

# АНАЛИЗ ДИСПЕРСИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ФОНОННЫХ СТРУКТУР

*Д. А. Пархоменко\**, *С. А. Коленов*, *В. И. Григорук*, *Н. Н. Мовчан*

*Киевский национальный университет им. Т. Шевченко  
01601, Киев, Украина*

Поступила в редакцию 15 сентября 2010 г.

Представлена обобщенная теория расчета дисперсии объемных акустических волн в трехмерных и двумерных фоновых кристаллах из анизотропных материалов методом разложения по плоским волнам (PWE). Предложено две методики разделения акустических мод на полученных дисперсионных диаграммах. Исследована картина распределения акустического поля в зависимости от направления волнового вектора для разных типов мод. Показано вырождение акустических мод в направлениях, отличных от направлений симметрии рассматриваемого фононного кристалла. Применение предложенных методик продемонстрировано на примерах трехмерной и двумерной кремниевых фононных структур.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Существование запрещенных зон для электромагнитного излучения в фотонных структурах [1–4] в свое время вызвало огромный интерес к теоретическим и экспериментальным исследованиям в данной области. Сейчас наблюдается также быстрый рост интереса к аналогичным эффектам и в акустике [5–14]. Аналогия между фотонами и фононами побудила к проведению исследований в области композитов из двух и более упругих веществ, образующих так называемый фононный кристалл или фононную решетку. Возможные области применения фононных структур: разработка разнообразных фононных фильтров или термоизоляторов, которые избирательно не пропускают фононы с определенной энергией; разработка акустических волноводов и т. п. В последнее время появился интерес к фононным кристаллам с точки зрения применения их в устройствах акустооптики [15–18]. Такие фононные кристаллы одновременно являются фотонными кристаллами для оптического излучения.

Существует ряд методик анализа фотонных структур: теория множественного рассеяния, метод конечных разностей в пространственно-временной области (FDTD) и метод разложения по плоским волнам (PWE). Метод матрицы рассеяния (SMM) — один из наиболее ранних и эффективных

методов решения задачи рассеяния для большого, однако ограниченного, количества объектов [3, 4]. Метод SMM можно описать на примере модели пространства, заполненного металлическими или диэлектрическими цилиндрами. Используется формализм полного и рассеянного полей (TF/SF), следуя которому полное поле записывается как сумма падающего и рассеянного полей в каждой точке пространства. Метод может быть разбит на три этапа. Первый шаг заключается в представлении суммарного поля в виде рядов Фурье–Бесселя. Снаружи цилиндра ряд можно разбить на две части. Первая часть описывает полное падающее на цилиндр поле. Оно включает в себя не только падающую плоскую волну, но и поля, рассеянные другими цилиндрами в направлении цилиндра, который рассматривается. Вторая часть представляет поле, рассеянное данным цилиндром. На втором этапе необходимо учесть наличие причинности между полем, рассеянным цилиндром, и полным падающим полем, которое окружает этот же цилиндр. Это соотношение может быть выражено в терминах коэффициентов Фурье–Бесселя через понятие матрицы рассеяния. Третий этап использует тот факт, что суммарное падающее на цилиндр поле является суммой известных компонентов (падающей плоской волны) и полей, рассеянных другими цилиндрами. Таким образом, может быть получено второе соотношение между двумя частями поля, окружающего каждый цилиндр. В отличие от

\*E-mail: dmitry.parhomenko@googlemail.com

второго шага, последний шаг выражает эффект связи между всеми цилиндрами. В конечном счете, метод SMM приводит к матричному формализму. Точность метода определяется количеством гармоник, используемых в разложении поля. Если для  $N$  цилиндров поле моделируется рядом гармоник от  $-M$  до  $M$ , то метод SMM потребует решения системы из  $N(2M + 1)$  уравнений.

SMM является строгим и точным методом, полученным из основных физических принципов. Следовательно, он гарантированно будет точным в пределах модели и не приведет к таким неожиданным эффектам, которые возникают в других техниках (как, например, численная дисперсия в методе FDTD). Даже если этот метод будет представлен для довольно сложной структуры, он базируется на физически интуитивно понятном подходе к решению задачи рассеяния для множества объектов. Более того, численная реализация этого метода не представляет никакой трудности. Первый вклад в развитие метода сделал Релей в работах, посвященных электростатике. Вариант метода для электромагнитных волн появился гораздо позже — в 1980-е гг. Основной задачей было изучение различных двумерных и трехмерных диэлектрических, металлических или сверхпроводящих структур с периодической или случайной ориентацией объектов в пространстве. Получение матрицы рассеяния для некруглых цилиндров довольно сложное, так как вычисления перестают быть аналитическими.

