



ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ. ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА

УДК 535.13:51.73

Особенности математического моделирования световых полей в сенсорном элементе для волоконной эванесцентной спектроскопии среднего ИК диапазона

С. В. Корсакова, Е. А. Романова

Корсакова Светлана Владимировна, инженер кафедры компьютерной физики и метаматериалов на базе Саратовского филиала Института радиотехники и электроники имени В. А. Котельникова РАН; Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, korskova92@yandex.ru

Романова Елена Анатольевна, доктор физико-математических наук, профессор кафедры компьютерной физики и метаматериалов на базе Саратовского филиала Института радиотехники и электроники имени В. А. Котельникова РАН; Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, romanova@optics.sgu.ru

Вводится в рассмотрение математическая модель световых полей в сенсорном элементе волоконного датчика для эванесцентной спектроскопии среднего ИК диапазона, основанная на положениях спектральной теории диэлектрических волноводов. Обсуждается применимость приближенных математических моделей световых полей в сенсорном элементе, созданных ранее на основе оптико-геометрического подхода, а также применимость приближения слабонаправляющего световода. Показано, что для описания световых полей в халькогенидном сенсорном элементе надо решать векторную задачу в строгой электродинамической постановке. Одной из особенностей такой математической модели является присутствие поперечных компонент потока мощности эванесцентной моды в поперечном сечении световода. В модельном примере представлены расчеты продольных и поперечных компонент потока мощности гибридных эванесцентных мод в бесструктурном халькогенидном световоде, погруженном в ацетон.

Ключевые слова: теория диэлектрических волноводов, математическая модель, характеристическое уравнение, халькогенидный световод, спектроскопия среднего ИК диапазона, волоконно-оптический сенсор.

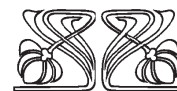
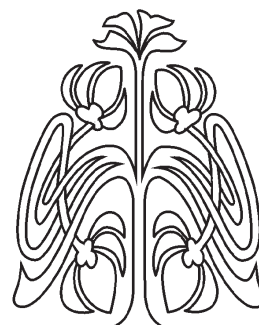
Поступила в редакцию: 12.12.2019 / Принята: 14.01.2020 / Опубликовано: 02.03.2020

Статья опубликована на условиях лицензии Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0)

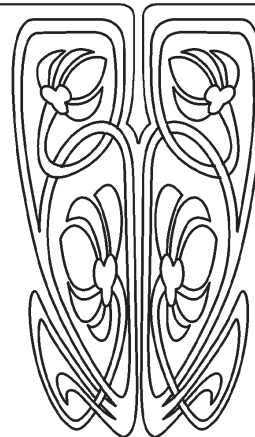
DOI: <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2020-20-1-55-63>

Введение

Спектроскопия среднего ИК диапазона – это надежное средство качественного и количественного определения химического состава различных сред, поскольку именно в этом диапазоне находятся полосы поглощения колебательных спектров многих веществ. Создание оптических устройств и систем для дистанционной ИК спектроскопии позволит перейти на более высокий уровень кон-



НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ





троля постоянно текущих производственных процессов и контроля состояния окружающей среды в режиме реального времени. Халькогенидные световоды с их областью прозрачности в диапазоне длин волн 0.5–20 мкм [1] (в зависимости от состава) являются наиболее подходящей средой для передачи ИК излучения в волоконных спектроскопических датчиках.

Принципиальная схема полностью волоконного спектроскопического датчика для дистанционного химического анализа в реальном времени состоит из следующих элементов: волоконный источник широкополосного излучения, волоконный сенсорный элемент (многомодовый халькогенидный световод, погруженный в поглощающую среду) и система детектирования с анализатором спектра.

Функционирование бесструктурного халькогенидного световода (состоящего только из стеклянной сердцевины) как сенсорного элемента для химического анализа основано на том, что электромагнитная волна распространяется не только по световоду, но частично проникает и во внешнюю поглощающую среду, которая может быть твердой, жидкой или газообразной. Электромагнитные волны, являющиеся модами волоконного сенсорного элемента, получили название эванесцентных, так как их мощность уменьшается при распространении вследствие поглощения во внешней среде.

В течение двух последних десятилетий метод волоконной эванесцентной спектроскопии (*the fiber-based evanescent wave spectroscopy*) применялся для определения химического состава преимущественно жидких веществ в лабораторных условиях на базе Фурье-спектрометров среднего ИК диапазона [2–8], а в основе математического описания световых полей широко использовался оптико-геометрический (лучевой) подход [2–5]. Коэффициенты отражения и пропускания лучей на боковой поверхности бесструктурного волоконного световода, погруженного в поглощающую среду, рассчитывались по формулам Френеля в приближении локальных плоских волн и слабого поглощения внешней среды, причем для внешней среды вводился комплексный показатель преломления с малой мнимой частью. Было получено выражение для полной мощности излучения, распространяющегося в световоде, путем интегрирования пропускания по площади поверхности световода и угловому распределению лучей, но сравнения с результатами измерений этих же авторов не проводилось [3, 4].

Использование феноменологического описания в рамках простых математических моделей недостаточно для разработки волоконно-оптических устройств со сложным профилем показателя преломления или сложной геометрией. При рассмотрении эванесцентных световых полей в рамках волнового подхода [9–11] вводилось упрощенное представление, согласно которому в световоде происходит уменьшение мощности только той части излучения, которая распространяется в поглощающей среде, а в его сердцевине мощность остается постоянной. Такой подход применим только в приближении слабого поглощения внешней среды и, строго говоря, противоречит фундаментальным представлениям электромагнитной теории волоконных световодов [12]. Использование приближения слабого поглощения неприемлемо в случае ИК спектроскопии жидких сред, так как коэффициенты поглощения жидкостей в области длин волн 3–10 мкм могут достигать значений порядка 10^3 см^{-1} .

