

УДК 537.876.2

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛОТНОСТЕЙ
ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ СОСТОЯНИЙ В ОДНОМЕРНЫХ И
ДВУМЕРНЫХ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛАХ

Савченко С.Ю., Смирнов Ю.В., Тимошенко Ю.К.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Воронежский государственный университет»

E-mail: yutim@phys.vsu.ru

Аннотация: Работа является обобщением результатов, полученных нами ранее. Рассмотрено применение различных методов построения гистограмм полной плотности электромагнитных состояний для идеальных фотонных кристаллов и фотонных кристаллов с дефектами. Проведен анализ допустимости применения этих методик. Предложен новый подход к расчету гистограмм полной плотности электромагнитных состояний без использования унитарных преобразований.

Ключевые слова: фотонные кристаллы, плотность электромагнитных состояний, метод плоских волн, компьютерное моделирование.

COMPUTER MODELING OF ELECTROMAGNETIC STATES DENSITY IN
ONE-DIMENSIONAL AND TWO-DIMENSIONAL PHOTON CRYSTALS

Savchenko S.Yu., Smirnov Yu.V., Timoshenko Yu.K.

Federal State Budget Educational Institution of Higher Education
«Voronezh State University»

E-mail: yutim@phys.vsu.ru

Summary: The work is a synthesis of the result, which we got earlier. Here we look at the application of different methods of building histograms, showing the total density of electromagnetic states for both ideal photonic crystals and the photonic crystals with defects. The work also offers the analysis of the admissibility of these models. Besides, we suggest a new approach to the construction of histograms, showing total density of electromagnetic states, without using unitary transformations.

Keywords: Photonic crystals, density of electromagnetic states, plane wave method, computer simulation.

Введение

Начиная с девяностых годов двадцатого века интенсивно изучаются фотонно-кристаллические системы, которые нашли применение в различных областях науки и техники. Одним из основных подходов к изучению таких систем является компьютерное моделирование. Ранее нами было проведено компьютерное моделирование дисперсии электромагнитных состояний как в одномерных, так и в двумерных фотонных кристаллах. Кроме того, большое внимание уделялось методике расчета плотности электромагнитных колебательных мод в таких системах. Было рассмотрено несколько численных подходов к решению этих задач. Использовались различные технологии программирования, включая параллельное программирование. Данная работа является кратким самообзором выполненных нами исследований.

Модели и методы

Как известно, частотный спектр собственных колебательных мод электромагнитного поля в фотонном кристалле (ФК) может иметь так называемые стоп-зоны (аналоги запрещённых зон в электронной теории кристаллов). Информация о положении стоп-зон на частотной шкале даёт представление об областях пропускания (даже без расчёта спектра пропускания) и поэтому является важнейшей оптической характеристикой ФК. Однако часто этих данных оказывается недостаточно. В частности, для оценки интенсивности спонтанного излучения (например, возбуждённого неоптическим путём примесного атома в ФК необходимо иметь данные о плотности электромагнитных состояний.

Наибольший интерес для практического применения представляют собой ФК с дефектами. Дефектами фотонных кристаллов называются нарушения регулярной структуры – это может быть, как пространственная неоднородность, так и изменение диэлектрической проницаемости в локальной области. Исследование подобных ФК влечёт за собой необходимость использования приближения суперячейки, которое является избыточным для идеальных ФК. Кроме этого, для получения физически корректных результатов требуется применение широкого базиса плоских волн. Ранее нами было показано, что недостаточная ширина базиса может приводить к появлению нефизических пиков на графиках плотности состояний [1].

Положение стоп-зон в фотонной зонной структуре даёт важную информацию как для фундаментальной науки, так и для прикладных дисциплин, имеющих отношение к фотонике [2, 3]. Одним из путей получения данных о стоп-зонах яв-

ляется компьютерное моделирование полной плотности электромагнитных состояний (ППЭС) в фотонном кристалле. Стандартный подход к расчёту ППЭС связан с расчётом дисперсионных кривых $\omega_n(\mathbf{k})$, $\forall \mathbf{k} \in BZ$, где ω – частота стационарной колебательной моды, \mathbf{k} – волновой вектор, BZ – первая зона Бриллюэна, n – номер зоны. Чаще всего для вычисления $\omega_n(\mathbf{k})$ применяют метод плоских волн (МПВ). Этот метод имеет множество вариантов. Один из последних представлен в работе [4], в которой учитываются поляритонные эффекты. Однако в большинстве работ, в которых используется МПВ, рассматриваются математические модели фотонных кристаллов с не зависящей от частоты диэлектрической проницаемостью [2, 3]. Это позволяет в рамках МПВ свести задачу определения $\omega_n(\mathbf{k})$ из волнового уравнения Гельмгольца к решению обобщённой алгебраической проблемы собственных значений для комплексных эрмитовых матриц большой размерности с применением унитарных преобразований.

