DOI: https://doi.org/10.30898/1684-1719.2026.3.15
УДК: 535.42

МЕТОД САМОСОГЛАСОВАННЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ АНАЛИЗА СЛАБОГО РАССЕЯНИЯ НА ДВУМЕРНЫХ РЕШЕТКАХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СФЕР

А.Ю. Ветлужский

**Институт физического материаловедения СО РАН,
670047, Улан-Удэ, ул. Сахьяновой, д. 6**

Статья поступила в редакцию 27 февраля 2026 г.

Аннотация. В статье предложен и проанализирован метод самосогласованных уравнений, предназначенный для исследования дифракции электромагнитных волн на фотонно-кристаллических структурах, представляющих собой периодические двумерные решетки диэлектрических сфер. Моделирование выполнено в рамках скалярного приближения, что позволило существенно упростить математический аппарат для систем, характеризующихся слабым контрастом диэлектрической проницаемости и субволновыми размерами рассеивающих частиц (радиус сфер меньше длины волны падающего излучения). Ключевым преимуществом разработанного подхода является явный учет эффектов многократного рассеяния между всеми элементами решетки, что обеспечивает эффективное определение амплитуд рассеянных волн в дальней зоне и позволяет анализировать условия формирования фотонных запрещенных зон (полос пропускания и непропускания). Для валидации теоретической модели проведено детальное сопоставление расчетных спектральных характеристик, в частности коэффициентов пропускания, с результатами строгого численного моделирования, выполненного методом конечных элементов. Показано, что метод самосогласованных уравнений обеспечивает высокую точность в длинноволновой части спектра, когда длина волны излучения превышает период структуры, а также в случае малых значений диэлектрической проницаемости материала сфер. При этом указанный метод не накладывает ограничений на соотношения между периодом расположения элементов в решетке и радиусом сфер и оказывается работоспособным при весьма плотной компоновке структуры. В работе определены границы применимости метода, связанные с увеличением контраста показателя преломления и уменьшением отношения длины волны к периоду решетки, что дает четкие критерии для его использования. Разработанный подход может быть успешно применен для быстрого предварительного анализа, оптимизации параметров и проектирования плоских фотонно-кристаллических структур и метаповерхностей на основе диэлектрических сфер, особенно в условиях слабого рассеяния и умеренного контраста показателей преломления, представляющих практический интерес для современных оптических устройств.

Ключевые слова: фотонные кристаллы, дифракция на сфере, метод самосогласованных уравнений, субволновые частицы, показатель преломления.

Автор для переписки: Ветлужский Александр Юрьевич, vay@ipms.bscnet.ru

Финансирование: Работа выполнена в рамках государственного задания ИФМ СО РАН № FWSF-2024-0008

Введение

Задача дифракции электромагнитных волн на структурах с периодически меняющейся диэлектрической проницаемостью, в настоящее время часто называемых фотонными кристаллами, представляет собой фундаментальную проблему современной оптики и фотоники. В частности, трехмерные фотонные кристаллы, обладающие пространственной периодичностью диэлектрической проницаемости во всех направлениях, открывают уникальные возможности для управления распространением света, включая формирование полных фотонных запрещенных зон [1]. Среди их различных конфигураций особый интерес вызывают структуры, состоящие из периодически расположенных сферических частиц, которые служат моделью как для теоретических исследований, так и для практических применений в области создания оптических волноводов, сенсоров, беспороговых лазеров, метаматериалов и т.д.

В последние годы значительное внимание уделяется системам, в которых радиус сфер меньше длины волны падающего излучения, а материал частиц характеризуется относительно небольшой диэлектрической проницаемостью. Такие условия позволяют существенно упростить математический аппарат, переходя от полного векторного описания к скалярному приближению, применимому для анализа рассеяния в дальней зоне объекта и определения основных закономерностей формирования дифракционных картин. Скалярный подход оказывается корректным, когда рассеивающие элементы не вносят существенной поляризационной анизотропии, а интерес сосредоточен на амплитудно-фазовых распределениях. Работы последних лет, такие как исследования по оптимизации метаповерхностей из субволновых диэлектрических сфер [2,3], а также анализ коллективных резонансов в массивах диэлектрических наночастиц в квазистатическом пределе [4], подтверждают эффективность скалярных моделей для анализа систем со слабым контрастом показателя преломления. В особенности это может быть отнесено к ситуации, когда сферические элементы располагаются в одной плоскости, формируя фотонно-кристаллические поверхности, характеризующиеся особыми электродинамическими свойствами.