Поскольку в сенсорном элементе на основе халькогенидного световода велика разница показателей преломления сердцевины (2.4–3.4 в среднем ИК диапазоне в зависимости от состава стекла) и внешней поглощающей среды (1.28–1.35 для многих жидких сред), для математического описания световых полей не применимо приближение слабонаправляющего световода, которое используется для световодов с небольшой разницей показателей преломления сердцевины и стеклянной оболочки в волоконно-оптических линиях связи. На основе такого приближенного подхода создавались упрощенные математические модели со скалярным описанием световых полей в волоконном световоде со стеклянной оболочкой. Предполагалось, что оптические потери в сердцевине и оболочке либо отсутствуют, либо очень малы. Однако такие математические модели не подходят для описания и исследования световых полей в халькогенидных световодах, используемых как сенсорные элементы в волоконной эванесцентной спектроскопии среднего ИК диапазона.

В [13–16] авторами данной работы были использованы вычислительные алгоритмы, созданные в рамках электродинамического подхода, для расчета коэффициентов затухания эванесцентных мод и выходных характеристик волоконного спектроскопического датчика.

В данной работе впервые излагаются теоретические основы разработанной математической модели. Исследуются особенности постановки



краевых задач в рамках спектральной теории диэлектрических волноводов [12] для математического моделирования световых полей в халькогенидных сенсорных элементах волоконных датчиков для эванесцентной спектроскопии среднего ИК диапазона.

1. Математическая модель световых полей в халькогенидном сенсорном элементе

Рассмотрим модель бесструктурного волоконного световода, погруженного в поглощающую среду, в виде цилиндрического волновода бесконечной длины с однородной сердцевиной с показателем преломления $n(r) = n_c$ ($0 \leq r < R$) и неограниченной однородной оболочкой с показателем преломления $n(r) = n_o$ ($R < r < \infty$), где R – радиус сердцевины (рис. 1). Обозначим символом \mathbb{R}^2 плоскость поперечного сечения волновода. Круговая граница Γ между сердцевиной и оболочкой является гладкой кривой.

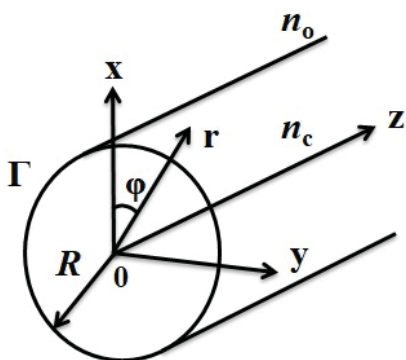


Рис. 1. Поперечное сечение волоконного световода

Fig. 1. Optical fiber cross-section

Поглощающая жидкость имеет комплексный показатель преломления $n_o = n_o^r + i \cdot n_o^i$, мнимая часть которого n_o^i может быть сравнима по величине с действительной n_o^r , а показатель преломления n_c сердцевины считается вещественным, так как $n_c^i \ll n_c^r$ вследствие малых оптических потерь в световоде (≈ 0.6 дБ/м [17]).

Согласно спектральной теории диэлектрических волноводов [12], в отсутствие источников гармонические во времени ($\sim \exp(-i\omega t)$) электрическое \vec{E} и магнитное \vec{H} поля собственных волн в таком волноводе можно представить в виде функций с частично разделяющимися переменными:

$$\vec{E}(\vec{r}, z) = \vec{e}(\vec{r}) \cdot \exp(i\beta z), \quad (1a)$$

$$\vec{H}(\vec{r}, z) = \vec{h}(\vec{r}) \cdot \exp(i\beta z), \quad (1b)$$

где $\vec{r} = (r, \varphi)$ – векторная поперечная координата, $\beta = \beta' + i\beta''$ – продольная постоянная распространения волны, ω – частота излучения. В отличие от слабонаправляющего волновода поля собственных волн волновода с большой разницей n_c и n_o удовлетворяют векторным уравнениям Гельмгольца в \mathbb{R}^2 :

$$\{\vec{\nabla}_t^2 + n^2 \cdot k^2 - \beta^2\} \vec{e} = -(\vec{\nabla}_t + i \cdot \beta \cdot \vec{z}) \cdot \vec{e}_t \cdot \vec{\nabla}_t \ln n^2, \quad (2a)$$

$$\{\vec{\nabla}_t^2 + n^2 \cdot k^2 - \beta^2\} \vec{h} = \{(\vec{\nabla}_t + i \cdot \beta \cdot \vec{z}) \times \vec{h}\} \times \vec{\nabla}_t \ln n^2, \quad (2b)$$

где $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число, λ – длина волны излучения, $\vec{\nabla}_t^2$ и $\vec{\nabla}_t$ – векторные операторы, которые определены в [12], индекс t отмечает поперечную компоненту электрического поля и поперечные операторы, определенные в заданной системе координат. Правая часть уравнений (2) отлична от нуля только на границе Γ .

Собственные волны диэлектрического волновода, являющиеся решениями краевой задачи для уравнений (2), удовлетворяют условиям непрерывности тангенциальных компонент полей на границе Γ и условиям излучения на бесконечности в \mathbb{R}^2 . В случае волновода без потерь собственные волны имеют вещественные постоянные распространения, а их амплитуды экспоненциально убывают на бесконечности в \mathbb{R}^2 [12].

Для классификации собственных волн обычно используется комплексная плоскость поперечного параметра моды в оболочке $w(\beta) = \pm R \cdot \sqrt{\beta^2 - k^2 \cdot n_o^2}$. В силу двужначности функций $w(\beta)$ и $\beta(w)$ каждому листу римановой поверхности w сопоставляются два экземпляра комплексной плоскости β , разрезанные вдоль линий $w' = 0$ и $w'' = 0$. На рис. 2 постоянные распространения собственных волн волновода с вещественным показателем преломления (такие волны называются направляемыми модами волновода) схематично показаны кружками на вещественной оси.

