

УДК 535.131:535.137 + 535.42

**В.В. Савуков, И.В. Голубенко**

Моделирование рассеяния диффузного фотонного газа  
на дифракционной решётке методом Монте-Карло

УДК 535.131:535.137 + 535.42

Моделирование рассеяния диффузного фотонного газа на дифракционной решётке методом Монте-Карло / Савуков В.В., Голубенко И.В.;

БГТУ «Военмех» им. Д. Ф. Устинова – СПб, 2011. – 12 с.: ил. – Библиогр.: 16 назв. – Рус. –

Редакция от 16.08.2011 была депонирована в ВИНТИ РАН: 24.08.2011, № 0392 - В2011<sup>1</sup>

## РЕФЕРАТ

При рассмотрении некоторых специальных вопросов статистической физики возникла необходимость в высокоточном решении задачи дифракции. В настоящей статье сообщается о создании компьютерной программы, служащей инструментальным средством для расчёта параметров дифракционных явлений при теоретическом исследовании сложных оптических систем. В программе реализован строгий метод решения задачи дифракции на основе уравнений Максвелла при заданных граничных условиях. Допускается произвольная, например, диффузная конфигурация исходного светового поля. В качестве дифракционных оптических элементов рассматриваются отражательные решётки с линейным или скрещенным синусоидальным профилем микрорельефа поверхности. При наличии в системе нескольких дифракционных элементов возможен расчёт характеристик самосогласованного итогового светового поля.

**Ключевые слова:** дифракция, поляризация, индикатриса, рассеяние, диффузный.

---

## Simulation of scattering of diffuse photons gas on a diffraction grating by Monte-Carlo method

Vladimir V. Savukov, Igor V. Golubenko

## ABSTRACT

Considering some special questions of statistical physics requires accurate numerical solution of a diffraction problem. A computer algorithm which can be used as an effective instrument for calculations of the diffraction parameters in theoretical investigation of complex optical systems was elaborated. The algorithm is based on Chandezon C-method in application to bare metallic relief crossed gratings. Calculations for arbitrary diffusive incident field on crossed gratings of sinusoidal profile were carried out. When there are several diffraction elements it is possible to use the algorithm for calculation of the characteristics of a resulting stationary radiation field.

**Key words:** diffraction, polarization, indicatrix, scattering, diffuse.

OCIS: 050.1940, 260.1960, 260.5430, 290.2648, 290.5855

PACS: 02.70.Uu ; 03.65.Sq ; 05.10.Ln ; 42.25.Fx ; 42.25.Ja



---

<sup>1</sup> URL: [https://savukov.ru/viniti\\_0392\\_b2011\\_full\\_rus.pdf](https://savukov.ru/viniti_0392_b2011_full_rus.pdf)

## СОДЕРЖАНИЕ

<b>Введение</b> .....	<b>4</b>
Постановка задачи .....	4
Общая методология расчётов .....	5
Расчёт единичного (элементарного) акта дифракции .....	5
Структура программного комплекса .....	7
Верификация программы .....	7
Примеры результатов работы .....	9
<b>Выводы</b> .....	<b>11</b>
<b>Список использованной литературы</b> .....	<b>12</b>



## Введение

В ряде практически значимых случаев возникает необходимость решения задачи дифракции, представленной в весьма общей форме:

- Исходное световое поле, взаимодействующее с неким дифракционным оптическим элементом (ДОЭ), может иметь любые физически допустимые параметры. В частности такое первичное (до дифракции) излучение может характеризоваться конкретным спектральным составом, а также заданным угловым распределением энергетической яркости и степени поляризации в геометрическом пространстве.
- Помещённый в исходное световое поле ДОЭ представляет собой выполненную из назначенного материала отражательную дифракционную решётку с заданной макроскопической формой и параметрами микрорельефа поверхности. В частном случае указанная поверхность может быть зеркально гладкой. Если в рассматриваемом пространстве находится более одного ДОЭ, то возникает необходимость в расчёте самосогласованного стационарного состояния результирующего светового поля.

Подобные нетривиальные задачи очень редко имеют точный аналитический вариант своего математического описания. Чаще всего бывает, что даже если некий аналитический вариант существует, то он, как правило, получен с применением достаточно произвольных приближений, последующее влияние которых на адекватность создаваемой модели невозможно объективно оценить.

