

均一な複屈折物体をクロスニコルに挟んだ時の透過スペクトルは手作業で計算できるが、TN 液晶のように膜厚方向で屈折率の主軸方位が変化するようなもの透過スペクトルは手作業ではとても計算できない。幸いなことに、今日ではクロスニコル間の TN 液晶の透過スペクトルも、フリーのプログラム言語で記述した簡単なプログラムをパーソナルコンピュータで走らせれば、あっという間に結果を得られるようになっている。この章では、まず、TN 液晶のように干渉がなく透過成分のみを考慮すればよい複屈折物質についての取り扱いを紹介し、その後、等方性物質での干渉の扱い、そして、コレステリック液晶の特性反射などの異方性物質で干渉が生じる場合の計算手法を紹介する。

ここで紹介する計算手法は、均一な面が積重なった構造を前提とした手法である。均一な面は仮想的なもので、コレステリック液晶なら屈折率異方性のある薄層が主軸方向が回転しながら積層していくモデルでよい\*1。しかし、面内で屈折率が不均一に分布するような媒体、具体的にはブルー相のように 1 つの平面内でも異方性の分布があるような構造の場合は、この章で紹介する手法は活用出来ない。そのような構造に関しては、空間を分割して、マクスウェル方程式の時間発展を境界条件の制限下で計算する計算手法 (FDTD 法) を用いる必要がある。

## 1 ジョーンズベクトルとストークスパラメータ

複屈折物体による偏光変化を計算するためには、任意の偏光状態を数学的に記述する必要がある。そのための手法としてジョーンズベクトルとストークスパラメータがある。

Z 軸方向に進行する偏光は、x 成分と y 成分に分離して以下のように記述できる。

$$E_x(t) = E_x e^{i(\omega t - kz + \phi_x)}$$

$$E_y(t) = E_y e^{i(\omega t - kz + \phi_y)}$$

これを行列で書き起こして、

$$E = \begin{pmatrix} E_x e^{i\phi_x} \\ E_y e^{i\phi_y} \end{pmatrix} e^{i(\omega t - kz)} = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y e^{i\delta\phi} \end{pmatrix} e^{i(\omega t - kz)}$$

時間依存項を外した

$$E_J = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y e^{i\delta\phi} \end{pmatrix} \tag{1}$$

---

\*1 薄層の設定値が厚すぎると残念な結果が得られるし、薄くしすぎると必要以上に計算時間が必要とはなる。

が一般的なジョーンズベクトルである\*2。この時の光の強度は

$$I = E_x E_x^* + E_y E_y^*$$

により求められる。光強度の計算から分かるように、ジョーンズベクトルは電場の振幅を扱っている。また、両軸で同じ周波数で振動する波動のみを扱っているので、合成された波動は直線、楕円、円のいずれかの完全な偏光となる。ジョーンズベクトルでは自然光や部分偏光は扱えない。なお、ジョーンズベクトルを使う計算では、入射光として光強度が1に規格化されたものを使うのが一般的である。

ジョーンズベクトルには偏光状態に関する完全な情報が含まれているが、直線偏光や円偏光となるような特別な場合を除いては、どのような偏光状態になっているかを直感的には理解しにくい。しかし、ジョーンズベクトルには偏光状態に関する全情報が含まれているので、計算により楕円偏光の長軸方位と楕円率を求めることができる。導出過程は省略するが\*3、x軸とy軸の電場強度  $E_x$ 、 $E_y$  と、それぞれの成分の位相  $\delta_x$ 、 $\delta_y$  とを用いて、楕円軸方位  $\alpha$  と楕円偏光の長軸  $a$  と短軸  $b$  の比率である楕円率  $b/a$  は以下の式により計算できる。

$$R = \left| \arctan \frac{E_y}{E_x} \right|$$

$$\Delta\delta = \delta_y - \delta_x$$

$$\alpha = \frac{1}{2} \arctan(\tan 2R \cos \Delta\delta) \quad (2)$$

$$\beta = \frac{1}{2} \arcsin(\sin 2R |\sin \Delta\delta|)$$

$$\frac{b}{a} = \tan \beta \quad (3)$$

ストークスパラメータは以下の4つの要素をもった数値の組み合わせで、書籍により、要素の記号として、 $I$ 、 $Q$ 、 $U$ 、 $V$ 、を用いているものと、 $S_0$ 、 $S_1$ 、 $S_2$ 、 $S_3$ 、という表記を用いているものがある。

$$\begin{pmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_0 \\ S_1 \\ S_2 \\ S_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_x + I_y \\ I_x - I_y \\ I_{+45} - I_{-45} \\ I_{RC} - I_{LC} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_a \\ I_a \cos 2\theta \\ I_a \sin 2\theta \cos \Delta \\ I_a \sin 2\theta \sin \Delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_x^2 + E_y^2 \\ E_x^2 - E_y^2 \\ 2E_x E_y \cos \Delta \\ 2E_x E_y \sin \Delta \end{pmatrix} \quad (4)$$

\*2 名称は発明者による。

\*3 ルケオの技術資料に、栗田進横浜国大名誉教授による詳し説明がある。

$S_0$  は全光強度で 0 以上の正の値である。 $S_1$  は水平、垂直方向の直線偏光成分で、完全な水平直線偏光で  $S_0$  に等しく、完全な垂直直線偏光で  $-S_0$  となる。 $S_2$  は斜め  $45^\circ$  方向の直線偏光成分で  $S_0$ 、完全な  $135^\circ$  直線偏光で  $-S_0$  となる。 $S_3$  は円偏光の成分で、完全な右円偏光で  $S_0$ 、左円偏光で  $-S_0$  となる。 $S_1, S_2, S_3$  が 0 の場合は、その偏光成分が含まれていないことを意味する。ジョーンズベクトルが電場強度を扱っているのに対して、ストークスパラメータは光強度を対象としている。

ストークスパラメータでは、完全な偏光だけでなく部分偏光や無偏光状態も記述出来る。ストークスパラメータで完全偏光の場合は  $S_0^2 = S_1^2 + S_2^2 + S_3^2$  となるが、完全な無偏光の場合には  $S_1 = S_2 = S_3 = 0$  であり、これらの自乗和は  $S_0^2$  にはならない。部分偏光の場合は、 $S_0^2 > S_1^2 + S_2^2 + S_3^2$  となる。そこで、ストークスパラメータを完全偏光の部分と無偏光状態の部分に切り分けて、偏光の割合を  $P$  とおき、

$$S = \begin{pmatrix} S_0 \\ S_1 \\ S_2 \\ S_3 \end{pmatrix} = (1 - P) \begin{pmatrix} S_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + P \begin{pmatrix} S_0 \\ S_1 \\ S_2 \\ S_3 \end{pmatrix} \quad (5)$$

