

01

# Металлические проволочные фотонные кристаллы. Анализ электрофизических свойств

© М.В. Давидович, Ю.В. Стефюк, П.А. Шиловский

Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского,  
410012 Саратов, Россия  
e-mail: davidovichmv@info.sgu.ru

(Поступило в Редакцию 24 мая 2011 г.)

На основе метода интегральных уравнений, основанного на функции Грина периодически расположенных источников, проанализированы простейшие непересекающиеся тонкие проволочные металлические фотонные кристаллы. С использованием гомогенизации получен зависящий от волнового числа и волнового вектора тензор эффективной диэлектрической проницаемости, рассчитана зонная структура и значения диэлектрической проницаемости для нижней дисперсионной ветви.

## Введение

Металлические фотонные кристаллы (МФК) широко исследуются в последние три десятилетия в связи с наличием у них ряда специфических (необычных) для естественных сред свойств в связи с возможностью получения на их основе искусственных сред (метаматериалов) с магнитными свойствами, с отрицательной диэлектрической проницаемостью или обеими проницаемостями, а также в связи с возможностью построения на их основе фильтрующих, волноведущих, фокусирующих, согласующих и ряда других устройств [1–28]. К указанным необычным свойствам МФК относятся: сильная пространственная и частотная дисперсии, отрицательная рефракция, бианизотропия, которые проявляются от СВЧ-диапазона вплоть до оптических частот. Под МФК понимаем любые периодически расположенные металлические объекты или объекты, периодически внедренные в диэлектрическую матрицу (основу) с не имеющей дисперсии в рассматриваемом диапазоне диэлектрической проницаемостью  $\epsilon$ . Из объектов, исследованных в большом числе работ по МФК, авторы взяли простейшие: линейные непересекающиеся проволочные включения. Соответствующие метаматериалы анизотропные, но бианизотропией и магнитными свойствами не обладают (в приближении тонких проволочек). Такой выбор обусловлен тем, что даже строгий электродинамический анализ подобных объектов весьма не прост. Большинство же исследований по МФК базируется на различных приближенных моделях или же для этого используется ряд пакетов прикладных программ, построенных на методе сеток или на методе конечных элементов.

В работе применен подход, базирующийся на методе функций Грина (ФГ) и методе интегродифференциальных уравнений (ИДУ) или интегральных уравнений (ИУ) [29,30] в приближении тонких проволочек. Это приближение означает, что их радиус  $r$  много меньше всех остальных размеров структуры. При этом поперечными (азимутальными) компонентами тока (и соответственно магнитными свойствами) можно пренебречь и свести задачу к одномерному ИУ. Применен один

из трех методов гомогенизации, развитых одним из авторов в [31–35], что позволило получить эффективные электрофизические параметры рассмотренных структур. В данном случае это тензор эффективной диэлектрической проницаемости (ТЭДП). Сделан упор на получение аналитических результатов. Изложены также методы построения моделей рассматриваемых структур с любой заданной точностью. Результаты сравниваются с данными аналогичных публикаций.

## 1. Постановка задачи

Рассмотрим трехмерный (3-D) МФК, состоящий из длинных и тонких металлических проволочек длины  $l$  и радиуса  $r$ , периодически расположенных по осям  $x$ ,  $y$ ,  $z$  с периодами соответственно  $a$ ,  $b$  и  $c$  в среде (матрице) с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon$  (рис. 1). Проволочки считаем тонкими:  $r \ll l$ ,  $r \ll \min(a, b, c)$ . Как частный случай также рассмотрим двумерный (2-D) такой МФК с бесконечно большим периодом  $c \rightarrow \infty$ . Это соответствует бесконечно длинным проволочкам. Реально этот случай реализуется из рассмотренного, когда длина проволочек  $l$  и размер периода  $c$  много

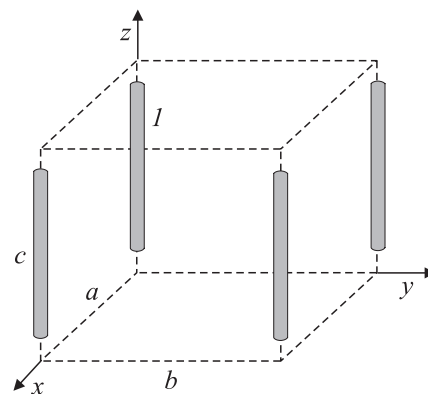


Рис. 1. Металлический фотонный кристалл в виде трехмерно-повторяющихся ячеек периодичности с включениями из тонких металлических стержней (проволочек).

больше размеров  $a$  и  $b$ , или же по координате  $z$  имеется лишь одна длинная ячейка. В этом случае будем считать длину проволочек бесконечной. Тогда для волны с зависимостью  $\exp(i\omega t - i\mathbf{k}\mathbf{r})$  считаем, что вдоль проволочек бегут волны тока, причем их плотность для проволочки  $I$  в нулевой ячейке можно записать в виде

$$\mathbf{J} = \mathbf{z}_0 I \delta(x) \delta(y) \exp(-ik_z z). \quad (1)$$

Здесь  $\mathbf{z}_0$  означает орт-вектор оси  $z$ . Далее для МФК будем использовать скалярную ФГ периодически расположенных сфазированных источников (периодическую ФГ) [29,30]. Свободные (собственные) волны МФК создают на металлических стержнях (проволочках) сдвинутые по фазам токи, которые в свою очередь и поддерживают (возбуждают) волну. В соответствии с подходом, основанным на методах ФГ и ИУ, достаточно получить решение последнего в одной (нулевой) ячейке периодичности, при этом использовать только объекты, принадлежащие этой ячейке. В нашем случае нулевой ячейке, соответствующей началу координат, принадлежит только проволочка  $I$  (рис. 1). Плотность тока (1) создает только одну компоненту электрического вектора-потенциала  $A_z$ , через которую можно выразить электрическое и магнитное поля. Для первого имеем

$$\mathbf{E} = \frac{\text{grad}(\text{div}) + k_0^2 \varepsilon}{i\omega \varepsilon_0 \varepsilon} \mathbf{z} A_z. \quad (2)$$

