

01;07

Расчет зонных диаграмм металлических проволочных фотонных кристаллов

© М.В. Давидович, П.А. Шиловский

Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского,
413026 Саратов, Россия
e-mail: davidovichmv@info.sgu.ru

(Поступило в Редакцию 25 января 2012 г.)

Методом интегральных уравнений и периодических функций Грина рассчитаны зонные структуры трехмерных металлических фотонных кристаллов в виде тонких проволочек с учетом до нескольких десятков учитываемых гармоник тока и нескольких тысяч пространственных гармоник. Исследованы сходимость алгоритма, точность результатов и зависимость ширины зоны непропускания.

Введение

Металлические фотонные кристаллы (МФК) исследуются в последние три десятилетия из-за наличия у них ряда специфических (необычных) для естественных сред свойств, возможностью получения на их основе искусственных сред (метаматериалов) с магнитными свойствами, с отрицательной диэлектрической проницаемостью или обеими проницаемостями, а также в связи с построением на их основе фильтрующих, волноведущих, фокусирующих, согласующих и ряда других устройств [1–28]. К таким 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 постоянной диэлектрической проницаемостью ϵ .

Из объектов, исследованных в большом числе работ по МФК, здесь взяты простейшие: линейные непересекающиеся конечные проволочные включения рис. 1. Большинство исследований по МФК базируется на

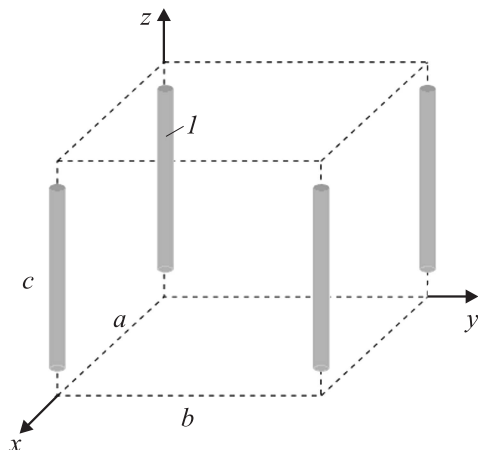


Рис. 1. Металлический фотонный кристалл в виде трехмерно-повторяющихся ячеек периодичности с включениями из тонких металлических стержней (проволочек).

различных приближенных моделях, или же для этого используются различные пакеты прикладных программ, построенные обычно на методе сеток или на методе конечных элементов. В настоящей работе был применен подход, базирующийся на методе функций Грина (ФГ) и методе интегродифференциальных уравнений (ИДУ) или интегральных уравнений (ИУ) [29,30] в приближении тонких проволочек, развитый в [31–36].

В исследовании МФК важную роль играет расчет зонной структуры (диаграммы Бриллюэна), позволяющей определить наличие и вид запрещенных зон и соответственно получить электрофизические параметры [29–38]. Расчет таких диаграмм сопряжен с большим количеством вычислений, поэтому актуальным становится подбор оптимальных значений для параметров, существенно влияющих на скорость вычислений: количество учитываемых гармоник тока и количество пространственных гармоник, учитываемых в функции Грина. Цель настоящей работы — расчет зонных диаграмм МФК, определение точности и оптимальных параметров расчета.

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 ϵ (рис. 1). Проволочки считаем тонкими: $r \ll l, r \ll \min(a, b, c)$. 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 l в нулевой ячейке можно записать в виде

$$J = z_0 \delta(x) \delta(y) \sum_{s=1}^{N_s} I_s \cos(k_s z). \quad (1)$$

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, а 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

$$E = \frac{\text{grad}(\text{div}) + k_0^2 \varepsilon}{i\omega \varepsilon_0 \varepsilon} z_0 A_z \quad (2)$$

Далее нам 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

$$E_z = \frac{2}{i\omega \varepsilon_0 \varepsilon ab} \sum_{s=1}^{N_s} (-1)^s k_s I_s \sum_{m,n,k=-\infty}^{\infty} \cos\left(\frac{k_z k l}{2}\right) \times \frac{(k_0^2 \varepsilon - k_{zk}^2) \exp(-i[k_{xm}x + k_{yn}y + k_z k z])}{(k_{zk}^2 - k_s^2)[k_{xm}^2 + k_{yn}^2 + k_{zk}^2 - k_0^2 \varepsilon]}. \quad (3)$$

