

На правах рукописи



ШИЛОВСКИЙ ПАВЕЛ АЛЕКСАНДРОВИЧ

**ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И МАТЕМАТИЧЕСКИЕ
МОДЕЛИ ГИПЕРБОЛИЧЕСКИХ МЕТАМАТЕРИАЛОВ**

01.04.03 – Радиофизика

05.13.18 – Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Саратов – 2014

Общая характеристика работы

Актуальность. Изучение электродинамических свойств гиперболических метаматериалов представляет собой актуальное направление в современной радиофизике. Гиперболические метаматериалы (ГМ) – искусственные диэлектрики, у которых компоненты тензора эффективной диэлектрической (или магнитной) проницаемости, определяемые в двух взаимно перпендикулярных плоскостях, имеют противоположные знаки. Данные материалы обладают анизотропией и могут поглощать или пропускать электромагнитные волны в зависимости от направления их распространения. Ввиду особого вида поверхности изочастот, имеющей форму гиперболоида, в таких средах возможно распространение волн с большими значениями компонент волнового вектора, что приводит к высокой плотности фотонных состояний и большим значениям фактора Парселла. Наличие данных свойств делает перспективным применение ГМ в элементной базе для широкого класса электрофизических устройств от сверхвысокочастотного (СВЧ) до оптического диапазона включительно.

Метаматериалы – это искусственно созданные среды, электрофизические свойства которых выходят за пределы свойств образующих их компонентов. Такие материалы, например, в определенных частотных диапазонах могут обладать отрицательными значениями компонент тензора эффективной диэлектрической или магнитной проницаемости как по отдельности, так и одновременно. При диссипации следует говорить об отрицательности вещественных частей этих компонент. Первые работы по метаматериалам относятся к 40-м годам прошлого века (Л. Левин, Л.И. Мандельштам), где были детально рассмотрены эффект распространения обратной волны и необычный закон преломления при падении волны из свободного пространства в среду, в которой групповая и фазовая скорости направлены в противоположные стороны. В таком случае преломленный луч отклоняется в противоположную сторону от нормали к поверхности, в отличие от случая совпадения направлений обеих скоростей. В 50-х годах было теоретически рассмотрено и доказано, что волны с противоположно направленными фазовой и групповой скоростью могут возникать в средах с одновременно отрицательными диэлектрической и магнитной проницаемостями (Д.В. Сивухин, В.Е. Пафомов, Р.А. Силин). В 1967 году В.Г. Веселаго выдвинул гипотезу о том, что в таких материалах показатель преломления имеет отрицательный знак, обосновал возможность их существования и описал их электродинамику. Однако широкое распространение исследования метаматериалов приобрели с начала 90-х годов после ряда работ (Э. Яблонович, Д. Джоаннопоулос, Д. Пендри и др.), в которых были описаны результаты изучения практических образцов материалов с отрицательной диэлектрической или магнитной проницаемостью. В 2000 году исследовательская группа Д.Р. Смита получила материал с отрицательной рефракцией в диапазоне 4.2–4.6 ГГц.

Одним из видов метаматериалов являются фотонные кристаллы (ФК) – среды с периодически внедренными в основу объектами различной природы: металлическими, диэлектрическими, полостными и другими. Частный случай ФК – структуры с периодически меняющимся в пространстве показателем преломления. В зависимости от вида структуры различают одномерно-периодические, двумерно-периодические и трехмерно-периодические ФК. Указанная периодичность обуславливает возникновение запрещенных зон для энергий фотонов – области частот, в пределах которой электромагнитные волны подавляются во всех

(полная запрещенная зона) или некоторых (неполная запрещенная зона) направлениях. Наличие потерь, конечность структур, квазипериодичность включений приводят к искажению зонной структуры, и соответствующие материалы следует рассматривать как многополосовые фильтрующие среды. Для одноосных ФК характерна анизотропия и ярко выраженная пространственная дисперсия. При этом в запрещенных зонах наблюдаются отрицательные значения лишь некоторых компонент тензоров диэлектрической или магнитной проницаемостей. Таким образом, в частотных диапазонах, соответствующих запрещенным зонам, такие ФК ведут себя как гиперболические метаматериалы.

К настоящему времени имеется большое число публикаций по исследованию электродинамических свойств метаматериалов (Д. Пендри, К. Сакода, И.В. Линделл, К.Р. Симовский, С.А. Третьяков, И.С. Нефедов, С.А. Никитов, Е.А. Виногорадов, П. Белов, С.Е. Банков и др.). Тем не менее в известной литературе остались мало изученными металлические тонкопроволочные ФК и металлодиэлектрические плоскостойкие среды. Данные структуры перспективны для создания на их основе гиперболических метаматериалов с электрическими или магнитными свойствами. Также недостаточно исследованы ФК с включениями в виде прямоугольных параллелепипедов.

В диссертации рассматриваются следующие виды ФК: двумерно-периодические с включениями в виде идеальных и неидеальных металлических бесконечно протяженных тонких проволочек, трехмерно-периодические с включениями в виде идеальных металлических тонкопроволочных стержней или колец, одномерные периодические и квазипериодические из слоев металла и диэлектрика, трехмерно-периодические с включениями в виде металлических или диэлектрических прямоугольных параллелепипедов (кубов). Анализируются также некоторые замедляющие структуры, которые можно рассматривать как одномерные метаматериалы.

Технологические трудности при изготовлении метаматериалов делают математическое моделирование главным методом исследования в сравнении со сложным и дорогим экспериментом. В работе используется метод интегральных уравнений (ИУ), основанный на применении периодических функций Грина (ФГ). Такие ФГ, являющиеся функциями периодически расположенных и сфазированных точечных источников, позволяют свести задачу к решению ИУ для включений в одной ячейке периодичности, что делает метод интегральных уравнений весьма универсальным и удобным, например, по сравнению с методом плоских волн. Метод ИУ применим для любых включений: металлических, полупроводниковых, диэлектрических, включая полостные включения в диэлектрической основе. При этом сами включения могут описываться макроскопическими диэлектрическими и магнитными проницаемостями, которые в общем случае могут иметь тензорный характер. Продвижение в область инфракрасных и оптических частот требует учета потерь в металлах при расчете дисперсии сред с металлическими включениями. В этом случае возможно применение итерационных методов решения ИУ, позволяющих исследовать дисперсию на конкретной ветви с комплексными волновыми векторами. В диссертации такие методы используются для анализа двумерно-периодических металлических проволочных ФК.

