

## МОДЕЛЮВАННЯ ВОДИ ЯК ФОТОННОГО КРИСТАЛУ В ПАКЕТІ МЕЕР

Баранова Д. В., Демиденко Є. Є.

Науковий керівник – д. ф.-м. н., проф. каф. ФОЕТ Одаренко Є. М.

Харківський національний університет радіоелектроніки  
(61166, Харків, пр. Науки 14, каф. Фізичних основ електронної  
техніки, тел. 702-10-57)

e-mail: daria.baranova@nure.ua; yevhen.demydenko@nure.ua

Waterbased photonic crystals are considered in this work. Computer simulation is based on the application of the free package MEEP. Properties of a two-dimensional photonic crystal based on an icy structure are investigated and the photonic band gaps are found. Two configurations of hexagonal photonic crystals have been investigated.

Як відомо, вода – це основа життя на планеті. Наша планета на 70.9% покрита водою, яка існує на Землі у трьох агрегатних станах. Це речовина, що дає життя тваринам та рослинам та є незамінною у фізичних процесах.

Вода складається з двох атомів гідрогену та одного атому оксигену. Молекула несиметрична: атоми гідрогену розташовані в молекулі таким чином, що напрямки до них утворюють кут  $104,45^\circ$  із вершиною в центрі атома оксигену та відстанню між ними в 95.84 пікометри (рис. 1).

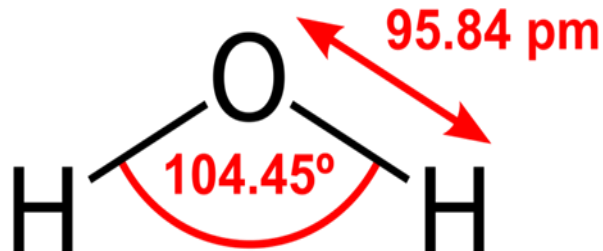


Рисунок 1 – Схема молекули води.

Вони розділяють електрони між собою неоднаково. Негативно заряджені частинки притягуються сильніше до атому оксигену, тому він більш електронегативний. Він отримує частковий негативний заряд, удвічі більший за позитивний заряд гідрогену. Внаслідок електростатичного притягання між атомами сусідніх молекул води, між ними формується водневий зв'язок, але в рідкому стані молекули води перебувають у стані постійного руху та менш впорядковані ніж у стані льоду, тому вони утворюють групи, сполучені між собою водневими зв'язками, які називають «кластерами» [1].

У вигляді льоду вода має досить чітко впорядковану гексагональну структуру (рис. 2). Завдяки періодичності вода у рідкому стані або стані льоду може бути представлена у вигляді фотонних кристалів. Фотонні

кристали – це структури, що дозволяють здійснювати ефективне керування фотонами для створення розвинених та складних оптичних пристроїв з меншими розмірами та більшою функціональністю. Такі структури широко застосовуються в фотоніці та оптиці для створення різноманітних функціональних пристроїв [2].

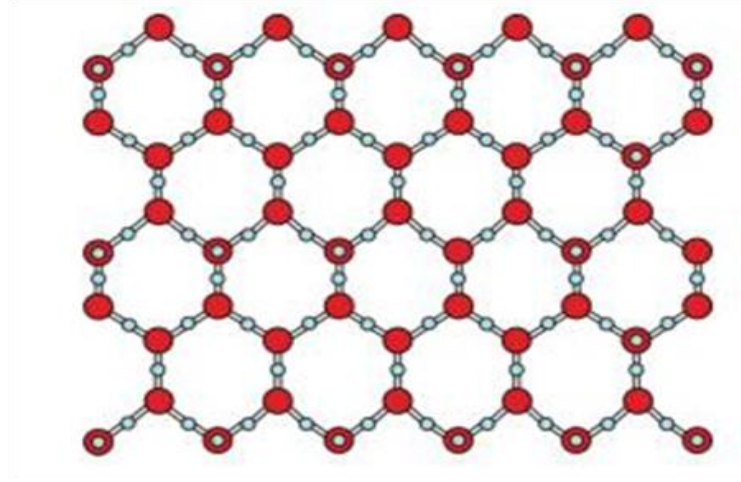


Рисунок 2 – Схема фотонного кристалу як моделі води в твердому стані.

В даній роботі розглянуто модель води у вигляді фотонного кристалу на основі впорядкованої гексагональної структури льоду в пакеті МЕЕР [3]. Розраховані дисперсійні діаграми двох різновидів такого фотонного кристалу: базової гексагональної структури, що складається лише з атомів оксигену, та її модифікованої схеми з урахуванням атомів гідрогену. Побудовано модель фотонного кристалу зі скінченними розмірами та розраховано спектральні характеристики такої схеми. Результати розрахунків складають підґрунтя для подальшого удосконалення моделі води як в твердому, так і в рідинному станах.

## СПИСОК ДЖЕРЕЛ

1. Malenkov G. Liquid water and ices: understanding the structure and physical properties // J. Phys.: Condens. Matter. – 2009. – vol. 21. – 283101.
2. Lourtioz J. M., Benisty H., Berger V., Gerard J.M. Photonic Crystals. – Springer-Verlag, 2008. – 514 p.
3. Oskooi A. F., Roundy D., Ibanescu M., Bermel P., Joannopoulos J. D., Johnson S. G. МЕЕР: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method // Computer Physics Communications. – 2010. – Vol. 181. – P. 687–702.