Далее потребуется только компонента  $E_z$  электрического поля, так как только для нее следует учитывать граничные условия. После интегрирования (1) с ФГ получаем  $A_z$ , что, согласно (2), дает

$$E_z = I \frac{k_0^2 \varepsilon - k_z^2}{i\omega \varepsilon_0 \varepsilon a b} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-ik_{xm}x - ik_{yn}y - ik_z z)}{k_{xm}^2 + k_{yn}^2 + k_z^2 - k_0^2 \varepsilon}, \quad (3)$$

где  $k_{xm} = k_x + 2m\pi/a$  и  $k_{yn} = k_y + 2n\pi/b$ . Здесь и далее временная экспонента опущена. Заметим, что вместо поверхностной плотности тока на проволочках в силу малой их толщины используем линейный ток, т.е. перешли от поверхностных уравнений к линейным. Если же импеданс проволочек конечен, а частоты достаточно высоки, следует использовать объемное распределение плотности тока типа (1). Это, в частности, относится к инфракрасному и оптическому диапазонам, где наноразмерные металлические проволочки следует моделировать как плазму. Чтобы получить из (3) дисперсионное уравнение (ДУ), достаточно наложить граничное условие на любой линии на поверхности проволочки, например, для  $x = r$ ,  $y = 0$ . В общем случае должны записать

$$E_z(x, y, z) = Z_S J_S(x, y, z). \quad (4)$$

Здесь точки  $x$ ,  $y$  принадлежат поверхности,  $Z_S$  — поверхностный импеданс,  $J_S$  — поверхностная плотность тока. В нашем случае следует считать поверхностную плотность тока равномерной  $J_S = I/(2\pi r) \exp(-ik_z z)$ .

Поверхностный импеданс можно взять в форме Леонтовича (или равным нулю в приближении идеально проводящих проволочек). В уравнении (4) удобно положить  $z = 0$ . Тогда граничное условие (4) может быть взято с усредненным по четырем симметричным точкам окружности электрическим полем или же как усредненное по азимутальному углу условие в соответствующей цилиндрической системе, связанной с проволочкой. В обоих случаях получаются аналитические ДУ, в которых одну из сумм можно вычислить явно [29,30]. Итак, мы имеем ДУ типа

$$F(k_0, \mathbf{k}) = 0, \quad (5)$$

которое (при заданном  $k_z$ ) определяет связь волнового числа  $k_0$  с поперечными компонентами волнового вектора  $k_x$  и  $k_y$ . Заметим, что реально (5) зависят от квадрата волнового числа. Задавая указанные величины волновых векторов, можно построить дисперсионную поверхность  $k_0 = f(k_x, k_y)$  для каждого  $k_z$  [29,30]. В общем случае ДУ определяет 3-D гиперповерхность в 4-D пространстве. Для идеально проводящих проволочек эта поверхность многолистная (многосвязная) и состоит из не касающихся друг друга поверхностей. Соответственно имеются запрещенные зоны для  $k_0$  (bandgap). В случае фотонного кристалла (ФК) с потерями периодичность нарушается, а указанные поверхности соединяются [29].

Для получения электрофизических параметров воспользуемся одним из методов гомогенизации, описанным в [31–35] и основанным на вычислении дипольных и высших мультипольных моментов. Под электрофизическими параметрами понимаем определенные на основе строгой электродинамической модели диэлектрические и магнитные проницаемости, зависящие от  $k_0$  и  $\mathbf{k}$ . Это означает учет временной и пространственной дисперсий. Далее будем определять только дипольные вклады в поляризацию  $\mathbf{P}$ . Известно, что металлические включения могут приводить к наличию магнитных свойств. Они проявляются, если учесть конечность  $r$  и наличие азимутальных токов на проволочных включениях. В нашем случае тонких проволочек  $\mu = 1$ , а ТЭДП можно записать как

$$\hat{\varepsilon}(k_0, \mathbf{k}) = \begin{bmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & o \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix}. \quad (6)$$

Искомая компонента связана с единственной  $z$ -компонентой вектора поляризации

$$\varepsilon_{zz}(k_0, \mathbf{k}) = 1 + \frac{P_z}{\varepsilon_0 \langle E_z \rangle}, \quad (7)$$

где скобка Дирака означает усредненную по ячейке  $z$ -компоненту электрического поля (3).

Процедура гомогенизации предполагает усреднение, т.е. замену быстро осциллирующих полей типа (3) на некие эффективные значения. Поскольку способов усреднения может быть много, гомогенизация является процедурой неоднозначной. В частности, нам необходимо усреднять функции типа  $\exp(-ik_{xm}x)$ . В качестве

интервала усреднения можно взять  $(0, a)$ , при этом получаются комплексные значения. Будем брать интервалы:  $(-a/2, a/2)$ . Тогда среднее значение экспоненты есть

$$e_{xm}(k_x, a) = \langle \exp(-ik_x x) \rangle = \frac{1}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \exp\left(-i\left[k_x + \frac{2m\pi}{a}\right]x\right) dx = \frac{2}{a} \frac{(-1)^m \sin(k_x a/2)}{k_x + 2m\pi/a}. \quad (8)$$

Усреднение по  $z$  проведем так:

$$e_z(k_z, L) = \langle \exp(-ik_z z) \rangle = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L \exp(-ik_z z) dz = \frac{\sin(k_z L)}{k_z L}.$$

Эта величина как функция  $L$  убывает и колеблется с периодом  $2\pi/k_z$ . Поэтому усредним ее по указанному периоду

$$e_z(k_z) = \langle e_z(k_z, L) \rangle = \frac{k_z}{2\pi} \int_{-\pi/k_z}^{\pi/k_z} \frac{\sin(k_z L)}{k_z L} dL = \frac{1}{\pi} \text{si}(\pi). \quad (9)$$

Заметим, что она не зависит от  $L$ . Взяв дивергенцию (1), найдем плотность заряда

$$\rho = -k_z I \delta(x) \delta(y) \exp(-ik_z z) / \omega. \quad (10)$$

Наличие дельта-функций говорит о том, что фактически имеется линейный заряд и линейный ток. Вектор поляризации имеет одну  $z$ -компоненту

$$P_z(k_z, L) = \frac{Ik_z}{2\omega abL} \int_{-L}^L z \exp(-ik_z z) dz = \frac{-iI}{\omega ab} \left\{ -\cos(k_z L) + \frac{\sin(k_z L)}{k_z L} \right\}. \quad (11)$$

