

МОДИФИЦИРОВАННЫЕ ФОРМУЛЫ ОПТИЧЕСКОГО ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ

С.Ю. Ланина

к.ф.-м.н., сотрудник лаборатории моделирования, обработки и управления
информацией, e-mail: swetl.lanina@yandex.ru

В.В. Еремина

к.ф.-м.н., доцент факультета математики и компьютерных наук,
e-mail: banysheva@mail.ru

О.С. Косолапова

аспирант, e-mail: chess.kosolapova@gmail.com

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение «Амурский
государственный университет», г. Благовещенск

Аннотация. Рассматривается вывод формул для вычисления оптического показателя преломления и оптического показателя поглощения, проверяется адекватность полученных зависимостей реальным спектрам рассматриваемых характеристик.

Ключевые слова: оптический показатель преломления, оптический показатель поглощения.

Взаимосвязь химического состава диэлектрика, его структуры с его поляризационными свойствами обычно выявляются за счёт анализа частотных спектров, отображающих преломление или поглощение им светового излучения. Кроме того, оптические постоянные в области собственного поглощения вещества являются фундаментальными константами, характеризующими целый ряд физико-химических параметров вещества. Измерение оптических характеристик материалов в высокочастотной области электромагнитного спектра позволяет рассчитать его характерные диэлектрические параметры, экспериментальное определение которых другими способами в настоящий момент технически не реализуемо. В свою очередь, актуальна и обратная задача, связанная с прогнозированием оптических характеристик перспективных материалов, проводимым на базе имитационного моделирования их поляризационных спектров.

Как известно [1], при рассмотрении взаимодействия вещества с переменным электромагнитным полем выражения комплексной диэлектрической проницаемости образца и его комплексного показателя преломления $n(j\omega)$ принимают вид подобающих комплексных функций:

$$\begin{aligned}n(j\omega) &= n(\omega) + j\chi(\omega); \\ \varepsilon(j\omega) &= \varepsilon'(\omega) + j\varepsilon''(\omega),\end{aligned}\tag{1}$$

где $n(\omega)$ и $\chi(\omega)$ — соответственно, частотные зависимости показателя преломления и показателя поглощения.

В свою очередь, принимая во внимание соотношение $n^2 = \varepsilon$, частотные зависимости разбираемых функциональных зависимостей общепринято связывать между собой на базе непосредственно вытекающего выражения:

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

Или

$$\begin{aligned} \varepsilon'(\omega) &= n^2(\omega) - \chi^2(\omega); \\ \varepsilon''(\omega) &= 2n(\omega)\chi(\omega). \end{aligned} \quad (3)$$

Рассмотрим математическое описание (3) в качестве системы линейных алгебраических уравнений, отвечающих частному виду функций $n(\omega)$ и $\chi(\omega)$ при скалярном значении частоты, характерному для действия статического внешнего поля. В этом случае, исключение переменной χ , даёт уравнение

$$n^4 - \varepsilon'n^2 - 0,25\varepsilon''^2 = 0, \quad (4)$$

решение которого даёт два вещественных и два мнимых корня:

$$n_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{\varepsilon' - \sqrt{\varepsilon'^2 + \varepsilon''^2}}{2}}; \quad n_{3,4} = \pm \sqrt{\frac{\varepsilon' + \sqrt{\varepsilon'^2 + \varepsilon''^2}}{2}}. \quad (5)$$

Поскольку исследуемая характеристика, по своему определению, описывает численную функцию вещественной части комплексной характеристики $p(j\omega)$, то из полученных решений следует отбросить мнимые корни $n_{1,2}$. Рассматривая оставшуюся пару вещественных корней и принимая во внимание физическую сущность рассматриваемой функции, получим, что практической ценностью обладает единственный (положительный) корень.