Для решения указанных задач в наибольшей степени подходят методы имитационного моделирования, в частности, метод статистических испытаний, известный как "метод Монте-Карло". При этом результат решения весьма сложной исходной задачи сводится к статистическому обобщению результатов решения множества неких более простых (элементарных) задач, каждая из которых разрешима уже непосредственно [1].

## Постановка задачи

При рассмотрении некоторых специальных вопросов, связанных с исследованием аксиоматических принципов статистической физики [2 - 4], возникла необходимость в высокоточном осуществлении строгого метода решения задачи дифракции, основанного на решении уравнений Максвелла при заданных граничных условиях, который отвечал бы нижеследующим требованиям:

1. Метод должен быть применим к задаче взаимодействия произвольного светового поля (в частности, чёрного излучения) с заданной дифракционной решёткой.
2. Элементарный физический объект, дифракция которого подлежит дальнейшему анализу, представляет собой монохромную электромагнитную волну с плоским фронтом распространения. Данный волновой объект может служить квазиклассической моделью так называемого «свободного» фотона, находящегося в зоне, удалённой от источника излучения. В каждом отдельном случае такой единичный фотон характеризуется следующими параметрами:
  - длина волны и, как следствие, величина планковской энергии;
  - угол падения фотона на поверхность дифракционной решётки (т. е. угол между волновым вектором фотона и нормалью к макроскопической поверхности);
  - азимутальный (конический) угол поворота плоскости падения фотона;

- фаза поляризации (сдвиг фазы между электрическими векторами разных поляризаций);
  - соотношение между сторонами прямоугольника, описанного вокруг эллипса поляризации.
3. Дифракционная решётка должна представлять собой отражательную решётку фазового типа с одномерным (линейным) или двумерным (скрещенным) синусоидальным микрорельефом поверхности. Её численные параметры таковы:
- величина периода (шага) решётки, – отдельно для каждого измерения;
  - полная глубина микрорельефа решётки, – отдельно для каждого измерения;
  - комплексная диэлектрическая проницаемость реального (т. е. с конечной проводимостью) материала решётки, функционально зависящая от длины волны излучения. Случай идеальной проводимости должен быть описан отдельно.
4. Корректный расчёт рассеяния каждого единичного фотона на дифракционной решётке должен быть возможен для максимально общего случая сочетаний параметров фотона и решётки. Это, в первую очередь, относится к анализу явлений в зонах аномалий Рэля-Вуда, особенно для субволновых решёток.
5. Результаты расчёта дифракции единичного волнового объекта (фотона) должны включать в себя:
- вероятность поглощения данного фотона решёткой;
  - число порядков (когерентных каналов) рассеяния фотона;
  - для каждого выявленного порядка вычисляются значение эффективности, угловые характеристики отражения от решётки, а также параметры поляризации излучения в данном конкретном канале рассеяния.

### **Общая методология расчётов**

Требуемая структура исходного светового поля (см. выше пункт 1) генерируется с помощью вероятностно обоснованных выборок начальных параметров для каждого отдельного волнового объекта (см. пункт 2). Результаты решений (см. пункт 4-5), получаемые для всех элементарных актов дифракционного рассеяния фотонов на решётке (см. пункт 3), запоминаются программой. Итоговые параметры излучения находятся в численной форме как статистические моменты распределений, получаемых вследствие обобщения информации расчётов для всех единичных элементарных актов рассеяния. Для большей наглядности итоговая информация выводится также и в форме графических изображений, например, в виде угловых диаграмм яркости рассеянного излучения.

### **Расчёт единичного (элементарного) акта дифракции**

Решение поставленной задачи потребовало рассмотрения дифракции на поверхности, которая обладает периодичностью в направлении двух осей декартовой системы координат. Такая поверхность, получившая название трехмерно модулированного профиля или скрещенных дифракционных решёток, образуется при наложении двух двумерно модулированных профилей или обычных дифракционных решёток, каждая из которых периодична вдоль одного из двух взаимно перпендикулярных направлений.

