

УДК 535.328

ОПИСАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ СВОЙСТВ СИСТЕМЫ ГРАН ХЛОРОПЛАСТА МЕТОДОМ ГОМОГЕНИЗАЦИИ

© 2022 г. Р. Г. Бикбаев^{1,2,*}, И. В. Тимофеев^{1,2}, академик РАН В. Ф. Шабанов^{1,3}

Поступило 12.11.2021 г.

После доработки 12.11.2021 г.

Принято к публикации 29.11.2021 г.

В работе исследованы спектральные свойства треугольной решетки из гран. Методом конечных разностей во временной области рассчитаны спектры пропускания структуры и определены компоненты матрицы рассеяния, позволяющие определить эффективные параметры структуры. В результате было показано, что двумерная решетка из гран может быть представлена в виде гомогенной пленки с толщиной равной высоте грани. Показано, что положения резонансов до и после гомогенизации структуры совпадают, что делает этот метод привлекательным для проведения оценочных расчетов структуры.

Ключевые слова: модель эффективной среды, многослойные структуры, мягкая материя

DOI: 10.31857/S2686740022010059

ВВЕДЕНИЕ

Определение оптических свойств гетерогенных сред – давняя и очень сложная задача, для решения которой было предложено множество самых различных идей и подходов [1]. Наиболее известная и широко используемая – модель эффективной среды. Суть этого метода заключается в том, что любую среду можно охарактеризовать с помощью эффективной диэлектрической проницаемости. Достоинством данной модели является то, что нет необходимости искать решение уравнений Максвелла в каждой точке пространства, а достаточно воспользоваться усредненными по объему значениями параметров среды для определения ее оптических свойств. В модели эффективной среды для диспергированных сред используют электростатическое приближение, при котором расстояние между частицами, а также размер самих частиц, намного меньше по сравнению с длиной волны в среде. В противном случае необходимо учитывать рассеяние на наночастицах и интерференцию на рассеянных волнах. Точное

определение эффективной диэлектрической проницаемости среды не всегда возможно, поэтому для большинства задач рассматриваются различные приближения, принимающие во внимание локальное поле, определяемое из решения задач электростатики. Одними из самых распространенных моделей эффективной среды являются модели Максвелл–Гарнетта [2] и Бруггемана [3], что обусловлено их физической наглядностью. Эффективные параметры периодических сред [4] или метаповерхностей [5] могут быть определены через матрицу рассеяния. Компоненты этой матрицы связаны с компонентами матрицы переноса, которые могут быть рассчитаны аналитическими и точными методами. В результате многослойная структура или метаповерхность представляются в виде однородного слоя с усредненными значениями диэлектрической или магнитной проницаемости. Важно отметить, что методы гомогенизации могут быть применены и для определения эффективных параметров биологических сред. Так, в работах [6, 7] с помощью модели эффективной среды был определен показатель преломления грани, входящей в состав хлоропласта. Грана, представляющая собой многослойник, каждый период которого состоит из четырех подслоев: строма (4 нм), тилакоид (4 нм), люмен (8 нм), тилакоид (4 нм), была представлена в виде цилиндра с эффективным показателем преломления, усредненным по ее объему. Этот подход позволил значительно уменьшить время расчета исследуемых структур. В данной работе нами рассмотрена возможность гомогенизации решетки из гран и

¹ Институт физики им. Л.В. Киренского
Сибирского отделения Российской академии наук,
Красноярск, Россия

² Сибирский федеральный университет,
Красноярск, Россия

³ Сибирский государственный университет науки
и технологий имени академика М.Ф. Решетнева,
Красноярск, Россия

