



2. *Еремин Е.Л., Цыкунов А.М.* Синтез адаптивных систем управления на основе критерия гиперустойчивости. Бишкек: Илим, 1992.
3. *Брокетт Р.У.* Алгебры Ли и группы Ли в теории управления // Математические методы в теории систем / Под ред. Ю.Н. Журавлева. М.: Мир, 1979. С. 174 - 220.
4. *Цыкунов А.М.* Адаптивное управление объектами с последствием. М.: Наука, 1984.
5. *Landau I.D.* Adaptive control systems: the model reference approach. N.Y.: Marsel Dekker, 1979.
6. *Баркин А.И., Зеленцовский А.Л., Пакишин П.В.* Абсолютная устойчивость детерминированных и стохастических систем управления. М.: МАИ, 1992.
7. *Гультяев А.К.* MATLAB - 5.2. Имитационное моделирование в среде Windows: практическое пособие. М.: Наука, 2000.

УДК 621.315

© 2001 г. **И.Е. Еремин,**
Н.С. Костюков, д-р техн. наук
(Амурский комплексный НИИ ДВО РАН, Благовещенск)

ПОСТРОЕНИЕ КИБЕРНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ОПТИЧЕСКОГО ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ

Рассматриваются частотные характеристики показателя преломления материала с использованием различных моделей его диэлектрической проницаемости, эффективность которых оценивается в рамках имитационного моделирования частотных спектров в области установления упругой электронной поляризации.

Введение

При оценке влияния структуры и химического состава вещества на его поляризационные свойства важная роль отводится исследованию оптического показателя преломления – n , характеризующего, во сколько раз уменьшается скорость света в среде по отношению к его скорости в вакууме.

Для переменных полей показатель преломления принимает вид комплексной функции $n(j\omega)$ [1, 2]:

$$n(j\omega) = n(\omega) + j\chi(\omega), \quad (1)$$

где $n(\omega)$ – частотная характеристика показателя преломления света; $\chi(\omega)$ – частотная характеристика показателя поглощения световой энергии.

Известно [3], что электрическая составляющая светового потока гораздо значительнее магнитной, т.е. преломление и поглощение света определяются преимущественно электрической поляризацией заряженных частиц, составляющих материал.

В физике твердого тела общепринято [2] связывать комплексный показатель преломления вещества с его комплексной диэлектрической проницаемостью – $\varepsilon(j\omega)$ соотношением

$$\varepsilon(j\omega) = n^2(j\omega) = n^2(\omega) - \chi^2(\omega) + j2n(\omega)\chi(\omega). \quad (2)$$

Очевидно, в силу разнообразия математических моделей для $\varepsilon(j\omega)$ (в частности см. работу [4]) возникает потребность в исследовании и оценке их эффективности.

Структурный синтез зависимости $n(\omega)$

При рассмотрении поляризационных характеристик вещества, обусловленных воздействием переменного поля определенной частоты, уравнение (2) традиционно рассматривается в виде двух соотношений, описывающих вещественную – ε_r и мнимую – ε_i части диэлектрической проницаемости через соответствующие оптические показатели исследуемого материала [1, 5]:

$$\begin{aligned} \varepsilon_r &= n^2 - \chi^2, \\ \varepsilon_i &= 2n\chi. \end{aligned} \quad (3)$$

Объединяя выражения (3), аналогично [6], за счет исключения χ можно получить следующее линейное биквадратное уравнение:

$$n^4 - \varepsilon_r n^2 - \left(\frac{\varepsilon_i}{2}\right)^2 = 0,$$

решение которого содержит четыре корня

$$n_{1,2,3,4} = \pm \sqrt{\frac{\left(\varepsilon_r \pm \sqrt{\varepsilon_r^2 + \varepsilon_i^2}\right)}{2}}. \quad (4)$$

При этом, учитывая физическую сущность показателя преломления, из полученных корней следует выбрать только вещественный и положительный, иначе говоря, для расчета значения n имеем только формулу

$$n = \sqrt{\frac{\left(\varepsilon_r + \sqrt{\varepsilon_r^2 + \varepsilon_i^2}\right)}{2}}. \quad (5)$$

В свою очередь функциональную зависимость $n(\omega)$ можно описать следующим образом:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\operatorname{Re}[\varepsilon(j\omega)] + \sqrt{(\operatorname{Re}[\varepsilon(j\omega)])^2 + (\operatorname{Im}[\varepsilon(j\omega)])^2} \right)}, \quad (6)$$

где $\text{Re}[\varepsilon(j\omega)]$ и $\text{Im}[\varepsilon(j\omega)]$ – соответственно вещественная и мнимая частотные характеристики комплексной диэлектрической проницаемости материала.