Предполагается проведение численного анализа свойств таких решёток в широком диапазоне изменения отношения длины волны к периоду, включающем резонанс-

ную область, в которой это отношение приближается к единице. В резонансной области на характер дифракции в существенной степени оказывает влияние поляризация падающего света. Поэтому для проведения численного анализа может быть пригоден строгий метод расчета, основанный на решении волновых уравнений или же на решении уравнений Максвелла, позволяющий учесть характер поляризации.

Традиционно, строгие теории, на основе которых можно построить вычислительные алгоритмы для расчета дифракционных процессов, делятся на две основные категории: интегральные и дифференциальные. Интегральные методы предполагают численное решение интегральных уравнений или систем связанных интегральных уравнений, а дифференциальные методы приводят к решению бесконечных систем связанных дифференциальных уравнений. Как показала практика применения указанных теорий, при решении систем дифференциальных уравнений возникают ситуации неустойчивости, в которых только применение интегральных методов позволяет получить правильные результаты [5]. С другой стороны, возможности применения существующих в настоящее время интегральных методов сильно лимитированы ввиду сложности выполнения граничных условий при произвольном направлении падающих волн. Поэтому выбор метода для проведения данного исследования оказался не простой проблемой.

В настоящее время решению задачи дифракции на поверхности, обладающей двойной периодичностью, уделяется большое внимание и посвящено много публикаций. Есть много различных подходов к решению этой задачи. Существующие строгие методы включают метод конечных разностей, метод вариации границ, анализ на основе связанных волн а также различные методы использования криволинейных координат, из которых наиболее надежным и эффективным признан  $S$ -метод Шандезона [6 - 8]. Главной особенностью  $S$ -метода является использование такого преобразования системы координат, которое превращает поверхность решётки в одну из координатных поверхностей. Данное преобразование называют трансляционной системой координат.

С помощью тензорной формы записи уравнений Максвелла в трансляционной системе координат, которая подробно рассматривается в [9], можно получить линейную систему дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами. Последнее обстоятельство оказывается очень важным, поскольку позволяет находить решение задачи дифракции путем вычисления собственных значений и собственных векторов матрицы этой системы. Данный метод имеет в значительной мере более широкую область применения по сравнению с другими дифференциальными методами и лишен присущих им недостатков. Преобразование рельефной поверхности решётки к формально плоскому виду значительно упрощает запись граничных условий. Метод также позволяет производить расчеты одновременно для случаев  $TM$  и  $TE$  поляризации.

Для проведения расчетов на основе  $S$ -метода был разработан выполненный на Фортране численный алгоритм, позволяющий проводить достоверные вычисления для различных диапазонов длин волн, параметров профиля и разных видов материала решётки, включая вариант и с неограниченной проводимостью. Прототипом для данного алгоритма послужили работы [10, 11] по развитию  $S$ -метода применительно к скрещенным дифракционным решёткам и к решёткам со слоями диэлектрических покрытий.

Кроме дифракционной эффективности, которая является одной из важнейших характеристик решётки, с помощью разработанного алгоритма можно вычислить комплексные амплитуды и фазы для  $TM$  и  $TE$  поляризованных дифракционных волн, что, в

конечном счете, позволяет определить параметры эллиптической поляризации каждой волны, т.е. определить форму и наклон осей эллипса.

Помимо решения задачи для трехмерно модулированной металлической поверхности, алгоритм позволяет выполнять расчёт рассеянного светового поля в режиме конической дифракции для обычной (линейной) решётки с конечной проводимостью. Кроме того, при незначительной модификации алгоритм может быть использован для прозрачных диэлектрических решёток, а также решёток с диэлектрическим покрытием.

### Структура программного комплекса

Созданный программный комплекс состоит из следующих основных компонентов:

