

PACS numbers: 42.70.Qs, 61.46.Hk, 71.15.Dx, 71.15.Mb, 71.45.Gm, 78.20.Ci, 78.67.Bf

Електронна структура та діелектрична матриця модельних фотонних кристалів, складених із волокон: розрахунки із перших принципів

Р. М. Балабай, Д. Ю. Грицуля, А. В. Здешиц, О. Ю. Тарасова

*Криворізький педагогічний інститут
ДВНЗ «Криворізький національний інститут»,
просп. Гагаріна 54,
50086 Кривий Ріг, Україна*

Статтю присвячено властивостям електронної підсистеми модельних фотонних кристалів з формувальними елементами у вигляді волокон пористого GaAs або SiO₂ з графеновими шарами. Теоретичний розрахунок на основі теорії функціоналу електронної густини та методу псевдопотенціалу із перших принципів є головною метою дослідження. З використанням авторського програмного комплексу було розраховано просторовий розподіл густини валентних електронів, розподіл густини електронних станів, Кулонів потенціал вздовж кристалу, діелектричну матрицю. Визначено вплив геометричних параметрів укладання формувальних елементів модельних фотонних кристалів на їхні електронні енергетичні зони, густину електронних станів у зонах, просторовий розподіл електронної густини, зонну структуру діелектричної матриці. Обчислено макроскопічну діелектричну проникність.

The paper is concerned with the properties of the electron subsystem of the model photonic crystals formed by fibres of the porous GaAs or graphene layers on SiO₂. The main research methods are theoretical calculations based on both the density functional theory and the *ab initio* pseudopotential method. Using author's software, the spatial distribution of valence electron density, the distribution of density of electron states, the Coulomb potential along the vector in the crystal, dielectric matrix are calculated. The influence of geometrical parameters of packing of the photonic crystal fibres on the crystal electronic energy bands, the density of the electron states, the spatial distribution of the electron density, the dielectric matrix band structure are determined. Macroscopic dielectric constant is calculated.

Стаття посвящена свойствам електронної підсистеми модельних фотонних кристалів з формуючими елементами в виде волокон пори-

стого GaAs или SiO₂ с графеновыми слоями. Теоретический расчёт на основе теории функционала электронной плотности и метода псевдопотенциала из первых принципов является главным методом исследования. С использованием авторского программного комплекса были рассчитаны пространственное распределение плотности валентных электронов, распределение плотности электронных состояний, кулоновский потенциал вдоль кристалла, диэлектрическая матрица. Определено влияние геометрических параметров упаковки формирующих элементов модельных фотонных кристаллов на их электронные энергетические зоны, плотность электронных состояний в зонах, пространственное распределение электронной плотности, зонную структуру диэлектрической матрицы. Рассчитана макроскопическая диэлектрическая проницаемость.

Ключові слова: розрахунки з перших принципів, фотонний кристал, просторовий розподіл електронної густини, макроскопічна діелектрична проникність, діелектрична матриця.

Keywords: *ab initio* calculations, photonic crystal, spatial distribution of electron density, macroscopic dielectric constant, dielectric matrix.

Ключевые слова: расчёты из первых принципов, фотонный кристалл, пространственное распределение электронной плотности, макроскопическая диэлектрическая проницаемость, диэлектрическая матрица.

(Отримано 1 вересня 2015 р.; після доопрацювання — 20 листопада 2015 р.)

1. ВСТУП ТА ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Рік 1987 був значимим для становлення фотоніки — у цьому році в одному ж тому томі журналу ‘Physical Review Letters’ були опубліковані дві установчі статті [1, 2], що заклали фундамент фотоніки. З того часу і до сьогодні інтерес дослідників до сфери фотонних кристалів, не припиняючись, зростає [3, 4, 5]. Фотонні кристали — штучні матеріали, здатні керувати світлом, їх унікальні властивості закладені у впорядковано розташованих структурних елементах кристалу [1, 2]. Саме, внаслідок упорядкованості елементів-розсіювачів фотонні кристали називають кристалами. Вони мають багато аналогій з твердотільними кристалами. Найбільш важливими з них є фотонні зони, котрі є потужною основою для розуміння поведінки світла в складній фотонній структурі. Фотонні кристали мають великий потенціал для новітніх розробок в оптиці, оптоелектроніці, μ -хвильових технологій, квантовій інженерії, біофотоніці, акустиці. Фотонні кристали мають строго впорядковане розташування формувальних структурних елементів в одному, двох або трьох напрямках. Такі формувальні елементи взагалі вважаються монодисперсними в гео-

