

# ЭФФЕКТИВНЫЙ ВОЛНОВОЙ ВЕКТОР ИЗЛУЧЕНИЯ В ДВУМЕРНОМ ДВУХКОМПОНЕНТНОМ КОМПОЗИТЕ

Р.С. Пузько \*<sup>1</sup>, А.М. Мерзликин<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук, Москва, Россия

Статья поступила в редакцию 12.02.2024

Одобрена после рецензирования 06.04.2024

Принята к публикации 21.05.2024

## Аннотация

Исследован эффективный волновой вектор излучения, распространяющегося в двумерном композите из двух компонент, расположенных в шахматном порядке. Показано, что в длинноволновом пределе эффективный волновой вектор сходится к электростатическому решению для статистически симметричного двухкомпонентного композита.

**Ключевые слова:** композитные материалы, теория гомогенизации

EDN DUAQBХ

doi:10.24412/2949-0553-2024-210-11-17

## Введение

Развитие технологии привело к созданию электродинамических композитных материалов – многокомпонентных структур с различными свойствами компонент. Структура и состав обеспечивают электродинамические свойства искусственных композитов, нехарактерные для однородных материалов [1]. Однако описание оптических свойств композитных образцов сопряжено с ресурсоемкими расчетами, сложностью анализа результатов численного эксперимента, неоднозначностью трактовки измерений. В связи с этим огромное значение для развития современной электродинамики получила задача гомогенизации уравнений Максвелла [2, 3].

Задача гомогенизации заключается в построении процедуры усреднения уравнений Максвелла, в результате которой задача о рассеянии излучения на неоднородном образце заменяется задачей рассеяния на однородном образце. При этом материальные параметры, описывающие такой однородный образец, должны обеспечивать с заданной точностью такое же рассеянное поле, что и в исходной задаче. Данные параметры называют эффективными. Таким образом, эффективные параметры позволяют описать рассеяние света на структурированном образце без учета неоднородной микроскопической структуры.

Распространение излучения в неоднородном образце зависит от нескольких масштабов: размера образца ( $L$ ), размера неоднородности ( $\xi$ ) и длины волны ( $\lambda$ ). Гомогенизация уравнений Максвелла должна явным образом учитывать многомасштабность задачи. Корректность вводимых эффективных параметров напрямую зависит от соотношения между масштабами [4]. Как правило, предполагается, что линейный размер  $L$  композитной системы достаточно велик, а характерный размер неоднородностей достаточно мал, чтобы композит можно считать однородным в макроскопическом смысле. При этом эффективные параметры, получаемые при гомогенизации уравнений Максвелла для образца конечного размера  $L$ , должны сходиться к постоянным значениям с ростом размера образца – это свойство называется самоусреднением.

Задача гомогенизации значительно различается в электростатике и электродинамике. В статике уравнения Максвелла разделяются на две независимые системы уравнений – на электрическое и магнитное поля. Поэтому в качестве эффективных параметров выступают эффективные диэлектрическая и магнитная проницаемости. Микроскопическое описание полей сводится к безразмерному уравнению

\* Автор, ответственный за переписку: Роман Сергеевич Пузько, roman998@mail.ru

Лапласа. Благодаря этому для периодического композитного материала построена математически строгая теория G-конвергенции [5]. Кроме того, получены некоторые точные результаты: ограничения Хашина-Штрикмана [6] на значение эффективной диэлектрической проницаемости, решение Дыхне для двумерной смеси на пороге перколяции [7].

