



# LEPM

## ДЕСЯТЫЙ МЕЖДУНАРОДНЫЙ МОЛОДЕЖНЫЙ СИМПОЗИУМ

**ФИЗИКА БЕССВИНЦОВЫХ ПЬЕЗОАКТИВНЫХ И РОДСТВЕННЫХ  
МАТЕРИАЛОВ. МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКО-СИСТЕМ**

(Анализ современного состояния и перспективы развития)

**PHYSICS OF LEAD-FREE PIEZOACTIONIVE AND  
RELATED MATERIALS. MODELING OF ECO-SYSTEMS**

(Analysis of current state and prospects of development)

Сборник трудов **Том I**

**27-28** ДЕКАБРЯ

**2021**



Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования "Южный федеральный университет"  
Федеральный исследовательский центр «Южный научный центр  
Российской академии наук»  
Научно - исследовательский институт физики Южного федерального  
университета  
Молодежный физико-технический научно-инновационный центр  
ЮФУ–ЮНЦ РАН,  
Совместный студенческий научно-исследовательский институт  
физического материаловедения ЮНЦ РАН – НИИ физики ЮФУ

**ФИЗИКА БЕССВИНЦОВЫХ ПЬЕЗОАКТИВНЫХ И  
РОДСТВЕННЫХ МАТЕРИАЛОВ. МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ЭКО-СИСТЕМ (АНАЛИЗ СОВРЕМЕННОГО СОСТОЯНИЯ  
И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ)**

Труды Десятого Международного междисциплинарного молодежного  
симпозиума

г. Ростов-на-Дону, 27–28 декабря 2021 года

**Том 1**

Ростов-на-Дону  
2021

УДК. 621.315.612  
ББК 22.3  
Ф50

**Редакционная коллегия:**

**Резниченко Л.А.**, д.ф.-м.н., профессор, зав. отделом интеллектуальных материалов и нанотехнологий НИИ физики Южного федерального университета, г. Ростов-на-Дону.

**Вербенко И.А.**, д.ф.-м.н., директор НИИ физики Южного федерального университета, г. Ростов-на-Дону.

**Павелко А.А.**, к.ф.-м.н., директор молодежного физико-технического научно-инновационного центра ЮФУ–ЮНЦ РАН, зав. лабораторией диэлектрических и пьезоэлектрических измерений НИИ физики Южного федерального университета, г. Ростов-на-Дону.

**Андрюшин К.П.**, к.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник отдела интеллектуальных материалов и нанотехнологий НИИ физики Южного федерального университета, г. Ростов-на-Дону.

«Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов. Моделирование экосистем (Анализ современного состояния и перспективы развития)». Труды Десятого Международного междисциплинарного молодежного симпозиума.

Вып. 10.: в 2 т. - Ростов-на-Дону, 27–28 декабря 2021 г.

Труды симпозиума: в 2 т. – Ростов-на-Дону. Изд-во Южного федерального университета, 2021.

ISBN 978-5-907361-93-5

Т.1: 2021. – 324с.: ил.

ISBN 978-5-907361-94-2 (Т1)

Proceedings of the international symposium «Physics of Lead-Free Piezoactive and Related Materials. Modeling of eco-systems (Analysis of Current State and Prospects of Development)».

В сборнике представлены труды Десятого Международного междисциплинарного молодежного симпозиума «Физика бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов. Моделирование экосистем (Анализ современного состояния и перспективы развития) («LFPM-2021)», посвященного 50-летию со дня основания Научно-исследовательского института физики Южного федерального университета. В рамках симпозиума, проходившего в Ростове-на-Дону 27–28 декабря 2021 г., рассматриваются вопросы разработки, создания, исследования и перспектив практического применения бессвинцовых пьезоактивных и родственных материалов.

Сборник предназначен для научных работников, преподавателей, аспирантов, студентов и всех интересующихся современной наукой исследователей.

Подготовка и проведение Симпозиума «LFPM-2021», а также выпуск сборника трудов осуществлены при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ: Государственное задание в сфере научной деятельности научный проект № (0852-2020-0032)/(БА30110/20-3-07ИФ).

Публикуется в авторской редакции.