Следует отметить, что уравнение (6) является общей частью структурного синтеза зависимости $n(\omega)$, т.е. не зависящей от конкретного или явного вида модели $\varepsilon(j\omega)$.

Известно [1-3], что количественной мерой поляризации образца служит величина индуцированного в нем суммарного дипольного момента, ослабляющего напряженность внешнего электрического поля и обусловленного комплексными поляризуемостями составляющих материал частиц – $\alpha_k(j\omega)$:

$$\alpha_k(j\omega) = \text{Re}[\alpha_k(j\omega)] + j \text{Im}[\alpha_k(j\omega)], \quad k = \overline{1, R},$$

$$\text{Re}[\alpha_k(j\omega)] = \frac{(\omega_{0k}^2 - \omega^2) q_k^2 / m_k}{(\omega_{0k}^2 - \omega^2)^2 + 4b_k^2 \omega^2}, \quad (7)$$

$$\text{Im}[\alpha_k(j\omega)] = -\frac{2b_k \omega q_k^2 / m_k}{(\omega_{0k}^2 - \omega^2)^2 + 4b_k^2 \omega^2},$$

где k – индекс разновидности индуцированного диполя; R – их число в исследуемом образце; q_k и m_k – соответственно заряд и масса частицы; ω_{0k} и b_k – ее собственная частота колебаний и коэффициент затухания.

При рассмотрении комплексной диэлектрической проницаемости материала через поляризуемости частиц обычно используется уравнение Клаузиуса-Мосотти [1, 3]:

$$\frac{\varepsilon(j\omega) - 1}{\varepsilon(j\omega) + 2} = \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^R n_i \alpha_i(j\omega), \quad (8)$$

где ε_0 – электрическая постоянная ($8,85418782 \cdot 10^{-12}$ Ф/м); n_i – концентрации частиц.

Для данной модели, частотные характеристики $\varepsilon(j\omega)$ в уравнении (6) имеют вид:

$$\text{Re}[\varepsilon(j\omega)] = \frac{\left(1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^R n_i \text{Re}[\alpha_i(j\omega)]\right) \left(1 - \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^R n_i \text{Re}[\alpha_i(j\omega)]\right)}{\left(1 - \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^R n_i \text{Re}[\alpha_i(j\omega)]\right)^2 + \left(\frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^R n_i \text{Im}[\alpha_i(j\omega)]\right)^2}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{2 \left(\frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^R n_i \operatorname{Im}[\alpha_i(j\omega)] \right)^2}{\left(1 - \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^R n_i \operatorname{Re}[\alpha_i(j\omega)] \right)^2 + \left(\frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^R n_i \operatorname{Im}[\alpha_i(j\omega)] \right)^2}, \quad (9) \\
\operatorname{Im}[\varepsilon(j\omega)] &= \frac{\frac{1}{\varepsilon_0} \sum_{i=1}^R n_i \operatorname{Im}[\alpha_i(j\omega)]}{\left(1 - \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^R n_i \operatorname{Re}[\alpha_i(j\omega)] \right)^2 + \left(\frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^R n_i \operatorname{Im}[\alpha_i(j\omega)] \right)^2}.
\end{aligned}$$

Кроме того, в работах [4, 7, 8] показана возможность применения новой, “кибернетической” модели диэлектрической проницаемости:

$$\varepsilon(j\omega) = 1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^R n_i \alpha_i(j\omega). \quad (10)$$

Таким образом, в уравнении (6) характеристики $\varepsilon(j\omega)$ на основании ее уравнения (10), можно также рассматривать в виде:

$$\begin{aligned}
\operatorname{Re}[\varepsilon(j\omega)] &= 1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^R n_i \operatorname{Re}[\alpha_i(j\omega)], \\
\operatorname{Im}[\varepsilon(j\omega)] &= \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^R n_i \operatorname{Im}[\alpha_i(j\omega)].
\end{aligned} \quad (11)$$

Необходимо отметить, что модель Клаузиуса-Мосотти, в силу особенностей структуры уравнения (8), обладает рядом негативных свойств, в частности, ее использование для расчетов диэлектрической проницаемости материалов с повышенной поляризуемостью частиц – например, полярных жидкостей, приводит к возникновению так называемой “4 π катастрофы” [1].

