

ДИФРАКЦИОННАЯ ОПТИКА, ОПТИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ

ЗОННАЯ СТРУКТУРА ТРЕХМЕРНЫХ ФОТОННЫХ АППРОКСИМАНТОВ КВАЗИКРИСТАЛЛА

П.Н. Дьяченко^{1,2}, Ю.В. Микляев³, В.Е. Дмитриенко⁴, В.С. Павельев^{1,2}

¹ Институт систем обработки изображений РАН, Самара, Россия,

² Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королева, Самара, Россия,

³ Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия,

⁴ Институт кристаллографии имени А. В. Шубникова РАН, Москва, Россия

Аннотация

В работе теоретически исследована зонная структура трехмерных фотонных аппроксимантов квазикристаллов. Обнаружено, что аппроксиманты различных порядков имеют большие, почти изотропные запрещенные зоны для широкого диапазона диэлектрической постоянной. Исследовано влияние координаты атомов на размер и порог фотонной запрещенной зоны. Сделан вывод о наличии полной запрещенной зоны у трехмерного фотонного квазикристалла с шестимерной объемно-центрированной кубической решеткой.

Ключевые слова: фотонные квазикристаллы, фотонная запрещенная зона.

Введение

Квазикристаллические структуры, обнаруженные в металлических сплавах в начале восьмидесятых, имеют точечные группы симметрии, несовместимые с периодичностью [1]. По сравнению с кристаллами они обладают более высокой вращательной симметрией, например, икосаэдрической, декагональной и т.п. Это открытие в значительной мере изменило взгляды на роль аперриодического упорядочения в физике конденсированного состояния [2] и стимулировало поиск физических свойств, характерных именно для аперриодических структур. Наиболее сильно меняются электронные и фотонные свойства, так как теорема Блоха неприменима. В результате структуры электронных зон и решеточные колебания квазикристаллов могут быть весьма экзотическими, и они остаются предметом обсуждения на протяжении многих лет, вплоть до последнего времени [3-5].

Аналогичные проблемы возникают и при рассмотрении взаимодействия фотонов с аперриодическими диэлектрическими структурами. Фотонными квазикристаллами называют оптические структуры, решетка которых имеет квазикристаллическую симметрию. В них, как и в фотонных кристаллах, происходит брэгговская дифракция фотонов, или, другими словами, возникновение фотонных запрещенных зон (ФЗЗ). В 1998 году было показано, что двухмерные фотонные квазикристаллы могут обладать ФЗЗ [6], где распространение электромагнитного излучения определенной поляризации запрещено в любом направлении. Концепция фотонных кристаллов была предложена в работах Яблоновича [7] и Джона [8]. В последующих работах было показано, что фотонные кристаллы могут иметь многочисленные практические применения [9,10].

Возникновение полной ФЗЗ состоит в перекрытии брэгговских запрещенных зон (стоп-зон) во всех направлениях. При трехмерно-периодическом распределении диэлектрика различным направлениям

соответствует различная периодичность и, соответственно, различная частота середины стоп-зон. Перекрытие стоп-зон можно обеспечить, с одной стороны, большим размером этих зон, т.е. большей амплитудой соответствующих пространственных гармоник распределения диэлектрической проницаемости. Это достигается созданием решеток диэлектрик-воздух из материалов с высоким показателем преломления. С другой стороны, перекрытие стоп-зон легче обеспечить при более изотропной периодичности, т.е. при форме зоны Бриллюэна, близкой к сферической [9]. Среди известных структур фотонных кристаллов наименьшим контрастом модуляции диэлектрической проницаемости, необходимым для возникновения запрещенной зоны, обладают решетки с симметрией алмаза [11].

Квазикристаллы имеют высокую вращательную симметрию, следовательно, их зонная структура может быть почти изотропной, и можно предположить, что такие структуры более предпочтительны для возникновения полных ФЗЗ. В работе [6] показано, что двухмерные фотонные квазикристаллы 8-го порядка имеют большие ФЗЗ для ТМ - (магнитное поле в плоскости структуры) и ТЕ - (электрическое поле в плоскости структуры) поляризации. Кроме того, отмечено, что дефектные состояния в фотонных квазикристаллах более сложны и интересны с точки зрения возможности гибкой настройки параметров этого состояния. Там же указано на необходимость исследования трехмерных фотонных квазикристаллов.

Первый двухмерный фотонный квазикристалл, обладающий двухмерной полной ФЗЗ, предложен в [12]. Экспериментально и теоретически в [12] показано, что такая структура имеет низкий порог ФЗЗ (минимальное значение диэлектрической постоянной материала решетки, при котором существует ФЗЗ) равный 2,1. В работе [13] методом стереолитографии создан икосаэдрический трехмерный квазикристалл, который имеет стоп-зоны в некоторых направлениях для микроволнового диапазона.

Для него были измерены коэффициенты пропускания микроволнового излучения, но теоретический анализ не был произведен. В недавних работах получены трехмерные фотонные квазикристаллы для инфракрасного [14] и видимого [15] диапазона излучения, так что тема фотонных квазикристаллов приобретает все большую актуальность [16].

