

ALGORITMO PARA LA CARACTERIZACIÓN UNÍVOCA DE METAMATERIALES BASADOS EN INCLUSIONES QUIRALES.

F. Javier Sánchez-López^(1,2), María J. Núñez⁽¹⁾, Ángel J. García-Collado^(1,3), Gregorio J. Molina-Cuberos⁽¹⁾
franciscojavier.sanchez@ciemat.es, maripepa@um.es, ajgarcia@ucam.pdi.edu, gregomc@um.es

⁽¹⁾Grupo Electromagnetismo, Universidad de Murcia, Campus Espinardo, E-30100, Murcia.

⁽²⁾Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas (CIEMAT), 28040 Madrid.

⁽³⁾Departamento Ciencias Politécnicas, Universidad Católica San Antonio, E-30107, Guadalupe, Murcia.

Resumen—Electromagnetic characterization is performed from the reflection and transmission coefficients by making use of retrieval algorithms. However, it is known the existence of uncertainties in the determination of these electromagnetic parameters. Here, we present a new algorithm that uses some techniques in order to avoid these uncertainties, some based on continuity conditions of physical magnitudes and some others based on causality relations, that is, exploiting Kramers-Kronig relations.

I. INTRODUCCIÓN

En los últimos años el desarrollo de nuevos materiales artificiales con propiedades exóticas y, en muchos casos, extremas ha demandado la implementación de nuevos algoritmos de inversión que permitan su caracterización experimental [1]–[4]. En nuestro caso, hemos desarrollado una técnica para la caracterización de metamateriales basados en la inclusión de quirales a partir de medidas experimentales en incidencia normal mediante la técnica de onda libre o de simulaciones bajo las mismas condiciones.

Los medios quirales se pueden caracterizar por las siguientes relaciones constitutivas [3]:

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} - j\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0} \kappa \vec{H} \quad (1)$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H} + j\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0} \kappa \vec{E} \quad (2)$$

Donde ε es la constante dieléctrica del medio, μ es permeabilidad del medio y κ el parámetro de quiralidad. Los parámetros ε, μ, κ son las magnitudes escalares complejas que deseamos obtener, para ello partimos de las expresiones de los coeficientes de transmisión y reflexión en función de estos parámetros y resolvemos el sistema de ecuaciones resultante. El problema residirá, tal y como veremos en la sección II, en que este sistema de ecuaciones no tiene solución única. La indeterminación la resolveremos aplicando condiciones de continuidad y causalidad. Además, en la sección III compararemos los resultados del algoritmo que se presenta con los obtenidos por el algoritmo de Varadan-Ro (VR) [1] a partir de datos simulados para distintos modelos.

II. PROBLEMA DE INVERSIÓN

A. Inversión de parámetros

La Fig. 1 muestra un esquema del problema propuesto. Alimentamos con una onda plana linealmente polarizada

que se propaga en la dirección perpendicular al plano de incidencia, siendo \vec{E}^i el campo incidente. Se reflejará una onda cuyo campo eléctrico tiene una magnitud $R|\vec{E}^i|$, donde R es el coeficiente de reflexión. La onda transmitida no debe tener necesariamente la misma dirección de polarización. Es por esto por lo que se descompone el campo eléctrico transmitido \vec{E}^t en las direcciones paralela a la del campo incidente (copolar) y perpendicular a la del campo incidente (crosspolar). Estos campos tendrán magnitudes $T_{co}|\vec{E}^i|$ y $T_{cr}|\vec{E}^i|$, respectivamente. T_{co} recibe el nombre de coeficiente de transmisión copolar y T_{cr} es el coeficiente de transmisión crosspolar. Bajo estas condiciones, resulta [3]:

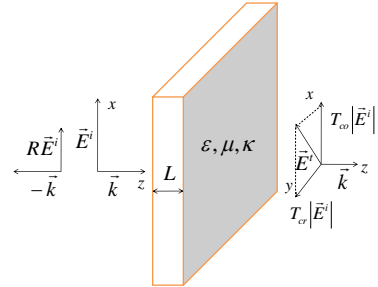


Fig. 1. Esquema de nuestro problema. Incide una onda plana sobre una lámina de espesor L con ε, μ, κ desconocidos y medimos T_{co}, T_{cr} y R .