Решение Дыхне дает значение эффективной проводимости для статистически симметричной смеси двух компонент  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$ : если композит в статистическом смысле не изменяется при замене первой компоненты на вторую и наоборот  $\sigma_1 \leftrightarrow \sigma_2$ , то эффективная проводимость  $\sigma_{eff} = \sqrt{\sigma_1 \sigma_2}$  (аналогично и для диэлектрических проницаемостей). В силу симметрии системы относительно замены компонент их концентрации одинаковы  $p_1 = p_2 = p_c = 0.5$ , где  $p_c$  – порог перколяции для двумерной системы. Стоит отметить, что решение Дыхне получено с помощью аргумента о статистической симметрии в рамках электростатической задачи. При этом отсутствуют какие-либо оценки применимости этого решения за пределами электростатики. В то же время свойства системы на пороге перколяции значительно изменяются при возмущении параметров.

В электродинамике задача гомогенизации значительно отличается от случая электростатики: электрическое и магнитное поля связаны. В [8, 9] показано, что даже в длинноволновом пределе эффективные диэлектрическая и магнитная проницаемости не самоусредняются с ростом размера композита, т.е. они не могут выступать в роли эффективных параметров. Кроме того, задача гомогенизации в электродинамике становится многомасштабной: возникают дополнительные масштабы, связанные с длиной волны внутри компонент композита. Вследствие этого перестает работать теория G-конвергенции. Таким образом, возникает неопределенность даже в выборе эффективных параметров [8, 10].

Тем не менее для слоистых систем без поглощения показано, что вне зависимости от соотношения между толщиной слоя и длиной волны можно ввести самоусредняющийся эффективный волновой вектор [11, 12]. При этом эффективный волновой вектор удовлетворяет соотношениям вида Крамерса-Кронига, а его действительная и мнимая части имеют физическую интерпретацию [12]. Кроме того, в случае двумерного периодического композита показано [13], что эффективный волновой вектор в длинноволновом пределе сходится к статическому значению, получаемому из теории G-конвергенции  $k_{eff} \rightarrow k_0 \sqrt{\varepsilon_G}$ .

Целью данной работы является численная проверка сходимости эффективного волнового вектора для электродинамической задачи в длинноволновом пределе к электростатическому решению Дыхне для случая «шахматного» композита.

### «Шахматный» композит

В работе [7] рассмотрен двумерный композит, состоящий из двух компонент с различными электрофизическими свойствами. При этом статистически композит симметричен, т.е. замена компонент одна на другую не приводит к статистическим изменениям пространственного распределения электрофизических свойств. Заменяем переменные в уравнениях Максвелла в статике: от полей  $\vec{E}$  и  $\vec{D}$  перейдем к полям

$$\begin{aligned} \vec{E}' &= [\vec{N} \times \vec{D}] / \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2} \\ \vec{D}' &= \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2} [\vec{N} \times \vec{E}], \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\vec{N}$  – нормаль к плоскости композита. При этом вид статических уравнений Максвелла не изменится, а используемые в них константы  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$  для компонент поменяются местами. В силу статистической симметрии относительно замены компонент для новой системы уравнений сохраняется эффективный параметр, т.е. для средних полей верно  $\langle \vec{D} \rangle = \varepsilon_{eff} \langle \vec{E} \rangle$  и  $\langle \vec{D}' \rangle = \varepsilon_{eff} \langle \vec{E}' \rangle$ . В то же время замена (1) позволяет получить соотношение между средними полями  $\langle \vec{D}' \rangle$ ,  $\langle \vec{E}' \rangle$  из уравнения  $\langle \vec{D} \rangle = \varepsilon_{eff} \langle \vec{E} \rangle$ , откуда следует

$$\varepsilon_{eff}^{Dykhne} = \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2}. \quad (2)$$

Данное соотношение получено из строгого рассуждения в электростатике. Однако в электродинамике система уравнений Максвелла имеет более сложный вид, а эффективную диэлектрическую проницаемость некорректно вводить из-за её мезоскопических свойств [8, 9, 14]. Тем не менее может быть введен эффективный показатель преломления [12, 13], совпадающий в случае периодического композита с блоховским волновым вектором. В длинноволновом пределе эффективный волновой вектор сходится к значению, соответствующему предсказаниям G-конвергенции.