Для волновода с комплексным показателем преломления в оболочке собственная волна, имеющая продольную зависимость $\exp(i\beta z)$, является «физическим» решением (эванесцентной модой волновода), если ее поле убывает в направлении



распространения, т.е. при выполнении условия $\beta'\beta'' > 0$ (области $K_{1,2}, M_{1,2}$ на рис. 2). Границы этих областей на плоскости β совпадают с осями $\beta' = 0$ и $\beta'' = 0$. В результате отображения этих

осей на плоскость w получаются граничные линии – разрезы, отделяющие область «физических» решений от области «нефизических» решений (области $N_{1,2}, L_{1,2}$).

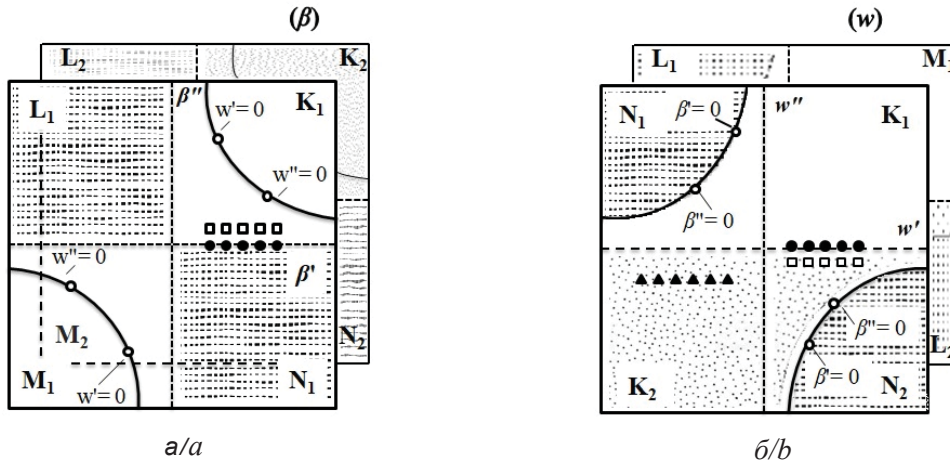


Рис. 2. Комплексные плоскости продольного (а) и поперечного (б) волновых чисел. Схематично показаны постоянные распространения, соответствующие направляемым (кружки), эванесцентным (квадраты), вытекающим (треугольники) модам

Fig. 2. Complex planes of the longitudinal (a) and transverse (b) wavenumbers. Propagation constants of guided (circles), evanescent (squares), and leaky (triangles) modes are shown schematically

При изменении параметров волновода или частоты излучения постоянные распространения направляемых или эванесцентных мод могут перейти в область вытекающих собственных волн (треугольники на рис. 2, б), поля которых экспоненциально растут на бесконечности в \mathbb{R}^2 . Вытекающие моды, а также другие комплексные постоянные распространения, лежащие в «физических» областях, играют важную роль в задачах возбуждения электромагнитных волн в диэлектрических волноводах. Эти волны вместе с направляемыми или эванесцентными модами составляют обобщенный спектр мод диэлектрического волновода и удовлетворяют обобщенному условию излучения (условию Рейхарда) [18], согласно которому поля мод обобщенного спектра в оболочке волновода могут быть представлены сходящимся рядом:

$$\begin{bmatrix} \vec{E} \\ \vec{H} \end{bmatrix} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \begin{bmatrix} \vec{A}_l \\ \vec{B}_l \end{bmatrix} H_l^{(1)}(\chi r) \cdot \exp(i \cdot l \cdot \varphi), \quad (3)$$

где $H_l^{(1)}(\chi r)$ – функция Ханкеля первого рода порядка l . Эта функция имеет следующую асимптотику при $-\pi < \arg \chi < 2\pi$ и $r \rightarrow \infty$ (с учетом того, что $\chi = iw$) [19]:

$$H_l^{(1)}(iwr) \approx \sqrt{\frac{2}{i\pi wr}} \cdot \exp \left[i \cdot \left(iwr - \frac{l\pi}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \right]. \quad (4)$$

Таким образом, поля \vec{E} и \vec{H} эванесцентных мод удовлетворяют следующему условию на бесконечности в \mathbb{R}^2 :

$$\begin{bmatrix} E \\ H \end{bmatrix} \approx \exp(-w \cdot r) / \sqrt{r}, r \rightarrow \infty. \quad (5)$$

Следовательно, поля \vec{E} и \vec{H} эванесцентных мод экспоненциально убывают на бесконечности в \mathbb{R}^2 как $\exp(-w'r) / \sqrt{r}$.

Для математического описания поглощения внешней среды, согласно закону Бугера, используется следующее соотношение между n_o^i и коэффициентом поглощения α исследуемой жидкости на заданной длине волны λ :

$$n_o^i = \alpha / (2 \cdot k). \quad (6)$$

Для исследования характеристик эванесцентных мод в математической модели с учетом вышеизложенных особенностей решается краевая задача с обобщенным условием излучения на бесконечности в \mathbb{R}^2 и формулируется уравнение относительно поперечных волновых чисел: трансцендентное характеристическое уравнение, известное из теории волоконных световодов с неограниченной оболочкой [12]:



$$\left[\frac{J'_v(u)}{u \cdot J_v(u)} + \frac{K'_v(w)}{w \cdot K_v(w)} \right] \cdot \left[\frac{J'_v(u)}{u \cdot J_v(u)} + \frac{n_o^2}{n_c^2} \cdot \frac{K'_v(w)}{w \cdot K_v(w)} \right] = \left(\frac{v \cdot \beta}{k \cdot n_c} \right)^2 \cdot \left(\frac{V}{u \cdot w} \right)^4. \quad (7)$$

Здесь v – азимутальный порядок моды, J_v и K_v , J'_v и K'_v – функции Бесселя и Макдональда и их производные соответственно, u и w – параметры моды в сердцевине и оболочке соответственно, $V = k \cdot R \cdot \sqrt{n_c^2 - n_o^2}$ – комплексный параметр световода.

