DOI: 10.17117/na.2016.08.01.284

<http://ucom.ru/doc/na.2016.08.01.284.pdf>

Поступила (Received): 09.08.2016

Маслов Н.А., Елисеева С.В. Метод S-матриц для композитных сред

Maslov N.A., Eliseeva S.V.
S-matrix method for composite medium

В работе описывается применение метода матриц рассеяния (S-матриц) для исследования эффективных оптических параметров (диэлектрической проницаемости и показателя преломления среды) элементарной ячейки упорядоченного нанокомпозита состава «диэлектрическая матрица – металлические наночастицы»

Ключевые слова: теория эффективной среды, эффективные материальные параметры, фотонные кристаллы, нанокомпозитные среды, матрица рассеяния

Маслов Николай Александрович
Ульяновский государственный университет
г. Ульяновск, ул. Л. Толстого, 42

Елисеева Светлана Вячеславовна
Кандидат физико-математических наук,
преподаватель
Ульяновский государственный университет
г. Ульяновск, ул. Л. Толстого, 42

The paper describes the application of the method of scattering matrix (S-matrix) for the study of effective optical parameters (permittivity and refractive index of the medium) of the unit cell of an ordered nanocomposite composition "dielectric matrix – metal nanoparticles"

Key words: effective medium, effective parameters, photonic crystals, nanocomposite, scattering matrix

Maslov Nikolay Alexandrovitch
Ulyanovsk state university
Ulyanovsk, L. Tolstoy st., 42

Eliseeva Svetlana Vjacheslavovna
Candidate of Physical and Mathematical Sciences,
teacher
Ulyanovsk state university
Ulyanovsk, L. Tolstoy st., 42

При моделировании композитов с включениями, конечно-элементные расчеты сопряжены с высокой затратой ресурсов на построение и вычисление. Для снижения трудоемкости и во избежание накопления численных ошибок удобно применить описанное в [1] разделение упорядоченного композита на отдельные элементарные ячейки, представляющие собой простейший, наименьший объем рассматриваемой среды. Эффективные параметры композита при этом удобно получить методом S-матриц [2-3].

В настоящей работе приведено сравнение метода S-матриц и приближения Максвелла-Гарнетта для определения эффективного показателя преломления элементарной ячейки нанокомпозитной среды.

Метод S-матриц

Рассмотрим нанокомпозитную среду (НКС), которая представляет собой непроводящую диэлектрическую матрицу с однородно распределенными в ней

металлическими наночастицами. ДП материала матрицы ε_m , ДП наночастиц ε_p . Магнитные проницаемости считаем равными единице. Все наночастицы являются сферическими и имеют одинаковый радиус a .

Для ДП металлических наночастиц используем выражение, которое следует из известной модели Друде [4]:

$$\varepsilon_p(\omega) = \varepsilon_0 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma}, \quad (1)$$

где ω_p – плазменная частота, ε_0 – вклад решетки, γ – скорость релаксации.

Удобно получить эффективные параметры ячейки элементарной ячейки, и распространить их на всю среду. Для этого композит разбивается на кубические объёмы с ребром d , содержащими шар радиуса a . Для полученных ячеек справедливы выражения [2]:

$$\begin{pmatrix} E_{x0} \\ H_{y0} \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} E_{x1} \\ H_{y1} \end{pmatrix}; \quad \hat{T} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(k_0 n_{ef} d) & -(in_{ef}^{-1}) \sin(k_0 n_{ef} d) \\ (in_{ef}) \sin(k_0 n_{ef} d) & \cos(k_0 n_{ef} d) \end{pmatrix} \quad (2)$$

Здесь $k = k_0 n_{ef}$ – волновой вектор в среде, $n_{ef} = \sqrt{\varepsilon_{ef}(\omega)\mu_{ef}}$ – эффективный показатель преломления, $k_0 = \omega/c$ – вакуумный волновой вектор, а ω и c – частота и скорость волны в вакууме.