Следует отметить, что, несмотря на активное изучение различных двумерных фотонных кристаллов, задачи дифракции на периодических массивах сфер остаются менее разработанными. Существующие методы, включая метод конечных элементов, метод конечных разностей во временной области (FDTD) и строгие теории связанных волн (например, метод T-матриц), часто требуют значительных вычислительных ресурсов. В данном случае перспективным представляется применение метода самосогласованных уравнений, успешно апробированного ранее для двумерных решеток из цилиндрических элементов [5]. Этот метод, основанный на учете многократного рассеяния между элементами структуры, позволяет эффективно определять амплитуды рассеянных фотонным кристаллом волн, а также анализировать условия формирования запрещенных зон.

В настоящей статье рассматривается дифракция электромагнитных волн на системе периодически расположенных в одной плоскости сфер в скалярном приближении. Цель работы – развить метод самосогласованных уравнений для данного случая, проанализировать влияние параметров решетки и свойств материала на дифракционные характеристики и оценить границы применимости скалярной модели. Теоретические выводы сопоставляются с результатами, полученными строгим численным методом, что позволяет обосновать адекватность предлагаемого подхода для проектирования фотонно-кристаллических поверхностных структур со слабым рассеянием.

1. Постановка задачи и реализация метода самосогласованных уравнений

Представим полное поле плоской волны, падающей на систему N сферических, расположенных в одной плоскости элементов одинакового радиуса a в виде суммы первичного и рассеянного на элементах полей.

Первичное поле представим в виде разложения по сферическим волновым функциям [6]:

$$u_0\left(r,\varphi,\theta\right)=\frac{E_0\cos\varphi}{ik^2r}\sum_{n=1}^{\infty}i^n\,\frac{2n+1}{n\left(n+1\right)}\psi_n\left(kr\right)P_n^1(\cos\theta),\tag{1}$$

где E_0 – амплитудный множитель, r – радиальная координата, φ – азимутальный угол, θ – угол места, определяющие положение некоторой точки в сферической системе координат, волновая функция $\psi_n(kr)$ может быть выражена через функции Бесселя дробного порядка:

$$\psi_n\left(kr\right)=\sqrt{\frac{\pi}{2kr}}J_{n+\frac{1}{2}}\left(kr\right),$$

а присоединенные функции Лежандра (или шаровые функции) вида $P_n^m(x)$ определяются полиномами Лежандра $P_n(x)$ следующим образом:

$$P_n^m(b) = \left(1-b^2\right)^{m/2} \frac{\partial^m P_n(b)}{\partial b^m}.$$

Будем искать поля, рассеянные на сферических элементах, в виде [6]:

$$u_{pac}(r,\varphi,\theta) = \\ = \frac{E_0}{ik^2 r_s} \sum_{s=1}^{N} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{(n-m)!}{(n+m)!} \right\}^{\frac{1}{2}} A_{mn}^{ext\,s} \psi'_n(ka) \xi_n(kr_s) P_n^m(\cos\theta_s) e^{im\varphi_s}, \tag{2}$$

где $A_{mn}^{ext\,s}$ – неизвестные функции, описывающие возбуждение s-ой сферы и определяемые из граничных условий, штрих у функции $\psi'_n(ka)$ означает дифференцирование по аргументу, а волновые функции $\xi_n(kr_s)$ выражаются через функции Ханкеля первого рода дробного порядка:

$$\xi_n(kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} H_{n+\frac{1}{2}}^{(1)}(kr).$$

Поле внутри сферических элементов, которые полагаем диэлектрическими, запишем в виде, аналогичном (2):

$$u_{np}(r,\varphi,\theta) = \\ = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{(n-m)!}{(n+m)!} \right\}^{\frac{1}{2}} A_{mn}^{in\,s} \psi_n(k_{c\phi} r_s) \xi'_n(k_{c\phi} a) P_n^m(\cos\theta_s) e^{im\varphi_s}, \tag{3}$$

где неизвестные коэффициенты $A_{mn}^{in\,s}$ описывают амплитудные характеристики поля внутри элементов, а $k_{c\phi} = k\sqrt{\varepsilon\mu}$, где ε и μ – диэлектрическая и магнитная проницаемости материала рассеивателей.

