

## Модель меры пространственной киральности

С. П. Борухович, П. В. Литвинов, В. П. Тишковец, С. Л. Просвирнин

*Радиоастрономический институт НАН Украины,  
ул. Краснознаменная, 4, г. Харьков, 61002, Украина  
E-mail: serge@rian.kharkov.ua*

*Статья поступила в редакцию 26 октября 2006 г.*

Построен новый простой алгоритм вычисления меры геометрической киральности объемных структур. Задача рассмотрена в контексте проблемы дифракции электромагнитных волн на элементах, имеющих сложную форму. Приведены результаты расчета меры киральности некоторых структур из цилиндрических спиралей и тетраэдрических элементов в зависимости от их геометрических параметров. Проведено сравнение с данными, полученными путем исследования рассеяния излучения на хаотически ориентированных структурах.

### Введение

Прогресс в микроволновой технике и фотонике в последние годы в значительной мере связывается с созданием метаматериалов – искусственных материалов с уникальными свойствами [1]. В частности, представляют интерес для приложений искусственные материалы, проявляющие оптическую активность, т. е. различным образом взаимодействующие с электромагнитным полем, имеющим левую и правую круговую поляризацию. Эффект оптической активности известен с 1811 года. Однако до сих пор не найдены естественные немагнитные материалы, проявляющие сколько-нибудь значительную оптическую активность в микроволновом диапазоне.

В [2] показано, что разница в интенсивности рассеяния света левой и правой круговой поляризации монослоем киральных молекул, адсорбированных на поверхности некирального материала, существенно выше, чем в случае рассеяния на поверхности объемного кирального материала. Поэтому особый интерес вызывают свойства двумерных киральных объектов, а также объектов в виде монослоя трехмерных киральных элементов.

Пусть имеется трехмерный объект в пространстве и его зеркальное изображение. Трехмерный объект является киральным, если его нельзя совместить с зеркальным изображением.

Периодические монослойные структуры из киральных элементов, в отличие от непериодических киральных поверхностей, формируют дифракционные лучи, причем матрицы трансформации поля падающей плоской волны в поле пространственной гармоники для одного и того же сценария дифракции являются разными для энантиоморфных форм структур. В результате существенно отличаются поляризационные характеристики полей [3, 4]. Поляризационные эффекты тем ярче и привлекательнее для приложений, чем значительнее отличия между энантиоморфными формами одиночных киральных элементов. Поэтому важной задачей является определение величины, характеризующей степень трехмерной киральности, т. е. построение меры киральности объемных объектов и структур.

Свойства сложных киральных структур наиболее ярко проявляются в резонансных условиях. Поэтому элементы струк-

турированных искусственных поверхностей и слоев как в микроволновом диапазоне, так и в оптике чаще всего состоят из узких металлических полосок или провололочек. Вдоль узких элементов устанавливается резонансное распределение электрического тока. Такому элементу легко придать киральную форму. С другой стороны, структура, состоящая из узких элементов сложной формы, может иметь резонансные свойства и в то же время оставаться мелкомасштабной в сравнении с длиной волны.

В [5] представлен обзор методов определения степени киральности применительно к различным объектам в разных областях науки. Понятие “двумерная киральность” обсуждается в [2], вопросы ее меры рассмотрены в [6, 7]. Для трехмерных объектов теория киральности изучена и развита применительно к органической химии и биологии (свойства стереоизомеров) и не совсем подходит для применения в микроволновой физике. Это связано с тем, что в химии и физике используются существенно разные киральные элементы и структуры. Если в химии киральный элемент представляет собой сравнительно небольшое количество в общем случае разных по размеру и массе частиц, достаточно удаленных друг от друга в пространстве, то в физике, как уже было сказано, представляет интерес тонкоэлементная конструкция, которую можно представить в виде достаточно большого количества непрерывно расположенных одинаковых точек (подробнее об этом будет сказано далее).

Таким образом, важно получить алгоритм нахождения меры объемной киральности фигур, представляющих собой отрезки трехмерных кривых. Далее мы рассматриваем алгоритм именно для этого случая, хотя его легко обобщить и для нахождения меры киральности фигур, имеющих конечную площадь или объем.