Фотонные квазикристаллы не имеют трансляционной симметрии, поэтому надежных методов расчета их оптических свойств пока не существует, и в любом случае они потребуют значительных вычислительных ресурсов. В частности, в этом случае затруднительно применить метод разложения по плоским волнам. Теоретический анализ двумерных фотонных квазикристаллов был проведен в первой же работе [6], тогда как в трехмерном случае он не произведен до сих пор, несмотря на то, что такие структуры уже созданы экспериментально. Решением данной проблемы может стать исследование аппроксимантов фотонных квазикристаллов. Аппроксимантами квазикристаллов называют периодические структуры, геометрия которых приближается к квазикристаллам с увеличением размера примитивной ячейки. В работе [17] показано, что почти изотропную ФЗЗ могут иметь двумерные аппроксиманты даже самых низких порядков, причем положение и размер ФЗЗ практически не зависят от порядка аппроксиманта. Авторами работы [18] показано, что аппроксиманты квазикристаллов высоких порядков имеют порог запрещенной зоны равный порогу в квазикристаллах.

В настоящей работе впервые рассматриваются один трехмерный аппроксимант 1/0 и два аппроксиманта 1/1, обладающие полной ФЗЗ. Под «атомами» в работе подразумеваются координаты узлов решетки, по которым строится фотонный квазикристалл. Их примитивные ячейки содержат небольшое число атомов, что сильно уменьшает вычислительный объем задачи, так как позволяет удерживать сравнительно небольшое число плоских волн в решении. В нижеследующем рассмотрении не ставилась задача найти самые оптимальные распределения диэлектрика в аппроксимантах с точки зрения полной ФЗЗ, это потребовало бы нереального времени счета. Главное было показать, что полная ФЗЗ может существовать в технологически достижимых структурах, чтобы стимулировать их создание и дальнейшее изучение, экспериментальное и теоретическое.

1. Геометрическая структура

В работах [19,20] показано, что реально существующая в кремнии и германии фаза BC8 и гипотетическая структура BC32 являются, соответственно, 1/0 и 1/1 аппроксимантами икосаэдрического квазикристалла с шестимерной объемно-центрированной кубической (ОЦК) решеткой, так что координаты всех атомов могут быть получены проектированием шестимерной решетки. Аппроксимант 1/0 содержит 8

атомов в примитивной ромбоэдрической ячейке ОЦК решетки, а 1/1 аппроксимант - 32 атома, отсюда названия этих структур. Следовательно, кубические элементарные ячейки 1/0 и 1/1 содержат 16 и 64 атома, соответственно. В структуре аппроксиманта 1/0 все атомы находятся в эквивалентных кристаллографических положениях 16 (c) с координатами x_{ic} , причем $x = x_{ic} = \tau^{-2}/4$, где τ - золотое среднее. Каждый атом 1/0 аппроксиманта имеет четверную координацию (число ближайших «соседей»), что делает такую структуры локально похожей на структуру алмаза, а как раз для последней получен наиболее низкий порог образования полной ФЗЗ.

На основе структуры 1/0 можно построить 1/1 аппроксимант, элементарная ячейка которого будет в τ раз больше. Его 64 атома занимают 16 (c) позиций с $x = x_{ic}$ и 48 (c) позиции с $x = (1 - 2x_{ic})/2$, $y = (2\tau - 1)x_{ic}$, $z = x_{ic}$. Атомы в положении 16 (c) имеют тройную координацию. Как показано в работах [19,20], можно построить аппроксимант 1/1, у которого все атомы имеют координационное число 4. Такой аппроксимант в дальнейшем будет обозначаться 1/1F.

2. Результаты вычислений

Для каждого аппроксиманта исследовалось два типа узлов решетки: DR (dielectric rods) с диэлектрическими цилиндрами и AS (air spheres) с воздушными сферами. В первом типе структур диэлектрические цилиндры определенного радиуса соединяют положения соседних атомов в решетке. Такие структуры будут называться в дальнейшем 1/0DR (см. рис.1), 1/1FDR (см. рис.2) и 1/1DR. Второй тип представляет собой воздушные сферы, расположенные в диэлектрике, и соответствующие аппроксиманты будут обозначаться как 1/0AS, 1/1FAS и 1/1AS. Для простоты будем рассматривать материал решетки как непоглощающий, немагнитный и изотропный. Все рассматриваемые решетки аппроксимантов квазикристаллов считаются бесконечными при расчетах. Чтобы найти собственные моды уравнений Максвелла с периодическими граничными условиями, использовался метод разложения поля по плоским волнам [21].

На рис.3 показана зонная структура аппроксиманта 1/0DR при значении диэлектрической постоянной $\epsilon = 12$ (соответствующей кремнию для ближнего инфракрасного диапазона длин волн) и найденном оптимальном факторе заполнения диэлектриком $f = 22,7\%$ (отношение объема диэлектрика в примитивной ячейке к объему самой ячейки, выраженное в процентах). Оптимальным фактором заполнения называют такое значение, при котором размер запрещенной зоны принимает максимальное значение. Частота указана в безразмерных единицах $\omega a / 2\pi c$, где ω - циклическая частота, a - размер кубической ячейки 1/0DR, c - скорость света в вакууме.

