

На правах рукописи



Галёв Роман Владимирович

**ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПОГЛОЩЕНИЯ  
И ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ТВЕРДЫХ  
И ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛОШНЫХ СРЕДАХ**

1.1.9 – механика жидкости, газа и плазмы

**АВТОРЕФЕРАТ**  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Новосибирск – 2023

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук (Новосибирск).

**Научный руководитель:** доктор физико-математических наук  
Кудрявцев Алексей Николаевич

**Официальные оппоненты:** Жуков Владимир Петрович,  
доктор физико-математических наук,  
ФИЦ ИВТ, старший научный сотрудник

Тищенко Владимир Николаевич,  
доктор физико-математических наук,  
ИЛФ СО РАН, главный научный сотрудник

**Ведущая организация:** Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук — обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, г. Красноярск

Защита состоится 21 апреля 2023 г. в 9:00 часов на заседании диссертационного совета Д 003.035.02 в Институте теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН по адресу: 630090, г. Новосибирск, ул. Институтская, 4/1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН по адресу: ул. Институтская, 4/1, г. Новосибирск, 630090, [http://itam.nsc.ru/education/dissertation\\_board.html](http://itam.nsc.ru/education/dissertation_board.html).

Отзыв на автореферат в двух экземплярах, заверенный печатью учреждения, просьба направлять на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Автореферат разослан «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2023 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета,  
д.ф.-м.н.



С. А. Гапонов

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы.** Создание лазера стало одним из наиболее важных изобретений XX века. Появление источников когерентного оптического излучения привело к подлинной революции в оптике, сравнимой по своим последствиям только с разработкой волновой теории света. Уникальные свойства лазерного излучения не только нашли широкое применение в самых различных областях науки и техники, но и позволили создать многие устройства, постоянно используемые нами в повседневной жизни.

В очень широком круге научных, технических и промышленных приложений приходится иметь дело со взаимодействием лазерного излучения с веществом. В частности, лазеры широко применяются для обработки материалов (сверление, резка, спекание и пр.). Возможность надежного численного моделирования процессов взаимодействия и поглощения лазерного излучения в сплошных средах могла бы привести к лучшему пониманию физических закономерностей, а также позволить существенно повысить качество обработки материалов.

Одной из наиболее интересных и актуальных задач современной лазерной техники и фотоники является преобразование лазерного излучения и управление свойствами световых пучков. Один из перспективных способов динамического управления параметрами лазерного излучения состоит в пропускании луча через среды, оптические свойства которых могут претерпевать значительные изменения даже при слабых энергетических воздействиях. Такие среды обычно называют «мягкой материей» (soft matter). Типичными представителями мягкой материи являются жидкие кристаллы (ЖК) — текучие среды, обладающие свойствами как жидкостей, так и кристаллических твердых тел. Оптические характеристики ЖК могут быть легко изменены приложением к ним внешних электромагнитных полей, это уникальное свойство обусловило их широчайшее применение в качестве средств отображения информации, таких как жидкокристаллические дисплеи. В последние годы все большее внимание исследователей привлекает возможность использования ЖК как управляющих элементов в оптоволоконных системах — оптических линиях связи, оптоволоконных лазерах и пр. ЖК могут быть также использованы для формирования оптических пучков с заданными свойствами, в частности «закрученного света» (оптических вихрей).

В перечисленных отраслях деятельности, в связи с необходимостью определения особенностей сочетания физических процессов, влияющих на конечный материальный результат, существенную роль играет численное моделирование. В связи с этим актуальными являются вопросы, связанные с выбором численных методов и границ их применимости, с методикой расчетов и применяемыми в расчетах формулами, с выбором технических параметров и разработкой кодов.

## **Цели и задачи диссертационной работы**

Целями работы являются

- Создание программного комплекса для численного моделирования взаимодействия электромагнитного излучения со сложными пространственно неоднородными и анизотропными средами.
- Численное моделирование процессов поглощения и преобразования лазерного излучения, исследование возможности управления данными процессами.

Задачи:

- Разработка вычислительных программ, позволяющих проводить, с высоким пространственным разрешением, расчеты взаимодействия излучения с твердыми и жидкокристаллическими сплошными средами путем прямого решения уравнений Максвелла и на основе методов геометрической оптики.
- Исследование пространственного распределения поглощаемого излучения при лазерной обработке материалов для улучшения качества технологических процессов.
- Получение данных о преобразовании лазерного излучения в оптоволокне при взаимодействии с объемом, заполненным жидкокристаллической средой, играющей роль элемента управления.
- Исследование возможности генерации «закрученного света» (оптических вихрей) с использованием жидких кристаллов.
- Исследование взаимного влияния анизотропной среды и пучка лазерного излучения.

## **Положения, выносимые на защиту**

- Алгоритмы и расчетные программы для моделирования взаимодействия электромагнитного излучения с твердыми и жидкокристаллическими сплошными средами, реализующие метод FDTD (Finite Difference Time Domain) для решения уравнений Максвелла, метод трассировки лучей для задач геометрической оптики, совместное решение уравнений Максвелла и уравнений ориентационной динамики нематического жидкого кристалла.
- Результаты численного решения задач лазерной обработки материалов: резки, сверления, селективного спекания.
- Результаты численного моделирования оптоволоконных систем управления с ЖК-вставками.
- Результаты численного моделирования оптических вихрей и управления их параметрами.
- Вычислительные данные о нелинейных эффектах при прохождении излучения через нематические жидкокристаллические среды: отклонении пучка и его самофокусировке.

## Научная новизна

1. Разработан параллельный расчетный код для решения методом FDTD уравнений Максвелла для анизотропной неоднородной среды, способный моделировать взаимодействие лазерного излучения с твердыми и жидкокристаллическими сплошными средами.
2. В численном моделировании задач лазерной резки показана необходимость учета всех переотражений для правильного вычисления теплового потока; в задаче о лазерном сверлении продемонстрирована важность учета интерференции; в задаче о лазерном спекании объяснены причины различного поведения керамических и металлических частиц. Метод FDTD впервые применен к задачам лазерного сверления и селективного лазерного спекания.
3. В оптоволоконных системах управления электромагнитным излучением с помощью полости, заполненной нематическим ЖК, показана предпочтительность использования определенной формы полости, как обеспечивающей меньшее рассеяние и избегающей фокусировки пучка.
4. Предложен способ управления величиной углового момента оптического вихря путем изменения толщины слоя и/или силы дисклинации нематического жидкого кристалла.
5. Разработан расчетный код для совместного решения уравнений Максвелла и уравнений динамики ЖК-среды, показана возможность возникновения стохастических режимов при определенных поляризации и знаке диэлектрической анизотропии; воспроизведено в численном расчете явление самофокусировки лазерного пучка в нелинейной среде.