метричних та ідентичними в діелектричних параметрах [1]. Завдяки періодичності фотонні кристали мають зонну структуру в електромагнетному спектрі, яка складається з областей прозорості для електромагнетного випромінення і так званих стоп-зон, пов'язаних (у простому випадку малого діелектричного контрасту) з Брегговим відбиттям світла від систем площин кристалічної ґратниці фотонного кристала. У результаті поза стоп-зонами транспорт світла носить балістичний характер, а в області стоп-зон спостерігається локалізація світла [2]. На цьому проміжку світло не може входити в кристал і електрони не можуть випромінювати фотони всередині кристалу. Легування фотонних кристалів домішкою оптичного атома або дефектом створює ситуацію, що викликає локалізацію резонансного фотона. Ці явища уможливають контролювати поширення світла і випромінення. Інші унікальні явища зв'язуються із складною будовою фотонних зон. Ретельна розробка кристалів забезпечить явища суперпризм, що проявляться незвичайно потужними керованими світловими променями, дозволить направляти світловий промінь без будь-яких хвилевідних структур, буде можливим негати́вне заломлення, що уможливить своєрідне фокусування і візуалізацію світла, надзвичайно велику групову дисперсію швидкостей, що маніпулює оптичним імпульсом, і т.д.

Створення технологій виготовлення фотонних кристалів є першою задачею в цій області. Нині деякі методи напівпровідникової промисловості, техніки наноманіпуляцій і методи самоорганізації, голографічні методи і т.д. досягли достатнього рівня для виявлення фотонної забороненої зони та інших явищ.

Традиційно, аналіз дисперсійних і відбивних властивостей фотонних кристалів робиться чисельними методами. Існує багато чисельних моделей проходження електромагнетних хвиль у фотонних кристалах, оснований на таких методах, як Plane-Wave-Expansion-Method (Joannopoulos et al., 1995), the Finite-Difference-Time-Domain-Method (Ziolkowski and Tanaka, 1999; Guo and Albin, 2003; Wu et al., 2003; Cryan et al., 2005) або методи власних мод (Bienstman and Baets, 2001; Bogaerts et al., 2002). Основними серед них визнані: метод Пендри [6], що використовує умови квазіперіодичності поля у фотонному кристалі, так, що для отримання коефіцієнтів у дисперсійному рівнянні досить вирішити рівняння Максвелла чисельно (наприклад, методом кінцевих різниць) в межах однієї комірки; метод Блоха-Флоке, що призводить до нескінченної системи дисперсійних рівнянь шляхом розкладання поля по просторових гармоніках [7]. Ми ж досліджували методами із перших принципів вплив геометричних параметрів укладання формувальних елементів модельного фотонного кристалу на його електронну енергетичну заборо-

нену зону, густину електронних станів у дозволених зонах, розподіл електронної густини та Кулонового потенціалу у просторі та діелектричну функцію. Реакції електронів твердого тіла на зовнішнє електромагнетне поле тісно пов'язані зі структурою енергетичних зон.

2. МЕТОДИ ОБЧИСЛЕННЯ

Результати були одержані за допомогою авторського програмного коду, що реалізує алгоритм квантової динаміки, якщо одночасно оптимізуються змінні електронної та ядерних підсистем багатоатомної структури, або алгоритм самоузгодженого розв'язку рівнянь Кона–Шема в локальному наближенні, якщо визначаються тільки електронні змінні при фіксованих атомних остовах [8]. За Коном і Шемом електронна густина записувалася в термінах зайнятих ортонормованих одночастинкових хвильових функцій:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i |\psi_i(\mathbf{r})|^2. \quad (1)$$

Точка на поверхні потенціальної енергії в наближенні Борна–Оппенгайма визначалася мінімумом енергетичного функціоналу по відношенню до хвильових функцій:

$$E[\{\psi_i\}, \{R_j\}, \{\alpha_\nu\}] = \sum_i \int_{\Omega} d^3r \psi_i^*(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right] \psi_i(\mathbf{r}) + U[\{n(\mathbf{r})\}, \{R_j\}, \{\alpha_\nu\}], \quad (2)$$

де $\{R_j\}$ — координати атомових остовів, $\{\alpha_\nu\}$ — всі можливі зовнішні впливи на систему.

У загальноприйнятому формулюванні мінімізація енергетичного функціоналу (2) по відношенню до одночастинкових орбіталей при накладених на них додаткових умовах ортонормування приводить до одночастинкових рівнянь Кона–Шема:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{\partial U}{\partial n(\mathbf{r})} \right\} \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}). \quad (3)$$

Розподіл електронів по енергіям отримувався шляхом числового обчислення похідної $\lim_{\Delta E \rightarrow 0} \Delta N / \Delta E$, де ΔN — кількість дозволених станів, що припадають на проміжок енергії ΔE , із отриманого під час діагоналізації матриці Кона–Шема одночастинкового енергетичного спектра, кількість значень в якому контролюється розміром розкладу хвильової функції. Відповідно до ідеології функціонала електронної густини кількість зайнятих станів при

$T = 0$ К визначалися половинною кількістю електронів у атомно-му базисі (у зв'язку з неврахуванням спіну електрона).