57.	О МЕТОДЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПОТЕРЬ ЭНЕРГИИ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ГИСТЕРЕЗИС В ПРОМЫШЛЕННЫХ МАТЕРИАЛАХ НА ОСНОВЕ ЦТС-СИСТЕМЫ Н.В. Макинян, Б.О. Проценко, К.П. Андрияшин, М.О. Мойса, В.Ю. Тополов	254
58.	ИЗЛУЧЕНИЕ ВАВИЛОВА-ЧЕРЕНКОВА В РЕНГЕНОВСКОМ ДИАПАЗОНЕ Д.А. Папазян	258
59.	МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ГЕНЕРАТОРА ЭНЕРГИИ ОСЕВОГО ТИПА С АКТИВНЫМ ОСНОВАНИЕМ И.А. Паринов, А.В. Черпаков, Р.К. Халджар	262
60.	НЕЛИНЕЙНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ЧАСТОТ ТЕРАГЕРЦОВОГО И ИНФРАКРАСНОГО ДИАПАЗОНОВ ПЛАЗМОННЫМИ МЕТАПОВЕРХНОСТЯМИ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА А.М. Лерер, Г.С. Макеева, В.В. Черепанов	266
	<b>Секция 4. Средства автоматизации и информационные технологии в физике бессвинцовых и родственных материалов. Компьютерное моделирование физического эксперимента</b>	270
61.	ИССЛЕДОВАНИЯ ЛОКАЛЬНОГО АТОМНОГО ПОРЯДКА В ЭЛЕКТРОКЕРАМИКЕ МЕТОДОМ ОБРАТНОГО МОНТЕ-КАРЛО В ПАКЕТЕ RMCProfile М. В. Еременко, В. Л. Крайзман	271
62.	ELASTIC MODULUS PREDICTION OF FLEXIBLE PAVEMENT THROUGH THE ARTIFICIAL INTELLIGENCE MODELS M.M.M. Elshamy, A.N. Tiraturyan	274
63.	ОСОБЕННОСТИ В МОДЕЛИРОВАНИИ ДИСПЕРСИИ ОПТИЧЕСКИХ КОНСТАНТ НИОБАТА БАРИЯ-СТРОНЦИЯ А.П. Ковтун	279
64.	АППРОКСИМАЦИЯ НИСХОДЯЩЕЙ ВЕТВИ P-E ПЕТЛИ ТВЕРДОГО РАСТВОРА $0.8\text{NaNbO}_3 - 0.1\text{KNbO}_3 - 0.1\text{CdNb}_2\text{O}_6$ М.О. Мойса, К.П. Андрияшин	281
65.	ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ СВОЙСТВ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО КОМПОЗИТА СО СЛУЧАЙНО РАСПРЕДЕЛЕННЫМИ ПОЛЫМИ МЕТАЛЛИЧЕСКИМИ ВКЛЮЧЕНИЯМИ А.В. Наседкин, М.Э. Нассар	285
66.	МОДЕЛИРОВАНИЕ КАТИОННОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ В СЛОЖНЫХ ОКСИДАХ $\text{AB}'_{(1-x)}\text{B}''_x\text{O}_3$ СО СТРУКТУРОЙ ПЕРОВСКИТА МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО Б.О. Проценко, Н.В. Тер-Оганесян	289
67.	DFT-ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НОВЫХ ПРЕКУРСОРОВ МЕТАТЕЗИСНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ А.Ф. Саггарова, Ю.Н. Биглова	293
	<b>Секция 5. Интеллектуальные производственные технологии, новые цифровые материалы и способы их конструирования, экологические проблемы современного фундаментального материаловедения</b>	296
68.	ВЛИЯНИЕ УДЕЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТИ ТЕХНИЧЕСКОГО УГЛЕРОДА НА СВОЙСТВА ИЗОПРЕНОВЫХ ЭЛАСТОМЕРОВ И.С. Макаров, А.А. Дьяконов, А.А. Охлопкова, С.А. Слепцова, Н.Н. Петрова, П.В. Винокуров	297
69.	ЗАКРЫТЫЙ ЯДЕРНЫЙ ТОПЛИВНЫЙ ЦИКЛ Т. К. Сайфудинов, В.С. Мальшевский, Н.В. Маломыжева	300
70.	ГУМИНОВЫЕ ВЕЩЕСТВА КАК СОРБЕНТЫ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ А. Тиркешов, Е.В. Зайцева, О.В. Недоедкова, М.А. Кремленная, Г.Э. Яловега	305
71.	РАЗРАБОТКА СПОСОБА МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЕФЕКТНЫХ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛОВ С ЗАДАННЫМИ СВОЙСТВАМИ Молчанова Е.С., Техтелев Ю.В., Кара-Мурза С.В., Сильчева А.Г.	308
	АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ	312
	СОДЕРЖАНИЕ	317