**Достоверность результатов.** Достоверность результатов диссертационной работы обеспечивается использованием апробированных численных алгоритмов, методическими исследованиями, сравнением с экспериментальными данными и с результатами, полученными на основе других методов.

**Практическая ценность.** Научная и практическая значимость работы заключается в создании расчетных кодов для моделирования взаимодействия лазерного излучения с веществом, получении данных о распределении теплового потока по поверхности образцов в различных задачах лазерной обработки материалов, в данных о рассеянии светового пучка и изменении его углового момента при прохождении через нематический жидкий кристалл, в воспроизведении в численном расчете явления самофокусировки пучка при взаимодействии с жидкокристаллической средой. Полученные данные о распределении теплового потока при лазерной резке, сверлении и селективном спекании позволяют дать ряд практических рекомендаций для улучшения качества обработки материалов и сузить направления дальнейших экспериментальных поисков. Данные о рассеянии излучения при

взаимодействии с полостью, заполненной ЖК, позволили отказаться от применения полости цилиндрической формы в экспериментах по созданию миниатюрных оптоволоконных систем управления и рекомендовать использование для этих целей плоского слоя ЖК. Полученный результат о периодической зависимости углового момента пучка, прошедшего через слой нематического ЖК с дисклинацией, от толщины слоя и силы дисклинации, указывает на практический способ управления характеристиками закрученного пучка («оптического вихря»). Воспроизведение в численном расчете явления самофокусировки позволило изучить его особенности в случае узкого пучка излучения, когда неприменимо обычно используемое приближение плоской волны.

**Представление работы.** Результаты, представленные в диссертации, докладывались и обсуждались на научных конференциях:

1. Международная конференция «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики 2014», Новосибирск, 2014;
2. Международная конференция «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики 2015», Новосибирск, 2015;
3. Международная конференция «17-th International Conference «Laser Optics 2016». Санкт-Петербург, 2016;
4. Международная конференция «Russian Supercomputing Days 2017», Москва, 2017;
5. Международная конференция «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики 2017», Новосибирск, 2017;
6. XXV Всероссийская конференция с международным участием «Высокоэнергетические процессы в механике сплошной среды», Новосибирск, 2017;
7. XXVII Всероссийская конференция с международным участием «Высокоэнергетические процессы в механике сплошной среды», Новосибирск, 2020;

а также на научном семинаре ИТПМ СО РАН под руководством академика В.М. Фомина, на научном семинаре учебно-научного центра «Квантовая оптика» ИАиЭ СО РАН под руководством академика А.М. Шалагина; на научном объединенном семинаре ФИЦ ИВТ, кафедры математического моделирования НГУ и кафедры вычислительных технологий НГТУ «Информационно-вычислительные технологии» под руководством академика Ю.И. Шокина, профессоров М.В. Ковени и В.Б. Барахнина; на научном семинаре ИФ СО РАН им. Л.В. Киренского под руководством академика В.Ф. Шабанова, на научном семинаре жидкокристаллического общества «Содружество» под руководством д.ф.-м.н. А.В. Казначеева (ИНЭОС РАН).

**Публикации.** По материалам диссертации опубликовано 14 работ, в том числе 7 работ в изданиях, рекомендованных ВАК для представления основных результатов диссертации. Список работ приведен в конце автореферата.

**Личный вклад автора.** При выполнении работ по теме диссертации автор принимал активное участие в постановке задач, обсуждении результатов, подготовке печатных работ и докладов на конференциях. Автором разработаны расчетные коды, выполнены расчеты для всех рассмотренных в работе задач.

**Структура и объем диссертации.** Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы из 57 наименований, двух приложений. Общий объем диссертации составляет 134 страницы, включая 77 рисунков и 5 таблиц.

## Основное содержание работы

Во *введении* описана актуальность темы исследования, сформулированы цели диссертационной работы, перечислены полученные в диссертации новые результаты и положения, выносимые на защиту, описана структура диссертации.

В *главе 1* описаны численные алгоритмы для моделирования взаимодействия лазерного излучения с веществом и их программная реализация в виде расчетных кодов. Для моделирования взаимодействия излучения с неоднородными анизотропными средами численно, с помощью метода FDTD (Finite-Difference Time Domain), решаются уравнения Максвелла. В алгоритм метода FDTD внесены ряд изменений, дающих возможность учесть анизотропность среды и повысить точность вычислений путем выделения несущей частоты. Предложен способ численной генерации падающего излучения с помощью «ограниченной токовой площадки», позволяющий генерировать ограниченные световые пучки. Реализованы неотражающие граничные условия, основанные на методе унисаксиального полностью согласованного слоя (Uniaxial Perfectly Matched Layer).

Разработан расчетный код для решения уравнений Максвелла на многопроцессорных ЭВМ. Код был распараллелен путем геометрической декомпозиции расчетной области по всем трем координатам. Обмен данными между процессорами выполнялся с помощью интерфейса MPI (Message Passing Interface). Показано масштабированное (то есть при одинаковой загрузке процессоров) параллельное ускорение, полученное в расчетах, где было использовано от 1 до 310 ядер (рис. 1). Эффективность параллелизации при большом числе процессоров составляла примерно 77%.

Выполнен ряд верификационных и валидационных расчетов, включавших, в частности, сравнение с доступными аналитическими решениями. Показаны два примера тестовых расчетов: распространение гауссова пучка с образованием «пе-

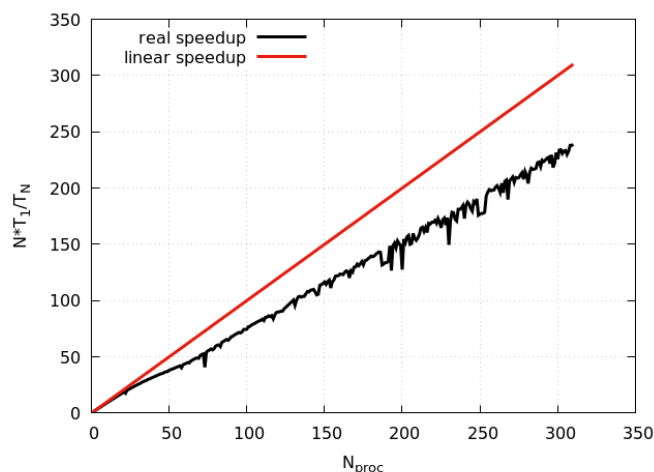


Рис. 1: Масштабированное параллельное ускорение при расчетах на различном числе процессоров в сравнении с идеальным линейным ускорением.