とすれば、任意の偏光度を表記出来る。偏光度  $P$  は 4 つのパラメータの測定値より

$$P = \frac{\sqrt{S_1^2 + S_2^2 + S_3^2}}{S_0} \quad (6)$$

と求められる。

表 1 にいくつかの特徴的な偏光状態の規格化されたジョーンズベクトルとストークスパラメータを示す。繰返しになるが、右円偏光と左円偏光のジョーンズベクトルは光学屋流儀に従った物で、物理屋流儀では、それぞれ以下のようなになる。

$$E_{RCP} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \quad \text{右円偏光 (物)}$$

$$E_{LCP} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad \text{左円偏光 (物)}$$

偏光状態	ジョーンズベクトル	ストークスパラメータ
水平直線偏光	$E_{LHP} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$	$S_{LHP} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$
垂直直線偏光	$E_{LVP} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$	$S_{LVP} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$
斜め 45 度直線偏光	$E_{L45P} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$S_{L+45P} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$
斜め 135 度直線偏光	$E_{L-45P} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$	$S_{L-45P} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$
右円偏光	$E_{RCP} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$	$S_{RCP} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
左円偏光	$E_{LCP} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$	$S_{LCP} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$

表 1: 種々の偏光を示す規格化されたジョーンズベクトルとストークスパラメータ

## 1.1 計算の方法

ジョーンズマトリックスは 2 行 1 列、ストークスパラメータは 4 行 1 列の行列なので、入射光と出射光を結びつけるには、それぞれ、 $2 \times 2$  か  $4 \times 4$  の行列が必要となる。こ

れらはそれぞれ、ジョーンズマトリックス、ミューラーマトリックスと呼ばれている。通常用いられるような光学素子の行列要素は知られている。以下、よく用いられる素子の行列を示す。

水平直線偏光子

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

$$M_{LHP} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

垂直直線偏光子

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

$$M_{LVP} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

±45度の直線偏光子

$$J_{LP(\pm 45)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \pm 1 \\ \pm 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$M_{L\pm 45P} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \pm 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

透過軸方位  $\theta$  の直線偏光子

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

$$M_{POL(\theta)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \cos 2\theta & \sin 2\theta & 0 \\ \cos 2\theta & \cos^2 2\theta & \sin 2\theta \cos 2\theta & 0 \\ \sin 2\theta & \sin 2\theta \cos 2\theta & \sin^2 2\theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

光軸方位  $\theta$  の 1/2 波長板

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

$$M_{HW} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos 4\theta & \sin 4\theta & 0 \\ 0 & \sin 4\theta & -\cos 4\theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

光軸方位  $\theta$  の 1/4 波長板

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

$$M_{WP(\theta)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos^2 2\theta & \sin 2\theta \cos 2\theta & \sin 2\theta \\ 0 & \sin 2\theta \cos 2\theta & \sin^2 2\theta & -\cos 2\theta \\ 0 & -\sin 2\theta & \cos 2\theta & 0 \end{pmatrix}$$

位相差  $\delta$ 、光軸方位  $\theta$  の波長板

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

$$M_{WP(\theta)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos^2 2\theta + \cos \phi \sin^2 2\theta & (1 - \cos \phi) \sin 2\theta \cos 2\theta & \sin \phi \sin 2\theta \\ 0 & (1 - \cos \phi) \sin 2\theta \cos 2\theta & \sin^2 2\theta + \cos \phi \cos^2 2\theta & -\sin \phi \cos 2\theta \\ 0 & -\sin \phi \sin 2\theta & \sin \phi \cos 2\theta & \cos \phi \end{pmatrix}$$

## 2 計算手法

入射光のジョーンズベクトルかストークスパラメータを設定し、それに光学素子に対応するマトリックスを掛ければ光学素子による偏光状態変化が求められる。まずはジョーンズマトリックスを使って、軸方位が  $\theta$  傾いた偏光子に水平偏光を入れた時の透過光を求めてみよう。

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

透過光強度を求めるには、ここからの計算が必要になる。

$$I = (\cos^2 \theta)^2 + \cos^2 \theta \sin^2 \theta = \cos^2 \theta (\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) = \cos^2 \theta$$

この計算例では実数の行列要素しか出ていないが、位相差板を含む計算では行列要素と出射光には複素数の成分が含まれることになる。複素数を含む行列計算可能なソフトウェアを用いれば、そのような場合でも、普通のかけ算のような簡単な表記で計算を実行できる\*4。

出てきた結果はおなじみのものである。軸方位と楕円率は  $E_x$  と  $E_y$  の値より

$$R = \left| \arctan \frac{E_y}{E_x} \right| = \arctan \frac{\cos \theta \sin \theta}{\cos^2 \theta} = \theta$$

$$\Delta \delta = \delta_y - \delta_x = 0$$

よって軸方位  $\alpha$  は

$$\alpha = \frac{1}{2} \arctan(\tan 2R \cos \Delta \delta) = \theta$$

と、偏光子の透過軸方位となり、楕円率は

$$\beta = \frac{1}{2} \arcsin(\sin 2R |\sin \Delta \delta|) = 0$$

$$\frac{b}{a} = \tan \beta = 0$$

より 0 となり完全な直線偏光であることが分かる。同じ状況についての計算をストークスパラメータとミュラーマトリックスで行うと

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos 2\theta \\ \cos 2\theta + \cos^2 2\theta \\ \sin 2\theta + \sin 2\theta \cos 2\theta \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \cos 2\theta & \sin 2\theta & 0 \\ \cos 2\theta & \cos^2 2\theta & \sin 2\theta \cos 2\theta & 0 \\ \sin 2\theta & \sin 2\theta \cos 2\theta & \sin^2 2\theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

となる。角度依存性を図 1 にプロットした。全光強度の  $S_0$  はジョーンズの計算と同様に  $\cos^2 \theta$  で変化する。 $S_1$  が  $45^\circ$  で 0 になりそれ以上の角度で負になる。 $90^\circ$  で 0 になるのは全透過光強度が 0 になるためである。 $S_2$  は  $45^\circ$  方向の成分だが、偏光子が  $45^\circ$  未満で最大になっている。これは、偏光方向変化と全光強度のバランスで定まっている。 $S_3$  はプロットしていないが全角度で 0 であり円偏光成分が生じていないことが確認できる。

上の計算例では、手作業で簡単に結果がでるようなものを、大げさに行っているような印象を受けるかもしれない。確かにその通りなのだけれど、これらの計算手法の利点は、複数の光学素子が重なって、手計算をやりたくない状況に至っても、それぞれの光学素子の行列を掛け合わせていくだけで、悩むことなくきちんと答に行き着くことである。特に