Метод FDTD — это метод численного решения задач электродинамики, основанный на нестандартной дискретизации уравнений Максвелла во времени и пространстве [19, 20]. Метод применим во временной области, поэтому он годится для решения задач в широком диапазоне частот. Этот метод относится к общему классу сеточных методов решения дифференциальных уравнений. Уравнения Максвелла подвергаются дискретизации с использованием центрально-разностной аппроксимации по времени и пространственным координатам. Полученные конечно-разностные уравнения решаются программными или аппаратными методами в каждый момент временной сетки, причем, как правило, рассчитанные поля разделены во времени половиной шага дискретизации. Расчет полей в ячейках сетки повторяется до тех пор, пока не будет получено решение поставленной задачи в интересующем промежутке времени. Базовый алгоритм метода был впервые предложен американским ученым К. Йе в 1966 г. Однако название «Finite-Difference Time-Domain» и аббревиатура FDTD были даны ме-

тоду А. Тейфламом [19]. Примерно с 1990 г. метод конечных разностей стал основным для численного моделирования многих научных и инженерных проблем, связанных с взаимодействием электромагнитных волн с веществом. Он может быть с успехом применен для решения широкого спектра задач: от моделирования сверхдлинных электромагнитных волн в геофизике (включая процессы в ионосфере) и микроволн (например, для изучения сигнатурной радиолокации, расчета характеристик антенн, разработки беспроводных устройств связи, в том числе цифровых) до задач в оптическом диапазоне (для изучения фотонных кристаллов, солитонов в наноплазмонике и биофотонике).

Методы для временной области удобны в отношении динамических задач, которые предусматривают временную зависимость электромагнитного поля. Они также могут быть использованы для расчета зонных структур фотонных кристаллов, однако практически сложно бывает выявить положение зон в выходных данных таких методов [3, 4]. Кроме того, при расчете зонных диаграмм фотонных кристаллов используется преобразование Фурье, частотное разрешение которого зависит от общего времени расчета метода. Для получения большего разрешения в зонной диаграмме нужно потратить больше времени на выполнение расчетов. Есть еще и другая проблема — временной шаг таких методов должен быть пропорционален размеру пространственной сетки метода. Требование увеличения частотного разрешения зонных диаграмм требует уменьшения временного шага, а следовательно, и размера пространственной сетки, увеличения числа итераций, требуемой оперативной памяти компьютера и времени расчета. Такие методы реализованы в известных коммерческих пакетах.

Метод разложения по плоским волнам (Plane Wave Expansion) относится к численным методам в частотной области [1, 2]. Методы для частотной области удобны прежде всего тем, что уравнения Максвелла решаются сразу для стационарной системы и непосредственно из решения определяют частоты оптических мод системы. Это позволяет рассчитывать зонные диаграммы фотонных кристаллов быстрее, чем с использованием методов для временной области. К их достоинствам можно отнести то, что число итераций практически не зависит от разрешения пространственной сетки метода, и то, что ошибка метода экспоненциально уменьшается с увеличением числа проведенных итераций. Недостатками метода являются необходимость расчета собственных частот оптических мод системы в

низкочастотной области, для того чтобы рассчитать частоты в области высоких частот, и естественно, невозможность описания динамики развития оптических колебаний в системе.

Постепенно перечисленные методики стали применяться и для решения волнового уравнения акустики. На сегодняшний день уже отработаны методики для расчета дисперсии как объемных [5–11], так и поверхностных [12–14] волн в фоновых структурах. В большинстве работ изучение фоновых структур ограничивается двумерным случаем. Первые расчеты трехмерных фоновых структур в изотропной среде методом матриц рассеяния были предложены в работах [7–9]. В представленной работе предлагается методика расчета дисперсии акустических волн в трехмерных фоновых кристаллах, образованных в акустически анизотропных материалах, методом разложения по плоским волнам (PWE). Метод FDTD пока применялся только для анализа двумерных фоновых кристаллов [11, 13].

Как известно, в упругих средах существует множество возможных вариантов для распространения объемных и поверхностных акустических волн. В общем случае уравнения акустики не распадаются на независимые подсистемы для отдельных волновых мод, как это происходит для уравнений Максвелла в оптике. Следовательно, для анализа дисперсионных кривых фоновых структур требуются новые подходы, отличные от уже известных в оптике. В работе предложены два метода разделения решений дисперсионной задачи и представления их в виде кривых отдельных мод на дисперсионной диаграмме. Каждый из предложенных методов имеет свои недостатки и ограничения, которые сводятся к минимуму при совместном использовании этих методов.

## 2. ТЕОРИЯ

В общем случае будем рассматривать структуру, периодическую вдоль всех трех осей координат. В общем виде уравнение движения упругой анизотропной среды можно записать следующим образом [21–24]:

$$\rho(\mathbf{r})\ddot{u}_i(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \sigma_{ij}(\mathbf{r}, t)}{\partial x_j}, \quad (1)$$

где  $u_i(\mathbf{r}, t)$  — компоненты вектора смещения,  $\rho(\mathbf{r})$  — пространственное распределение плотности,  $\sigma_{ij}(\mathbf{r}, t)$  — тензор напряжений структуры. Уравнение состояния кристалла (обобщенный закон Гука) в этом случае имеет вид

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r}, t) = C_{ijkl}(\mathbf{r}) \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_k(\mathbf{r}, t)}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l(\mathbf{r}, t)}{\partial x_k} \right), \quad (2)$$

где  $C_{ijkl}(\mathbf{r})$  — тензор упругих модулей структуры. Рассматривается случай адиабатических деформаций, соответственно под  $C_{ijkl}(\mathbf{r})$  везде нужно подразумевать адиабатические значения модулей упругости [21].