ретьяжки» и отражение гауссова пучка от наклонной металлической поверхности с проникновением вглубь металла на толщину скин-слоя (рис. 2).

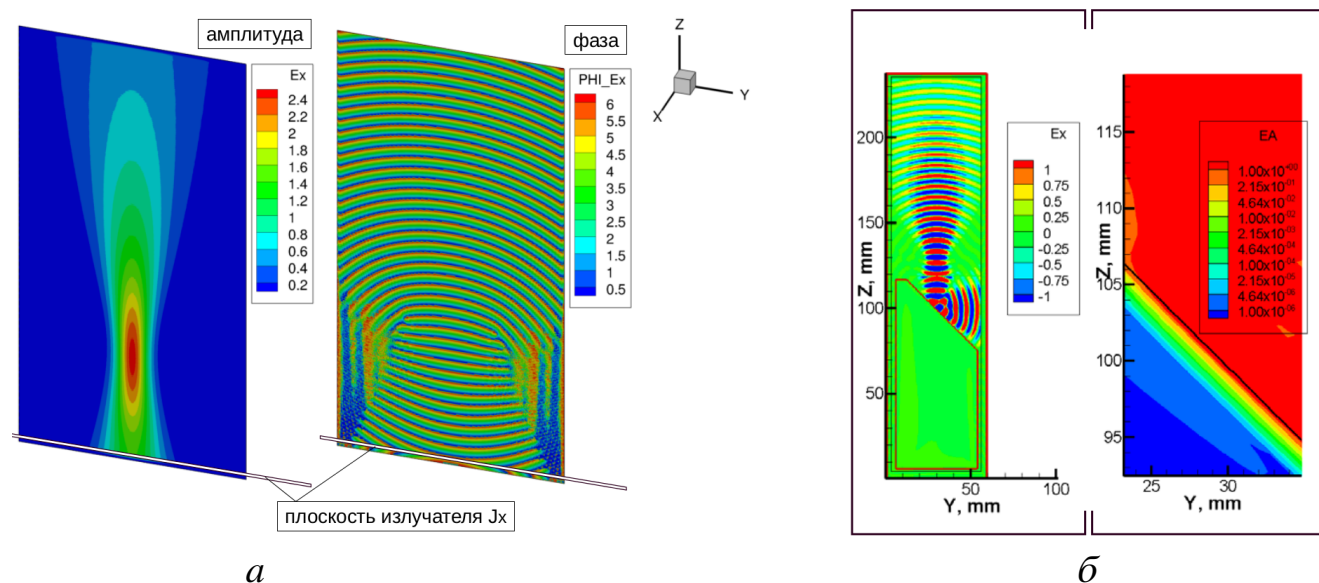


Рис. 2: Примеры тестовых расчетов. *а* — распространение гауссова пучка; *б* — отражение гауссова пучка от наклонной металлической поверхности, его затухание в скин-слое внутри металла.

Расчетный код, реализующий метод FDTD, был использован в задаче о лазерном сверлении металла, при моделировании взаимодействия излучения с веществом при селективном лазерном спекании, в ряде задач о прохождении света через жидкокристаллические среды.

В случае, когда характерные размеры требуемой расчетной области многократно превышают длину волны излучения, использование метода FDTD становится затруднительным в силу ограниченности памяти и быстродействия современных компьютеров. В такого рода задачах может быть, однако, использовано приближение геометрической оптики. В диссертации представлен разработанный



алгоритм решения задач взаимодействия излучения с веществом в данном приближении, основанный на методе трассировки лучей с учетом многократного отражения лучей и поляризации излучения. Алгоритм был реализован в виде расчетного кода, использованного далее при моделировании поглощения энергии излучения при лазерной резке металла.

*Глава 2* посвящена описанию результатов численного моделирования поглощения излучения при лазерной резке, лазерном сверлении и селективном лазерном спекании.

При моделировании процессов, происходящих при лазерной резке металла, численно исследовалось распределение поверхностной плотности теплового потока при использовании двух типов лазера — CO<sub>2</sub>-лазера и волоконного. Отличие в длине волны излучения этих двух лазеров и, таким образом, в показателе преломления, влияет на эффективность поглощения лазерной энергии и, следовательно, на качество реза, в частности на шероховатость получаемой поверхности.

Расчеты проведены в приближении геометрической оптики. В отличие от представленных в литературе данных был выполнен полный учет многократных отражений гауссова пучка внутри полости реза. Показано, что при линейной поляризации минимальная величина шероховатости достигается при ориентации вектора электрического поля волны перпендикулярно направлению резки; сделан вывод о существенном влиянии распределения поглощенной мощности на качество поверхности и важности прогрева излучением боковых стенок для получения меньшей шероховатости. Эти результаты полностью согласуются с данными экспериментальных исследований, проведенных в лаборатории лазерных технологий ИТПМ СО РАН.

Было также показано, что учет многократных отражений может существенно изменить картину распределения теплового потока (рис. 3), таким образом, полная трассировка траекторий лучей во многих случаях является необходимой при численном моделировании поглощения излучения в процессе лазерной резки.

При численном моделировании лазерного сверления металла использовалось как прямое решение уравнений Максвелла методом FDTD, так и подход, основанный на геометрической оптике. В отличие от лазерной резки, в данном случае характерные размеры передней части канала сверления (донной области каверны) могут быть сравнимы с длиной волны излучения, что приводит к необходимости учитывать волновые эффекты. В расчетах методом FDTD использовалась пространственная сетка из  $16 \cdot 10^6$  ячеек и 16 процессоров вычислительного кластера. Были получены поверхностные и пространственные распределения плотности поглощенного излучения. Сравнение результатов, полученных с помощью двух подходов, показало совпадение рассчитанных плотностей поглощения в большей части канала, за исключением его донной области. В самой донной области, где радиус кривизны поверхности канала сравним с длиной волны излучения, расчеты