\*4 このような計算が出来るフリーな言語に Scilab がある。もちろん、Scilab 以外にも複数のフリーな言語がある。

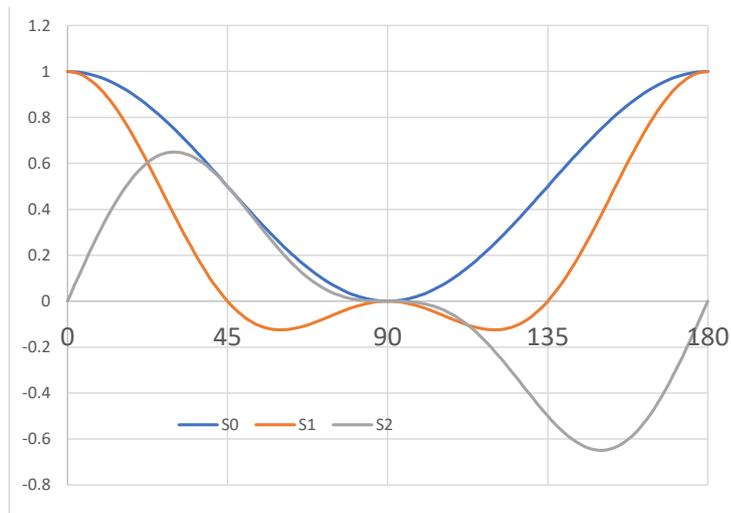


図 1: 直線偏光子を回した場合のストークスパラメータ変化

複素数の行列が扱えるコンピュータ言語を用いた数値計算とは相性がよい。

続いて、OPD=400nm の位相差板の光軸が入射偏光軸に対して、45° 傾いている場合と 22.5° 傾いている場合の出射偏光の波長依存性を求めてみよう。OPD は一定値なので、透過後の位相差は波長に依存し、入射光が 400nm で 1 波長分、約 533nm で 3/4 波長分、800nm で 1/2 波長分となる。図 2 に位相差板の軸方位が 45° の場合に、楕円長軸方位と楕円率（左）、ストークスパラメータの  $S_1$ 、 $S_2$ 、 $S_3$ （右）を示した。楕円の長軸方位は約 533nm で 0° から 90° に不連続に変化する。図から分かるように、もとの直線偏光は長軸方位を変えないまま膨らんでいき、533nm で円偏光となり、それより長い波長で軸方位が 90 度回転した楕円偏光となっている。ストークスパラメータは水平方向の偏光直線成分を示す  $S_1$  が 1 から低下し、円偏光になった時点で 0 となり、それ以降は垂直偏光成分が強くなるので負値となり、800nm では完全な垂直偏光の -1 となる。円偏光の程度を表す  $S_3$  は 400nm と 800nm の両端で 0 で約 533nm で完全な円偏光を示す 1 となる。斜め 45° の直線偏光成分を示す  $S_2$  は波長に依らず 0 である。

つづいて図 3 に位相差板の光軸が 22.5° の場合の透過偏光を示した。挿入角度が 45° の場合とは異なり楕円の長軸方向は 400nm から 800nm にかけて連続変化していく。800nm での軸方位は 45° であるが、この波長で位相差は  $\lambda/2$  なので、偏光と位相差板の光軸の 2 倍の角度回転している。位相差板の角度が 45° の時に楕円率が 1 になったのと同じ約 533 nm で楕円率が最大となっているが、0.4 程度の値であり、かなり細長い楕円となっている。下段の中央にこのときの状態を示した。ストークスパラメータは  $S_1$  が 1

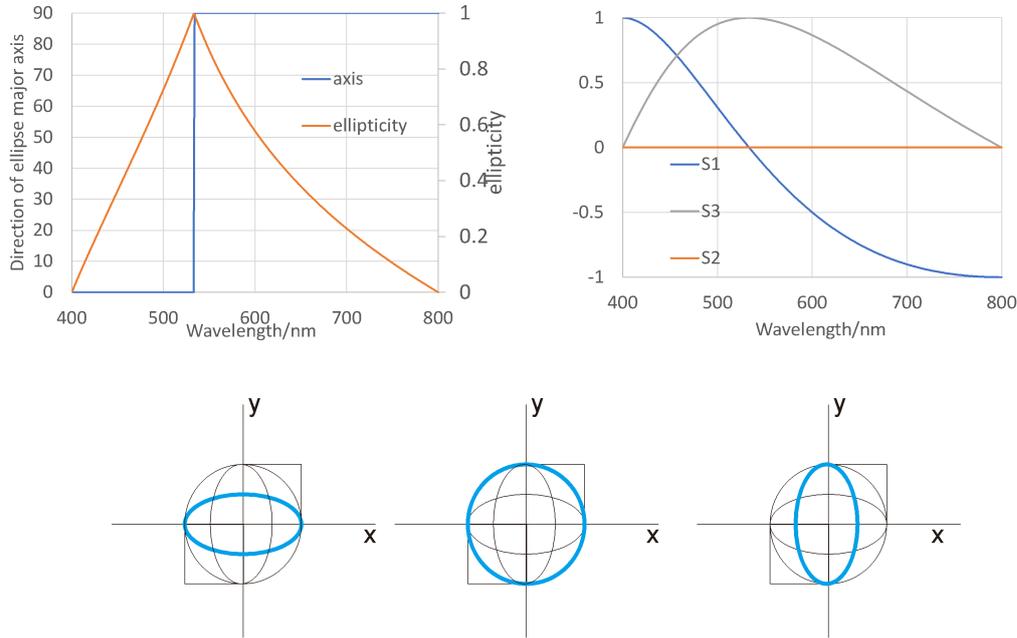


図 2: OPD=400nm の位相差板を軸方位 45° で挿入した場合の出射偏光の波長分散。左が光軸方位と楕円率、右がストークスパラメータ。下段は中間での偏光状態

から 0 へと変化していく一方で、 $S_2$  は 0 から 1 への変化となっている。 $S_3$  は途中で最大値をとるが、もちろん 1 には届かない値である。

この計算では出射光の偏光状態を見るために、位相差板のみを通してはいるけれども、クロスニコルでどのような透過光があるのかを知りたかったら、垂直直線偏光子のマトリックスを追加すればよい。ジョーンズマトリックスでは、

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} + i \sin \frac{\phi}{2} \cos 2\theta & i \sin \frac{\phi}{2} \sin 2\theta \\ i \sin \frac{\phi}{2} \sin 2\theta & \cos \frac{\phi}{2} - i \sin \frac{\phi}{2} \cos 2\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ i \sin(\phi/2) \sin(2\theta) \end{pmatrix}$$

であり、光強度は

$$I = E_x^2 + E_y^2 = \sin^2(\phi/2) \sin^2 2\theta$$

と求められる。この結果はジョーンズマトリックスを用いずに、固有偏光の重ね合わせから求めたものと同じで、この結果を得るために、わざわざジョーンズマトリックスを持ち出す必要性をあまり感じないものである。しかし、次に示す、光軸角度が異なる位相差板を組み合わせた場合や、TN 液晶のように、光軸が連続変化していく場合には、ジョーンズマトリックスやミュラーマトリックスを用いた計算が威力を発揮する。