Излучение в сенсорном элементе представляется как сумма эванесцентных мод с продольными постоянными распространения, которые определяются на заданной длине волны путем численного решения уравнения (7). Для каждой моды определена критическая частота (частота отсечки), выше которой по частоте мода является направляемой, а ниже – вытекающей. Поскольку в волноводе с поглощающей оболочкой u , w и β , а также V – комплексные величины, частота отсечки определяется по первому пересечению дисперсионной кривой поперечного волнового числа эванесцентной моды с осью w'' на плоскости w [20], причем с ростом n_o^i это пересечение происходит при большей частоте. Поэтому мода, которая является направляемой модой световода в случае внешней среды без поглощения, при частотах излучения, близких к частоте отсечки, может стать вытекающей при погружении световода в поглощающую жидкость.

Эванесцентные моды, полученные в результате решения спектральной задачи в полной электродинамической постановке, имеют ненулевые в сечении \mathbb{R}^2 радиальные и азимутальные компоненты вектора Пойнтинга. Плотность поперечного потока мощности определяется величиной n_o^i .

Ниже приводится пример использования вышеописанной математической модели для расчета продольных и поперечных компонент потока мощности гибридных эванесцентных мод HE_{vm} в световоде, погруженном в поглощающую жидкость.

2. Расчет плотности потока мощности эванесцентной моды в поперечном сечении халькогенидного сенсорного элемента

Рассмотрим сенсорный элемент на основе многомодового халькогенидного бесструктурного световода из стекла состава $Ge_{26}As_{17}Se_{25}Te_{32}$

с $n_c = 2.8$ [21] и $R = 150$ мкм. В качестве поглощающей жидкости был выбран чистый ацетон. Для расчета мнимой части показателя преломления внешней среды n_o^i по формуле (6) использовалась спектральная зависимость коэффициента поглощения ацетона (рис. 3), полученная путем измерений спектров пропускания объемных образцов ацетона в кювете толщиной 11 мкм [13, 14].

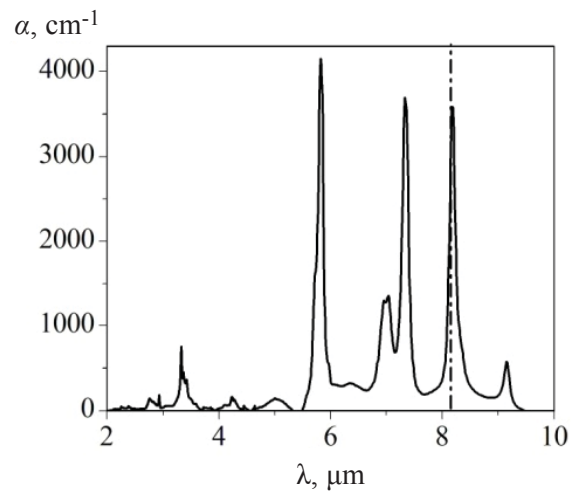


Рис. 3. Спектральная зависимость коэффициента поглощения ацетона

Fig. 3. Spectral dependence of the acetone absorption coefficient

В качестве рабочей была выбрана полоса поглощения с максимумом при $\lambda = 8.18$ мкм, которая соответствует валентным колебаниям связи С-С между атомами углерода метильной и карбоксильной групп [22]. На этой длине волны коэффициент поглощения $\alpha = 3582$ cm^{-1} , чему соответствует $n_o^i = 0.233$. Поскольку в литературе нет данных о значениях показателя преломления ацетона в среднем ИК диапазоне, использовалось значение $n_o^r = 1.35$ (измерено в [23] для $\lambda = 0.83$ мкм).

В результате решения сформулированной выше спектральной задачи с обобщенным условием излучения на бесконечности в \mathbb{R}^2 были получены значения коэффициентов затухания $\eta = 2\beta''$ эванесцентных мод HE_{vm} при разных радиальных m и азимутальных v порядках и показано, что они растут при увеличении m и/или v [14, 15].



Плотности

продольной $S_z = 1/2 \cdot \text{Re}[E_r \cdot H_\phi^* - E_\phi \cdot H_r^*]$,
 радиальной $S_r = 1/2 \cdot \text{Re}[E_\phi \cdot H_z^* - E_z \cdot H_\phi^*]$,
 азимутальной $S_\phi = 1/2 \cdot \text{Re}[E_z \cdot H_r^* - E_r \cdot H_z^*]$

компонент потока мощности эванесцентных мод HE_{vm} построены на рис. 4 в зависимости от радиальной координаты при $z = 0$ и $\phi = 0$. Каждая компонента потока нормирована на максимальную величину S_z^{\max} продольного потока.

