

01;05;06

## Моделирование и повышение избирательности кристаллоподобных структур

© Е.А. Нелин

Национальный технический университет Украины  
„Киевский политехнический институт“  
03056 Киев, Украина  
e-mail: ye\_nelin@rtf.ntu-kpi.kiev.ua

(Поступило в Редакцию 10 сентября 2003 г. В окончательной редакции 29 апреля 2004 г.)

Предложена модель эквивалентных отражателей для кристаллоподобных структур, позволяющая в явном виде получить дисперсионную характеристику. Показано сходство дисперсионных характеристик волноводов и кристаллоподобных структур. Предложено принципиальное решение для повышения избирательности таких структур.

В последнее время интенсивно развиваются исследования искусственных периодических структур, аналогичных естественным кристаллам. Эти структуры составляют основу новых разнообразных интегральных устройств обработки сигналов, прежде всего нанoeлектронных. Из таких кристаллоподобных структур (КС) значительное развитие получили полупроводниковые сверхрешетки (СР) для электронов как волн де Бройля, фотонные кристаллы (ФК) для электромагнитных волн, фононные кристаллы (ФнК) для упругих волн. В кристаллах и КС за счет конструктивной интерференции отраженных волн формируются частотные полосы, в пределах которых волны распространяться не могут (зоны запрещенных энергий для электронов, фотонные и фононные запрещенные зоны). Такая частотная фильтрация позволяет управлять прохождением волн в КС, что обеспечивает значительные возможности в обработке сигналов.

Моделирование кристаллов и КС сводится к решению волнового уравнения с периодическими граничными условиями в основном матричным методом [1] и методом конечных разностей во временной области [2]. Недавно предложенные относительно простые модели [3,4], основанные соответственно на анализе формул Эйри для коэффициентов отражения и прохождения оптического слоя и аналогии законов дисперсии ФК и псевдоквантовой частицы, позволяют установить важные особенности спектральных характеристик ФК.

В настоящей работе предложена общая для КС модель эквивалентных отражателей, которая дает достаточно точные, в том числе явные, выражения для дисперсионных характеристик, позволяет выполнить наглядный анализ и оптимизацию конструктивных решений КС. На основе этой модели в работе предложен метод повышения избирательности КС.

Принципиальные особенности КС проявляются в одномерных структурах. Рассмотрим дисперсионные характеристики таких КС.

### Дисперсионные характеристики КС. Модель эквивалентных отражателей

Дисперсионные характеристики ФК и ФнК, образованных слоями соответственно с чередующимися показателями преломления и с чередующимися акустическими свойствами, при нормальном падении волны имеют вид [1,5,6]

$$\cos K\Lambda = \cos k_1 a \cos k_2 b - \frac{1 + \chi^2}{2\chi} \sin k_1 a \sin k_2 b, \quad (1)$$

где  $K$  — блоховское волновое число;  $\Lambda$  — период структуры;  $a$  и  $b$  — толщины слоев;  $k_{1,2}$  — волновые числа, соответствующие слоям; для ФК  $\chi = k_1/k_2 = n_1/n_2$ ,  $n_{1,2}$  — показатели преломления слоев; для ФнК  $\chi = c_1 k_1 / c_2 k_2$ ,  $c_{1,2}$  — модули упругости слоев.

Заметим, что в недавних работах [3,7] дисперсионная характеристика ФнК приведена с ошибкой, без учета модулей упругости.

Дисперсионная характеристика СР, образованной чередующимися потенциальными барьерами и ямами, при туннелировании электронов определяется выражением [8]

$$\cos K\Lambda = \operatorname{ch} k_1 a \cos k_2 b - \frac{1 - \chi^2}{2\chi} \operatorname{sh} k_1 a \sin k_2 b, \quad (2)$$

где  $k_1 = \sqrt{2m(V - E)}/\hbar$ ,  $E < V$ ;  $k_2 = \sqrt{2mE}/\hbar$ ,  $m$  — эффективная масса электрона;  $V$  — высота потенциальных барьеров;  $E$  — энергия электрона,  $\hbar = h/2\pi$ ,  $h$  — постоянная Планка;  $a$  — ширина барьера;  $b$  — ширина ямы;  $\chi = k_1/k_2$ .

При различных эффективных массах электрона в области барьера и ямы (соответственно  $m_1$  и  $m_2$ ) отличие граничных условий в этих областях [9] приведет к тому, что  $\chi = k_1 m_2 / k_2 m_1$ .

