

**Удельная активность гранита в образцах  
для месторождения «Микашевичи»**

Радионуклид	Удельная активность, Бк/кг
K – 40	698,9
Ra – 226	16,05
Th – 232	26,07
A <sub>эфф</sub>	109,6

Таким образом, граниты, добываемые на месторождении «Микашевичи», могут быть использованы в качестве строительных материалов для строящихся и реконструируемых жилых и общественных зданий.

**Литература:**

1. Крисюк Э.М. Радиационный фон помещений. М. Энергоатомиздат, 1989, с. 120
2. Лобач Д.И., Тушин Н.Н. Радон. Мн. 1997, с. 110
3. Нормы радиационной безопасности (НРБ — 2000). Мн., 2000, с. 115.

УДК 535.3

**РАСЧЕТ ФОТОННОЙ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ ДЛЯ КРИСТАЛЛА  
ИЗ СФЕРИЧЕСКИХ КЛАСТЕРОВ**

**Бобученко Д.С.**

*Белорусский национальный технический университет  
Минск, Беларусь*

В настоящее время существует все возрастающий интерес к изучению распространения электромагнитных волн в упорядоченных и неупорядоченных периодических диэлектрических структурах. Этот интерес обусловлен существованием частотных интервалов (фотонных запрещенных зон) в оптическом диапазоне, и электромагнитные волны с частотами, лежащими в этих интервалах, распространяться в таких структурах не могут, аналогично как в случае распространения электронных волн в кристаллах. Потенциальные приложения этого явления обширны. Это в первую очередь создание

микро волноводов в оптическом диапазоне, резонаторов и полостей в таких кристаллах для высокоэффективных излучательных структур. Кроме того, многие исследователи надеются, что это явление может послужить основой для создания принципиально новой элементной базы для оптоэлектронных приборов.

В настоящее время происходит интенсивный поиск и исследование материалов, в которых может быть обнаружены фотонные запрещенные зоны. К числу перспективных материалов относится опал. Материал обладает кристаллической структурой, в узлах которой находятся сферические кластеры с размерами 100-300 нм. Освоена технология получения искусственных опалов с требуемыми размерами сфер. Кристалл опала имеет 26% пустоты, которую можно заполнить полупроводниковым материалом (кремнием, германием и другими). Получают также инвертированные структуры, удалением исходных сферических кластеров  $\text{SiO}_2$ , на месте которых остаются воздушные сферы в диэлектрическом материале.

По-прежнему является актуальной задача поиска трехмерных периодических диэлектрических структур, в которых может быть обнаружена полная фотонная запрещенная зона. Поэтому важно, с теоретической стороны, иметь точную математическую модель и соответствующие алгоритмы, с помощью которых можно было бы проводить детальные расчеты для произвольных периодических структур.

Существуют несколько математических методов расчета фотонных зонных структур. Одним из них, позволяющим рассчитывать трехмерные структуры без больших затрат машинного времени является метод плоских волн (PWEM). В основе его, как любых других, лежат уравнения Максвелла. Для электромагнитных волн распространяющихся в среде с пространственно периодически изменяющейся диэлектрической функцией  $\epsilon(\mathbf{r})$  уравнения Максвелла могут быть записаны как

$$\nabla \times \mathbf{E} = i(\omega / c)\mathbf{H}; \quad \nabla \times \mathbf{H} = -i(\omega / c)\epsilon(\mathbf{r})\mathbf{E} \quad (1)$$

которые можно привести к следующему виду для магнитного поля:

$$\nabla \times \left[ \frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \nabla \times \mathbf{H} \right] = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H} \quad (2)$$

Так как  $\epsilon(\mathbf{r})$  является периодической, можно использовать теорему Блоха и разложить магнитное поле  $\mathbf{H}$  в ряд по плоским волнам:

$$\vec{\mathbf{H}}(\mathbf{r}) = \sum_G \sum_{\lambda=1}^2 h_{G,\lambda} \vec{e}_{\lambda}^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\mathbf{r}} \quad (3)$$

где  $k$  — волновой вектор в зоне Бриллюэна решетки,  $G$  — вектор обратной решетки,  $e_1, e_2$  — единичные вектора перпендикулярные к  $k+G$ , образуют триаду из-за поперечной природы  $H$  ( $\nabla H = 0$ ).