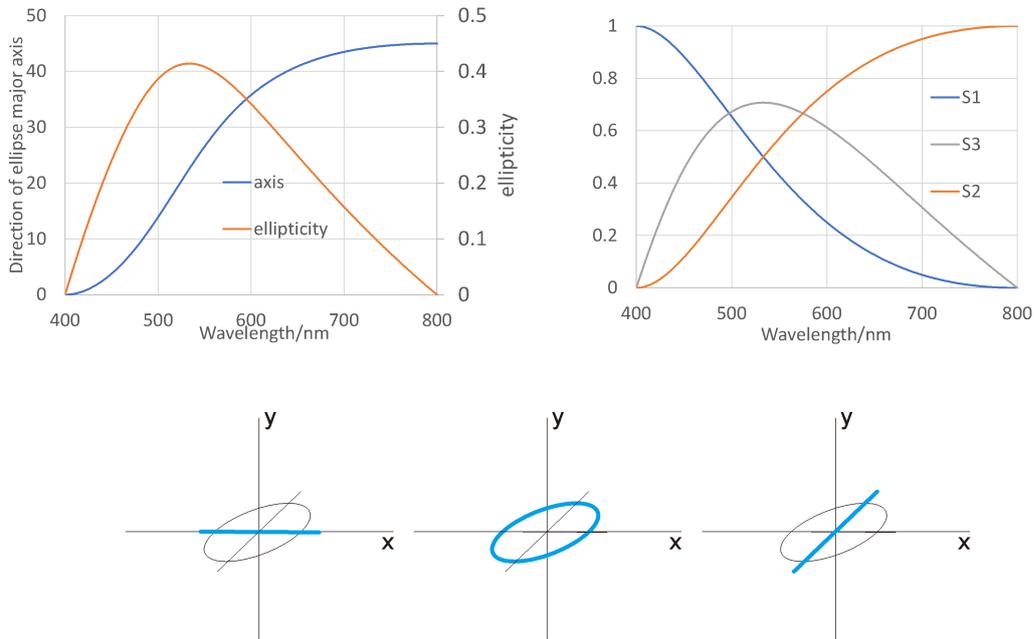


図 3: OPD=400nm の位相差板を軸方位 22.5° で挿入した場合の出射偏光の波長分散。左が光軸方位と楕円率、右がストークスパラメータ。下段は中間での偏光状態

## 2.1 位相差板を光軸をずらして積層した場合の透過光強度

セロテープを 2 枚貼った上に、方位を 30° ずらしてもう一枚のセロテープを貼ったものをクロスニコル下で観察した様子を図 4 に示す。0° では、2 枚重ねの部分には偏光子に平行であるため偏光色には寄与せず、30° 傾いた 1 枚の部分のみが光を透過している。試料を回転していくと 2 枚重ねの部分も偏光色が見えてくる。同時に 1 枚の部分も角度が変化するので明暗変化がおこり、両者が重なった部分は両方の影響で明るさと色味が変化していく。図 5 に実測データ (A) とジョーンズマトリックスによる計算結果 (B) を示す。OPD の値などは正確にそろえておらず、また実測の角度もかなり誤差を含んだものであることを考えると、両者はよく一致している。

## 2.2 ツイステッドネマチック液晶の扱い

ツイステッドネマチック (TN) 液晶では、セルの上下界面で分子長軸方向が 90° 異なり、セル中では長軸方向は連続的に回転している。このような状態を扱う場合は、セルを均一な配向を持った薄層が配向方向を僅かに変えながら積層しているとしてモデル化を行

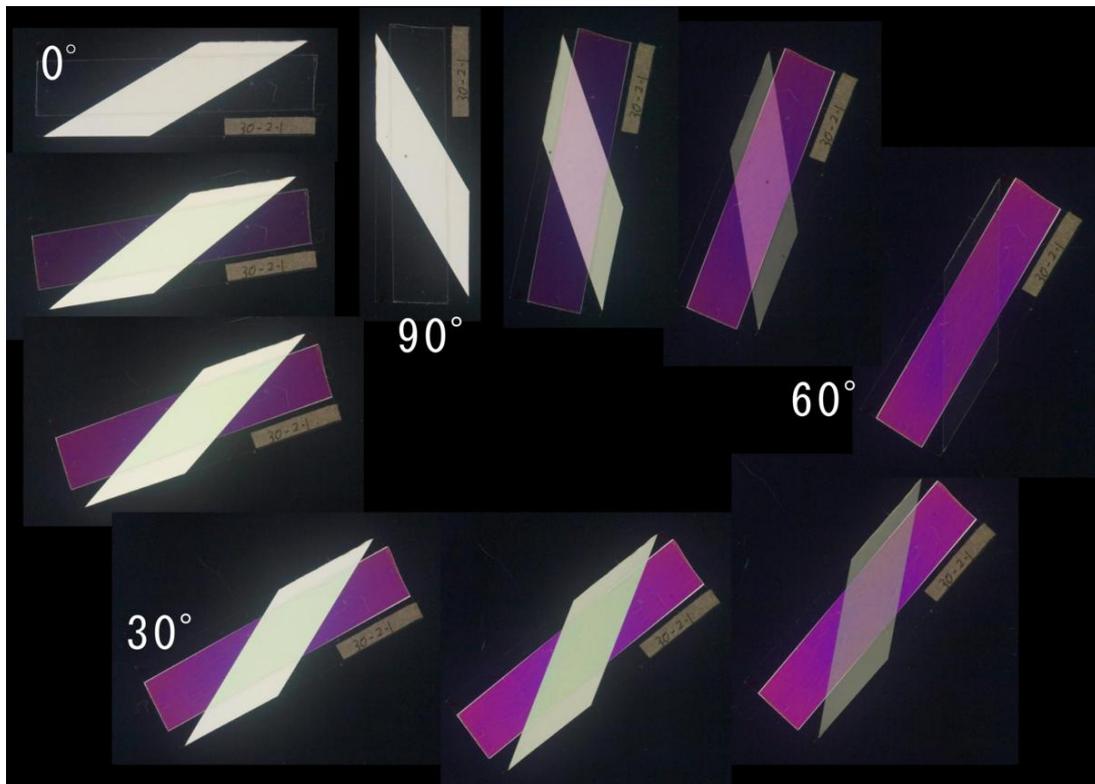


図 4: セロテープを 2 枚重ねた上に、軸方位を  $30^\circ$  ずらしてもう 1 枚のセロテープを貼った試料をクロスニコルで観察した画像。試料の方位を  $10^\circ$  で変化している。