$$R = -j \frac{\sin(2nk_0L)(1 - \eta_r^2)}{2\eta_r \cos(nk_0L) + j(\eta_r^2 + 1) \sin(nk_0L)} \quad (3)$$

$$T_{co} = \frac{2\eta_r \cos(\kappa k_0L)}{2\eta_r \cos(nk_0L) + j(\eta_r^2 + 1) \sin(nk_0L)} \quad (4)$$

$$T_{cr} = \frac{2\eta_r \sin(\kappa k_0L)}{2\eta_r \cos(nk_0L) + j(\eta_r^2 + 1) \sin(nk_0L)} \quad (5)$$

donde $\eta_r = \sqrt{\mu_r/\varepsilon_r}$ es la impedancia relativa de la lámina y $n = \sqrt{\mu_r \varepsilon_r}$ el índice de refracción del medio que estamos analizando. Estas expresiones resuelven el problema directo, es decir, conocidos los parámetros constitutivos de los materiales, obtenemos los coeficientes de transmisión y reflexión. Nosotros estamos interesados en el problema inverso, para

resolverlo definimos los siguientes parámetros:

$$T = \sqrt{T_{co}^2 + T_{cr}^2} \quad (6)$$

$$\Gamma = \frac{\eta_r^2 - 1}{(\eta_r + 1)^2} \quad (7)$$

$$P = e^{-jn k_0 L} \quad (8)$$

Usando (3), (4) y (5) obtenemos para R y T las expresiones:

$$R = \frac{\Gamma(1 - P^2)}{1 - \Gamma^2 P^2} \quad (9)$$

$$T = \frac{P(1 - \Gamma^2)}{1 - \Gamma^2 P^2} \quad (10)$$

De (9) se extrae que:

$$P^2 = \frac{R - \Gamma}{R\Gamma^2 - \Gamma} \quad (11)$$

Y usando (11) se obtiene

$$\Gamma [R^2 \Gamma^2 + \Gamma (T^2 - R^2 - 1) + R] = 0 \quad (12)$$

Suponemos que los materiales bajo estudio son tales que $\eta_r \neq 1$, o, equivalentemente, a partir de (7), $\Gamma \neq 0$. Es decir, sólo consideramos las soluciones de la ecuación:

$$R^2 \Gamma^2 + \Gamma (T^2 - R^2 - 1) + R = 0 \quad (13)$$

Que son:

$$\Gamma = -\frac{(T^2 - R^2 - 1) \pm \sqrt{(T^2 - R^2 - 1)^2 - 4R^2}}{2R} \quad (14)$$

Además, consideramos que los materiales que analizamos son medios pasivos, esto es, si $\eta_r = \eta_r' + j\eta_r''$, la parte real debe ser positiva, $\eta_r' > 0$, lo que impone sobre Γ la siguiente condición:

$$|\Gamma| < 1 \quad (15)$$

Primero escribimos η_r en función de Γ

$$\eta_r = \eta_r' + j\eta_r'' = \frac{1 + \Gamma}{1 - \Gamma} = \frac{1 - |\Gamma|^2 + 2j\text{Im}(\Gamma)}{1 + |\Gamma|^2 - 2\text{Re}(\Gamma)} \quad (16)$$

Si analizamos únicamente la parte real tenemos:

$$\eta_r' = \frac{1 - |\Gamma|^2}{1 + |\Gamma|^2 - 2\text{Re}(\Gamma)} \quad (17)$$

Nos centramos en el denominador

$$d = 1 + |\Gamma|^2 - 2\text{Re}(\Gamma) = 1 + \text{Re}(\Gamma)^2 + \text{Im}(\Gamma)^2 - 2\text{Re}(\Gamma) \quad (18)$$

$$d = (1 - \text{Re}(\Gamma))^2 + \text{Im}(\Gamma)^2 > 0 \quad \forall \Gamma \neq 1 \quad (19)$$

