光学的異方体と透過偏光変化の計算

1　光学異方体

空気や水などの流体や、食塩の結晶のように対称性の高い固体は、偏光方向によらず、単一の屈折率を示す。それに対して、対称性の低い結晶や、歪みがかかったり配向したりした非晶質では、屈折率は光の入射方向や偏光方向による変化する。屈折率が入射方向や偏光方向により変化する物質を光学異方体と呼ぶ。

光学異方体は大きく光学 1 軸性物質と光学 2 軸性物質に分類される。光学 1 軸性物質は 1 本の光軸を持つもので、2 軸性物質は 2 本の光軸を持つ物である。光軸とは、その方向に進行する光にとっては、屈折率が偏光方向に依存せず、物質があたかも等方的であるかのように見える軸の事である。

光学異方体には屈折率の主軸がある。主軸は光軸とは別の概念なので混同しないように注意する必要がある。主軸の方向は直交する 3 方向になるので、ここでは、それらの屈折率を n_x、n_y、 n_z　と置くことにする。光学等方体、1 軸性、2 軸性物質では、これら 3 つの屈折率の間に以下の関係がある。

光学等方体：$n_x = n_y = n_z$

一軸性物質：$n_x = n_y \neq n_z$

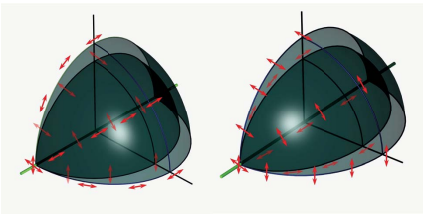
二軸性物質：$n_x \neq n_y \neq n_z \neq n_x$

1.1　一軸性物質の屈折率面

一軸性物質に光が入射した時に、Z 軸に垂直な偏光面の光は屈折率が入射角に依存せず一定の値（n_x、n_y に対応）を示す。この場合は入射光は通常の屈折の法則に従うので常光と呼ばれ、この時の屈折率は n_o と表記される。一方、Z 軸に平行な偏光面の屈折率は入射角に依存し

$n_{//} = \frac{n_o n_e}{\sqrt{n_o^2 \sin^2\theta + n_e^2 \cos^2\theta}}$

となる。一軸性物質の光軸は Z 軸となる。入射光の z 軸からの傾き θ に依存して、 z 軸に平行な偏光成分の屈折率は上記のように変化する。屈折率が入射角によって変化すると、屈折率が一定であることが前提の屈折の法則とは違った屈折角を示すようになる。このため、この偏光は異常光と呼ばれ、異常光側の主屈折率 n_z を異常光屈折率と呼び、通常は n_e と表記する。



$n_z > n_x$　　$n_z < n_x$

図 1:　一軸性物質の屈折率局面

入射角度による屈折率の値の変化をしめしたのが屈折率楕円体で、一軸性の場合には $n_x = n_y < n_z$
には正の $n_x = n_y > n_z$
の場合には負の光学的一軸性物質と呼ぶ。

1.2　二軸性物質の屈折率面

二軸性物質では、屈折率局面は一軸性よりかなり複雑な形状となる。

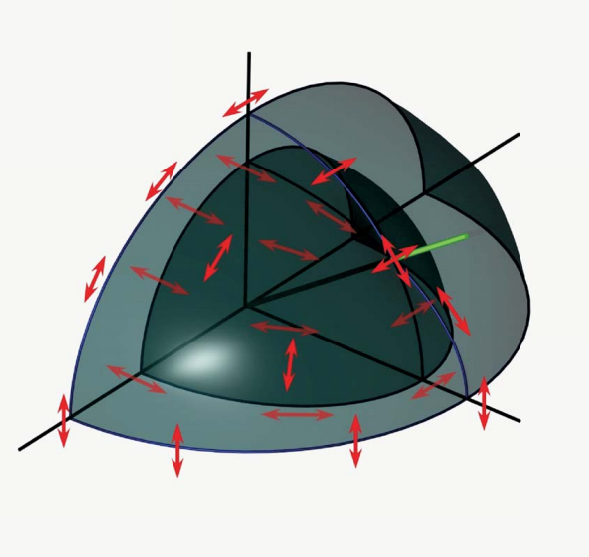


図 2:　二軸性物質の屈折率局面

2　偏光の表記方法と計算方法

光は電磁波の一種で、真空中では、進行方向に対して垂直な振動面を持つ電場と磁場の波動が組み合わさったものである。電場と磁場が直交しているので、通常は電場だけを考えれば十分で、振動面として電場の方向を使う。物質と光の相互作用を考えると、誘電的なものが大半であり、電場の振動面の方が実用的に重要性が高い。

