

УДК 532:537.311.32

© 2009 г. **В.В. Еремина**, канд. физ.-мат. наук
(Амурский государственный университет, Благовещенск)

ОСОБЕННОСТИ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ СПЕКТРОВ КОНДЕНСИРОВАННЫХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СРЕД. II

Рассматриваются общие закономерности поведения диэлектрических и оптических спектров конденсированного образца при различных величинах количественного соотношения динамических параметров процессов поляризации составляющих его частиц, вызванных воздействием слабого электрического поля. Во второй части работы рассмотрены особенности частотных характеристик комплексного показателя преломления.

Ключевые слова: оптический показатель преломления, оптический показатель поглощения.

Введение

Изучение влияния структуры и химического состава вещества на его поляризационные свойства может быть осуществлено на базе исследования частотных спектров, характеризующих преломление или поглощение светового излучения исследуемым материалом. Кроме того, оптические постоянные в области собственного поглощения вещества являются фундаментальными константами, позволяющими рассчитывать целый ряд его физико-химических параметров. При этом, принимая во внимание объективное обстоятельство того, что электрическая составляющая светового потока существенно превышает магнитную составляющую, преломление (поглощение) света веществом практически определяется электрической поляризацией составляющих его частиц.

В свою очередь измерение оптических характеристик материалов в высокочастотной области электромагнитного спектра позволяет рассчитать его вытекающие диэлектрические параметры, экспериментальное определение которых другими способами в настоящий момент технически нереализуемо. Следует отметить актуальность решения и обратной задачи, заключающейся в прогнозировании оптических характеристик создаваемых материалов, проводимом на основе имитационного моделирования их поляризационных спектров.

Достаточно очевидно, что достоверность производимых расчетов целиком и полностью определяется адекватностью используемых математических моделей. В работе приведены оригинальные варианты рассматриваемых уравнений, более эффективные по сравнению с их общепринятыми аналогами.

Характеристики комплексного показателя преломления

Следуя уравнениям Максвелла, величина диэлектрической проницаемости ε материала практически эквивалентна квадрату его оптического показателя преломления n . При рассмотрении взаимодействия вещества с переменным электромагнитным полем выражения диэлектрической проницаемости и оптического показателя преломления принимают вид комплексных функций [1]:

$$\begin{aligned} n(j\omega) &= n(\omega) + j\chi(\omega); \\ \varepsilon(j\omega) &= \varepsilon_{\text{Re}}(\omega) + j\varepsilon_{\text{Im}}(\omega), \end{aligned} \quad (1)$$

где $n(\omega)$ – частотная зависимость показателя преломления; $\chi(\omega)$ – частотная зависимость показателя поглощения; $\varepsilon_{\text{Re}}(\omega)$ и $\varepsilon_{\text{Im}}(\omega)$ – соответственно вещественная и мнимая частотные характеристики комплексной диэлектрической проницаемости. Таким образом, частотные зависимости анализируемых характеристик могут быть связаны посредством соотношения:

$$\varepsilon_{\text{Re}}(\omega) + j\varepsilon_{\text{Im}}(\omega) = n^2(\omega) - \chi^2(\omega) + j2n(\omega)\chi(\omega). \quad (2)$$

В свою очередь, разделение вещественной и мнимой составляющих приведенного выражения позволяет сформировать следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{Re}}(\omega) &= n^2(\omega) - \chi^2(\omega); \\ \varepsilon_{\text{Im}}(\omega) &= 2n(\omega)\chi(\omega). \end{aligned} \quad (3)$$

Рассматривая данное математическое описание в качестве системы линейных алгебраических уравнений, отвечающих частному виду функций $n(\omega)$ и $\chi(\omega)$ при скалярном значении частоты, с одной стороны, исключив переменную χ , можно получить биквадратное уравнение

$$n^4 - \varepsilon_{\text{Re}}n^2 - 0,25\varepsilon_{\text{Im}}^2 = 0, \quad (4)$$

решение которого дает два мнимых и два вещественных корня:

$$\begin{aligned} n_{1,2} &= \pm \sqrt{\frac{\varepsilon_{\text{Re}} - \sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2 + \varepsilon_{\text{Im}}^2}}{2}}; \\ n_{3,4} &= \pm \sqrt{\frac{\varepsilon_{\text{Re}} + \sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2 + \varepsilon_{\text{Im}}^2}}{2}}. \end{aligned} \quad (5)$$