Кроме того, для расчета ППЭС использовался МПВ в скалярно-векторном приближении. Решения для напряжённости электрического поля в этом случае, например, находятся из системы алгебраических уравнений ([3], с. 16):

$$-\sum_{\mathbf{G}'} \kappa(\mathbf{G} - \mathbf{G}')(\mathbf{k} + \mathbf{G}') \times ((\mathbf{k} + \mathbf{G}') \times \mathbf{E}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{G}')) = \frac{\omega_n^2(\mathbf{k})}{c^2} \mathbf{E}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{G}), \quad (1)$$

где \mathbf{G} – вектор обратной решётки, c – скорость света, $\mathbf{E}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{G})$ – коэффициент в фурье-разложении:

$$\mathbf{E}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{E}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{G}) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}}, \quad (2)$$

а $\kappa(\mathbf{G})$ имеет вид

$$\kappa(\mathbf{G}) = \frac{1}{V} \int_V \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}. \quad (3)$$

Здесь V – объём элементарной ячейки фотонного кристалла, $\varepsilon(\mathbf{r})$ – диэлектрическая проницаемость. Так как $\varepsilon(\mathbf{r})$ является действительной функцией, то фурье-коэффициенты должны удовлетворять равенству $\kappa(-\mathbf{G}) = \kappa^*(\mathbf{G})$.

Одномерные кристаллы

В одномерном случае уравнение (1) приобретает вид

$$\sum_{\mathbf{G}'} \kappa(\mathbf{G} - \mathbf{G}')(\mathbf{k} + \mathbf{G}')^2 E_{\mathbf{k}n}(\mathbf{G}') = \frac{\omega_n^2(\mathbf{k})}{c^2} E_{\mathbf{k}n}(\mathbf{G}). \quad (4)$$

Диэлектрическая проницаемость задаётся в виде

$$\varepsilon(x) = \begin{cases} \varepsilon_1, & x \in [0, a_1], \\ \varepsilon_2, & x \in [a_1, a]; \end{cases} \quad (5)$$

Интеграл (3) с учетом (5) легко берется

$$\kappa(G) = \begin{cases} \frac{1}{a} \left(\frac{a_1}{\varepsilon_1} + \frac{a-a_1}{\varepsilon_2} \right), & \text{if } G=0 \\ i \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 \varepsilon_2} \cdot \frac{1 - e^{-ia_1 G}}{aG}, & \text{if } G \neq 0 \end{cases} \quad (6)$$

Фактически система уравнений (6) представляет собой обобщенную алгебраическую проблему на собственные значения и собственные векторы вида

$$\| \kappa \| \| B(k) \| \| E(k) \|_n = \frac{\omega_n^2(k)}{c^2} \| E(k) \|_n, \quad (7)$$

где κ – комплексная эрмитова матрица, $\| B(k) \|$ – вещественная положительно определённая диагональная матрица, $\| E(k) \|_n$ – собственный вектор, соответствующий n -му собственному значению $\omega_n^2(k)/c^2$.

Вместо выполнения унитарных преобразований нами была использована известная теорема ([6], с. 204). Используя предложенный нами подход при вычислении количества собственных значений для произвольной величины λ без использования унитарных преобразований, можно, изменяя ее с заданным шагом, рассчитать гистограмму ППЭС. Такой подход может легко применяться к нанокристаллам содержащим фиксированное число атомов или ионов. Однако в случае идеального фотонного кристалла имеет место трансляционная инвариантность, что приводит к появлению в теории волнового вектора (числа) $k \in BZ$ и необходимости вычислений для всех его актуальных значений. Чтобы избавиться от этого, в работе [5] было использовано приближение суперячейки.

Результаты расчетов приведены на рисунке 1. В приближении суперячейки зона распадается на подзоны, количество которых равно количеству элементарных ячеек, содержащихся в суперячейке. Эти подзоны не пересекаются друг с другом и обладают слабой кривизной. Так как нас интересуют прежде всего положения краев стоп-зон, а не распределение электромагнитных состояний в разрешенных зонах, то при достаточно больших размерах суперячейки будем ограничиваться для выполнения приближенных расчетов всего лишь одним значением волнового вектора в пределах суженной зоны Бриллюэна (кроме центра зоны: при $k = 0$ в МПВ, как известно, возникает расходимость). Для определенности обозначим это значение k_0 . Кроме того, в центральной части суперячейки может быть размещен «дефект»

(например, слой с диэлектрической проницаемостью и/или толщиной, отличающийся от регулярных значений). Собственно говоря, приближение суперячейки и было разработано для получения возможности рассмотрения дефектных кристаллов в рамках стандартной зонной теории.