Если использовать общее выражение для  $k_1$ :  $k_1 = \sqrt{2m(E - V)}/\hbar$ , то при  $E < V$   $k_1$  мнимое и (2) следует из (1) при подстановке мнимого  $k_1$ . Таким образом,

(1) устанавливает неявную зависимость дисперсионной характеристики для всех рассматриваемых КС.

Покажем, что величина  $\chi$  равна прямому или обратному отношению импедансов слоев  $Z_1$  и  $Z_2$ . Для оптических волн  $\chi = n_1/n_2 = Z_2/Z_1 = r_Z^{-1}$ . Для упругих волн  $Z = v\rho$ , где  $v$  — скорость,  $\rho$  — плотность среды. Поскольку  $v = \sqrt{c/\rho}$ , то  $\chi = c_1v_2/c_2v_1 = Z_1/Z_2 = r_Z$ . Для электронных волн [10,11]  $Z = \pm 2\sqrt{2(E-V)/m}$ , где знаки  $\pm$  отвечают положительному и отрицательному направлениям распространения волны. При  $E < V$  импеданс мнимый, что соответствует туннелированию электронов в случае ограниченной среды (потенциального барьера); при  $E > V$  импеданс действительный, что отвечает надбарьерному их прохождению. Поскольку  $Z = \pm 2\hbar k/m$ , то и для электронных волн  $\chi = Z_1/Z_2 = r_Z$ .

Таким образом, первый из множителей второго слагаемого в правой части (1), как и коэффициент отражения от границы между слоями с импедансами  $Z_1$  и  $Z_2$ , определяется отношением импедансов  $r_Z$ .

Преобразуем (1) для действительных  $k_1$  и  $Z_1$ , добавив и вычтя в правой части (1) слагаемое  $\sin k_1 a \sin k_2 b$ ,

$$\cos K\Lambda = \cos kD - \frac{(r_Z - 1)^2}{2r_Z} \sin k_1 a \sin k_2 b, \quad (3)$$

где  $D = n_1 a + n_2 b$ ;  $k = \omega/c$ ; для оптических волн  $n_{1,2}$  — показатели преломления слоев,  $c$  — скорость света в вакууме; для упругих и электронных волн величины  $n_{1,2}$  аналогичны показателям преломления  $n_{1,2} = c/v_{1,2}$ ,  $c = (v_1 + v_2)/2$ .

Без учета второго слагаемого в правой части (3) и периодичности функции  $\cos x$  имеем  $K\Lambda = kD$ . При этом дисперсионная характеристика, определяемая выражением  $\omega = cK/\langle n \rangle$ , где  $\langle n \rangle = (n_1 a + n_2 b)/(a + b)$  — усредненный показатель преломления, отвечает случаю, когда отражения внутри структуры не учитываются. Таким образом, второе слагаемое в правой части (3) обусловлено влиянием отражений.

Для упругих волн в отличие от оптических и электронных возможны случаи, когда  $v_1 \neq v_2$ , а  $r_Z = 1$  (если  $v_1/v_2 = \rho_2/\rho_1$ ). При этом отражения и соответственно второе слагаемое в (3) отсутствуют, зонная диаграмма не формируется.

Покажем связь этого слагаемого с коэффициентами отражения от слоев (вставка на рис. 1). Стрелками обозначены источники отражения, расположенные на границах слоев;  $r = |r_Z - 1|/(r_Z + 1)$  — модуль коэффициента отражения от границы слоя. Направление стрелок соответствует  $r_Z > 1$ . Разделим источники на половины и просуммируем половины, приведя их к центрам слоев (источники  $r_{1,2}$  на рис. 1):  $r_1 = 0.5r \exp(ik_1 a) - 0.5r \exp(-ik_1 a) = ir \sin k_1 a$ ,  $r_2 = -ir \sin k_2 b$ . Произведение коэффициентов отражения  $r_1 r_2 = r^2 \sin k_1 a \sin k_2 b$ . С учетом этого

$$\cos K\Lambda = \cos kD - P/2, \quad (4)$$

где  $P = 4r_1 r_2 / (1 - r^2)$ .