Строгий анализ метаматериалов, связанный с нахождением действительных и комплексных законов дисперсии, а также определением эффективных мате-

риальных параметров, требует решения краевых задач для уравнений электродинамики в двумерных и трехмерных бесконечно протяженных областях. Следовательно, необходимы привлечение и разработка специальных методов численного моделирования задач математической физики в неограниченных пространственных областях, в частности, методов, основанных на использовании интегральных уравнений и функций Грина и позволяющих свести моделирование дисперсионных характеристик к численному решению дисперсионного уравнения (ДУ). В свою очередь, корни ДУ требуется находить в достаточно широком частотном диапазоне (теоретически – на полубесконечной вещественной оси частот). Для каждого фиксированного значения характерной частоты вычисление значения левой части ДУ аналогично численному решению линейных интегральных уравнений, к которым сводится краевая задача для векторных уравнений Гельмгольца в неограниченной двумерной или трехмерной пространственной области. Таким образом, данный класс математических моделей и методов их численного анализа обладает значительным ресурсом параллелизма на двух уровнях – с одной стороны, поиск корней дисперсионного уравнения в разных частотных диапазонах может выполняться независимо, то есть параллельно, а с другой стороны, может быть распараллелено решение линейных интегральных уравнений. Следовательно, требуется разработка параллельных алгоритмов, которые в полной мере используют ресурсы параллелизма, свойственные математическим моделям метаматериалов и методам их численного анализа. Перспективным является реализация данных параллельных алгоритмов в виде комплексов программ для выполнения расчетов на высокопроизводительных вычислительных системах под управлением технологий параллельных вычислений (Message Passing Interface и Open Calculation Language).

Все отмеченное выше определяет актуальность темы диссертации и рассматриваемых в ней вопросов, которые включают разработку адекватных исследуемым структурам математических моделей электродинамического уровня разной сложности, численных методов, алгоритмов и комплексов программ.

Целью диссертационной работы является выявление закономерностей распространения электромагнитных волн в гиперболических метаматериалах путем численного моделирования с применением распараллеливания алгоритмов, а также разработка программного комплекса для расчета дисперсионных характеристик метаматериалов.

Для достижения поставленной цели в работе решаются следующие **основные задачи**:

- Построение математических моделей распространения электромагнитных волн в одномерно-периодических структурах: замедляющей системе с диэлектрической металлизированной гребенкой и пленочных металлодиэлектрических фотонных кристаллах; проведение вычислительных экспериментов, анализ электродинамических свойств.
- Построение математических моделей распространения электромагнитных волн в двумерно-периодических металлических фотонных кристаллах с включениями в виде бесконечно протяженных параллельных проволок, проведение вычислительных экспериментов, анализ электродинамических свойств.
- Построение математических моделей распространения электромагнитных волн в трехмерно-периодических фотонных кристаллах с металлически-

ми проволочными включениями в виде непересекающихся параллельных стержней и колец, а также с металло-диэлектрическими кубическими включениями; проведение вычислительных экспериментов, анализ электродинамических свойств.

- Разработка параллельного алгоритма расчета дисперсионных характеристик метаматериалов и его реализация в виде программного комплекса.

Методы исследования. Методами исследования в работе являются математическое моделирование на основе интегральных уравнений электродинамики, проекционные и итерационные методы их решения, а также методы сшивания полей.

Научная новизна работы:

- Предложены новые математические модели для стержневых и кольцевых металлических проволочных фотонных кристаллов, отличающиеся тонкопроволочным приближением. Согласно данным моделям, по проволочкам протекает азимутально-независимый линейный ток, что позволяет решать интегральное уравнение лишь для компонент электрического поля, ориентированных вдоль контуров проволочек.
- На основе численного решения дисперсионного уравнения получена зависимость компоненты тензора эффективной диэлектрической проницаемости от частоты и волнового вектора для металлических фотонных кристаллов с включениями в виде стержней конечной и бесконечной длины. Для структур со стержнями бесконечной длины получена численная оценка уровня низкочастотной отсечки, ниже которого данная компонента принимает отрицательные значения. В центре диаграммы Бриллюэна наблюдается неполная запрещенная зона, границы которой смыкаются в области точки M .
- На основе численного моделирования показано, что металлические проволочные фотонные кристаллы с конечными стержнями в кубической решетке с периодом a обладают полной запрещенной зоной для волн с нормированной продольной компонентой волнового вектора менее π при длине стержней $l = 0.7a$ и радиусе $r = 0.05a$. Для кольцевых проволочных структур наблюдается неполная запрещенная зона и, соответственно, достижение одновременно отрицательных величин диэлектрической и магнитной проницаемостей на структурах из стержней и колец является проблематичным.
- Получены дисперсионные характеристики для двумерно-периодических наноразмерных диссипативных стержневых фотонных кристаллов с учетом плазменных свойств металла. Показано, что подобные структуры имеют малые потери и слабую дисперсию для волн, распространяющихся вдоль стержней вплоть до инфракрасного диапазона.
- Исследована замедляющая система с одномерно-периодической диэлектрической металлизированной гребенкой и показано, что данная структура обладает близким к линейному закону дисперсии и почти постоянным замедлением в широкой полосе частот. При этом величина замедления увеличивается при уменьшении ширины и увеличении глубины гребней.
- Исследованы одномерные наноразмерные структуры с металлическими и диэлектрическими пленками как фильтрующие элементы с учетом частотных свойств металлов. Показано, что такие структуры могут служить ос-

новой при создании тепловых электромагнитных экранов, пропускающих видимый свет.

- Исследованы обладающие потерями металлические фотонные кристаллы из прямоугольных параллелепипедов в кубической решетке и показано, что для достижения фильтрующих свойств в области высоких частот следует использовать сильно разреженные структуры с наноразмерными включениями.
- Предложен новый метод решения дисперсионного уравнения, основанный на анализе скорости изменения значений целевой функции и позволяющий определять корни различных дисперсионных ветвей.
- На основе метода интегральных уравнений создан параллельный алгоритм расчета дисперсионных характеристик метаматериалов и разработана его реализация в виде программного комплекса для выполнения расчетов на параллельных вычислительных системах с поддержкой технологий Message Passing Interface и Open Calculation Language.

Научная и прикладная значимость. Научной значимостью обладают разработанные математические модели гиперболических метаматериалов и замедляющих структур, а также результаты расчета электродинамических характеристик на основе данных моделей, существенно дополняющие представления о физике распространения электромагнитных волн в искусственно созданных средах. В прикладном аспекте результаты работы представляют существенный интерес для проектирования и расчета устройств на основе метаматериалов, включая управляемые структуры, линзы, резонаторы, фильтры и линии передач.