El denominador siempre es positivo, salvo en $\Gamma = 1$. Por otra parte el numerador será positivo siempre y cuando $|\Gamma|^2 < 1$. Teniendo en cuenta esto y la ecuación (19), se tiene que es condición necesaria y suficiente que $|\Gamma| < 1$ para tener $\eta_r' > 0$. Esto nos permite seleccionar una solución Γ única para T y R dados. Una vez que hemos determinado Γ usando (16) obtenemos η_r . Por otra parte,

$$P^2 = |P^2| e^{j(\phi + 2\pi m)} = e^{-2jn k_0 L} \quad (20)$$

Siendo ϕ la fase de P^2 y m un número entero. De (20) obtenemos el índice de refracción n :

$$n = n' + jn'' = \frac{jc}{4\pi fL} \ln |P^2| - \frac{\phi c}{4\pi fL} - \frac{mc}{2fL} \quad (21)$$

Donde ya hemos expresado n en función de la frecuencia f . La única restricción que tenemos sobre el índice es $n'' < 0$ (medios pasivos) esta condición no es suficiente para determinar el valor de m y, por tanto, no tenemos solución única [2]. A partir de n y η_r podemos obtener ε_r, μ_r .

$$\varepsilon_r = \frac{n}{\eta_r} \quad (22)$$

$$\mu_r = n\eta_r \quad (23)$$

Resta todavía calcular la quiralidad κ , reescribimos la expresión de T (10) como sigue:

$$T = \frac{2\eta_r}{2\eta_r \cos(nk_0 L) + j(\eta_r^2 + 1) \sin(nk_0 L)} \quad (24)$$

Si definimos $T_{++} = T_{co} + jT_{cr}$ y lo dividimos entre T tenemos:

$$\frac{T_{++}}{T} = \left| \frac{T_{++}}{T} \right| e^{j(\gamma + 2\pi p)} = e^{-j\kappa k_0 L} \quad (25)$$

Donde γ es la fase de T_{++}/T y p un entero arbitrario. De aquí obtenemos κ

$$\kappa = \frac{j}{k_0 L} \ln \left| \frac{T_{++}}{T} \right| - \frac{\gamma + 2\pi p}{k_0 L} \quad (26)$$

El entero p se determinará usando las mismas estrategias que se presentan en las siguientes secciones para hallar el entero m , que provoca la indeterminación en el índice de refracción.

B. Determinación de la solución única

Tal y como se ha establecido anteriormente no disponemos de una solución única para el problema de inversión, obtener dicha solución podemos usar diversas estrategias, incluso, simultáneamente.

1) *Estrategia de continuidad*: Dado el valor de m conocido para la frecuencia inicial de estudio, si imponemos continuidad al índice de refracción n , habremos determinado de manera única este índice. La determinación de m a la frecuencia inicial se puede realizar por diversos métodos, bien mediante una estimación previa del índice de refracción, o bien probando varios valores de m en el caso de tener materiales conocidos. Cabe destacar que cambios en m de una unidad provocan respuestas muy distintas. Podemos estimar el valor de m por simple descarte. Otra posible solución es usar el algoritmo de Varadan-Ro [1], aunque también adolece de este tipo de indeterminación a la que llamaremos m_{VR} . La variación de los parámetros m, m_{VR} conlleva a resultados muy distintos. Se puede obtener la solución observando los valores de los parámetros que hacen que la diferencia en valor absoluto de sus respuestas sea mínima.

2) *Estrategia de causalidad*: Esta estrategia es la que se usa en [1] y consiste en usar las relaciones de Kramers-Kronig (K-K) para determinar, a partir de la parte imaginaria del índice de refracción, que sí se puede determinar unívocamente, la parte real de dicho índice de refracción. En nuestro caso, para asegurar fiabilidad del algoritmo y mejores resultados, calculamos las relaciones de K-K entre las partes real e imaginaria de la susceptibilidad eléctrica y magnética [5], [6]. Por un lado tenemos:

$$\varepsilon_r = 1 + \chi_e = 1 + \chi'_e + j\chi''_e \quad (27)$$

$$\mu_r = 1 + \chi_m = 1 + \chi'_m + j\chi''_m \quad (28)$$

Por otro lado, tanto χ_e como χ_m cumplen [7]–[9]

$$\chi'(\omega) = \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{\omega' \chi''(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (29)$$

Donde \mathcal{P} denota el valor principal de Cauchy de la integral y $\omega = 2\pi f$ es la frecuencia angular. El problema de este método es que, en la mayoría de los casos, no podemos realizar la integral analíticamente. Debemos recurrir a técnicas numéricas que se ven limitadas por el hecho de que no tenemos datos en el intervalo $[0, \infty)$. Las medidas se realizan en un ancho de banda finito, con lo que los resultados obtenidos por este método, no nos darán las magnitudes de forma exacta. Sí que nos servirán para escoger m de manera adecuada, además, si empleamos la estrategia de continuidad, este método nos sirve para estimar el valor inicial de m y tener resuelto el problema. Tal y como se verá en la sección III, las diferencias que se encuentran entre el resultado exacto y el obtenido por este método no son muy significativas.