Лінійний відгук твердого тіла на збурення, — електричне поле, фонони та ін., — описується діелектричною матрицею. У наших обчислювальних експериментах статична діелектрична матриця кристалічної системи оцінювалася із електронної структури її основного стану (зайнятих і незайнятих станів). Діелектрична матриця $\epsilon_{GG'}^{-1}(\mathbf{q}, \omega)$ представлялася в оберненому просторі і залежала від хвильового вектора \mathbf{q} та частоти коливань електромагнетного збурювального поля ω (\mathbf{G} — вектори оберненої ґратниці). Недіагональні елементи матриці $\epsilon_{GG'}^{-1}$ визначають локальні ефекти поля. Макроскопічна діелектрична функція визначалася як

$$\epsilon_M(\mathbf{q} + \mathbf{G}) = \frac{1}{\epsilon_{00}^{-1}(\mathbf{q})}. \quad (4)$$

Розрахунок діелектричної матриці був проведений за допомогою формалізмів функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів [9]. Щоб одержати елементи матриці, розв'язували рівняння в оберненому просторі:

$$\epsilon_{GG'}^{-1}(\mathbf{q}) = \delta_{GG'} + \frac{4\pi e^2}{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|^2} \chi_{GG'}(\mathbf{q}), \quad (5)$$

де поляризованість визначалася як

$$\chi_{GG'}(\mathbf{q}) = \sum_{G''} A_{GG''}^{-1}(\mathbf{q}) \chi_{G''G'}^0(\mathbf{q}), \quad (6)$$

$$A_{GG'}(\mathbf{q}) = \delta_{GG'} - \chi_{GG'}^0(\mathbf{q}) \frac{4\pi e^2}{|\mathbf{q} + \mathbf{G}'|^2} - \sum_{G''} \chi_{GG''}^0(\mathbf{q}) K_{xc}(\mathbf{G}'' - \mathbf{G}'), \quad (7)$$

$$\chi_{GG'}^0(\mathbf{q}) = \frac{4}{\Omega} \sum_{c,v,k} \frac{\langle v, \mathbf{k} | e^{-i(\mathbf{q}+\mathbf{G})\mathbf{r}} | c, \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle \langle c, \mathbf{k} + \mathbf{q} | e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{G}')\mathbf{r}'} | v, \mathbf{k} \rangle}{\epsilon_{v,k} - \epsilon_{c,k+\mathbf{q}}}, \quad (8)$$

де індекси c, v, \mathbf{k} перебирали стани зон провідності, валентної та Бріллюєнової.

Обмінно-кореляційний внесок мав вид:

$$K_{xc}(r, r') = \frac{\delta^2 E_{xc}}{\delta \rho(r) \delta \rho(r')} = \left. \frac{dV_{xc}}{d\rho} \right|_{\rho(r)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (9)$$

Одержана діелектрична матриця є ермітовою і завдяки наявності центру інверсії модельного кристалу є симетричною. Її діагоналізація приводить до одержання власних значень $\epsilon_n^{-1}(\mathbf{q})$ та власних функцій $V_n^{-1}(\mathbf{q} + \mathbf{G})$:

$$\sum_{\mathbf{G}'} \epsilon^{-1}(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \mathbf{q} + \mathbf{G}') V_n^{-1}(\mathbf{q} + \mathbf{G}') = \epsilon_n(\mathbf{q}) V_n^{-1}(\mathbf{q} + \mathbf{G}). \quad (10)$$

Вектор \mathbf{q} знаходиться в межах Бріллюєнової зони, а власні значення $\epsilon_n^{-1}(\mathbf{q})$ означають «діелектричну зонну структуру». Знання власних значень та власних функцій діелектричної матриці є важливим. Вони служать для візуалізації екранування в реальному просторі, передають інформацію про електронний відгук твердого тіла та уможливають адекватно врахувати симетрію кристалу [10].