Члены в (11) как функции  $L$  четные, первый осциллирует с периодом  $2\pi/k_z$ , а второй осциллирует и затухает при больших длинах  $L$ . Поэтому усредним результат по периоду осцилляций

$$\langle P_z \rangle = \frac{k_z}{\pi} \int_0^{\pi/k_z} P_z(k_z, L) dL = \frac{-iI}{\pi \omega ab} \text{si}(\pi). \quad (12)$$

Мы получили результат, не зависящий от  $k_z$ . При выводе (12), однако, длина  $L$  предполагалась большой, т.е.  $k_z = 2\pi/L$  величиной малой. Итак, имеем

$$\langle E_z \rangle = I \frac{(k_0^2 - k_z^2) e_z(k_z)}{i\omega \epsilon_0 \epsilon ab} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{e_{xm}(k_x, a) e_{yn}(k_y, b)}{k_{xm}^2 + k_{yn}^2 + k_z^2 - k_0^2 \epsilon}. \quad (13)$$

Теперь диэлектрическая проницаемость определена формулой (7), в которой поляризацию следует заменить ее средним значением (12). Заметим, что поляризацию и поле мы усредняли одинаковым методом. Приведем полученный результат

$$\epsilon_{zz}(k_0, \mathbf{k}) = 1 + \frac{\epsilon ab [\sin(k_x a/2) \sin(k_y b/2)]^{-1}}{4(k_0^2 \epsilon - k_z^2) \sum_{m,n=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^{m+n}}{(k_{xm}^2 + k_{yn}^2 + k_z^2 - k_0^2 \epsilon) k_{xm} k_{yn}}}. \quad (14)$$

Следует отметить, что при усреднении поля мы интегрировали по всему объему ячейки. Для идеально проводящих проволочек поле внутри них отсутствует, и их объем можно исключить. Соответствующие уточнения, однако, несущественны, поскольку поле удовлетворяет приближенному граничному условию (4), т.е. малю как на поверхности, так и внутри проволочки. Ошибка при этом получается второго порядка по  $r/a$ . Сделаем еще одно важное замечание. Входящие в (14) величины не являются независимыми. Они связаны посредством ДУ (5). Например, задавая  $k_0$ , выбираем дисперсионную поверхность. Если волновое число попадает в зону bandgap, диэлектрическая проницаемость не определена, поскольку нет решений ДУ. Можно считать ее отрицательной, что соответствует отсутствию распространения волны (затуханию). Далее уточним, как ее определить и в этом случае. Задав  $k_0$ ,  $k_z$  и одну из поперечных компонент волнового вектора, из (5) находим другую. Тогда подстановка их в (15) определяет ТЭДП (6). Он разный для разных дисперсионных поверхностей и зависит при данном  $k_0 = \omega/c$ , вообще говоря, от двух компонент волнового вектора (при заданном  $k_z$ ). ДУ (5) периодически по  $k_x$  и  $k_y$  с периодами обратной решетки  $2\pi/a$ ,  $2\pi/b$  соответственно. Это же относится и к (14). Эту формулу можно записать так:

$$\epsilon_{zz}(k_0, \mathbf{k}) = 1 - \frac{k_p^2(\omega, k_x, k_y, k_z) \epsilon}{k_0^2 \epsilon - k_z^2}. \quad (15)$$

Выражения типа (15) были получены в ряде работ из различных качественных и модельных соображений [1-3,5,11,12,14,18,20-22,28], в том числе рассматривался его вид при  $k_z = 0$  [11,12]. В этом случае ФК ведет себя как плазма с отсечкой на плазменной частоте  $\omega_p = ck_p(\omega, k_x, k_y, k_z)$ . С ростом  $k_z^2$  указанная частота обычно смещается в высокочастотную область:  $\omega = c \sqrt{k_p^2(\omega, k_x, k_y, k_z) + k_z^2/\epsilon}$  [29]. Исследуем соотношение (14). Ряд сходится весьма быстро, а его сумма (при малых  $k_0, |\mathbf{k}|$ ) определяется в основном нулевым членом. При  $k_x \rightarrow 0, k_y \rightarrow 0$  имеем  $\epsilon_{zz}(k_0, \mathbf{k}) \rightarrow 0$ , что соответствует низкочастотной отсечке. При этом сама частота отсечки увеличивается с ростом  $k_z$ . Это же относится к случаю  $k_x = 2\pi/a, k_y = 2\pi/b$  и аналогичным точкам в силу периодичности (14) по поперечным волновым векторам. При малых  $k_x, k_y$ , как нетрудно видеть,  $0 < \epsilon_{zz}(k_0, \mathbf{k}) < 1$ . Для конфигурации МФК  $a = b = c, r/a = 0.001, \epsilon = 1$  имеем оценку  $k_p a = 1.43$ .

На более низких частотах, согласно модели (15),  $\varepsilon_{zz}$  отрицательна и стремится к большим отрицательным значениям при  $k_0 \rightarrow 0$  (предполагается  $k_z = 0$ ). При  $k_0\sqrt{\varepsilon} = k_z$  и  $k_x^2 + k_y^2 > 0$  выражение (14) обращается в бесконечность. Это соответствует тому, что свободная волна вдоль проволочек распространяться не может. Возбужденная сторонам источником плоская волна через конечную структуру такого МФК проходит почти без отражений, поскольку ее электрическое поле перпендикулярно проволочкам и не наводит на них токи. Однако свободные волны в бесконечной структуре должны наводить на проводниках токи, которые их же и поддерживают, что в данном случае выполняться не может. В отсутствие потерь величина  $k_z$  действительная и определяет волну тока (1). При  $k_0\sqrt{\varepsilon} > k_z$  эта волна быстрая, а при  $k_0\sqrt{\varepsilon} < k_z$  — медленная. Если  $k_x^2 + k_y^2 > 0$ , то волна тока может быть только быстрой, т.е.  $k_z < k_0\sqrt{\varepsilon}$ . Определение эффективной проницаемости при  $k_0 < k_p$  или в следующей полосе пропускания также может быть получено указанным методом. Для этого следует искать мнимые корни  $k_x, k_y$ , или, полагая их значения мнимыми, определить  $k_0$ , а далее проводить рассмотренные усреднения при вычислении дипольного момента.