По горизонтали отмечены точки высокой симметрии зоны Бриллюэна ОЦК решетки (вставка на рис.3) [22]. Дополнительно на отрезок между точками высокой симметрии помещаются еще 15 точек на одинаковых расстояниях.

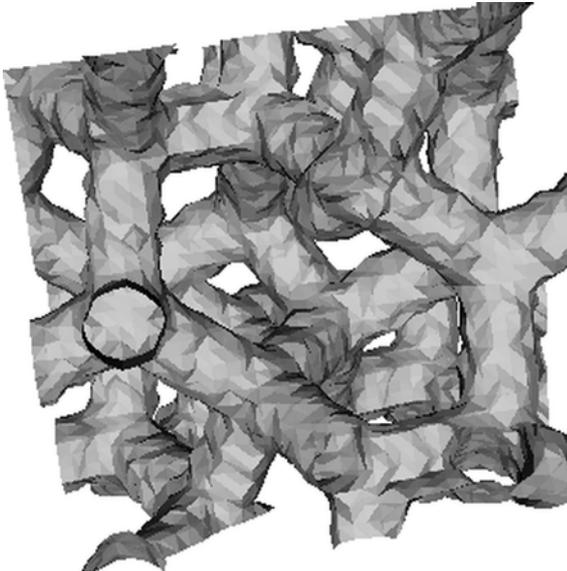


Рис.1. Графическое представление решетки 1/0DR

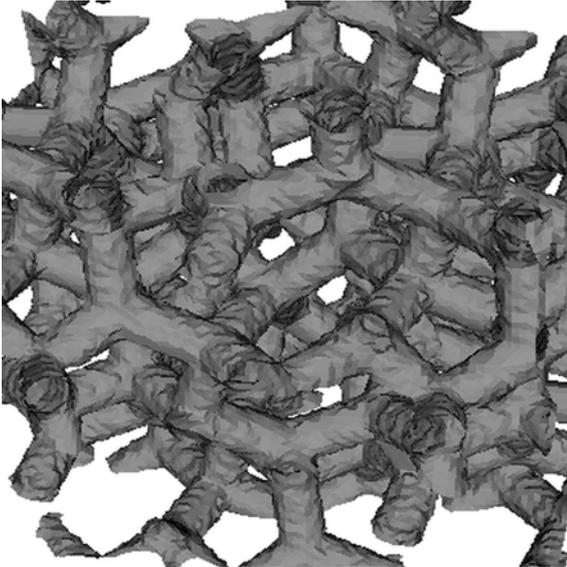


Рис.2. Графическое представление решетки 1/1FDR

Имеет место полная ФЗЗ размером $\Delta\omega/\omega_m = 17,6\%$ между 8 и 9 зонами (между частотами 0,6293 ($\omega a/2\pi c$) и 0,7509 ($\omega a/2\pi c$)) при факторе заполнения диэлектриком $f=22,7\%$. При данном факторе заполнения диэлектриком отношение радиуса диэлектрических цилиндров к размеру кубической ячейки $r/a=0,09$. Под размером ФЗЗ $(i) - (i+1)$ понимается выражение:

$$\Delta\omega_{i,i+1}/\omega_m = 2 \frac{\min(\omega_{i+1}) - \max(\omega_i)}{\min(\omega_{i+1}) + \max(\omega_i)} 100\% ,$$

где $\max(\omega_i)$ и $\min(\omega_{i+1})$ - максимальная и минимальная частота для зон (i) и $(i+1)$ соответственно.

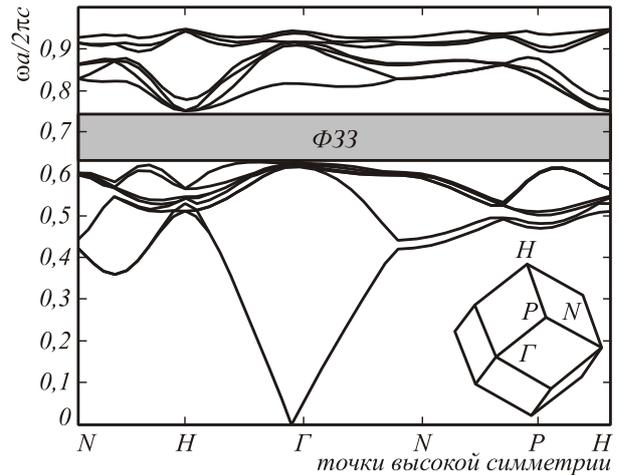


Рис.3. Зонная структура аппроксиманта 1/0DR (первые 15 зон). Фактор заполнения диэлектриком $f=22,7\%$, а его диэлектрическая постоянная $\epsilon = 12$. Размер полной запрещенной зоны $\Delta\omega/\omega_m = 17,6\%$

Размер ФЗЗ для 1/0AS получился равным $\Delta\omega/\omega_m = 11\%$ между 12 и 13 зонами (между частотами 0,8014 и 0,8948) при $\epsilon=12$ и оптимальном факторе заполнения диэлектриком $f=18,9\%$. Данный фактор заполнения диэлектриком получается при отношении радиуса воздушных шаров к размеру примитивной ячейки $r/a=0,25$. Зонная структура 1/0AS показана на рис.4. Следует отметить, что ФЗЗ 1/0AS лежит в более высоких частотах. Также интересно то, что номера зон, между которыми лежит ФЗЗ, не совпадают у 1/0AS и 1/0DR.