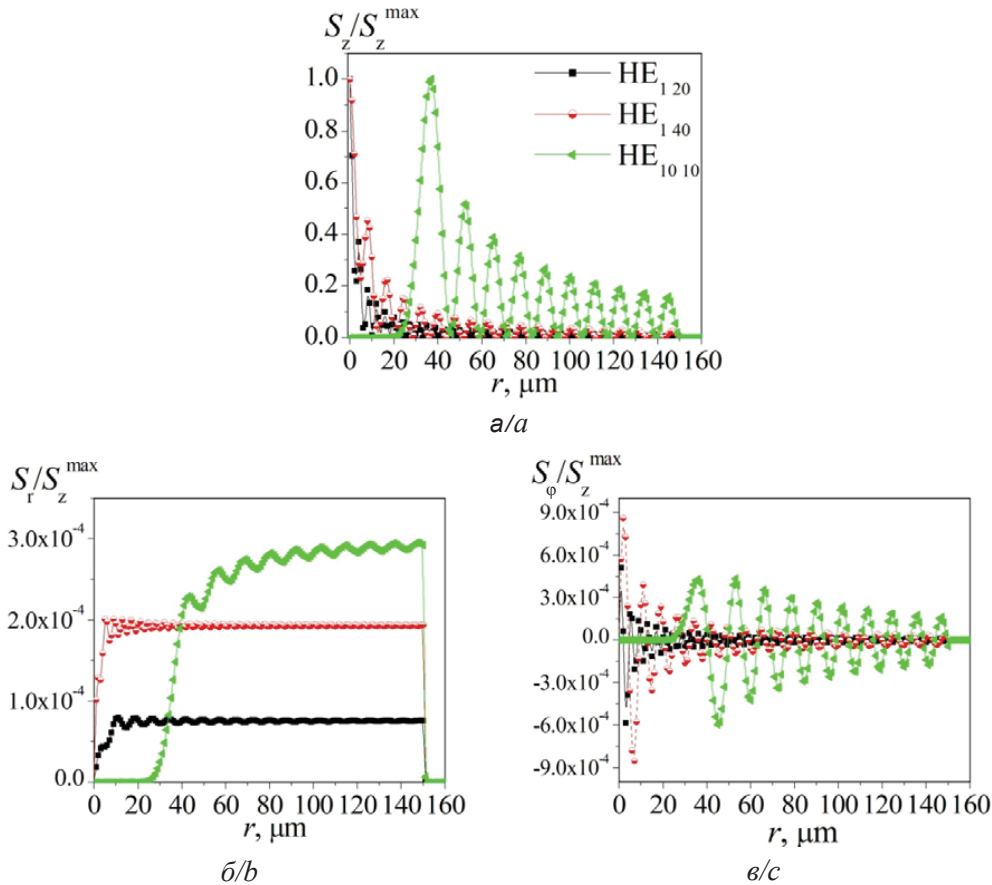


Рис. 4. Плотность продольного S_z (а), радиального S_r (б) и азимутального S_ϕ (в) потоков мощности в \mathbb{R}^2 , рассчитанная для HE_{120} , HE_{140} , HE_{1010} эванесцентных мод
 Fig. 4. Density of the longitudinal S_z (a), radial S_r (b), and azimuthal S_ϕ (c) components of the power flow in \mathbb{R}^2 , calculated for the HE_{120} , HE_{140} , HE_{1010} evanescent modes

Видно, что поперечные потоки мощности, связанные именно с наличием поглощения в оболочке, на 3–4 порядка меньше, чем продольный поток мощности даже при довольно большом коэффициенте поглощения. Плотность всех трех компонент потока резко падает до нулевых значений во внешней среде. Отметим, что компонента S_r имеет положительные значения в \mathbb{R}^2 , т.е. поток направлен от оси световода к границе Γ , что обусловлено поглощением излучения во внешней среде. Таким образом поддерживается постоянная форма поперечного профиля эванесцентной моды. В каждой точке поперечного сечения происходит уменьшение потока мощности вдоль оси световода $\sim \exp(-2\beta''z)$.

Заключение

В результате проведенного исследования особенностей математической модели световых полей в халькогенидном сенсорном элементе для волоконной эванесцентной спектроскопии среднего ИК диапазона установлено, что вследствие большой разницы показателей преломления сердцевины световода и окружающей среды а также большого коэффициента поглощения окружающей среды в математической модели нельзя использовать приближение слабонаправляющего световода, а также приближение слабого поглощения среды. Для решения спектральной задачи в математической модели халькогенидного сенсорного элемента используется



строгая электродинамическая постановка. На комплексной плоскости поперечного волнового числа эванесцентной моды выявлены «физические» области, удовлетворяющие обобщенному условию излучения на бесконечности в поперечном сечении световода. Спецификой решения векторной задачи является наличие поперечных компонент потока мощности эванесцентной моды в поперечном сечении световода.

При заданной геометрии сенсорного элемента, заданных оптических параметрах световода и поглощающей внешней среды, на заданной длине волны проведено решение характеристического уравнения относительно поперечных волновых чисел эванесцентной моды, проведен расчет продольных и поперечных потоков мощности HE_{vm} эванесцентных мод в поперечном сечении халькогенидного световода, погруженного в поглощающую среду. Установлено, что даже при большом коэффициенте поглощения внешней среды плотность поперечных компонент потока мощности моды на 3–4 порядка меньше, чем плотность продольной компоненты.

В [13–16] было получено хорошее согласование результатов расчетов на основе представленной математической модели и экспериментальных данных, полученных методом волоконной эванесцентной спектроскопии, что подтверждает применимость используемой математической модели.

Благодарности

Разработка математической модели и численные расчеты проведены при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 16-13-10251р).