Заметим, что мера киральности может быть введена множеством способов и использование того или иного определения величины асимметрии зависит от удобства его применения. Наиболее полно задача

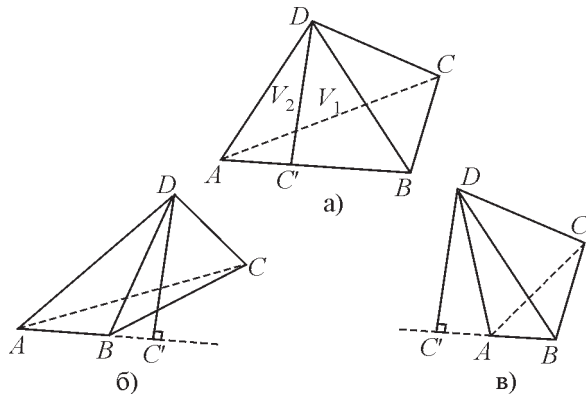
определения меры киральности в контексте проблемы исследования свойств структурированных поверхностей в оптике обсуждается в [6], однако метод, предложенный в этой работе, рассматривается только для планарных киральных структур. В связи с этим, нами предлагается достаточно простой в реализации и быстрый алгоритм вычисления некоторой безразмерной величины, характеризующей асимметричность объемного объекта, – его меры киральности. Результаты вычисления геометрической меры киральности сопоставляются с данными о различии характеристик рассеянного излучения хаотически ориентированными энантиоморфными объектами.

### Описание алгоритма

Простейшим киральным объектом в пространстве является совокупность четырех точек, расстояния между которыми различны, т. е. четыре точки, являющиеся вершинами неравностороннего тетраэдра. Если построить меру киральности для четырех точек, тогда мы сможем построить ее для любой другой совокупности точек в пространстве, например, образующей отрезок трехмерной кривой, путем суммирования по всем возможным тетраэдрам, каждая из вершин которых представляет собой точку из этой совокупности.

Рассмотрим тетраэдр  $ABCD$ , показанный на рис. 1, а. Пусть  $ABC$  – основание тетраэдра,  $DC'$  – его высота, опущенная из вершины  $D$  на ребро  $AB$ . Обозначим через  $V_1$  и  $V_2$  объемы тетраэдров  $ACC'D$  и  $BCC'D$  соответственно. Введем величину  $Q^{(1)} = \tilde{V}_1 + \tilde{V}_2$ , причем  $\tilde{V}$  означает объем со знаком: если смешанное произведение  $(\overline{DC'}, \overline{DC}, \overline{DB}) > 0$ , будем считать  $\tilde{V}_1$  положительным, иначе – отрицательным. Аналогично для  $\tilde{V}_2$ . То есть  $Q^{(1)} = V_1 - V_2$  в случае тетраэдра, показанного на рис. 1, а,  $Q^{(1)} = V_1 + V_2$  для тетраэдра на рис. 1, б, и, наконец, для тетраэдра на рис. 1, в  $Q^{(1)} = -V_1 - V_2$ .

Далее, повторим описанные действия, считая теперь  $BDC$  основанием тетраэдра, показанного на рис. 1, а, и опустив высоту



**Рис. 1.** Примеры простейших трехмерных киральных объектов в виде совокупности четырех точек, расположенных в вершинах неравностороннего тетраэдра  $ABCD$ . а)-в) – три варианта тетраэдров, отличающихся алгоритмом определения меры киральности в зависимости от положения высоты  $DC'$  относительно базового ребра  $AB$

из вершины  $A$  на ребро  $BD$ , найдем значение  $Q^{(2)}$ . Затем для основания треугольника  $ACD$  и высоты, опущенной из  $B$  на  $AD$ , имеем  $Q^{(3)}$ . Таким образом получим значения  $Q^{(i)}$ ,  $i = 1, 2, 3$  для трех высот на грани  $ABD$ . Далее получим аналогичные тройки значений  $Q^{(i)}$  для каждой из остальных трех граней тетраэдра.

