ см, $A = 2,223$, $C = 1,277$, $r_A = 0,5808$ см, $r_B = 0,2357$ см, $r_C = 0,3574$ см, $r_H = 0,4711$ см, $\chi(s)$ – функция Хевисайда:

$$\chi(s) = \begin{cases} 1, & s \geq 0, \\ 0, & s < 0. \end{cases}$$

При этом относительная среднеквадратическая погрешность аппроксимации состави-

ла 3,6%. Поскольку диаметр лазерного пучка ненулевой, то при вычислениях используется значение $R_1 = 0,5509$ см, $R_1 > R$.

Из симметричности на рис. 2 видно, что $\alpha_1(x, \rho) = -\alpha_2(x, \rho)$. Используя выражение (1), можно найти верхнюю границу интегрирования $\alpha_2(x, \rho)$ в соотношении (3):

$$\alpha_2(x, \rho) = \begin{cases} \arccos\left(\frac{\rho^2 + x^2 - R_1^2}{2\rho x}\right), & \rho + x > R_1, \\ \pi, & \rho + x \leq R_1. \end{cases}$$

Это позволит вычислить внутренний интеграл в (3). Поскольку функция $G(x, \rho, \alpha)$ симметрична, то его значение можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} K(x, \rho) &= \int_0^{\alpha_2(x, \rho)} G(x, \rho, \alpha) d\alpha = \\ &= \frac{1}{2} \int_{\alpha_1(x, \rho)}^{\alpha_2(x, \rho)} G(x, \rho, \alpha) d\alpha. \end{aligned} \quad (5)$$

Используя (5), представим интегральное соотношение (3) в таком виде

$$u(x) = 2 \int_{\rho_1(x)}^{\rho_2(x)} \rho v(\rho) K(x, \rho) d\rho, \quad x \in [-a, a]. \quad (6)$$

При определении границ интегрирования $\rho_1(x)$ и $\rho_2(x)$ следует рассмотреть два возможных варианта размещения линзы относительно центра лазерного пучка. В первом из них центр лазерного пучка находится внутри круга радиуса R_1 : $x \leq R_1$. Во втором – центр пучка находится вне границ круга, т.е. $x > R_1$. Рассмотрим эти случаи детальнее:

1. $x \leq R_1$ (рис. 2, а). При этом линии уровня интенсивности излучения внутри круга радиуса R_1 можно разбить на две группы:

- круги радиуса ρ : $0 < \rho < (R_1 - x)$. В этом случае $\alpha_2(x, \rho) = \pi$, а функцию $K(x, \rho)$ можно записать следующим образом:

$$K_0(x, \rho) = \int_0^{\pi} G(x, \rho, \alpha) d\alpha = \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} G(x, \rho, \alpha) d\alpha. \quad (7)$$

Для этой части линзы функция $u(x)$ имеет вид

$$u(x) = 2 \int_0^{R_1-x} \rho v(\rho) K_0(x, \rho) d\rho; \quad (8)$$

- дуги окружностей радиуса $(R_1 - x) < \rho < (R_1 + x)$. В этом случае $\alpha_2(x, \rho) < \pi$, а функция $K(x, \rho)$ имеет вид:

$$\begin{aligned} K_1(x, \rho) &= \int_0^{\arccos\left(\frac{\rho^2 + x^2 - R_1^2}{2\rho x}\right)} G(x, \rho, \alpha) d\alpha = \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\arccos\left(\frac{\rho^2 + x^2 - R_1^2}{2\rho x}\right)}^{\arccos\left(\frac{\rho^2 + x^2 - R_1^2}{2\rho x}\right)} G(x, \rho, \alpha) d\alpha. \end{aligned} \quad (9)$$

Отсюда

$$u(x) = 2 \int_{R_1-x}^{R_1+x} \rho v(\rho) K_1(x, \rho) d\rho. \quad (10)$$

2. $x > R_1$ (рис. 2, б; центр лазерного пучка находится вне круга радиуса R_1). В этом случае линии уровня интенсивности излучения внутри круга радиуса R_1 являются дугами окружностей с радиусом $(x - R_1) < \rho < (R_1 + x)$, а выражение (6) можно записать в виде

$$u(x) = 2 \int_{x-R_1}^{R_1+x} \rho v(\rho) K_1(x, \rho) d\rho. \quad (11)$$

После применения выражений (7)–(11) интегральное соотношение (6) примет вид

$$u(x) = 2 \int_0^{2R_1} \rho v(\rho) K(x, \rho) \chi(R_1^2 - (\rho - x)^2) d\rho, \quad (12)$$

где $K(x, \rho)$ – «сшитые» функции $K_0(x, \rho)$ и $K_1(x, \rho)$ (рис. 4).