Подставляя (3) в (2) получим следующие матричные уравнения:

$$\sum_{GG'} H_{GG'}^{\lambda\lambda'} h_{G\lambda'} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 h_{G\lambda} \quad (4)$$

где

$$h_{GG'} = |k + G| |k + G'| \epsilon_{GG'}^{-1} \begin{bmatrix} e_2 e_2 & -e_2 e_1 \\ -e_1 e_2 & e_1 e_1 \end{bmatrix} \quad (5)$$

и  $\epsilon_{G-G'} = \epsilon(G-G')$  есть коэффициенты Фурье диэлектрической функции.

Для сфер радиуса  $R$  с диэлектрической функцией  $\epsilon_a$ , образующих границиентрированную кубическую решетку Браве, в однородной среде с диэлектрической функцией  $\epsilon_b$ , вектор прямой решетки:

$$\vec{r} = l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3; \quad l_1, l_2, l_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (6)$$

$$\vec{a}_1 = \frac{a_0}{2}(0, 1, 1); \quad \vec{a}_2 = \frac{a_0}{2}(1, 0, 1); \quad \vec{a}_3 = \frac{a_0}{2}(1, 1, 0)$$

Вектор обратной решетки:

$$\vec{G} = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3; \quad h_1, h_2, h_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (7)$$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a_0}(-1, 1, 1); \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a_0}(1, -1, 1); \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a_0}(1, 1, -1)$$

Объем элементарной ячейки —  $a_0^3/4$ , степень упаковки  $f = 16\pi R^3/(3a_0^3)$ .

В методе плоских волн используют коэффициенты Фурье:

$$\epsilon_G = \frac{1}{\Omega} \int d\vec{r} e^{-iGr} \epsilon(r)$$

где  $\Omega$  — объем элементарной ячейки.

Для неперекрывающихся сфер можно использовать аналитическую формулу для коэффициентов Фурье, которая справедлива для  $f \leq 0.74$

$$\epsilon_G = \begin{cases} 1 - f(1 - \frac{\epsilon_a}{\epsilon_b}) \\ -f(1 - \frac{\epsilon_a}{\epsilon_b}) \frac{3(\sin GR - GR \cos GR)}{(GR)^3} \end{cases} \quad (8)$$

Уравнения (4),(5),(6),(7),(8) решались численно с использованием стандартных методов матричной диагонализации. Размер матрицы  $-2N*2N$ ,  $N$  — число точек в обратной решетке. Результаты представленные в данной работе были получены при  $N = 670$ , что позволяет получить точность менее 1% для десяти нижних зон.