Поскольку исследуемая зависимость по своему определению описывает численную функцию вещественной части комплексной характеристики $n(j\omega)$, т.е. представляет собой массив действительных чисел, то из всего множества полученных решений следует отбросить мнимые корни $n_{1,2}$. В свою очередь, разбирая оставшуюся пару вещественных корней (принимая во внимание физическую сущность рассматриваемой функции), можно констатировать, что практической ценностью обладает единственный (положительный) корень.

Таким образом, частотная зависимость оптического показателя преломления может быть представлена в виде следующего выражения:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega)} + \varepsilon_{\text{Re}}(\omega)}{2}}. \quad (6)$$

С другой стороны, если в исходной системе уравнений исключить переменную n , то можно сформировать биквадратное уравнение относительно переменной χ

$$\chi^4 + \varepsilon_{\text{Re}} n^2 - 0,25\varepsilon_{\text{Im}}^2 = 0, \quad (7)$$

решение которого дает пару мнимых и пару вещественных корней:

$$\chi_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{-\varepsilon_{\text{Re}} - \sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2 + \varepsilon_{\text{Im}}^2}}{2}};$$

$$\chi_{3,4} = \pm \sqrt{\frac{-\varepsilon_{\text{Re}} + \sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2 + \varepsilon_{\text{Im}}^2}}{2}}. \quad (8)$$

Оценка практической ценности найденных решений позволяет прийти к выводу, что частотная зависимость оптического показателя поглощения может быть представлена в виде следующего выражения:

$$\chi(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega)} - \varepsilon_{\text{Re}}(\omega)}{2}}. \quad (9)$$

Учитывая, что уравнения (6) и (9), описывающие частотные характеристики комплексного показателя преломления, включают в себя выражение амплитудной частотной характеристики $\varepsilon_{\text{Am}}(\omega)$ комплексной диэлектрической проницаемости [2], они могут быть эквивалентно представлены в виде:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon_{\text{Am}}(\omega) + \varepsilon_{\text{Re}}(\omega)}{2}}; \quad (10)$$

$$\chi(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon_{\text{Am}}(\omega) - \varepsilon_{\text{Re}}(\omega)}{2}}. \quad (11)$$

Таким образом, анализируя конечные структуры уравнений частотных зависимостей оптических показателей преломления и поглощения, следует отметить, что они характеризуют взаимосвязь частотных спектров реальных составляющих комплексной диэлектрической проницаемости материала. При этом частотная функция показателя преломления выражает взаимное сложение амплитудной и вещественной частотных характеристик $\varepsilon(j\omega)$, а частотная функция показателя поглощения описывает их взаимное вычитание.

Рассмотрим особенности внешнего вида графиков разбираемых спектральных зависимостей применительно к имитационному моделированию характеристик процессов упругих и релаксационных колебаний частиц.

Особенности спектральных графиков функции $n(\omega)$

С целью проверки эффективности практического использования уравнения вида (10) для моделирования частотных спектров оптического показателя преломления был выполнен вычислительный эксперимент, объектом которого являлся гипотетический диэлектрик, состоящий из частиц одной и той же разновидности. При этом первая часть проводимого моделирования заключалась в расчетах характеристики $n(\omega)$ для условия существования упругих колебаний час-

тиц, коэффициент затухания которых полагался в десять раз меньшим частоты их собственных колебаний ω_0 . Вторая часть эксперимента была посвящена моделированию характеристики $n(\omega)$ для релаксационных колебаний тех же самых частиц, коэффициент затухания которых задавался в десять раз большим частоты их собственных колебаний. Полученные результаты представлены на рис. 1.