Кроме того, наряду со сказанным, уточнение причинно-следственных отношений или взаимосвязей между электрическими полями в диэлектрике, которое было выполнено в рамках вывода уравнения (10), привело к устранению причин, вызывавших появление “4 π катастрофы” при расчете характеристик $\varepsilon(j\omega)$ для любых материалов [9].

Параметрический синтез $n(\omega)$ в области упругой электронной поляризации материала

Для области частот установления процессов упругой электронной поляризации, соответствующей длинам волн ультрафиолетового (от 0,2 до 0,4 мкм), видимого (от 0,4 до 0,7 мкм) и ближнего инфракрасного (от 0,7 до 4,0 мкм) диапазонов оптического спектра, параметрами, необходимыми

при имитационном моделировании рассматриваемых частотных характеристик, являются ω_{0k} , b_k , q_k и m_k внешней (оптической) электронной оболочки [8] ионов каждой разновидности, а также их концентрации в исследуемом образце.

Полагая, аналогично [1], что сила квазиупругой связи, возвращающая смещенную электронную оболочку в исходное состояние, обусловлена исключительно силой кулоновского взаимодействия ее заряда с экранированным внутренними электронами зарядом ядра, для вычисления ω_{0k} можно использовать выражения:

$$\omega_{0k} = \sqrt{\frac{Q_k q_k}{4\pi\epsilon_0 m_k r_k^3}}, \quad Q_k = Z_k e, \quad k = \overline{1, K}, \quad (12)$$

где Q_k – эффективный заряд ядра, действующий на внешнюю оболочку; Z_k – коэффициент, выражающий его величину через элементарный заряд и рассчитываемый по методике Слейтора [3]; r_k – ионный радиус; e – заряд электрона ($1,6021892 \cdot 10^{-19}$ Кл); K – количество разновидностей ионов в диэлектрике.

Принимая во внимание силу внутреннего трения [1], влияющую на электронный диполь с зарядом q_k при электромагнитном излучении с фазовой скоростью, равной скорости света в вакууме, величины b_k можно рассчитать в виде:

$$b_k = \frac{\mu_0 q_k^2 \omega_{0k}^2}{12\pi m_k c}, \quad k = \overline{1, K}, \quad (13)$$

где μ_0 – магнитная постоянная ($12,5663706144 \cdot 10^{-7}$ Гн/м); c – скорость света в вакууме ($2,99792458 \cdot 10^8$ м/с).

Числовые значения параметров q_k и m_k можно определять на основании числа оптических электронов N_k , входящих в состав рассматриваемой оболочки:

$$q_k = N_k e, \quad m_k = N_k m_e, \quad k = \overline{1, K}, \quad (14)$$

где m_e – масса электрона ($0,9109534 \cdot 10^{-30}$ кг).

Концентрации ионов n_i для каждого исследуемого материала однозначно рассчитываются на основании его химического состава, данных о плотностях композитов и атомных массах элементов.

Оценка эффективности использования моделей $\epsilon(j\omega)$ при моделировании спектров показателя преломления

Для оценки эффективности использования моделей комплексной диэлектрической проницаемости видов (8) и (10) был проведен вычислительный эксперимент, направленный на проверку адекватности кривых, полученных в ходе имитационного моделирования спектров оптического пока-

зателя преломления ряда материалов, соответствующим литературным данным экспериментальных измерений. В ходе эксперимента использовалась следующая методика.

Во-первых, поскольку в справочной литературе – например, [5], часто приводятся данные для n , соответствующие длине волны λ внешнего излучения, для перехода от $n(\omega)$ к $n(\lambda)$ в уравнениях (7), преобразованных с учетом выражений (14), осуществлялась замена $\omega \rightarrow 2\pi c/\lambda$:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}[\alpha(j\omega)] &= \alpha'_k(\lambda) = \frac{(\omega_{0k}^2 - (2\pi c/\lambda)^2) N_k e^2 / m_e}{(\omega_{0k}^2 - (2\pi c/\lambda)^2)^2 + 4b_k^2 (2\pi c/\lambda)^2}, \quad k = \overline{1, K}, \\ \operatorname{Im}[\alpha(j\omega)] &= \alpha''_k(\lambda) = -\frac{2b_k (2\pi c/\lambda) N_k e^2 / m_e}{(\omega_{0k}^2 - (2\pi c/\lambda)^2)^2 + 4b_k^2 (2\pi c/\lambda)^2}, \end{aligned} \quad (15)$$

где $\alpha'_k(\lambda)$ – вещественные длинноволновые характеристики поляризуемых частиц; $\alpha''_k(\lambda)$ – их мнимые длинноволновые характеристики.