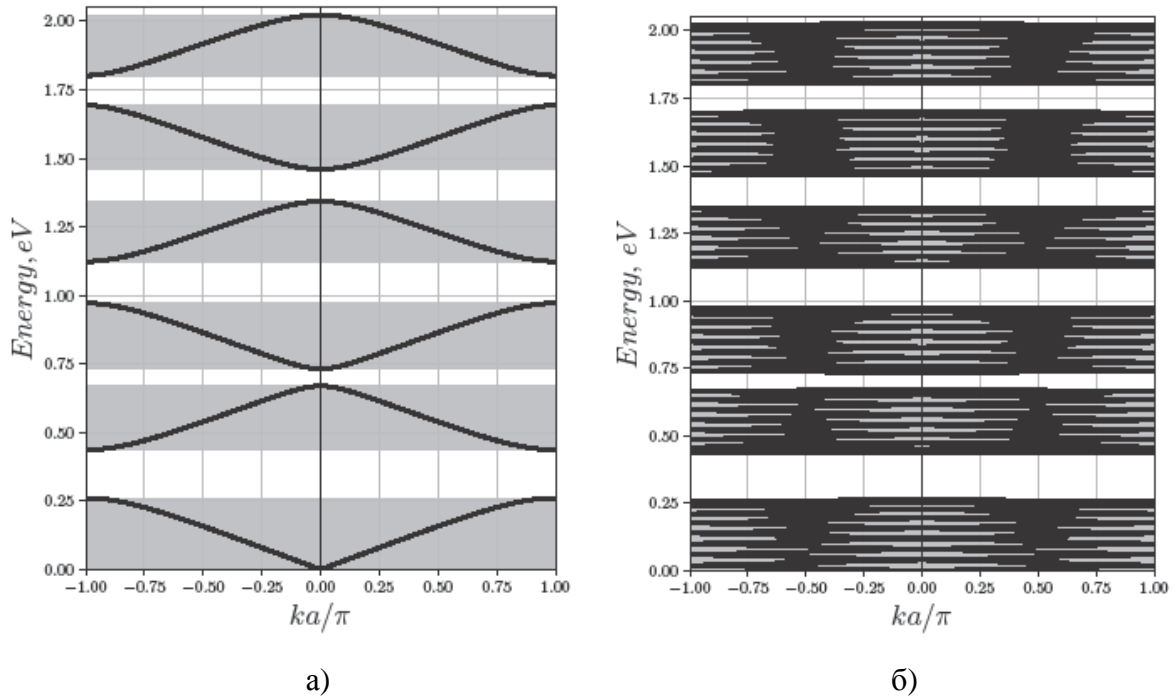


Рисунок 1 – Зонная структура идеального фотонного кристалла $Si/a - SiO_2$:

а) стандартный подход (одна элементарная ячейка); б) в приближении суперячейки, содержащей 16 элементарных ячеек

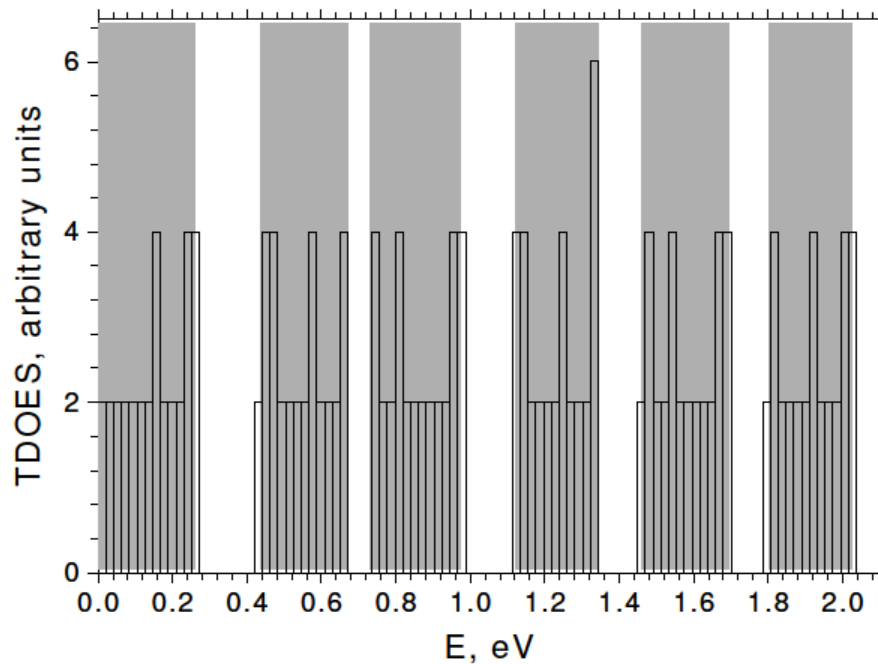


Рисунок 2 – Гистограмма ППЭС, рассчитанная по предложенной вычислительной методике

Решение обобщённой проблемы (7) для каждого значения волнового вектора (числа) k даёт собственные значения, которые могут быть использованы для построения фотонных дисперсионных кривых и вычисления ППЭС. Рассчитанная гистограмма ППЭС приведена на рисунке 2. Как и на рисунке 1, тонированием показаны области разрешенных зон идеального кристалла, вычисленные по традиционной методике.

Также нами была произведена оценка корректности использования метода тетраэдров [8] и метода размытия [9] при рассмотрении ФК с дефектами в приближении суперячейки.