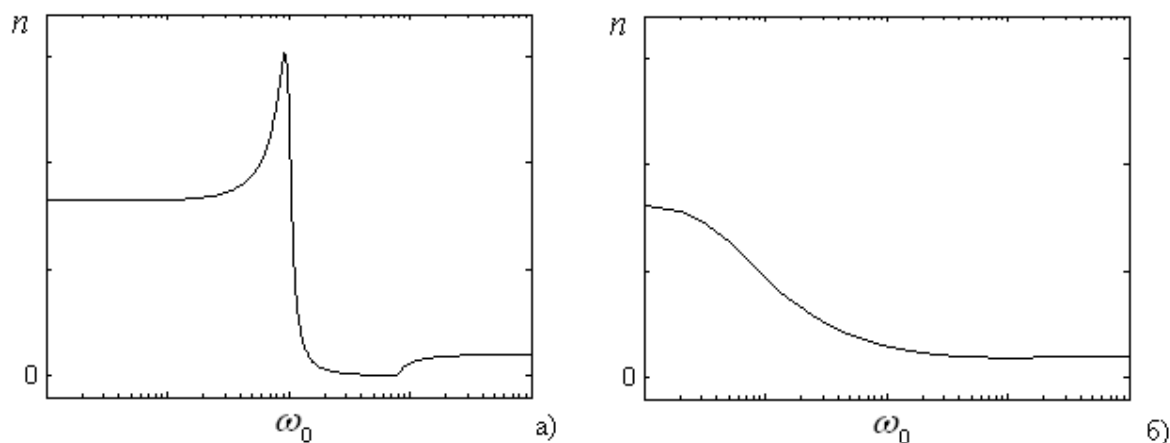


Рис. 1. Расчетные спектры оптического показателя преломления:
а) – упругие колебания частиц; б) – релаксационные колебания.

Анализ приведенных графиков позволяет сформулировать следующее. Графический образ частотного спектра $n(\omega)$, имитируемого для условия существования упругих колебаний частиц, существенно отличается от внешнего вида его реально наблюдаемых аналогов [1], представляющих собой всплеск с острым углом в нижней части, характерный для прохождения резонансного режима. Однако спектр, рассчитанный по формуле (10), имеет явно выраженный горизонтальный участок, возникающий в названном диапазоне частот. Причина обстоятельства, повлекшего выявленную расчетную аномалию, может быть вскрыта на базе рассмотрения уравнения оптического показателя преломления в форме его промежуточного выражения вида (6).

Как известно, вещественная частотная характеристика комплексной диэлектрической проницаемости, наблюдаемая в случае упругих колебаний частиц при прохождении частоты резонанса, практически совпадающей с частотой их собственных колебаний, обладает как положительными, так и отрицательными значениями. В свою очередь, мнимая частотная характеристика $\varepsilon(j\omega)$ имеет приблизительно нулевые значения во всем диапазоне частот, за исключением очень узкого энергетического выброса, достигающего своего максимума на резонансной частоте. Следовательно, присутствие горизонтального участка на графике $n(\omega)$, наблюдаемого в диапазоне частот, следующих за частотой электромагнитного резонанса исследуемой системы, может быть объяснено тем, что при совместном выполнении условий $\varepsilon_{\text{Im}}(\omega) \approx 0$ и $\varepsilon_{\text{Re}}(\omega) < 0$ функциональная зависимость (6) дает нулевые значения за счет взаимного подавления величин $\varepsilon_{\text{Re}}(\omega)$:

$$\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + 0} + \varepsilon_{\text{Re}}(\omega) = 0.$$

Отметим, что при моделировании оптического спектра для случая релаксационных колебаний тех же самых частиц разбираемая вычислительная аномалия

отсутствует, а полученные графики (с качественной точки зрения) соответствуют данным физического эксперимента. Объяснение данного факта может быть связано с тем, что при релаксационных колебаниях вещественная частотная характеристика комплексной диэлектрической проницаемости обладает только положительными значениями, т.е. взаимного подавления $\varepsilon_{\text{Re}}(\omega)$ не происходит.

Сложившаяся негативная ситуация может быть исправлена за счет использования в проводимых расчетах только абсолютных величин вещественной частотной характеристики $\varepsilon(j\omega)$, т.е. модификации уравнения (10) к виду:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon_{\text{Am}}(\omega) + |\varepsilon_{\text{Re}}(\omega)|}{2}}. \quad (12)$$

Результат имитационного моделирования частотной зависимости оптического показателя преломления на базе использования ее предлагаемой модификации представлен на рис. 2.