Список литературы

1. Ta'eed V. G., Baker N. J., Fu L., Finsterbusch K., Lamont M. R. E., Moss D. J., Nguyen H. C., Eggleton B. J., Choi D. Y., Madden S., Luther-Davies B. Ultra fast all-optical chalcogenide glass photonic circuits // *Opt. Express*. 2007. Vol. 15, № 15. P. 9205–9221. DOI: 10.1364/OE.15.009205
2. Jonas E. R., Braiman M. S. Efficient Source-to-Fiber Coupling Method Using a Diamond Rod : Theory and Application to Multimode Evanescent-Wave IR Absorption Spectroscopy // *Appl. Spectrosc.* 1993. Vol. 47, № 11. P. 1751–1759. DOI: 10.1366/0003702934066118
3. Katz M., Katzir A., Schnitzer I., Bornstein A. Quantitative evaluation of chalcogenide glass fiber evanescent wave spectroscopy // *Appl. Opt.* 1994. Vol. 33, № 25. P. 5888–5894. DOI: 10.1364/AO.33.005888
4. Messica A., Greenstein A., Katzir A. Theory of fiber-optic, evanescent-wave spectroscopy and sensors // *Appl. Opt.* 1996. Vol. 35, № 13. P. 2274–2284. DOI: 10.1364/AO.35.002274
5. Xu Y., Cottenden A., Jones N. B. A theoretical evaluation of fibre-optic evanescent wave absorption in spectroscopy and sensors // *Opt. Lasers Eng.* 2006. Vol. 44, № 2. P. 93–101. DOI: 10.1016/j.optlaseng.2005.05.003
6. Heo J., Rodrigues M., Saggese S. J., Sigel G. H. Remote fiber-optic chemical sensing using evanescent-wave interactions in chalcogenide glass fibers // *Appl. Opt.* 1991. Vol. 30, № 6. P. 3944–3951. DOI: 10.1364/AO.30.003944
7. Sanghera J. S., Kung F. H., Pureza P. C., Nguyen V. Q., Miklos R. E., Aggarwal I. D. Infrared evanescent-absorption spectroscopy with chalcogenide glass fibers // *Appl. Opt.* 1994. Vol. 33, № 27. P. 6315–6322. DOI: 10.1364/AO.33.006315
8. Sanghera J. S., Busse L. E., Pureza P. C., Aggarwal I. D., Kung F. H. IR Evanescent Absorption Spectroscopy of Toxic Chemicals Using Chalcogenide Glass Fibers // *J. Am. Ceram. Soc.* 1995. Vol. 78, № 8. P. 2198–2202. DOI: 10.1111/j.1151-2916.1995.tb08636.x
9. Amorphous Chalcogenides, *Advances and Applications* / ed. by R. Wang. Pan Stanford Publishing, 2013. 322 с.
10. Kumar P. S., Vallabhan C. P. G., Nampoore V. P. N., Pillai V. N. S., Radhakrishnan P. A fibre optic evanescent wave sensor used for the detection of trace nitrites in water // *J. Opt. A. Pure Appl. Opt.* 2002. Vol. 4, № 3. P. 247–250.
11. Thomas L. S., George N. A., Kumar P. S., Radhakrishnan P., Vallabhan C. P., Nampoore V. P. Chemical sensing with microbent optical fiber // *Opt. Lett.* 2001. Vol. 26, № 20. P. 1541–1543. DOI: 10.1364/OL.26.001541
12. Снайдер А., Лав Дж. Теория оптических волноводов. М. : Радио и связь, 1987. 656 с.
13. Korsakova S., Romanova E., Velmuzhov A., Kotereva T., Sukhanov M., Shiryayev V. Peculiarities of the mid-infrared evanescent wave spectroscopy based on multimode chalcogenide fibers // *J. Non-Cryst. Solids*. 2017. Vol. 475. P. 38–43. DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2017.08.027
14. Romanova E. A., Korsakova S., Komanec M., Nemecek T., Velmuzhov A., Sukhanov M., Shiryayev V. S. Multimode chalcogenide fibers for evanescent wave sensing in the mid-IR // *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* 2017. Vol. 23, № 2. P. 1–7. DOI: 10.1109/JSTQE.2016.2630846
15. Romanova E., Korsakova S., Rozhnev A., Velmuzhov A., Shiryayev V. Novel approach for design of fiber-based evanescent wave sensors for the mid-infrared spectroscopy // *20th International Conference on Transparent Optical Networks (ICTON)*, 2018. DOI: 10.1109/ICTON.2018.8473730
16. Корсакова С. В., Романова Е. А., Вельмузов А. П., Котерева Т. В., Суханов М. В., Ширяев В. С. Исследование характеристик сенсорных элементов для волоконной эванесцентной спектроскопии среднего ИК диапазона // *Оптика и спектроскопия*. 2018. Т. 125, вып. 9. С. 402–410. DOI: 10.21883/OS.2018.09.46559.78-18
17. Velmuzhov A. P., Sukhanov M. V., Kotereva T. V., Zernova N. S., Shiryayev V. S., Karaksina E. V., Stepanov B. S.,



- Churbanov M. F. Optical fibers based on special pure $\text{Ge}_{20}\text{Se}_{80}$ and $\text{Ge}_{26}\text{As}_{17}\text{Se}_{25}\text{Te}_{32}$ glasses for FEWS // J. Non-Cryst. Solids. 2019. Vol. 517. P. 70–75. DOI: 10.1016/j.jnoncrsol.2019.04.043
18. Reichardt H. Ausstrahlungsbedingungen für die Wellengleichung // Abh. Mathem. Seminar Univ. Hamburg. 1960. Bd. 24. S. 41–53.
19. Янке Е., Эмде Ф., Леш Ф. Специальные функции. М.: Наука, 1968. 344 с.
20. Romanova E. A. Scalar approximation feasibility analysis near the cutoff frequency of HE_{1n} fibre mode with account of material losses // Optics Communications. 2002. Vol. 208, № 1. P. 91–96. DOI: 10.1016/S0030-4018(02)01572-9
21. Savage J. A., Webber P. J., Pitt A. M. The Potential of Ge-As-Se-Te Glasses as 3–5 μm and 8–12 μm Infrared Optical Materials // Infrared Phys. 1980. Vol. 20, № 5. P. 313–320. DOI: 10.1016/0020-0891(80)90045-7
22. Velmuzhov A. P., Shiryayev V. S., Sukhanov M. V., Kotereva T. V., Churbanov M. F., Zernova N. S., Plekhovich A. D. Fiber sensor on the basis of $\text{Ge}_{26}\text{As}_{17}\text{Se}_{25}\text{Te}_{32}$ glass for FEWS analysis // Opt. Mater. 2018. Vol. 75. P. 525–532. DOI: 10.1016/j.optmat.2017.11.012
23. Rheims J., Köser J., Wriedt T. Refractive-index measurements in the near-IR using an Abbe refractometer // Meas. Sci. Technol. 1997. Vol. 8, № 6. P. 601–605. DOI: 10.1088/0957-0233/8/6/003

Образец для цитирования:

Корсакова С. В., Романова Е. А. Особенности математического моделирования световых полей в сенсорном элементе для волоконной эванесцентной спектроскопии среднего ИК диапазона // Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика. 2020. Т. 20, вып. 1. С. 55–63. DOI: <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2020-20-1-55-63>