В данной работе рассмотрим сходимость эффективного волнового вектора – блоховского волнового вектора – к решению Дыхне (2) для двумерного композита, имеющего шахматную структуру (см. Рис. 1).

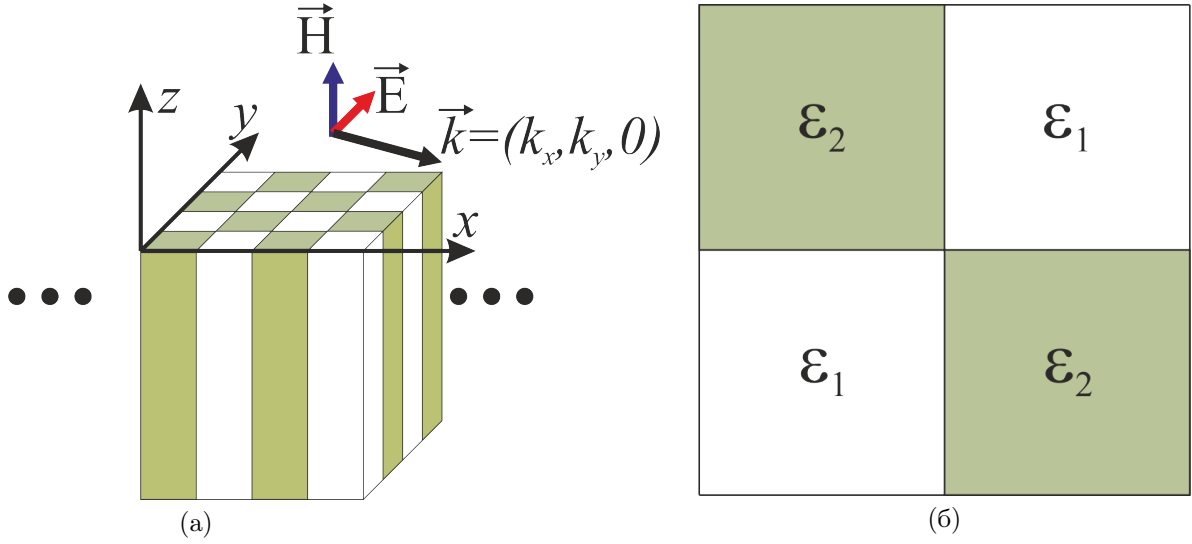


Рисунок 1 – (а) Симметричный композит из двух компонент, расположенных в шахматном порядке, и (б) рассматриваемый в расчетах период системы

При этом необходимо рассмотреть случай поляризации волны в плоскости композита, что соответствует формулировке задачи для электростатического решения Дыхне.

### Эффективный волновой вектор

Рассмотрим систему уравнений Максвелла

$$\begin{aligned} [\nabla \times \vec{E}] &= ik_0 \vec{H} \\ \frac{i}{k_0} \frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} [\nabla \times \vec{H}] &= \vec{E}. \end{aligned} \quad (3)$$

Для рассматриваемой поляризации удобно перейти к уравнению на  $\vec{H}$ , поскольку при этом достаточно ограничиться решением скалярного уравнения на компоненту  $H_z$  (см. Рис. 1а)

$$\left[ \nabla \times \frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} [\nabla \times \vec{H}] \right] = k_0^2 \vec{H}. \quad (4)$$

Используя свойство периодичности системы, разложим в ряд Фурье обратную к диэлектрической проницаемости величину

$$\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} = \sum_{n_x, n_y} \tilde{\varepsilon}_{n_x, n_y}^{(-1)} \exp[i(G_x n_x x + G_y n_y y)], \quad (5)$$