Компонента (3) должна обратиться в нуль на поверхности проволочки. Применяя метод Галеркина, имеем

$$\int_{-l}^l E_z(x, y, z) \cos(k_s z) dz = 0. \quad (4)$$

В (4) точка (x, y) принадлежит окружности $x^2 + y^2 = r^2$. Можно взять произвольную точку окружности или наложить граничные условия в четырех симметричных точках [37,38]. Однако целесообразно усреднить 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]

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

При этом вместо экспонент в (3) получим

$$\alpha_{mn}(k_x, k_y) = J_0\left(r \sqrt{k_{xm}^2 + k_{ym}^2}\right).$$

Данное усреднение позволяет существенно увеличить скорость сходимости рядов из (3), что отображено на рис. 2.

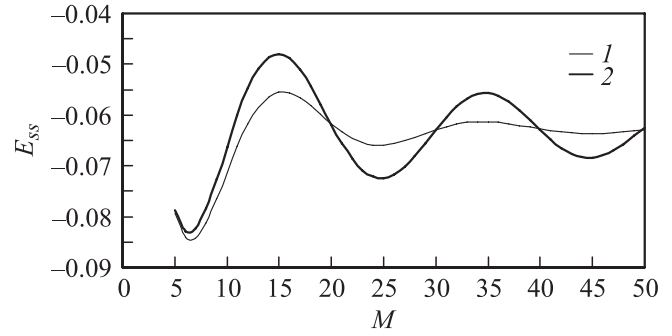


Рис. 2. Зависимость значения матричного элемента от количества учитываемых плоских волн в ФГ при усреднении по всем точкам окружности 1 и по 4 точкам окружности (2).

Соотношения (3) и (4) приводят к системе линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), определитель которой Δ должен быть равен нулю. Собственно

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

и есть искомое ДУ. Теперь матричные элементы, согласно (4), можно записать так

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

где $(M+1)^3$ — количество учитываемых плоских волн (пространственных гармоник).

Видно, что особенность при $k_{zk} = \pm k_s$ устранимая. Однако когда квадратная скобка в знаменателе (3) 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. 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. Далее получим искомые зонные диаграммы для точек $\Gamma(0, 0, 0)$, $M = (\pi/a, 0, 0)$, $X = (\pi/a, \pi/b, 0)$. При этом считаем $k_z = 0$, т.е. точку $R = (\pi/a, \pi/b, \pi/c)$ не рассматриваем.

2. Подбор оптимальных параметров расчета зонной диаграммы МФК

Рассмотрим структуру МФК с $a = b = c$, $\varepsilon = 1$, $l/a = 0.7$, $r/a = 0.05$. Для простоты вычислений возьмем одну гармонику ($N = 1$) и 9261 плоскую волну

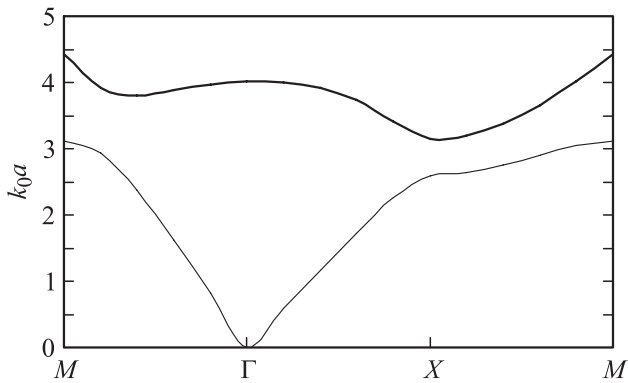


Рис. 3. Зонная диаграмма Бриллюэна для $a = b = c$, $\epsilon = 1$, $l/a = 0.7$, $r/a = 0.05$ при $N = 1$, $M = 10$.

в функции Грина ($M = 10$). Результирующая зонная диаграмма расположена на рис. 3. Заметим, что первую зону непропускания (bandgap) образует первая ветка в точке M (3.1075) и вторая ветка в точке X (3.14125).

Рассмотрим, как влияет изменение параметров N и M на точность получаемых результатов. Соответствующие результаты даны в табл. 1, где приведены значения, полученные для точки M . Ячейки таблицы со знаком „–“ означают невозможность правильного расчета при данных параметрах.

С увеличением количества гармоник N нужно увеличивать количество плоских волн (M), чтобы обеспечить точность. Для наглядности приведена табл. 2 с относительными значениями величины частотного зазора к конфигурации $N = 1$, $M = 10$.