光の進行方向を Z 軸方向とした場合に、電場は XY 面内の任意の方向に振動面を持つ。X 軸と Y 軸は直交しているので、それぞれの軸方向への射影成分を考えれば、任意の光の状態を記述できる。これを素直に行ったのがジョーンズベクトル（Jones vector) である。

2.1　ジョーンズベクトル

任意の振幅と位相を持つ波を表すのには振幅が 2 方向、位相も 2 方向で合計で 4 つのパラメータがあればよい。即ち

$$E_G = \begin{pmatrix} E_x e^{i\phi_x} \\ E_y e^{i\phi_y} \end{pmatrix} \tag{1}$$

ただし、X 面内と Y 面内の波は相対的な位相差が問題となるので、両要素に $e^{-i\phi_x}$ をかけて

$$E_G = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y e^{i(\phi_y - \phi_x)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y e^{i\delta\phi} \end{pmatrix} \tag{2}$$

とすることも出来る。光の強度は電場の振幅の 2 乗に比例するので、

$$I = \begin{pmatrix} E_x E_x^* \\ E_y E_y^* \end{pmatrix} \tag{3}$$

となる。ここで*は複素共役を示す記号である。

以下、幾つかの特別な偏光のジョーンズ行列を示す。

横直線偏光

$$E_{LHP} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

縦直線偏光

$$E_{LVP} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

斜め 45 度線偏光

$$E_{L45P} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

斜め - 45 度直線偏光

$$E_{L-45P} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

右円偏光

$$E_{RCP} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

左円偏光

$$E_{LCP} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

斜め直線偏光や、円偏光でベクトルの前に $1/\sqrt{2}$ があるのは全光強度を 1 に規格化するためである。

ジョーンズベクトルは、どのような表記をしても、何らかの偏光を表記してしまうことになる。偏光していない自然光はジョーンズベクトルでは書き表すことが出来ない。自然光も含めて光の状態を記述するためには、ストークスパラメータ (Stokes Parameter) と呼ばれる 4 要素を持つベクトルを使う必要がある。

ストークスパラメータ　ストークスパラメータは

$$S = \begin{pmatrix} S_0 \\ S_1 \\ S_2 \\ S_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_x^2 + E_y^2 \\ E_x^2 - E_y^2 \\ 2E_x E_y \cos\delta \\ 2E_x E_y \sin\delta \end{pmatrix} \tag{4}$$

で定義される。ただし、E_x と E_y は X と Y 軸方向の電場の振幅、δ は両方の波の位相差である。4 つのパラメータのうち、S_0 は全光強度を与えている。ジョーンズベクトルと同様に、幾つかの偏光についてのストークスパラメータを示す。

横直線偏光

$$S_{LHP} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

縦直線偏光

$$S_{LVP} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

斜め 45 度線偏光

$$S_{L+45P} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

斜め - 45 度直線偏光

$$S_{L-45P} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

右円偏光

$$S_{RCP} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

左円偏光

$$S_{LCP} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

完全無偏光

$$S_{unp} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

ストークスパラメータで部分偏光を表すのには、偏光状態を表すパラメータと、完全無偏光のパラメータを適当な割合で足しあわせればよい。P を偏光度 (degree of polarization）とすれば、

$$S = \begin{pmatrix} S_0 \\ S_1 \\ S_2 \\ S_4 \end{pmatrix} = (1-P) \begin{pmatrix} S_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + P \begin{pmatrix} S_0 \\ S_1 \\ S_2 \\ S_4 \end{pmatrix} \tag{5}$$

と表記できる。ただし、P は 0 から 1 の間の数である。

3　ジョーンズマトリックスとそれを用いた計算

ジョーンズベクトルは 2 行、ストークスパラメータは 4 行なので、それぞれ 2×2、4×4 の正方行列により、1 次変換できる。様々な光学素子に対応する行列が準備できれば、行列どおしの演算により機械的に偏光状態の変化を追跡できる。

ジョーンズベクトルを操作する 2×2 の行列をジョーンズマトリックス、ストークスパラメータを操作する 4×4 の行列をミュラー行列と呼ぶ。様々な光学素子に対応するこれらの行列は既知のものなので、それらの組み合わせにより偏光状態の計算が可能である。ジョーンズマトリックスの方が偏光しか扱えない分だけ単純なので、ここでは、ジョーンズマトリックスと、それによる計算手法を紹介する。