В качестве меры киральности простейшего объекта из четырех точек  $A, B, C$  и  $D$  (тетраэдрического элемента  $ABCD$ ) будем рассматривать безразмерную величину

$K_{ABCD} = \prod_{i=1}^{12} Q^{(i)} / d^{36}$ , где  $d$  – длина наибольшей стороны тетраэдра. Произведение всех найденных значений  $Q^{(i)}$  в качестве меры киральности гарантирует, что для тетраэдров с равносторонними и равносторонними гранями, которые являются зеркально симметричными, т. е. некиральными элементами, эта величина равна нулю.

Поскольку элемент в виде тетраэдра – простейший киральный пространственный объект, интересен вопрос о геометрических особенностях наиболее несимметричного тетраэдра и величине соответ-

ствующей меры киральности. Для ответа на него на оси абсцисс прямоугольной системы координат  $O_{xyz}$  были выбраны две точки  $A(-1, 0, 0)$  и  $B(1, 0, 0)$ . Точка  $C$  располагалась в первом квадранте плоскости  $O_{xy}$  ( $x > 0, y > 0, z = 0$ ), точка  $D$  – в области ( $x \in R, y > 0, z > 0$ ). Был найден максимум функции  $K_{ABCD}(x_c, y_c, z_c, x_d, y_d, z_d)$  при оговоренных выше условиях. Значение функции в максимуме равно

$K_m = \max_{x_c, y_c, z_c, x_d, y_d, z_d} K_{ABCD} = 1.1146 \cdot 10^{-19}$ . Эта величина  $K_m$  соответствует тетраэдру с координатами вершин  $A(-1, 0, 0)$ ,  $B(1, 0, 0)$ ,  $C(0.39, 2.65, 0)$  и  $D(-0.4, 2.0, 1.73)$ .

Форму любого объекта, более сложного, чем тетраэдр, мы можем с необходимой степенью детализации представить в виде достаточно большого числа точек, расположенных на объекте. Затем можно найти меры киральности для всех различных четверок точек и, сложив результаты, получить величину, характеризующую асимметрию всего объекта [7]. Для того чтобы обеспечить сравнимость результатов при использовании разного количества точек для задания формы объекта, будем вводить нормировку на число четырехточечных элементов, участвовавших в расчетах. Очевидно, что это число элементов равно  $M = N_s(N_s - 1)(N_s - 2)(N_s - 3)/24$ , где  $N_s$  – число точек. Таким образом, мы определяем меру киральности множества из  $N_s$  точек в виде

$$K = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{N_s} \sum_{j=i+1}^{N_s} \sum_{k=j+1}^{N_s} \sum_{l=k+1}^{N_s} \prod_{m=1}^{12} Q_{ijkl}^{(m)} / d_{ijkl}^{36},$$

где  $Q_{ijkl}^{(m)}$ , а также  $d_{ijkl}$  – описанные выше величины для четырехточечного элемента, состоящего из точек  $i, j, k, l$ . Эта величина представляет собой среднюю меру киральности тетраэдрических элементов в описании объекта набором точек. Заметим, что усредненная мера киральности тетраэдра в сложном объекте, состоящем из большого числа точек, как правило существенно меньше, чем киральность упомянутого выше

максимально асимметричного тетраэдра. Поэтому удобно ввести индекс киральности

$$I = K/K_m$$

как коэффициент пропорциональности между мерами киральности объекта и наиболее асимметричного тетраэдра. Индекс киральности принимает значения из промежутка  $[-1, 1]$ .

Упорядоченные объемные структуры из конечного числа элементов или бесконечные периодические структуры могут быть киральными по причине как киральности составляющих их элементов, так и асимметрии расположения элементов (не обязательно киральных). Очевидно, что индекс киральности системы из конечного числа элементов может быть найден по алгоритму, ничем не отличающемуся от алгоритма вычисления индекса киральности одного элемента, хотя это может потребовать значительных затрат компьютерного времени. Если система из конечного числа элементов является упорядоченной, например, представляет собой фрагмент периодической структуры, общая асимметричность с увеличением числа элементов уменьшается, поскольку симметрия всей структуры начинает преобладать (становится определяющей) над киральностью ее отдельных элементов.