Отдельный практический интерес представляют следующие результаты:

- Предложена структура тепловых электромагнитных экранов, прозрачных в оптическом диапазоне, на основе одномерно-периодических наноразмерных металло-диэлектрических пленочных фотонных кристаллов.
- Рассчитаны электродинамические характеристики направляющей структуры в диапазоне от СВЧ до оптического на основе двумерно-периодических металлических фотонных кристаллов.
- Предложена структура замедляющей системы для ламп бегущей волны, обеспечивающая почти постоянное замедление в широком частотном диапазоне, на основе одномерно-периодической диэлектрической металлизированной гребенки.
- Предложен метод решения дисперсионного уравнения при наличии полюсов, позволяющий определять корни различных дисперсионных ветвей.
- Разработан программный комплекс для расчета дисперсионных характеристик метаматериалов, поддерживающий высокопроизводительные параллельные вычислительные системы.

Достоверность результатов. Достоверность результатов работы основана на использовании строгих электродинамических моделей анализа, в основе которых лежат уравнения Максвелла, сходимости применяемых алгоритмов и удовлетворительных результатах расчета невязки граничных условий. Достоверность части численных результатов подтверждена их совпадением и сравнением с аналогичными как теоретическими, так и экспериментальными результатами других авторов.

Положения и результаты, выносимые на защиту:

1. В двумерно-периодическом металлическом фотонном кристалле из тонких бесконечно протяженных параллельных идеально проводящих стержней существует низкочастотная отсечка, ниже которой такая структура ведет себя как гиперболический материал с одной продольной отрицательной компонентой диагонального тензора эффективной диэлектрической проницаемости.
2. В трехмерно-периодическом металлическом фотонном кристалле из тонких параллельных идеально проводящих стержней конечной длины существует полная запрещенная зона, которая исчезает при стремлении нормированной продольной компоненты волнового вектора к π . При переходе с нижней дисперсионной ветви прямой волны на верхнюю частотная дисперсия такого метаматериала соответствует модели Лоренца среды с осцилляторами.
3. Трехмерно-периодические металлические фотонные кристаллы с включениями из тонкопроволочных идеально проводящих колец обладают неполной запрещенной зоной для волновых векторов, параллельных плоскостям колец.
4. Разработанный программный комплекс с модульной структурой, основанный на параллельном алгоритме решения дисперсионного уравнения и поддерживающий технологии высокопроизводительных параллельных вычислений Message Passing Interface и Open Calculation Language, позволяет получать дисперсионные характеристики одномерных, двумерных и трехмерных метаматериалов, обеспечивает масштабируемость по числу выполняющих устройств и обладает возможностями расширения функционала.

Апробация результатов работы. Основные результаты по теме диссертационного исследования докладывались на следующих международных школах, конференциях и семинарах: 15-ая, 16-ая и 17-ая международные школы-конференции по оптике, лазерной физике и биофизике «Saratov Fall Meeting», Саратов 2011–2013; семинары IEEE отделения Саратов-Пенза 2011–2013; 15-ая международная зимняя школа-семинар по электронике сверхвысоких частот и радиофизике, Саратов 2012; 22-ая и 23-ая международные конференции «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии» (КрыМиКо'2012–2013); международная конференция «Компьютерные науки и информационные технологии», Саратов 2012; международная конференция «Излучение и рассеяние электромагнитных волн» (ИРЭМВ-2011).

Публикации. По теме диссертации было опубликовано 14 печатных работ, в том числе 7 статей в рецензируемых российских журналах, рекомендованных ВАК [1–7], и 7 статей в сборниках международных и российских конференций. Получено свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ [8].

Личный вклад автора. Лично автором разработаны все программы, произведена основная часть расчетов и интерпретирована значительная часть полученных в работе результатов. Постановка задач и разработка алгоритмов проводилась совместно с научными руководителями.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 125 страницах машинописного текста, содержит 34 рисунка, 4 таблицы и список литературы из 122 наименований.

Основное содержание работы

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертационной работы, определены ее цель и задачи, аргументирована научная новизна полученных результатов, показана их теоретическая и практическая значимость, сформулированы положения и результаты, выносимые на защиту.

В **первой главе** рассмотрены применяемые на настоящий момент методы для моделирования распространения электромагнитных волн в метаматериалах, а также подробно изложен метод на основе интегральных уравнений и функций Грина. Проведен сравнительный анализ таких методов, как метод Корринги-Кона-Ростокера, метод плоских волн, метод матриц передачи и метод конечных разностей во временной области. Приведены основные достоинства и недостатки каждого из методов, а также обозначена оптимальная область их применения.

Подробно представлен метод интегральных уравнений и функций Грина. Данный метод основан на применении функций Грина для периодических структур, с помощью которых выводятся интегральные уравнения для электрического поля. Интегральные уравнения преобразуются к дисперсионным уравнениям (ДУ) следующего вида:

$$F(k_0, \mathbf{k}) = \det A = 0,$$

где k_0 – волновое число, \mathbf{k} – волновой вектор, A – матрица, которая получается после применении проекционных методов решения интегральных уравнений.

Метод одинаково хорошо подходит для расчета электродинамических характеристик как идеальных металлических, так и металло-диэлектрических структур. В первом случае поле не проникает внутрь металла, поэтому следует рассматривать поверхностные либо линейные токи на включении и задавать граничные условия. Во втором же случае поле проникает внутрь включения, что соответствует неидеальным металлам на инфракрасных и оптических частотах, и возникают объемные интегральные уравнения.

Во **второй главе** описываются математические модели метаматериалов с одномерно-периодической и двумерно-периодической структурой. Используется метод моделирования на основе интегральных уравнений и функций Грина, а также метод матриц передачи. Приводятся результаты аналитического и численного моделирования.

Рассмотрены одномерно-периодические структуры из конечного числа слоев металла и диэлектрика (рис. 1). Ввиду конечности числа периодов для анализа использовался метод матриц передачи, позволяющий найти коэффициент пропускания по мощности для волны, падающей под прямым углом к слоям. На рис. 2 приведены результаты расчета данного коэффициента в зависимости от длины волны для структур из разных металлов: алюминия, никеля и хрома.

Данные структуры хорошо подавляют частоты инфракрасного диапазона, оставаясь прозрачными в оптическом. При этом минимальное значение коэффициента пропускания наблюдается для структур из алюминия. Тем самым можно сделать вывод, что такие структуры могут быть основой при создании электромагнитных тепловых экранов.

Также была исследована замедляющая система с одномерно-периодической диэлектрической металлизированной гребенкой для ламп бегущей волны в терагерцовом диапазоне. Показано, что такая структура обладает постоянным замедлением в широком частотном диапазоне.