- Базовая часть программы, написанная на языке интерпретатора математической системы **Maple™** версии 15.01 (производство фирмы **Waterloo Maple Inc.**). Эта часть, имеющая форму интерактивного "рабочего листа" (Worksheet), содержит полную информацию о поставленной задаче: параметры исходного светового поля, все характеристики дифракционных оптических элементов, помещённых в это поле, и т. д. Кроме того данный рабочий лист имеет исчерпывающее описание того, какую расчётную информацию требуется накапливать, как эта информация должна обрабатываться, и в какой визуальной форме следует предоставлять результаты обработки пользователю.
- Программные модули в форме dll-библиотек, вызываемые по мере необходимости из базовой части комплекса. Эти модули, исходные тексты которых написаны на языке **Fortran 95**, содержат алгоритмы расчётов единичных актов дифракции. Они составлены для разных вариантов размерности микрорельефа и проводимости отражающей поверхности ДОО. Исполняемый код модулей формируется компилятором **Compaq Visual Fortran™** версии 6.6 и включает вызовы подпрограмм библиотеки **IMSL® Fortran Numerical Library** версии 4.01.
- Текстовые файлы с таблицами специальных многомерных последовательностей Соболя [12, 13], предназначенные для реализации метода Монте-Карло с особо высоким разрешением. Обращение к этим файлам производится из базовой части комплекса при формировании сетки значений входных параметров задачи. Файлы таблиц имеют неизменный вид для различных вариантов решаемых задач. Поэтому данные файлы были однократно сгенерированы с помощью соответствующей программы на языке **Pascal**, выполненной в среде системы **Borland Delphi™** версии 6.0 фирмы **Borland Software Corporation™**.

Таким образом, ввод всех исходных данных и вывод получаемых результатов осуществляется через интерактивный рабочий лист (система **Maple™**) базовой части созданного программного комплекса, функционирующего на платформе **Win32®**.

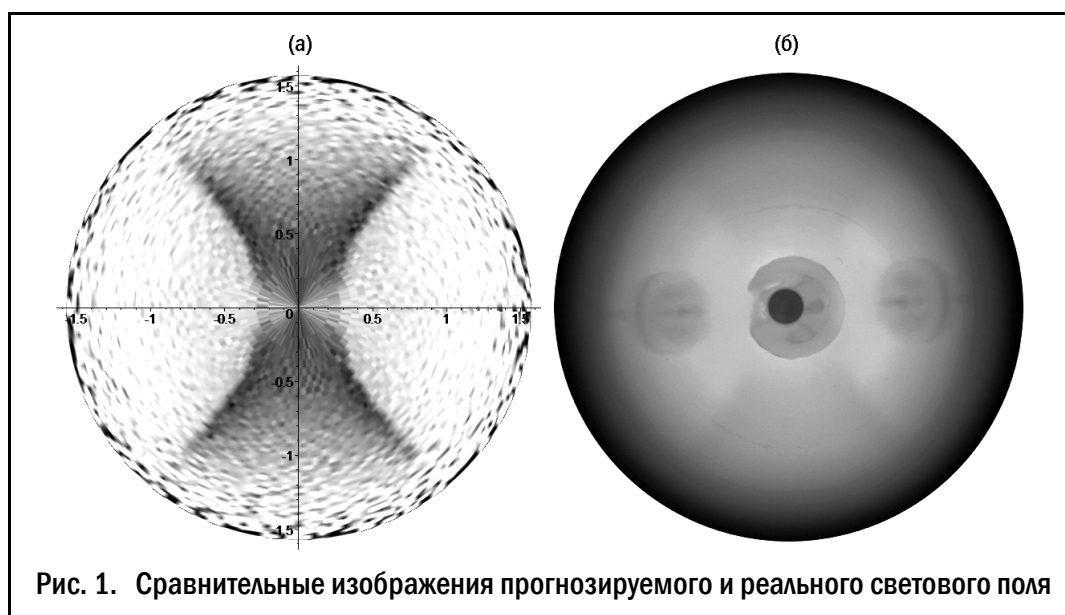
### Верификация программы

В качестве основного критерия, позволяющего контролировать правильную работу программного алгоритма, было выбрано условие соблюдения энергетического баланса. Для этого сравнивалась величина энергии, приходящей к решётке вместе с падающей волной, с величиной энергии, которая уносилась распространяющимися дифракционными волнами или поглощалась в материале решётки. При корректной работе программы энергетический баланс должен всегда выполняться с высокой точностью.

Известно, однако, что выполнение энергетического баланса не может служить единственным доказательством правильности решения задачи дифракции. Поэтому была проведена доскональная проверка разработанного алгоритма, которая заключалась в сравнении результатов расчётов с аналогичной информацией, получаемой интегральными методами как для идеально проводящих решёток, так и для решёток с конечной проводимостью [5]. При этом в числе прочих рассматривались и такие особые режимы, как, например, случай полного поглощения излучения поверхностью решётки [14]. Было также выполнено сравнительное тестирование данных, получаемых для скрещенных решёток, с уже известными результатами, представленными в [10].