Вблизи границ запрещенных зон  $K\Lambda \approx m\pi$ , где  $m = 1, 2, \dots$  — номер запрещенной зоны. Преобразуем (4):

$$\begin{aligned} \cos(K\Lambda - m\pi) &= \cos(kD - m\pi) - (-1)^m P/2 \\ &\approx 1 - (kD - m\pi)^2/2 - (-1)^m P/2 \\ &\approx \cos \sqrt{(kD - m\pi)^2 + (-1)^m P}. \end{aligned}$$

В разрешенных зонах  $(kD - m\pi)^2 + (-1)^m P \geq 0$  и

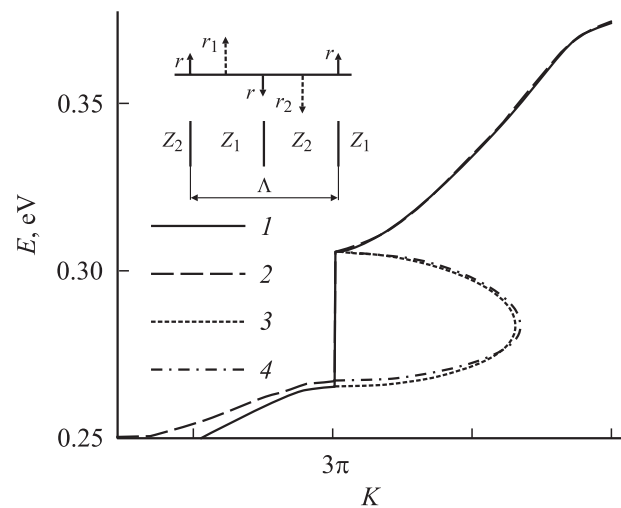
$$(kD - m\pi)^2 \approx (K\Lambda - m\pi)^2 - (-1)^m P. \quad (5)$$

Поскольку в запрещенных зонах  $K\Lambda = m\pi + ix$  и  $(kD - m\pi)^2 + (-1)^m P < 0$ , то

$$x \approx \sqrt{-(kD - m\pi)^2 - (-1)^m P}. \quad (6)$$

Зависимости (5) и (6) хорошо аппроксимируют (1) не только вблизи границ запрещенных зон, но и во всем диапазоне изменения  $K$ . Так, при  $r_Z = 2.7$  (что, например, для ФК соответствует  $n_1 = 1.5$  и  $n_2 = 4$ ) и  $k_2 b/k_1 a = 3$  (чередование слоев с оптической толщиной  $3\lambda_0/8$  и  $\lambda_0/8$ , где  $\lambda_0$  — длина волны на средней частоте первой запрещенной зоны) дисперсионные характеристики, рассчитанные согласно (1) и (5), (6) графически совпадают.

На рис. 1 приведены дисперсионные характеристики СП. СП образована слоями  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  и  $\text{GaAs}$  толщиной 30 постоянных кристаллической решетки  $\text{GaAs}$  в направлении [100] (равной  $2.82665 \text{ \AA}$  [12]);  $V = 0.25 \text{ eV}$ ;  $m_1 = (0.0665 + 0.0835x)m_0$  [13];  $m_2 = 0.0665m_0$ , где  $m_0$  — масса покоя электрона;  $V$  и  $x$  связаны соотношением  $V = 0.7731x$  [14]. Аппроксимация вполне приемлема и в начале зависимости, где  $Z_1 \approx 0$  и  $r \approx 1$ . Максимальная относительная погрешность зависимостей 2 и 4 менее 2%.



**Рис. 1.** Дисперсионные характеристики СП. 1, 2 и 3, 4 — действительная и мнимая части  $K$  согласно (1), (5) и (1), (6). Действительная часть  $K$  выражена в единицах  $1/\Lambda$ , мнимая — в произвольных единицах.

## Дисперсионные характеристики с явной зависимостью

Максимальной ширине запрещенных зон соответствуют четвертьволновые слои  $k_1a = k_2b$ . При этом  $P = 4r^2 \sin^2 k_1a / (1 - r^2) \approx 4r^2$ . В результате упрощений (5) и (6) дисперсионные характеристики для ФК и ФнК станут явными. В разрешенных зонах