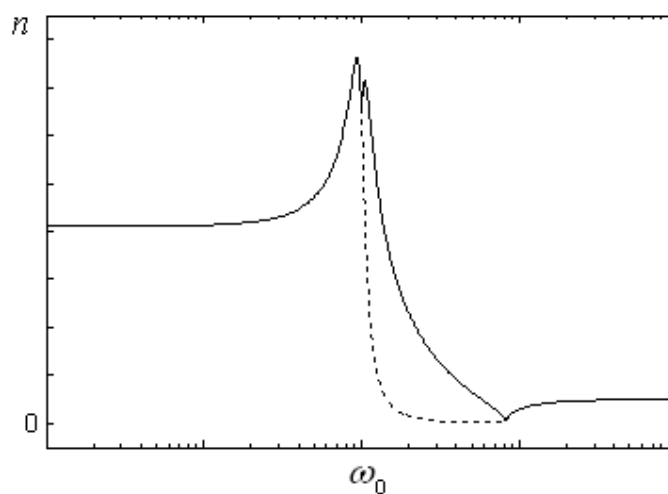


Рис. 2. Модифицированный расчетный спектр показателя преломления.

Оценка полученных изменений внешнего вида исследуемого спектрального графика показывает, что предпринятые меры по его улучшению оказываются достаточно эффективными.

Действительно, использование уравнения (12) для проведения расчетов частотной зависимости $n(\omega)$ позволяет имитировать его спектры, качественно соответствующие физически измеряемым аналогам.

Особенности спектральных графиков функции $\chi(\omega)$

Экспериментальное изучение частотных зависимостей оптического показателя преломления показывает [1], что его спектры представляют собой наборы энергетических выбросов, симметричных относительно вертикальной оси и обладающих максимумами на резонансных частотах. В свою очередь вычислительный эксперимент, направленный, на проверку эффективности уравнения (11), используемого для вычисления частотных зависимостей $\chi(\omega)$ при рассмотрении как упругих, так и релаксационных колебаний, дает результаты, представленные на рис. 3.

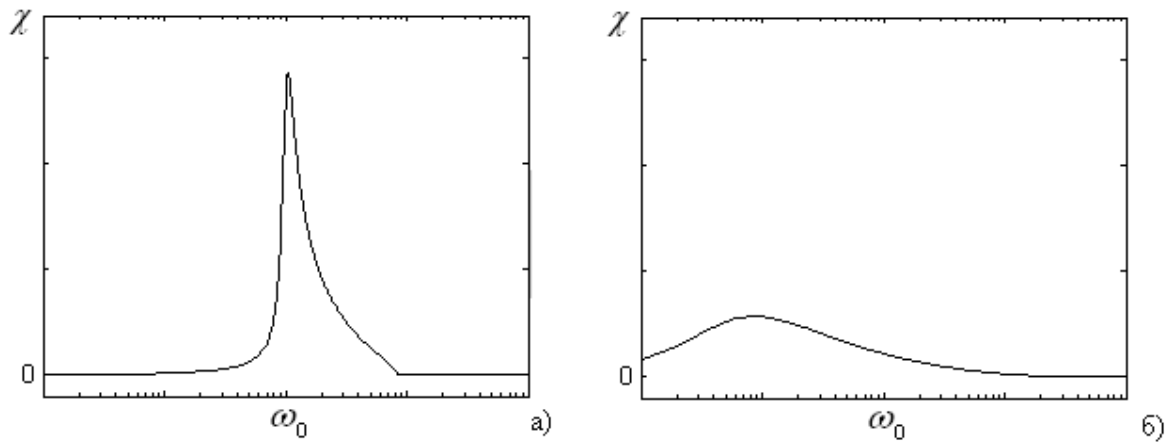


Рис. 3. Расчетные спектры оптического показателя поглощения:
 а) – упругие колебания частиц; б) – релаксационные колебания.