Для большей уверенности в корректности созданной программы была выполнена прямая экспериментальная проверка результатов её работы в одном из самых сложных режимов: тестировался расчёт дифракционного рассеяния монохромного диффузного излучения (длина волны  $\lambda = 470$  нм) на линейной субволновой фазовой решётке из алюминия (шаг  $d = 372$  нм, полная глубина синусоидального профиля микрорельефа  $h = 118$  нм), при наличии зон интенсивного проявления аномалий Рэля-Вуда [15, 16].

На рис. 1а приведено графическое изображение компьютерной модели пространственной индикатрисы суммарной энергетической яркости рассеянного светового поля. Индикатриса построена в полярной системе координат таким образом, что её центр соответствует нулевому значению угла отражения при обзоре поверхности дифракционной решётки. Величина угла отражения пропорциональна полярному радиусу, и на периферии круговой диаграммы значение этого угла приближается к  $90^\circ$ . Азимутальный угол наблюдения поверхности решётки определяется полярным углом диаграммы.



На рис. 1б дана фотография индикатрисы рассеянного светового поля в реальной физической установке<sup>1</sup>, прогноз работы которой был представлен на рис. 1а. Очевидное совпадение общего вида обеих индикатрис говорит об успешном характере проведённой экспериментальной проверки.

<sup>1</sup> В центре, справа и слева на фотографии — видны три отображения служебного технологического элемента, которые не имеют отношения к собственно индикатрисе.

### Примеры результатов работы

Как уже говорилось ранее, результаты работы описываемого программного комплекса, характеризующие итоговые параметры рассеянного излучения, могут быть представлены в численной форме и в форме графических изображений. Поскольку графический вариант обладает большей наглядностью, то здесь для примера приведены некоторые угловые диаграммы энергетической яркости излучения, отражаемого от металлических поверхностей с разными свойствами.

На рис. 2 и 3 представлены графические изображения индикатрис различных компонент энергетической яркости рассеянного светового поля для некоторых видов отражающих поверхностей. Во всех случаях исходное световое поле представляет собой монохромное диффузное излучение с длиной волны  $\lambda = 555$  нм и общим числом фотонов в каждом статистическом испытании  $2^{18} = 262144$ . Характер построения этих индикатрис аналогичен тому, который был ранее описан для графика на рис. 1а.

