

[建模方法]材料参数设置

本文档适用于：所有版本

说明：使用者的材料公式常与软件内置公式不同。一旦材料参数设置出错，整个仿真无法进行。

建议参考：帮助手册 - 附录 - II Lorentz 材料模型相关公式推导

本文将就 Lorentz 材料模型，具体说明公式不同时，材料参数设置的方式。

材料模型来源：Thin Solid Films 517 (2009) 2963-2967。

特别感谢：宁波大学黄水平老师。

第一种方法：

核对软件公式与文献公式，分析参数的对应关系并进行转化。

软件中的公式：

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega_c\omega} + \sum_{i=1}^n \frac{\omega_{pi}^2}{\omega_{a,i}^2 - \omega^2 - i\omega_{\sigma,i}\omega}$$

文献中的公式：

$$\epsilon = \epsilon_{\infty} \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - i\gamma\omega} \right) + \sum_{j=1}^m \frac{S_j \omega_{T0j}^2}{\omega_{T0j}^2 - \omega^2 + i\Gamma_j\omega}$$

两个公式有很大不同，首先，文献中的公式，做进一步处理：

$$\epsilon = \epsilon_{\infty} - \frac{\epsilon_{\infty} \omega_p^2}{\omega^2 - i\gamma\omega} + \sum_{j=1}^m \frac{S_j \omega_{T0j}^2}{\omega_{T0j}^2 - \omega^2 + i\Gamma_j\omega}$$

先不考虑分母虚部前面的正负号问题，比较之后，发现：

| | 软件中 | = | 文献中 |
|------------|--------------|---|--------------------------------|
| Drude 部分 | ω_c | | γ |
| | ω_p | | $\epsilon_{\infty} \omega_p^2$ |
| Lorentz 部分 | ω_a^2 | | ω_{T0}^2 |
| | ω_p | | $S \omega_{T0}^2$ |
| | ω_c | | Γ |

根据文献中的具体参数：

| ϵ_∞ | $\omega_p (\times 10^{14} \text{ Hz})$ | $\gamma (\times 10^{14} \text{ Hz})$ | j | S_j | $\omega_{T0j} (\times 10^{14} \text{ Hz})$ | $\Gamma_j (\times 10^{14} \text{ Hz})$ |
|-------------------|--|--------------------------------------|-----|-------|--|--|
| 3.972 | 10.1 | 2.31 | 1 | 3.981 | 0.852 | 0.078 |
| | | | 2 | 2.059 | 1.15 | 0.068 |
| | | | 3 | 2.91 | 1.7 | 0.332 |
| | | | 4 | 1.332 | 2.49 | 0.781 |

得到软件中设置的参数：

| | | 软件中 | 文献中 | 参数 |
|------------|---|-------------------|-----------------------------------|----------|
| | | ϵ_∞ | ϵ_∞ | 3.972 |
| Drude 部分 | 0 | ω_a | ---- | 默认为 0 |
| | | ω_c | γ | 2.31E14 |
| | | ω_p | $\sqrt{\epsilon_\infty} \omega_p$ | 20.13E14 |
| Lorentz 部分 | 1 | ω_a | ω_{T0} | 0.852E14 |
| | | ω_p | $\sqrt{S} \omega_{T0}$ | 1.67E14 |
| | | ω_c | Γ | 0.078E14 |
| Lorentz 部分 | 2 | ω_a | ω_{T0} | 1.15E14 |
| | | ω_p | $\sqrt{S} \omega_{T0}$ | 1.65 E14 |
| | | ω_c | Γ | 0.068E14 |
| Lorentz 部分 | 3 | ω_a | ω_{T0} | 1.7E14 |
| | | ω_p | $\sqrt{S} \omega_{T0}$ | 2.90E14 |
| | | ω_c | Γ | 0.332E14 |
| Lorentz 部分 | 4 | ω_a | ω_{T0} | 2.49E14 |
| | | ω_p | $\sqrt{S} \omega_{T0}$ | 2.87E14 |
| | | ω_c | Γ | 0.781E14 |