## РАЗРАБОТКА СПОСОБА МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЕФЕКТНЫХ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛОВ С ЗАДАНЫМИ СВОЙСТВАМИ

Молчанова Е.С., Техтелев Ю.В., Кара-Мурза С.В., Сильчева А.Г.

<sup>1</sup>*Луганский государственный педагогический университет, ул. Оборонная, 2, Луганск  
e-mail: [s.karamurza@gmail.com](mailto:s.karamurza@gmail.com)*

Предложен способ моделирования дефектных фотонных кристаллов с наперед заданными свойствами – шириной запретной зоны и ее центральной длиной волны. Способ основан на использовании матричного метода расчета коэффициентов пропускания и отражения в многослойных наноструктурах с учетом вклада материала подложки макроскопической толщины. Приведены результаты компьютерного моделирования дефектных фотонных кристаллов с различными оптическими характеристиками.

## DEVELOPMENT OF A METHOD FOR MODELING DEFECTIVE PHOTONIC CRYSTALS WITH SPECIFIC PROPERTIES

Molchanova E.S., Tehtelev Yu.V., Kara-Murza S.V., Silcheva A.G.

*Lugansk State Pedagogical University, No. 2Oboronnaya str., Lugansk, 91000, Ukraine.  
e-mail: [s.karamurza@gmail.com](mailto:s.karamurza@gmail.com)*

A method is proposed for modeling defective photonic crystals with predetermined properties - the gap width and its central wavelength. The method is based on the use of a matrix method for calculating the transmission and reflection coefficients in multilayer nanostructures taking into account the contribution of the substrate material of macroscopic thickness. The results of computer simulation of photonic crystals with different optical characteristics are presented.

### **Введение**

Фотоника является одним из наиболее перспективных направлений развития микросхемной техники. Она представляет собой область прикладной физики, в которой разрабатываются теория и вопросы практического изготовления устройств, объектами управления в которых служат не электроны, а фотоны [4]. Создание фотонных кристаллов является важнейшим направлением. Фотонные кристаллы – материалы, воздействующие на распространяющиеся в них электромагнитные волны (фотоны) так же, как и периодический потенциал в кристаллах влияет на движение электронов, что приводит к формированию в таких фотонных кристаллах разрешенных и запрещенных энергетических зон [4]. Наличие запрещенной зоны обуславливает возможности использования фотонных кристаллов в различных оптических приборах. Например, микрорезонаторы (лазеры) – фотонно–кристаллические структуры с внедренным дефектом активной среды, оптические волокна и различные преобразователи для волоконной оптики. Использование фотонных кристаллов приводит к возможности создания полностью оптических вычислительных микрочипов и выводит интегральную оптику на более серьезный уровень.

Фотонные кристаллы — периодические диэлектрические или металлодиэлектрические материалы, воздействующие на распространяющиеся по ним электромагнитные волны, так же, как и периодический потенциал в кристаллах влияет на движение электронов. Это приводит к формированию в них разрешенных и запрещенных энергетических зон [5].

Фотонные кристаллы разделяют на три основных класса по характеру изменения коэффициента преломления [4]. *Одномерные фотонные кристаллы* характеризуются периодическим изменением коэффициента преломления в одном пространственном направлении. Подобные фотонные кристаллы имеют параллельные друг другу слои различных материалов с разными коэффициентами преломления. *Двумерные фотонные кристаллы* характеризуются периодическим изменением коэффициента преломления в двух пространственных направлениях. Такой кристалл имеет прямоугольные области с

коэффициентом преломления  $n_1$ , находящиеся в среде с коэффициентом преломления  $n_2$ . При этом в двумерной кубической решетке области с коэффициентом преломления  $n_1$  упорядочены.