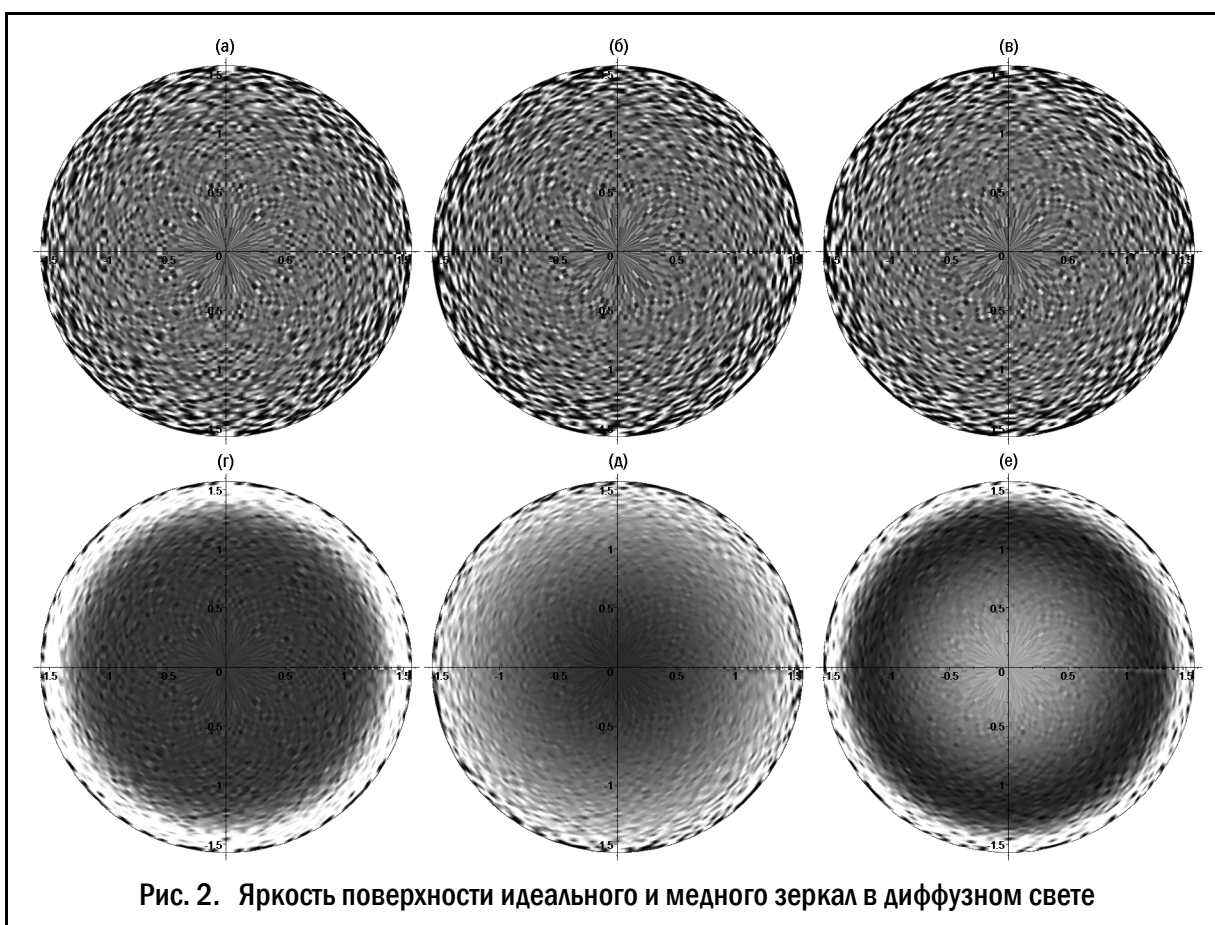


Рис. 2. Яркость поверхности идеального и медного зеркала в диффузном свете

Индикатрисы 2а, 2б и 2в описывают угловое распределение яркости диффузного светового поля, отражаемого от идеально проводящего металлического зеркала:

- 2а – график суммарной яркости S- и P-поляризованных отражённых компонент;
- 2б – график яркости S-поляризованной составляющей отражённого излучения;
- 2в – график яркости P-поляризованной составляющей отражённого излучения.

Каждый отдельный график автоматически масштабируется так, чтобы максимальным образом выявлять все имеющиеся контрасты плотности рассеянного светово-

го потока. Очевидно, что на изображениях индикатрис 2а, 2б и 2в присутствуют лишь бессистемные проявления флуктуаций рассеянного поля, не образующие каких-либо визуально наблюдаемых макроскопических градиентов. Иначе говоря, при отражении диффузного излучения от идеально проводящего зеркала для всех рассеиваемых компонент выполняется закон Ламберта, что вполне ожидаемо.

Индикатрисы 2г, 2д и 2е описывают угловое распределение яркости диффузного светового поля, отражаемого от медного идеально ровного металлического зеркала:

- 2г – график суммарной яркости S- и P-поляризованных отражённых компонент;
- 2д – график яркости S-поляризованной составляющей отражённого излучения;
- 2е – график яркости P-поляризованной составляющей отражённого излучения.

В отличие от графиков 2а, 2б и 2в, на изображениях индикатрис 2г, 2д и 2е присутствуют макроскопические градиенты, масштаб которых для большей наглядности автоматически увеличивается до максимально возможной величины (их реальный масштаб вычисляется через надлежащие статистические моменты). При этом флуктуационные явления становятся менее заметны на фоне наблюдаемых макроэффектов.

Индикатрисы 3а, 3б и 3в описывают угловое распределение яркости диффузного светового поля, дифракционно рассеиваемого на линейной фазовой решётке из меди (шаг  $d = 544$  нм, полная глубина синусоидального профиля микрорельефа  $h = 337$  нм):

- 3а – график суммарной яркости S- и P-поляризованных отражённых компонент;
- 3б – график яркости S-поляризованной составляющей отражённого излучения;
- 3в – график яркости P-поляризованной составляющей отражённого излучения.