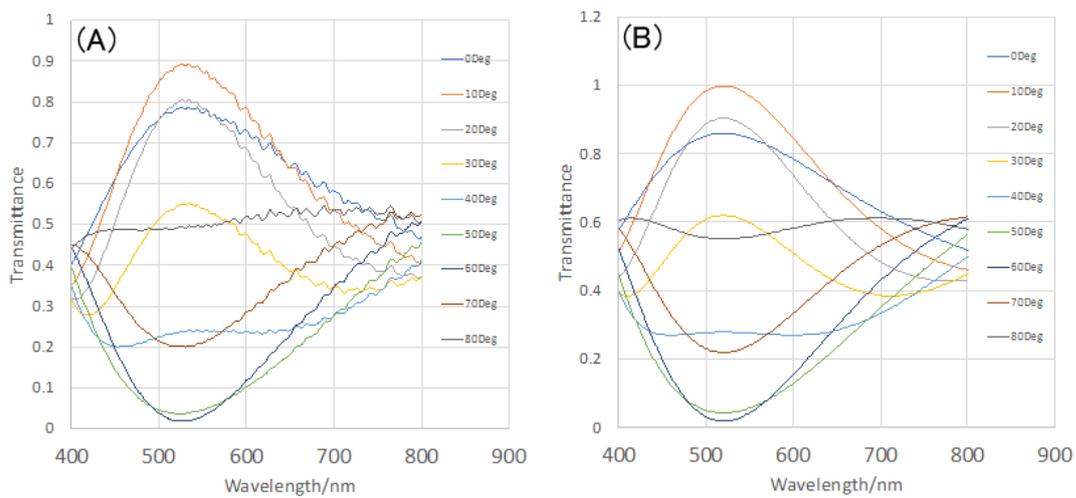


図 5: セロテープを 2 枚重ねた上に、軸方位を  $30^\circ$  ずらしてもう 1 枚のセロテープを貼った試料のクロスニコル条件での透過スペクトルの角度依存性。(A) が実測で、(B) はジョーンズマトリックス計算によるスペクトル。両者はよく一致している。

う。TN 液晶の場合は、薄層の厚さを無限小にした極限の全体のジョーンズマトリックスの式は解析的な手法により求められることが知られている\*5。

しかし、そうした数学的な技法を知らなくても、十分に薄い層を積み重ねたモデルを用いてジョーンズマトリックス計算を機械的に行えば同等の結果が得られる。考え方は単純で、TN のモデル化をするときに、90° のねじれを分割する層数を増減してみて、結果が変わらないレベルにあれば、実質的に問題がないと判断できる。かつて、計算機の能力が今ほど高くなかった時代には、計算機の能力を無駄遣いするような試行は好ましくなかったかもしれないが、現在では TN のジョーンズ計算は、分割数を無駄に増やしすぎない限りは普通のノートパソコンで、ほぼ待ち時間なく終わるものなので、いろいろと試して納得できる条件を経験的に得ることができる。

TN 液晶の具体的な計算では、配向ベクトルは基板に平行で、下界面で 0°、上界面で 90° を向いており、セルの厚み方向で、均一にねじれているとして、厚み方向で、層内では配向ベクトルが均一に配向しており、隣接層間では配向ベクトル方向が、全体として 90° のねじれになるようにずれた角度で積層しているものとして、各層のジョーンズベクトルを決定する。セル厚を  $d$ 、仮想的なセルの分割数を  $m_d$  とすれば、仮想的な層の厚みは  $d/m_d$  で、液晶の複屈折を  $\delta n$  とすると、波長  $\lambda$  の光の層あたりの位相差は  $\phi = 2\pi d\delta n/m_d\lambda$  である。下から  $m$  番目の層の軸方位は  $\theta = (\pi/2)(m/m_d + 1)$  で与えられるので、この層のジョーンズマトリックスは

$$J_m = \begin{pmatrix} \cos \frac{\pi d\delta n}{m_d\lambda} + i \sin \frac{\pi d\delta n}{m_d\lambda} \cos \frac{\pi m}{m_d+1} & i \sin \frac{\pi d\delta n}{m_d\lambda} \sin \frac{\pi m}{m_d+1} \\ i \sin \frac{\pi d\delta n}{m_d\lambda} \sin \frac{\pi m}{m_d+1} & \cos \frac{\pi d\delta n}{m_d\lambda} - i \sin \frac{\pi d\delta n}{m_d\lambda} \cos \frac{\pi m}{m_d+1} \end{pmatrix} \quad (7)$$

となる。あとは行列を順に入射光にかけ合わせればよい\*6。

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = (J_{m_a})(J_{m_a-1})\dots\dots(J_2)(J_1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \prod_{m=m_a}^1 (J_m) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (8)$$

この計算により 1 つの波長  $\lambda$  に対する偏光計算が出来る。後は必要な波長範囲の計算を繰返せばよい。この結果に軸方位が水平、または垂直の偏光子のジョーンズマトリックスを作用させて絶対値の 2 乗を取れば透過光強度が求められる。

図 6 に透過光強度の計算結果を示す。セル厚は 5 ミクロン、複屈折は 0.1 に設定している。クロスニコルでの透過光は 570nm 付近で、ほぼ 1 となっており、セルにより入射直

\*5 赤羽先生の液晶学会解説を参照のこと。

\*6 この書き方だと、入射光に次々と行列をかけていくことになるけれども、行列は結合法則が成立しているので、行列の順番の掛け合わせを行ってから、入射光に作用させるのでよい。

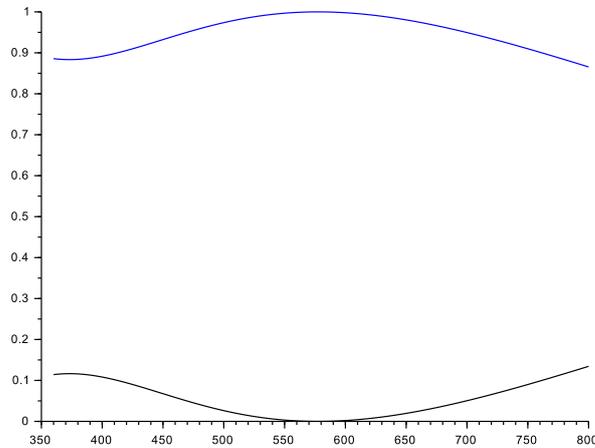


図 6: TN の計算例。透過率が 1 に近い方が、クロスニコルでの透過光で、0 に近い方が、パラニコルでの透過光。

線偏光の向きが配向ベクトルのねじれにそって  $90^\circ$  回転するという TN 型液晶の一般的な説明に合致するような結果となっている。この説明が正しいなら、セルの真ん中あたりの偏光状態は、入射偏光に対して  $45^\circ$  回転した直線偏光となっているはずである。ジョーンズマトリックスの計算では、 $90^\circ$  の TN を計算した条件から、セル厚を半分に減らし、ねじれも  $45^\circ$  とすれば、TN 型セルの真ん中での偏光状態を取り出すことができるので、どのような偏光状態になっているか計算できる。計算結果を図 7 に示した。出射偏光を見ると、 $570\text{nm}$  付近で、ほぼ  $90^\circ$  方向の直線偏光になっており、他の波長でも楕円率はそれほど高くはない。一方、セル中央の偏光状態を見ると、軸方位の  $45^\circ$  からのずれ幅は大きく、また軸方位が  $45^\circ$  の場合でも楕円率は 0.5 程度の楕円偏光となっており、直線偏光とは大きく異なった状況となっている。