*Трехмерные фотонные кристаллы* характеризуются периодическим изменением коэффициента преломления в трех пространственных направлениях. Такие фотонные кристаллы проявляют свои свойства в трех пространственных направлениях. Их можно представить, как массив объемных областей (кубов, сфер и т.д.), упорядоченных в трехмерной кристаллической решетке.

В настоящей работе представлены способ расчета коэффициента пропускания и результаты компьютерного моделирования свойств одномерного фотонного кристалла с дефектным слоем в зависимости от показателей преломления периодически чередующихся слоев и произвольного их количества.

### Расчет коэффициента оптического пропускания

Расчет коэффициента пропускания выполнялся для фотонного кристалла, состоящего из  $m$  прозрачных периодически повторяющихся структур с находящимся между ними дефектным слоем. Периодически повторяющиеся структуры состоят из двух параллельных прозрачных слоев с показателями преломления  $n_1$  и  $n_2$  соответственно, представляющих собой

четвертьволновые микрорезонаторы с резонансной длиной волны  $\lambda_0$  и толщиной  $d_1 = \frac{\lambda_0}{4n_1}$  и  $d_2 = \frac{\lambda_0}{4n_2}$  (рис. 1). Дефектный слой имеет показатель преломления  $n_3$  и толщину  $d_3 = \frac{\lambda_0}{4n_3}$ .

Рассматривается пропускание фотонного кристалла в воздухе ( $n_0$ ) при нормальном падении электромагнитной волны в оптическом диапазоне длин волн.

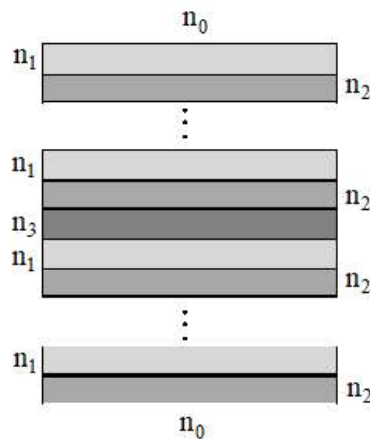


Рис. 1. Геометрия фотонного кристалла с дефектным слоем.

Коэффициент пропускания рассматриваемой системы рассчитывался по формуле:

$$T = |t|^2 = \left( \frac{1}{s_{11}} \right)^2, \quad (1)$$

где  $t_{030}$  – амплитудный коэффициент пропускания системы воздух–фотонный кристалл–воздух, и  $S$  – матрица рассеяния для системы воздух–фотонный кристалл–воздух, имеющая вид [6-7]:

$$S = \hat{R}_{01} \hat{F}_1 \hat{R}_{12} (\hat{F}_2 \hat{R}_{21} \hat{F}_1 \hat{R}_{12})^{m-1} \cdot \hat{F}_2 \hat{R}_{23} \hat{F}_3 \hat{R}_{31} \hat{F}_1 \hat{R}_{12} \cdot (\hat{F}_2 \hat{R}_{21} \hat{F}_1 \hat{R}_{12})^{m-1} \hat{F}_2 \hat{R}_{20}. \quad (2)$$

Здесь  $m$  – число повторяющихся слоев,  $\hat{R}$  и  $\hat{F}$  – матрицы преломления и набега фаз в слоях. При этом

$$\hat{R}_{01} = \frac{1}{t_{01}} \begin{pmatrix} 1 & r_{01} \\ r_{01} & 1 \end{pmatrix} \quad \hat{R}_{12} = \frac{1}{t_{12}} \begin{pmatrix} 1 & r_{12} \\ r_{12} & 1 \end{pmatrix} \quad \hat{R}_{21} = \frac{1}{t_{21}} \begin{pmatrix} 1 & r_{21} \\ r_{21} & 1 \end{pmatrix}$$

$$\widehat{R}_{23} = \frac{1}{t_{23}} \begin{pmatrix} 1 & r_{23} \\ r_{23} & 1 \end{pmatrix} \quad \widehat{R}_{31} = \frac{1}{t_{31}} \begin{pmatrix} 1 & r_{31} \\ r_{31} & 1 \end{pmatrix} \quad \widehat{R}_{20} = \frac{1}{t_{20}} \begin{pmatrix} 1 & r_{20} \\ r_{20} & 1 \end{pmatrix}$$

где  $t_{ik}$  и  $r_{ik}$  соответствующие амплитудные (френелевские) коэффициенты пропускания и отражения.