Анализ внешнего вида смоделированных спектров показывает, что расчет оптических характеристик релаксационных колебаний дает изображение полосы поглощения, качественно соответствующее ее реальной картине. При рассмотрении же упругих колебаний частиц вытекающий график частотной зависимости показателя поглощения принимает неестественный вид. Причина данной вычислительной аномалии, как и в предыдущем случае, связана с фактом существования отрицательных значений $\varepsilon_{\text{Re}}(\omega)$, характерных для упругих поляризационных процессов, и может быть устранена за счет использования только ее абсолютных величин.

Таким образом, предлагается модифицировать уравнение (11) к виду:

$$\chi(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon_{\text{Am}}(\omega) - |\varepsilon_{\text{Re}}(\omega)|}{2}}, \quad (13)$$

результат практического применения которого представлен на рис. 4.

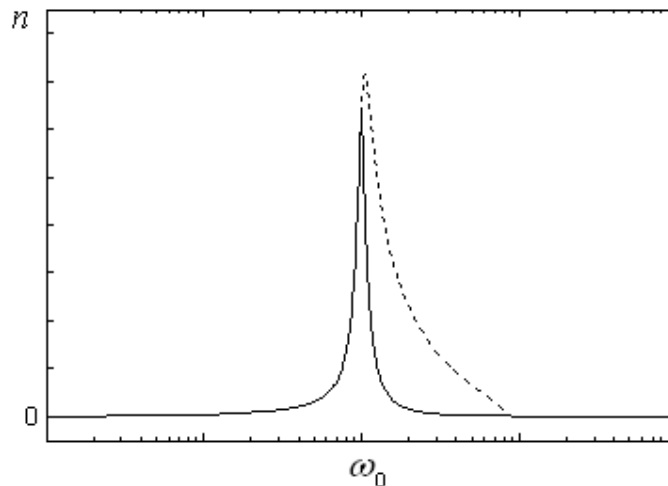


Рис. 4. Модифицированный расчетный спектр показателя поглощения.

Оценка полученных изменений показывает, что предлагаемые меры по улучшению внешнего вида исследуемого графика оказываются вполне действенными.

Кроме того, завершая рассмотрение особенностей частотных спектров зависимостей $\chi(\omega)$, следует отметить факт смещения максимумов полос поглощения от значений ω_0 в низкочастотную зону, отвечающую практически наблюдаемым резонансным частотам. Очевидно, что отмеченное обстоятельство должно приниматься во внимание при задании величин частот собственных колебаний частиц, определяемых на основании эмпирических исходных данных.

Заключение

Основные результаты, полученные в рамках проведенного исследования, позволяют сформулировать следующие выводы.

Во-первых, частотные зависимости оптических показателей преломления $n(\omega)$ и поглощения $\chi(\omega)$ светового излучения диэлектрическим материалом целиком определяются взаимосвязью величин реальных частотных характеристик его комплексной диэлектрической проницаемости – $\varepsilon_{Am}(\omega)$ и $\varepsilon_{Re}(\omega)$.

Во-вторых, при проведении расчетов оптических спектров материалов, эквивалентных их физически измеряемым аналогам, необходимо использовать только абсолютные значения вещественной частотной характеристики комплексной диэлектрической проницаемости. Данное обстоятельство является особенно важным при изучении процессов упругих колебаний частиц.

В-третьих, максимумы полос поглощения соответствуют резонансным частотам, величины которых меньше значений частот собственных колебаний частиц. При этом их физически наблюдаемая разница особенно ярко выражается в релаксационных процессах.

ЛИТЕРАТУРА

1. Золотарев В.М., Морозов В.Н., Смирнова Е.В. Оптические постоянные природных и технических сред. Справочник. – Л.: Химия. 1984.
2. Еремина В.В. Особенности поляризационных спектров конденсированных диэлектрических сред. I // Информатика и системы управления. – 2009. – № 2(20). – С. 60-65

Статья представлена к публикации членом редколлегии А.Д. Плутенко.

E-mail:

Еремина В.В. – banysheva@mail.ru.

О конкурсах на соискание золотых медалей и премий имени выдающихся ученых, проводимых Российской академией наук в 2009 году

Российская академия наук объявляет конкурсы на соискание золотых медалей и премий имени выдающихся ученых, каждая из которых присуждается в знаменательную дату, связанную с жизнью и деятельностью ученого, именем которого названа медаль или премия.

Подробности на сайте: <http://elementy.ru/events/427633>.