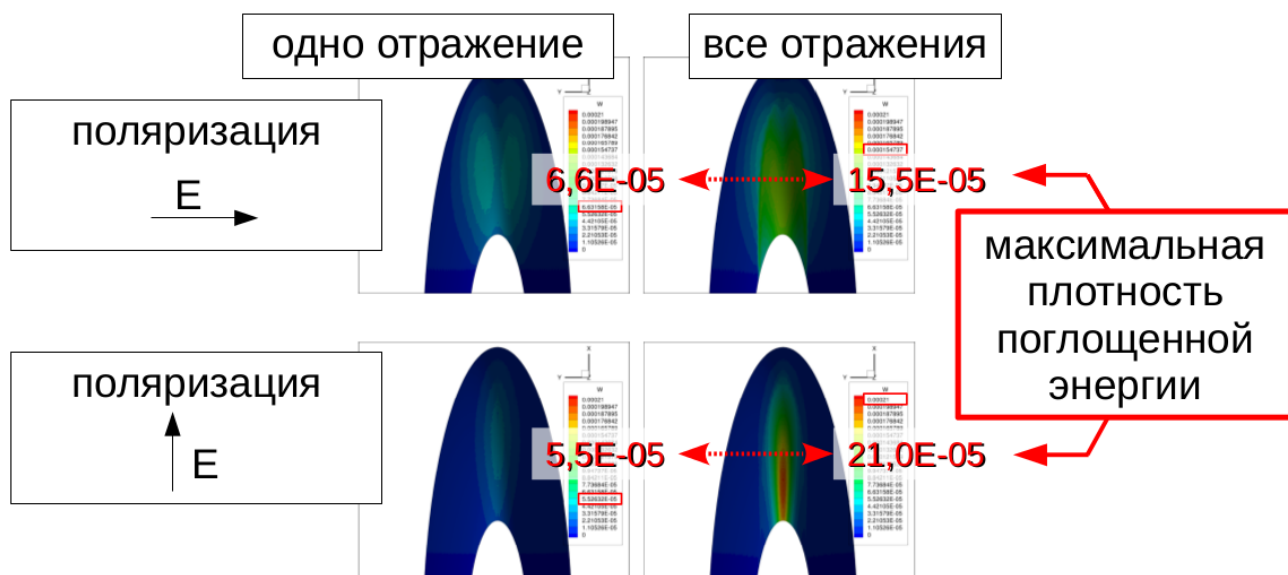


Рис. 3: Вид сверху на модельную переднюю кромку канала лазерной резки листа металла. Отличия в распределении плотности поглощенной энергии в зависимости от поляризации и учета количества отражений.

методом FDTD показывают сильные почти периодические колебания пространственной плотности поглощенной энергии (рис. 4). Неравномерность прогрева поверхности канала и плавления металла может приводить к тому, что канал приобретет «гофрированную» форму. На основе проведенных расчетов сделано предположение, что этого нежелательного эффекта можно избежать, если использовать лазер с меньшей длиной волны и большим поперечным размером пучка.

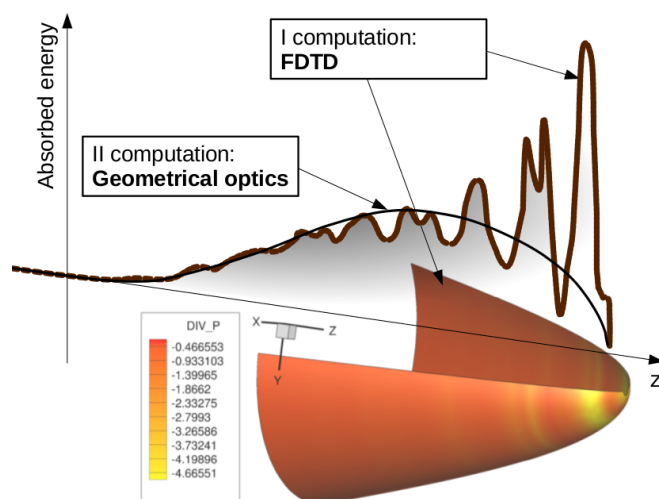


Рис. 4: Сравнение интегральных плотностей поглощенной энергии лазерного пучка в донной области каверны, полученных при моделировании начального этапа сверления металла методом FDTD и с помощью подхода, основанного на геометрической оптике.

Метод FDTD применялся также для моделирования селективного спекания сферических частиц в насыпном слое — процесс, широко используемый в адди-

тивных технологиях 3D-печати. Рассматривались два модельных материала — металл и керамика, нагреваемые лазерным пучком с радиальной интенсивностью, распределенной по Гауссу, и круговой поляризацией. Сетка насчитывала  $4 \cdot 10^6$  ячеек, расчеты производились на четырех процессорах.

Проведенные расчеты показали, что частицы металла нагреваются неравномерно, поскольку энергия поглощается вблизи поверхности частиц из-за скин-эффекта. В то же время в сферических частицах керамики за счет фокусировки преобладает поглощение излучения вблизи центра. Таким образом, для обеспечения равномерного прогрева важно учитывать влияние этих явлений. С этой целью можно подбирать или длину волны, или радиус шаровых частиц. В случае спекания смеси шаровых частиц из разных материалов (металла и керамики) одним лазерным пучком единственной возможностью вариативного управления равномерностью прогрева остается подбор радиуса частиц.

В главе 3 рассматривается взаимодействие лазерного излучения с жидкокристаллическими средами.

В одной из решаемых задач моделировалось прохождение излучения, распространяющегося по оптическому волокну, через цилиндрическую полость, заполненную нематическим жидким кристаллом (НЖК). Такого рода задачи возникают при разработке миниатюрных систем для преобразования и управления свойствами когерентного излучения. Рассматривались два случая — когда ось цилиндра перпендикулярна оси оптоволокна (рис. 5,а), и когда их оси совпадают (рис. 6,а). Диэлектрические проницаемости оболочки и сердцевины оптоволокна были взяты равными  $\epsilon_1 = 2,14$  и  $\epsilon_2 = 2,1556$ , продольная и поперечная проницаемости НЖК внутри полости были равны  $\epsilon_{\parallel} = 2,8224$  и  $\epsilon_{\perp} = 2,2801$ . Предполагалось, что распределение вектора-директора, показывающего преимущественное направление ориентации молекул НЖК, соответствует линейной дисклинации силы  $s = 1$ . Достаточно большие размеры расчетной области ( $20\lambda \times 20\lambda \times 25\lambda$  и  $30\lambda \times 30\lambda \times 20\lambda$  в первом и втором случаях, где  $\lambda$  — длина волны лазерного излучения в вакууме) потребовали использования расчетных сеток с большим числом узлов:  $27 \cdot 10^7$  и  $48.5 \cdot 10^7$ ; расчеты производились соответственно на 80 и 144 процессорах.