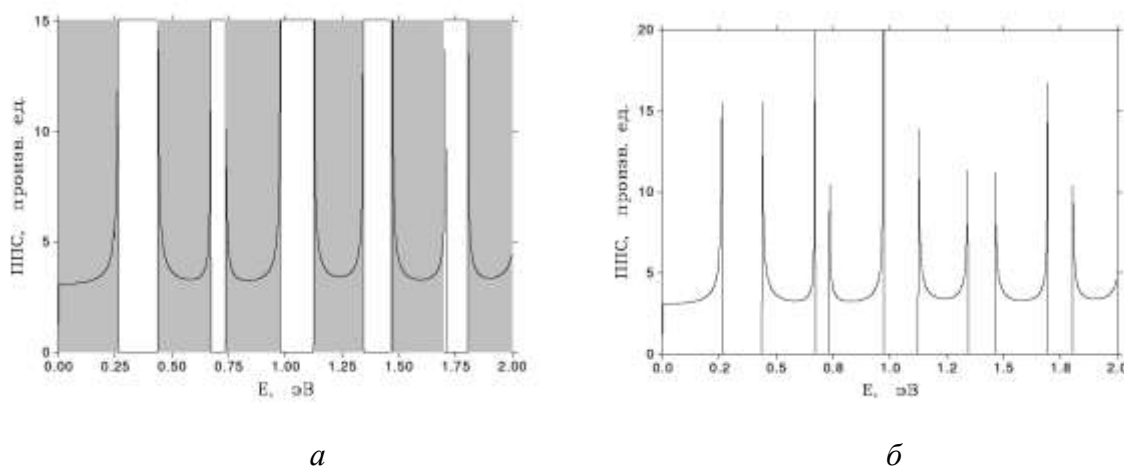


Рисунок 3 – ПС идеального ФК, рассчитанных формуле (\ref{f_dos}):
а) ячейка из 2-х слоев; б) суперячейка из 32 слоев

Для расчёта плотности состояний (ПС) в зонной теории преимущественно используется метод тетраэдров [8] и его модификации. На рисунке 3 представлены ПС идеального ФК, рассчитанные вариантом метода тетраэдров для одномерных систем (для краткости будем называть далее просто «методом тетраэдров»). Как следует из рисунка 3, выполненный для теста расчёт в приближении суперячейки корректным образом воспроизводит ПС. Однако в случаях, когда имеются зоны (или подзоны), практически не обладающие дисперсией, использование этого метода может приводить к ошибкам. Вклад такой зоны может быть либо просто не учтен, либо может быть получено отрицательное значение, что не имеет физического смысла. Поэтому для расчётов нами применялось также «размытие ПС» (англоязычный термин ``DOS smearing``). Существуют различные варианты этой процедуры (см., например, [9], [10]). Как и в [9], заменим дельта-функцию Дирака на гауссиан подходящей полуширины.

Тогда формула для расчёта ПС приобретет вид

$$\rho(\omega) \approx \frac{2}{Nn_{sc}\sigma\sqrt{2\pi}} \sum_{k,n} \exp\left(-\frac{(\omega-\omega_{k,n})^2}{2\sigma^2}\right) \quad (8)$$

Здесь N – количество значений \mathbf{k} . На рисунке 4, *а* представлена ПС идеального ФК, рассчитанная по формуле (8). Сравнивая с рисунком 4, *б*, видим, что в областях разрешённых зон имеются по 5-6 небольших пиков. Происхождение этих пиков не имеет физической природы, а обусловлено недостаточно широким базисным набором плоских волн. В ещё более резкой форме относительная узость базиса сказывается при расчёте ПС для суперячейки с дефектом (см. рис. 4, *б*); модель дефектного ФК описана в [7]).

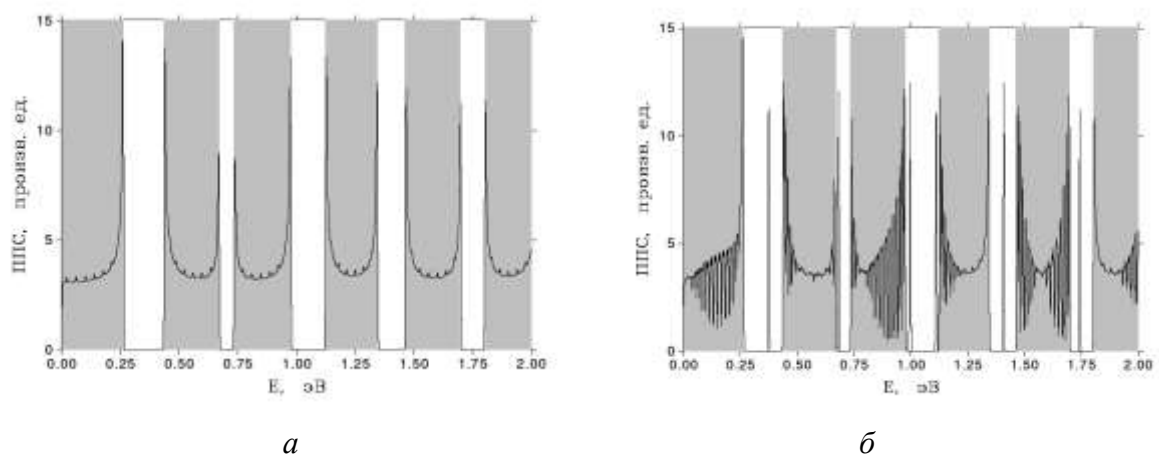


Рисунок 4 – Плотность состояний фотонного кристалла с дефектом (модель суперячейки), рассчитанная по формуле (8): а) идеальный ФК; б) суперячейка с дефектом