3. ОБ'ЄКТИ ОБЧИСЛЕННЯ

Вчені університету Іллінойсу виявили спосіб змінити тривимірну структуру добре відомого напівпровідникового матеріалу, щоб виявити у ньому нові оптичні властивості, зберігаючи при цьому свої дуже корисні електричні властивості. Вони шляхом епітаксії виростили пористий кристал GaAs через складний шаблон, використовуючи новий 3D SAE (Selective Area Epitaxy) підхід [11]. Ми чисельно змоделивали цей кристал, котрий став першим об'єктом нашого обчислювального експерименту. Модельний фотонний кристал являв собою масив пористих волокон із GaAs (рис. 1, *a*) у повітряній порожнині. Наявність повітряних порожнин у речовині ґратниці 2D-фотонного кристалу (у структурі двовимірного фотонного кристалу, діелектрична проникність періо-

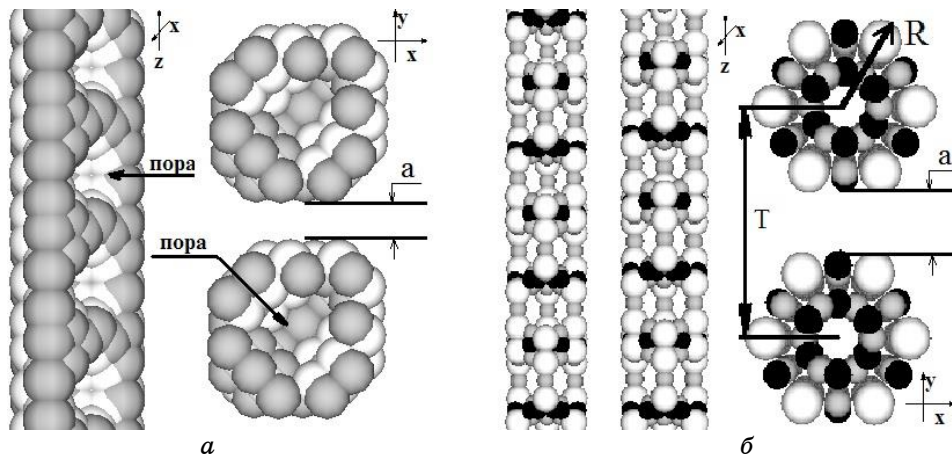


Рис. 1. Волокно модельного фотонного кристалу на основі напівпровідникового матеріалу GaAs (*a*) об'єкт обчислення №1; волокно модельного фотонного кристалу, набране із графенових площин та шарів SiO₂ (*б*) об'єкт обчислення №2.¹

дична в одній площині, як правило, визначається як площина XY і незмінна в третьому напрямку Z) відкриває великі фотонні заборонені зони [12]. При цьому потрібна ідеальна реалізація структури $2D$ -фотонного кристалу, що поширюються нескінченно в напрямку Z , — ситуація, яка не може бути реалізована в експерименті. Наприклад, матеріалом, що володіє пропорціями 100-500 (співвідношення між довжиною порожнин або волокна до діаметра волокна) є макропористий кремній. Нами була апроксимована структура з пропорціями, що прямує до нескінченности. Була розроблена тетрагональна примітивна комірка, що містила 160 атомів в базисі. Розташування атомів у базисі утворювало при трансляції нескінченно довгі пари волокон пористого GaAs (рис. 1, *a*). У межах пари волокна були дзеркальним відображенням одне одного. Відстань (a) між волокнами змінювалася від 1,28 Å до 6,28 Å.

Отже, у наших обчислювальних експериментах розглядалися періодично розташовані у площині XY та нескінченні у напрямку Z циліндричні волокна, розділені вакуумом, які формують тривимірний фотонний кристал. Один з ключових параметрів фотонного кристалу — контраст діелектричної проникності. Його можна міняти не лише шляхом заповнення порожнеч якоюнебудь речовиною, але і шляхом варіювання діелектричної проникності самого каркаса, міняючи розмір і склад частинок, що утворюють його. У наших дослідженнях волокна були неоднорідними: у першому об'єкті вони містили пори, у другому — волокна набиралися із графенових площин, відокремлених одна від одної ізолятором (SiO_2 , α -кварц) (рис. 1, *b*), що є цікавою композицією [13]. Волокна у площині XY упаковувалися у квадратну ґратницю з коефіцієнтом упаковки, що мінявся від 33% до 75%. Період повторення волокон із графенових площин та шарів SiO_2 змінювався від 7,2 Å до 10,9 Å. Радіус волокна $R = 3,5$ Å.

4. РЕЗУЛЬТАТИ ОБЧИСЛЕНЬ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Електронна зонна структура і зонна структура діелектричної матриці обчислювалися для Γ -точки Бріллюєнової зони модельних кристалів. Аналіз одержаних в обчислювальних експериментах розподілів густин електронних станів валентних зон модельних фотонних кристалів залежно від віддалі між їхніми формувальними структурними елементами (волокнами) уможливив виділити наступні особливості, яких згруповано в табл. 1 і на рис. 2–4.