### Численные результаты

Описанный алгоритм определения меры пространственной киральности основан на геометрическом принципе. Существуют и другие способы определения степени киральности объектов. Например, так как киральные структуры по-разному рассеивают свет с правой и левой круговой поляризацией, для определения степени киральности объекта можно использовать характеристики, непосредственно связанные с параметрами рассеянного излучения. Одну из возможных таких характеристик для хаотически ориентированной структуры можно определить следующим образом:

$$P = \frac{I_1^{sc} - I_2^{sc}}{I_1^{sc} + I_2^{sc}} = \frac{F_{14}}{F_{11}}.$$

Здесь  $I_1^{sc}$  и  $I_2^{sc}$  – интенсивности рассеянного излучения при падающем излучении с правой и левой круговой поляризацией соответственно,  $F_{11}$  и  $F_{14}$  – элементы матрицы рассеяния ( $I_1^{sc} = (F_{11} + F_{14})I^0$ ,  $I_2^{sc} = (F_{11} - F_{14})I^0$ , где  $I^0$  – интенсивность падающего излучения) [8]. Величина  $P$  соответствует также степени круговой поляризации излучения, рассеянного хаотически ориентированной структурой (частицей) при неполяризованном падающем излучении [8].

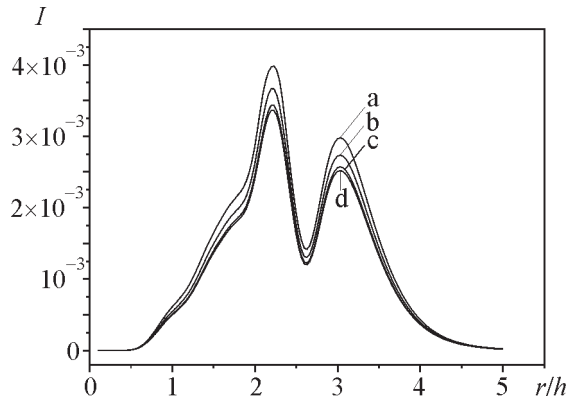
В настоящей работе для одних и тех же киральных объектов была исследована зависимость величин  $P$  и  $I$  от параметров этих объектов.

Был исследован представляющий интерес для оптики и микроволновой техники элемент в виде цилиндрической спирали – “пружинки”, а также изучены различные структуры, составленные из простейших киральных элементов – тетраэдров. Цилиндрическую спираль можно характеризовать такими параметрами, как радиус витка спирали  $r$ , шаг спирали  $h$  и ее угол закрутки  $\varphi$ .

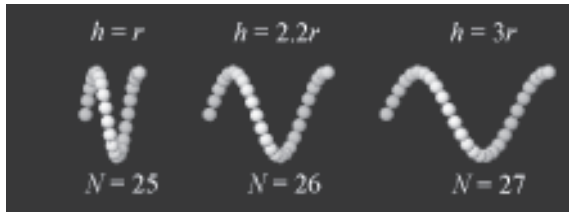
На рис. 2 показана зависимость величины  $I$  одиночной спирали от соотношения  $h/r$  для фиксированного угла закрутки  $\varphi = 2.44\pi$ . Приведены результаты расчетов, которые соответствуют нескольким значениям числа точек  $N_s$ , представляющих форму спирали. Из графиков видна устойчивость и сходимости алгоритма (естественно, имеется в виду практическая сходимость для расчетов, а не строгие математические понятия). Очевидно также, что для такой, сравнительно несложной структуры, вполне достаточно использовать для расчетов  $80 \div 100$  точек.

Для вычисления параметра  $P$  цилиндрическая спираль представлялась в виде набора соприкасающихся одинаковых частиц (см. рис. 3), центры которых расположены на спирали, а тетраэдры – четырьмя одинаковыми частицами, расположенными





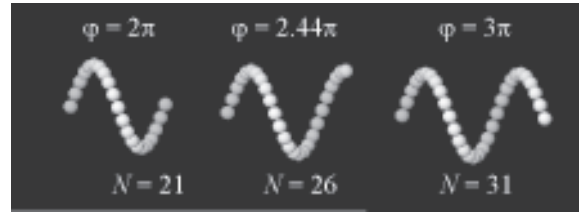
**Рис. 2.** Величина индекса киральности одиночной спирали в зависимости от соотношения  $h/r$  для фиксированного угла закрутки  $\varphi = 2.44\pi$  при  $N_s = 30$  (a);  $N_s = 50$  (b);  $N_s = 100$  (c);  $N_s = 150$  (d)