Во-вторых, для ионных кристаллов CaF_2 , $NaCl$ и KBr – рассчитывались длинноволновые аналоги характеристик (9) и (11) в виде:

$$\begin{aligned} \varepsilon'(\lambda) &= \frac{\left(1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha'_i(\lambda)\right) \left(1 - \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha'_i(\lambda)\right) - 2 \left(\frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha''_i(\lambda)\right)^2}{\left(1 - \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha'_i(\lambda)\right)^2 + \left(\frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha''_i(\lambda)\right)^2}, \\ \varepsilon''(\lambda) &= \frac{\frac{1}{\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha''_i(\lambda)}{\left(1 - \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha'_i(\lambda)\right)^2 + \left(\frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha''_i(\lambda)\right)^2}; \end{aligned} \quad (16)$$

$$\varepsilon'(\lambda) = 1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha'_i(\lambda), \quad \varepsilon''(\lambda) = \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K n_i \alpha''_i(\lambda). \quad (17)$$

При этом расчет значений параметров, входящих в уравнения (15), проводился на основании выражений (12)-(14) и исходных данных, приведенных в табл. 1. Кроме того, в диапазоне длин волн от 0,4 до 4 мкм, на базе уравнений (16) и (17), моделировались спектры $n(\lambda)$:

$$n(\lambda) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\varepsilon'(\lambda) + \sqrt{(\varepsilon'(\lambda))^2 + (\varepsilon''(\lambda))^2} \right)}. \quad (18)$$

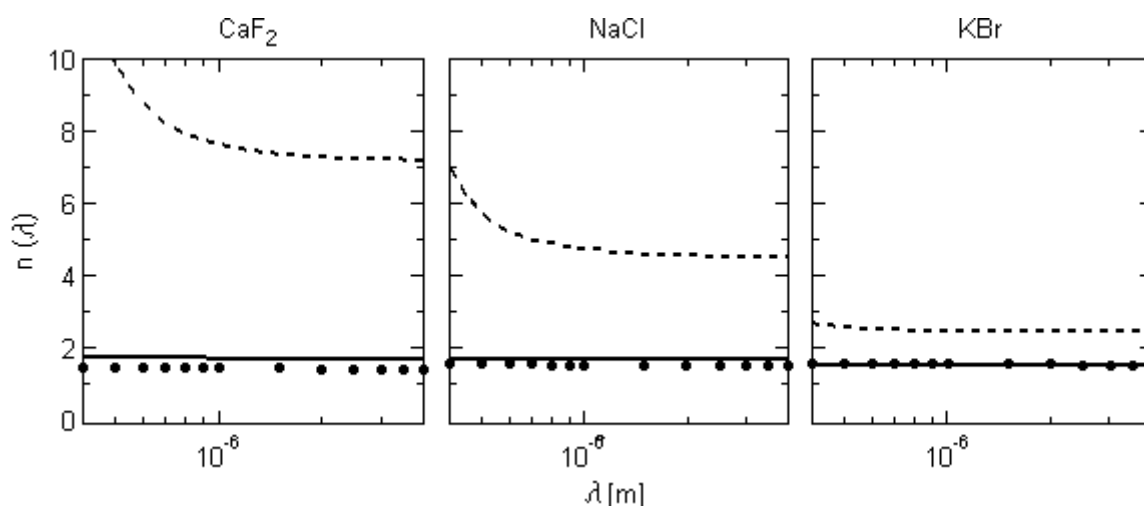
Таблица 1

| | CaF_2 | | $NaCl$ | | KBr | |
|--------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|
| | ион + | ион - | ион + | ион - | ион + | ион - |
| N_k | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 |
| Z_k | 8,75 | 4,85 | 6,85 | 5,75 | 7,75 | 7,25 |
| r_k (м) | $0,99 \cdot 10^{-10}$ | $1,36 \cdot 10^{-10}$ | $0,95 \cdot 10^{-10}$ | $1,81 \cdot 10^{-10}$ | $1,33 \cdot 10^{-10}$ | $1,95 \cdot 10^{-10}$ |
| n_i (м ⁻³) | $2,4527 \cdot 10^{28}$ | $4,9055 \cdot 10^{28}$ | $2,2311 \cdot 10^{28}$ | $2,2311 \cdot 10^{28}$ | $1,3929 \cdot 10^{28}$ | $1,3929 \cdot 10^{28}$ |