Із аналізу розподілу електронних станів по енергіях модельного фотонного кристалу на основі GaAs видно, що для відстаней між волокнами, починаючи з 1,28 Å, заборонена зона мала і збільшується в 3 рази при віддаленні волокон до 4,28 Å. Пік мак-

ТАБЛИЦЯ 1. Властивості електронної підсистеми модельних фотонних кристалів.²

| Модельний кристал | $a, \text{Å}$ | $\Delta E_{\text{val}}, \text{eV}$ | $\Delta E_{\text{gap}}, \text{eV}$ | Максимальна заселеність станів |
|-----------------------|---------------|------------------------------------|------------------------------------|--------------------------------|
| SiO ₂ + Gr | 0,16 | 715,6997 | 0,01361 | 4 |
| | 0,68 | 828,6335 | 0,01814 | 5 |
| | 0,94 | 883,6038 | 0,01361 | 6 |
| | 1,21 | 950,2757 | 0,09070 | 7 |
| | 1,47 | 1022,934 | 0,01361 | 5 |
| | 1,74 | 1097,225 | 0,03628 | 6 |
| | 2,27 | 1250,162 | 0,02268 | 6 |
| | 2,8 | 1407,452 | 0,03175 | 6 |
| | 3,05 | 1489,091 | 0,00454 | 8 |
| | 3,33 | 1569,097 | 0,00454 | 6 |
| | 3,86 | 1746,797 | 0,03175 | 5 |
| GaAs | 1,28 | 253,6121 | 0,27211 | 32 |
| | 2,28 | 282,4564 | 0,54423 | 23 |
| | 3,28 | 327,3555 | 0,27211 | 21 |
| | 4,28 | 371,9826 | 0,81634 | 23 |
| | 5,28 | 408,174 | 0 | 23 |
| | 6,28 | 425,3173 | 0,54423 | 19 |

симуму припадає на відстань 4,28 Å. При відстані між волокнами 5,28 Å заборонена зона у модельній системі істотно зменшується — падає практично до нуля. Таким чином, можна зробити висновок, що слабо взаємодійні волокна GaAs створюють вузькозонний кристал. Порядок ширини забороненої зони, згідно з нашими розрахунками, — близько 10^{-1} еВ. Але більше віддалення волокон одне від одного призводить до зникнення забороненої зони. Ми це пояснюємо зміною структурної морфології модельного об'єкту: від кристалічного об'єкту, що набраний із волокон, до окремо взятого ізольованого волокна. Отже, варіюючи відстань між волокнами, можна керувати електричними властивостями масиву атомів, що, безумовно, буде впливати на фотонні зони модельного об'єкту.

Аналізуючи модельний фотонний кристал на основі графенових площин, відокремлених одна від одної SiO₂, ми помітили гострі піки, що виникають у загальній густині електронних станів

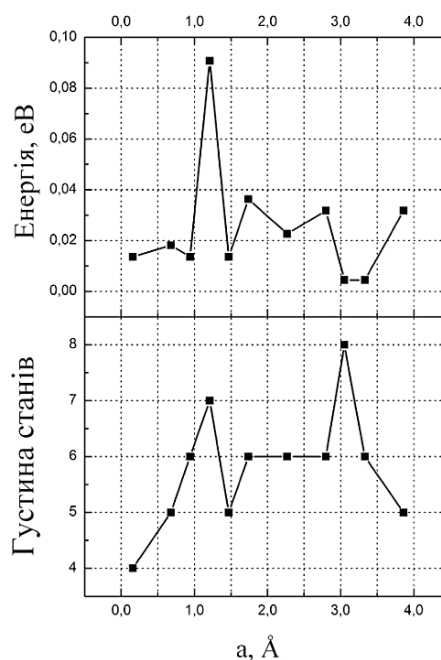
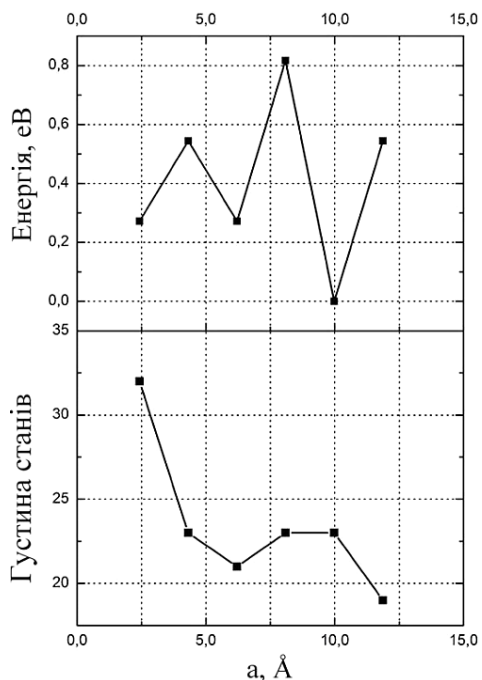