Показано, что при прохождении света через поперечную цилиндрическую полость он сильно рассеивается и даже расщепляется на несколько пучков (рис. 5,б и 5,в). Значительная часть излучения при этом рассеивается за пределы оптоволокна, что нежелательно.

Когда оси оптоволокна и цилиндрической полости совпадают, пучок, проходя через слой НЖК, также расщепляется, в данном случае на два пучка, однако они остаются внутри сердцевины оптоволокна (рис. 6,б и 6,в), так что потери энергии излучения почти не происходит.

Моделирование для второго случая проводилось при различной толщине слоя НЖК, то есть высоты полости  $h$ : было выполнено 38 расчетов, в которых  $h$  менялась от  $0,05\lambda$  до  $1,8\lambda$ . Расчеты показали, что коэффициент прохождения

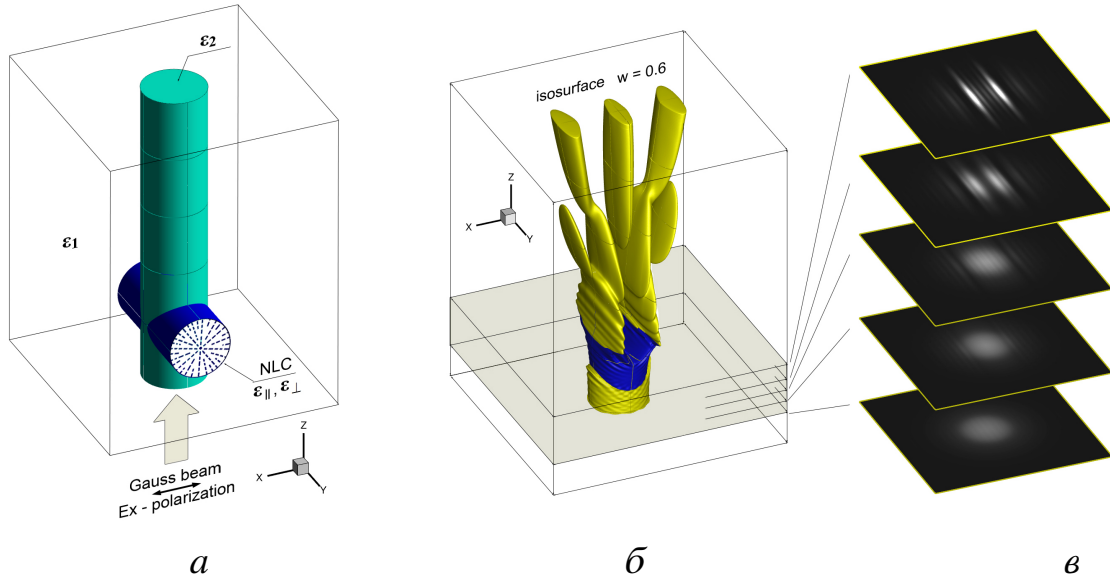


Рис. 5: Миниатюрная оптоволоконная система с поперечной цилиндрической полостью: *a* — схема; *б* — изоповерхность плотности энергии электромагнитного поля; *в* — плотность энергии в различных сечениях.

излучения меняется немонотонно в зависимости от  $h/\lambda$ , обнаруживая максимумы и минимумы различной высоты, интервал между соседними экстремумами составляет четверть длины волны. Это связано с интерференцией излучения, отражающегося от двух границ НЖК с материалом оптоволоконна, система ведет себя как оптический резонатор с потерями, что открывает возможность управления прохождением излучения путем изменения ширины зазора.

Еще одной особенностью, обнаруженной при исследовании данной задачи, является изменение момента импульса пучка света, прошедшего через слой НЖК. Исследовалась величина интеграла в плоскости поперечного сечения момента вектора Пойнтинга относительно оси пучка, отнесенная к величине потока вектора Пойнтинга через поперечное сечение, которая при распространении пучка вдоль  $O_z$  в безразмерном виде может быть представлена как:

$$LP_z = \int [\mathbf{r}, \mathbf{P}] dx dy / \int P_z dx dy.$$

Проведен ряд расчетов, отличающихся задаваемой толщиной слоя НЖК и силой дисклинации. На рис. 7 показано распределение излучения, пропущенного через слой НЖК, включающий дисклинацию силы  $s = 2$ , а на рис. 8 — зависимость  $LP_z$  от силы дисклинации и  $h$  — толщины слоя НЖК. Видно, что  $LP_z$  меняется почти периодически, расстояние между соседними экстремумами дается формулой

$$\delta h = \frac{\lambda/2}{\sqrt{\epsilon_{||}} - \sqrt{\epsilon_{\perp}}},$$

что, очевидно, можно объяснить сложением обыкновенной и необыкновенной волн, распространяющихся в двоякопреломляющей среде. Таким образом, изме-

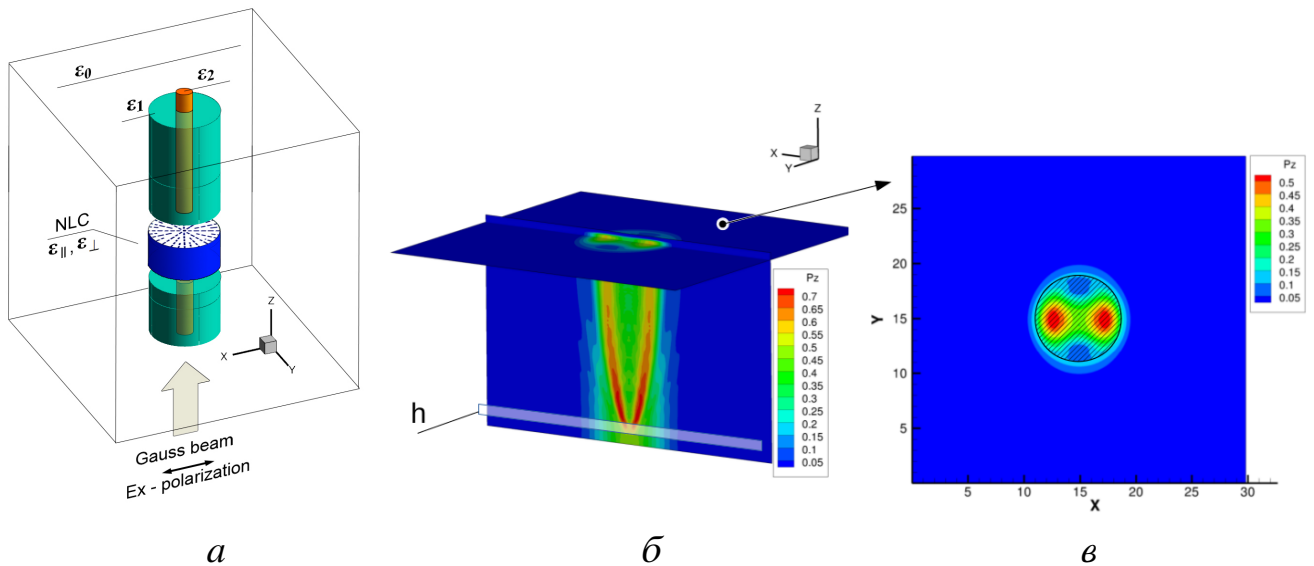


Рис. 6: Миниатюрная оптоволоконная система с соосной полостью: *a* — схема; *б-в* — распределение плотности потока энергии вдоль оси в сечениях  $xz$  и  $xy$ .