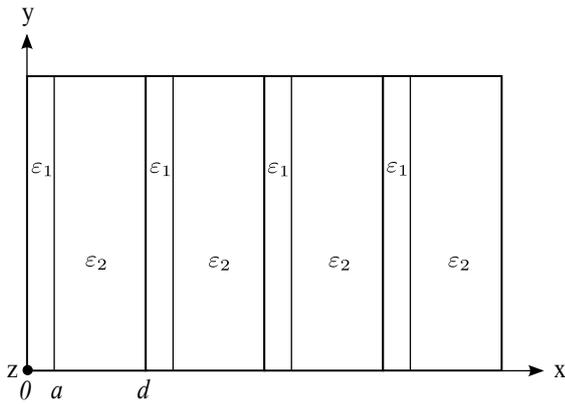


Рис. 1. Слоистая одномерно-периодическая структура

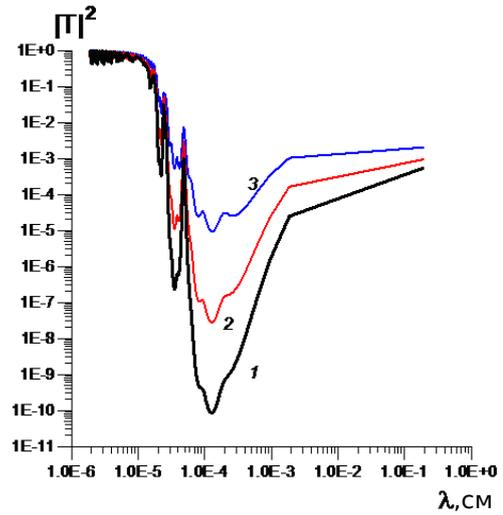


Рис. 2. Коэффициент прохождения по мощности теплового экрана в виде четырех периодов со слоями металла 30 нм и слоями SiO_2 300 нм в зависимости от длины волны: кривая 1 – Al, 2 – Ni, 3 – Cr

Рассмотрены двумерно-периодические металлические фотонные кристаллы (МФК) с включениями в виде бесконечно протяженных тонких проволок радиуса r в решетке с периодами a и b (рис. 3). Такая структура МФК является одноосным кристаллом и описывается диагональным тензором эффективной диэлектрической проницаемости (ДП).

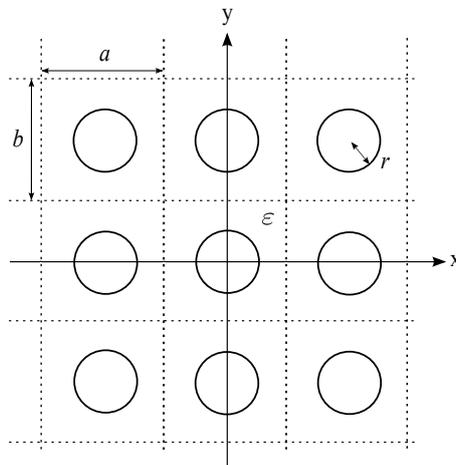


Рис. 3. Двумерно-периодический МФК с включениями в виде бесконечно протяженных тонких проволок

Данные структуры исследовались в случае идеальной проводимости металла на низких частотах, а также с учетом прохождения поля внутрь проволок на инфракрасных и оптических частотах. В приближении идеальной проводимости считалось, что по проволокам течет электрический ток, плотность которого записывается следующим образом:

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

Результаты моделирования показаны на рис. 4 и 5. Такие структуры обладают низкочастотной отсечкой, а частотная дисперсия продольной компоненты диагонального тензора эффективной диэлектрической проницаемости аналогична частотной дисперсии плазмы: на низких частотах она отрицательна, а на высоких стремится к единице. Поэтому на частотах ниже отсечки данные структуры представляют собой гиперболический метаматериал.

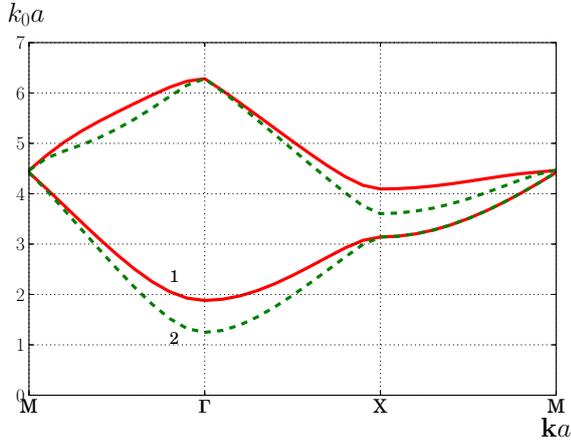


Рис. 4. Зонные диаграммы МФК с бесконечно протяженными проволочками при $a = b$, $\varepsilon = 1$, $k_z a = 0$ и $r/a = 0.05$ (кривая 1), $r/a = 0.005$ (2)

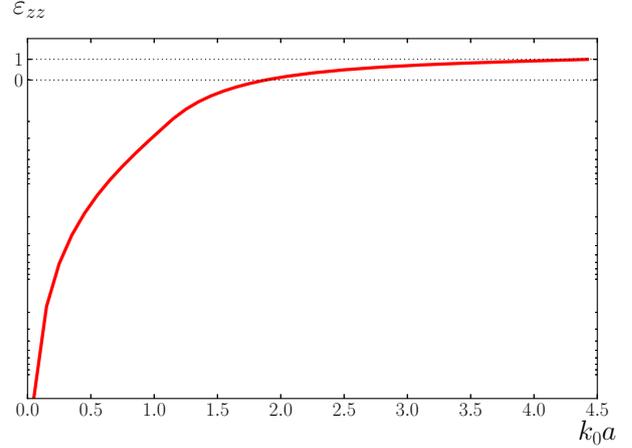


Рис. 5. Компонента ДП ε_{zz} в зависимости от нормированного волнового числа при движении по нижней ветви зонной диаграммы от точки Γ к M для МФК при $a = b$, $\varepsilon = 1$, $r/a = 0.05$, $k_z = 0$

В случае высоких частот металл следует рассматривать как диэлектрик с потерями, поэтому задавался ток поляризации с плотностью

$$\mathbf{J}_p(\mathbf{r}, \omega) = j\omega\varepsilon_0(\tilde{\varepsilon}(\omega) - \varepsilon)\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega), \quad (2)$$

где $\tilde{\varepsilon}$ – диэлектрическая проницаемость металла. Электрическое поле выражается путем интегрирования с функцией Грина. Повторное интегрирование приводит к функционалу

$$F(k_0, \mathbf{k}, E_z) = \int_0^r E_z^2(p) dp - (k_0^2 \varepsilon - k_z^2)(\tilde{\varepsilon}/\varepsilon - 1) \int_0^r \int_0^r E_z(p) K(p, p') E_z(p') p' dp' dp,$$

в котором введено следующее ядро:

$$K(p, p') = \frac{2\pi}{ab} \sum_{m,n=-\infty}^{\infty} \frac{J_0(p\tilde{k}_{mn})J_0(p'\tilde{k}_{mn})}{\tilde{k}_{mn}^2 + k_z^2 - k_0^2\varepsilon},$$

где $\tilde{k}_{mn} = \sqrt{(k_x + 2m\pi/a)^2 + (k_y + 2n\pi/b)^2}$.