В максимальной приведенной конфигурации зона непропускания увеличивается в 9.86 раз. Число же плоских волн существенно влияет на точность вычислений только при переходе от 10 к 20 для $N \leq 7$. Аналогичные вычисления для точки X показали, что ее значение слабо меняется при увеличении N и M . Таким образом, основной вклад в величину зоны непропускания вносит точка M .

Таблица 1. Сводные нормированные значения точки M для различных чисел учитываемых пространственных гармоник и гармоник тока

| N | M | | | | |
|-----|--------|--------|--------|--------|--------|
| | 10 | 20 | 30 | 40 | 50 |
| 1 | 3.1075 | 3.0825 | 3.0825 | 3.0825 | 3.0825 |
| 3 | 2.9925 | 2.9525 | 2.9575 | 2.9575 | 2.9575 |
| 5 | 2.9325 | 2.9025 | 2.9075 | 2.9075 | 2.9125 |
| 7 | 2.9225 | 2.8675 | 2.8775 | 2.8775 | 2.8775 |
| 9 | – | 2.8375 | 2.8525 | 2.8525 | 2.8525 |
| 11 | – | – | 2.8325 | 2.8325 | 2.8375 |
| 13 | – | – | 2.8125 | 2.8175 | 2.8225 |
| 15 | – | – | – | 2.8075 | 2.8125 |
| 17 | – | – | – | 2.7975 | 2.8025 |
| 19 | – | – | – | 2.7875 | 2.7925 |
| 21 | – | – | – | 2.7825 | 2.7925 |

Таблица 2. Нормированные разности частотного зазора первой и второй веток в точке M к значению $N = 1$, $M = 10$ для различных N и M

| N | M | | | | |
|-----|------|------|------|-------|------|
| | 10 | 20 | 30 | 40 | 50 |
| 1 | 1 | 2.71 | 2.71 | 2.71 | 2.71 |
| 3 | 4.29 | 5.43 | 5.29 | 5.29 | 5.29 |
| 5 | 6.00 | 6.86 | 6.71 | 6.71 | 6.71 |
| 7 | 6.29 | 7.86 | 7.57 | 7.57 | 7.57 |
| 9 | – | 8.71 | 8.14 | 8.14 | 8.14 |
| 11 | – | – | 8.86 | 8.86 | 8.71 |
| 13 | – | – | 9.42 | 9.29 | 9.14 |
| 15 | – | – | – | 9.57 | 9.42 |
| 17 | – | – | – | 9.86 | 9.71 |
| 19 | – | – | – | 10.14 | 9.86 |
| 21 | – | – | – | 10.29 | 9.86 |

Рассмотрим сводную диаграмму изменения точности результата и скорости вычисления матрицы из (5), представленную на рис. 4. Число плоских волн было взято оптимальным для каждого случая, что соответствует M , равному 20 для N от 1 до 7.30 — от 9 до 11, 40 — от 13 до 15, 50 — от 17 до 21.

Из диаграммы видно, что изменение точности вычислений, затухая, стабилизируется при увеличении N .

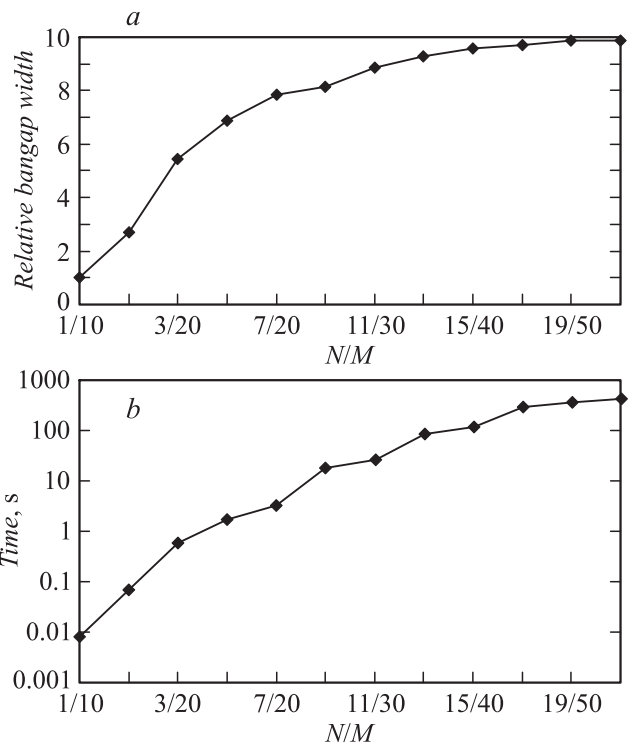


Рис. 4. Зависимости значений относительной величины зоны непропускания от количества учитываемых гармоник тока (a) и времени вычисления матрицы от отношения числа гармоник тока N к числу пространственных гармоник M по каждой из координат (b).