*E-mail: bikbaev@iph.krasn.ru

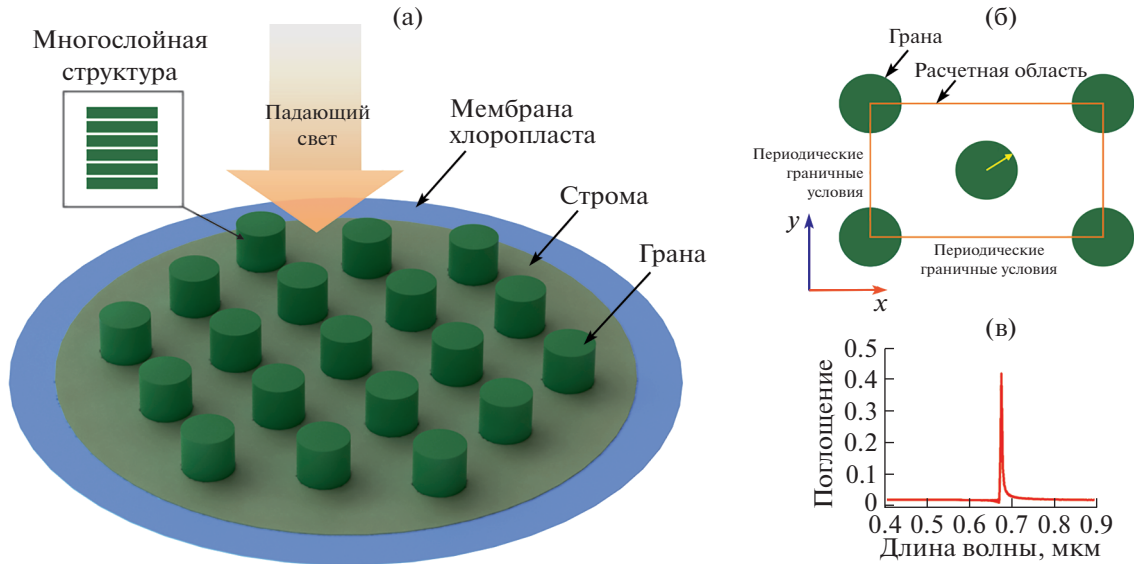


Рис. 1. а – Схематическое изображение исследуемой структуры; б – схематическое изображение расчетной области и в – спектр поглощения структуры, рассчитанный методом конечных разностей во временной области. Спектральный пик соответствует области поглощения хлорофилла *a*.

представления ее в виде однородного слоя с толщиной равной высоте граны. Подобного рода двойная гомогенизация (гомогенизация граны и гомогенизация всей решетки из гран) ранее не рассматривалась, что придает актуальность работе. Кроме этого, исследованы спектральные свойства многослойной структуры, образованной решетками из гран или гомогенизированными слоями. Ранее было показано, что наличие фотонной запрещенной зоны и дефектных мод оказывает существенное влияние на первичные этапы фотосинтеза [8, 9].

ОПИСАНИЕ ИССЛЕДУЕМОЙ СТРУКТУРЫ

На рис. 1а схематически изображено строение хлоропласта, который состоит из внешней мембраны и цилиндрических дискообразных гран, образующих треугольную решетку. Эффективный показатель преломления граны равен $n_{\text{eff}} = 1.55 + 0.01i$ [9, 10]. Показатель преломления окружающей среды был принят равным $n_{\text{ext}} = 1.33$.

Для расчета спектров пропускания исследуемой структуры нами был использован метод конечных разностей во временной области (FDTD). В отличие от других методов, например, метода связанных диполей, математическая модель, лежащая в основе FDTD, не использует приближений и является точной для классической электродинамики. Решение уравнений осуществляется методом конечных разностей на двух вложенных друг в друга структурированных прямоугольных сетках, одна из которых предназначена для расчета электрических полей, другая – для магнитных.