Таким образом, при рассмотрении суперячеек с дефектами метод тетраэдров позволяет вполне корректно рассчитать ПС в областях фотонных зон ФК, но в случае дефектных ФК расчёты ПС в областях стоп-зон идеального кристалла более надёжно вычислять методом размытия.

Следует отметить, что применение унитарных преобразований влечёт за собой использование большого объема оперативной памяти. Поэтому в последние годы разрабатываются вычислительные подходы, не использующие унитарные преобразования в таких задачах. Мы также предложили свой вычислительный подход расчета гистограммы ППЭС без использования унитарных преобразований [5]. Использовалась математическая аналогия с задачей о расчете полной плотности электронных состояний полярных нанокристаллов, состоящих из «целых ионов», в которой используется известная теорема ([6],

с. 204), которая может быть сформулирована следующим образом.

Теорема. Пусть $\|H\|$ – вещественная симметричная матрица. Для произвольной скалярной величины λ образуем матрицу $\|H\| - \lambda \|I\|$ и затем выполним треугольную факторизацию вида:

$$\|H\| - \lambda \|I\| = \|L\| \|D\| \|L\|^T, \quad (9)$$

где $\|I\|$ – единичная матрица, $\|L\|$ – нижняя треугольная матрица с единичной диагональю, $\|D\|$ – диагональная матрица. Тогда количество собственных значений $\|H\|$, меньших чем λ , равно количеству отрицательных элементов диагональной матрицы $\|D\|$.

Если изменять λ с заданным шагом, выполняя затем треугольную факторизацию (9) и вычисляя количество отрицательных элементов диагональной матрицы $\|D\|$, то можно легко рассчитать гистограмму полной плотности состояний.

Заметим, что нанокристаллы содержат фиксированное количество атомов или ионов, поэтому в уравнении (9) отсутствует зависимость от волнового вектора матрицы $\|H\|$ и, следовательно, собственных значений и собственных векторов. При рассмотрении идеального фотонного кристалла наблюдается трансляционная инвариантность. Это приводит к появлению в теории волнового вектора (числа) $k \in BZ$ и необходимости вычислений для всех его актуальных значений. Чтобы избавиться от такой необходимости в данной работе предлагается использовать приближение суперячейки. Под суперячейкой подразумевается несколько элементарных ячеек идеального кристалла. Суженная зона Бриллюэна для суперячейки существенно меньше, чем обычная зона Бриллюэна. Что это дает? Рассмотрим зонную структуру идеального фотонного кристалла $Si/a-SiO_2$, полученную МПВ как по стандартной методике, так и в приближении суперячейки. В этом приближении интегрирование в (3) приводит к формулам:

$$\kappa(G) = \begin{cases} \frac{c^2}{a} \left(\frac{L_1^{SC}}{\epsilon_1^{SC}} + S_0 \right), & \text{if } G = 0; \\ \frac{ic^2}{aG} \left(\frac{\exp(-iGL_1^{SC}) - 1}{\epsilon_1^{SC}} + S_1 \right), & \text{if } G \neq 0. \end{cases} \quad (10)$$

где

$$S_0 = \sum_{m=2}^{n^{SC}} \frac{L_m^{SC} - L_{m-1}^{SC}}{\varepsilon_m^{SC}}, \quad (11)$$

$$S_1 = \sum_{m=2}^{n^{SC}} \frac{\exp(-iGL_m^{SC}) - \exp(-iGL_{m-1}^{SC})}{\varepsilon_m^{SC}}. \quad (12)$$

Здесь n^{SC} – количество слоев в суперячейке, L_m^{SC} – координата правой границы m -го слоя, а ε_m^{SC} – диэлектрическая проницаемость m -го слоя. Численные значения параметров $a_1 = 2290 \text{ \AA}$, $a_2 = 6580 \text{ \AA}$, $\varepsilon_1 = 11.6964$, $\varepsilon_2 = 2.25$ были такими же, как и в работе [7]. Использовался базисный набор из 2403 плоских волн.