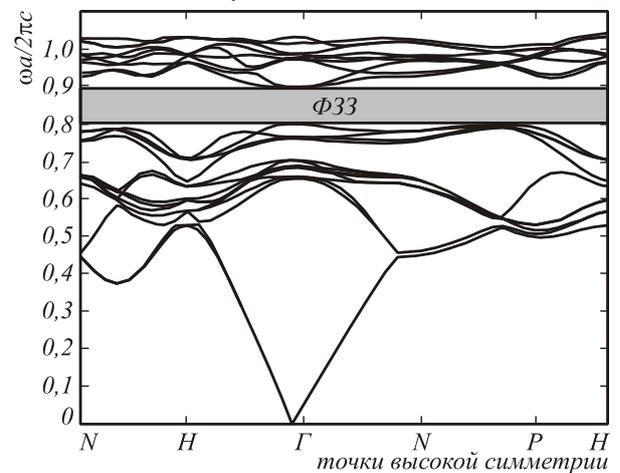


Рис.4. Зонная структура аппроксиманта 1/0AS (первые 20 зон). Фактор заполнения диэлектриком $f=18,9\%$, а его диэлектрическая постоянная $\epsilon = 12$. Размер полной запрещенной зоны $\Delta\omega/\omega_m = 11\%$

Перейдем к рассмотрению фотонных аппроксимантов квазикристаллов более высокого порядка. У аппроксиманта 1/1FAS все атомы имеют координационное число равное 4, поэтому его структура локально подобна алмазу. Структура 1/1FAS при факторе заполнения диэлектриком $f \sim 22\%$ имеет несвязанную решетку диэлектрика, поэтому ее невозможно получить экспериментально.

Кроме того, 1/1FAS не имеет полных ФЗЗ. Поэтому в дальнейшем ограничим рассмотрение структурой 1/1FDR. Такие решетки проще получить экспериментально, что было продемонстрировано в работах [13,14].

Зонная структура 1/1FDR при $\epsilon=12$ и оптимальном факторе заполнения диэлектриком $f=23,8\%$ показана на рис.5. Так же, как и в случае с 1/0DR, на рис.5 частота отмечена в безразмерных единицах, причем в обоих случаях a – размер кубической ячейки 1/0DR.

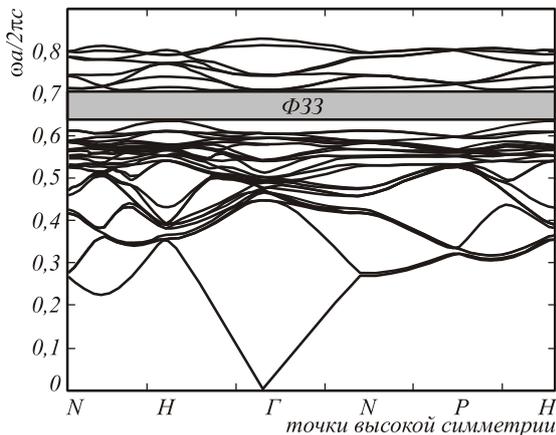


Рис.5. Зонная структура аппроксиманта 1/1FDR (первые 40 зон). Фактор заполнения диэлектриком $f=23,8\%$, а его диэлектрическая постоянная $\epsilon=12$. Размер полной запрещенной зоны $\Delta\omega/\omega_m=10,3\%$

Фактор заполнения диэлектриком $f=23,8\%$ получается при $r/a=0,095$. Размер полной ФЗЗ равен $\Delta\omega/\omega_m=10,3\%$, и находится она между 32 и 33 зонами (между частотами $0,6342(\omega a/2\pi c)$ и $0,7029(\omega a/2\pi c)$). Интересно, что оптимальный фактор заполнения почти одинаков в обоих аппроксимантах, тогда как размер полной ФЗЗ у 1/1FDR оказался почти в два раза меньшим, чем у 1/0DR. Это объясняется тем, что у 1/1DR фурье-гармоники пространственного распределения диэлектрической проницаемости имеют меньшую амплитуду, чем у 1/0DR, и необходима дальнейшая оптимизация структур.

Атомы аппроксиманта 1/1 имеют разные координационные числа, поэтому, сравнивая свойства 1/1DR и 1/1FDR, можно выявить влияние координации атомов на размер и порог запрещенной зоны. В отличие от 1/1FAS, 1/1AS имеет связанную решетку диэлектрика. На рис.6 представлена зонная структура 1/1AS при $\epsilon=12$ и $f=20,5\%$. Полная ФЗЗ находится между 56 и 57 зонами (между частотами $0,8019$ и $0,8666$) с размером $\Delta\omega/\omega_m=7,76\%$. Отношение радиуса воздушных шаров к размеру примитивной ячейки 1/0DR получается $r/a=0,252$.

Зонная структура 1/1DR представлена на рис.7 при $\epsilon=12$ и $f=26\%$. ФЗЗ находится между 28 и 29 зонами (между частотами $0,5783$ и $0,6379$) и размером $\Delta\omega/\omega_m=9,8\%$. При данном факторе заполне-

ния диэлектриком отношение радиуса диэлектрических цилиндров к размеру кубической ячейки $r/a=0,1$.