Отметим, что выражения (2) и (3) записаны в локальных системах координат, связанных с некоторой s-ой сферой. Для удовлетворения граничным условиям на ее поверхности и нахождения величин коэффициентов A_{mn}^{s} необходимо волновые функции остальных элементов ФК выразить через волновые функции этой сферы, для чего по аналогии с [5] используем теорему сложения для сферических функций. Пользуясь обозначениями, приведенными на рис. 1, запишем теорему сложения в следующем виде [7]:

$$Z_q\left(kr_j\right)P_q^p(\cos\theta_j)=\sum_{n=p}^{\infty}Q_{pnpq}\left(r_{js},\theta_{js}\right)\sqrt{\frac{\pi}{2kr_s}}J_{n+\frac{1}{2}}\left(kr_s\right)P_n^p(\cos\theta_s), \tag{4}$$

где j, s = 1,2, $j \neq s$, $Z_q\left(x\right)$ – произвольная сферическая функция, а коэффициенты Q_{pnpq} выражаются следующим образом:

$$Q_{pnpq}=\frac{2i^{n-q}}{\frac{2}{2n+1}\frac{\left(n+p\right)!}{\left(n-p\right)!}}\sum_{m=|n-q|}^{n+q}i^m b_m^{qpnp}Z_m\left(kr_{js}\right)P_m(\cos\theta_{js}),$$

где, в свою очередь, функции b_m^{qpnp} имеют вид:

$$b_m^{qpnp}=\left(-1\right)^p\left(\frac{\left(q+p\right)!\left(n+p\right)!}{\left(q-p\right)!\left(n-p\right)!}\right)^{\frac{1}{2}}\left(qn00\middle|\left(q-n\right),0\right)\left(qnp,-p\middle|q-n,0\right).$$