Многочисленные отражения не рассматриваются в силу малости их вклада.

### Результаты компьютерного моделирования

Нами выполнялись расчеты коэффициента пропускания условного фотонного кристалла, изготовленного из прозрачных материалов слоев с показателями преломления  $n_1 = 1,6$ ,  $n_2 = 2$  и  $n_3 = 2,8$ . Варьировались толщины слоев, т.е. резонансная длина волны микрорезонаторов, и количество их повторений  $m$ . Расчет выполнялся в диапазоне длин волн 200 – 1600 нм с шагом 10 нм. На рис. 2а,б и 3а,б представлены в качестве примеров полученные спектры пропускания дефектных фотонных кристаллов с числом периодически повторяющихся структур  $m=1$  и  $m=4$  с резонансными длинами волн  $\lambda_0 = 300$  нм и  $\lambda_0 = 1000$  нм.

Из рис. 2 и 3 видно, как с увеличением количества  $m$  чередующихся слоев 12 в спектре пропускания фотонного кристалла со структурой вида  $(12)^m 3(12)^m$  формируется запрещенная зона. Изменяя параметры и количество слоев, а также изменяя параметры «дефекта» можно управлять свойствами таких материалов.

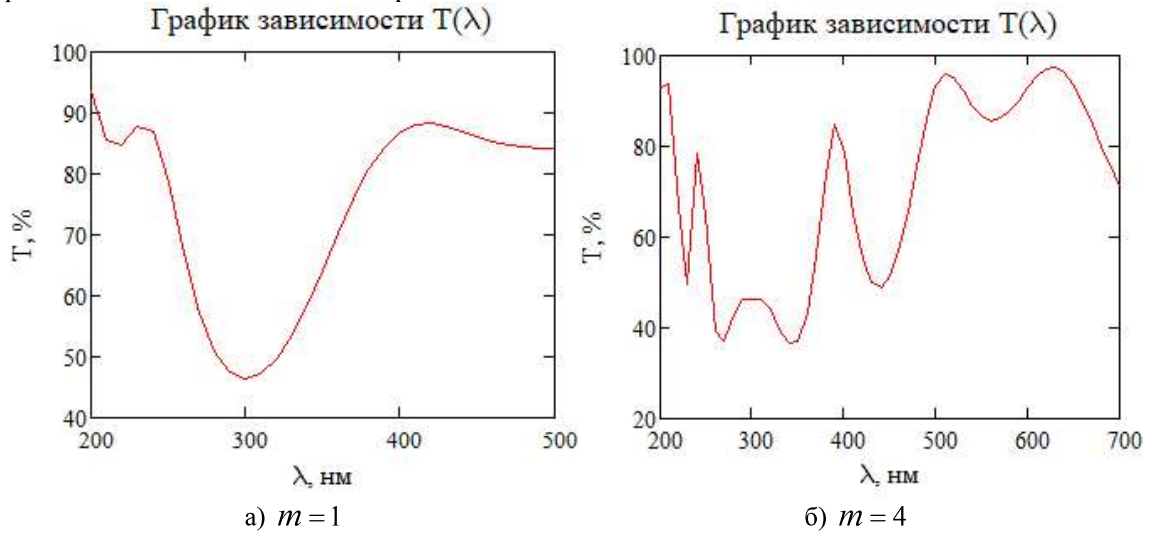


Рис. 2. Резонансная длина волны  $\lambda_0 = 300$  нм

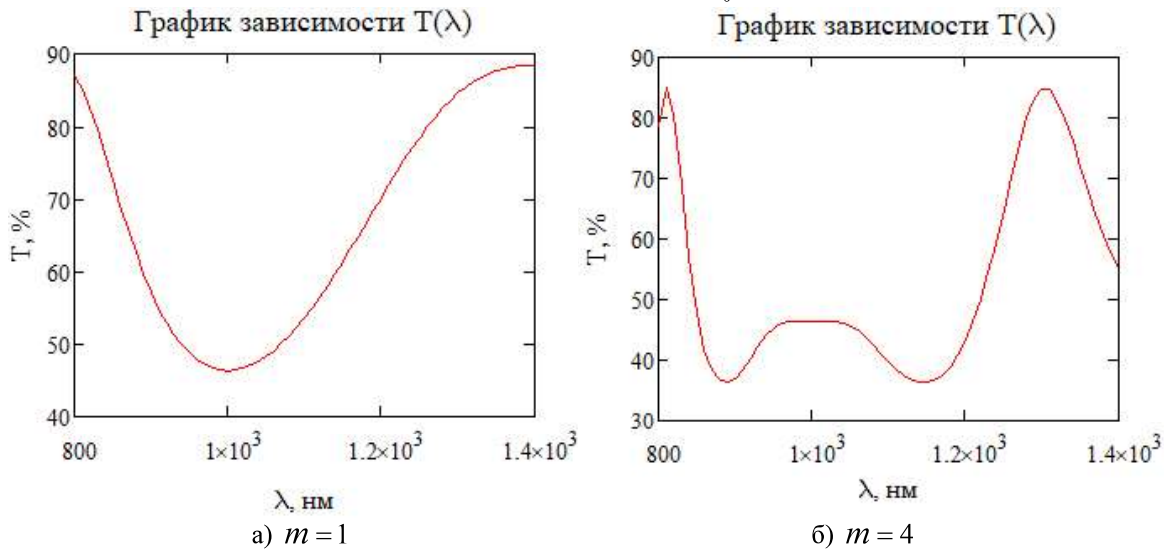


Рис. 3. Резонансная длина волны  $\lambda_0 = 1000$  нм

### **Заключение**

Одним из важнейших применений одномерных фотонных кристаллов является изготовление диэлектрических покрытий с уникальными оптическими характеристиками. Такие покрытия используются для создания высокоэффективных оптических спектральных фильтров, уменьшения нежелательного отражения от оптических элементов и диэлектрических зеркал с коэффициентом отражения, близким к 100%. Так же еще одним примером одномерных фотонных структур являются полупроводниковые лазеры с распределенной обратной связью и оптические волноводы с периодической продольной модуляцией физических параметров (профиль или показатель преломления).