Была исследована пространственная дисперсия для волн, распространяющихся в направлении проволочек. На рис. 6 представлены результаты расчета замедления и нормированных потерь для структур из золотых проволочек на различных частотах инфракрасного и оптического диапазона. Показано, что такие материалы способны практически без потерь передавать энергию инфракрасного диапазона, при этом возможны медленные плазмоны и гиперболическая дисперсия.

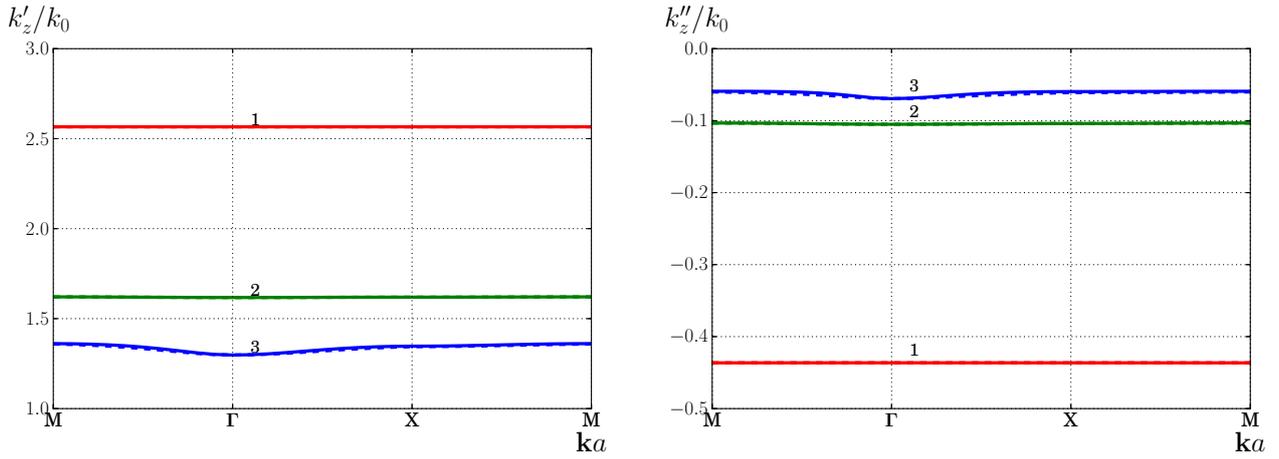


Рис. 6. Замедление (слева) и нормированные потери (справа) волны вдоль стержней для МФК с бесконечно протяженными золотыми проволочками при $a = b = 500$ нм, $\varepsilon = 1$, $r = 25$ нм для $\lambda = 0.5$ мкм (кривые 1), $\lambda = 0.65$ мкм (2), $\lambda = 1$ мкм (3)

Результаты данной главы опубликованы в работах [1, 3, 6, 7, 9, 10].

В **третьей главе** описываются математические модели метаматериалов с трехмерно-периодической структурой. Используется метод моделирования на основе интегральных уравнений и функций Грина. Приводятся результаты аналитического и численного моделирования.

Рассмотрены трехмерно-периодические МФК с включениями в виде тонкопроволочных непересекающихся стержней длины l и радиуса r в решетке с периодами a, b, c (рис. 7).

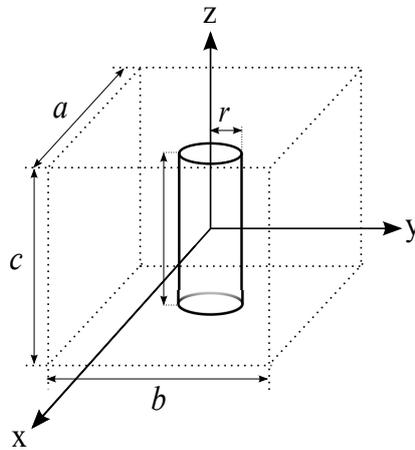


Рис. 7. Ячейка трехмерно-периодического МФК с включениями в виде тонких проволочек

Проволочка нулевой ячейки помещена в центр декартовой системы координат. Электрический ток обращается в нуль на концах проволочки, при этом плотность записывается в следующем виде:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \mathbf{z}_0 \delta(x) \delta(y) \sum_{s=1}^N I_s \cos(k_s z), \quad (3)$$

где \mathbf{z}_0 – орт-вектор оси z , N – количество учитываемых гармоник тока.

Расчет дисперсии таких структур показал, что они обладают запрещенной зоной для волн с продольной компонентой волнового вектора менее π (рис. 8).

Данные структуры описываются диагональным тензором эффективной диэлектрической проницаемости, продольная компонента которого отрицательна в запрещенной зоне. В этом случае данная структура является гиперболическим метаматериалом, а при переходе с нижней дисперсионной ветви прямой волны на верхнюю частотная дисперсия такого метаматериала соответствует модели Лоренца осциллирующей среды (рис. 9).

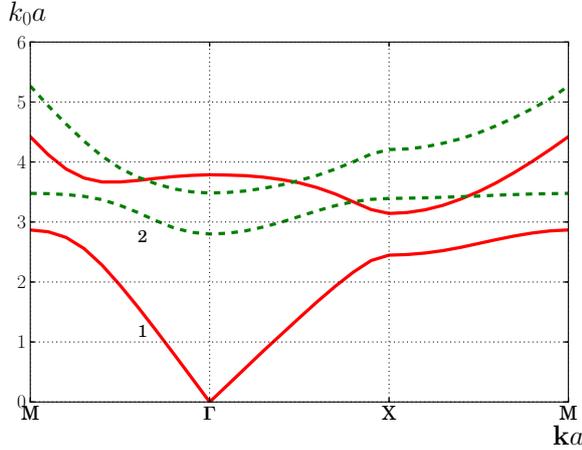


Рис. 8. Зонные диаграммы МФК с проволочными стержнями при $a = b = c$, $\varepsilon = 1$, $N = 7$, $M = 20$, $l/a = 0.7$, $r/a = 0.05$, $k_z = 0$ (кривая 1) и $k_z = 2.8$ (2)