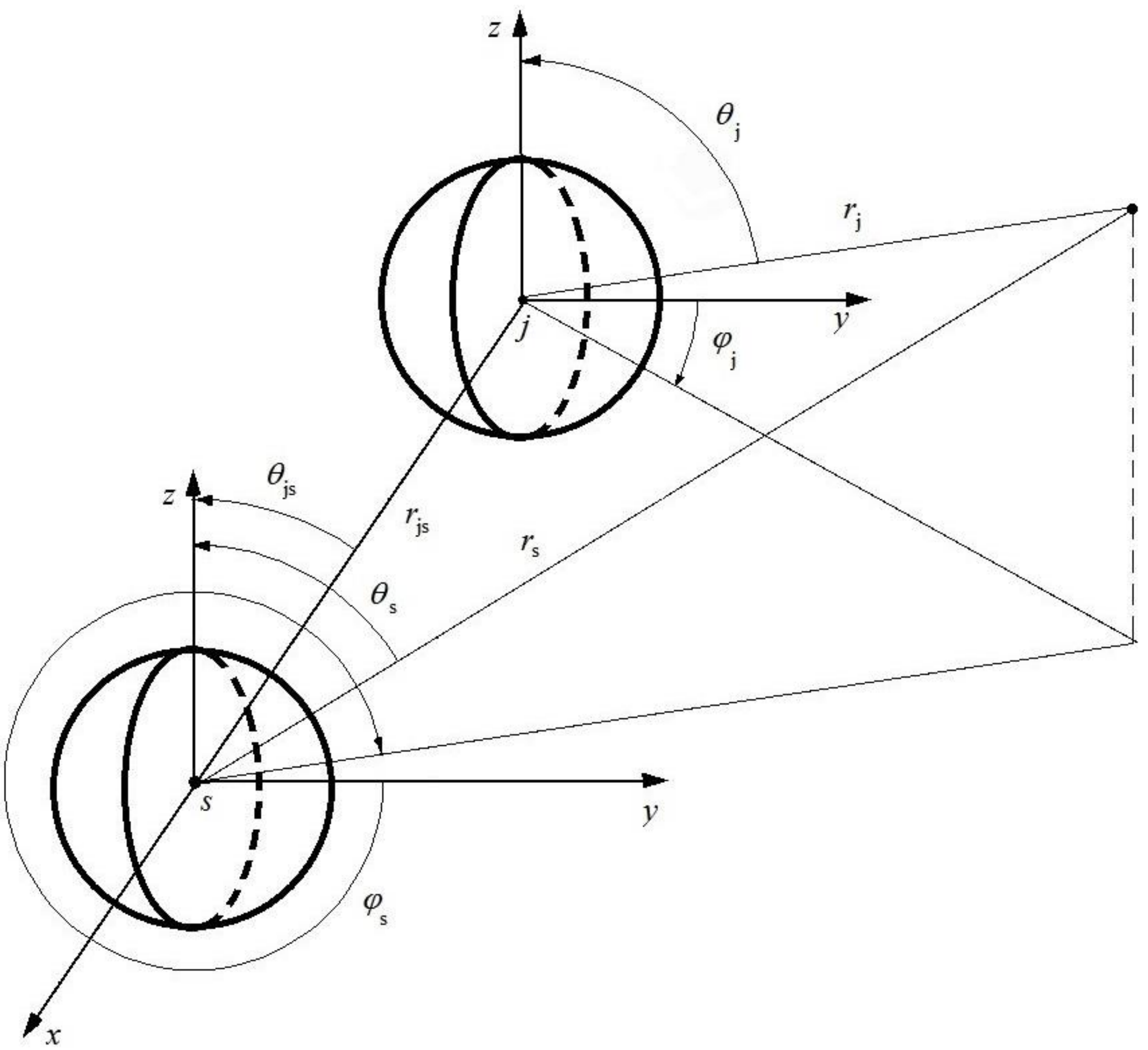

Рис. 1. Геометрическая иллюстрация к теореме сложения
для сферических функций.

В последнем выражении символами $(abcd|a-b, c+d)$ обозначены коэффициенты Клебша-Гордана [8].

Применяя теорему сложения для сферических функций (4) к (2) и – для единообразия представления – к (1) и удовлетворяя граничным условиям на поверхности сфер, которые для волн E типа, что в данном случае означает не равенство нулю радиальной компоненты электрического поля, формулируются следующим образом:

$$k^2\left(u_0+u_{рас}\right)=k_{сф}^2 u_{пр},$$
$$\frac{\partial\left(u_0+u_{рас}\right)}{\partial r}=\frac{\partial u_{пр}}{\partial r},$$
$$при\, r=a,$$

получим следующую систему N линейных уравнений относительно неизвестных коэффициентов $A_{mn}^{ext\,s}$:

$$A_{mn}^{ext\,s} + \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq s}}^{N} \sum_{q+|m|}^{\infty} \alpha_{mnq}^{(j,s)} A_{mq}^{ext\,j} = f_{mn}^{s}, \quad s = 1\ldots N, \qquad (5)$$

где коэффициенты $\alpha_{mnq}^{(j,s)}$ выражаются через волновые функции двух сфер следующим образом:

$$\alpha_{mnq}^{(j,s)} = \frac{\Delta_n^1(s)}{\Delta_n^2(s)} \frac{\psi_n'(ka_j)}{\psi_n'(ka_s)} Q_{mnmq},$$

а правые части уравнений имеют вид:

$$f_{mn}^{s} = \frac{E_0}{ik} e^{iknr_s} \frac{2n+1}{n(n+1)} (-1)^n \frac{(1-m)!}{(1+m)!} P_n^s(\cos\theta_s) e^{im\varphi_s} \frac{\Delta_n^1(s)}{\Delta_n^2(s)\psi_n'(ka_s)}.$$

Матричные коэффициенты в двух последних выражениях определяются как:

$$\Delta_n^1(s) = \begin{vmatrix} k\psi_n(ka_s) & \psi_n'(ka_s) \\ k_{сф}\psi_n(k_{сф}a_s) & \psi_n'(k_{сф}a_s) \end{vmatrix},$$

$$\Delta_n^2(s) = \begin{vmatrix} k\xi_n(ka_s) & \xi_n'(ka_s) \\ k_{сф}\psi_n(k_{сф}a_s) & \psi_n'(k_{сф}a_s) \end{vmatrix}.$$

2. Обсуждение результатов

Используя полученные выражения, определим спектральные характеристики поля, создаваемого плоской волной, прошедшей через простейшие двумерные ФК, образованные сферическими элементами.