Так как формирование таких прецизионных многослойных структур является высокотехнологичной операцией, необходимо заранее проводить оптимизацию параметров фотонного кристалла или фильтра для решения поставленных задач. Для этих целей применяются методы численного моделирования, один из которых представлен в настоящей работе. Эффективность рассмотренного метода подтверждается полученными результатами.

### **Список литературы**

1. Игнатов А.Н. Оптоэлектроника и нанопотоника. — СПб: Изд. «Лань», 2011. — 596 с.
2. Ярив А. Введение в оптическую электронику. — М.: Высшая школа, 1983. — 398 с.
3. Астапенко В.А. Физические основы фотоники. — М.: МФТИ, 2005. — 104 с.
4. Белотелов В.И., Звездин А.К. Фотонные кристаллы и другие материалы. — М.: Библиотечка «Квант», 2006. — 144 с. 5.
5. Пул Ч., Лоуэнс Ф. Мир материалов и технологий. Нанотехнологии. — М.: Техносфера, 2001 — 327 с.
6. Тихий А.А., Грицких В.А., Кара-Мурза С.В., Корчикова Н.В., Николаенко Ю.М., Фарапонов В.В., Жихарев И.В. Эллипсометрический метод определения оптических параметров тонкопленочных покрытий со сложной структурой // Оптика и спектроскопия, 2015, том 119, № 2, С. 282–285.
7. Грицких В.А., Жихарев И.В., Кара-Мурза С.В., Корчикова Н.В., Николаенко Ю.М., Тихий А.А. Методы обработки результатов эллипсометрических измерений.// Труды 7-го международного симпозиума «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы». — Туапсе (16-21 сентября 2017), вып.7, С.53-57.
8. Кара-Мурза С.В., Жидель К.М., Корчикова Н.В., Павленко А.В., Тихий А.А. Спектрофотометрические исследования пленок  $\text{Sr}_{0,5}\text{Ba}_{0,5}\text{Nb}_2\text{O}_6$  (SBN-50) на кристаллических подложках  $\text{Al}_2\text{O}_3$  (001) и  $\text{MgO}$  (001).// Вестник Луганского национального университета имени В.Даля. Материалы Международная научно-практическая конференция «Открытые физические чтения – 2018», №5 (11), Луганск 2018 – С. 62-67.