**Рис. 3.** Три спиральных кластера при  $\varphi = 2.44\pi$  и различных значениях  $h/r$

в вершинах тетраэдра. Характеристики излучения, рассеянного такими кластерами, значительно зависят от ориентации кластера по отношению к направлению падающего и рассеянного излучения. Поэтому эти характеристики усреднялись по ориентациям кластера. Кроме того, в качестве меры киральности для кластеров было выбрано значение  $P(0^\circ)$  в направлении распространения падающего излучения (при нулевом угле рассеяния). Для вычисления оптических характеристик хаотически ориентированных кластеров использовался алгоритм, описанный в работе [9], компьютерные коды которого доступны в интернете [10].

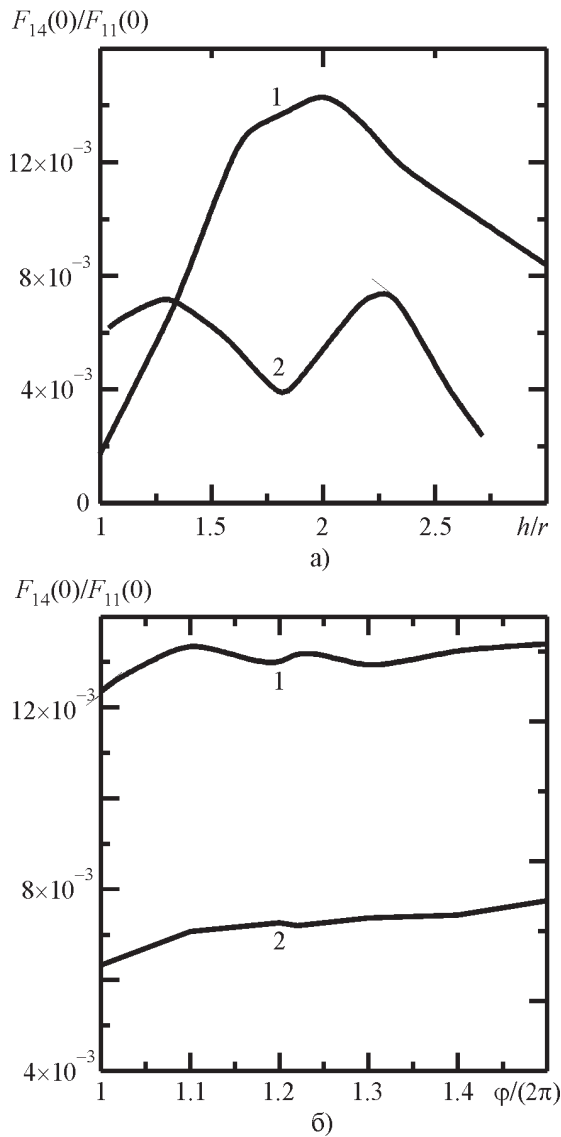
На рис. 3 показан пример цилиндрических спиралей, составленных из сферических частиц при разных значениях  $h/r$  и фиксированном  $\varphi$ , а на рис. 4 – вид спиралей при фиксированном  $h/r$  и различных  $\varphi$ .



**Рис. 4.** Три спиральных кластера при  $h/r = 2.2$  и различных значениях  $\varphi$

При вычислении  $P$  для цилиндрических спиралей задавались свойства составляющих кластер сферических частиц (волновой параметр  $x_0 = 2\pi a/\lambda$ , характеризующий размеры частиц, далее геометрические параметры кластеров будут выражаться через него,  $\lambda$  – длина волны,  $a$  – радиус частиц, и комплексный показатель преломления  $n$  материала составляющих кластер частиц) и параметры спирали ( $r, h, \varphi$ ), которые определяли число  $N$  сферических частиц, составляющих спираль. Вычисления  $P$  проводились вблизи значений  $h = 2.2r$ ,  $\varphi = 2.44\pi$  при которых получается максимальное значение  $I$  из определения меры пространственной киральности, основанной на геометрическом принципе. Результаты вычислений значения  $P(0^\circ)$  при различных параметрах спирали представлены на рис. 5. Рис. 5, а соответствует случаю когда фиксировалось значение  $\varphi = 2.44\pi$  и варьировалось значение соотношения  $h/r$ . Рис. 5, б получен при фиксированном значении  $h/r = 2.2$  и для различных  $\varphi$ . Отметим, что мера киральности  $P$  обусловлена не только геометрией кластеров, но и параметрами, определяющими рассеивающие свойства кластеров (волновым параметром  $x_0$ , характеризующим размер, комплексным показателем преломления  $n$  составляющих частиц, их числом  $N$  в кластере, отношениями параметров спирали к длине волны падающего излучения  $h/\lambda, r/\lambda$ ).