меняя толщину слоя НЖК, можно управлять моментом импульса, приобретаемым пучком.

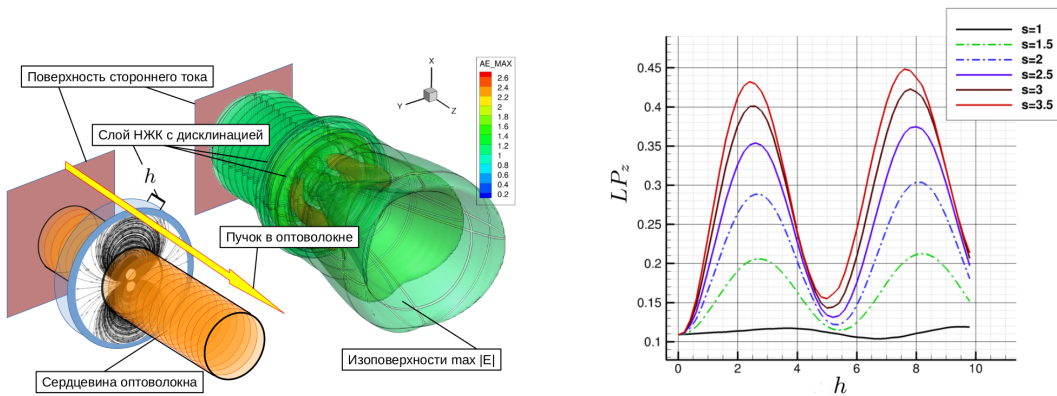


Рис. 7: Схема задачи и распределение излучения при силе дисклинации  $s = 2$

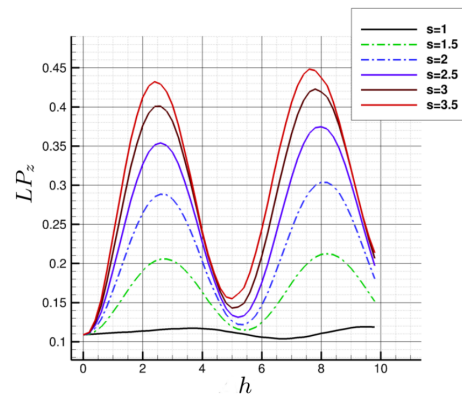


Рис. 8: Зависимость  $LP_z$  от ширины зазора  $h$  при различной силе дисклинации

В литературе световые пучки с ненулевым орбитальным моментом импульса часто именуют «оптическими вихрями». Точное определение оптического вихря как геометрического места точек, в которых фаза не определена, обычно дается в параксиальном приближении, где рассматривается фаза только одной компоненты поля. В данной работе предложено определение, учитывающее векторный характер электрического поля (три компоненты поля), где в точке пространства рассматривается фаза, при которой максимальна величина вектора, описывающего эллипс за период колебания поля. Векторное определение может быть сведено к параксиальному, однако позволяет рассматривать в качестве оптических вихрей

пучки с ненулевым полем на оси (в точках, где фаза максимального значения вектора не определена, так как вектор за периода колебания описывает окружность), например, собственную моду оптоволокна  $HE_{11}$ , которую имеет смысл рассматривать в качестве оптического вихря, поскольку её момент импульса не равен нулю (см. рис. 8: значение  $LP_z \neq 0$  при  $h = 0$ ).

**Глава 4** посвящена исследованию взаимного воздействия светового излучения и неоднородной анизотропной среды. Рассматривается влияние электромагнитного поля на ориентационную динамику НЖК. Таким образом, в дополнение к уравнениям Максвелла решаются «материальные» уравнения, описывающие изменения поля вектора-директора, в случае, когда скорость среды НЖК равна нулю. Фактически это уравнения ориентационной теории упругости, в которых свойства среды описываются с помощью трех упругих констант Франка и константы, описывающей релаксацию вектора-директора под действием молекулярного поля.

Описан численный метод для совместного решения уравнений Максвелла и уравнений ориентационной динамики. При решении уравнений ориентационной динамики пространственные производные аппроксимируются центральными разностями 2-го порядка. Алгоритм интегрирования во времени гарантирует сохранение единичной длины вектора-директора. Подробно исследована сходимость численного решения к стационарному состоянию в зависимости от величины шага интегрирования при совместном решении уравнений для электромагнитного поля и поля ориентации.

Проведены верификационные расчеты на предмет соответствия численных вычислений и аналитических решений в части воздействия стационарного или переменного электрического поля на ориентацию вектора-директора: статический электроориентационный эффект (электрический эффект Фредерикса) и динамический электроориентационный эффект.

Задача об электрическом эффекте Фредерикса имеет в одноконстантном приближении аналитическое решение, что позволяет верифицировать код. Продемонстрировано хорошее совпадение полученного численного решения с аналитическим. На этом основании считается верифицированной реализация в коде как той части уравнения ориентационной динамики, которая отвечает за статический электроориентационный эффект, так и той части уравнения, которая отвечает за силы упругости НЖК.

В литературе не найдено аналитически решенных задач на динамический электроориентационный эффект, однако в данной работе аналитически проанализирован характер эффекта — при положительной анизотропии НЖК ( $\epsilon_{\parallel} > \epsilon_{\perp}$ ) вектор-директор ориентируется вдоль большой полуоси эллипса, описываемого электрическим вектором за период колебания электрического поля в точке пространства; при отрицательной анизотропии НЖК вектор-директор ориентируется по нормали к плоскости эллипса. На этом основании предложено использовать расчеты с принудительным обнулением сил упругости НЖК (упругие кон-

станты Франка) для верификации кодовой реализации уравнения ориентационной динамики в части, описывающей динамический электроориентационный эффект. Проведен численный расчет ориентации вектора-директора с принудительным обнулением упругих констант Франка в поле собственной моды оптоволокна  $HE_{11}$ . Выявлено соответствие численного расчета аналитическому выводу о воздействии переменного электрического поля на ориентацию вектора-директора.