$$(kD - m\pi)^2 \approx (K\Lambda - m\pi)^2 + 4r^2, \quad (7)$$

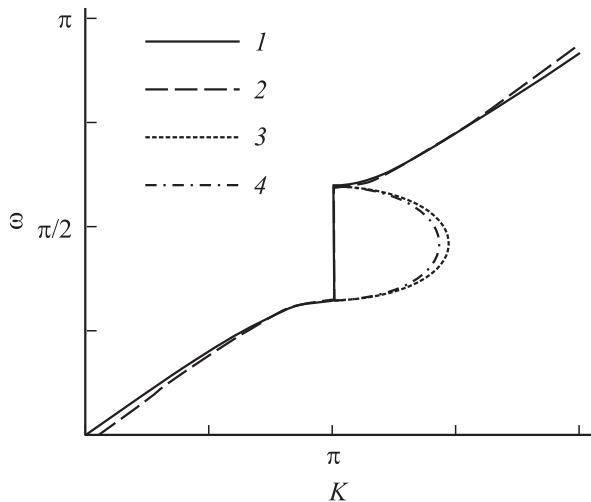
$$\omega \approx \frac{c}{D} \left[ m\pi \mp \sqrt{(K\Lambda - m\pi)^2 + 4r^2} \right], \quad (8)$$

где  $m = 1, 3, \dots$  (запрещенные зоны с четным  $m$  отсутствуют); знак „-“ соответствует первой разрешенной зоне и верхнечастотным половинам последующих разрешенных зон, а знак „+“ — их нижнечастотным половинам. В верхнечастотной половине разрешенной зоны по сравнению с нижнечастотной  $m$  увеличивается на 2. В запрещенных зонах

$$\omega \approx \frac{c}{D} (m\pi \pm \sqrt{4r^2 - x^2}). \quad (9)$$

Хорошее соответствие (8), (9) и (1) иллюстрируют дисперсионные характеристики КС, приведенные на рис. 2.

Заметим, что зависимость (7) соответствует дисперсионной характеристике волновода  $k^2 = K^2 + K_m^2$ , где  $K$  — продольное волновое число в волноводе,  $K_m$  — волновое число отсечки,  $m$  — номер моды волновода. Такое соответствие обусловлено общностью физических явлений, формирующих характеристики периодических структур и волноводов, — многолучевой интерференцией отраженных волн. Интерференция конструктивна вблизи границ запрещенных зон и в самих запрещенных



**Рис. 2.** Дисперсионные характеристики КС. 1, 2 и 3, 4 — действительная и мнимая части  $K$  согласно (1), (8) и (1), (9);  $r_Z = 2.7$ ; слои четвертьволновые. Величина  $\omega$  выражена в единицах  $c/\Lambda$ , действительная часть  $K$  — в единицах  $1/\Lambda$ , мнимая — в произвольных единицах.

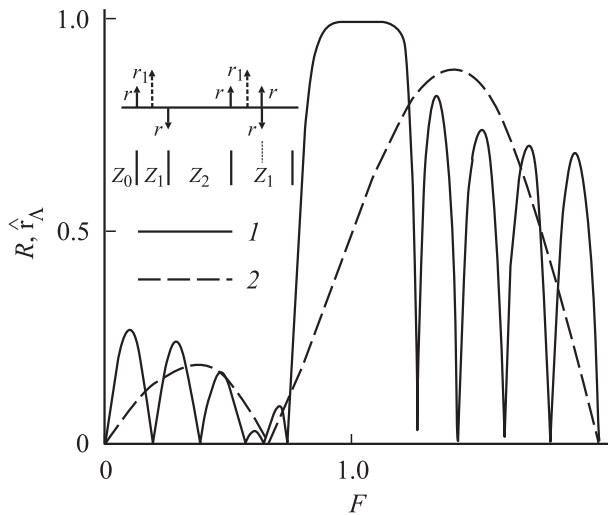
зонах КС, а также вблизи частот отсечки волновода. Частотам отсечки волновода соответствуют верхнечастотные границы запрещенной зоны. Общность спектральных характеристик волноводов и КС может служить основой применения модельных представлений и конструктивных решений КС, аналогичных используемым для волноводящих структур.

## Повышение избирательности КС в нечетных или четных разрешенных зонах

Для формирования структур ФК используют решения, разработанные для многослойных оптических фильтров. Одно из таких решений — периодическое повторение трехслойных секций с чередующимися показателями преломления слоев, внутренним четвертьволновым слоем и наружными слоями с оптической толщиной  $\lambda_0/8$  ( $\lambda_0/8$ -слой) [15]. В результате формируется структура с четвертьволновыми внутренними слоями и крайними  $\lambda_0/8$ -слоями. Такое решение применимо и для других КС.