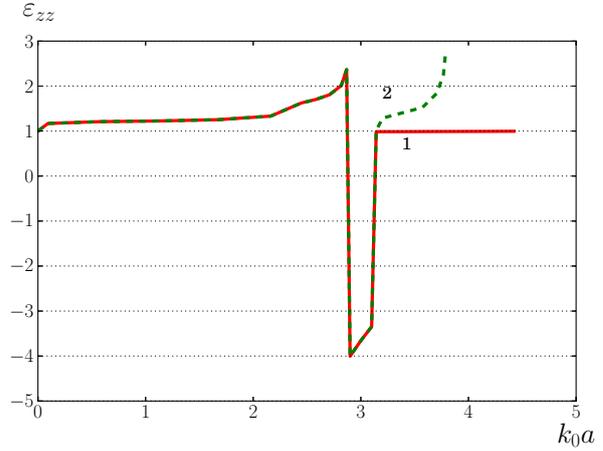


Рис. 9. Компонента ДП ε_{zz} в зависимости от $k_0 a$ при движении по нижней ветви зонной диаграммы по точкам Γ -X-M, переходом в X верхней ветви и движении к M (кривая 1), к Γ (2) для МФК при $a = b = c$, $\varepsilon = 1$, $l/a = 0.7$, $r/a = 0.05$, $k_z = 0$

Также были исследованы МФК с включениями в виде непересекающихся проволочных колец прямоугольной формы в решетке с периодами a , b , c (рис. 10). Длина стороны прямоугольного кольца (рамки) – L , радиус проволочки – r .

Проволочное кольцо помещено в центр нулевой ячейки. Электрический ток непрерывен, а его плотность записывается в виде:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \mathbf{q}_0 \delta(z) \delta(h \pm L/2) \sum_{s=1}^N I_s \cos(k_s q), \quad (4)$$

где \mathbf{q}_0 – орт-вектор оси рамки, N – количество учитываемых гармоник тока, h – координата оси, вдоль которой проходит сторона рамки, $k_s = 2(s - 1)\pi/(4L)$, q – точка на оси рамки.

Расчет дисперсии выявил наличие лишь неполной запрещенной зоны для волн, распространяющихся в плоскостях параллельных кольцам (рис. 11). Следовательно, достижение одновременно отрицательных компонент эффективной диэлектрической и магнитной проницаемостей на структурах из стержней и колец является проблематичным.

Рассчитана дисперсия трехмерно-периодических металлических и диэлектрических ФК с кубическими включениями с ДП $\tilde{\varepsilon}$ (рис. 12 и 13). Длина стороны куба – Δ , а период кубической решетки – a . Данные результаты показывают, что идеальный и недиссипативный ФК может иметь полные и частичные запрещенные зоны. Это соответствует самосопряженной задаче на собственные

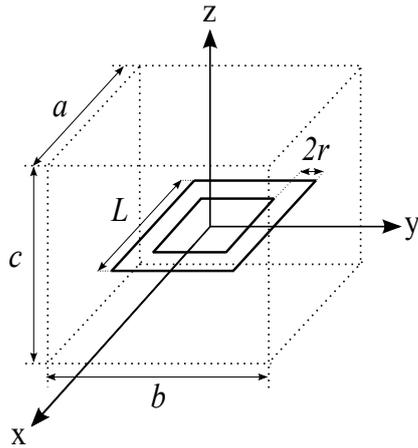


Рис. 10. Ячейка трехмерно-периодического МФК с включениями в виде тонких проволочных колец прямоугольной формы

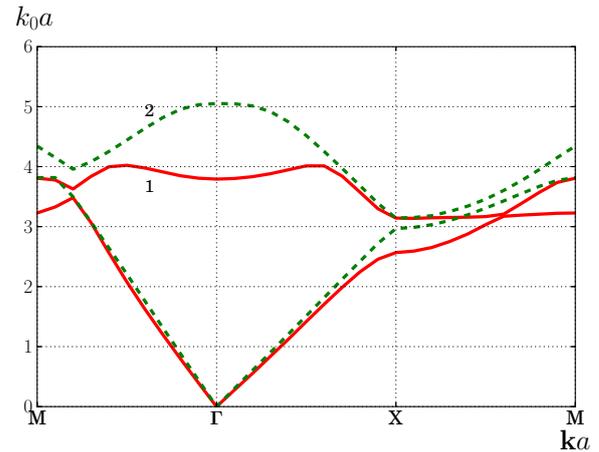


Рис. 11. Зонные диаграммы МФК с проволочными кольцами при $a = b = c$, $\varepsilon = 1$, $N = 2$, $M = 20$, $r/a = 0.05$, $L/a = 0.4$ (кривая 1) и $L/a = 0.2$ (2)

значения и сохранению числа фотонов. В диссипативном периодическом ФК фотоны поглощаются, а их число не сохраняется, что приводит к смыканию дисперсионных ветвей прямых и обратных волн в области запрещенных зон, которые практически исчезают.

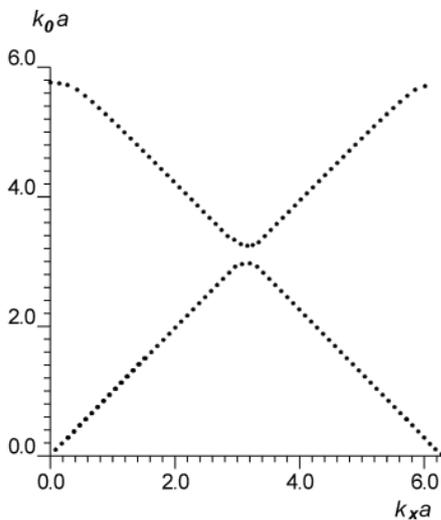


Рис. 12. Дисперсия МФК с кубическими включениями при $\varepsilon = 1$, $\Delta/a = 0.1$, $k_y = k_z = 0$

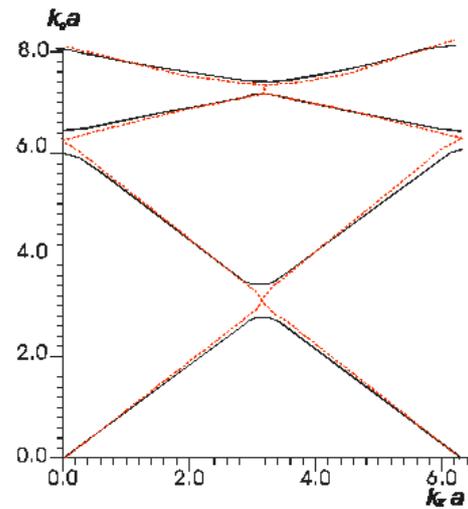


Рис. 13. Дисперсия диэлектрического ФК с кубическими включениями при $\varepsilon = 1$, $\Delta/a = 0.2$, $k_y = k_z = 0$, $\tilde{\varepsilon} = 3.7$ (сплошные кривые) и $\tilde{\varepsilon} = 3.7 - 0.3j$ (штрихованные)

Результаты данной главы опубликованы в работах [1, 3–5, 10–12].