Замечено, что при принудительном обнулении сил упругости для сходимости расчетов требуется, чтобы его поляризация была круговой, если анизотропия НЖК положительна, и линейной в противоположном случае. Это согласуется с экспериментальными исследованиями «нематиконов» (пространственных структур НЖК, возникающих в пучке света, Assanto et al., 2011, 2013), в которых наблюдалось, что именно такие комбинации поляризации и знака анизотропии благоприятствуют сохранению стабильной структуры НЖК. С учетом выводов аналитического анализа динамического электроориентационного эффекта, описанного выше, сделано предположение о том, что отсутствие сходимости численных расчетов с принудительным обнулением сил упругости может соотноситься с реальной нестабильностью, наблюдаемой в экспериментах.

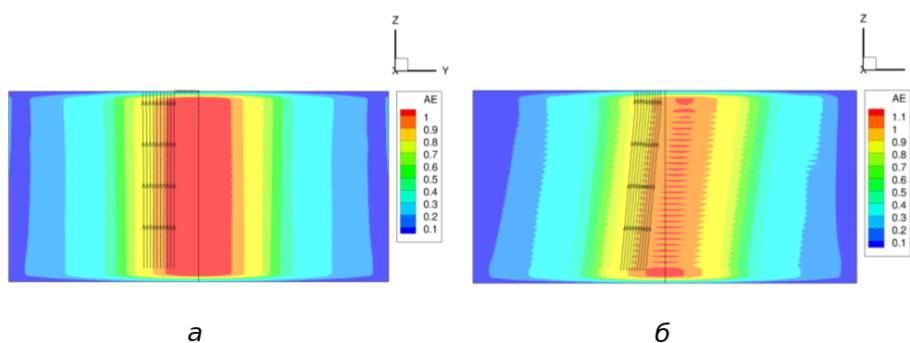


Рис. 9: Центральные продольные сечения. Цветом обозначена  $|E_{\max}|$ . Черные линии касательны вектору Пойнтинга. *a* — расчет в изотропной среде, *б* — расчет со слоем НЖК.

Проведено моделирование прохождения пучка лазерного излучения через слой нематического жидкого кристалла в постановке задачи «гигантская оптическая нелинейность» (рис. 9). Полученные результаты сравнены с результатом оценочной формулы Б.Я. Зельдовича. Сделан вывод о важности учета не только изменения параметров среды, но и изменения параметров излучения, закономерно следующим за изменением среды.

В завершении главы представлен численный расчет, основанный на последовательном решении уравнений Максвелла и уравнения ориентационной динамики НЖК, который показал, что узкий пучок электромагнитного излучения может деформировать НЖК вблизи оси пучка, а деформированная область, в свою очередь, способна вызвать фокусировку пучка. Таким образом, показано соответствие результата численного моделирования, основанного на совместном применении уравнений Максвелла и уравнения ориентационной динамики НЖК, с экспериментом и теоретическим объяснением явления самофокусировки.

**В заключении** изложены результаты работы.

1. Разработаны как калькуляционные коды, так и коды, содержащие численные схемы:

– для вычисления в объеме электромагнитного поля собственных мод оптоволокна (калькуляционный код, использующий аналитическое выражение, описанное в Приложении А);

– для вычисления электромагнитного поля на прямой линии вдоль распространения плоской волны в стопке пластин, с возможностью задавать как количество и толщины пластин, так и каждой пластине — индивидуальные параметры либо изотропных, либо анизотропных сред, вплоть до анизотропии, описывающей холестерический жидкий кристалл с анизотропным поглощением, с возможностью вычисления и электромагнитного поля в любой координате и коэффициентов отражения, поглощения и прохождения стопки пластин (калькуляционный код, использующий аналитическое выражение, описанное в приложении Б);

– для численного моделирования процесса поглощения лазерного излучения металлической поверхностью (калькуляционный код с применением положений геометрической оптики);

– для численного моделирования прохождения пучка электромагнитного излучения через задаваемую оптически неоднородную композитную среду, состоящую из областей, включающих как изотропные, так и анизотропные среды, с возможностью задавать параметры пучка, композицию и размеры областей и параметры сред (численная схема);

– для моделирования во внешних электромагнитных полях ориентационной динамики пространственного поля оси анизотропии нематического жидкого кристалла, задаваемого единичным вектором-директором  $\mathbf{n}$  (численная схема);

– для моделирования взаимодействия электромагнитного поля и пространственного поля оси анизотропии нематического жидкого кристалла, задаваемого единичным вектором-директором  $\mathbf{n}$  (численная схема).

Для реализации кодов использовался язык программирования Фортран. Все коды решают задачи в трехмерной пространственной области в декартовой системе координат, за исключением кода, калькулирующего электромагнитное поле в одномерной задаче о стопке пластин. Для увеличения производительности, коды, содержащие численные схемы, адаптированы к применению на высокопроизводительных вычислительных кластерах — «распараллелены» с использованием библиотеки MPI.

2. Разработанные коды применены к задачам лазерной резки и сверления металлов, селективного лазерного спекания порошковых материалов, созда-



ния миниатюрных систем управления параметрами лазерного излучения в оптоволокне.

Результаты применения кодов:

– сопровождали эксперименты в области сравнения качества резки металлов волоконными и  $\text{CO}_2$ -лазерами, эксперименты в области создания миниатюрных систем управления лазерным излучением в оптоволокне;

– показали важность учета всех переотражений лучей, описывающих лазерный пучок, при расчетах плотности теплового потока в металлическую стенку в задачах лазерной резки;

– сфокусировали внимание на двух явлениях, участвующих в процессе распределения поглощенной мощности лазерного излучения в порошковом слое: скин-эффекте и фокусировке;

– указали на варианты управления моментом импульса пучка электромагнитного излучения в миниатюрных оптических системах;

– продемонстрировали возможность моделирования нелинейного ориентационного эффекта самофокусировки пучка в слое нематического жидкого кристалла и указали на важность учета при оценках отклонения пучка под действием среды;

– показали, каким образом может влиять совместно поляризация пучка света и знак диэлектрической анизотропии  $\epsilon_a$  кристалла на появление стохастического режима поведения оси анизотропии нематического жидкого кристалла в электромагнитном поле пучка.