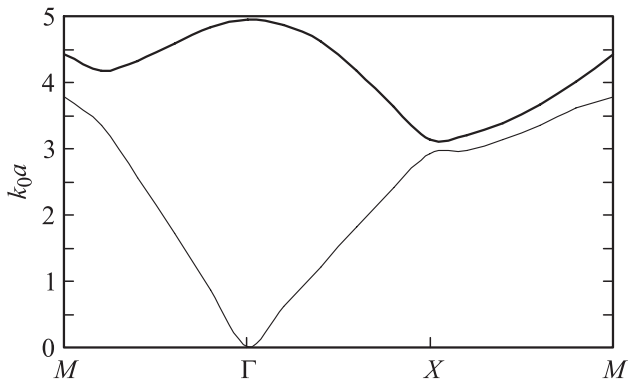


Рис. 5. Зонная диаграмма Бриллюэна для $a = b = c$, $\varepsilon = 1$, $a/a = 0.5$, $r/a = 0.05$ при $N = 7$, $M = 20$.

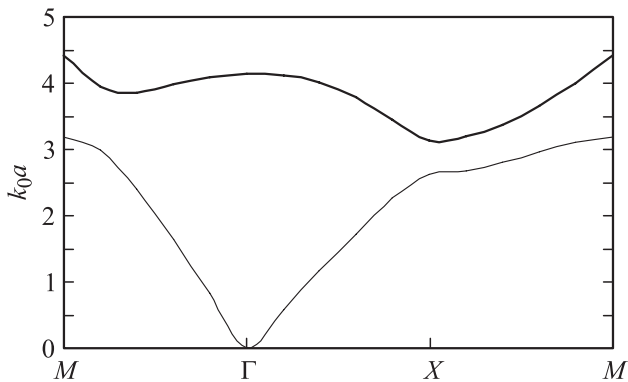


Рис. 6. Зонная диаграмма Бриллюэна для $a = b = c$, $\varepsilon = 1$, $l/a = 0.6$, $r/a = 0.05$ при $N = 7$, $M = 20$.

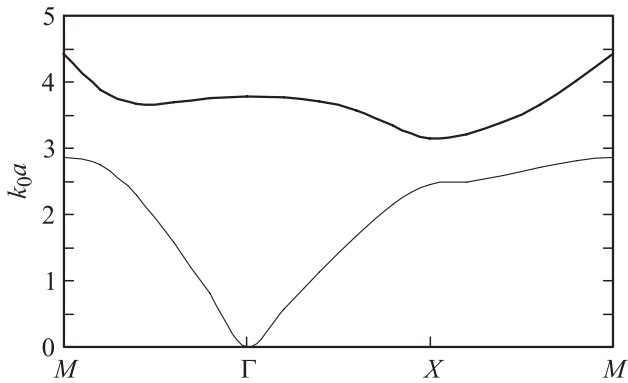


Рис. 7. Зонная диаграмма Бриллюэна для $a = b = c$, $\varepsilon = 1$, $l/a = 0.7$, $r/a = 0.05$ при $N = 7$, $M = 20$.

Для расчета зонных диаграмм для конфигураций МФК с конечными непересекающимися проволочками длины, меньше либо равной $l/a = 0.7$, разумно брать количество гармоник, равное $N = 7$ и $M = 20$, что соответствует $41^3 = 68921$ плоской волне. В результате получаем точность около 80% от максимального результата и в то же время приемлемое время вычислений.

Заметим, что при дальнейшем увеличении длины проволочки придется увеличивать число гармоник то-

ка, что обусловлено емкостными связями по торцам проволочек. Эти связи увеличивают эффективную длину проволочек и влекут сложную некосинусоидальную зависимость тока.