Следовательно, частотная зависимость оптического показателя преломления может быть представлена в виде:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon'^2(\omega) + \varepsilon''^2(\omega)} + \varepsilon'(\omega)}{2}}. \quad (6)$$

Действуя аналогичным образом, из исходной системы уравнений исключим переменную n :

$$\begin{aligned} \chi^4 + \varepsilon'\chi^2 - 0,25\varepsilon''^2 = 0, \Rightarrow \\ \chi_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{-\varepsilon' - \sqrt{\varepsilon'^2 + \varepsilon''^2}}{2}}; \quad \chi_{3,4} = \pm \sqrt{\frac{-\varepsilon' + \sqrt{\varepsilon'^2 + \varepsilon''^2}}{2}}. \end{aligned} \quad (7)$$

Рассуждая аналогично, получим, что частотная зависимость оптического показателя поглощения имеет вид:

$$\chi(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon'^2(\omega) + \varepsilon''^2(\omega)} - \varepsilon'(\omega)}{2}}. \quad (8)$$

Учитывая, что уравнения (6) и (8), описывающие частотные характеристики комплексного показателя преломления, включают в себя выражение амплитудной частотной характеристики $\varepsilon_{Am}(\omega)$ комплексной диэлектрической проницаемости, то они могут быть эквивалентно представлены в виде:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon_{Am}(\omega) + \varepsilon'(\omega)}{2}}; \quad (9)$$

$$\chi(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon_{Am}(\omega) - \varepsilon'(\omega)}{2}}. \quad (10)$$

Таким образом, принимая во внимание структуры частотных зависимостей оптических показателей преломления и поглощения представленного типа, можно отметить, что они характеризуют взаимосвязь частотных спектров реальных составляющих комплексной диэлектрической проницаемости материала.

С целью проведения качественной оценки практической эффективности рассматриваемых уравнений был выполнен ряд вычислительных экспериментов, общим объектом которых послужил гипотетический диэлектрик, состоящий из частиц одной и той же разновидности. Разберём выявленные с их помощью особенности внешнего вида имитационных графиков $n(\omega)$ и $\chi(\omega)$, достаточно объективно характеризующих общие особенности изучаемых спектральных зависимостей применительно к отдельному рассмотрению упругих и релаксационных колебаний частиц.

Первая часть проведённого исследования заключалась в расчётах спектра $n(\omega)$ для условия существования упругих колебаний частиц, коэффициент затухания которых полагался в десять раз меньше частоты их собственных колебаний ω_0 . Вторая часть эксперимента представляла моделирование спектра $n(\omega)$ для релаксационных колебаний тех же самых частиц, коэффициент затухания которых задавался в десять раз больше частоты их собственных колебаний. Полученные имитационные спектры изображены на рис. 1.

Анализ графиков показал, что графический образ частотного спектра $n(\omega)$, имитируемого для упругих колебаний частиц, существенно отличается от его реальных аналогов, которые чаще всего представляют собой резонансный всплеск с острым углом в нижней части. В свою очередь, спектр, рассчитанный на базе использования формулы (6), обладает явно выраженным горизонтальным участком, находящимся вблизи частоты собственных колебаний (рис. 1, а). При этом для моделирования спектра $n(\omega)$ в случае релаксационных колебаний тех же самых частиц подобная вычислительная аномалия отсутствует, а полученные графики хорошо соответствуют данным физического эксперимента в рамках их оценки с качественной точки зрения (рис. 1, б).

Причина полученного несовпадения может заключаться в следующем: с одной стороны, вещественная частотная характеристика комплексной диэлектрической проницаемости разбираемого образца, детализируемая в области электромагнитного резонанса его частиц для случая их упругих колебаний, обладает как положительными, так и отрицательными значениями; с другой –

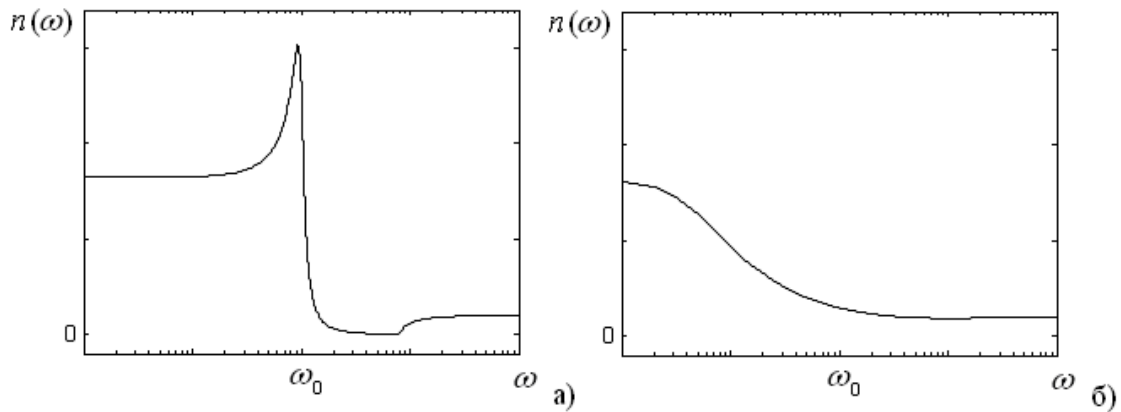


Рис. 1. Расчетные спектры оптического показателя преломления: а) — упругие колебания частиц; б) — релаксационные колебания