Каждая из кривых рис. 5, а получена для одних и тех же значений  $h/\lambda, r/\lambda, x_0, \tilde{n}$  и при близких значениях числа частиц в кластере  $N$  (рис. 3). При этом геометрия спирали изменяется значительно (см. рис. 3).



**Рис. 5.** Зависимость меры киральности  $P$  от свойств спирального кластера. Для кривых 1 –  $r = 6x_0$ , для кривых 2 –  $r = 7x_0$

В то же время на величину  $P$  (рис. 5, б) существенное влияние оказывает не только изменение геометрических параметров спирали, но и изменение числа частиц в кластере (см. рис. 4).

Как видно из рис. 5, а максимальное значение  $P$  на кривой 1 (радиус спирали  $r = 6x_0$ ,  $x_0 = 1$ ) наблюдается при  $h/r \approx 2$ , а на кривой 2 (радиус спирали  $r = 7x_0$ ) – при  $h/r \approx 2.25$ . Оба результата близки к значению  $h/r \approx 2.2$ , при котором появляется максимум  $I$ .

При фиксированном значении  $h/r$  локальные максимумы  $P$  наблюдаются при  $\phi = 2.2\pi$  и  $\phi = 2.44\pi$  на кривой 1 рис. 5, б и при  $\phi = 2.4\pi$  на кривой 2 рис. 5, б (максимальное значение  $I$  соответствует  $\phi = 2.44\pi$ ).

Остановимся теперь на сравнении параметров тетраэдров, соответствующих максимальным значениям меры киральности  $K_m$ , вычисленной по указанному в предыдущем разделе алгоритму, и максимальным значениям  $P$  для кластеров. Координаты вершин тетраэдра с максимальным значением  $K_m$  следующие:  $A(-1, 0, 0)$ ,  $B(1, 0, 0)$ ,  $C(0.39, 2.65, 0)$  и  $D(-0.4, 2.0, 1.73)$ . Конфигурация кластера с частицами в вершинах тетраэдра, соответствующая максимальному значению  $P$ , определялась варьированием координат частиц кластера. Параметры частиц следующие: волновые параметры  $x_0 = 4.0$ , показатели преломления частиц  $n = 4.0 + i0.0$ . Для того чтобы можно было контролировать влияние интерференции, не связанной с киральностью, максимум  $P$  находился для кластеров двух масштабов: в первом случае начальные значения координат частиц кластера, соответствующих координатам вершин тетраэдра с максимальным  $K_m$ , умножались на  $1.5x_0$  и во втором случае – на  $3.0x_0$ . В первом случае максимальному значению  $P = 1.4 \cdot 10^{-3}$  соответствовал кластер с координатами частиц  $A(-1, 0, 0.27) \cdot 1.5x_0$ ,  $B(1, 0, 0) \cdot 1.5x_0$ ,  $C(0.53, 2.65, 0.2) \cdot 1.5x_0$ ,  $D(-0.4, 2, 1.8) \cdot 1.5x_0$ . Во втором случае максимальное значение  $P = 3.15 \cdot 10^{-5}$  и координаты  $A(-1, 0, 0.07) \cdot 3.0x_0$ ,  $B(1, 0, 0) \cdot 3.0x_0$ ,  $C(0.53, 2.65, 0.2) \cdot 3.0x_0$ ,  $D(-0.4, 2, 1.8) \cdot 3.0x_0$ . Как видно, геометрические свойства тетраэдров в обоих случаях близки к геометрическим свойствам тетраэдра, соответствующего максимальным значениям  $K_m$ . Различия в геометрических свойствах тетраэдров вызваны тем, что степень круговой поляризации  $P$  для хаотически ориентированного тетраэдра зависит не только от меры киральности тетраэдра, но и от вклада всевозможной интерференции рассеянных волн, которая может приводить к смещению максимума  $P$ . В частности, этим объясняется некоторое

различие в геометрии тетраэдров, соответствующих двум указанным выше масштабам кластеров.