对应 Matlab 脚本：

```

eps_infty = 3.972;

omega_a_0 = 0;
omega_c_0 = 2.31E14;
omega_p_0 = 20.129E14

eps_0 = omega_p_0^2/(omega_a_0^2 - omega^2 - 1i * omega_c_0 * omega);

omega_a_1 = 0.852E14;
omega_c_1 = 0.078E14;
omega_p_1 = 1.699E14;

eps_1 = omega_p_1^2/(omega_a_1^2 - omega^2 - 1i * omega_c_1 * omega);

omega_a_2 = 1.15E14;
omega_c_2 = 0.068E14;
omega_p_2 = 1.65015E14;

eps_2 = omega_p_2^2/(omega_a_2^2 - omega^2 - 1i * omega_c_2 * omega);

omega_a_3 = 1.7E14;
omega_c_3 = 0.332E14;
omega_p_3 = 2.8999E14;

eps_3 = omega_p_3^2/(omega_a_3^2 - omega^2 - 1i * omega_c_3 * omega);

omega_a_4 = 2.49E14;
omega_c_4 = 0.781E14;
omega_p_4 = 2.87376E14;

eps_4 = omega_p_4^2/(omega_a_4^2 - omega^2 - 1i * omega_c_4 * omega);

eps(j) = eps_infty + eps_0 + eps_1 + eps_2 + eps_3 + eps_4;
    
```