III. RESULTADOS

En esta sección presentamos los resultados de los distintos algoritmos aplicados a simulaciones. En primer lugar se simula un modelo lineal como el que sigue:

$$\varepsilon_r(f) = \frac{2}{9}f \left(1 - \frac{1}{20}j\right) + 2 - 0,1j \quad (30)$$

$$\mu_r(f) = \frac{1}{9}f \left(1 - \frac{1}{2}j\right) + 1 - 0,5j \quad (31)$$

Siendo f la frecuencia en GHz. Y para κ suponemos un modelo lineal tal que:

$$\kappa = 0,0453f + 0,3170 - j(0,0239f + 0,1674) \quad (32)$$

Hemos escogido este modelo por dos motivos. El primero es que después de un modelo de parámetros constantes es el modelo más sencillo para simular. El otro motivo es que, antes de la resonancia, podemos aproximar el crecimiento o decrecimiento de los parámetros constitutivos de los materiales bajo estudio mediante un modelo de este tipo. Los valores de los parámetros se han escogido de tal forma, que si bien en su conjunto de parte real e imaginaria no son realistas, sí que por separado muestran valores similares a los materiales con los que se pretende trabajar. Con este modelo no podemos usar la estrategia de causalidad puesto que no cumple las relaciones de K-K. Así pues, usamos únicamente la estrategia de continuidad, obteniendo los resultados de las figuras Fig. 2 y Fig. 3, en la que se observa que nuestro algoritmo nos devuelve de manera correcta los parámetros

mientras que el de Varadan-Ro, en este caso falla a partir de 6 GHz. Posteriormente se simula un modelo no lineal, con

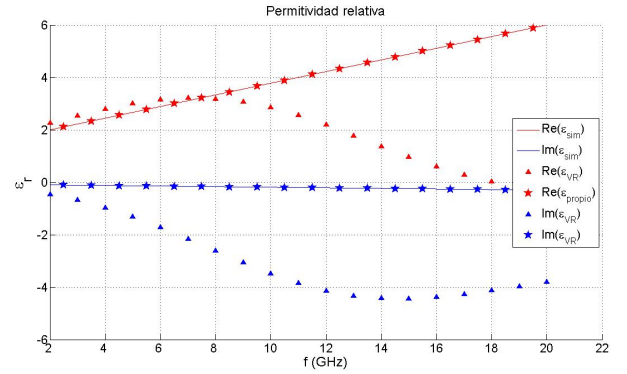


Fig. 2. Partes real (rojo) e imaginaria (azul) de la permitividad relativa para un modelo lineal obtenidas conforme al modelo impuesto (línea continua), calculado aquí (*) y usando el algoritmo de Varadan-Ro(Δ).

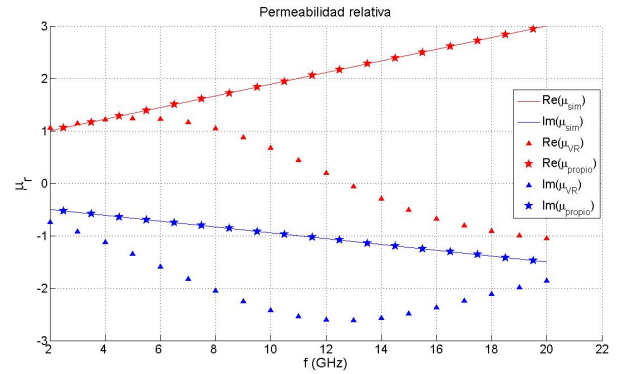


Fig. 3. Permeabilidad relativa obtenida para modelo lineal, usamos el mismo convenio de representación que en la Fig. 2.