## 2. Одноосные, двуосные и трехосные МФК с неконтактирующими проволочками

Из изложенного выше ясно, что ориентация проволочки определяет ее вклад в электрический дипольный момент в соответствующем направлении. Далее рассмотрим неконтактирующие проволочки конечной длины. Контактирующие проволочные ФК требуют учета непрерывности тока (по закону Кирхгофа), что усложняет рассмотрение и составляет предмет отдельного исследования. Рассмотрим простейшую структуру (рис. 1). Теперь плотность тока запишем в виде

$$\mathbf{J} = \mathbf{z}_0 \delta(x) \delta(y) \sum_{s=1}^{N_s} I_s \cos(k_s z). \quad (16)$$

Здесь  $k_s = (2s - 1)\pi/l$ , а начало координат по сравнению с рис. 1 сдвинуто в центр проволочки, так что на концах ток обращается в нуль. Используя изложенный выше подход, найдем

$$E_z = \frac{2}{i\omega\varepsilon_0\varepsilon ab} \sum_{s=1}^{N_s} (-1)^s k_s I_s \sum_{m,n,k=-\infty}^{\infty} \cos\left(\frac{k_z l}{2}\right) \times \frac{(k_0^2\varepsilon - k_{zk}^2) \exp(-i[k_{xm}x + k_{yn}y + k_z k z])}{(k_{zk}^2 - k_s^2)(k_{xm}^2 + k_{yn}^2 + k_{zk}^2 - k_0^2\varepsilon)}. \quad (17)$$

Компонента (17) должна обратиться в нуль на поверхности проволочки. Применяя метод Галеркина, имеем

$$\int_{-l/2}^{l/2} E_z(x, y, z) \cos(k_s z) dz = 0. \quad (18)$$

В (18) точка  $(x, y)$  принадлежит окружности  $x^2 + y^2 = r^2$ . Можно взять произвольную точку окружности. Тогда соотношения (17) и (18) приводят к системе линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), определитель которой  $\Delta$  должен быть равен нулю. Собственно  $F(k_0, \mathbf{k}) = \Delta = 0$  и есть искомое ДУ. Оно слабо меняется при движении выбранной точки по окружности. Удобно наложить граничные условия в четырех симметричных точках  $x = \pm r, y = 0$  и  $x = 0, y = \pm r$ . При этом вместо экспонент в (17) получим  $a_{mn}(k_x, k_y) = \cos([k_{xm} + k_{yn}]r/2) \cos([k_{xm} - k_{yn}]r/2)$ , а компонента (17) зависит только от координаты  $z$  и имеет разложение

$$E_z(z) = \sum_{s=1}^{N_s} I_s \tilde{E}_{zs}(z).$$

Теперь матричные элементы, согласно (18), можно записать так:

$$E_{ss'} = \int_{-l/2}^{l/2} \tilde{E}_{zs}(z) \cos(k_s z) dz = \frac{4k_s k_{s'}}{i\omega\varepsilon_0\varepsilon ab} (-1)^{s+s'} \times \sum_{m,n,k=-\infty}^{\infty} \cos^2\left(\frac{k_z k l}{2}\right) \frac{(k_0^2\varepsilon - k_{zk}^2) \alpha_{mn}(k_x, k_y)}{(k_{zk}^2 - k_s^2)[k_{xm}^2 + k_{yn}^2 + k_{zk}^2 - k_0^2\varepsilon]}$$

Усредним по всем точкам окружности, записав  $x = r \cos \varphi, y = r \sin \varphi$  и проинтегрировав по углу. При этом возникают функции Бесселя в силу формулы [30]

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp(\pm i r (k_{xm} \cos \varphi + k_{ym} \sin \varphi)) d\varphi = J_0\left(r \sqrt{k_{xm}^2 + k_{ym}^2}\right).$$

Это соответствует изменению введенной ранее величины так:  $\alpha_{mn}(k_x, k_y) = J_0(r \sqrt{k_{xm}^2 + k_{ym}^2})$ . Поскольку ряды сходятся достаточно быстро, отличие обеих величин при малых  $r$  и для невысоких значений индексов незначительное. Однако такое усреднение приводит к улучшению сходимости рядов. Видно, что особенность при  $k_{zk} = \pm k_s$  устранимая. Однако когда квадратная скобка в знаменателе (17) обращается в нуль, матричные элементы имеют полюса. Часто указанные полюса находятся вблизи корней ДУ, что затрудняет нахождение последних. Устранение полюсов возможно путем добавления малой мнимой части к волновому числу:  $k_0 \rightarrow k_0 - i\delta$ . Однако такое добавление приводит к ложным корням. Заметим, что указанный способ при  $\delta \rightarrow +0$  в случае ФГ свободного пространства выделяет требуемый ее вид, удовлетворяющий условию излучения [36]. В случае же ФК условие излучения накладывать не нужно: в экспоненте периодической ФГ можно взять оба знака  $\exp(\pm i \mathbf{k}_{mnk} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}'))$ , поскольку нет выделенного

направления излучения: собственные прямые и обратные волны (волны в отсутствие источников) неразличимы [29]. Указанные полюса соответствуют условиям  $k_0^2 \varepsilon = k_{xm}^2 + k_{yn}^2 + k_{zk}^2$ , которые разделяют дисперсионные ветви. В частности, при  $m = n = k = 0$  имеем  $\sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \pm k_0 \sqrt{\varepsilon}$ . Для волны с  $k_y = k_z = 0$  прямые  $k_x = \pm k_0 \sqrt{\varepsilon}$  отделяют ветви медленных и быстрых волн первой зоны. Заметим, что ряды с  $\alpha_{mn}(k_x, k_y)$  в виде косинусов можно просуммировать асимптотически по двум индексам при больших их значениях. Однако такое суммирование весьма громоздко и приводит к неудобным соотношениям. Исходные соотношения удобны для распараллеливания алгоритмов, что и было сделано при расчетах.