Метод позволяет получить спектры пропускания, отражения и поглощения исследуемой системы, а также распределение полей в пределах расчетной области за один расчет, при этом учитываются как геометрическая структура исследуемой системы, так и оптические свойства используемых материалов. Наложение периодических граничных условий и учет симметрии элементарной ячейки периодической структуры, см. рис. 1б, позволяют значительно ускорить процесс вычисления. Так, для исследуемой структуры периодические граничные условия были применены вдоль осей x и y , в то время как плоская волна распространяется вдоль оси z . Радиус и высота граны равны $R = 178$ нм и $H = 200$ нм соответственно. Период расчетной области вдоль оси x составил 578 нм, вдоль оси y – 1001 нм. Рассчитанный спектр пропускания структуры изображен на рис. 1в. Из рис. 1в видно, что на длине волны $\lambda = 0.673$ мкм формируется линия пропускания, обусловленная аномалией Вуда, возникающей в данной решетке. Эффективные параметры решетки из гран были определены через компоненты матрицы рассеяния [10]:

$$n_{\text{eff}} = \frac{1}{kd} \cos^{-1} \left(\frac{1 - S_{11}^2 + S_{21}^2}{2S_{21}} \right), \quad (1)$$

где d – толщина слоя, k – волновой вектор, S_{11}^2 и S_{21}^2 – компоненты матрицы рассеяния.

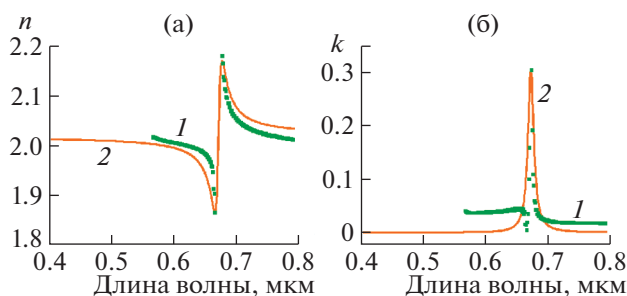


Рис. 2. Зависимости действительной (а) и мнимой (б) частей показателя преломления двумерной решетки от длины волны падающего на структуру излучения. Точками изображены данные, полученные с помощью формулы (1), а сплошными линиями – их аппроксимация.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА

Методом FDTD нами был произведен расчет, позволивший определить эффективный показатель преломления среды. Результаты расчета изображены на рис. 2.

Из рис. 2 видно, что на длине волны $\lambda = 0.673$ мкм мнимая часть эффективного показателя преломления достигает максимального значения, в то время как действительная часть в окрестности этой длины волны имеет резонансный характер. Полученные данные были использованы для повторного расчета, в котором решетка из гран, изображенная на рис. 1а, была заменена однородным слоем с аналогичной толщиной. Результаты расчета изображены на рис. 3а.

Из рис. 3 видно, что длины волн, соответствующие минимуму пропускания структуры, представленной в виде решетки из гран или однородного слоя, совпадают. Однако значительно отличаются сами коэффициенты пропускания. Это связано с тем, что при гомогенизации структуры осуществляется ряд упрощений, которые не позволяют полностью воспроизвести свойства исходной среды. При расчетах подобных структур порой важна не величина пропускания, а положение самого резонанса, поэтому представленная модель может быть использована на первичных (оценочных) этапах вычислений. Еще одним преимуществом такого подхода является возможность использования одномерных матричных методов, например, метода матрицы переноса, при расчете энергетических спектров структур, обладающих периодичностью в направлении оси z . Для проверки этого факта нами были произведены расчеты спектров пропускания многослойных структур, образованных решетками из гран или однородными гомогенизированными слоями толщиной $H = 200$ нм и расстоянием между ними 150 нм. Результаты расчета изображены на рис. 3б. В этом случае наряду с решеточным резонансом на дли-

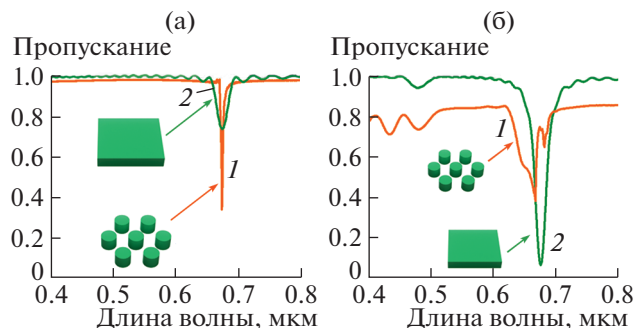


Рис. 3. а – Спектры пропускания однослойной структуры, изображенной на рис. 1а, в случае ее представления в виде решетки из гран (1) или однородного слоя (2) толщиной $H = 200$ нм, гомогенизованного по формуле (1). б – Спектры пропускания многослойной структуры, слой которого представлен в виде двумерной решетки (1) или однородных гомогенизованных (2).