つづいて、セル厚を  $50\mu\text{m}$  とした場合の計算結果を図 8 に示す。TN 型セルでは楕円偏光の軸は  $90^\circ$  付近で波打っており、楕円率もほぼ 0 になっている。そしてセル中央でも、楕円の軸方位は  $45^\circ$  を中心に狭い範囲で波打つのみで、楕円率もほぼ 0 で、通常言われている TN 型セルの挙動が再現されている。ここでは 2 つの厚さのみの結果を示しているが、セル厚を変えた計算を行えば、挙動がどのように変化していくかを容易に確認できる。

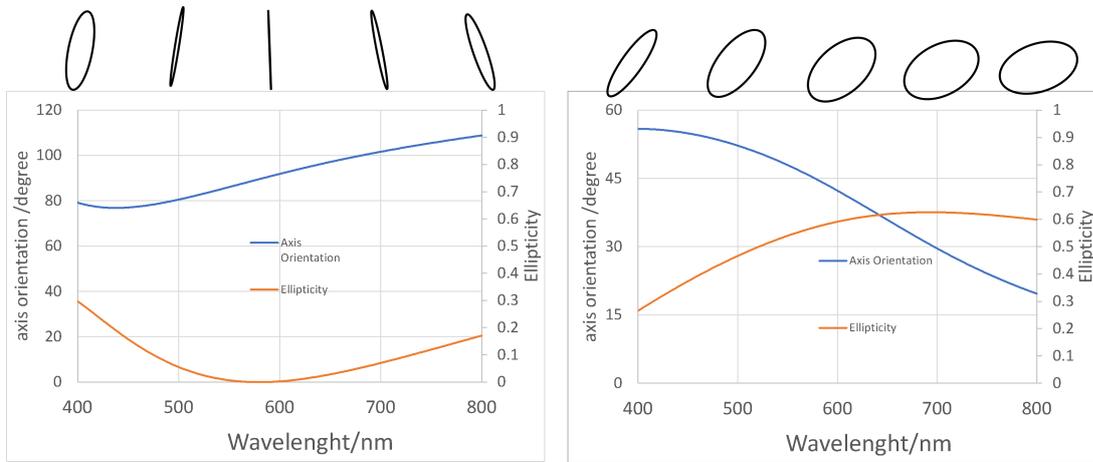


図 7: セル厚  $5\mu\text{m}$  のセルでの計算結果。左: TN セルでセル透過後の偏光状態。主軸の方位と楕円率。右: セルの真ん中での偏光状態。楕円の主軸は  $45^\circ$  に近い角度であるが、楕円率は大きく、とても直線偏光が回転しているとはいえないような状況になっている。上には各波長での偏光状態を図示している。

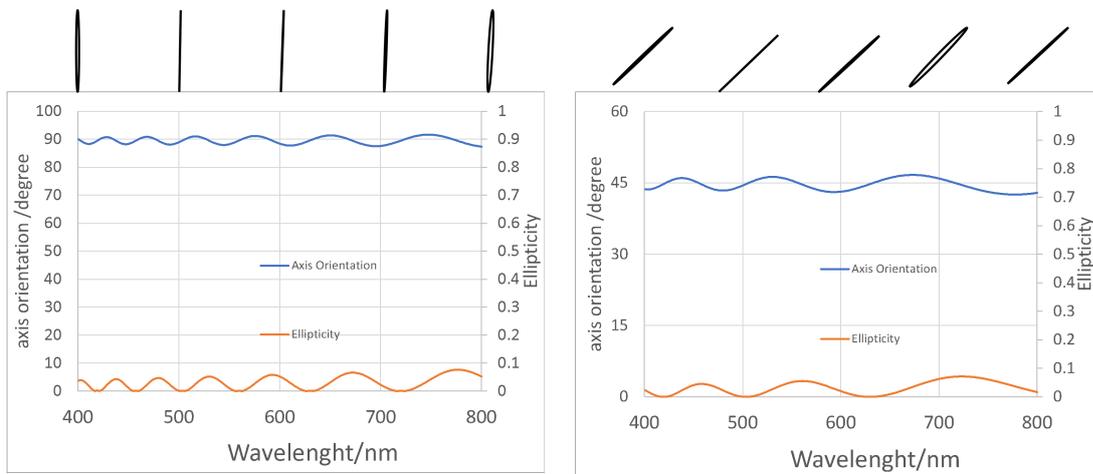


図 8: セル厚  $50\mu\text{m}$  のセルでの計算結果。左: TN セルでセル透過後の偏光状態。主軸の方位と楕円率。右: セルの真ん中での偏光状態。楕円の主軸は  $45^\circ$  に近い角度で楕円率も小さく、直線偏光が回転している描像と一致している。上には各波長での偏光状態を図示している。

### 2.3 ジョーンズマトリックスを用いたコレステリック液晶の計算

ジョーンズマトリックスの計算では、ある段階までマトリックスを作用させた結果は、その後の計算には依存していない。そのため、上の TN 型の例のようにセルの中央での偏光状態を確認することも可能である。通常の TN セルではこれで問題がないのだけれ

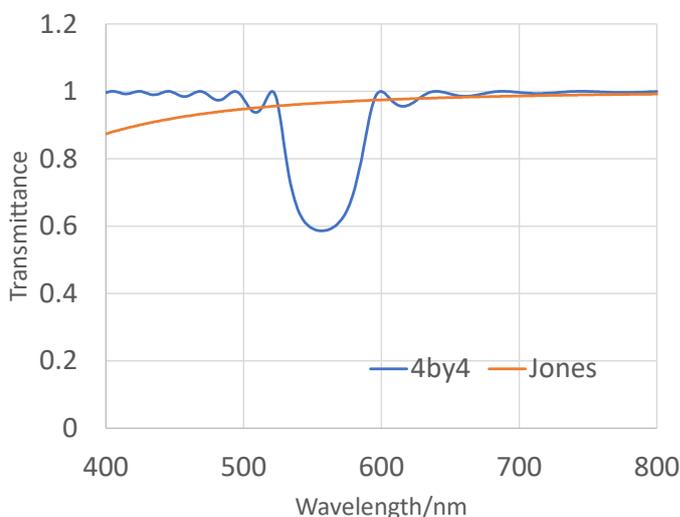


図 9: セル厚  $50\mu\text{m}$  のセルでの計算結果。左: TN セルでセル透過後の偏光状態。主軸の方位と楕円率。右: セルの真ん中での偏光状態。楕円の主軸は  $45^\circ$  に近い角度で楕円率も小さく、直線偏光が回転している描像と一致している。上には各波長での偏光状態を図示している。