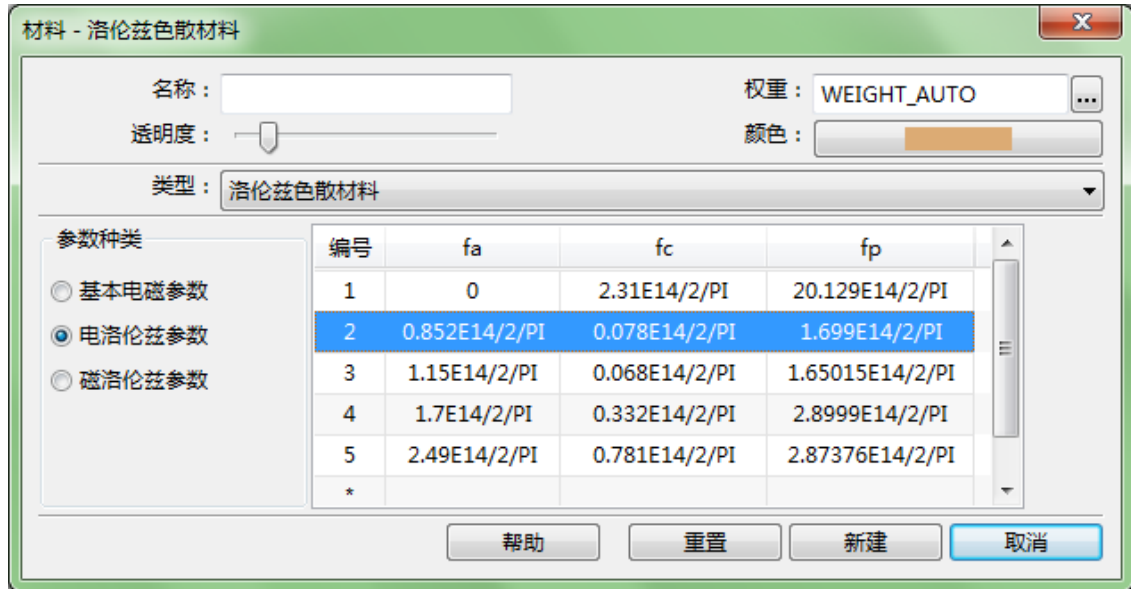
在软件中填入时，需要注意软件填入的是频率，而不是角频率，即：

表 6-2-3 洛伦兹色散模型参数说明表

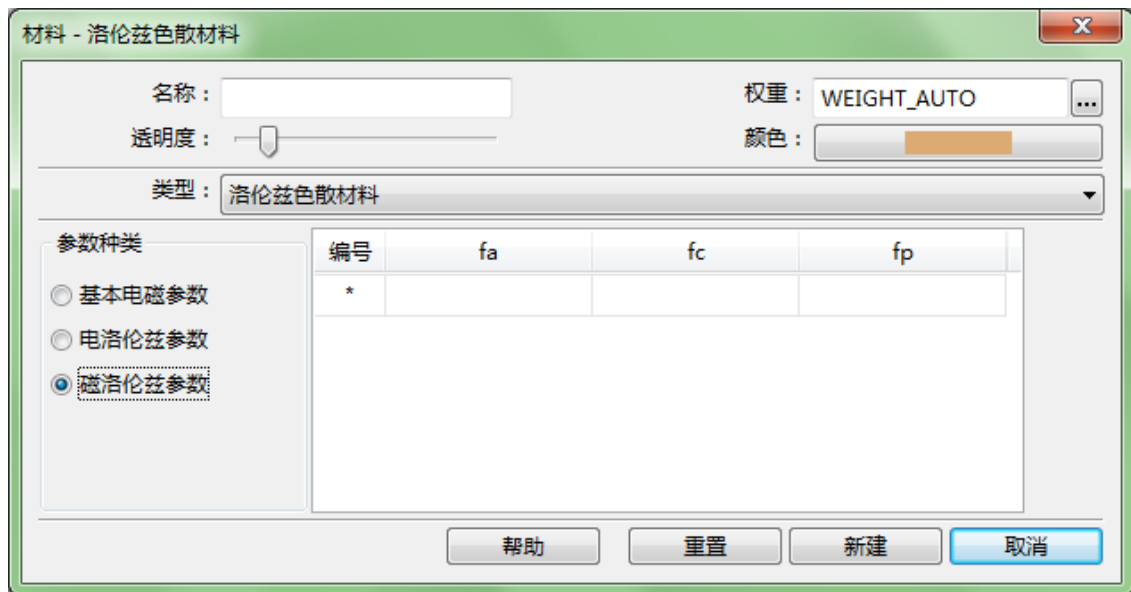
| 参数名称 | 说明 | 备注 |
|-------|--------------------------------|------------|
| f_a | 谐振频率 $f_a = \omega_a / 2\pi$ | 使用文档指定频率单位 |
| f_c | 阻尼频率 $f_c = \omega_c / 2\pi$ | |
| f_p | 等离子体频率 $f_p = \omega_p / 2\pi$ | |