Далее, приведем обобщенную алгебраическую проблему вычисления собственных значений (7) к обычной проблеме:

$$\| Q(k_0) \| \| Y(k_0) \| = \| Y(k_0) \| \| \Lambda(k_0) \|, \quad (13)$$

где

$$\| Q(k_0) \| = \| B(k_0) \|^{1/2} \kappa \| B(k_0) \|^{1/2}; \quad (14)$$

$$\| Y(k_0) \| = \| B(k_0) \|^{1/2} \| E(k_0) \|; \quad (15)$$

$$\| \Lambda(k_0) \| = \begin{pmatrix} \lambda_1(k_0) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2(k_0) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n(k_0) \end{pmatrix}. \quad (16)$$

Здесь n – количество базисных плоских волн, $\lambda_i(k_0) = \omega_i^2(k_0) / c^2$. Все матрицы в (13-16), разумеется, имеют размерность $n \times n$; $\| Q(k) \|$ – комплексная эрмитова матрица; i -й столбец в матрице $\| Y(k_0) \|$ является собственным вектором, соответствующим собственному значению $\lambda_i(k_0)$.

Вместо алгебраической проблемы вычисления собственных значений (13) удобнее решать эквивалентную проблему для блочной матрицы:

$$\| A(k_0) \| = \left\| \begin{array}{cc} \text{Re} \| Q(k_0) \| & -\text{Im} \| Q(k_0) \| \\ \text{Im} \| Q(k_0) \| & \text{Re} \| Q(k_0) \| \end{array} \right\|. \quad (17)$$

Очевидно, что $\| A(k_0) \|$ – вещественная симметричная матрица. Она имеет удвоенную размерность, то есть $2n \times 2n$, а её собственные значения вырождены: $\lambda_1(k_0)$, $\lambda_1(k_0)$, $\lambda_2(k_0)$, $\lambda_2(k_0)$, ..., $\lambda_n(k_0)$, $\lambda_n(k_0)$, где $\lambda_i(k_0)$ – i -е собственное значение комплексной эрмитовой матрицы $\| Q(k_0) \|$.

Теперь к матрице $\| A(k_0) \|$ можно применить теорему. Для этого надо выполнить треугольную факторизацию этой матрицы

$$\|A(k_0) - \lambda I\| = \|L(k_0)\| \|D(k_0)\| \|L(k_0)\|^T, \quad (18)$$

что позволит нам изменяя λ с выбранным шагом построить гистограмму ППЭС. Для выполнения треугольной факторизации вида (18) разработаны эффективные алгоритмы и написаны компьютерные коды, некоторые из которых содержатся в библиотеках подпрограмм по линейной алгебре. Можно было бы воспользоваться одной из таких подпрограмм (функций), но мы поступили иначе (см. подробности в [5]).

Двумерные кристаллы

Для изготовления ФК световодов часто применяют кварцевое стекло $a-SiO_2$. В то же время известны материалы с более высокими значениями показателя преломления. К таким материалам относятся стекла на основе TeO_2 . Эти структуры изучены менее подробно. В частности, в научном центре волоконной оптики при Институте общей физики им. А. М. Прохорова Российской академии наук при изучении фотонно-кристаллических световодов, их оптические свойства исследовались, опираясь только лишь на расчёт собственных колебательных мод в приближении расширенной элементарной ячейки. Причём расчёты выполнялись только для центра зоны Бриллюэна [11]. Но для более полного понимания оптических свойств фотонных кристаллов необходима информация о полной ФЗС и плотностях ЭМ состояний [12]. В нашей работе [13] мы попытались провести недостающие расчёты.

Нами были рассмотрены два типа фотонно-кристаллических структур. Первый тип представлял собой систему из воздушных цилиндров, расположенных в матрице из основного материала. Второй тип – цилиндры из исследуемого материала, находящиеся в воздушной среде. Кроме световодов на основе теллуритно-вольфраматного стекла, для сравнения характеристик изучаемых систем, были рассмотрены световоды на основе Si и SiO_2 . Произведены расчеты фотонной зонной структуры и плотностей состояний для каждого исследуемого образца. Случаи ТЕ и ТМ поляризации рассматривались отдельно.

Для рассмотренных систем на основе кремния для каждой из поляризаций наблюдаются несколько стоп-зон (рис. 5).

Особый интерес представляет диапазон энергий 0,460795 – 0,48038 (эВ), так как в нём стоп-зона существует для обоих видов поляризации и ширина этой стоп-зоны составляет 0,0196 безр. единиц (рис. 6).