3. Численные результаты

Для расчета была взята структура МФК с $a = b = c$, $\varepsilon = 1$. Были рассмотрены случаи с $l/a = 0.5$, $l/a = 0.6$ и $l/a = 0.7$. Радиус во всех случаях равен $r/a = 0.05$. Как видно из разд. 2, оптимальным с точки зрения достоверности получаемых результатов и затрачиваемой на это скорости вычислений для данных длин проволочки является случай $N = 7$, $M = 20$. Для получения зонной структуры был разработан и применен алгоритм с распараллеливанием процессов, реализованный с использованием технологии MPI на языке программирования Python с C-расширениями.

По результатам на рис. 5–7 видно, что первый и второй случаи не обладают полными запрещенными зонами. Лишь в третьем случае появляется зона непропускания.

4. Заключение

Методом интегральных уравнений, сформулированных на основе ФГ периодически расположенных источников, получены зонные диаграммы металлических фотонных кристаллов в виде проволочек с конечной длиной и проведен подбор оптимальных параметров вычислений. Результаты показали, что при наличии проволочек длины 0.7 и меньше разумно использовать 7 гармоник в разложении тока и 68921 плоскую волну. Также было выяснено, что конфигурация с проволочками $l/a = 0.7$ обладает полной запрещенной зоной между первой и второй дисперсионными ветками.

На основе полученных результатов можно определить тензорную эффективную диэлектрическую проницаемость МФК. Из приведенных диаграмм видно, что при движении по первой ветке до точки bandgap ε_{zz} изменяется от 1 до 1.10 (точка M рис. 7) с нормальной дисперсией ε_{zz} (волна медленная). В зоне bandgap корни k_x , k_y мнимые [29], при этом максимальное затухание соответствует середине зоны. Для точки M оценка дает $k_x a = -j0.7$, что соответствует $\varepsilon_{zz} = -0.22$. Далее ε_{zz} растет и при выходе из зоны bandgap на второй ветви становится меньше единицы и положительной (волна быстрая). Следует отметить, что в силу пространственной дисперсии компонента ε_{zz} есть функция $\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{zz}(k_0, \mathbf{k})$, т.е. ее значение зависит от частоты и точки дисперсионной ветви (поверхности). Поэтому свойства конечного МФК зависят от расположения и ориентации источника плоских волн. МФК с проволочками вдоль каждой из осей координат представляет собой трехосный кристалл с диагональным тензором $\hat{\varepsilon}$. Интересен случай одинаковых проволочек в кубической ячейке, когда МФК изотропен и обладает

скалярной проницаемостью $\varepsilon(\omega)$, которая в некоторой полосе может быть отрицательной. Расчет таких структур требует больших вычислительных затрат, поскольку при длине волны $\lambda \gg a$ для получения отрицательных $\varepsilon(\omega)$ необходимы большие значения $r/a \sim 0.5$ и $l/a > 0.5$, что потребует решения поверхностных ИУ. Даже в приближении тонких проволочек размерность алгоритма возрастет более чем в 3 раза, так как влияние торцевых токов требует увеличения числа базисных функций.

Приведенные результаты применимы в СВЧ-диапазоне. При больших частотах в МФК существенны потери, что разрушает зонную структуру и смыкает прямые и обратные ветви, а вектор \mathbf{k} становится комплексным [29].

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. Vol. 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. Vol. 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 9th Intern. Conf. 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 Latsis 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. 285-289.
- [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. 1506-1513.
- [27] Silveirinha M.G., Fernandes C.A., Costa J.R. // Phys. Rev. B. 2008. Vol. 78. P. 195 121 (1-7).
- [28] Silveirinha M.G., Fernandes C.A., Costa J.R. // Proc. of the 3rd 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 СарГУ, 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 12th International Conference (MMET'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, 2008. С. 99-106.
- [35] Давидович М.В., Савин А.Н., Стефюк Ю.В. // Излучение и рассеяние электромагнитных волн ИРЭМВ-2009. Тр. конф. Таганрог: ТРТУ, 2009. С. 370-375.
- [36] Давидович М.В. // Материалы XIII зимней школы по СВЧ электронике и радиофизике. Тезисы лекций и докладов. Саратов. Из-во ГосУНЦ-„Колледж“, 2006. P. 80.
- [37] Давидович М.В., Стефюк Ю.В., Шиловский П.А., Явчуновская С.В. // Излучение и рассеяние электромагнитных волн ИРЭМВ-2011. Тр. конф. Таганрог: ТРТУ, 2011. С. 246-250.
- [38] Давидович М.В., Стефюк Ю.В., Шиловский П.А. // ЖТФ. 2012. Т. 82. Вып. 3. С. 7-14.