因此，软件中填入：





磁洛伦兹参数空白：



第二种方法：

直接采用软件的参数拟合工具，拟合得到电洛伦兹参数。

通过 Matlab，按照文献中给定的公式，生成各个频点的介电常数实部、虚部值。

```

W1(j)=S1*W101^2/(W101^2-w(j)^2+i*t1*w(j));
S2=2.059;%震子强度
W102=1.15*10^14;%横向光学模式频率
t2=0.068*10^14;%阻尼因数
W2(j)=S2*W102^2/(W102^2-w(j)^2+i*t2*w(j));
S3=2.91;%震子强度
W103=1.7*10^14;%横向光学模式频率
t3=0.332*10^14;%阻尼因数
W3(j)=S3*W103^2/(W103^2-w(j)^2+i*t3*w(j));
S4=1.332;%震子强度
W104=2.49*10^14;%横向光学模式频率
t4=0.781*10^14;%阻尼因数
W4(j)=S4*W104^2/(W104^2-w(j)^2+i*t4*w(j));
eps(j)=eps00*(1-Wp^2/(w(j)^2-i*r*w(j)))+W1(j)+W2(j)+W3(j)+W4(j);%第三介质(L0W-E功能层)介电函数

end;

epsreal=real(eps);
epsimag=imag(eps);
fre=w/2/pi;

figure:plot(fre,epsreal);hold on;plot(fre,-epsimag,'-r');

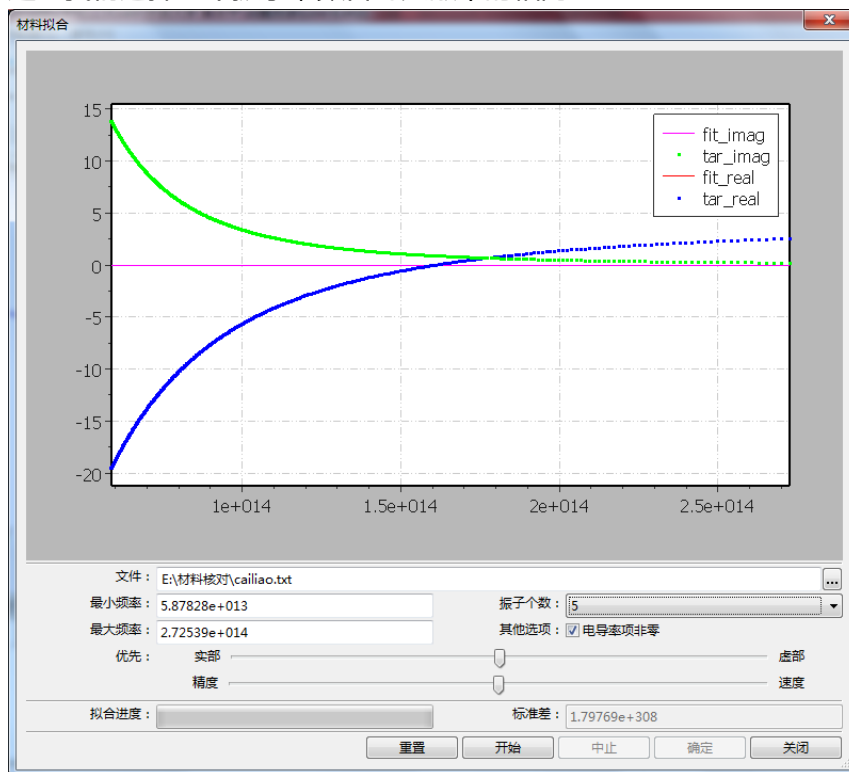
cailiao(:,1)=fre';
cailiao(:,2)=epsreal';
cailiao(:,3)=-epsimag';

save cailiao.txt -ascii cailiao;

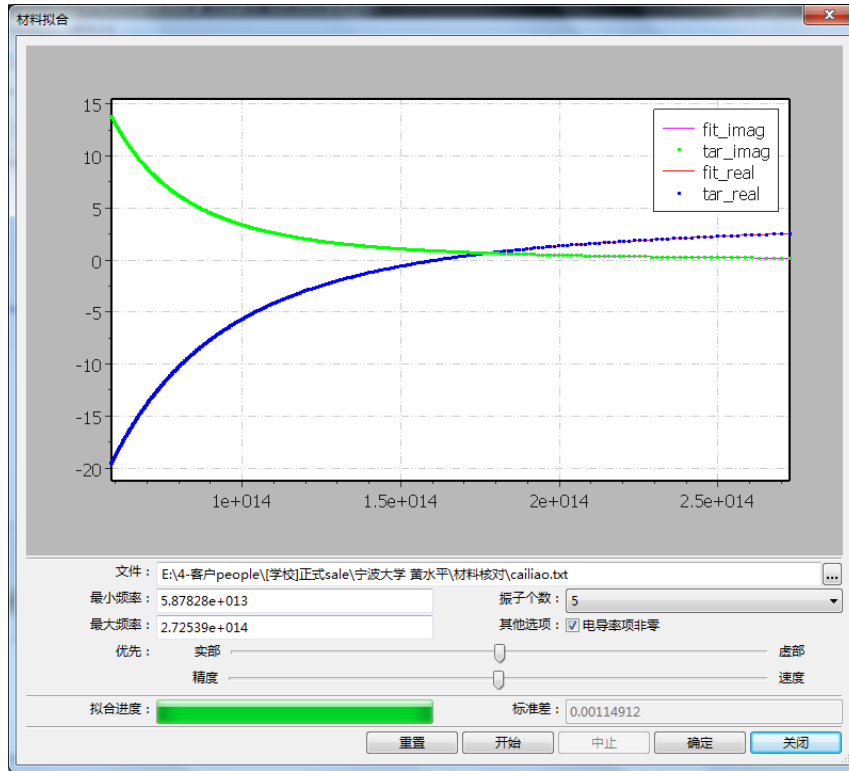
```

然后采用软件的材料拟合工具，进行材料拟合，具体可参见帮助手册 6.2.17 一节。






这里我们选择 5 个振子，数目与文献中的相同。



点击开始，开始拟合。拟合完成后，可看到标准差只有 0.00114912。拟合效果非常好。



点击确定，材料库中会挂载拟合后的材料“fitting_0”：

-  材料
-  air
-  pec
-  pmc
-  fitting_0

双击该材料，打开查看洛伦兹色散材料参数，就可以看到拟合后的阵子了。