Подставляя (2) в (1), можно получить уравнение движения в следующем виде:

$$\rho(\mathbf{r})\ddot{u}_i(\mathbf{r}, t) = \partial_j [C_{ijkl}(\mathbf{r})\partial_l u_k(\mathbf{r}, t)]. \quad (3)$$

Поскольку значения элементов тензора  $C_{ijkl}(\mathbf{r})$  являются зависимыми от координат системы, вынести его из-под знака дифференциала, как в классическом случае упругих волн в кристалле, нельзя. Однако для упрощения задачи, вследствие пространственной периодичности,  $\rho(\mathbf{r})$  и  $C_{ijkl}(\mathbf{r})$  можно разложить в ряд Фурье по векторам обратной решетки  $\mathbf{G}$  следующим образом:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \rho(\mathbf{G}), \quad (4)$$

$$C_{ijkl}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} C_{ijkl}(\mathbf{G}), \quad (5)$$

где  $\rho(\mathbf{G})$  и  $C_{ijkl}(\mathbf{G})$  — соответствующие коэффициенты Фурье.

Применяя теорему Блоха и раскладывая вектор смещения  $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$  в ряд Фурье, решение волнового уравнения можно записать в виде

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\Omega t} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{u}(\mathbf{G}), \quad (6)$$

где  $\mathbf{k}$  — волновой вектор,  $\Omega$  — круговая частота,  $\mathbf{u}(\mathbf{G})$  — коэффициенты Фурье вектора смещения.

Подставив выражения (4)–(6) в (3), можно получить следующую систему уравнений:

$$\Omega^2 \rho(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) E \mathbf{u}(\mathbf{G}) - M(\mathbf{G}', \mathbf{G}) \mathbf{u}(\mathbf{G}) = 0, \quad (7)$$

где  $E$  — единичная диагональная матрица,  $M(\mathbf{G}', \mathbf{G})$  — матрица, вид элементов которой приведен в Приложении. В отличие от [6, 14], вид элементов матрицы  $M(\mathbf{G}', \mathbf{G})$  в уравнении (7) носит обобщенный характер и применим при решении задач любой размерности для объемных акустических волн в анизотропной среде.

Пример зонной структуры для фоновых кристаллов с гранецентрированной кубической решеткой (ГЦК) приведен на рис. 1. Расчет проводился для разложения на 729 плоских волн (векторов обратной

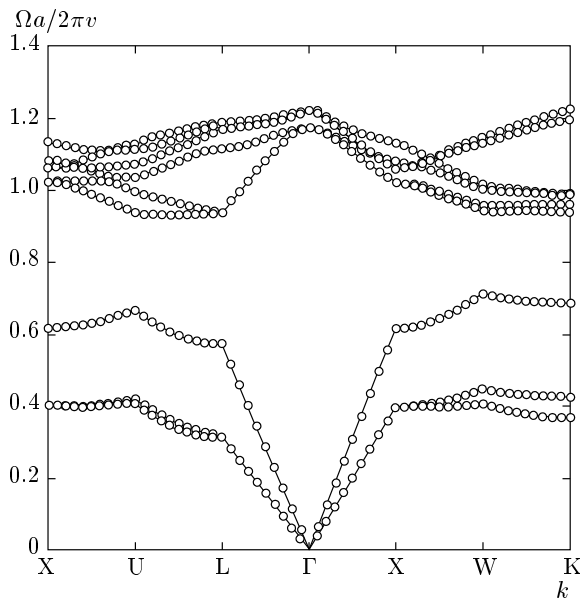


Рис. 1. Зонная структура трехмерного фоновонного кристалла с ГЦК-решеткой

решетки). Рассматриваемый фоновонный кристалл состоит из шаров плавяного кварца  $\text{SiO}_2$  в чистом кремнии. Дисперсионные кривые по аналогии с оптикой приводятся в нормированном по частоте виде

$$\Omega^* = \frac{\Omega a}{2\pi v}, \tag{8}$$

где  $v$  — скорость объемной поперечной звуковой волны в материале матрицы. Как видно на полученной дисперсионной диаграмме, в данной структуре есть довольно широкая полная запрещенная зона для всех объемных акустических мод.

### 3. РАЗДЕЛЕНИЕ АКУСТИЧЕСКИХ МОД И АНАЛИЗ АКУСТИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Решение задачи на собственные числа (7) дает лишь набор точек на дисперсионной диаграмме (рис. 1). Как правильно соединить полученные точки — это уже другая и не менее сложная задача. Независимо от выбранного метода расчета фоновонной структуры, она требует отдельного решения.