3.1 様々な光学素子に対応するジョーンズマトリックス

種々の光学素子に対応するジョーンズマトリックスを以下に示す。

水平直線偏光子

$$J_{LHP}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}$$

垂直直線偏光子

$$J_{LVP}=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

± 45 度直線偏光子

$$J_{LP(\pm45)}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & \pm1\\ \pm1 & 1\end{pmatrix}$$

角度 θ の直線偏光子

$$J_{LP(\theta)}=\begin{pmatrix}\cos^2\theta & \sin\theta\cos\theta\\ \sin\theta\cos\theta & \sin^2\theta\end{pmatrix}$$

振動面回転子（旋光性）

$$J_{ROT(\theta)}=\begin{pmatrix}\cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix}$$

$\lambda/2$ 波長版

$$J_{\lambda/2(\theta)}=\begin{pmatrix}\cos2\theta & \sin2\theta\\ \sin2\theta & -\cos2\theta\end{pmatrix}$$

$\lambda/4$ 波長版

$$J_{\lambda/4(\theta)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1+i\cos2\theta & i\sin2\theta\\ i\sin2\theta & 1-i\cos2\theta\end{pmatrix}$$

$\lambda/4$ 波長版 (0 度)

$$J_{\lambda/4(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1+i & 0\\ 0 & 1-i\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{2}}\begin{pmatrix}(1+i)(1-i) & 0\\ 0 & (1-i)(1-i)\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}2 & 0\\ 0 & -2i\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -i\end{pmatrix}$$

$\lambda/4$ 波長版 (± 45 度)

$$J_{\lambda/4(\pm45)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & \pm i\\ \pm i & 1\end{pmatrix}$$

一般的位相差板

$$J_{WP(\phi,\theta)}=\begin{pmatrix}\cos\frac{\phi}{2}+i\sin\frac{\phi}{2}\cos2\theta & i\sin\frac{\phi}{2}\sin2\theta\\ i\sin\frac{\phi}{2}\sin2\theta & \cos\frac{\phi}{2}-i\sin\frac{\phi}{2}\cos2\theta\end{pmatrix}$$

となる。それ以外の光学素子は上記の組み合わせで作り出すことが出来る。例えば、直線偏光子が水平方向を向いた円偏光版は、LHP と 45 度傾いた $\lambda/4$ 板の合成なので、

$$J_{CP1}=J_{\lambda/4(\pm45)}\cdot J_{LHP}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & \pm i\\ \pm i & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 0\\ \pm i & 0\end{pmatrix} \tag{6}$$

となる。同様に、偏光子が垂直方向の円偏光版は

$$J_{CP2} = J_{\lambda/4(\mp 45)} \cdot J_{VHP} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & \mp i \\ \mp i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & \mp i \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{7}$$

となる。両者を合わせると、一般的な円偏光版の行列として

$$J_{R/LCP} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \pm i \\ \mp i & 1 \end{pmatrix} \tag{8}$$

が得られる。

3.2 ジョーンズマトリックスを用いた計算

それぞれの光学素子による偏光状態変化の計算には、入射ジョーンズベクトルに対して、それぞれのジョーンズマトリックスを掛け合わせればよい。例えば、水平直線偏光を角度 θ だけ傾いた直線偏光子に通した場合の偏光変化は

$$J_{LP(\theta)} \cdot E_{LHP} = \begin{pmatrix} \cos^2\theta & \sin\theta\cos\theta \\ \sin\theta\cos\theta & \sin^2\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2\theta \\ \cos\theta\sin\theta \end{pmatrix} \tag{9}$$

で、与えられる。出射光強度は $I = E_x^2 + E_y^2$ より

$$I = (\cos^2\theta)^2 + \cos^2\theta\sin^2\theta = \cos^2\theta(\cos^2\theta + \sin^2\theta) = \cos^2\theta \tag{10}$$

となる。あるいは、水平直線偏光を４５度直線偏光を通した後に垂直直線偏光を通した時の透過電場強度は

$$E = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{11}$$

であり、光強度は 1/4 となることが求められる。

3.3 ジョーンズ行列を用いた TN 液晶の計算

前節では、ジョーンズベクトルに単純にジョーンズ行列を掛け合わせるか、2 つのジョーンズ行列を掛け合わせたのみであったが、掛け合わせるジョーンズ行列はいくつあっても問題ない。TN 液晶では、セル厚方向に対して、1 軸性屈折率がらせん状に 90 度回転していく。セル厚み方向を仮想的に分割することを考える。分割層がが十分に薄ければ、層のなかでは屈折率の主軸は一定の方向を向いており、隣接層ではそれに対して僅かに異なった方向に向いていると近似できる。このように考えると、個々の分割層に対するジョーンズマトリックスを決めることが出来る。あとは、それを単純に掛け合わせていけばよい。