На рис. 2 представлены результаты численного моделирования спектра пропускания ФК, состоящего из диэлектрических элементов, образующих в пространстве двумерную решетку с плотной компоновкой элементов, сформированную в двадцатипятиэлементную (5 на 5) структуру. На рисунке представлены результаты сопоставления данных, полученных вышеизложенным методом, и результаты строгого численного моделирования методом конечных элементов, выполненного с использованием программной платформы Comsol Multiphysics.

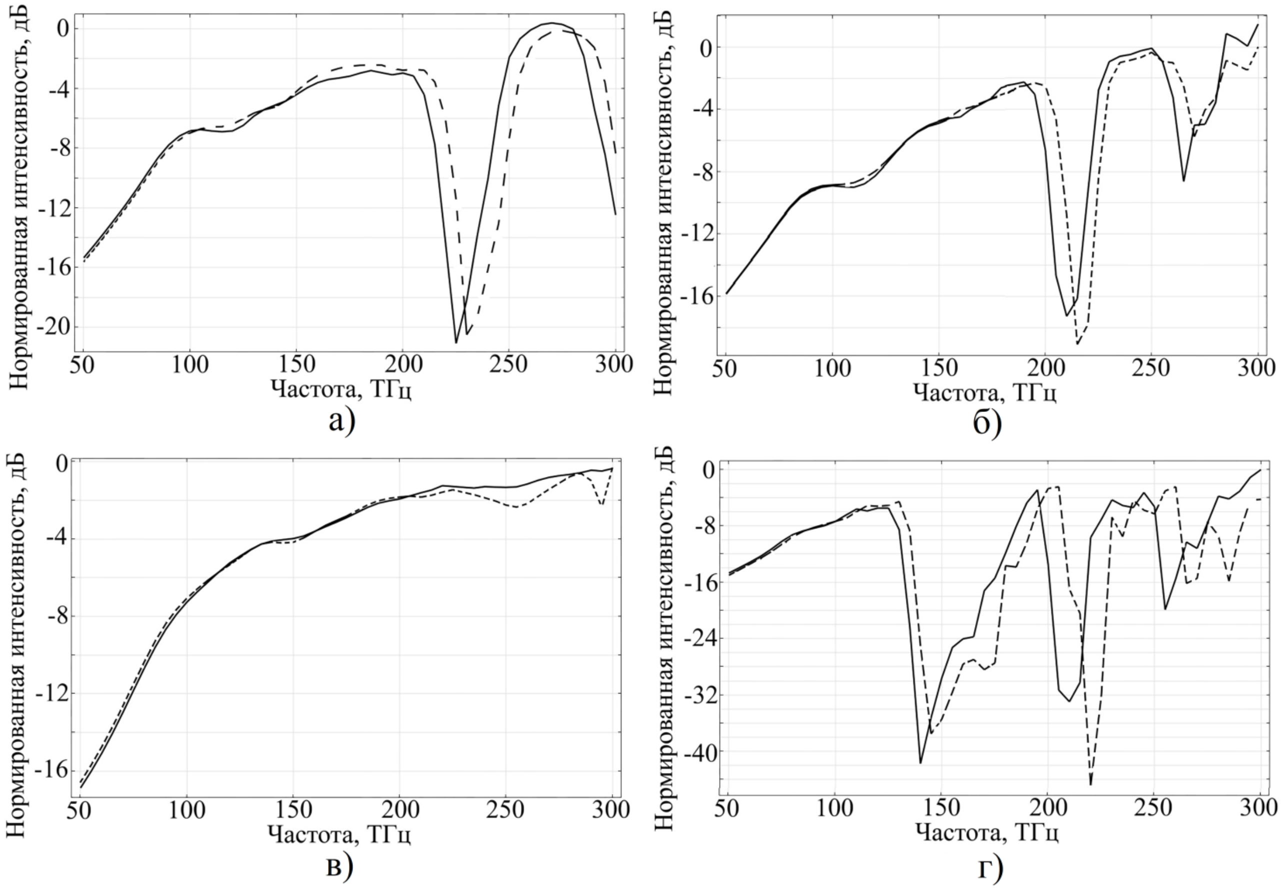

Рис. 2. Результаты численного моделирования спектров пропускания фотонных кристаллов, образованных сферическими диэлектрическими элементами. Сплошные кривые получены методом самосогласованных уравнений, пунктирные – методом конечных элементов.
а) d = 1 μm, a = 0.4 μm, ε = 3.2; б) d = 1.2 μm, a = 0.4 μm, ε = 3.2;
в) d = 1.2 μm, a = 0.2 μm, ε = 3.2; г) d = 1 μm, a = 0.4 μm, ε = 9.