ども、ねじれがきつくなって、周期が計算対象となる波長域となった場合には問題が発生する。具体例を挙げるとコレステリック液晶の選択反射で、コレステリック液晶はらせん周期と屈折率で定まる光学的ならせん周期に等しい波長の光を反射する<sup>\*7</sup>。このような場合、セルの中央の状態を考えようとすると、入射側からの光に加えて、出射側から反射してきた戻り光も含めて考えなければならないので、上の計算例のように、途中までの計算結果を使うことはできない。そもそも、ジョーンズやミュラーマトリックスの計算は進行波のみ考えているので、特性反射のように反射波が重要な役割を果たす状況は計算できない。

図 9 にらせん周期 (1 周期)  $360\text{nm}$ 、長軸屈折率 1.6、短軸屈折率 1.5、らせん巻き数 16 のコレステリック液晶について、ジョーンズマトリックスと  $4 \times 4$  マトリックス法で透過スペクトルを計算した結果を示す。 $4 \times 4$  マトリックス法については改めて説明するが、干渉性の反射光も含めた計算手法である。ジョーンズマトリックスの計算結果では特別の構造のない単調な結果が得られているのに対して、 $4 \times 4$  マトリックス法の計算結果は  $550\text{nm}$  付近に窪みが見られる。このくぼみの部分では入射側に裏返しの反射 (選択反射) が生じている。図が明白に示しているように、ジョーンズマトリックスでは選択反射は取

<sup>\*7</sup> より厳密には、らせんの掌性と同じ掌性の円偏光をなどと言わなければならないのだけれど、それは別途扱う。

り扱えないのである。続いて、 $4 \times 4$  マトリックス法の説明に移りたいのだけれども、その前に、等方性物質の干渉性の膜構造の扱いを眺めておくことにしよう。

### 3 等方的単層薄膜の干渉

均一な薄膜を光が透過するとき、薄膜の入射面での反射光と出射面での反射光が干渉を起す結果として、着色などの現象が生じる。2層以上の積層膜の場合も、それぞれの界面での反射光が干渉により特徴的な反射/透過スペクトルを示す。

これらの多層膜のスペクトル計算には二つの手法がある。一つは、2つの界面の干渉を無限級数和として求める方法で、多層膜の場合には、一端の2層の計算を行った後に、それを用いて次の層境界との干渉を無限級数和として求めることを逐次行っていく。直観的には悪くはないが、界面の数が増えると、式が長くなり計算が煩雑になる。

もう一つの方法は、それぞれの界面での境界条件から一つの層の上下での関係を定め、その関係を逐次積重ねることにより、多層膜全体としての挙動を求める手法である。この方法では、一つの層の上下での関係を定める時点で、前進波と後退波を含んだ行列を導入し、その行列の積により全体の挙動を定める式を求める。

無限級数和を逐次計算する手法では、 $n$  番目の界面の計算は  $n-1$  番目までの界面の計算結果が存在していないと具体的には行えないが、行列を用いる手法では  $n$  番目の層の両界面での関係は、他の層とは独立に定められる。また、人の手で式を展開していく必要もなく、コンピュータとの相性もよい。

#### 3.1 単一界面の扱い

行列を用いる計算手法では、最終的に積層薄膜全体の光学特性を光学アドミタンスにより書下ろす。真空の光学アドミタンスは

$$Y = (\epsilon_0/\mu_0)^{1/2} = 2.6544 \times 10^{-3} S \quad (9)$$

で、物質の光学アドミタンスは透磁率が1の非磁性物質では複素屈折率を  $\hat{n}$  として

$$y = \hat{n}Y \quad (10)$$

で与えられる。透明な物質への垂直入射では、界面での電場と磁場の条件式より

$$\begin{aligned} E_i + E_r &= E_t \\ H_i - H_r &= H_t \end{aligned} \quad (11)$$

であるが、 $H = yE$  という関係があるので 2 番目の式は

$$y_0 E_i - y_0 E_r = y_1 E_t \quad (12)$$

と変形でき、これら 2 つの式より  $E_t$  を消去すると

$$y_1 (E_i + E_r) = y_0 (E_i - E_r)$$

$$\rho = \frac{E_r}{E_i} = \frac{y_0 - y_1}{Y_0 + y_1} = \frac{n_0 - n_1}{n_0 + n_1} \quad (13)$$

となる。最後の式変形は共通となる  $Y$  の消去と、透明な物質であり消衰係数が 0 で  $\hat{n} = n$  となることを使っている。最後の式は、振幅反射率の式で、これだけだと光学アドミタンスを持出す利点が明確には見えてこないのだが、光学アドミタンスの拡張により、斜入射でも、多層膜でも偏光によらず、振幅反射率は上の式で表記出来るようになる。

### 3.2 透明な単一界面で斜入射の扱い

斜入射光の反射率は偏光方向により反射率は異なる。しかし、斜入射の光学アドミタンスを  $\theta$  をスネルの法則と入射角から求められる屈折角として

$$\eta_p = \frac{y}{\cos \theta} = \frac{nY}{\cos \theta}$$

$$\eta_s = y \cos \theta = nY \cos \theta \quad (14)$$

と再定義すれば、振幅反射率は

$$\rho = \frac{\eta_0 - \eta_1}{\eta_0 + \eta_1} \quad (15)$$

とまったく同形式となる。

### 3.3 単層薄膜の計算

図 10 のような薄膜の内部の光の伝播を考える。光は上から下へと抜けていくものとする。下の界面で

$$E_b = E_{1b}^+ + E_{1b}^-$$

$$H_b = H_{1b}^+ - H_{1b}^- = \eta_1 E_{1b}^+ - \eta_1 E_{1b}^- \quad (16)$$

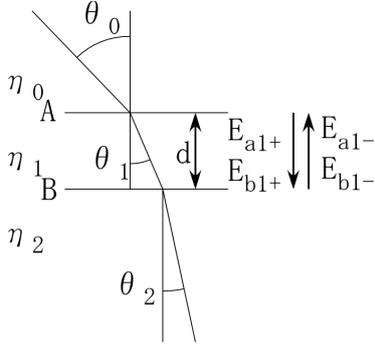


図 10: 薄膜

であり、これより  $E_{1b}^+$  等を  $E_b$  と  $H_b$  で書表わすと、

$$E_{1b}^+ = \frac{1}{2} \left( \frac{H_b}{\eta_1} + E_b \right)$$

$$E_{1b}^- = \frac{1}{2} \left( -\frac{H_b}{\eta_1} + E_b \right)$$

$$H_{1b}^+ = \eta_1 E_{1b}^+ = \frac{1}{2} (H_b + \eta_1 E_b)$$

$$H_{1b}^- = -\eta_1 E_{1b}^- = \frac{1}{2} (H_b - \eta_1 E_b) \quad (17)$$

となる。下の界面と上の界面での電場と磁場は、

$$\delta = \frac{2\pi N_1 d \cos \theta_1}{\lambda} \quad (18)$$

として、 $e^{i\delta}$  変化する。なお、式中の  $\theta_1$  は

$$\hat{n}_0 \sin \theta_0 = \hat{n}_1 \sin \theta_1 = \hat{n}_2 \sin \theta_2 \quad (19)$$