Поскольку функция $K(x, \rho)$, в силу аппроксимации (4), обращается в ноль в области $((\rho, x) : \rho \geq R_1 + x, x \geq 0)$ и в области $((\rho, x) : \rho \leq x - R_1, x \geq 0)$, то из (12) следует:

$$u(x) = 2 \int_0^{2R_1} \rho v(\rho) K(x, \rho) d\rho, \quad x \in [-a, a]. \quad (13)$$

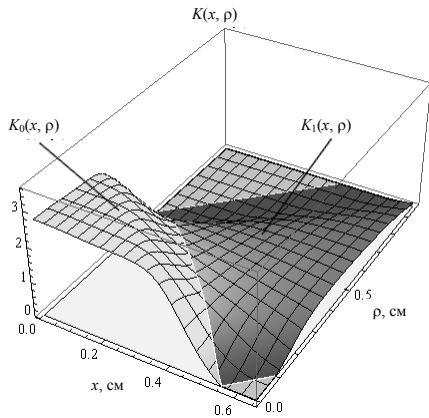


Рис. 4. Аппаратная функция $K(x, \rho)$

Выражение (13) можно интерпретировать двояко. В самом простом случае, когда известно распределение интенсивности $v(\rho)$, соотношение (13) представляет собой интегральную формулу, с помощью которой довольно просто определяется величина мощности излучения, регистрируемая лазерной установкой с конкретными параметрами измерительного тракта. Таким образом, решается прямая задача и при ее решении не возникает вычислительных трудностей. Другая ситуация складывается, когда по известной функции $u(x)$ мощности излучения, которая получена экспериментально, необходимо восстановить распределение интенсивности $v(\rho)$ в лазерном пучке. Тогда выражение (11) представляет собой интегральное уравнение Фредгольма первого рода, и его решение – это решение некорректно поставленной задачи, в котором требуется применение специальных методов регуляризации [4, 5].

Проверка модели

На этапе проверки достоверности математической модели измерительного тракта лазерной установки для оптической диагностики слаборассеивающих образцов целесообразно иметь в наличии как данные об истинном распределении интенсивности $v(\rho)$ в рассеянном лазерном пучке, так и экспериментальные значения интенсивности излучения $u(x)$. С этой целью проведена серия экспериментов, в ходе которой получены индикатрисы рассеивания:

- лазерного пучка, распространяющегося в воздухе (без образца);

- пучка, прошедшего сквозь пластинку кристалла *KDP* без примесей;
- пучка, прошедшего сквозь пластинку кристалла *KDP* с примесями TiO_2 .

Для получения точных данных распределения интенсивности $v(\rho)$ в качестве измерительного тракта использовалось оптоволокно с малой апертурой (диаметр $d = 410$ мкм). Пример результатов таких измерений представлен на рис. 5.

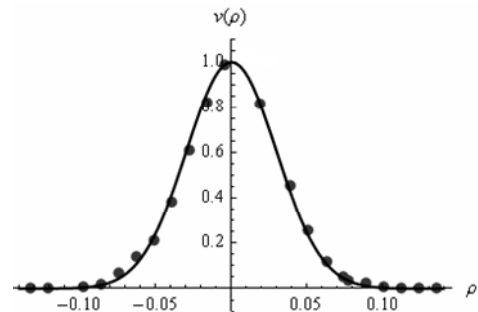


Рис. 5. Распределение интенсивности излучения, измеренной с помощью оптоволоконного спектрофотометра

Во всех сериях измерений лазерные пучки имели гауссово распределение интенсивности вида

$$v(\rho) = a_k \exp\left(-(\rho / \rho_k)^2\right); \quad k = 1, 2, 3; \quad (14)$$

$$\rho_1 = 0,0447 \text{ ci}; \quad \rho_2 = 0,0431 \text{ ci}; \quad \rho_3 = 0,0421 \text{ ci}.$$

На рис. 6 непрерывной линией показан график функции $u(x)$, полученной с использованием формулы (13) и функции (14) при $k = 3$. Точкам на графике соответствуют экспериментальные значения мощности излучения, прошедшего сквозь линзу. Погрешность аппроксимации результатов не превышает 5%.