具体的には式は

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \theta \overset{\pi}{\Pi}{}_{=0} \begin{pmatrix} C + iS\cos 2\theta & iS\sin 2\theta \\ iS\sin 2\theta & C - iS\cos 2\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{12}$$

で与えられる。ただし $\phi = \Delta nd/\lambda$ は厚み d の仮想的な層で生じる位相差として、

$$\begin{cases} C = \cos\frac{\phi}{2} \\ S = \sin\frac{\phi}{2} \end{cases} \tag{13}$$

である。また θ の計算間隔は TN セルの厚みを D として、$\Delta\theta = \pi d/2D$ で与えられる。

実は、隣接層の厚みを 0 にした極限は数学の技を使うと一つの行列にまとめ込むことが出来ることが知られている。その結果は、

$$J(\theta, \Delta nd, \lambda) = \begin{pmatrix} p + iq & r + is \\ -r + is & p - iq \end{pmatrix} \tag{14}$$

ここで、

$$\begin{cases} p = \cos\theta\cos\beta + \frac{1}{\sqrt{1+\alpha^2}}\sin\theta\sin\beta \\ q = \frac{\alpha}{\sqrt{1+\alpha^2}}\cos\theta\sin\beta \\ r = -\sin\theta\cos\beta + \frac{1}{\sqrt{1+\alpha^2}}\cos\theta\sin\beta \\ s = \frac{\alpha}{\sqrt{1+\alpha^2}}\sin\theta\sin\beta \end{cases} \tag{15}$$

ただし、

$$\begin{cases} \alpha = \frac{\pi\Delta nd}{\lambda\theta} \\ \beta = \theta\sqrt{1+\alpha^2} \end{cases} \tag{16}$$

である。この導き方は、液晶学会誌の昔の赤羽先生の解説講座記事にある（4 × 4 マトリックスもある)。

コンピュータによる力尽くの計算ではなく、解析的にジョーンズマトリックスを求められれば、式を眺めることによって、新たな知見をえることができる。これは、非常に有り難いことであるけれども、一方で、コンピュータの助けがあれば、手間はかかるかもしれないけれども、類似した地点には到達出来る。これは、式をいじる能力が高くない人間にとっては非常に有り難いことで、数式が苦手な人ほど、コンピュータを数値計算で使いこなすとメリットがある。

折角、TN のジョーンズマトリックスを紹介したので、2 つほどの場合について、もう少し検討することにしよう。まず、第一は $\beta = m\pi$ (m は整数）の場合だ。この時に $\sin\beta = 0$ となるので、

$$J(\theta, \Delta nd, \lambda) = \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\beta & -\sin\theta\cos\beta \\ \sin\theta\cos\beta & \cos\theta\cos\beta \end{pmatrix} = \cos\beta \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \tag{17}$$

となる。最終的な行列は定数がかかった回転行列で、この条件下では TN セルは入射直線偏光を θ 度回転させる行列として機能することが分かる。ただし、β は波長の関数なので、あるリタデーション Δnd に対して一つの λ でしかこの条件は完全には満たされない。通常の TN セルでは可視領域で目の感度が最も高い波長付近に合わせて条件設定をしている。なお、$\beta = m\pi$ を業界では第一モーガン条件と呼んでいる。ここで、注意すべき事は第一モーガン条件が満たされている時に、その波長の直線偏光は直線偏光のままセルから出て来るが、セル内では直線偏光から外れた楕円偏光になって、最後に直線偏光に戻っているにすぎないことである。セルの中間地点までのジョーンズ行列を考えると、第一モーガン条件はもはや満たされておらず、その時点では、偏光は何らかの楕円偏光になっているはずである。それが、セルの後半部分で、さらに変調をうけて、最終的に何事もなかったかのような直線偏光に戻っているだけなのである。

2 番目のケースとしてセル厚が非常に厚い場合（$\Delta nd >> \lambda$) を考える。この時 α は非常に大きな数となり、

$$\beta = \theta\sqrt{1+\alpha^2} \cong \theta\alpha = \frac{\pi\Delta nd}{\lambda} \tag{18}$$