と、屈折の法則から定っている。

光の進行方向を考えると + 符号の項では上側が  $\delta$  だけ進んでおり、- 符号の項では上側が  $-\delta$  だけ遅れていることになるので、

$$E_{1a}^+ = E_{1b}^+ e^{i\delta} = \frac{1}{2} \left( \frac{H_b}{\eta_1} + E_b \right) e^{i\delta}$$

$$E_{1a}^- = E_{1b}^- e^{-i\delta} = \frac{1}{2} \left( -\frac{H_b}{\eta_1} + E_b \right) e^{-i\delta}$$

$$H_{1a}^+ = H_{1b}^+ e^{i\delta} = \frac{1}{2} (H_b + \eta_1 E_b) e^{i\delta}$$

$$H_{1a}^- = H_{1b}^- e^{-i\delta} = \frac{1}{2} (H_b - \eta_1 E_b) e^{-i\delta} \quad (20)$$

となる。そして、

$$\begin{aligned}
 E_a &= E_{1a}^+ + E_{1a}^- = E_b \left( \frac{e^{i\delta} + e^{-i\delta}}{2} \right) + H_b \left( \frac{e^{i\delta} - e^{-i\delta}}{2} \right) = E_b \cos \delta + H_b \frac{i \sin \delta}{\eta_1} \\
 H_a &= H_{1a}^+ + H_{1a}^- = E_b \eta_1 \left( \frac{e^{i\delta} - e^{-i\delta}}{2} \right) + H_b \left( \frac{e^{i\delta} + e^{-i\delta}}{2} \right) \\
 &= E_b i \eta_1 \sin \delta + H_b \cos \delta
 \end{aligned} \tag{21}$$

を行列形式でまとめると\*<sup>8</sup>

$$\begin{pmatrix} E_a \\ H_a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \delta & (i \sin \delta)/\eta_1 \\ i \eta_1 \sin \delta & \cos \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_b \\ H_b \end{pmatrix} \tag{22}$$

となる。この2行2列の行列を特性マトリックスと呼ぶ。ここで、 $Y = H_a/E_a$  を考えると、振幅反射率とエネルギー反射率は

$$\begin{aligned}
 \rho &= \frac{n_0 - Y}{n_0 + Y} \\
 R &= \left( \frac{n_0 - Y}{n_0 + Y} \right) \left( \frac{n_0 - Y}{n_0 + Y} \right)^*
 \end{aligned} \tag{23}$$

となる。この式には  $E_b$  項と  $H_b$  項があり、このままでは  $Y$  を求められないように思うかもしれないが、式の両辺を  $E_b$  で割ると

$$\begin{pmatrix} E_a/E_b \\ H_a/E_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \delta & (i \sin \delta)/\eta_1 \\ i \eta_1 \sin \delta & \cos \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \eta_2 \end{pmatrix} \tag{24}$$

となり、薄膜の下の層の光学アドミタンスが既知なら値は求まる事となる。計算すると

$$Y = \frac{C}{B} = \frac{\eta_2 \cos \delta + i \eta_1 \sin \delta}{\cos \delta + i(\eta_2/\eta_1) \sin \delta} \tag{25}$$

となる。

## 4 等方的多層薄膜の干渉

図11のような3層の膜構造を考える。2番目の層について、先ほど同様に2番目の層について特性マトリックスを考えると、

$$\begin{pmatrix} E_b \\ H_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \delta_2 & (i \sin \delta_2)/\eta_2 \\ i \eta_2 \sin \delta_2 & \cos \delta_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_c \\ H_c \end{pmatrix} \tag{26}$$

\*<sup>8</sup>  $H_a = H_{1a}^+ + H_{1a}^-$  の右辺符号が負ではないかとの疑問を持つ人もいるかと思う。この式は界面での条件ではなく  $H_{1a}^-$  は下の界面で発生した波が伝わってきたものなので足し合わせになっている。

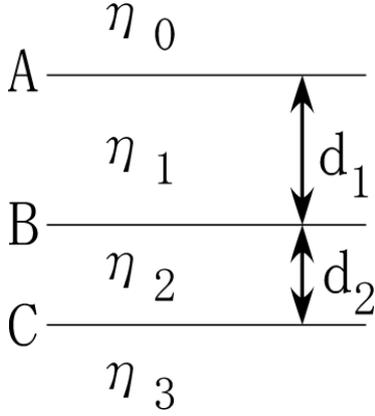


図 11: 3 層膜

となる。さらに、この左辺に先ほどの式を使うと

$$\begin{pmatrix} E_a \\ H_a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \delta_1 & (i \sin \delta_1)/\eta_1 \\ i\eta_1 \sin \delta_1 & \cos \delta_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \delta_2 & (i \sin \delta_2)/\eta_2 \\ i\eta_2 \sin \delta_2 & \cos \delta_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_c \\ H_c \end{pmatrix} \quad (27)$$

となる。この式の両辺を  $E_c$  で割れば、

$$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \delta_1 & (i \sin \delta_1)/\eta_1 \\ i\eta_1 \sin \delta_1 & \cos \delta_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \delta_2 & (i \sin \delta_2)/\eta_2 \\ i\eta_2 \sin \delta_2 & \cos \delta_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \eta_3 \end{pmatrix} \quad (28)$$

$B$  と  $C$  が求まり、膜としての光学アドミタンスが計算できる。あとは、先ほどと同じ式で反射率が計算できる。層数  $m$  の多層膜の場合も

$$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = \left\{ \prod_{r=1}^m \begin{pmatrix} \cos \delta_r & (i \sin \delta_r)/\eta_r \\ i\eta_r \sin \delta_r & \cos \delta_r \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ \eta_{m+1} \end{pmatrix} \quad (29)$$

$$\delta_r = \frac{2pN_r d_r \cos \theta_r}{\lambda}$$

となる。ただし、

$$\begin{aligned} \eta_r &= Y \hat{n}_r \cos \theta_r & (s - Pol) \\ \eta_r &= Y \hat{n}_r / \cos \theta_r & (p - Pol) \end{aligned} \quad (30)$$

で

$$\hat{n}_0 \sin \theta_0 = \hat{n}_r \sin \theta_r = \hat{n}_{m+1} \sin \theta_{m+1} \quad (31)$$

である。

## 5 ソフトウェア

行列を用いた計算手法は、コンピュータの性能向上と行列計算を容易に行えるソフトウェアの出現により、より容易に行えるものとなった。4×4マトリックスでもジョーンズマトリックスでも複素数を要素にする行列の計算が必要であるが、市販ソフトだけでなく、フリーソフトでも、簡単な記述でこれらの計算が出来る物が存在している。ジョーンズマトリックスを使った TN の計算では、セルの下面から上面まで主軸の角度を変えた行列を掛け合わせる必要があるが、この処理に必要なコードは僅か数行である。