В-третьих, были построены графики (рисунок) по результатам моделирования и данным физических измерений соответствующих спектров [5], которые приведены в табл. 2. При этом по оси абсцисс была использована логарифмическая градуировка и введены условные обозначения: *пунктирная линия* – результаты моделирования на основании модели Клаузиуса-Мосотти; *сплошная линия* – результаты моделирования на основании кибернетической модели; *точки* – данные практических измерений.

Таблица 2

| λ (10^{-6} м) | $n(\lambda)$ | | | λ (10^{-6} м) | $n(\lambda)$ | | |
|-----------------------------|--------------|--------|-------|-----------------------------|--------------|--------|-------|
| | CaF_2 | $NaCl$ | KBr | | CaF_2 | $NaCl$ | KBr |
| 0,400 | 1,442 | 1,568 | 1,591 | 1,500 | 1,426 | 1,528 | 1,540 |
| 0,500 | 1,437 | 1,552 | 1,570 | 2,000 | 1,424 | 1,527 | 1,538 |
| 0,600 | 1,434 | 1,543 | 1,559 | 2,500 | 1,421 | 1,525 | 1,537 |
| 0,700 | 1,432 | 1,539 | 1,553 | 3,000 | 1,418 | 1,524 | 1,537 |
| 0,800 | 1,431 | 1,536 | 1,549 | 3,500 | 1,414 | 1,523 | 1,536 |
| 0,900 | 1,430 | 1,534 | 1,546 | 4,000 | 1,410 | 1,522 | 1,536 |
| 1,000 | 1,429 | 1,532 | 1,544 | | | | |



Результаты вычислительного эксперимента

Заключение

Проведенные исследования показали существенное преимущество кибернетической модели по сравнению с классической моделью Клаузиуса-

са-Мосотти. Действительно, в рассматриваемых диапазонах оптического спектра математическая модель показателя преломления света материалом, построенная с использованием кибернетического принципа – обратных связей, дает практически минимальный уровень отклонений между результатами аналитических расчетов спектров и данными их практических измерений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Хиппель А.Р. Диэлектрики и волны. М.: ИИЛ, 1960.
2. Рез И.С., Поплавко Ю.М. Диэлектрики. Основные свойства и применение в электронике. М.: Радио и связь. 1989.
3. Эткинс П. Кванты: Справочник концепций. М.: Мир, 1977.
4. Костюков Н.С., Еремин Е.Л., Еремин И.Е. Имитационное моделирование диэлектрической проницаемости конденсированных материалов: ультрафиолетовый и видимый спектры частот. Научно-практическое издание. Благовещенск: Изд-во АмурКНИИ АНЦ ДВО РАН, 2001.
5. Золотарев В.М., Морозов В.Н., Смирнова Е.В. Оптические постоянные природных и технических сред. Л.: Химия, 1984.
6. Костюков Н.С., Щербакова Е.В., Арташ С.М. Некоторые аспекты влияния нейтронного облучения на оптические и диэлектрические свойства керамических материалов в видимой, УФ- и ИК-области. Препринт. Благовещенск: Изд-во ДВО РАН, 1997.
7. Костюков Н.С., Еремин И.Е. Математические модели процесса общей поляризации диэлектрика // Вестник АмГУ. 2001. № 11. С. 47-48.
8. Еремин И.Е., Костюков Н.С. Построение модели процесса поляризации диэлектрика с помощью обратных связей // Информатика и системы управления. 2001. № 1. С. 45-53.
9. Костюков Н.С., Еремин И.Е. Устранение “4 π катастрофы” формулы Клаузиуса-Мосотти // Вестник АмГУ. 2001. № 13. С. 57-58.
10. Мотт Н., Герни Р. Электронные процессы в ионных кристаллах. М.: ИИЛ, 1950.

Статья представлена к публикации членом редколлегии А.В. Бушмановым.