В большинстве работ, посвященных акустике фоновонных кристаллов, анализируется только положение полных запрещенных зон. Для двумерных случаев, когда моды частично можно разделить аналитически, иногда выделяют дисперсионные диаграммы мод с вертикальной составляющей вектора смещения и с горизонтальной составляющей вектора

смещения. Встречаются работы, в которых моды разделяются по аналогии с оптикой [15]. В задаче оптики система уравнений Максвелла распадается на независимые подсистемы уравнений для отдельных мод. В таком случае дисперсионные кривые следует разделить только по зонам Бриллюэна. Кривые, принадлежащие разным зонам Бриллюэна, не могут пересекаться, поэтому для разделения таких мод достаточно сортировки решения (собственных чисел). К сожалению, в общем случае, как было показано раньше, по аналогии с оптикой уравнения акустики не распадаются и посчитать все моды по отдельности невозможно. В этом случае следует разделить полученное решение и по принадлежности к определенному типу мод. Алгоритм сортировки решения тут неприменим, так как дисперсионные кривые для разных типов мод могут пересекаться между собой. В упомянутых выше частных двумерных случаях задача упрощается и необходимо разделить между собой решения только для двух горизонтальных объемных мод.

Можно предложить два способа разделения решений по типам мод:

- 1) анализ нормали вектора смещения по отношению к волновому вектору;
- 2) анализ второй производной дисперсионной кривой.

Опишем детальнее основополагающие идеи предложенных нами методов. Первый из предложенных методов основан на анализе конфигурации акустического поля. При решении задачи на собственные числа (7) по аналогии с оптикой собственные векторы обычно отбрасываются как не несущие никакой вспомогательной информации (за исключением случая, когда необходимо визуализировать акустическое поле). Собственные векторы в данном классе задач представляют собой множество из коэффициентов разложения по плоским волнам амплитуды вектора смещения (6). Фактически, метод PWE в явном виде дает возможность получить и проанализировать вектор смещения. Подсчитав сумму членов ряда Фурье в определенной точке можно получить в явном виде амплитуду вектора смещения. Наиболее интересной для анализа конфигурации поля является точка начала координат  $(0,0,0)$ . В этом случае нахождение вектора смещения сводится к сумме всех коэффициентов разложения

$$\mathbf{u}(\mathbf{0}) = \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{u}(\mathbf{G}). \tag{9}$$

В отличие от изотропных сред в общем случае в кристаллах ни одна из трех волн, имеющих за-

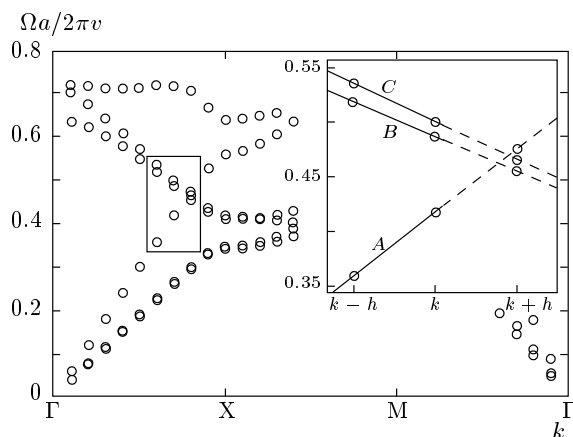


Рис. 2. Соединение точек дисперсионной кривой по минимуму второй производной

данную волновую нормаль  $\mathbf{n}$ , не является ни чисто продольной, ни чисто поперечной. Для чисто продольной волны вектор смещения  $\mathbf{u}$  должен удовлетворять условию

$$\mathbf{u} \times \mathbf{n} = 0, \tag{10}$$

а для чисто поперечной — условию

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0. \tag{11}$$

В анизотропных кристаллах же для подавляющего большинства направлений  $\mathbf{n}$  выполняются условия  $\mathbf{u} \times \mathbf{n} \neq 0$  и  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \neq 0$ . Однако в любом случае одна из трех волн будет иметь вектор смещения, образующий наименьший угол с волновой нормалью по сравнению с векторами смещения двух других волн. Также по компонентам вектора смещения (9) можно определить поляризацию поперечных мод.

Второй из предложенных методов разделения мод предлагает использовать вторую производную дисперсионной кривой для анализа точек пересечения дисперсионных кривых. Значение первой производной дает угол наклона дисперсионной кривой. При выборе следующей точки на дисперсионной кривой предлагается брать точку, для которой излом дисперсионной кривой будет минимальным, т. е. с наименьшим значением второй производной

$$\Omega''(k) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\Omega(k+h) - 2\Omega(k) + \Omega(k-h)}{h^2}, \tag{12}$$

где  $h$  — шаг расчета дисперсионной кривой по волновому вектору.

Работа данного метода проиллюстрирована на рис. 2. Сплошными линиями показаны участки дисперсионных кривых, полученные при предыдущей

итерации. Штриховыми линиями изображены предполагаемые продолжения дисперсионных кривых  $A$ ,  $B$  и  $C$ .