Размер полных ФЗЗ у 1/1DR и 1/1FDR получился почти одинаковым, следовательно, в данном случае координация атомов не оказывает существенного влияния. Данный факт может оказаться полезным при проектировании фотонных квазикристаллов с шестимерной простой кубической решеткой [13,14], где атомы имеют разную координацию. Также интересно отметить, что ФЗЗ у 1/1AS лежит в более высоких зонах и частотах по сравнению с 1/1DR. Это является благоприятным фактором для снижения значения порога ФЗЗ.

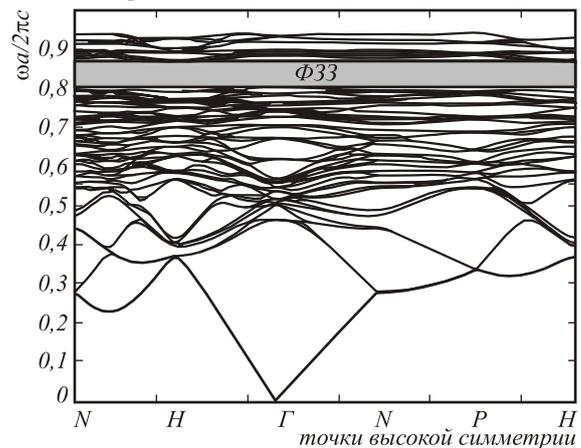


Рис.6. Зонная структура аппроксиманта 1/1AS (первые 70 зон). Фактор заполнения диэлектриком $f=20,5\%$, а его диэлектрическая постоянная $\epsilon=12$. Размер полной запрещенной зоны $\Delta\omega/\omega_m=7,76\%$

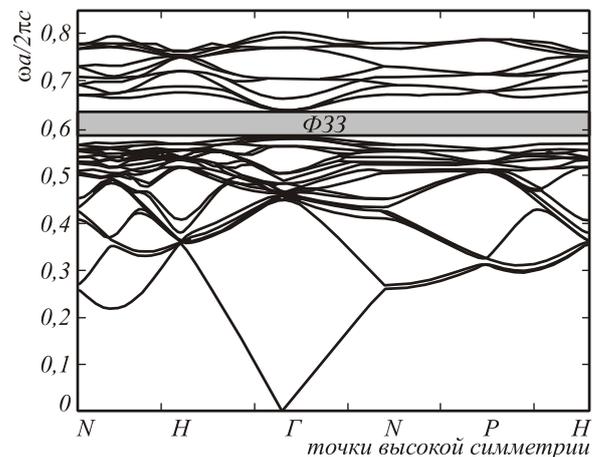


Рис.7. Зонная структура аппроксиманта 1/1DR (первые 40 зон). Фактор заполнения диэлектриком $f=26\%$, а его диэлектрическая постоянная $\epsilon=12$. Размер полной запрещенной зоны $\Delta\omega/\omega_m=9,8\%$

Проанализируем теперь, каковы индексы рефлексов hkl (координаты вектора обратной решетки), дающих полную ФЗЗ в 1/0DR. Из условия Брэгга для дифракции назад с учетом средней диэлектрической проницаемости имеем $K^2=4[1+f(\epsilon-1)](a\omega/2\pi c)^2$, где $K^2=h^2+k^2+l^2$.

На рис.3 для центра зоны $a\omega/2\pi c = 0,7\%$, откуда получаем $K^2=6,85$. Отсюда следует, что полная ФЗЗ образована, в основном, рефлексами типа 211 ($K^2=6$) и 220 ($K^2=8$). Однако в точке P (ось третьего порядка) запрещенная зона очень широкая, так что, наверное, делают вклад и рефлексы типа 222 ($K^2=12$).

Чуть выше порога открытия полной ФЗЗ ($\epsilon=6$, $f=0,296$) расчеты дают $a\omega/2\pi c = 0,78$; следовательно, $K^2=6,04$, т.е. получается, что ФЗЗ возникает за счет рефлексов 211 и 200, которые соответствуют в квазикристалле рефлексам, направленным вдоль осей второго порядка икосаэдра (таких рефлексов на сфере тридцать). Для 1/0AS получают следующие результаты. На рис.4 для центра зоны $a\omega/2\pi c = 0,85$, откуда получаем $K^2=8,9$. Значит, полная ФЗЗ образована, в основном, рефлексами типа 221 ($K^2=9$). При значении диэлектрической проницаемости близком к пороговому $\epsilon=6$, для 1/0AS получается $a\omega/2\pi c = 1$ при $f=0,238$, следовательно, $K^2=8,76$. Таким образом, полная ФЗЗ образована рефлексами 220 ($K^2=8$) и 221 ($K^2=9$). Как можно увидеть на рис.3 и рис.4, ФЗЗ у 1/0AS является более изотропной, чем у 1/0DR, вследствие того, что создающие ФЗЗ рефлексы имеют более близкие длины векторов обратной решетки. Это объясняется тем, что у 1/0AS ФЗЗ лежит в более высоких частотах по сравнению с 1/0DR.