Рис. 2. Залежність ширини забороненої зони та максимальної заселеності станів валентної зони від відстані між волокнами модельного фотонного кристалу №1.³

Рис. 3. Залежність ширини забороненої зони та максимальної заселеності станів валентної зони від відстані між волокнами модельного фотонного кристалу №2.⁴

фотонного кристалу поблизу вершини валентної зони, при відстанях між волокнами у 1,21 Å та 3,05 Å (рис. 3). При цих же відстанях фіксуються помітні зміни у ширині забороненої зони, але немонотонні. Деталі розподілу електронних станів валентної зони для кристалу при найменшій відстані між волокнами (0,2 Å), коли був зафіксований обмін через вакуумні проміжки електронами, приводяться на рис. 4. Для цього випадку характерні найнижчі заселеності станів, з великою долею станів з одиничним заселенням (два електрони на стан без урахування спіну), що є проявом квантового ефекту.

Щодо електронної густини всередині пори волокна на основі GaAs, то вона дуже мала в усіх розрахованих випадках. Електрони при віддаленні волокон зосереджуються всередині стінок волокна, але не в його порі. А при зближенні електронна густина витісняється із тіла волокон у вакуумний проміжок між ними. Про це свідчать зображені на рис. 5 просторові розподіли електронної густини та значення Кулонового потенціалу, що визначені

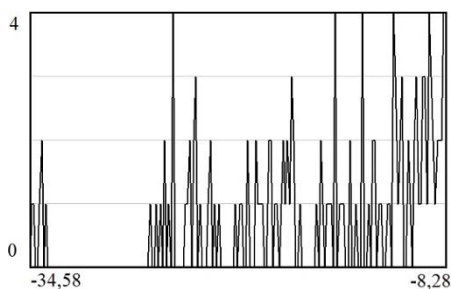


Рис. 4. Розподіл загальної густини електронних станів валентної зони модельного фотонного кристалу №2, при відстані між воло-
— кількість станів, горизонталь-
— енергія в атомних одини-
цях.⁵

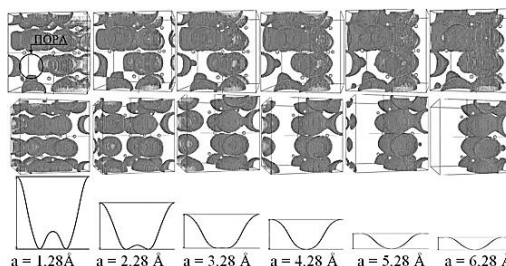


Рис. 5. Розподіл густини валентних електронів при ізозначенні від 0,2 до 0,1 від максимального значення в об-
ласті пори волокна модельного кри-
сталу №1 (верхній ряд), в області між
волокнами (середній ряд); графіки
Кулонового потенціалу вздовж на-
прямку посередині між волокнами,
що приведені в єдиному масштабі
(нижній ряд).⁶

для різних кристалографічних напрямків.

Для розрахунку діелектричної матриці, який потребує перебору великого числа комбінації вільних та зайнятих станів, примітивна комірка об'єкту №2 була зменшена від 54 до 24 атомів у базисі (об'єкт №3). На рисунку 6 наведено модель, подібну за хімічним складом до модельного кристалу №2, а на рис. 6 — її примітивну комірку з просторовими розподілами валентних електронів. Діелектрична матриця розраховувалася для структури фотонного кристалу з коефіцієнтом упаковки волокна у площині XY, що становить 43%. Відстань між волокнами 2,1 Å, радіус волокна $R = 2,9$ Å.

Одержані значення макроскопічної діелектричної проникності для модельного кристалу №3 за формулою (4) (табл. 2) свідчать, що досліджуваний об'єкт чутливий до напрямку збурювального поля. Одержані числові значення дуже близькі до одиниці, тому що обрана для розрахунку просторова упаковка волокон у кристалі, більше як на половину складалася із вакуумного проміжку.