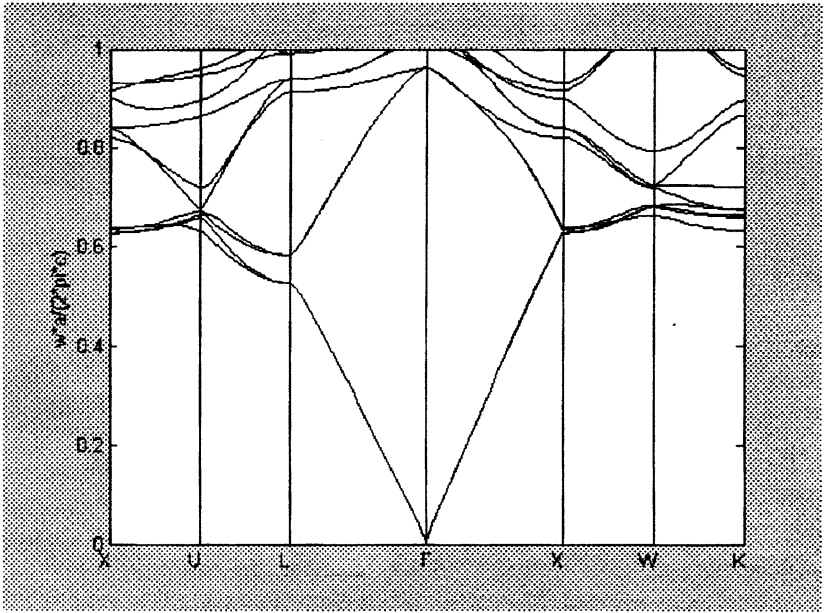


Рис. 1. Рассчитанная фотонная зонная структура вдоль важнейших линий симметрии в зоне Бриллюэна для г.ц.к. решетки, состоящей из воздушных сфер  $\epsilon_s=1$  в диэлектрической среде  $\epsilon_b=11,9$  (кремний). Степень упаковки  $f=74\%$  воздуха,  $26\%$  диэлектрического материала,  $a_0=0,5$  мкм.

Выполнены численные расчеты для гранцентрированной кубической решетки (г.ц.к.) Браве для различных значений диэлектрической функции  $\epsilon_s$  сфер и среды  $\epsilon_b$ . На рис. 1 представлены результаты расчета зонной структуры для  $a_0=0,5$  мкм,  $f=0,74$ ,  $\epsilon_s=1$ ,  $\epsilon_b=11,9$ .; на рис. 2 —  $f=0,26$ . Не для одной из г.ц.к. не обнаружено существование полностью запрещенной фотонной зоны. Однако, как показал расчет плотности состояний, зависимость плотности состояний от частоты является сложной, особенно для  $f=0,26$ . В нескольких областях существует резкое уменьшение плотности состояний, что может проявляться на эксперименте как запрещенная зона.

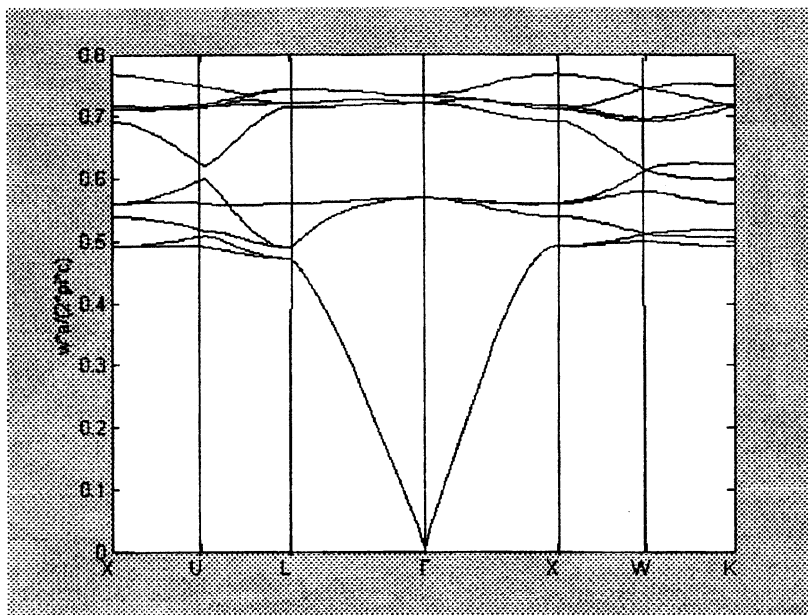


Рис. 2. Рассчитанная фотонная зонная структура вдоль важнейших линий симметрии в зоне Бриллюэна для г.ц.к. решетки, состоящей из воздушных сфер  $\epsilon_a=1$  в диэлектрической среде  $\epsilon_b=11,9$  (кремний). Степень упаковки  $f=26\%$  воздуха,  $74\%$  диэлектрического материала,  $a_0=0,5$  мкм.

Необходим дальнейший поиск структур, в которых могут существовать полностью запрещенные фотонные зоны для всех направлений.

#### Литература:

1. Busch K., John S. Phys. Rev. E 58, 3896 (1998).
2. Ho K.M., Chah C.T., Soukoulis C.M. Phys. Rev. Lett. 65, 3152 (1990).
3. Leung K.M., Liu Y.F. Phys.Rev. Lett. 65, 2646 (1990).
4. Hama J., Watanabe M., Kato T. J.Phys.:Condens.Matter. 2, 7445(1990).