3. При работе над кодами сделаны попытки решить некоторые методические вопросы, имеющие самостоятельное значение: интерполяция неполярного вектора, математическое определение оптического вихря при векторном описании поля, предложение критериев сходимости совместного расчета уравнений с разными характерными временами изменения переменных.

**В Приложении А** описано аналитическое решение задачи «собственные моды оптоволокна» и предложен компьютерный алгоритм для построения решения.

**В Приложении Б** описано оригинальное аналитическое решение задачи «падение плоской волны на слой холестерического жидкого кристалла» и предложен метод построения поля плоской электромагнитной волны проходящей через стопку пластин с анизотропией холестерического типа.

Автор выражает глубокую признательность за всестороннюю поддержку научному руководителю А.Н. Кудрявцеву, а также С.И. Трашкееву и О.Б. Ковалеву.

## Список работ по теме диссертации

### *Публикации в периодических изданиях, рекомендованных ВАК*

1. Галёв Р.В., Ковалев О.Б. Об использовании уравнений Максвелла при численном моделировании взаимодействия лазерного излучения с материалами // Вестник НГУ. Серия: Физика. 2014. Т. 9. С. 55 – 64.
2. Kovalev O.B., Galjov R.V. The application of Maxwell's equations for numerical simulation of processes during laser treatment of materials // J. Phys. D: Appl. Phys. 2015. art. 305501. 12 p. doi: 10.1088/0022-3727/48/30/305501
3. Galev R., Kudryavtsev A., Trashkeev S. Numerical simulation of light propagation through composite and anisotropic media using supercomputers // Supercomputing / Eds V. Voevodin, S. Sobolev: Third Russian Supercomputing Days – RuSCDays 2017 (Russia, Moscow, September 25 – 26, 2017): Conference proceedings. Cham et al.: Springer International Publishing AG, 2017. P. 229 – 240. (Book series: Communications in Computer and Information Science, Volume 793).
4. Galev R., Kudryavtsev A., Trashkeev S. Numerical simulation of generation of optical vortices at light beam propagation through a layer of a nematic liquid crystal // Proceedings of the XXV Conference on High-energy Processes in Condensed Matter (HEPCM 2017, Russia, Novosibirsk, June 5 – 9, 2017): AIP Conference Proceedings. 2017. Vol. 1893. Art. 030045. 11 p. doi: 10.1063/1.5007503
5. Galev R., Kudryavtsev A., Trashkeev S. Numerical simulation of laser beam interaction with a liquid crystal medium in a miniature fiber-optical system // Proceedings of the XXV Conference on High-energy Processes in Condensed Matter (HEPCM 2017, Russia, Novosibirsk, June 5 – 9, 2017): AIP Conference Proceedings. 2017. Vol. 1893. Art. 030044. 8 p. doi: 10.1063/1.5007502
6. Orishich A.M., Golyshev A.A., Shulyatyev V.B., Galev R.V., Kudryavtsev A.N. Beam polarization effect on the surface quality during steel cutting by CO<sub>2</sub> laser // Journal of Laser Applications. 2018. Vol. 30, No. 1. Art. 012006. 7 p.
7. Galev R.V., Kudryavtsev A.N. Numerical method for simulation of orientation dynamics of nematic liquid crystals in electromagnetic fields. // Proceedings of the XXVII Conference on High-Energy Processes in Condensed Matter (HEPCM 2020, Russia, Novosibirsk, 2020): AIP Conference Proceedings. 2020. Vol. 2288. Art. 030001. 6 p. doi: 10.1063/5.0031271

### *Публикации в других изданиях и научных сборниках*

8. Trashkeev S.I., Galev R.V., Kudryavtsev A.N. Numerical simulation of electromagnetic processes based on a new two-potential formalism for the Maxwell equations // International Conference «Advanced Mathematics, Computations and Applications – 2014» (Russia, Novosibirsk, 8 – 11 June, 2014): abstracts. Novosibirsk, 2014. P. 84.
9. Галев Р.В., Кудрявцев А.Н., Трашкеев С.И. Численное моделирование взаимодействия лазерного излучения с дисклинациями в нематическом жидком кристалле // Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики – 2015 : тезисы Международной конференции, посвященной 90-летию со дня рождения академика Г.И. Марчука (Россия, Новосибирск, 19 – 23 окт. 2015 г.). Новосибирск, 2015. С. 126 – 127.
10. Галев Р.В., Кудрявцев А.Н., Трашкеев С.И. Численное моделирование генерации оптических вихрей при прохождении пучка света через слой нематического жидкого кристалла // Марчуковские научные чтения – 2017 (Россия, Новосибирск, 25 июня – 14 июля 2017): тезисы. Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2017. С. 170.
11. Галев Р.В., Кудрявцев А.Н., Трашкеев С.И. Численное моделирование взаимодействия лазерного излучения с дисклинациями в нематическом жидком кристалле [Электронный ресурс] // Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики – 2015: труды Международной конференции, посвященной 90-летию со дня рождения академика Г.И. Марчука (Россия, Новосибирск, 19 – 23 окт. 2015 г.). Новосибирск, 2015. С. 189 – 195. URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=25577955>
12. Trashkeev S.I., Nyushkov B.N., Galev R.V., Kolker D.B., Denisov V.I. Optical trigger based on a fiber-coupled liquid crystal // International Conference Laser Optics (LO-2016) (Russia, St. Petersburg, 27 June – 1 July 2016): Proceedings. St. Petersburg, 2016. P. R8-13.
13. Галев Р.В., Кудрявцев А.Н., Трашкеев С.И. Численное моделирование генерации оптических вихрей при прохождении пучка света через слой нематического жидкого кристалла // Марчуковские научные чтения – 2017 (Россия, Новосибирск, 25 июня – 14 июля 2017): труды. Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 2017. С. 179 – 185.
14. Galev R.V., Kudryavtsev A.N., Trashkeev S. Numerical simulation of light propagation through composite and anisotropic media using supercomputers // Суперкомпьютерные дни в России (Россия, Москва, 25 – 26 сент. 2017 г.): труды международной конференции. М. Изд-во Моск. ун-та, 2017. P. 211 – 222.

Ответственный за выпуск Р.В. Галёв

Подписано в печать 02.02.2023  
Формат бумаги 60×84/16, Усл. печ. л. 1.1  
Уч.-изд. л. 1.0, Тираж 100 экз., Заказ № 10

Отпечатано в типографии ООО «Параллель»  
630090, Новосибирск, ул. Институтская, 4/1