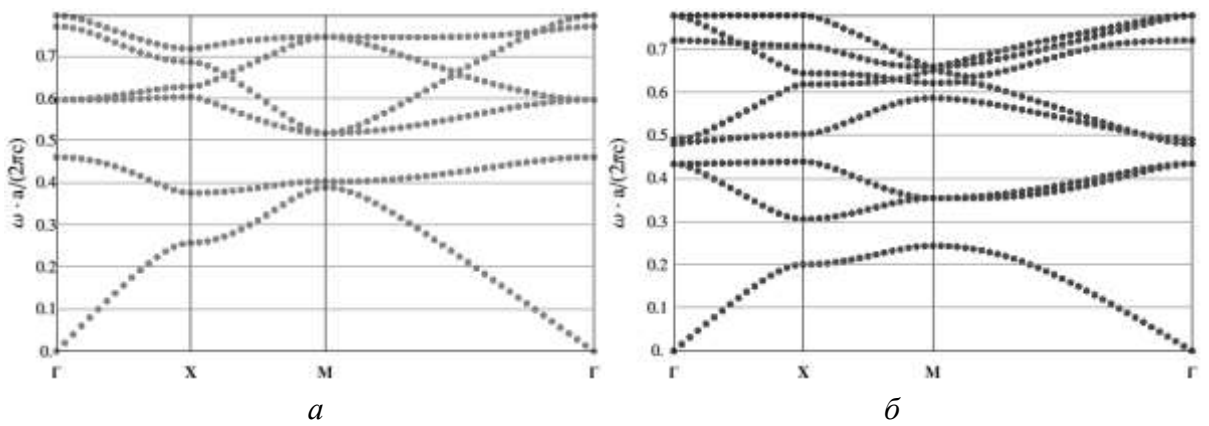


Рисунок 5 – Зонная структура для воздушных стержней в основе Si: а) ТЕ-поляризация; б) ТМ-поляризация

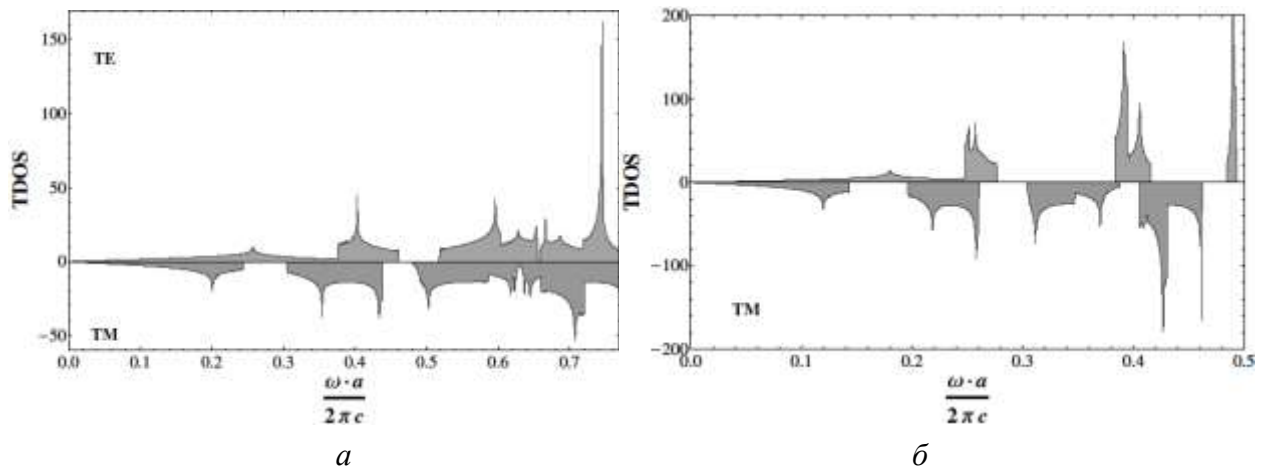


Рисунок 6 – Дифференциальные плотности состояний для воздушных стержней а) в основе из Si; б) в основе из теллурида вольфрама

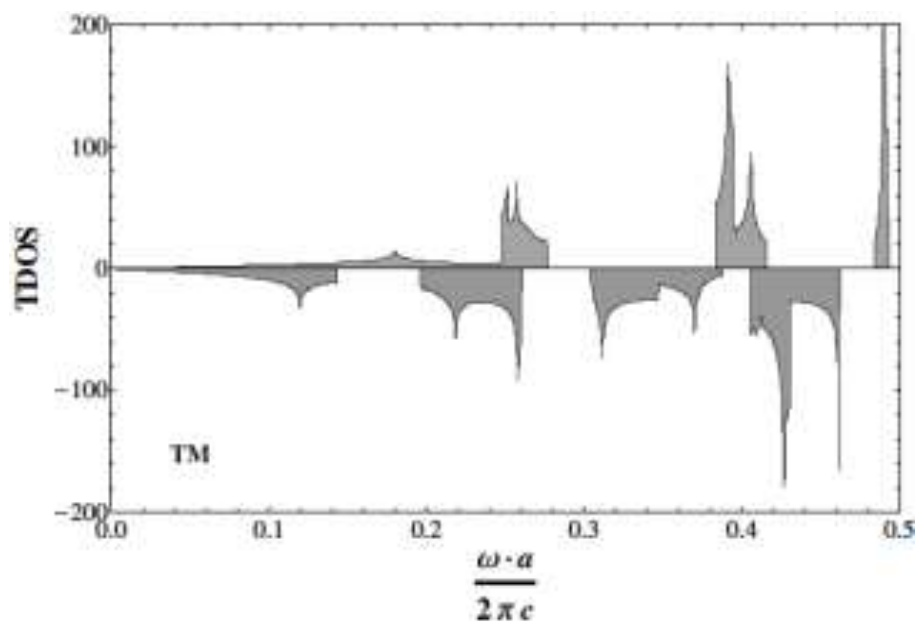


Рисунок 7 – Дифференциальные плотности состояний для воздушных стержней в основе из теллурида вольфрама

Большое значение диэлектрического контраста для структур из теллуридно-вольфраматного стекла, приводит к образованию самых широких по сравнению с другими рассматриваемыми образцами стоп-зон (рис. 7). Так же наблюдаются две стоп-зоны – общие для ТЕ и ТМ типов поляризации.