Численный эксперимент показывает, что метод дает хорошие результаты на участках, где дисперсионные кривые пересекаются. Однако может потребоваться дополнительный анализ в точках соприкосновения дисперсионных кривых. Преимуществом данного метода является простота реализации. На основной вопрос, какой именно моде принадлежит данная точка дисперсионной кривой, этот метод ответа не дает. Принадлежность дисперсионной кривой той или иной моде можно предположить на основе знаний про скорость звука в однородной среде матрицы. Например, в твердых телах чаще всего скорость продольного звука больше скорости поперечного, соответственно для продольной моды дисперсионная кривая будет выше. Следовательно, на рис. 2 кривая  $A$  принадлежит продольной моде в первой зоне Бриллюэна, а кривые  $B$  и  $C$  — поперечным модам во второй зоне Бриллюэна.

#### 4. РАЗДЕЛЕНИЕ МОД НА ПРИМЕРЕ ДВУМЕРНОЙ ФОНОННОЙ СТРУКТУРЫ

Для трехмерного случая решение данной задачи практически аналогично, как и для двумерной структуры. Дополнительные затруднения в трехмерном случае могут возникнуть только при определении поляризации поперечных мод в связи со сложной формой контура невырожденной зоны Бриллюэна. Поэтому попробуем решить задачу разделения решений для более простой двумерной фононной структуры.

Рассмотрим двумерную фононную структуру, в которой акустическая волна распространяется с волновым вектором  $\mathbf{k}$  в плоскости  $xy$ . При таких условиях в анизотропной среде могут распространяться три объемных волновых моды: две квазипоперечных (SV — с вертикальной поляризацией, SH — с горизонтальной поляризацией) и одна квазипродольная (L).

Если в выражении (6) принять компоненту волнового вектора  $k_z = 0$ , то для изотропных кристаллов и кристаллов с орторомбической и выше симметрией (например, кубических кристаллов) уравнение (7) примет следующий упрощенный вид:

$$\Omega^2 \rho(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) E \mathbf{u}(\mathbf{G}) - \begin{pmatrix} M_{11}(\mathbf{G}', \mathbf{G}) & M_{12}(\mathbf{G}', \mathbf{G}) & 0 \\ M_{21}(\mathbf{G}', \mathbf{G}) & M_{22}(\mathbf{G}', \mathbf{G}) & 0 \\ 0 & 0 & M_{33}(\mathbf{G}', \mathbf{G}) \end{pmatrix} \times \mathbf{u}(\mathbf{G}) = 0. \quad (13)$$

Это позволяет аналитически разделить моды и записать для них уравнения по отдельности. Для продольной моды L и горизонтальной квазипоперечной моды SH уравнение принимает вид

$$\Omega^2 \rho(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1(\mathbf{G}) \\ u_2(\mathbf{G}) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} M_{11}(\mathbf{G}', \mathbf{G}) & M_{12}(\mathbf{G}', \mathbf{G}) \\ M_{21}(\mathbf{G}', \mathbf{G}) & M_{22}(\mathbf{G}', \mathbf{G}) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} u_1(\mathbf{G}) \\ u_2(\mathbf{G}) \end{pmatrix} = 0. \quad (14)$$

Соответственно для вертикальной квазипоперечной моды SV получаем следующее уравнение:

$$\Omega^2 \rho(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) u_3(\mathbf{G}) - M_{33}(\mathbf{G}', \mathbf{G}) u_3(\mathbf{G}) = 0. \quad (15)$$

В случае симметрии материалов, из которых сформирован фоновый кристалл, ниже орторомбической волновое уравнение не распадается. Также уравнение не распадается для двумерного случая при  $k_z \neq 0$ , что соответствует распространению волн в структуре под углом к плоскости  $xy$ .

Сравним и проанализируем эффективность предложенных методов на самом простом примере двумерного фоновый кристалла с квадратной решеткой (рис. 3а). Особенностью такой структуры является отсутствие полной запрещенной зоны и возможность аналитически выделить моду с вертикальной поляризацией. Рассматриваемый фоновый кристалл сформирован в кремнии в виде цилиндрических стержней из плавленого кварца SiO<sub>2</sub>. Невырожденная зона Бриллюэна [2] принимает вид треугольника (ГХМ на рис. 3б).

Рассмотрим конфигурацию акустического поля для разных мод в первой зоне Бриллюэна. Следует отдельно выделить точки симметрии X и M, а также промежуточную точку посередине отрезка XM (рис. 4). Для анализа удобно изобразить распределение компонент поля не относительно системы координат фоновый кристалла, а разложить поле на продольную и поперечную составляющие относительно волнового вектора.

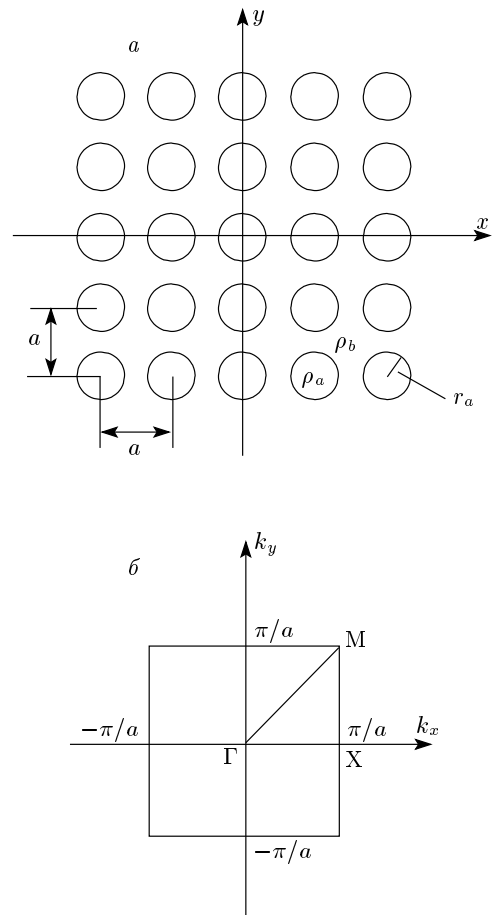


Рис. 3. Двумерная квадратная решетка фоновый кристалла (а), первая зона Бриллюэна для этой решетки (б)