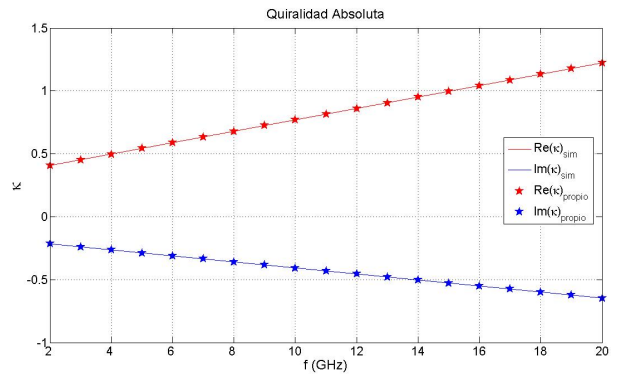


Fig. 4. Partes real (rojo) e imaginaria (azul) de la quiralidad absoluta para un modelo lineal obtenidas conforme al modelo impuesto (línea continua) y mediante el algoritmo que se presenta (*), el algoritmo V-R no calcula este parámetro.

los siguientes parámetros [10], [11]:

$$\varepsilon_r(f) = \varepsilon_{r\infty} + \frac{(\varepsilon_{rs} - \varepsilon_{r\infty}) f_{0e}^2}{f_{0e}^2 - f^2 + 2jf_{0e}\xi_e f} \quad (33)$$

$$\mu_r(f) = \mu_{r\infty} + \frac{(\mu_{rs} - \mu_{r\infty}) f_{0m}^2}{f_{0m}^2 - f^2 + 2jf_{0m}\xi_m f} \quad (34)$$

$$\kappa(f) = \frac{2\pi\tau f_{0k}^2 f}{f_{0k}^2 - f^2 + 2jf_{0k}\xi_k f} \quad (35)$$

En nuestro ejemplo tomaremos los valores para los parámetros del modelo que se muestran en Tabla I. Los motivos para

Parámetro	Valor
f_{0e}, f_{0m}, f_{0k}	11 GHz
ξ_e, ξ_m, ξ_k	0,12
ε_{r_s}	5
μ_{r_s}	1,1
ε_{r_∞}	3
μ_{r_∞}	1
τ	$-6 \cdot 10^{-13}$ s

Tabla I. Valores de los parámetros del modelo usados para la simulación.

escoger estos valores son, por un lado observar la resonancia adecuadamente y por otro lado tomar valores similares a los encontrados experimentalmente [12]. Empleamos las estrategias de continuidad y causalidad simultáneamente obteniendo los resultados de las figuras Fig. 5, Fig. 6 y Fig. 7.

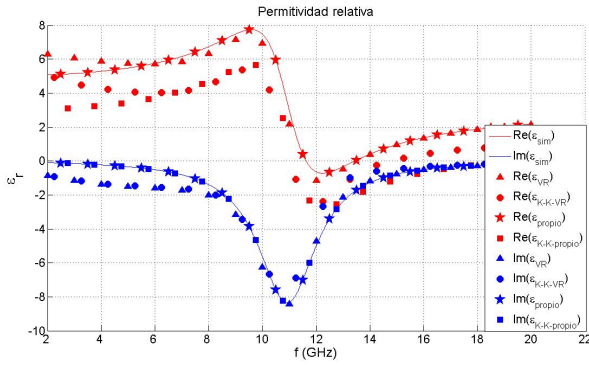


Fig. 5. Partes real (rojo) e imaginaria (azul) de la permitividad relativa para un modelo de Lorentz resonante obtenidas conforme al modelo impuesto (línea continua), el algoritmo VR (Δ), el algoritmo que se presenta aquí \star , Kramers-Kronig aplicado al algoritmo VR (\circ) y aplicando Kramers-Kronig a nuestro algoritmo (\square).

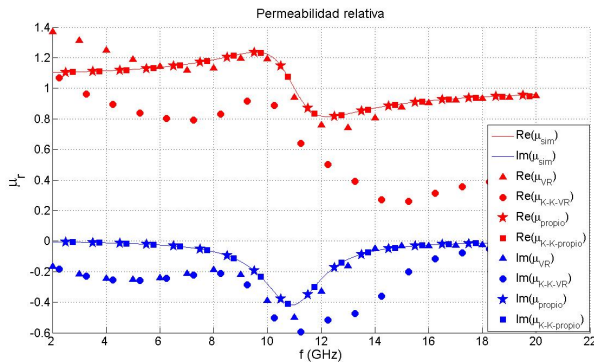


Fig. 6. Permeabilidad relativa obtenida para un modelo de Lorentz resonante. Se sigue el mismo convenio de representación que en la Fig. 5

Vemos que nuestro algoritmo, para ambos modelos, recupera con un error inferior al 2% los parámetros constitutivos simulados y además es bastante más preciso que el algoritmo VR que comete errores del 10% aproximadamente, en estos casos.