Посмотрим, что получается для 1/1FDR, в которых условие Брэгга выглядит как $K^2 = 4[1 + f(\epsilon - 1)](\tau a\omega/2\pi c)^2$, где $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$ - золотое среднее. Если $\epsilon=12$, $f=0,238$ и в середине зоны $a\omega/2\pi c = 0,67$, то $K^2=17,05$. Теоретически, в этом аппроксиманте должны делать сильный вклад рефлексы 400 ($K^2=16$) и 321 ($K^2=14$), но, по-видимому, делают также вклад и 411 ($K^2=18$), и 420 ($K^2=20$), которые не соответствуют никаким сильным рефлексам в квазикристаллах. При $\epsilon=6$, $f=0,3123$ середина зоны - $0,793$, так что $K^2=16,87$. В процентном отношении характерная величина K^2 меняется не столь сильно, как в 1/0DR, при переходе от $\epsilon=6$ к $\epsilon=12$. Следует также отметить, что ФЗЗ у 1/1DR является более изотропной, чем у 1/0DR, вследствие того, что создающие ФЗЗ рефлексы имеют более близкие длины векторов обратной решетки. Данный факт является результатом того, что с повышением порядка аппроксиманта структура приближается к геометрии квазикристалла. Как можно заметить на рис.3 и рис.7, частотные диапазоны, в которых лежат ФЗЗ, перекрываются. В результате получается, что с увеличением порядка аппроксиманта сохраняется полная ФЗЗ, следовательно, ею будет обладать и соответствующий квазикристалл [17,18].

Для 1/1DR и 1/1AS условие Брэгга выглядит аналогично случаю 1/1FDR. При $f=0,26$ и $\epsilon=12$ у

1/1DR середина зоны $a\omega/2\pi c = 0,608$, тогда $K^2=14,94$. Таким образом, в основном делают вклад рефлексы типа 321 ($K^2=14$) и 400 ($K^2=16$). При $\epsilon=6$ 1/1DR не имеет полной ФЗЗ. Это можно объяснить тем, что ФЗЗ 1/1DR менее изотропная, чем у 1/1FDR, вследствие меньшего значения модуля вектора обратной решетки. Для 1/1AS при $\epsilon=12$ и $f=0,205$ середина зоны $a\omega/2\pi c = 0,8342$, тогда получается $K^2=23,72$. Значит, ФЗЗ образована в основном рефлексами типа 422 ($K^2=24$). При значениях $\epsilon=6$ и $f=0,297$ середина зоны $a\omega/2\pi c = 0,9538$, следовательно $K^2=23,67$. В процентном соотношении величина K^2 меняется не столь сильно, как в 1/0AS, при переходе от $\epsilon=6$ к $\epsilon=12$. Также из рис.4 и рис.6 видно, что частотные диапазоны ФЗЗ перекрываются для 1/0AS и 1/1AS.

Для каждого значения диэлектрической постоянной определялся оптимальный фактор заполнения диэлектриком, при котором полная ФЗЗ имеет максимальный размер. Данные результаты представлены на рис.8.

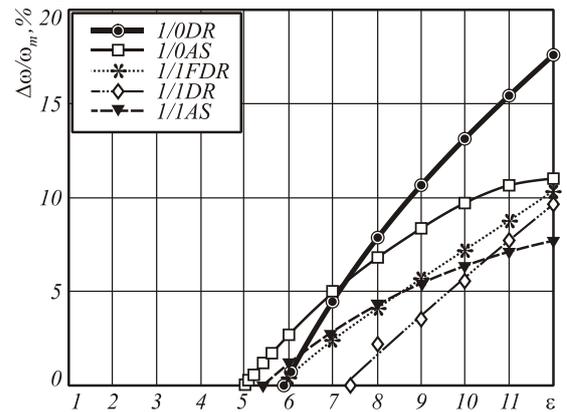


Рис.8. Зависимость размера запрещенной зоны $\Delta\omega/\omega_m$ от диэлектрической постоянной ϵ

Порог возникновения ФЗЗ по диэлектрической постоянной для аппроксимантов 1/0AS, 1/0DR получился равным $\epsilon_{th}=5$, $\epsilon_{th}=5,8$, соответственно. Для аппроксимантов более высокого порядка 1/1AS, 1/1DR, 1/1FDR пороговые значения оказались равными $\epsilon_{th}=5,3$, $\epsilon_{th}=7,4$, $\epsilon_{th}=5,8$, соответственно. Порог ФЗЗ 1/0DR и 1/1FDR получился практически одинаковым, следовательно, при дальнейшем увеличении порядка аппроксимантов мы получим такое же значение порога или немного меньшее [18]. Аналогичные выводы можно сделать для аппроксимантов 1/0AS и 1/1AS. Как можно заметить, порог ФЗЗ у 1/1DR оказался значительно большим, чем у 1/1FDR. Это объясняется влиянием координационного числа атомов. Получается, что для квазикристаллов, построенных из диэлектрических цилиндров, предпочтительней оказывается такое расположение атомов, когда они имеют одинаковое координационное число. Кроме того, можно сделать вывод, что для построения фотонных квазикристаллов с низ-

ким порогом ФЗЗ наиболее предпочтительна конфигурация – воздушные шары в диэлектрике. В принципе, возможно конструирование аппроксимантов с другими наборами сильных рефлексов, которые будут иметь более низкие пороги образования полной ФЗЗ.