На рисунку 8 представлено розподіл найнижчих станів зонної структури діелектричної матриці для третього об'єкту дослідження. На розподілах спостерігається поява зони значно нижче одиниці (що відповідає додатковому екрануванню) при направленні зовнішнього збурення поперек волокон. Наступні зони для цього напрямку з'являються через значний проміжок в області значень, близьких до одиниці. При направленні зовнішнього збурення паралельно волокнам найнижча зона з'являється в області

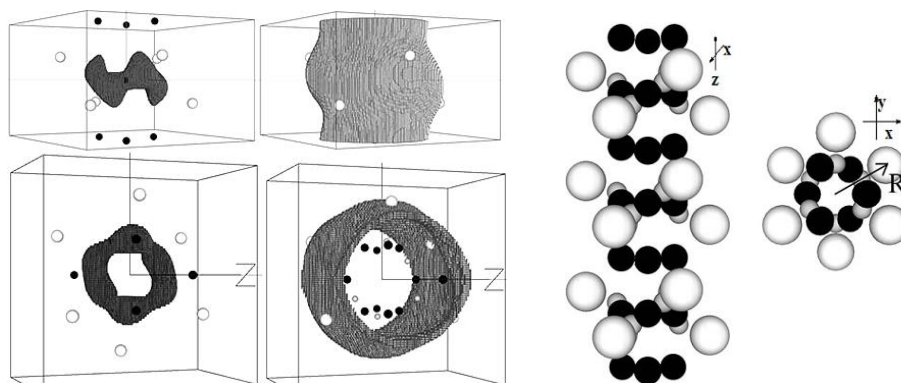


Рис. 6. Просторові розподіли густини валентних електронів в об'єкті обчислення №3 для ізозначень в інтервалі графенових площин та шарів 1,0–0,9 від максимального значення SiO_2 (24 атома в базисі) — об'єкт (зліва), в інтервалі 0,2–0,1 (справа).⁷

Рис. 7. Волокно модельного фотонного кристалу, набране із обчислення №3.⁸

0,5, наступні зони з'являються близько 0,7.

5. ВИСНОВКИ

Методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів одержано розподіли густини валентних електронів, кулонівського потенціалу, електронні енергетичні спектри та діелектрична функція модельних фотонних кристалів, що являли собою масиви або пористих волокон GaAs або графенових площин, переміжених шарами SiO_2 , залежно від геометричних параметрів укладання формувальних елементів модельного фотонного кристалу.

Продемонстровано, що контраст діелектричної проникності фотонного кристала можна міняти не тільки шляхом заповнення пустот у його каркасі якою-небудь речовиною чи вакуумом, але й шляхом варіювання діелектричної проникності самого каркаса.

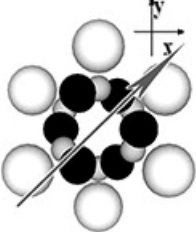
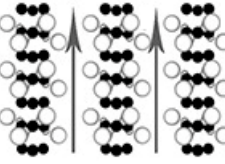
Визначено відстані між волокнами, на яких має місце найбільша та найменша заборонена зона для модельних фотонних кристалів з пористих волокон GaAs. Електронна густина всередині пори волокна GaAs зникаючи мала. Зміна ширини забороненої зони пояснювалася зміною структурної морфології модельного об'єкту: від кристалічного об'єкту, що набраний із волокон, до окремо взятого ізольованого волокна.

Неоднорідна структура циліндричних волокон, набраних із графенових площин та шарів SiO_2 , ґратниці модельного фотонного кристалу та щільність їх розташування впливала на електрон-

ні характеристики. Було зафіксовано щільність волокон, для котрої характерними є найнижчі заселеності електронних станів у зонах, що є проявом квантового ефекту.

ТАБЛИЦЯ 2. Макроскопічна діелектрична проникність

$$\epsilon_M(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\epsilon_{00}^{-1}(\mathbf{q}, \omega)} \quad (\omega = 0) \text{ модельного кристалу №3.}^9$$

| | | |
|--|---|---|
| Напрямок вектора \mathbf{q} збурювального поля ($ \mathbf{q} \rightarrow 0$) в межах Бріллуєнової зони (на малюнку, перерахований для прямого простору) |  |  |
| Макроскопічна діелектрична проникність | 0,9924 | 1,0213 |

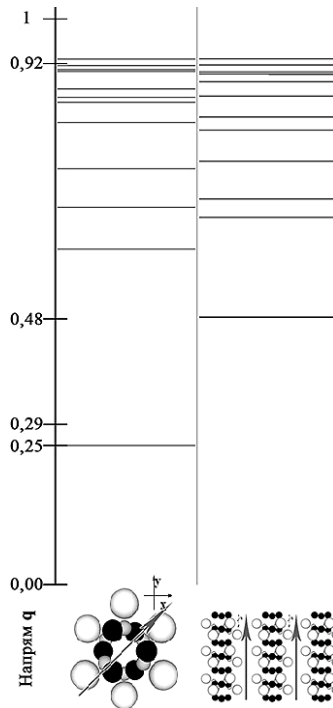


Рис. 8. Найнижчі власні значення оберненої діелектричної матриці $\epsilon_{GG'}^{-1}(\mathbf{q})$ модельного фотонного кристалу №3, розраховані для кількох напрямків вектора ($|\mathbf{q}| \rightarrow 0$) в межах Бріллуєнової зони.¹⁰

Одержані значення діелектричної функції модельного фотонного кристалу, що являв собою масиви волокон з графенових площин, переміжених шарами SiO_2 , продемонстрували, що діелектрична функція є чутливою до напрямку збурювального поля.