Specificity of the Mathematical Modeling of Light Fields in a Sensing Element for the Fiber-Based Evanescent-Wave Mid-IR Spectroscopy

S. V. Korsakova, E. A. Romanova

Svetlana V. Korsakova, <https://orcid.org/0000-0002-5019-1234>, Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia, korsakova92@yandex.ru

Elena A. Romanova, <https://orcid.org/0000-0002-2288-0470>, Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia, romanova@optics.sgu.ru

Background and Objectives: The fiber-based evanescent-wave mid-IR spectroscopy is a prospective tool for the real-time remote chemical analysis of various substances, which have their vibrational spectra in the mid-IR spectral range. Chalcogenide fibers transparent in the mid-IR are considered as the most suitable sensing elements of the fiber-based mid-IR spectroscopic sensors. Earlier, to describe light fields in a chalcogenide fiber embedded into an absorbing medium, a ray optics approach based on the approximation of weak absorption of the medium was used. However, this approach is not applicable for the mid-IR spectroscopy of liquids since the absorption coefficients of liquids in the mid-IR can be of the order of 10^3 cm^{-1} . As the difference of refractive indices of a chalcogenide glass (2.4–3.4) and a liquid (1.28–1.35) is large, the weakly guiding approximation widely used to design the fiber-optic information networks is not applicable for the sensing elements modeling. Development of a reliable mathematical model of light fields in the chalcogenide sensing elements is an urgent problem. In this paper, a detailed analysis of such a mathematical model based on the electromagnetic theory of optical fibers is presented. **Materials and Methods:** A multimode single-index chalcogenide fiber embedded into an absorbing liquid is considered as a sensing element of a fiber-based spectroscopic sensor. For this sensing element, a model of a infinite cylindrical waveguide with a uniform core and an infinite uniform cladding with a complex-valued refractive index is proposed. To describe light fields in the sensing element, a mathematical model based on solution of a boundary value problem for Helmholtz equations in a rigorous electrodynamic formulation is developed. For classification

of the boundary value problem solutions, a complex plane of a fiber mode parameter in the cladding is used. Eigenwaves obtained by solution of the boundary value problem that satisfies the condition of exponential decay in the waveguide cross-section at infinity are identified as evanescent modes of the waveguide. The power of the modes is decreasing along the waveguide due to the external absorption. In computer modeling of the evanescent modes, an eigenvalue equation written for the modes parameters is solved numerically. As an absorbing liquid, pure acetone is chosen. The absorption coefficient of acetone, obtained experimentally, is used to evaluate the imaginary part of its refractive index. **Results:** Specificity of the boundary value problem formulation in application to the light fields in sensing elements of the fiber-based spectroscopic sensors has been revealed. A mathematical model of evanescent modes of a chalcogenide sensing element has been elaborated by using the rigorous electrodynamic approach. This model has been applied to calculate the longitudinal and transverse power flows of the $\text{HE}_{\nu m}$ evanescent modes in the cross-section of a chalcogenide fiber immersed into the pure acetone. It was demonstrated that in the rigorous mathematical model, the transverse power flows of evanescent modes are specifically nonzero. With the given parameters of the chalcogenide sensing element and the absorbing medium, the density of the transverse components of the power flow at a specified peak wavelength of an absorption band of acetone was 3–4 orders of magnitude lower than the longitudinal component density. **Conclusion:** The mathematical model of light fields in chalcogenide sensing elements for the mid-IR spectroscopy has been developed with account of the large difference in the refractive indices of the chalcogenide fiber core and the external medium having large absorption coefficients. Applicability of the mathematical model based on the rigorous electrodynamic approach was confirmed previously in our works where the results of computer modeling fit the experimental data obtained in the chalcogenide fiber based spectroscopic measurements.

Keywords: theory of dielectric waveguides, mathematical model, characteristic equation, chalcogenide fiber, mid-IR spectroscopy, fiber-optic sensor.

Received: 12.12.2019 / Accepted: 14.01.2020 / Published: 02.03.2020

This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0)



Acknowledgements: Development of the mathematical model and numerical calculations were carried out under financial support of the Russian Science Foundation (project No. 16-13-10251p).