Моделирование показывает, что для чистых направлений X и M моды сохраняют свой явно выраженный продольный или поперечный характер. Иначе дело обстоит на отрезке XM. На рис. 4а,б приведены конфигурации поля составляющих квазипоперечной моды SH, а на рис. 4в,г — квазипродольной моды L на этом неоднозначном участке. Амплитуды продольной и поперечной составляющих для мод SH и L становятся соизмеримыми (рис. 4). Как видно из приведенных картин распределения поля, на этом участке происходит вырождение и по конфигурации поля однозначно определить тип моды становится практически невозможно. При анализе дисперсионных кривых это приводит к скачкам с одной дисперсионной ветви на другую в определенных точках на неоднозначном участке. Как только неоднозначный участок заканчивается, скачки исчезают.

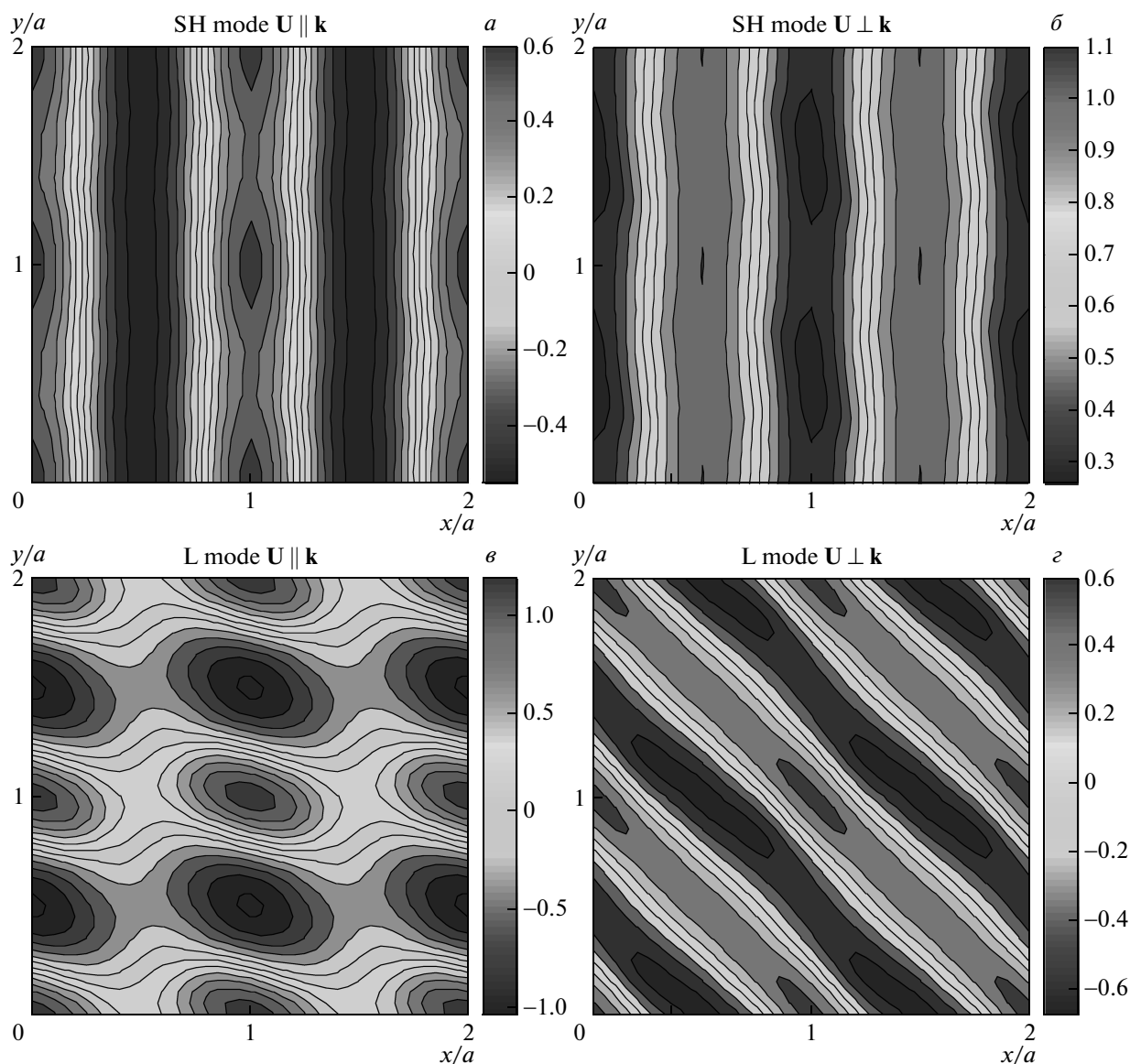


Рис. 4. Распределение поля горизонтальных мод на отрезке XM

Дисперсионные кривые, построенные по анализу второй производной, как и ожидалось, особо не отличаются от построенных методом анализа вектора смещения. Метод не приводит к ошибкам, за исключением частных случаев соприкосновения дисперсионных кривых. В таких точках возможен ошибочный переход на чужую дисперсионную ветвь.