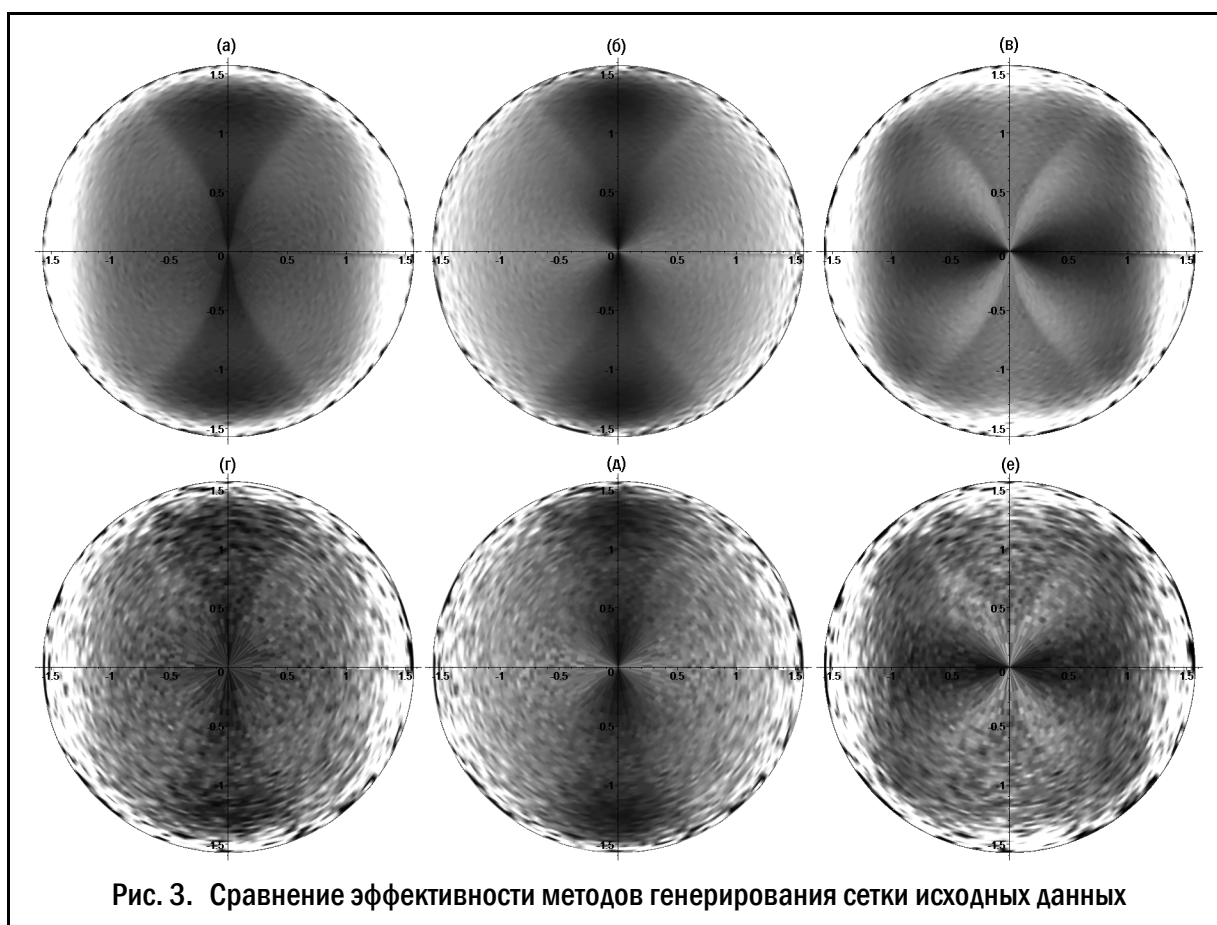


Рис. 3. Сравнение эффективности методов генерирования сетки исходных данных

Индикатрисы 3г, 3д и 3е описывают те же самые угловые распределения яркости, что и представленные на рис. 3а, 3б и 3в. Отличие состоит лишь в том, что в случае 3а, 3б и 3в для формирования значений сетки исходных данных статистических испытаний использовался высокоэффективный метод последовательностей Соболя, а варианты 3г, 3д и 3е были получены с использованием для указанных целей стандартного генератора псевдослучайных чисел, входящего в состав математической системы Maple™.