На рис. 7 представлены кривые зависимости мощности лазерного излучения от наличия образцов двух типов. Верхняя кривая соответствует мощности излучения без образца, средняя – с образцом в виде чистого кристалла *KDP*, нижняя – мощности излучения после прохождения пластинки кристалла *KDP* с примесями TiO_2 .

На основе представленных данных можно сделать вывод о достоверности математической модели (13) измерительного тракта лазерной установки для оптической диагностики

слаборассеивающих образцов на базе гониометра Г-5, с использованием детектора в виде ПЗС-линейки и собирающей линзы.

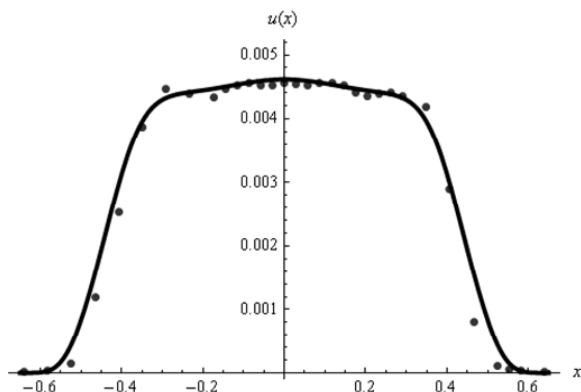


Рис. 6. Распределение мощности излучения при исследовании кристалла *KDP* с примесями TiO_2 (точки – экспериментальные данные, полученные с использованием детектора и линзы)

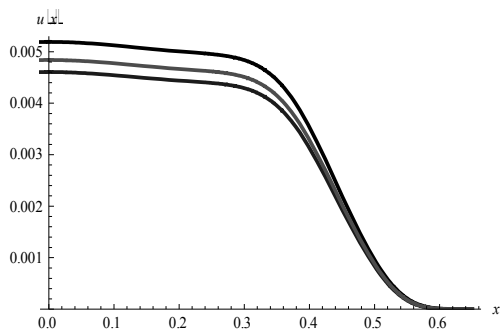


Рис. 7. Кривые распределения мощности лазерного излучения для разных образцов

Заключение. Итак, получена математическая модель измерительного тракта лазерной установки для интерпретации результатов экспериментальных исследований оптических свойств новых нелинейно-оптических материалов в виде интегрального уравнения Фредгольма первого рода.

Ядро интегрального уравнения $K(x, \rho)$ определено с помощью функции прохождения экспериментальной установки $G(r)$. Аналитическое выражение функции $G(r)$ получено пу-

тем аппроксимации экспериментальных значений. При этом относительная среднеквадратическая погрешность аппроксимации составила 3.6%.

Достоверность математической модели проверялась на экспериментальной установке с высокой разрешающей способностью. Сопоставление результатов нескольких серий измерений с результатами вычислительных экспериментов подтвердило адекватность модели. Погрешность приближения не превышала 5%.

Данная работа была выполнена при частичной финансовой поддержке гранта Украинского научно-технологического центра НАН Украины № 4956.

1. *Новые* нелинейно-оптические и сцинтилляционные среды на основе кристаллов семейства *KDP*. Кристаллические материалы для фотоники / И.М. Притула, А.П. Воронов, В.Я. Гайворонский и др. // Харьков: НТК «Институт монокристаллов», 2008. – С. 181–252.
2. *Характеризація* оптичної якості кристалів *KDP* з інкорпорованими наночастинками TiO_2 та моделювання лазерного експерименту з розсіяння / В.Я. Гайворонський, В.М. Старков, М.А. Копиловський та ін. // Укр. фіз. ж. – 2010. – **55**, № 8. – С. 875–884.
3. *Старков В.Н., Боярчук А.Ю.* Ядра интегральных уравнений первого рода в оптических экспериментальных исследованиях // Матеріали конф. «Питання оптимізації обчислень (ПОО–XXXV)». – К.: ІК ім. В.М. Глушкова, 2010. – С. 339–344.
4. *Старков В.Н.* Конструктивные методы вычислительной физики в задачах интерпретации. – К.: Наук. думка, 2002. – 264 с.
5. *Тихонов А.Н., Арсенин В.Я.* Методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1979. – 286 с.

Поступила 05.11.2010

Тел. для справок: (050) 415-1448, (093) 881-3814 (Киев)
E-mail: vjachnikstar@svitonline.com, swan4004@gmail.com

© В.Н. Старков, В.Я. Гайворонский, М.С. Бродин,
А.Ю. Боярчук, М.А. Копыловский, Е.А. Вишняков,
И.М. Притула, 2011