Анализ полученных данных позволяет сделать следующие выводы. Во-первых, начальные участки всех полученных различными методами кривых практически полностью совпадают, что свидетельствует о хорошем согласии обоих методов в длинноволновой области рассматриваемого диапазона. Во-вторых, метод самосогласованных уравнений дает достаточно хорошую точность при оценке местоположения первой запрещенной зоны при малой диэлектрической проницаемости элементов решетки. В-третьих, соотношение периода и длины волны является основным параметром, определяющим корректность используемого метода. Следует отметить, что ранее на это указывалось и при исследовании двумерных фотонных кристаллов [9]. В-четвертых, уменьшение радиуса по отношению к длине волны существенно увеличивает частотный диапазон, в котором точность предлагаемого метода оказывается сопоставима с точностью метода конечных элементов. И наконец, увеличение показателя преломления материала элементов существенно снижает точность метода самосогласованных уравнений применительно к рассматриваемой в работе ситуации.

Заключение

В данной статье развит метод самосогласованных уравнений для анализа дифракции электромагнитных волн на двумерной фотонно-кристаллической структуре, состоящей из периодически расположенных в одной плоскости диэлектрических сфер. Исследование проведено в рамках скалярного приближения, что позволило существенно упростить математический аппарат при сохранении адекватности описания для систем со слабым контрастом диэлектрической проницаемости и субволновыми размерами рассеивающих элементов.

Сравнение результатов с данными строгого численного моделирования методом конечных элементов показало, что предложенный подход обеспечивает высокую точность в области спектра, где длина волны излучения как минимум двукратно превосходит период расположения элементов, а также при малых значениях диэлектрической проницаемости материала сфер.

Таким образом, разработанный метод самосогласованных уравнений представляет собой эффективный инструмент для предварительного анализа и проектирования плоских фотонно-кристаллических структур на основе диэлектрических сфер, особенно в случаях слабого рассеяния и умеренного контраста показателей преломления.

Финансирование: Работа выполнена в рамках государственного задания ИФМ СО РАН № FWSF-2024-0008

Литература

1. Pendry J.B., Schurig D., Smith D. R. Controlling Electromagnetic Fields // Science. – 2006. – V. 312. – P. 1780–1782. https://doi.org/10.1126/science. 1125907
2. Yu N., Capasso F. Flat optics with designer metasurfaces // Nature Materials. – 2014. – V. 13. – P. 139–150. https://doi.org/10.1038/nmat3839
3. Bakker R.M., Permyakov D., Yu Y.F. et al. Magnetic and electric hotspots with silicon nanodimers // Nano Letters. – 2015. – V. 15. – P. 2137–2142. https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.5b00128
4. Krasnok A., Tymchenko M., Alu A. Nonlinear metasurfaces: a paradigm shift in nonlinear optics // Materials Today. – 2018. – V. 21. – P. 8–21. https://doi.org/10.1016/j.mattod.2017.06.007
5. Ветлужский А.Ю. Метод самосогласованных уравнений при решении задач рассеяния волн на системах цилиндрических тел // Компьютерные исследования и моделирование. – 2021. – Т. 13. – № 4. – С.725–733. https://doi.org/10.20537/2076-7633-2021-13-4-725-733
6. Хенл Х., Мауэ А., Вестпфаль К. Теория дифракции. – М.: Мир, 1964. – 428 с.
7. Иванов Е.И. Дифракция электромагнитных волн на двух телах. – Минск: Наука и техника, 1968. – 584 с.
8. Смородинский Я. А., Шелепин Л. А. Коэффициенты Клебша-Гордана с разных сторон // Успехи физических наук. – 1972. – Т. 106. – С. 3–45. https://doi.org/10.3367/UFNr.0106.197201a.0003
9. Ветлужский А.Ю. Локализация электромагнитных волн в регулярных и случайных дискретных средах. – М.: Техносфера, 2025. – 283 с.

Для цитирования:

Ветлужский А.Ю. Метод самосогласованных уравнений для анализа слабого рассеяния на двумерных решетках диэлектрических сфер. // Журнал радиоэлектроники. – 2026. – № 3. https://doi.org/10.30898/1684-1719.2026.3.15