где  $G_i$  –  $i$ -ая компонента вектора обратной решетки. Рассмотрим период композита, изображенный на Рис. 1б. Будем искать решение (4) в виде блоховской волны с волновым вектором  $\vec{k}(k_x; k_y; 0)$ :

$$\vec{H}(x, y) = \vec{e}_z H_{per}(x, y) \exp[i(k_x x + k_y y)], \quad (6)$$

где  $H_{per}(x, y)$  – периодическая в плоскости композита функция

$$H_{per}(x, y) = \sum_{n_x, n_y} H_{n_x, n_y} \exp[i(G_x n_x x + G_y n_y y)]. \quad (7)$$

После подстановки (6), (7) в (4) получаем систему уравнений

$$\sum_{n'_x, n'_y} H_{n'_x, n'_y} \tilde{\varepsilon}_{n_x - n'_x, n_y - n'_y}^{(-1)} \{ (k_x + G_x n'_x)(k_x + G_x n_x) + (k_y + G_y n'_y)(k_y + G_y n_y) \} = k_0^2 H_{n_x, n_y}. \quad (8)$$

В дальнейшем будем полагать  $G_x = G_y = G$ . Расчет эффективного волнового вектора  $\vec{k}$  будем проводить путем численного поиска нулей определителя системы уравнений (8). Для получения численного решения будем использовать конечное число гармоник Фурье разложения:  $2R_{max} + 1$  гармоник вдоль каждой из осей, где  $R_{max}$  – параметр отсечки. Для обращения матрицы уравнения (8) используем метод  $LU$ -факторизации.

### Эффективный волновой вектор «шахматного» композита в длинноволновом пределе

В дальнейших расчетах положим постоянной длину волны, а период системы будем варьировать. В длинноволновой области для «шахматного» композита изочастота имеет вид окружности (см. Рис. 2). Радиус окружности  $k_{eff} = k_0 n_{eff}$  соответствует эффективному волновому вектору.

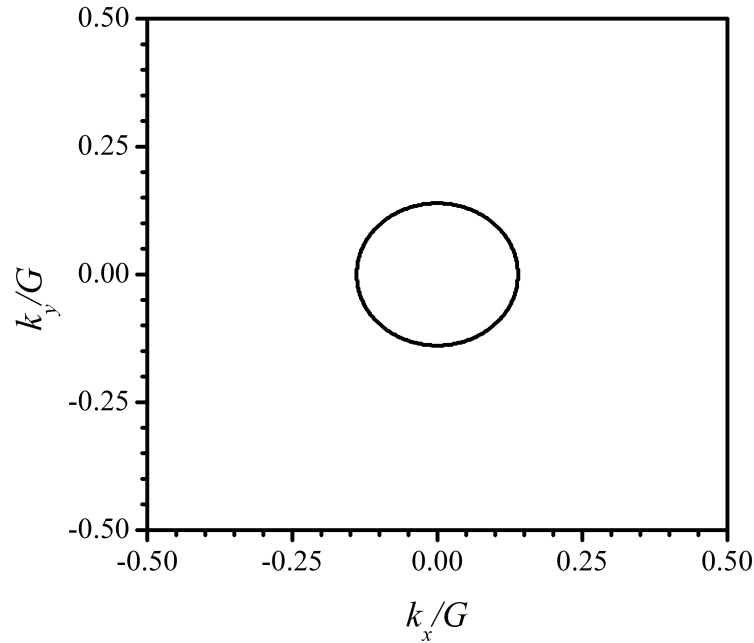


Рисунок 2 – Изочастота для двумерного периодического композита с диэлектрическими проницаемостями компонент  $\epsilon_1 = 1$ ,  $\epsilon_2 = 4$ ,  $k_0 = 0.1G$