Заключение

Теоретически исследована зонная структура трехмерных аппроксимантов фотонных квазикристаллов. Получено, что такие структуры имеют большие изотропные запрещенные зоны для широкого диапазона величины диэлектрической постоянной материала решетки. Исследовано влияние координаты атомов на размер и порог запрещенной зоны. Сделан вывод о наличии полной ФЗЗ у трехмерного фотонного квазикристалла с шестимерной ОЦК решеткой.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке российско-американской программы «Фундаментальные исследования и высшее образование» (RUXO-014-SA-06), гранта РФФИ №07-02-12134 и грантов Президента РФ № НШ-3086.2008.9 и МД-5303.2007.9.

Литература

1. **Shechtman, D.** Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry / D. Shechtman [and other] // *Phys. Rev. Lett.* 1984. -Vol. 53. -p. 1951-1953.
2. **Macia, E.** The role of aperiodic order in science and technology / E. Macia // *Rep. Prog. Phys.* 2006 -Vol. 69. -p. 397-441.
3. **Quilichini, M.** Phonon excitations in quasicrystals / M. Quilichini, T. Janssen // *Rev. Mod. Phys.* 1997. -Vol. 69. -p. 277-314.
4. **Vekilov, Yu. Kh.** Influence of phason flips, magnetic field, and chemical disorder on the localization of electronic states in an icosahedral quasicrystal / Yu. Kh. Vekilov, E. I. Isaev, S. F. Arslanov // *Phys. Rev. B.* 2000. -Vol. 62, -p. 14040-14048.
5. **Krajci, M.** Topologically induced semiconductivity in icosahedral Al-Pd-Re and its approximants / M. Krajci, J. Hafner // *Phys. Rev. B.* 2007. -Vol. 75. -p. 024116.
6. **Chan, Y.S.** Photonic Band Gaps in Two Dimensional Photonic Quasicrystals / Y.S. Chan, C., T. Chan, Z.Y. Liu // *Phys. Rev. Lett.* 1998, -Vol 80, -p. 956-959.
7. **Yablonovitch, Y.** Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics / Y. Yablonovitch // *Phys. Rev. Lett.* 1987, -Vol. 58, -p. 2059-2062.
8. **John, S.** Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices / S. John // *Phys. Rev. Lett.* 1987. -Vol. 58. -p. 2486-2489.
9. **Johnson, S.J.** Photonic Crystals: The Road from Theory to Practice / S.J. Johnson, J.D. Joannopoulos // Kluwer Academic Publishers, London, 2003.
10. **Joannopoulos, J.D.** Photonic Crystals: Molding the Flow of Light, / J.D. Joannopoulos, R.D. Meade, J.N. Winn // Princeton University Press, Singapore, 1999.
11. **Ho, K. M.** Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures / K.M. Ho // C. T. Chan, and C. M. Soukoulis // *Phys. Rev. Lett.* 1990. -Vol 65. -p. 3152.
12. **Zoorob, M.E.** Complete photonic bandgaps in 12-fold symmetric quasicrystals / M.E. Zoorob [and other] // *Nature* 2000. -Vol. 404, -p. 740-743.
13. **Man, W.** Experimental measurement of the photonic properties of icosahedral quasicrystals / W. Man [and other] // *Nature.* 2005, -Vol. 436. -p. 993-996.
14. **Lidermann, A.** Three-dimensional silicon inverse photonic quasicrystals for infrared wavelengths / A.Lidermann [and other] // *Nature Mater.* 2006. -Vol. 5. -p. 942-945.
15. **Xu, J.** Icosahedral quasicrystals for visible wavelengths by optical interference holography / J. Xu [and other] // *Opt. Express* 2007. -Vol. 15. -p. 4287-4295.
16. **Peach, M.** Quasicrystals step out of the shadows / M. Peach // *Materials Today.* 2006. -Vol. 9. -p. 44-47.
17. **Wang, K.** Photonic band gaps in quasicrystal-related approximant structures / K. Wang [and other] // *J. Mod. Opt.* 2003. -Vol. 50. -p. 2095-2105.
18. **Dyachenko, P.N.** Band structure calculations of 2D photonic pseudoquasicrystals obtainable by holographic lithography / P.N. Dyachenko, Yu.V. Miklyaev // *Proc. of SPIE,* 2006, -Vol. 6182. -p. 61822I.
19. **Dmitrienko, V.E.** Icosahedral order and disorder in semiconductors / V.E. Dmitrienko, M. Kleman // *Philos. Mag. Lett.* 1999, -Vol. 79, -p. 359-367.
20. **Dmitrienko, V.E.** Quasicrystal-related phases in tetrahedral semiconductors: Structure, disorder, and ab initio calculations / V.E. Dmitrienko, M. Kleman, F. Mauri // *Phys. Rev. B.* 1999. -Vol. 60. -p. 9383-9389.
21. **Johnson, S.G.** Block-iterative frequency-domain methods for Maxwell's equations in a planewave basis / S.G. Johnson, J.D. Joannopoulos // *Opt. Express.* 2001, -Vol. 8. -p. 173-190.
22. **Харрисон, У.** Теория твердого тела / У. Харрисон - М.: Мир, 1972.