Отже, варіюючи відстань між волокнами фотонного кристалу, можна керувати його електронними властивостями, і, як наслідок, випромінюванням (поглинанням) фотонного кристалу.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА—REFERENCES

1. E. Yablonovitch, *Phys. Rev. Lett.*, **58**, No. 20: 2059 (1987).
2. S. John, *Phys. Rev. Lett.*, **58**, No. 23: 2486 (1987).
3. H. F. Wilson, F. Gygi, and G. Galli, *Phys. Rev. B*, **78**, No. 11: 113303 (2008).
4. A. Kaur, E. R. Ylvisaker, D. Lu, T. A. Pham, G. Galli, and W. E. Pickett, *Phys. Rev. B*, **87**, No. 15: 155144 (2013).
5. L. Maigyte and K. Staliunas, *Appl. Phys. Rev.*, **2**, No. 1: 011102 (2015).
6. J. Pendry, *J. of Physics: Condensed Matter*, **8**, No. 9: 1085 (1996).
7. E. Ya. Glushko, *Optics Communications*, **259**, No. 1: 342 (2006).
8. R. M. Balabai, *Ukr. J. Phys.*, **58**, No. 4: 389 (2013).
9. M. S. Hybertsen and G. L. Steven, *Phys. Rev. B*, **35**, No. 11: 5585 (1987).
10. A. Baldereschi and E. Tosatti, *Solid State Commun.*, **29**, No. 3: 131 (1979).
11. E. C. Nelson, N. L. Dias, K. P. Bassett, S. N. Dunham, V. Verma, M. Miyake, P. Wiltzius, J. A. Rogers, J. J. Coleman, X. Li, and P. V. Braun, *Nature Materials*, **10**, No. 9: 676 (2011).
12. R. D. Meade, K. D. Brommer, A. M. Rappe, and J. D. Joannopoulos, *Appl. Phys. Lett.*, **61**, No. 4: 495(1992).
13. A. A. Колесников, Ю. Е. Лозовик, *Труды МФТИ*, **5**, № 1: 53 (2013);
A. A. Kolesnikov and Yu. E. Lozovik, *Trudy MFTI*, **5**, No. 1: 53 (2013).

*Kryvyi Rih National University,
54 Gagarin Ave.,
UA-50085 Kryvyi Rih, Ukraine*

¹ Fig. 1. The model photonic crystal fibre based on the semiconductor GaAs (a)—the object of calculation No. 1; the model photonic crystal fibre composed of graphene and SiO_2 layers (b)—the object of calculation No. 2.

² TABLE 1. The properties of the electron subsystem of the model photonic crystals.

³ Fig. 2. The dependence of the band gap and the maximum populations of states on the distance between the fibres of the model photonic crystal No. 1.

⁴ Fig. 3. The dependence of the band gap and the maximum populations of states on the distance between the fibres of the model photonic crystal No. 2.

⁵ Fig. 4. Distribution of the electron-states' density of the model photonic crystal No. 2, when the distance between the fibres is 0.21 Å. The vertical axis is the number of states; horizontal axis is energy in atomic units.

⁶ Fig. 5. Spatial distributions of the valence-electrons' density within the interval of 0.2–0.1 of the maximum value near the pore of fibres of the model photonic crystal No. 1 (top row), near the vacuum between the fibres (middle row), the Coulomb potential graphics along the vector in the middle between the fibres bringing in the common scale (bottom row).

⁷ Fig. 6. Spatial distributions of the valence-electrons' density within the interval of 1.0–0.9 of the maximum value (left), the interval of 0.2–0.1 of the maximum value (right) for the model photonic crystal No. 3.

⁸ **Fig. 7.** Fibre of photonic crystals based on graphene layers on SiO₂ (24 atoms in basis) is the calculation object No. 3.

⁹ **TABLE 2.** Macroscopic dielectric constant $\epsilon_M(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\epsilon_{00}^{-1}(\mathbf{q}, \omega)}$ ($\omega = 0$) of the model crystal

No. 3.

¹⁰ **Fig. 8.** The lowest eigenvalues of the inverse dielectric matrix of the model photonic crystal No. 3 calculated for different directions of the vector ($|\mathbf{q}| \rightarrow 0$) within the Brillouin zone.