References

1. Ta'eed V. G., Baker N. J., Fu L., Finsterbusch K., Lamont M. R. E., Moss D. J., Nguyen H. C., Eggleton B. J., Choi D. Y., Madden S., Luther-Davies B. Ultra fast all-optical chalcogenide glass photonic circuits. *Opt. Express*, 2007, vol. 15, no. 15, pp. 9205–9221. DOI: 10.1364/OE.15.009205
2. Jonas E. R., Braiman M. S. Efficient Source-to-Fiber Coupling Method Using a Diamond Rod: Theory and Application to Multimode Evanescent-Wave IR Absorption Spectroscopy. *Appl. Spectrosc.*, 1993, vol. 47, no. 11, pp. 1751–1759. DOI: 10.1366/0003702934066118
3. Katz M., Katzir A., Schnitzer I., Bornstein A. Quantitative evaluation of chalcogenide glass fiber evanescent wave spectroscopy. *Appl. Opt.*, 1994, vol. 33, no. 25, pp. 5888–5894. DOI: 10.1364/AO.33.005888
4. Messica A., Greenstein A., Katzir A. Theory of fiber-optic, evanescent-wave spectroscopy and sensors. *Appl. Opt.*, 1996, vol. 35, no. 13, pp. 2274–2284. DOI: 10.1364/AO.35.002274
5. Xu Y., Cottenden A., Jones N. B. A theoretical evaluation of fibre-optic evanescent wave absorption in spectroscopy and sensors. *Opt. Lasers Eng.*, 2006, vol. 44, no. 2, pp. 93–101. DOI: 10.1016/j.optlaseng.2005.05.003
6. Heo J., Rodrigues M., Saggese S. J., Sigel G. H. Remote fiber-optic chemical sensing using evanescent-wave interactions in chalcogenide glass fibers. *Appl. Opt.*, 1991, vol. 30, no. 6, pp. 3944–3951. DOI: 10.1364/AO.30.003944
7. Sanghera J. S., Kung F. H., Pureza P. C., Nguyen V. Q., Miklos R. E., Aggarwal I. D. Infrared evanescent-absorption spectroscopy with chalcogenide glass fibers. *Appl. Opt.*, 1994, vol. 33, no. 27, pp. 6315–6322. DOI: 10.1364/AO.33.006315
8. Sanghera J. S., Busse L. E., Pureza P. C., Aggarwal I. D., Kung F. H. Infrared Evanescent Absorption Spectroscopy of Toxic Chemicals Using Chalcogenide Glass Fibers. *J. Am. Ceram. Soc.*, 1995, vol. 78, no. 8, pp. 2198–2202. DOI: 10.1111/j.1151-2916.1995.tb08636.x
9. Wang R., ed. *Amorphous Chalcogenides, Advances and Applications*. Pan Stanford Publishing, 2013. 322 p.
10. Kumar P. S., Vallabhan C. P. G., Nampoori V. P. N., Pillai V. N. S. Radhakrishnan P. A fibre optic evanescent wave sensor used for the detection of trace nitrites in water. *J. Opt. A. Pure Appl. Opt.*, 2002, vol. 4, no. 3, pp. 247–250. DOI: 10.1088/1464-4258/4/3/305
11. Thomas L. S., George N. A., Sureshkumar P., Radhakrishnan P., Vallabhan C. P., Nampoori V. P. Chemical sensing with microbent optical fiber. *Opt. Lett.*, 2001, vol. 26, no. 20, pp. 1541–1543. DOI: 10.1364/OL.26.001541
12. Snyder A. W., Love J. *Optical Waveguide Theory*. Chapman & Hall, 1983. 738 p.
13. Korsakova S., Romanova E., Velmuzhov A., Kotereva T., Sukhanov M., Shiryaev V. Peculiarities of the mid-infrared evanescent wave spectroscopy based on multimode chalcogenide fibers. *J. Non-Cryst. Solids*, 2017, vol. 475, pp. 38–43. DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2017.08.027
14. Romanova E. A., Korsakova S., Komanec M., Nemecek T., Velmuzhov A., Sukhanov M., Shiryaev V. S. Multimode chalcogenide fibers for evanescent wave sensing in the mid-IR. *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.*, 2017, vol. 23, no. 2, pp. 1–7. DOI: 10.1109/JSTQE.2016.2630846
15. Romanova E., Korsakova S., Rozhnev A., Velmuzhov A., Shiryaev V. Novel approach for design of fiber-based evanescent wave sensors for the mid-infrared spectroscopy. *20th International Conference on Transparent Optical Networks (ICTON)*, 2018. DOI: 10.1109/ICTON.2018.8473730
16. Korsakova S. V., Romanova E. A., Velmuzhov A. P., Kotereva T. V., Sukhanov M. V., Shiryaev V. S. Analysis of Characteristics of the Sensing Elements for the Fiber-Based Evanescent Wave Spectroscopy in the Mid-IR. *Opt. Spectrosc.*, 2018, vol. 125, iss. 3, pp. 416–424. DOI: 10.1134/S0030400X18090163
17. Velmuzhov A. P., Sukhanov M. V., Kotereva T. V., Zernova N. S., Shiryaev V. S., Karaksina E. V., Stepanov B. S., Churbanov M. F. Optical fibers based on special pure $\text{Ge}_{20}\text{Se}_{80}$ and $\text{Ge}_{26}\text{As}_{17}\text{Se}_{25}\text{Te}_{32}$ glasses for FEWS. *J. Non-Cryst. Solids*, 2019, vol. 517, pp. 70–75. DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2019.04.043
18. Reichardt H. Ausstrahlungsbedingungen für die Wellengleichung. *Abh. Mathem. Seminar Univ. Hamburg*, 1960, Bd. 24, S. 41–53.
19. Yanke E., Emde F., Lesh F. *Special'nye funktsii* [Special Functions]. Moscow, Nauka Publ., 1968. 344 p. (in Russian).
20. Romanova E. A. Scalar approximation feasibility analysis near the cutoff frequency of HE_{1n} fibre mode with account of material losses. *Opt. Commun.*, 2002, vol. 208, no. 1, pp. 91–96. DOI: 10.1016/S0030-4018(02)01572-9
21. Savage J. A., Webber P. J., Pitt A. M. The Potential of Ge-As-Se-Te Glasses as 3-5 μm and 8-12 μm Infrared Optical Materials. *Infrared Phys.*, 1980, vol. 20, no. 5, pp. 313–320. DOI: 10.1016/0020-0891(80)90045-7
22. Velmuzhov A. P., Shiryaev V. S., Sukhanov M. V., Kotereva T. V., Churbanov M. F., Zernova N. S., Plekhovich A. D. Fiber sensor on the basis of $\text{Ge}_{26}\text{As}_{17}\text{Se}_{25}\text{Te}_{32}$ glass for FEWS analysis. *Opt. Mater.*, 2018, vol. 75, pp. 525–532. DOI: 10.1016/j.optmat.2017.11.012
23. Rheims J., Köser J., Wriedt T. Refractive-index measurements in the near-IR using an Abbe refractometer. *Meas. Sci. Technol.*, 1997, vol. 8, no. 6, pp. 601–605. DOI: 10.1088/0957-0233/8/6/003

Cite this article as:

Korsakova S. V., Romanova E. A. Specificity of the Mathematical Modeling of Light Fields in a Sensing Element for the Fiber-Based Evanescent-Wave Mid-IR Spectroscopy. *Izv. Saratov Univ. (N. S.), Ser. Physics*, 2020, vol. 20, iss. 1, pp. 55–63 (in Russian). DOI: <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2020-20-1-55-63>