не волны $\lambda = 0.673$ мкм в спектрах пропускания наблюдаются дополнительные минимумы на длинах волн $\lambda = 0.325$ мкм и $\lambda = 0.480$ мкм. Эти минимумы соответствуют запрещенным зонам фотонного кристалла. Таким образом, в подобных структурах могут присутствовать как решеточные, так и брэгговские резонансы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе методом конечных разностей во временной области рассчитаны спектры поглощения и пропускания решетки из гран и определены компоненты матрицы рассеяния, позволяющие вычислить эффективные параметры структуры. В результате двумерная решетка из гран была представлена в виде однородной пленки с толщиной, равной высоте грани. Анализ спектров пропускания структуры показал, что положение резонанса структуры, в случае ее представления в виде двумерной решетки или одного гомогенизированного слоя, совпадает. Показано, что при формировании многослойных структур проявляются как решеточные, так и брэгговские резонансы, проявление которых может способствовать повышению эффективности фотосинтеза.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Sihvola A.* Electromagnetic Mixing Formulas and Applications. IET, 1999. P. 296.
2. *Maxwell-Garnett J.C.* Colours in metal glasses, in metallic films, and in metallic solutions // *Philos. R. Soc. London.* 1906. V. 205. P. 237–288.
3. *Bruggeman D.A.G.* *Annalen der Physik.* 1937. V. 421. P. 160.
4. *Agranovich V., Kravtsov V.* Notes on crystal optics of superlattices // *Solid State Commun.* 1985. V. 55. P. 85–90.

5. *Smith D.R. et al.* Determination of effective permittivity and permeability of metamaterials from reflection and transmission coefficients // *Phys. Rev. B.* 2002. V. 65. P. 195104.
6. *Cinque G. et al.* Energy Transfer among CP29 Chlorophylls: Calculated Förster Rates and Experimental Transient Absorption at Room Temperature // *Biophysical Journal.* 2000. V. 79. P. 1706.
7. *Capretti A. et al.* Nanophotonics of higher-plant photosynthetic membranes. // *Light: Science & Applications.* 2019. V. 8. P. 5.
8. *Кориунов М.А. и др.* Влияние длиннопериодической упорядоченности в структуре растений на первичные стадии фотосинтеза // *ДАН.* 2018. Т. 478. С. 280–283.
9. *Ветров С.Я., Тимофеев И.В., Шабанов В.Ф.* Локализованные моды в хиральных фотонных структурах // *УФН.* 2020. Т. 190. С. 37–62.
10. *Smith D.R. et al.* Electromagnetic parameter retrieval from inhomogeneous metamaterials // *Phys. Rev. E.* 2005. V. 71. P. 036617.

INVESTIGATION OF THE SPECTRAL PROPERTIES OF THE CHLOROPLAST GRANA SYSTEM BY THE EFFECTIVE MEDIUM THEORY

R. G. Bikbaev^{a,b}, I. V. Timofeev^{a,b}, and Academician of the RAS V. F. Shabanov^{a,c}

^a *Kirensky Institute of Physics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Krasnoyarsk, Russian Federation*

^b *Siberian Federal University, Krasnoyarsk, Russian Federation*

^c *Reshetnev Siberian State University of Science and Technology, Krasnoyarsk, Russian Federation*

In this paper, the spectral properties of a triangular lattice of grana are investigated. By the finite difference time domain method the transmittance spectra of the structure are calculated and the components of the scattering matrix are determined, which make it possible to determine the effective parameters of the structure. As a result, it was shown that a two-dimensional lattice of grana can be represented as a homogeneous film with a thickness equal to the height of the grana. It is shown that the positions of the resonances before and after the homogenization of the structure coincide, which makes this method attractive for estimated calculations of the structure.

Keywords: effective medium theory, multilayer structure, soft matter