Дипольный момент единицы объема есть

$$P_z = \frac{i}{abc\omega} \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-b/2}^{b/2} \int_{-c/2}^{c/2} z \frac{dJ}{dz} dx dy dz. \quad (19)$$

Вычисляя его, получим

$$P_z = \frac{-i}{abc\omega} \sum_{s=1}^N I_s \{ -l \cos(k_s l / 2) + 2 \sin(k_s l / 2) / k_s \}$$

Для него усреднение не требуется, поскольку имеется одна проволочка на ячейку. Усредняя компоненту электрического поля (17), найдем

$$\langle E_z \rangle = \frac{2}{i\omega \varepsilon_0 \varepsilon ab} \sum_{s=1}^{N_s} (-1)^s k_s I_s \sum_{m,n,k=-\infty}^{\infty} \cos\left(\frac{k_{zk} l}{2}\right) \times \frac{(k_0^2 \varepsilon - k_{zk}^2) e_{xm}(k_x, a) e_{yn}(k_y, b) e_{zk}(k_z, c)}{(k_{zk}^2 - k_s^2) [k_{xm}^2 + k_{yn}^2 + k_{zk}^2 - k_0^2 \varepsilon]}. \quad (20)$$

Соответственно компонента тензора (6) определяется по формуле (7). При этом сначала следует, задав  $k_x, k_y, k_z$ , определить из ДУ  $k_0$ . Значений при конечном числе базисных функций в (16) может быть несколько. Из них следует выбрать нужное, например, наименьшее. Далее следует положить  $I_1 = 1$  (волна определяется с точностью до произвольной амплитуды) и выразить через нее оставшиеся амплитуды гармоник тока как решения СЛАУ с меньшим на единицу порядком. Далее все определенные величины подставляем в (20), а затем определяем проницаемость.

Трехосный МФК имеет три проволочки на ячейку периодичности в виде параллелепипеда со сторонами  $a, b, c$ . Длины проволочек  $l_1, l_2, l_3$ . Такой МФК характеризуется диагональным тензором эффективной диэлектрической проницаемости

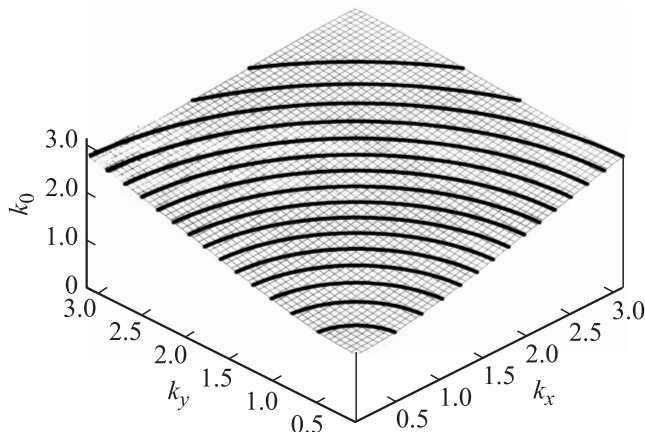
$$\hat{\varepsilon}(k_0, \mathbf{k}) = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix}. \quad (21)$$

В принципе проволочки могут быть расположены несимметрично. Кроме этого, возможны такие проволочки

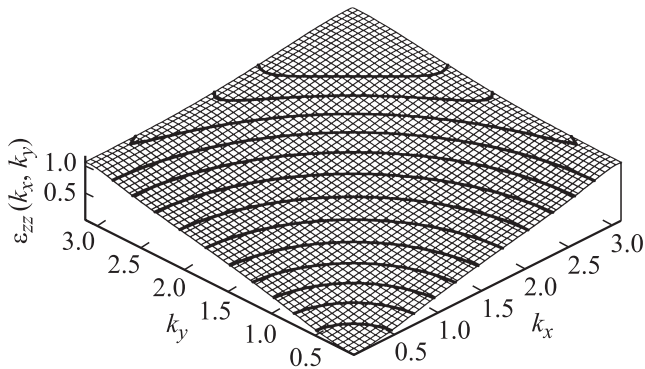
на гранях ячейки и внутри нее, при этом их ориентация может быть любой. Это приводит к недиагональному виду тензора (21), поскольку произвольно ориентированная проволочка дает вклад во все компоненты дипольного момента. Однако в силу теоремы Онсагера–Казимира при отсутствии диссипации из-за самосопряженности задачи имеем  $\varepsilon_{mn}(k_0, \mathbf{k}) = \varepsilon_{nm}^*(k_0, \mathbf{k})$ . Если потерь в диэлектрической основе и проволочках нет, то все компоненты тензора действительные, а сам он симметричен. Однако при наличии диссипации тензоры типа (2) уже неэрмитовые, и условие симметрии Онсагера должно быть видоизменено так:  $\varepsilon_{mn}(k_0, \mathbf{k}) = \varepsilon'_{nm}(k_0, \mathbf{k}) - i\varepsilon''_{nm}(k_0, \mathbf{k})$ . Наличие  $N$  проволочек в ячейке приводит к системе  $N$  связанных одномерных ИУ и к ДУ в виде равенства нулю определителя СЛАУ, соответствующей дискретизации уравнений. Порядок определителя при учете нескольких гармоник тока на проволочке при  $N_s > 3$  является уже достаточно существенным фактором, ухудшающим поиск его комплексных корней в трехмерной комплексной области  $\mathbf{k}$ , что становится весьма нетривиальной задачей. Дисперсия тогда определяется гиперповерхностью в шестимерной области. Для микроструктурированных и наноструктурированных МФК в терагерцовой, инфракрасной и оптической областях потери очень существенны. Такие МФК не имеют резко выраженных зон bandgap, поэтому тензор  $\hat{\varepsilon}(k_0, \mathbf{k})$  следует определять во всей необходимой области частот и волновых векторов. Для недиссипативных систем на границах зон bandgap соответствующие компоненты ТЭДП обращаются в нуль. Внутри зон bandgap вектор  $\mathbf{k}$  чисто мнимый (для 3-D структур) или мнимые некоторые из его компонент (для 1-D и 2-D структур) [29]. Соответственно волна в указанных направлениях затухает. Такое затухание носит реактивный (недиссипативный) характер, при этом периодичность сохраняется. Заметим, что в периодических диссипативных фотонных кристаллах (ФК) периодичность в электродинамическом смысле нарушается: волна распространяется с затуханием. Это принципиальное отличие ФК от обычных твердотельных кристаллов, для которых характерно локальное сохранение плотности вероятности и глобальной вероятности (числа единиц). Как следствие этого имеют место периодичность (с точностью до фазового множителя) блоховских волн плотности вероятности и самосопряженность задачи. Нарушение периодичности возможно лишь за счет дислокаций и конечности структуры, при этом задача здесь опять самосопряженная. В конечных ФК имеет место излучение, поэтому собственные частоты резонаторов на основе ФК комплексные (подобно частотам диэлектрических резонаторов).