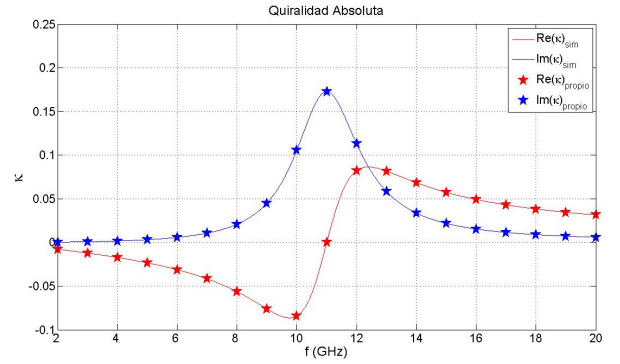


Fig. 7. Quiralidad absoluta obtenida para un modelo de Condon. Seguimos el convenio de representación de la Fig. 4.

IV. CONCLUSIONES

Hemos presentado un algoritmo que resuelve de manera unívoca el problema de inversión de parámetros para muestras basadas en inclusiones quirales. Los resultados muestran un alto grado de precisión en el cálculo de estos parámetros. Este algoritmo ya se utiliza para la caracterización experimental mediante la técnica de onda libre en incidencia normal de metamateriales basados en la inclusión de quirales, además su campo de aplicación se podría extender de manera sencilla a medios bi-isótropos.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido realizado en el marco del proyecto TEC2010-21496-C03-02.

REFERENCIAS

- [1] V. V. Varadan and R. Ro, "Unique retrieval of complex permittivity and permeability of dispersive materials from reflection and transmitted fields by enforcing causality," *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, vol. 55, no. 10, pp. 2224–2230, october 2007.
- [2] S. Ramakrishna and T. Grzegorzczak, *Physics and applications of negative refractive index materials*. SPIE Press, 2009.
- [3] I. V. Lindell, A. H. Sihvola, S. A. Tretyakov, and A. J. Viitanen, *Electromagnetic waves in chiral and bi-isotropic media*. Boston and London: Artech House, 1994.
- [4] L. F. Chen, C. K. Ong, C. P. Neo, V. V. Varadan, and V. Varadan, *Microwave Electronics: Measurement and Materials Characterization*, 1st ed. Wiley, Apr. 2004.
- [5] V. Lucarini, J. J. Saarinen, and K. E. Peiponen, "Multiple subtractive kramers-kronig relations for arbitrary-order harmonic generation susceptibilities," *Optical Communications*, vol. 218, pp. 409–414, 2003.
- [6] K. R. Waters, J. Mobley, and J. G. Miller, "Causality-imposed (kramers-kronig) relationships between attenuation and dispersion," *IEEE Transactions on ultrasonics, ferroelectrics and frequency control*, vol. 52, no. 5, pp. 822–833, May 2005.
- [7] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii, *Electrodynamics of Continuous Media*. Butterworth-Heinemann; 2 edition, 1984.
- [8] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics Third Edition*, 3rd ed. Wiley, Aug. 1998.
- [9] C. A. Balanis, *Advanced Engineering Electromagnetics*. New York, NY: John Wiley & Sons, 1989.
- [10] S. Zouhdi, A. Sihvola, and A. Vinogradov, *Metamaterials and plasmonics: fundamentals, modelling, applications*, ser. NATO science for peace and security series-Series B-Physics and biophysics. Springer, 2009.
- [11] A. Sihvola and I. of Electrical Engineers, *Electromagnetic mixing formulas and applications*, ser. IEE electromagnetic waves series. Institution of Electrical Engineers, 1999.
- [12] C. R. Brewitt-Taylor, P. G. Lederer, F. C. Smith, and S. Haq, "Measurement and prediction of helix-loaded chiral composites," *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 57, no. 4, pp. 692–700, April 1999.