В четвертой главе рассмотрен разработанный автором метод решения ДУ при наличии полюсов, на основе которого был создан алгоритм расчета дисперсионных характеристик метаматериалов, а также его модификация для параллельных вычислительных систем. Проведен анализ сходимости алгоритма и определены оптимальные параметры расчета. Приведено описание функциональных возможностей программного комплекса для расчета дисперсионных

характеристик метаматериалов, разработанного на основе полученного алгоритма. Проведено тестирование программного комплекса на высокопроизводительных системах, основанных как на центральных процессорах, так и на гибридной архитектуре с использованием графических ускорителей вычислений.

Наличие полюсов в функциях Грина делает неэффективным применение традиционных численных методов решения уравнений. На рис. 14 представлен график поведения функции $F(k_0, \mathbf{k})$ в области корней и полюсов.

Был разработан метод, основанный на анализе изменения целевой функции, который позволяет определять наличие полюса и находить корни дисперсионных ветвей. На основе данного метода был создан алгоритм решения, а также его параллельная модификация, схема работы которой представлена на рис. 15. При этом FROM и TO – левая и правая точки области поиска решения, STEP – шаг поиска, S – количество параллельных выполняющих процессов, \mathbf{k} – волновой вектор, для которого производятся вычисления.

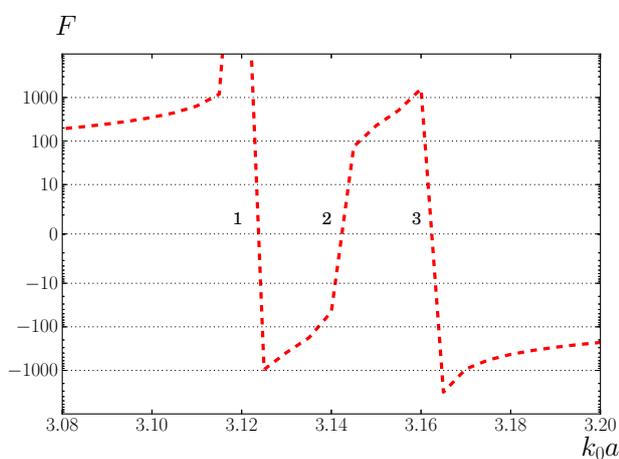


Рис. 14. Зависимость значений функции F от k_0a вблизи полюсов (точки 1, 3) и корня (2)

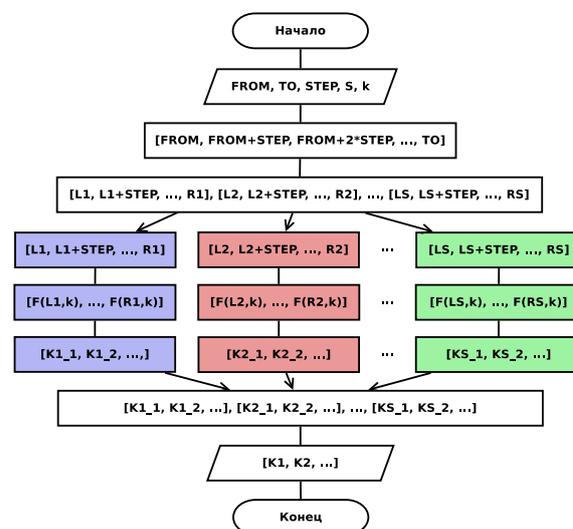


Рис. 15. Блок-схема процесса разбиения области поиска k_0 и решения ДУ несколькими процессами

Разработан программный комплекс расчета дисперсионных характеристик метаматериалов, основанный на параллельном алгоритме решения ДУ. Комплекс позволяет получать дисперсионные диаграммы одномерно-периодических, двумерно-периодических и трехмерно-периодических структур. Комплекс разделен на две логические части: модуль вычислений и модуль управления. Первый содержит функции расчета дисперсионных характеристик, которые делятся на две части: общие функции и функции, отвечающие за расчет конкретного вида структур. Второй обеспечивает запуск программы, разбор конфигурационного файла и организацию параллельных вычислений. Такая модульная архитектура способствует легкому расширению функционала для расчета новой структуры метаматериала.

Поддерживаются технологии параллельных вычислений Message Passing Interface и Open Calculation Language. Результаты тестирования программного комплекса показали, что первая технология позволяет масштабировать время вычислений по количеству процессов с небольшими потерями от максимально возможного значения (8% при 6 четырехъядерных процессорах). Вторая техно-

логия обеспечивает быстрый расчет рядов в функциях Грина: в ресурсоемком режиме связка из двухъядерного процессора и графического ускорителя справляется с задачей в 3 раза быстрее, чем 6 четырехъядерных процессоров. При этом время выполнения на графическом ускорителе растет нелинейно с ростом размерности задачи ввиду наличия накладных временных расходов на переключение контекста выполнения программы между центральным и графическим процессором.

Результаты данной главы опубликованы в работах [2, 13–15].

В **заключении** сформулированы основные результаты диссертационной работы.