### 3. Численные результаты

Далее везде рассмотрена конфигурация  $a = b = c, \varepsilon = 1$ . Дисперсия для МФК в виде бесконечно длинных параллельно расположенных 2-D периодических проволочек получена в работах [29,30]. На основе решений



**Рис. 2.** Аппроксимация дисперсии 2-D-P по результатам решения ДУ ( $a = b = 1$ ,  $k_z = 0$ ,  $r/a = 0.001$ ,  $\varepsilon = 1$ ).

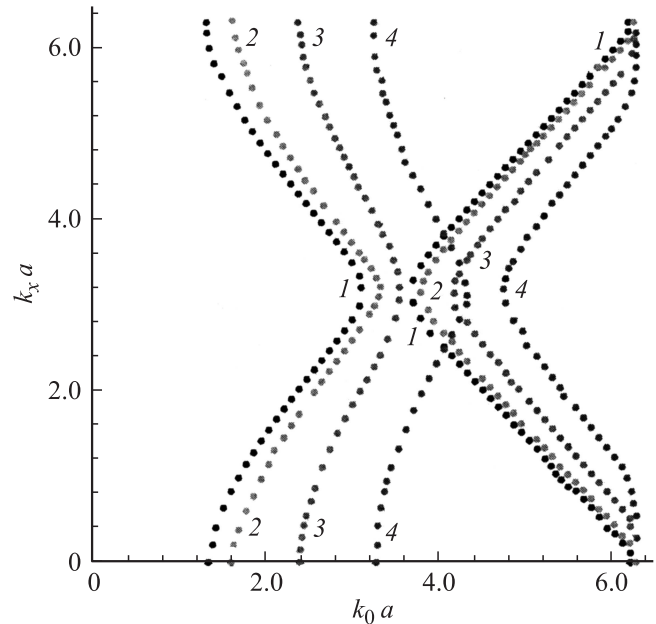


**Рис. 3.** Компонента  $\varepsilon_{zz}$  в зависимости от волновых векторов в основном секторе первой зоны при  $k_z = 0$  (результаты соответствуют рис. 2).

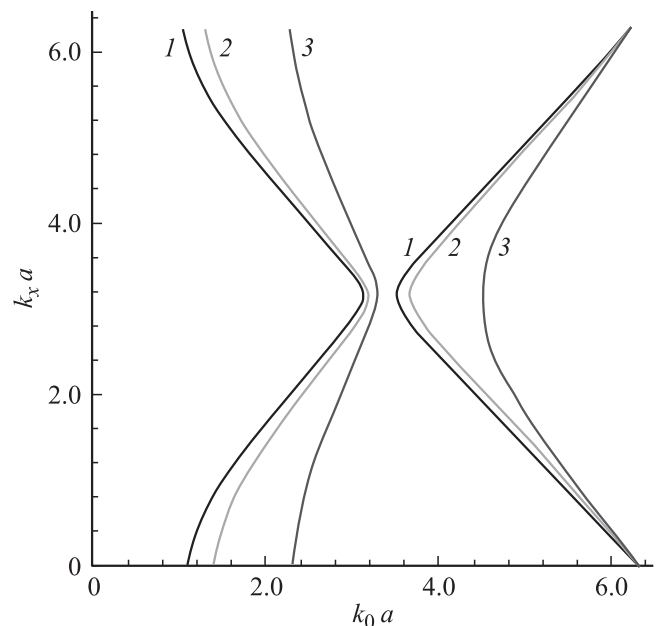
ДУ выполнены аппроксимации двумерных поверхностей  $k_0 = f(k_x, k_y)$  при  $k_z = 0$ . Для случая  $a = b = 1$ ,  $r/a = 0.001$ ,  $\varepsilon = 1$  и участка первой ветви дисперсионной поверхности с прямой волной такая аппроксимация представлена на рис. 2. На рис. 3 приведены расчеты по формуле (14) для этого же случая, когда  $k_0$  определяется поверхностью рис. 2. Видно, что в области малых волновых векторов  $\varepsilon_{zz}$  существенно меньше единицы, и волна быстрая. Это подтверждает и дисперсионная характеристика, поскольку для малых  $|\mathbf{k}|$  волновой вектор всегда имеет конечное значение. С увеличением  $|\mathbf{k}|$  волна становится медленной с небольшим замедлением  $n\sqrt{\varepsilon_{zz}} \sim 1.2$ , что соответствует компоненте проницаемости немного более единицы. Естественно, в силу периодичности в пространстве волновых векторов такая же периодичность имеет место для ТЭФД. В запрещенной зоне компоненты  $k_x$  и  $k_y$  мнимые, поэтому знак перед суммой в формуле (14) меняется и  $\varepsilon_{zz}$  становится отрицательной.

На рис. 4 приведены результаты зависимости дисперсии от величины  $k_z$ . Зависимость дисперсии от толщины проволочек дана на рис. 5. Результаты для дисперсии (зонная структура) МФК с проволочками

конечной длины даны на рис. 6. Эта задача уже требует больших вычислительных ресурсов, особенно если  $l \sim c$  (для чего необходим учет большого числа гармоник в (16)), и приводит к определителю высокого порядка. В представленных результатах с  $l/a = 0.6$  достаточно учесть 1–3 гармоники, причем разница составляет ме-