Заключение

Итак, в данной работе рассмотрены различные подходы к расчёту дисперсионных кривых и гистограмм полной плотности электромагнитных состояний. Особо следует выделить предложенный нами новый подход к вычислению полной плотности электромагнитных состояний, основанный на алгоритме, в котором не используются унитарные преобразования. Компьютерный код, реализующий данный подход, написан с использованием функций библиотеки MPI. В настоящее время ведутся работы по усовершенствованию этого кода для увеличения быстродействия программ.

В наших работах был представлен новый подход к расчёту гистограмм полной плотности состояний, предложенный подход был реализован в компьютерной программе.

Выполнение работы программы было ускорено использованием технологий параллельного программирования. Дополнительно были исследованы границы применимости двух методов построения гистограмм плотности состояний: метода тетраэдров и метод размытия.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1 Тимошенко, Ю. К. Компьютерное моделирование плотностей электромагнитных состояний в одномерных фотонных кристаллах на основе кремния [Текст] / Ю. К. Тимошенко, Ю. В. Смирнов, С. Ю. Савченко // Материалы VIII международного семинара «Физико-математическое моделирование систем», Т. 4. – Воронеж : Изд-во ВГТУ, 2012. – С. 83-86.

2 Qihuang, G. Photonic Crystals : Principles and Applications [Text] / Gong Qihuang, Hu Xiaoyong. – Singapore : Pan Stanford Publishing, 2013. – 346 p.

3 Kazuaki, S. Optical Properties of Photonic Crystals [Text] / Sakoda Kazuaki. – Berlin-Heidelberg : New York : Springer, 2004. – 253 p.

4 Dispersive photonic crystals from the plane wave method [Text] / E. Guevara-Cabrera, M. A. Palomino-Ovando, B. Flores-Desirena, J. A. Gaspar-Armenta // Physica B : Condensed Matter. – 2016. – V. 484. – P. 53-59.

5 Тимошенко, Ю. К. Новый подход к компьютерному анализу колебательных мод электромагнитного поля в одномерных фотонных кристаллах с дефектами [Текст] / Ю. К. Тимошенко, С. Ю. Савченко, Смирнов Ю. В. // Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики : сб. тр. Междунар. конф. – Воронеж : Изд-во Научно-исследовательские публикации, 2017. – С. 24-31.

6 Писсанецки, С. Технология разреженных матриц [Текст] / С. Писсанецки. – М. : Мир, 1988. – 411 с.

7 Timoshenko, Yu. K. Light Propagation in One-Dimensional Photonic Finite Systems (Si/a-SiO₂)_m with Defects [Text] / Yu. K. Timoshenko, V. A. Shunina, Yu. V. Smirnov, O. V. Kazarina // Physical Chemistry of Interfaces and Nanomaterials VII : Conf. of SPIE Symposium on NanoScience+Engineering, 10-14 Aug. 2008, San Diego, USA : Proc. of SPIE. – San Diego, USA, 2008 . – Vol. 7034. – P. 7030181 – 7030186.

8 Цише, П. Достижения электронной теории металлов [Текст] / П. Цише, Г. Леманн. – Москва : Мир, 1984. – р. 652.

9 Немошкаленко, В. В. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронные состояния в неидеальных кристаллах [Текст] / В. В. Немошкаленко, Ю. Н. Кучеренко. – Киев : Наукова Думка, 1986. – 296 с.

10 Methfessel, M. High-precision sampling for Brillouin-zone integration in Metals [Text] / M. Methfessel, A. T. Paxton // Physical Review B. – 1989. – V. 40. – Iss. 6. – P. 3616-3621.

11 Численное моделирование фотонно-кристаллических световодов из теллуритно-вольфраматного стекла для применения в параметрических волоконных устройствах [Текст] / В. О. Соколов, В. О. Назарьянц, Е. М. Дианов, В. Г. Плотниченко // Квантовая электроника. – 2006. – Т. 36. – С. 67-72.

12 Плотность фотонных состояний в оптических наноматериалах и управление энергетическими уровнями атомов [Текст] / Р. Х. Гайнутдинов, Е. В. Зайцева, М. Х. Салахов, М. А. Хамадеев // Наносистемы: физика, химия, математика. – 2012. – Т. 3. – С. 56-63.

13 Савченко, С. Ю. Компьютерное моделирование фотонных зон и плотностей электромагнитных состояний двумерных фотонных кристаллов на основе теллуритно-вольфраматного стекла [Текст] / С. Ю. Савченко, Ю. К. Тимошенко // Материалы VI международного семинара «Физико-математическое моделирование систем», Т. 2. – Воронеж : Изд-во ВГТУ, 2012. – С. 42-46.