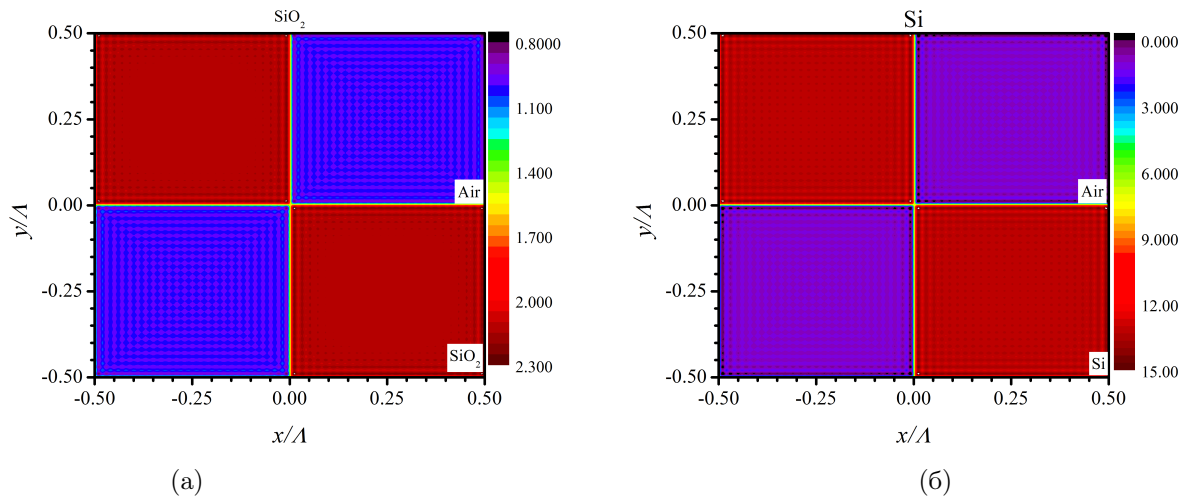


Рисунок 3 – Распределение диэлектрической проницаемости в периоде для композита из (а)  $SiO_2$  и (б)  $Si$ , восстановленные из Фурье-образа при  $R_{max} = 50$ ,  $k_0 = 0.001G$

В качестве композитов далее рассмотрим «шахматные» структуры, в которых в качестве компонент выступают воздух ( $\epsilon_1 = 1$ ) и  $SiO_2/Si$  ( $\epsilon_2 = 2.13$  или  $\epsilon_2 = 13.22$  соответственно). При численном решении уравнения (8) приходится обрезать максимальный порядок в разложении Фурье, что приводит к дополнительной неточности в расчетах помимо численной ошибки. В расчетах использовалось до  $2R_{max} + 1 = 101$  гармоники вдоль каждой из осей. На Рис. 3 представлены восстановленные из Фурье-образов при  $R_{max} = 50$  распределения диэлектрической проницаемости. Стоит отметить, что с ростом отсечки  $R_{max}$  происходит довольно медленное убывание Фурье-образа величины (5):  $\bar{\epsilon}_{n_x, n_y}^{(-1)} \sim 1/n_x n_y$ , что затрудняет повышение точности расчета путем повышения отсечки  $R_{max}$ . Тем не

менее при  $R_{max} = 50$  для Фурье-образа диэлектрической проницаемости наблюдается хорошее соответствие с исходным распределением диэлектрической проницаемости. Подобная картина наблюдается и для обратной к  $\varepsilon(\vec{r})$  величины, используемой в расчетах.

В длинноволновом пределе эффективный показатель преломления  $n_{eff}$  сходится к постоянной величине (см. Рис. 4). Таким образом, для проверки сходимости эффективного волнового вектора к  $k_0\sqrt{\varepsilon_{eff}^{Dyhne}}$  необходимо установить значение соответствующей постоянной величины.