Пусть, как и ранее,  $r_Z > 1$ . КС с крайними  $\lambda_0/8$ -слоями по сравнению с КС с четвертьволновыми крайними слоями имеет повышенную избирательность в нечетных разрешенных зонах, если импеданс внешней среды  $Z_0 < Z_1$  или  $Z_0 > Z_2$  (например,  $Z_0 = Z_{2,1}$ ), а импеданс крайних слоев  $Z_b = Z_{2,1}$  соответственно, и в четных, если  $Z_0 > Z_1$  или  $Z_0 < Z_2$ , а  $Z_b = Z_{1,2}$  соответственно. Здесь учтено объединение разрешенных зон за счет отсутствия запрещенных с четным  $m$ . Предложенная модель позволяет наглядно объяснить и оптимизировать такое повышение избирательности.

На вставке к рис. 3 показан фрагмент КС с крайними  $\lambda_0/8$ -слоями. Разделим четвертьволновой слой с импедансом  $Z_1$ , ближайший к крайнему слою, пополам воображаемой границей. Разместим на этой границе противофазные взаимно компенсирующие источники отражения с амплитудой, равной  $r$ . Просуммируем источники, расположенные на границах крайнего слоя, приведя их к его центру  $r_1 = i2r \sin(\pi F/4)$ , где  $F = f/f_0$  — нормированная частота,  $f_0$  — средняя частота первой запрещенной зоны. Суммируя аналогичные источники, расположенные на границах левой половины четвертьволнового слоя с импедансом  $Z_1$ , и приведя их к осевой линии этой половины, также получим источник с амплитудой  $r_1$ . В результате суммирования двух источников с амплитудами  $r_1$  и приведения их к середине слоя с импедансом  $Z_2$  имеем эквивалентный отражатель периода  $r_\Lambda = 2r_1 \cos(3\pi F/4)$ . Источники отражения, расположенные на границах правой половины четвертьволнового слоя с импедансом  $Z_1$  и левой половины следующего четвертьволнового слоя с импедансом  $Z_1$ , также формируют эквивалентный отражатель периода с амплитудой, равной  $r_\Lambda$ . Частотная зависимость эквивалентного отражателя периода определяется выражением



**Рис. 3.** Частотные зависимости коэффициента отражения  $R$  КС с крайними  $\lambda_0/8$  — слоями (1) и эквивалентного отражателя периода  $\hat{r}_\Lambda$  (2). Число слоев  $N = 11$ ,  $r_z = 1.74$ ,  $Z_0 = Z_2$ ,  $Z_b = Z_1$  (первый вариант) либо  $Z_0 = Z_1$ ,  $Z_b = Z_2$  (второй вариант).

$\hat{r}_\Lambda = |r_\Lambda|/4r = |\sin(\pi F/4) \cos(3\pi F/4)|$ . Второй сомножитель обеспечивает основное уменьшение уровня боковых лепестков частотной зависимости коэффициента отражения КС со стороны нижних частот в диапазоне изменения  $F$  от 0 до 2 с режекцией на частоте  $F_r = 2/3$ , если ширина запрещенной зоны  $\Delta F \leq F_r$ . При  $\Delta F > F_r$  точка режекции смещается в область частот  $F < F_r$ . В более широком диапазоне частот избирательность повышается в нечетных разрешенных зонах.

На рис. 3 показаны частотные зависимости коэффициента отражения КС с крайними  $\lambda_0/8$  — слоями и эквивалентного отражателя периода. Как видно, характер уменьшения боковых лепестков зависимости 1 определяется зависимостью 2. Для уменьшения подъема дальних (от запрещенной зоны) нижнечастотных боковых лепестков зависимости 1 необходимо оптимизировать амплитуды отражателей на границах КС, несколько увеличив  $Z_0$  для первого варианта и уменьшив для второго. При  $\hat{Z}_0 = Z_0/Z_2 = 1.11$  в первом варианте и  $\hat{Z}_0 = 1.57$  во втором ближний и дальний нижнечастотные боковые лепестки выравниваются; уровень дальнего лепестка уменьшается с 0.27 до 0.17.