Вполне удовлетворительный результат можно получить, скомбинировав оба метода разделения решений по модам. На участках, где однозначно можно определить тип моды по полю, применялся первый метод — метод анализа вектора смещения. На

отрезке XM при невозможности проанализировать конфигурацию поля выбиралась наиболее вероятная точка по минимуму второй производной дисперсионной кривой (второй метод). Пример результата работы предложенного алгоритма для описанной выше простой двумерной структуры представлен на рис. 5. При расчете использовалось разложение на 1089 плоских волн.

### 5. ВЫВОДЫ

Предложенная форма записи дисперсионной задачи позволяет легко проанализировать зонную

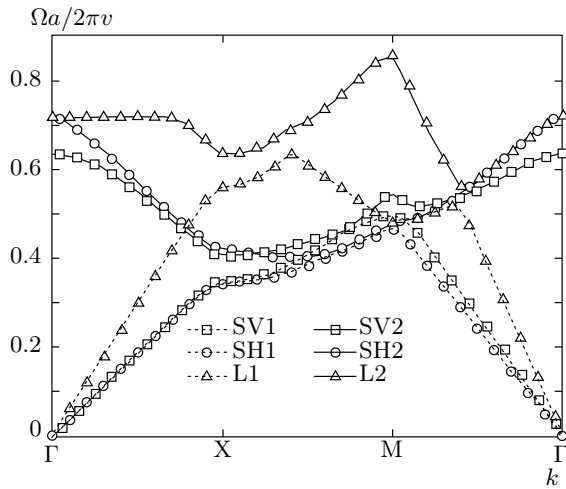


Рис. 5. Дисперсионная диаграмма двумерного фоновонного кристалла с разделенными модами

структуру фоновонных кристаллов любой размерности и конфигурации, образованных в анизотропных материалах. Поскольку в общем случае уравнения акустики не распадаются на независимые подсистемы, возникает дополнительная задача о разделении решений по модам (ветвям). В трехмерном случае постановка задачи разделения мод более сложная, однако сохраняется прямая аналогия с двумерным случаем. Поэтому был проведен анализ решений на примере двумерной структуры. Более того, для двумерных систем существуют условия, когда некоторые элементы матрицы  $M(\mathbf{G}', \mathbf{G})$  становятся равными нулю и система уравнений распадается на две независимых подсистемы. В результате аналитически отделяется поперечная мода с вертикальной поляризацией.

Оба предложенных метода построения дисперсионных кривых имеют свои ограничения. Анализ вида акустического поля в зависимости от направления волнового вектора не всегда позволяет определить моду по прямому признаку продольности или поперечности ее акустического поля. Однако в случае совпадения направления волнового вектора с направлением симметрии фоновонного кристалла по предложенной методике можно однозначно определить, какой из мод принадлежит точка на данной дисперсионной кривой.

Анализ акустического поля может быть ошибочным и приводить к скачкам в случае вырождения поля при распространении упругих волн вдоль направлений, которые не совпадают с направлениями симметрии фоновонного кристалла. Анализ второй про-

изводной помогает избежать ошибки в точках пересечения множества дисперсионных кривых, однако иногда ошибка появляется в случае, когда кривые соприкасаются. Поэтому было предложено за основу взять метод анализа акустического поля, а на участках, где возникает неопределенность, анализировать вторую производную.

К сожалению, однозначно разделить решения задачи на всем участке дисперсионной кривой невозможно. Но, тем не менее, предложенные методы помогают свести к минимуму время на построение и анализ полученных дисперсионных кривых. Еще больше данная задача усложняется при низкой симметрии материалов, формирующих фотонный кристалл, и при переходе к трехмерному случаю.