Для определения эффективных параметров композитной среды удобно применить обратную задачу, определяя искомые величины из амплитуд электрического поля отражённой и падающей волн на границах рассматриваемой элементарной ячейки [2]:

$$\begin{pmatrix} B_0 \\ B_1 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Здесь A_0, B_0 – амплитуды падающей и отраженной волн на границе $z_0 = 0$, A_1, B_1 – амплитуды падающей и отраженной волн на границе $z_1 = d$, S – матрица рассеяния 2x2, причем для рассмотренной среды $S_{12} = S_{21}$, $S_{11} = S_{22}$. Элементы матрицы рассеяния связываются с матрицей передачи выражениями:

$$\begin{aligned} S_{11} &= \frac{k_0(T_{11} - T_{22}) + i(k_0^2 T_{12} + T_{21})}{k_0(T_{11} + T_{22}) + i(k_0^2 T_{12} - T_{21})}, & S_{12} &= \frac{2k_0 \det \hat{T}}{k_0(T_{11} + T_{22}) + i(k_0^2 T_{12} - T_{21})} \\ S_{21} &= \frac{2k_0}{k_0(T_{11} + T_{22}) + i(k_0^2 T_{12} - T_{21})}, & S_{22} &= \frac{k_0(T_{22} - T_{11}) + i(k_0^2 T_{12} + T_{21})}{k_0(T_{11} + T_{22}) + i(k_0^2 T_{12} - T_{21})}. \end{aligned} \quad (4)$$

С учетом (7) и (10) выражения для S-параметров примут вид:

$$\begin{aligned} S_{11} = S_{22} &= (2n_{ef})^{-1}(n_{ef} - 1)\sin(k_0 n_{ef} d) \\ S_{12} = S_{21} &= \frac{2n_{ef}}{2n_{ef} \cos(k_0 n_{ef} d) + (n_{ef} - 1)\sin(k_0 n_{ef} d)} \end{aligned} \quad (5)$$

n_{ef} – эффективный показатель преломления, d – толщина слоя.

$$n_{ef} = \frac{1}{k_0 d} \left(\pm \arccos \left(\frac{1}{2S_{21}} (1 - S_{21}^2 + S_{11}^2) \right) \right) \quad (6)$$

Результаты и обсуждения

Было произведено сравнение полученных результатов согласно формуле (6) с точного расчета по формуле Максвелла-Гарнетта в виде [4]:

$$\varepsilon_{ef} = \varepsilon_m \left(1 + \frac{\eta(\varepsilon_p - \varepsilon_m)}{\varepsilon_m + 1/3(1-\eta)(\varepsilon_p - \varepsilon_m)} \right), \quad (7)$$

где η – объемная доля металлических включений.

Рис. 2. 1, 3 – результаты расчета; 2, 4 – МГ при $a=2.5$ nm
а) $\eta = 0.01, 0.05$, б) $\eta = 0.1, 0.5$

Графические зависимости реальной части эффективного показателя преломления для элементарной ячейки с частицей диаметром $a=2.5$ nm и $\eta = 0.01, 0.05, 0.1, 0.5$ приведены на рис. 2. При повышении η наблюдается кратный прирост амплитуды и расширение диапазона плазмонного резонанса.

При малых коэффициентах (рис. 2а) заполнения наблюдается хорошее совпадение расчетов методом S-матриц и формулой Максвелл-Гарнетта. Отклонения появляются при $\eta = 0.5$ (рис. 2б), в области, что с учетом [5], позволяет говорить о повышенной точности метода S-матриц по сравнению с аналитическим расчетом.

Закключение

Показано, что метод S-матриц лучше описывает свойства нанокомпозитных сред при больших размерах включений и высоком коэффициенте заполнения. При этом данным методом доступно описание элементарных ячеек нанокомпозитных сред.

Список используемых источников:

1. Макеева Г.С., Голованов О.А., Вареница В.В. Математическое моделирование дифракции ТЕМ-волны на периодических 2D-структурах из микролент графена конечной длины в терагерцовом диапазоне // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2014. Т. 17. №4. С. 17-26.

2. Smith D.R., Schultz S. Determination of effective permittivity and permeability of metamaterials from reflection and transmission coefficients // *Physical Review B*. Vol. 65. Art. 195104.
3. Smith D.R., Vier D.C., Koschny T., Soukoulis C.M. Electromagnetic parameter retrieval from inhomogeneous metamaterials // *Physical Review*, 2005. Vol. 71. Art. 036617.
4. Дьяченко П.Н., Микляев Ю.В. Одномерный фотонный кристалл на основе нанокомпозита: металлические наночастицы-диэлектрик // *Компьютерная оптика*, 2007. Т. 31. №1. С. 31-34.
5. Ораевский А.Н., Проценко И.Е. Высокий показатель преломления и другие оптические свойства гетерогенных сред // *Письма в ЖЭТФ*. 2000. Т. 72. С. 641-646.

© 2016, Маслов Н.А., Елисеева С.В.

Метод S-матриц для композитных сред

© 2016, Maslov N.A., Eliseeva S.V.

S-matrix method for composite medium