его мнимая частотная характеристика имеет практически нулевые значения во всем диапазоне частот за исключением узкого энергетического выброса с максимумом на резонансной частоте. Следовательно, присутствие горизонтального участка, отмеченного выше на спектре $n(\omega)$, оказывается вызванным тем, что при совместном выполнении условий $\varepsilon''(\omega) \simeq 0$ и $\varepsilon'(\omega) < 0$ зависимость вида (6) даёт приблизительно нулевые значения, обусловленные взаимным подавлением текущих величин $\varepsilon'(\omega)$:

$$\sqrt{\varepsilon'^2(\omega) + 0} - \varepsilon'(\omega) = 0. \tag{11}$$

Сложившаяся ситуация может быть исправлена за счёт использования только абсолютных величин вещественной частотной характеристики $\varepsilon(j\omega)$, т.е. видоизменения структуры традиционного выражения $n(\omega)$ к его альтернативному представлению в виде:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon'^2(\omega) + \varepsilon''^2(\omega)} + |\varepsilon'(\omega)|}{2}}. \tag{12}$$

Результаты имитационного моделирования частотной зависимости оптического показателя преломления, проведённого на базе использования модифицированной формулы (12), изображены на рис. 2. Объективная оценка вытекающих изменений внешнего вида исследуемого спектрального графика показывает, что принятие предлагаемых авторами мер, направленных на его качественное улучшение, оказывается весьма эффективным. Следовательно, применение уравнения (12) для проведения практических расчётов частотных зависимостей $n(\omega)$ позволяет имитировать оптические спектры материалов, наиболее адекватные их физически измеряемым свойствам.

Аналогичным образом были построены имитационные спектры, полученные с помощью уравнения (8) и изображённые на рис. 3. Необходимо отметить, что физические измерения разбираемых зависимостей показывают, что внешний

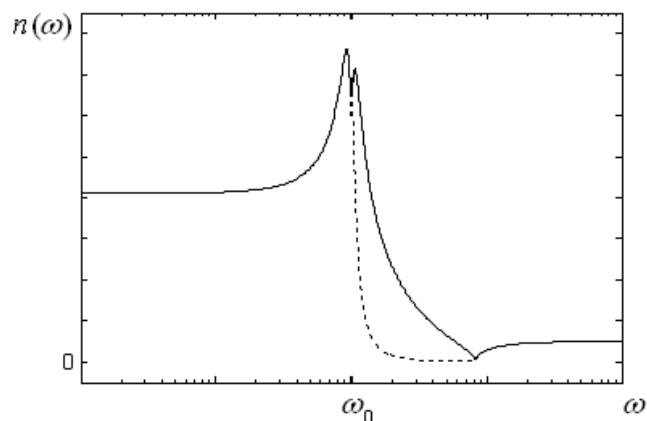
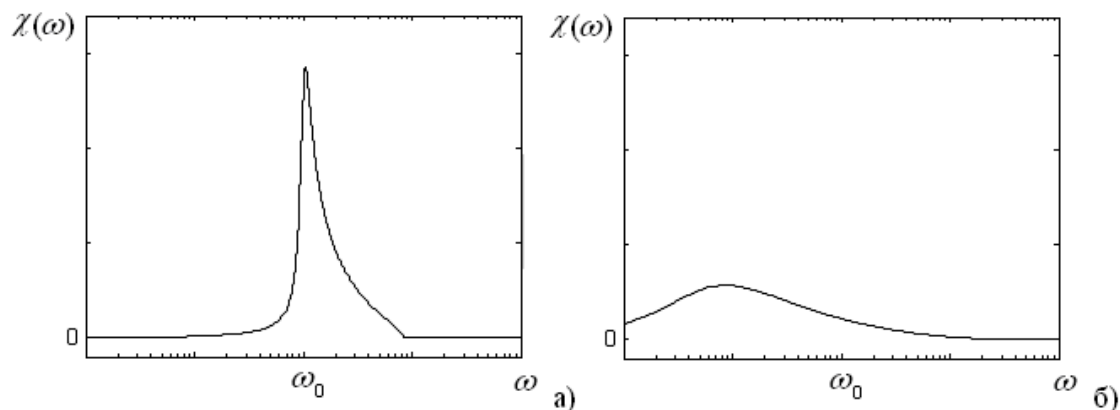
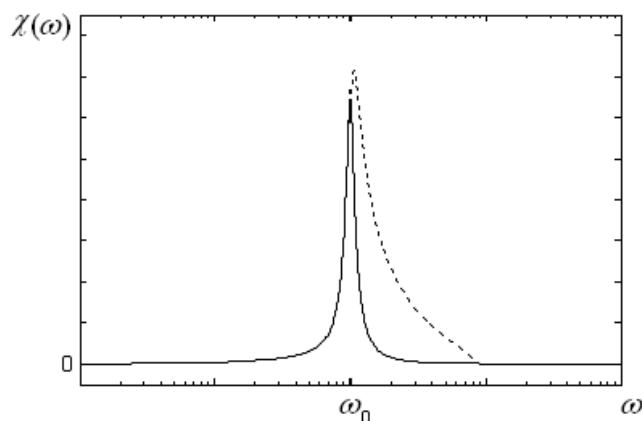
Рис. 2. Модифицированный расчётный спектр $n(\omega)$ 