Заметим, что при сравнении рис. 4 и 5, а различие кривых не должно настораживать. График на рис. 4 показывает исключительно геометрическую величину киральности, в то время как рис. 5, а – относительную разницу в интенсивностях рассеянного разнополяризованного излучения. Достаточно, чтобы их максимумы совпадали.

### Заключение

Описанный выше алгоритм вычисления меры киральности является простым в реализации, устойчивым и быстро сходящимся (в смысле пригодности для расчетов). Тестирование алгоритма проведено путем сравнения данных вычислений меры киральности для спиралей и тетраэдров и степени круговой поляризации рассеянного излучения этими структурами при их хаотической ориентации. Это тестирование показало работоспособность и надежность предложенного алгоритма.

### Литература

1. Caloz C., Itoh T. Metamaterials for High-Frequency Electronics // Proc. IEEE. – 2005. – Vol. 93, No. 10. – P. 1744-1752.
2. Hecht L., Barron L. Rayleigh and Raman optical activity from chiral surfaces // Chem. Phys. Lett. – 1994. – No. 225. – P. 525-530.
3. Papakostas A., Potts A., Bagnall D. M., Prosvirnin S. L., Coles H. J., Zheludev N. I. Optical Manifestations of Planar Chirality // Phys. Rev. Lett. – 2003. – Vol. 90. – 107404.
4. Prosvirnin S. L., Zheludev N. I. Polarization effects in the diffraction of light by a planar chiral structure // Phys. Rev. E. – 2005. – Vol. 71. – 037603.
5. Petitjean M. Chirality and Symmetry Measures: A Transdisciplinary Review // Entropy. – 2003. – Vol. 5, No. 3. – P. 271-312.
6. Potts A., Bagnall D. M., and Zheludev N. I. A new model of geometric chirality for two-dimensional continuous media and planar meta-materials // J. Opt. A: Pure Appl. Opt. – 2004. – Vol. 6. – P. 193-203.

7. Boruhovich S. P., Prosvirnin S. L., Schwanecke A. S., and Zheludev N. I. Multiplicative measure of planar chirality for 2D meta-materials // Proc. Eur. Microw. Assoc. – 2006. – Vol. 2, No. 1. – P. 89-93.
8. Bohren C. F., Huffman D. R. Absorption and Scattering of Light by Small Particles. – New York: Wiley, 1983. – 660 p.
9. Mackowski D., Mishchenko M. Calculation of the T matrix and scattering matrix for ensemble of spheres // J. Opt. Soc. Am. – Vol. 13. – P. 2266-2278.
10. Mishchenko M. I., Travis L. D. and Lacis A. A. Scattering, Absorption and Emission of Light by Small Particles. – Cambridge University press, 2002. – 445 p.

### Модель міри просторової кіральності

**С. П. Борухович, П. В. Литвинов,  
В. П. Тишковец, С. Л. Просвирнин**

Побудовано новий простий алгоритм обчислення міри геометричної кіральності об'ємних структур. Задачу розглянуто у контексті проблеми дифракції електромагнітних хвиль на елементах, що мають складну форму. Наведено результати розрахунків міри кіральності деяких структур з циліндричних спиралей та тетраедричних елементів залежно від їх геометричних параметрів. Виконано порівняння із даними, отриманими шляхом дослідження розсіяння випромінювання на хаотично орієнтованих структурах.

### Three-Dimensional Chirality Degree Model

**S. P. Boruhovich, P. V. Litvinov,  
V. P. Tishkovets, and S. L. Prosvirnin**

A new simple algorithm for calculation of a 3D geometric chirality degree is constructed. The problem is considered in context of electromagnetic wave diffraction on complex-shape elements. Dependencies of the chirality degree for some structures of cylindrical spirals and tetrahedrons are shown vs. their geometries. The results are compared with those achieved for the radiation scattered by randomly oriented structures.