PHOTONIC BAND GAP STRUCTURE OF THE THREE-DIMENSIONAL APPROXIMANTS QUASICRYSTAL

P.N. Dyachenko^{1,2}, J.V. Miklyaev¹, V.E. Dmitrienko², V.S. Pavelyev^{1,2}

¹*Image Processing Systems Institute RAS, Samara, Russia,*

²*S.P. Korolev Samara State Aerospace University, Samara, Russia*

³*South-Ural State University, Dept. of Optics and Spectroscopy, Chelyabinsk, Russia,*

⁴*A.V. Shubnikov Institute of Crystallography Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

Abstract

For the first time, the band structure of three-dimensional cubic photonic approximants of quasicrystals is studied theoretically. The approximants of different orders are found to have large, near-isotropic band gaps in a wide range of permittivity values. The effect of atom coordination on the size and threshold of the photonic band gap is explored. The existence of a complete band gap in the cubic photonic quasicrystal with a body-centered six-dimensional lattice is demonstrated.

Key words: photonic quasicrystals, photonic band gap.

Citation: Dyachenko PN, Miklyaev JuV, Dmitrienko VE, Pavelyev VS. Photonic band gap structure of the three-dimensional approximants quasicrystal. *Computer Optics* 2008; 32(3): 216-22.

Acknowledgements: The work was supported by the Russian-American program "Basic Research and Higher Education" (RUXO-014-SA-06), the grant RFFI №07-02-12134 and grants President of the Russian Federation number NS-3086.2008.9 and MD-5303.2007. 9.

References

- [1] Shechtman D. Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry. *Phys. Rev. Lett.* 1984; 53: 1951-1953.
- [2] Macia E. The role of aperiodic order in science and technology. *Rep. Prog. Phys.* 2006; 69: 397-441.
- [3] Quilichini M, Janssen T. Phonon excitations in quasicrystals. *Rev. Mod. Phys.* 1997; 69: 277-314.
- [4] Vekilov YuKh, Isaev EI, Arslanov SF. Influence of phason flips, magnetic field, and chemical disorder on the localization of electronic states in an icosahedral quasicrystal. *Phys. Rev. B* 2000; 62: 14040-14048.
- [5] Krajci M, Hafner J. Topologically induced semiconductivity in icosahedral Al-Pd-Re and its approximants. *Phys. Rev. B* 2007; 75: 024116.
- [6] Chan YS, Chan CT, Liu ZY. Photonic Band Gaps in Two Dimensional Photonic Quasicrystals. *Phys. Rev. Lett.* 1998; 80: 956-959.
- [7] Yablonovitch Y. Inhibited spontaneous emission in solidstate physics and electronics. *Phys. Rev. Lett.* 1987; 58: 2059-2062.
- [8] John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. *Phys. Rev. Lett.* 1987; 58: 2486-2489.
- [9] Johnson SJ, Joannopoulos JD. *Photonic Crystals: The Road from Theory to Practice.* Kluwer Academic Publishers, London 2003.
- [10] Joannopoulos JD, Meade RD, Winn JN. *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light.* Princeton University Press, Singapore 1999.
- [11] Ho KM, Chan CT, Soukoulis CM. Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures. *Phys. Rev. Lett.* 1990; 65: 3152.
- [12] Zoorob ME. Complete photonic bandgaps in 12-fold symmetric quasicrystals. *Nature* 2000; 404: 740-743.
- [13] Man W. Experimental measurement of the photonic properties of icosahedral quasicrystals. *Nature* 2005; 436: 993-996.
- [14] Lidermann A. Three-dimensional silicon inverse photonic quasicrystals for infrared wavelengths. *Nature Mater.* 2006; 5: 942-945.
- [15] Xu J. Icosahedral quasicrystals for visible wavelengths by optical interference holography. *Opt. Express* 2007; 15: 4287-4295.
- [16] Peach M. Quasicrystals step out of the shadows. *Materials Today* 2006; 9: 44-47.
- [17] Wang K. Photonic band gaps in quasicrystal-related approximant structures. *J. Mod. Opt.* 2003; 50: 2095-2105.
- [18] Dyachenko PN, Miklyaev YuV. Band structure calculations of 2D photonic pseudoquasicrystals obtainable by holographic lithography. *Proc. of SPIE* 2006; 6182: 61822I.
- [19] Dmitrienko VE, Kleman M. Icosahedral order and disorder in semiconductors. *Philos. Mag. Lett.* 1999; 79: 359-367.
- [20] Dmitrienko VE, Kleman M, Mauri F. Quasicrystal-related phases in tetrahedral semiconductors: Structure, disorder, and ab initio calculations. *Phys. Rev. B* 1999; 60: 9383-9389.
- [21] Johnson SG, Joannopoulos JD. Block-iterative frequency-domain methods for Maxwell's equations in a planewave basis. *Opt. Express* 2001; 8: 173-190.
- [22] Harrison W. *Solid State Theory* [In Russian]. Moscow: "Mir" Publisher; 1972.