となる。また、ジョーンズマトリックスは $1/\sqrt{1+\alpha^2} \to 0$ 、$\alpha/\sqrt{1+\alpha^2} \to 1$ とすると、

$$\begin{aligned} J(\theta, \Delta nd, \lambda) &= \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\beta + i\cos\theta\sin\beta & -\sin\theta\cos\beta + i\sin\theta\sin\beta \\ \sin\theta\cos\beta + i\sin\theta\sin\beta & \cos\theta\cos\beta - i\cos\theta\sin\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta(\cos\beta + i\sin\beta) & -\sin\theta(\cos\beta - i\sin\beta) \\ \sin\theta(\cos\beta + i\sin\beta) & \cos\theta(\cos\beta - i\sin\beta) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\beta + i\sin\beta & 0 \\ 0 & \cos\beta - i\sin\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\beta} & 0 \\ 0 & e^{-i\beta} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{19}$$

となり、水平、垂直直線偏光に位相差を与えた後に、回転する形式になっている。入り口で光軸に平行（か垂直）な光を入れれば、直線偏光が θ だけ回転して出射することになる。

TN 液晶では、光の振動面が捻れにそって回転すると書いてある解説書もあるが、それは、この状態のことを示している。しかし、この状態となるためには、$\Delta nd >> \lambda$ である（モーガンリミット）必要があるが、通常の TN セルではセル厚が $5\mu m$ で、Δn は 0.1 程度なので、モーガンリミットはまったく成立していない。光が捻れにそって回転するという描像は普通の TN に対しては、正しくはないのである。

3.4　ジョーンズ行列による計算の適用範囲

ジョーンズマトリックスは、機械的な計算により光学素子を通過した後の偏光状態変化を計算できる手法であるが、ジョーンズベクトルが偏光しか扱えないために、偏光度の変化などは扱えないという制約がある。それ以外にも、幾つかの制約があるので、以下にジョーンズ行列による計算の制限事項をまとめておく。

物質の均一性　ジョーンズマトリックスで表現できる光学素子は均一の特性を持っている必要がある。回折格子のように入射方向に垂直な面内で構造を持っているような光学素子のジョーンズマトリックスを作ることは出来ないので、これらの光学素子が関与する現象は扱えない。

なお、回折格子（や虫の羽根の凸凹）のような構造は、ミュラーマトリックスや、後述の４×４マトリックス法でも取り扱いが出来ず、空間を 3 次元的なメッシュで区切って、マクスウェル方程式を数値的に解く FTDT(Finite-difference time-domain method) 法を持ち出す必要がある。

光軸方向　ジョーンズマトリックスによる計算では光学素子の軸は光の進行方向に対して垂直な面内にあることが暗黙に前提されている。このため光軸が傾いている場合には、XY 面内に射影した屈折率の値から計算をすることになる。それで問題を起こさない場合が多いとは思うが、全ての場合に、それで大丈夫かは疑問のあるところである。

旋光性のある複屈折物質　旋光性のある複屈折物質のジョーンズ行列がどのようなものになるのか、ちょっと見当がついていない。

入射角　ジョーンズマトリックスの計算は、垂直入射を前提としている。垂直入射以外の計算をしたい場合には、拡張ジョーンズマトリックス法（名前は聞いたことがあるが、どうやるかはきちんと調べていない。）を使うか、後述の４×４マトリックス法を使う必要がある。

多重反射　ジョーンズマトリックスは、入射側から逐次偏光変化を計算していく手法であるため、多重干渉を考えなければならないような状況には使えない。液晶関連では、コレステリック液晶の特性反射の計算はジョーンズマトリックスでは不可能である。

多重反射を扱うためには、入射側から進行する光に加えて、反射して戻ってくる光も計算に取り入れる必要がある。この手法は４×４マトリックス法として知られている。４×４マトリックス法は、斜入射にも対応するし、また、試料の光軸が任意の方向を向いていても問題なく計算できる。その代わり、計算手順はジョーンズマトリックスに比べて、だいぶめんどくさくなる。また、ジョーンズマトリックスでは、光が一方通行であるため、計算途中の任意の場所での偏光状態を確認できるが、４×４マトリックスの行列は、全てを掛け合わせた場合にのみ多重反射の影響を正しく評価できるので、マトリックス計算の途中をつかって、セル中の偏光状態を確認するようなことは出来ない。