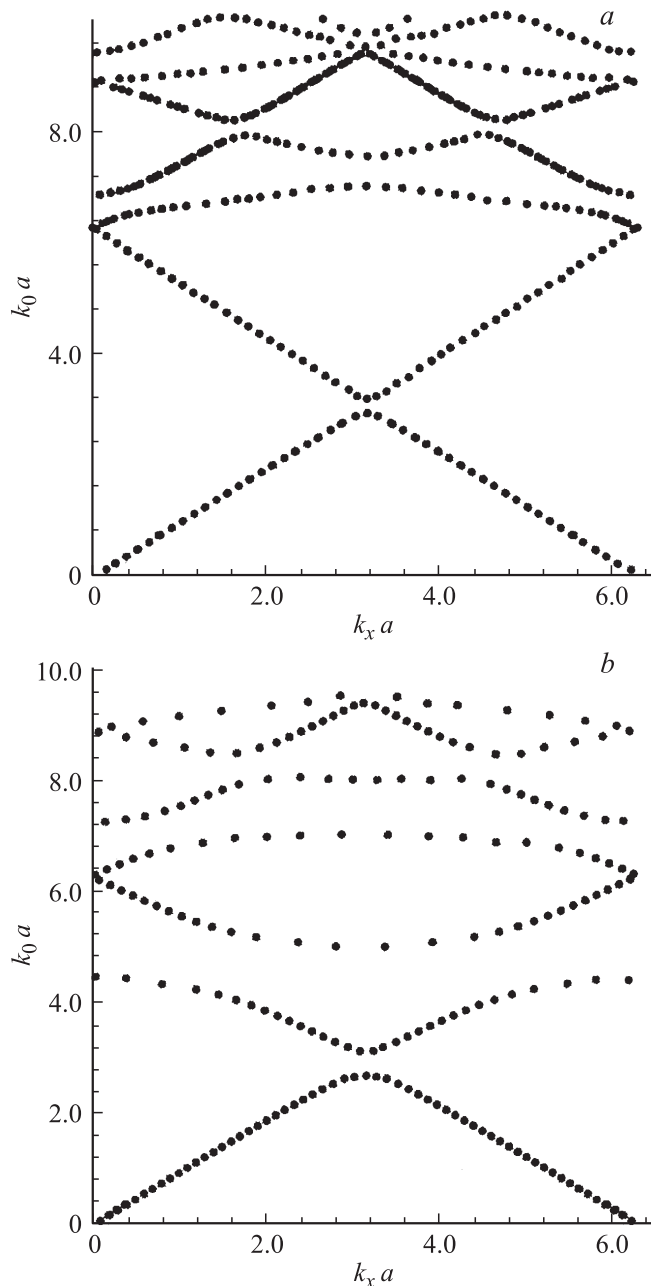


**Рис. 4.** Зависимость нормированного волнового числа от нормированной частоты для 2-D-P МФК с решеткой  $a = b$  для  $r/a = 0.005$ ,  $k_y = 0$  и различных значений  $k_z a$ : 0 (кривая 1), 1 (2), 2 (3), 3 (4).

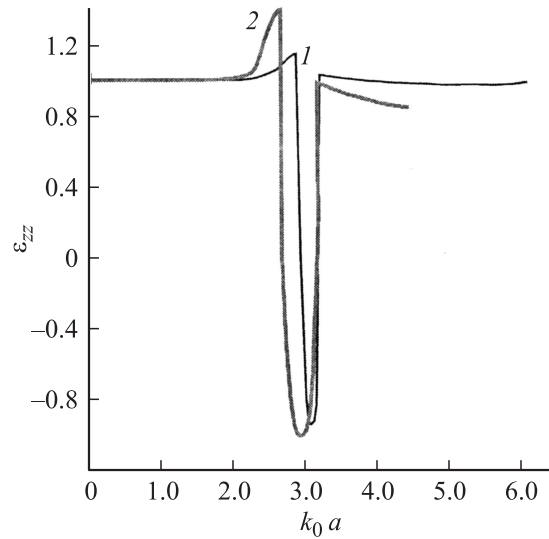


**Рис. 5.** Зависимость нормированного волнового числа от нормированной частоты для 2-D-P МФК с решеткой  $a = b$  для  $k_y = k_z = 0$  и различных значениях  $r/a$ : 0.001 (кривая 1), 0.005 (2), 0.05 (3).

нее 1%. Сильное усечение трехмерных рядов вносит погрешности, которые могут приводить к пропуску корней или к их существенному изменению. Численное исследование показало, что эти эффекты пропадают при  $N = M = K > 20$  (число членов обоих знаков в суммах). Вычисления выполнены при  $N = M = K = 30$ , т.е. учтены  $61^3 = 226\,981$  плоские волны. Вычисление с  $N = M = K = 10$  увеличивает скорость более чем в 200 раз, при этом точность определения корней ухудшается на 2–3%. Заметим, что усечение рядов вносит эффект радиационных потерь, поскольку из конечной структуры возможно излучение. Наличие полюсов, ино-



**Рис. 6.** Зонная структура 3-D-P проволочного метаматериала при  $k_z = k_y = 0$ ,  $l/a = 0.06$  для  $r/a = 0.01$  (a) и  $r/a = 0.06$  (b).



**Рис. 7.** Значение компоненты  $\epsilon_{zz}$  в зависимости от нормированной частоты при движении по нижней дисперсионной ветви с переходом при  $k_x a = \pi$ ,  $k_y = 0$  на следующую прямую дисперсионную ветвь для рис. 6: a — кривая 1, b — кривая 2.

гда очень близко подходящих к корням, осложняет поиск последних. Была разработана процедура сглаживания полюсов и обхождения ложных корней.

Для первой дисперсионной ветви рис. 6 также была рассчитана компонента  $\epsilon_{zz}$  рис. 7 в зависимости от частоты. Она изменяется от 1 при  $k_x = k_y = 0$  (волна распространяется со скоростью света) до значения несколько больше единицы на граничной частоте при  $k_x a = \pi$ ,  $k_y = 0$  (или  $k_y a = \pi$ ,  $k_x = 0$ ). В зоне bandgap она становится отрицательной, а при переходе на следующую прямую ветвь становится меньше единицы (быстрая волна).

### Заключение

Методом интегральных уравнений, сформулированных на основе ФГ периодически расположенных источников, получены электрофизические параметры простейших проволочных металлических фотонных кристаллов в виде проволочек с бесконечной и конечной длинами. Рассмотрен случай тонких идеально проводящих линейных неконтактирующих проволочек. Применен один из методов гомогенизации, использующий вычисление средних по ячейке мультипольных моментов и усреднение полей. Результаты оценки плазменной частоты в формуле (15) находятся в хорошем соответствии с ранее опубликованными моделями. Они также соответствуют замедлению волн, определяемому по дисперсионным кривым (поверхностям). Случай  $l \approx c$  требует учета большего числа гармоник тока в (16), что имитирует емкости соответствующих зазоров. На высоких частотах такой МФК с конечными проволочками подобен кристаллу с бесконечными  $l$ , дисперсионная кривая

изгибается в высокочастотную область, однако низкочастотной отсечки нет. Использовать данный алгоритм для предельного случая проволок с бесконечно малым зазором (т.е. для перехода к первой из рассмотренных задач) невозможно. Проще взять бо́льшие  $l$  и  $c$ . Метод может быть распространен на любые конфигурации МФК, включая кольцевые, спиральные и тому подобные структуры, а также на диэлектрические и магнитные ФК. Учет потерь приведет к эффективным комплексным проницаемостям. Однако это не означает наличие проводимости: указанная диссипация связана со сдвигом фаз между током поляризации и полем. В физических структурах МФК с нанопроволоками проводимость существовать должна, а ее механизм связан с квантовыми эффектами и может, например, иметь скачковый характер.