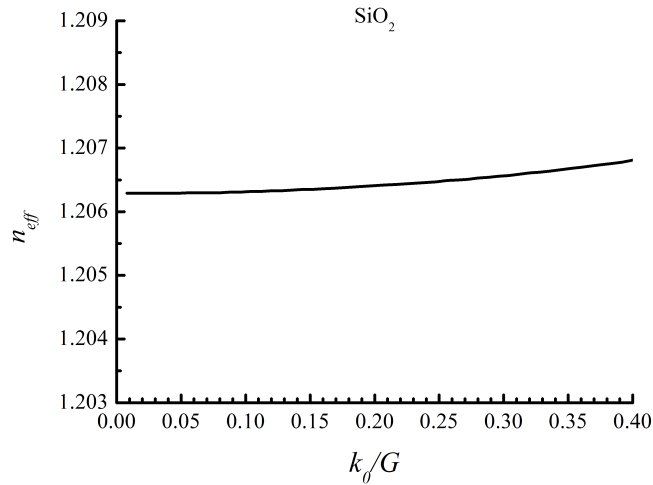


Рисунок 4 – Зависимость эффективного волнового вектора от периода композита  $SiO_2/воздух$ . Параметр отсечки в расчетах  $R_{max} = 20$

На Рис. 5 представлено значение  $\Delta n$  отклонения эффективного показателя преломления от  $\sqrt{\varepsilon_{eff}^{Dyhne}}$  для композитов  $SiO_2/воздух$  и  $Si/воздух$  с ростом величины отсечки  $R_{max}$ . Полученные значения  $\Delta n$  с хорошей точностью соответствуют степенному закону убывания. Стоит отметить, что величина  $\Delta n$  заметно больше в случае  $Si/воздух$ , поскольку для этого композита заметно больше контраст диэлектрической проницаемости компонент, а значит и соответствующие величины  $\varepsilon_{n_x, n_y}^{(-1)}$ . Результаты, представленные на Рис. 5, подтверждают сходимость эффективного показателя преломления к решению Дыхне.

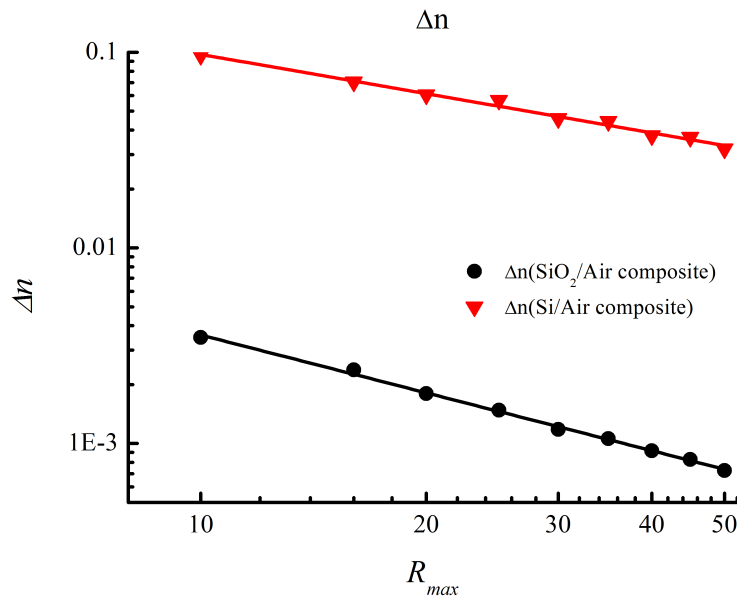


Рисунок 5 – Отличие эффективного показателя преломления от решения Дыхне для композита  $SiO_2/воздух$  (черный) и  $Si/воздух$  (красный) в зависимости от точности расчета (количества гармоник Фурье-образа).  $R_{max}$  – величина отсечки для Фурье-образа вдоль каждой из осей.  $k_0 = 0.001G$

## 5. Заключение

Для композита, статистически симметричного относительно замены компонент, известно классическое решение Дыхне для величины эффективной проводимости/диэлектрической проницаемости. Однако данное решение получено в электростатике на основе аргументов о симметрии задачи. При этом решение Дыхне формально должно давать правильное значение эффективного электростатического параметра «шахматных» композитов – структур, образованных двумя компонентами в шахматном порядке. Вне электростатики отсутствуют какие-либо оценки применимости решения Дыхне, что важно в связи с перколяционными свойствами композита.