- Получены дисперсионные характеристики замедляющей системы для ламп бегущей волны с диэлектрической металлизированной гребенкой и проанализирована зависимость величины замедления от геометрических и диэлектрических параметров гребенки. Показано, что такая структура обладает близким к линейному закону дисперсии и почти постоянным замедлением в широком частотном диапазоне, при этом наибольшее замедление достигается при комбинации широкого слоя диэлектрика с узкими и глубокими металлизированными гребнями.
- Рассчитана частотная зависимость коэффициента пропускания для одномерно-периодических металло-диэлектрических пленочных наноразмерных метаматериалов. Показано, что такие структуры обладают фильтрующими свойствами в области инфракрасного диапазона и могут быть основой для создания тепловых электромагнитных экранов.
- Предложена модель в тонкопроволочном приближении для металлических проволочных фотонных кристаллов с бесконечными стержнями, согласно которой по проволочкам бежит азимутально-независимый ток. Это позволяет ввести линейную плотность тока и рассматривать интегральное уравнение относительно компонент электрического поля, ориентированных вдоль контуров проволочек.
- Получены дисперсионные характеристики двумерно-периодических металлических стержневых фотонных кристаллов. Показано, что при условии идеальной проводимости данные структуры обладают низкочастотной отсечкой, ниже которой ведут себя как плазма. При учете плазменных свойств металла и наличии наноразмерных включений отсечка понижается. Для волн, распространяющихся вдоль проволочек, данные структуры имеют слабую дисперсию и малые потери вплоть до инфракрасного диапазона.
- Предложена модель в тонкопроволочном приближении для трехмерно-периодических металлических проволочных фотонных кристаллов с непересекающимися стержнями, согласно которой по стержням бежит азимутально-независимый ток. Это позволяет ввести линейную плотность тока, которая представляется тригонометрическим рядом и обращается в нуль на концах проволочек, и рассматривать интегральное уравнение относительно компоненты электрического поля, параллельной проволочкам.
- Получены дисперсионные характеристики трехмерно-периодических металлических стержневых фотонных кристаллов. Показано, что данные структуры с периодом кубической решетки a обладают полной запрещенной зоной при радиусе проволочек $r/a = 0.05$ и длине $l/a \geq 0.7$ для волн с нормированной продольной компонентой волнового вектора менее π . Полу-

чена зависимость от нормированного волнового числа компоненты тензора эффективной диэлектрической проницаемости, взаимодействующей с компонентой электрического поля. Данная характеристика соответствует модели Лоренца осциллирующей среды.

- Предложена модель в тонкопроволочном приближении для трехмерно-периодических металлических проволочных фотонных кристаллов с пересекающимися прямоугольными кольцами, согласно которой по кольцам бежит азимутально-независимый ток. Это позволяет ввести линейную плотность тока, которая представляется тригонометрическим рядом и непрерывна по оси кольца, и рассматривать интегральное уравнение относительно компоненты электрического поля, параллельной плоскости колец.
- Рассчитаны дисперсионные характеристики трехмерно-периодических металлических прямоугольно-кольцевых фотонных кристаллов. Показано, что данные структуры обладают неполной запрещенной зоной для поперечных волн. Поэтому достижение одновременно отрицательных величин диэлектрической и магнитной проницаемостей на структурах из колец и стержней является проблематичным.
- Получены дисперсионные характеристики трехмерно-периодических металло-диэлектрических фотонных кристаллов. Показано, что при сильно разреженных наноразмерных включениях данные структуры обладают потерями и фильтрующими свойствами в области высоких частот.
- Предложен новый метод решения дисперсионного уравнения, основанный на анализе скорости изменения значений целевой функции и позволяющий определять корни различных дисперсионных ветвей.
- Разработаны последовательная и параллельная версии алгоритма расчета дисперсионных характеристик метаматериалов.
- Разработан программный комплекс, реализующий параллельный алгоритм расчета дисперсионных характеристик метаматериалов с применением метода интегральных уравнений. Показана его эффективность при выполнении расчетов на параллельных вычислительных системах с наличием многоядерных процессоров и графических ускорителей.

Публикации автора по теме диссертации

1. Давидович М. В., Шиловский П. А. Метаматериалы с диэлектрическими и металлическими включениями в кубическую решетку // Журнал технической физики. 2013. Т. 83, № 8. С. 90–97.
2. Давидович М. В., Шиловский П. А., Андрейченко Д. К. Использование технологий параллельных вычислений при моделировании металлических фотонных кристаллов // Известия Саратовского Государственного Университета. Новая серия. Сер. Математика. Механика. Информатика. 2013. Т. 13, № 2. ч. 1. С. 86–90.
3. Давидович М. В., Стефюк Ю. В., Шиловский П. А. Металлические проволочные фотонные кристаллы. Анализ электрофизических свойств // Журнал технической физики. 2012. Т. 82, № 3. С. 7–14.

4. Давидович М. В., Шиловский П. А. Расчет зонных диаграмм металлических проволочных фотонных кристаллов // Журнал технической физики. 2012. Т. 82, № 12. С. 79–83.
5. Давидович М. В., Шиловский П. А. Анализ электрофизических свойств металлических прямоугольных проволочных фотонных кристаллов // Гетеромагнитная микроэлектроника. 2012. № 13. С. 45–50.
6. Бушуев Н. А., Давидович М. В., Шиловский П. А. Перспективные замедляющие системы терагерцового диапазона для ЛБВ // Известия Саратовского Государственного Университета. Новая серия. Сер. Физика. 2012. Т. 12, № 2. С. 64–75.
7. Давидович М. В., Яфаров Р. К., Доронин Д. М., Шиловский П. А. Электромагнитные экраны инфракрасного диапазона на основе наноразмерных слоев металла, SiO₂ и SiO // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2012. Т. 15, № 2. С. 19–21.
8. Шиловский П. А. Программа расчета зонных диаграмм фотонных кристаллов // Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ №2014610826 от 17 января 2014 г.
9. Давидович М. В., Шиловский П. А. Волны и дисперсия в 2-D периодических металлических стержневых структурах // СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии (КрыМиКо'2013). Материалы конференции. Севастополь: Вебер. 2013. С. 887–888.
10. Давидович М. В., Стефюк Ю. В., Шиловский П. А., Явчуновская С. В. Материальные параметры металлических проволочных фотонных кристаллов // Излучение и рассеяние электромагнитных волн (ИРЭМВ-2011). Труды конференции. Таганрог: ТРТУ. 2011. С. 246–250.
11. Давидович М. В., Шиловский П. А. Электрофизические свойства металлических штыревых и кольцевых проволочных фотонных кристаллов // СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии (КрыМиКо'2012). Материалы конференции. Севастополь: Вебер. 2012. С. 641–643.
12. Davidovich M. V., Stephuk J. V., Shilovsky P. A. Metallic wire photonic crystals: analysis of electrophysical properties // Modeling in Applied Electromagnetics and Electronics. No. 10. Saratov University Press, 2011. P. 79–92.
13. Давидович М. В., Шиловский П. А., Андрейченко Д. К. Применение технологий параллельных вычислений для решения задачи моделирования металлических фотонных кристаллов // Компьютерные науки и информационные технологии. Материалы конференции. Саратов. 2012. С. 101–104.
14. Shilovsky P., Atmakin D., Khvatov I. Using message passing interface technology for solving mathematical physics problems on parallel calculating systems // Presenting Academic Achievements to the World. 2010. P. 125–129.
15. Khvatov I., Atmakin D., Shilovsky P. Python for science computing // Presenting Academic Achievements to the World. 2010. P. 55–58.