## Список литературы

- [1] Pendry J.B., Holden A.J., Stewart W.J., Youngs I. // Phys. Rev. Lett. 1996. Vol. 76. P. 4773–4776.
- [2] Sievenpiper D.F., Sickmiller M.E., Yablonovitch E. // Phys. Rev. Lett. 1996. Vol. 76. P. 2480–2483.
- [3] Pendry J.B., Holden A.J., Robbins D.J., Stewart W.J. // J. Phys. Condens. Matter. 1998. Vol. 10. P. 7785–4809.
- [4] Sievenpiper D.F., Yablonovitch E., Winn J.N., Fan S., Villeneuve P.R., Joannopoulos J.D. // Phys. Rev. Lett. 1998. Vol. 80. P. 2819–2832.
- [5] Pendry J.B., Holden A.J., Robbins D.J., Stewart W.J. // IEEE Trans. 1999. Vol. Mtt-47. N 11. P. 2075–2084.
- [6] Smith D.R., Padilla W.J., Vier D.C., Nemat-Nasser S.C., Schultz S. // Phys. Rev. Lett. 2000. Col. 84. P. 4184–4187.
- [7] Smith D.R., Knoll N. // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 85. P. 2933–2936.
- [8] Shelby R., Smith D., Schultz S. // Science. 2001. Vol. 292. P. 77–79.
- [9] Pokrovsky A.L., Efros A.L. // Phys. Rev. Lett. 2002. Vol. 89. P. 093 901 (1–4).
- [10] Luo C., Johnson S.G., Joannopoulos J.D., Pendry J.B. // Phys. Rev. B. 2002. Vol. 65. P. 201 104 (1–4).
- [11] Maslovski S.I., Tretyakov S.A., Belov P.A. // Microwave Opt. Technol. Lett. 2002. Vol. 35. 47–51.
- [12] Belov P.A., Marque R., Maslovski S.I., Nefedov I.S., Silveirinha M., Simovski R., Tretyakov S.A. // Phys. Rev. B 2003.67. P. 113 103 (1–4).
- [13] Luo C., Johnson S.G., Joannopoulos J.D., Pendry J.D. // Phys. Rev. B. 2003. Vol. 68. P. 045 115 (1–15).
- [14] Pokrovsky A.L. // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 69. P. 195 108 (1–7).
- [15] Simovski C.R., Belov P.A. // 2004. Vol. 70. P. 046 616 (1–8).
- [16] Smith D.R., Pendry J.B., Wiltshire M.C.K. // Science. 2004. Vol. 305. P. 788–782.
- [17] Shen J.T., Catrysse P.B., Fan S. // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 94. P. 197 401 (1–4).
- [18] Silveirinha M.G., Fernandes C.A. // IEEE Trans. 2005. Vol. MTT-53. P. 1418–1430.
- [19] Belov P.A., Simovski C.R., Ikonen P. // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 71. P. 193 105 (1–4).
- [20] Nefedov I.S., Viitanen A.J., Tretyakov S.A. // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 72. P. 245 113 (1–9).
- [21] Nefedov I.S., Viitanen A.J., Tretyakov S.A. // Proc. of Joint 9<sup>th</sup> Intern. Conf. on Electromagnetic Structures Conference. Torino. Italy, 2005. P. 571–574.
- [22] Nefedov I.S., Simovski C.R., Belov P.A., Viitanen A.J., Tretyakov S.A. // EPEL Latisis Symposium. 2005. Lausanne. 2005. P. 117.
- [23] Belov P.A., Simovski C.R., Nefedov I.S., Tretyakov S.A. // Proc. of the PIERS 2005. Hangzhou, China, 2005. P. hbox285–289.
- [24] Nefedov I.S., Viitanen A.J., Tretyakov S.A. // Phys. Rev. E. 2005. Vol. 71. P. 046 612 (1–10).
- [25] Belov P.A., Hao Y., Sudhakaran S. // Phys. Rev. B-73. 2006. P. 033 108 (1–4).
- [26] Zhao Y., Belov P.A., Hao Y. // IEEE Trans. 2007. Vol. AP-55. N 6. P. hbox1506–1513.
- [27] Silveirinha M.G., Fernandes C.A., Costa J.R. // Phys. Rev. B. 2008. Vol. 78. P. hbox195 121 (1–7).
- [28] Silveirinha M.G., Fernandes C.A., Costa J.R. // Proc. of the 3<sup>rd</sup> International Congress on Advanced Electromagnetic Materials in Microwaves and Optics (Metamorphose-VI). 12009. P. 175–177.
- [29] Давидович М.В. // Известия Вузов. Радиофизика. 2006. Т. 49. № 2. С. 150–163.
- [30] Давидович М.В. // Фотонные кристаллы: функции Грина, интегродифференциальные уравнения, результаты. Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, 2005. 40 с.
- [31] Davodovich M.V., Stephuk J.V. // Modeling in Applied Electromagnetics and Electronics. Saratov University Press, 2007. Vol. 8. P. 67–75.
- [32] Davodovich M.V., Stephuk J.V. // Proc. of the 12<sup>th</sup> International Conference (ММЕТ'2008). Odessa, Ukraine, 2008. P. 527–529.
- [33] Davodovich M.V., Stephuk J.V. // 2008 International Workshop on Metamaterials, Meta08. Nanjing, China. 2008. P. 251–254.
- [34] Давидович М.В. Проблемы оптической физики. Саратов: Новый ветер, 2008ю С. 99–106.
- [35] Давидович М.В., Савин А.Н., Стефюк Ю.В. // Излучение и рассеяние электромагнитных волн ИРЭМВ-2009. Труды конференции. Таганрог: ТРТУ, 2009. С. 370–375.
- [36] Марков Г.Т., Чаплин А.Ф. Возбуждение электромагнитных волн. М.: Радио и связь, 1983. 296 с.