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

вид их графиков представляет совокупность энергетических выбросов, симметричных относительно своих вертикальных осей.

Анализ представленных графиков показывает, что расчёт оптических характеристик релаксационных колебаний даёт изображение полосы поглощения, качественно соответствующее их реальной картине. В свою очередь, при рассмотрении упругих колебаний частиц имитационный спектр опять принимает неестественный вид.

Причина очередной вычислительной аномалии, также как и в предыдущем случае, может быть связана с фактом существования отрицательных значений $\varepsilon'(\omega)$, характерных для упругих поляризационных процессов, и устранена за счёт использования только её абсолютных величин. Для этого уравнение частотной зависимости $\chi(\omega)$, обладающее традиционной структурой (8), должно быть модифицировано к виду:

Рис. 4. Модифицированный расчётный спектр $\chi(\omega)$

$$\chi(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon'^2(\omega) + \varepsilon''^2(\omega)} - |\varepsilon'(\omega)|}{2}}. \quad (13)$$

Результаты имитационного моделирования частотной зависимости оптического показателя поглощения, проведённого на базе предлагаемой формулы (13), изображены на рис. 4.

Оценка полученных изменений исследуемого графика показывает качественное улучшение его вида. Следовательно, модифицированное уравнение (13) позволяет имитировать оптические спектры показателя поглощения материалов, наиболее адекватные их физически измеряемым свойствам.

В заключении отметим, что полученные результаты позволяют обоснованно сформулировать следующие выводы: частотные зависимости оптических показателей преломления и поглощения светового излучения диэлектрическим материалом целиком определяются взаимосвязью величин вещественной и амплитудной частотных характеристик его комплексной диэлектрической проницаемости; 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. Юхневич Г.В. Инфракрасная спектроскопия воды. М.: Наука, 1973.
2. Золотарев В.М., Морозов В.Н., Смирнова Е.В. Оптические постоянные природных и технических сред. Справочник. Л.: Химия. 1984.
3. Еремина В.В. Особенности поляризационных спектров конденсированных диэлектрических сред. I // Информатика и системы управления. 2009. № 2(20). С. 60–65.

MODIFIED FORMULA OPTICAL REFRACTIVE INDEX

S.Y. Lanina

Researcher of the Laboratory of modeling, information processing and management,
candidate of physical and mathematical sciences, e-mail: swetl.lanina@yandex.ru

V.V. Eremina

Associate Professor of Information and Control Systems of the Faculty of Mathematics
and Computer Science, PhD in Physics and Mathematics, e-mail: anysheva@mail.ru

O.S. Kosolapova

post-graduate student, Department of Information and councils-Barking Systems Faculty
of Mathematics and Informatics, e-mail: chess.kosolapova@gmail.com

Amur State University, Blagoveshchensk

Abstract. We consider the derivation of the formulas for the calculation of the optical refractive index and optical absorption coefficient, and verify their adequacy to the real spectra of the characteristics.

Keywords: optical refractive index, optical absorption coefficient.