В работе исследован эффективный волновой вектор излучения, распространяющегося в периодическом двумерном композите. Эффективный волновой вектор, в отличие от эффективной диэлектрической проницаемости, может быть введен за пределами электростатики [11–13]. Более того, в длинноволновом пределе эффективный волновой вектор сходится для периодической системы к значению электростатической теории G конвергенции [13]. В этой работе на основе численного эксперимента показано, что для «шахматного» композита эффективный волновой вектор сходится в длинноволновом пределе к решению Дыхне.

## Список литературы

- [1] Shadrivov, Ilya V., Lapine, Mikhail, Kivshar Y.S. *Nonlinear, Tunable and Active Metamaterials*. 2015. 324 p.
- [2] Chipouline A., Simovski C., Tretyakov S. *Basics of averaging of the Maxwell equations for bulk materials // Metamaterials*. 2012. Vol. 6, № 3–4. P. 77–120.
- [3] Vinogradov A.P., Merzlikin A.M. *Comment on “Basics of averaging of the Maxwell equations for bulk materials” // Metamaterials*. 2012. Vol. 6, № 3–4. P. 121–125.
- [4] Ludwig A., Webb K.J. *Accuracy of effective medium parameter extraction procedures for optical metamaterials // Phys Rev B*. 2010. Vol. 81, № 11. P. 113103.
- [5] Санчес-Паленсия Э. *Неоднородные среды и теория колебаний / ed. Олейник О.А. Москва: Мир, 1984. 472 p.*
- [6] Markel V.A. *Introduction to the Maxwell Garnett approximation: tutorial // Journal of the Optical Society of America A*. 2016. Vol. 33, № 7. P. 1244.
- [7] Дыхне А.М. *Проводимость двумерной двухфазной системы // ЖЭТФ*. 1970. Vol. 59, № 7. P. 110–115.
- [8] Vinogradov A.P., Merzlikin A.M. *On Electrodynamics of One-Dimensional Heterogeneous System Beyond Homogenization Approximation // Advances in Electromagnetics of Complex Media and Metamaterials*. Dordrecht: Springer Netherlands, 2002. P. 341–361.
- [9] Виноградов А.П., Мерзликин А.М. *К вопросу о гомогенизации одномерных систем // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики*. 2002. Vol. 121, № 3. P. 565–572.
- [10] Vinogradov A.P. et al. *Additional effective medium parameters for composite materials (excess surface currents) // Opt Express*. 2011. Vol. 19, № 7. P. 6699.
- [11] Puzko R.S., Merzlikin A.M. *Analytical properties of the effective refractive index // Opt Commun*. 2017. Vol. 383. P. 323–329.
- [12] Merzlikin A.M., Puzko R.S. *Homogenization of Maxwell’s equations in a layered system beyond the static approximation // Sci Rep*. 2020. Vol. 10, № 1. P. 15783.
- [13] Rodionov S.A., Merzlikin A.M. *Effective Refractive Index of 2D Porous Composite Materials // Journal of Experimental and Theoretical Physics. Pleiades journals*, 2022. Vol. 134, № 5. P. 600–606.
- [14] Vinogradov A.P., Merzlikin A.M. *Electromagnetic properties of super-lattice in the long wavelength regime // Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering / ed. Lakhtakia A., Dewar G., McCall M.W. 2002. P. 307–316.*

# EFFECTIVE WAVE VECTOR OF RADIATION IN A TWO-DIMENSIONAL TWO-COMPONENT COMPOSITE MATERIAL

R.S. Puzko <sup>\*1</sup>, A.M. Merzlikin<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institute for Theoretical and Applied Electromagnetics of RAS, Moscow, Russia

\* roman998@mail.ru

## Abstract

The effective wave vector of radiation propagating through a two-dimensional two-component checkerboard composite material has been studied. It is shown that in the long-wavelength limit the effective wave vector converges to the electrostatic solution for a statistically symmetric two-component composite.

**Key words:** composite material, homogenization theory

---