Здесь не приводятся результаты расчётов, полученные для сетки с равномерным шагом разбиения области допустимых значений входных параметров, поскольку данный тип разбиения является, как известно, наихудшим для многомерных областей.

## Выводы

Широкие функциональные возможности созданного программного комплекса, а также принципиально высокая достоверность получаемых с его помощью результатов, позволяют эффективно использовать данный инструмент в теоретических исследованиях, характерных для физической оптики. Более того, во многих случаях, связанных и с экспериментальным изучением нетривиальных оптических систем, становится возможной замена прямого физического эксперимента на имитационный, осуществляемый на компьютере. Чаще всего, такая замена оправдана с экономической точки зрения. Кроме того, она даёт выигрыш во времени проведения работ.

Авторы выражают глубокую благодарность доктору Даниэлю Мэстру (Франция) за конструктивные замечания, способствовавшие выполнению данного проекта.



### Список использованной литературы

1. **Соболь И. М.** Численные методы Монте–Карло. М.: Наука, 1973. – 311 с.
2. **Савуков В. В.** Нарушение изотропности диффузного излучения вследствие его дифракции на многомерных регулярных структурах // Оптический журнал, 2010, том 77, № 1, с. 95-100.
3. **Савуков В. В.** Уточнение аксиоматических принципов статистической физики // Деп. ВИНТИ № 1249-B2004, – 177 с.  
URL: [https://savukov.ru/viniti\\_1249\\_b2004\\_full\\_rus.pdf](https://savukov.ru/viniti_1249_b2004_full_rus.pdf)
4. **Савуков В. В.** Нарушение закона Ламберта при дифракции диффузного фотонного газа на многомерных регулярных структурах // Деп. ВИНТИ № 507-B2009, – 49 с.  
URL: [https://savukov.ru/viniti\\_0507\\_b2009\\_full\\_rus.pdf](https://savukov.ru/viniti_0507_b2009_full_rus.pdf)
5. **Petit R.**, ed. Electromagnetic Theory of Gratings. Berlin; New York: Springer-Verlag, 1980, 284 p.
6. **Chandezon J., Cornet G., Raoult G.** Propagation des ondes dans les guides cylindriques à génératrices sinusoïdales // C. R. Acad. Sci. (Paris), 1973, No. 276B, P. 507-509.
7. **Chandezon J., Maystre D., Raoult G.** A new theoretical method for diffraction gratings and its numerical application // J. Optics (Paris), 1980, Vol. 11, No. 4, P. 235-241.
8. **Chandezon J., Dupuis M.T., Cornet G., and Maystre D.** Multicoated gratings: a differential formalism applicable in the entire optical region // J. Opt. Soc. Am., 1982, Vol. 72, No. 7, P. 839-847.
9. **Post E. J.** Formal Structure of Electromagnetics: General Covariance and Electromagnetics. Amsterdam: North-Holland Pub. Co.; New York: Interscience Publishers, 1962, in series: Series in physics, 224 p.
10. **Granet G.** Diffraction par des surfaces biperiodiques: resolution en coordonnees non orthogonales // Pure Appl. Opt., 1995, Vol. 4, P. 777-793.
11. **Granet G.** Analysis of diffraction by surface-relief crossed gratings with use of the Chandezon method: application to multilayer crossed gratings // J. Opt. Soc. Am., 1998, Vol. 15, No. 5, P. 1121-1131.
12. **Соболь И. М.** Многомерные квадратурные формулы и функции Хаара. М.: Наука, 1969. – 288 с.
13. **Соболь И. М., Статников П. Б.** Выбор оптимальных параметров в задачах со многими критериями. М.: Наука, 1981. – 110 с.
14. **D. Maystre, R. Petit.** Brewster incidence for metallic gratings // Optics Communications, 1976, Vol. 17, No. 2, P. 196-200.
15. **Wood R.W.** On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum // Philosophical Magazine, 1902, Vol. 4, P. 396-402.
16. **Lord Rayleigh.** On the Dynamical Theory of Gratings // Proceedings of the Royal Society of London, 1907, Series A 79, P. 399-416.