### ПРИЛОЖЕНИЕ

$$M_{11}(\mathbf{G}', \mathbf{G}) = (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \begin{pmatrix} C_{11}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{61}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{51}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \\ C_{16}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{66}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{56}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \\ C_{15}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{65}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{55}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \end{pmatrix} \times (\mathbf{k} + \mathbf{G}')^T,$$

$$M_{12}(\mathbf{G}', \mathbf{G}) = (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \begin{pmatrix} C_{16}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{66}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{56}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \\ C_{12}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{62}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{52}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \\ C_{14}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{64}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{54}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \end{pmatrix} \times (\mathbf{k} + \mathbf{G}')^T,$$

$$M_{13}(\mathbf{G}', \mathbf{G}) = (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \begin{pmatrix} C_{15}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{65}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{55}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \\ C_{14}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{64}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{54}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \\ C_{13}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{63}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{53}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \end{pmatrix} \times (\mathbf{k} + \mathbf{G}')^T,$$

$$M_{21}(\mathbf{G}', \mathbf{G}) = (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \begin{pmatrix} C_{61}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{21}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{41}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \\ C_{66}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{26}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{46}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \\ C_{65}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{25}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{45}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \end{pmatrix} \times (\mathbf{k} + \mathbf{G}')^T,$$



$$M_{22}(\mathbf{G}', \mathbf{G}) = (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \begin{pmatrix} C_{66}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{26}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{46}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \\ C_{62}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{22}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{42}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \\ C_{64}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{24}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{44}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \end{pmatrix} \times (\mathbf{k} + \mathbf{G}')^T,$$

$$M_{23}(\mathbf{G}', \mathbf{G}) = (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \begin{pmatrix} C_{65}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{25}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{45}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \\ C_{64}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{24}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{44}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \\ C_{63}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{23}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{43}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \end{pmatrix} \times (\mathbf{k} + \mathbf{G}')^T,$$

$$M_{31}(\mathbf{G}', \mathbf{G}) = (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \begin{pmatrix} C_{51}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{41}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{31}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \\ C_{56}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{46}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{36}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \\ C_{55}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{45}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{35}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \end{pmatrix} \times (\mathbf{k} + \mathbf{G}')^T,$$

$$M_{32}(\mathbf{G}', \mathbf{G}) = (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \begin{pmatrix} C_{56}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{46}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{36}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \\ C_{52}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{42}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{32}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \\ C_{54}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{44}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{34}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \end{pmatrix} \times (\mathbf{k} + \mathbf{G}')^T,$$

$$M_{33}(\mathbf{G}', \mathbf{G}) = (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \begin{pmatrix} C_{55}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{45}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{35}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \\ C_{54}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{44}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{34}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \\ C_{53}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{43}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) & C_{33}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) \end{pmatrix} \times (\mathbf{k} + \mathbf{G}')^T.$$

## ЛИТЕРАТУРА

1. J. D. Joannopoulos, *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*, Princeton Univ. Press (2008).
2. K. Sakoda, *Optical Properties of Photonic Crystals*, Springer (2001).
3. K. Yasumoto, *Electromagnetic Theory and Applications for Photonic Crystals*, CRC Press (2006).
4. J.-M. Lourtioz, *Photonic Crystals. Towards Nanoscale Photonic Devices*, Springer, Berlin (2008).
5. M. S. Kushwaha, P. Halevi, L. Dobrzynski, and B. Djafari-Rouhani, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2022 (1993).
6. M. S. Kushwaha, P. Halevi, G. Martinez, L. Dobrzynski, and B. Djafari-Rouhani, *Phys. Rev. B* **49**, 2313 (1994).
7. M. Kafesaki and E. N. Economou, *Phys. Rev. B* **60**, 11993 (1999).
8. I. E. Psarobas and N. Stefanou, *Phys. Rev. B* **62**, 278 (2000).
9. Zhengyou Liu, C. T. Chan, and Ping Sheng, *Phys. Rev. B* **62**, 2446 (2000).
10. Jun Mei, Zhengyou Liu, Jing Shi, and Decheng Tian, *Phys. Rev. B* **67**, 245107 (2003).
11. D. Garica-Pablos, M. Sigalas, F. R. Montero de Espinosa, M. Kafesaki, and N. Garcia, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4349 (2000).
12. Y. Tanaka and S. Tamura, *Phys. Rev. B* **58**, 7958, 1998.
13. Y. Tanaka, Y. Tomoyasu, and S. Tamura, *Phys. Rev. B* **62**, 7387 (2000).
14. Tsung-Tsong Wu, Zi-Gui Huang, and S. Lin, *Phys. Rev. B* **69**, 094301 (2004).
15. З. А. Пятакова, Г. В. Белокопытов, *Вестник МГУ, физика, астрон.*, № 3, с. 46 (2009).
16. Hua Ma, Shaobo Qu, and Zhuo Xu, *J. Appl. Phys.* **103**, 104904 (2008).
17. В. И. Балакшиев, В. Н. Парыгин, Л. Е. Чирков, *Физические основы акустооптики*, Радио и связь, Москва (1985).
18. L. N. Magdich and V. Ya. Molchanov, *Acousto-Optic Devices and Their Applications*, Gordon and Breach, New York (1989).
19. A. Taflove, *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*, Artech House, Norwood (1995).
20. D. M. Sullivan, *Electromagnetic Simulation Using the FDTD Method*, IEEE Press (2000).
21. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, т. VII, Наука, Москва (1987).
22. В. А. Красильников, В. В. Крылов, *Введение в физическую акустику*, Наука, Москва (1984).
23. В. А. Auld, *Acoustic Fields and Waves in Solids*, Vol. 1, J. Wiley & Sons (1973).
24. Л. М. Бреховских, О. А. Годин, *Акустика слоистых сред*, Наука, Москва (1989).