В случае, если  $Z_0 > Z_1$  и  $(Z_0 - Z_1)/(Z_0 + Z_1) = r$  (первый вариант) либо  $Z_0 < Z_2$  и  $(Z_2 - Z_0)/(Z_2 + Z_0) = r$  (второй вариант), а  $Z_b = Z_{1,2}$  соответственно, то источник отражения, расположенный на границе КС, по амплитуде и фазе совпадает с источником отражения, расположенным на границе между крайним и смежным с ним слоями. При этом амплитуды крайнего эквивалентного отражателя КС и эквивалентного отражателя периода равны соответственно  $r_1 = \mp 2r \cos(\pi F/4)$  и  $r_\Lambda = \mp i 2r_1 \sin(3\pi F/4)$ , где знаки „-“ и „+“ соответствуют указанным выше вариантам. Частотная зави-

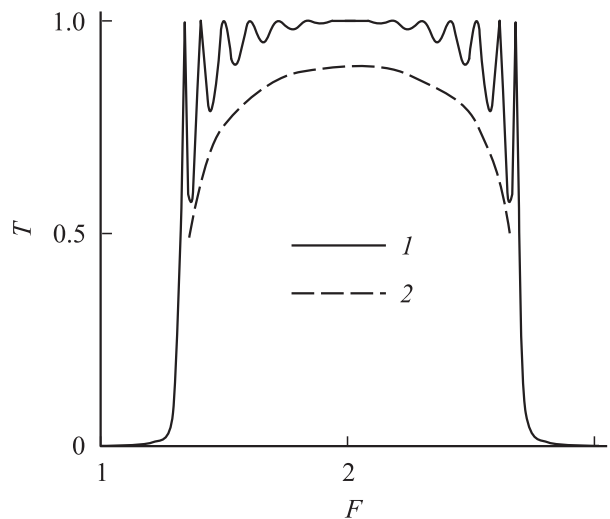
симость эквивалентного отражателя периода определяется выражением  $\hat{r}_\Lambda = |\cos(\pi F/4) \sin(3\pi F/4)|$ . Такая КС имеет повышенную избирательность со стороны верхних частот в диапазоне  $F$  от 0 до 2 с режекцией на частоте  $F_r = 4/3$ , в более широком диапазоне — в четных разрешенных зонах.

### Повышение избирательности КС во всех разрешенных зонах

Модель эквивалентных отражателей позволяет предложить принципиальное решение, обеспечивающее повышение избирательности во всех разрешенных зонах.

Рассмотрим особенности многолучевой интерференции для всей КС (вставка на рис. 1). Просуммируем источники, расположенные на границах четвертьволновых слоев, для периода КС  $r_\Lambda = i 2r \sin(\pi F/2)$ . При суммировании источников  $r_1$  и  $r_2$  имеем  $r'_\Lambda = -2r \sin^2(\pi F/2)$ . В разрешенных зонах интерференция деструктивна и уровень пульсаций характеристик отражения и пропуска КС определяется частотными зависимостями эквивалентных отражателей периода  $\hat{r}_\Lambda = |r_\Lambda|/2r = |\sin(\pi F/2)|$  и  $\hat{r}'_\Lambda = |r'_\Lambda|/2r = \sin^2(\pi F/2)$ . Во втором случае уровень пульсаций заметно меньше. Для реализации второго варианта интерференции для всей КС необходимо в два раза уменьшить амплитуды отражателей на ее границах, выбрав импедансы внешней среды  $Z_{01,02}$  из условия  $Z_{01,02} = Z_{1,2}(Z_{1,2} + 3Z_{2,1})/(3Z_{1,2} + Z_{2,1})$ , где  $Z_{1,2}$  — импеданс слоя, граничащего со средой.

Рис. 4 иллюстрирует повышение эффективности прохождения волн в разрешенных зонах за счет предложенной компенсации по сравнению с традиционным решением.



**Рис. 4.** Зависимости коэффициента прохождения  $T$  КС. 1 — предлагаемое решение, 2 — традиционное решение (показана огибающая пульсаций).  $N = 15$ ,  $r_z = 2.7$ ,  $\hat{Z}_0 = 1.6$  и  $\hat{Z}_0 = 2.7$  соответственно для зависимостей 1 и 2.

Предложенная модель наглядно иллюстрирует ключевую роль взаимной компенсации отражений при формировании разрешенной зоны. Метод дополнительной компенсации отражений, основанный на этой модели, позволяет заметно повысить избирательность КС, что имеет первостепенное значение для высокоэффективных устройств на основе КС.

## Список литературы

- [1] Ярив А., Юх П. Оптические волны в кристаллах. М.: Мир, 1987. 616 с.
- [2] Ridder R.M., Stoffer R. // AIP Conf. Proc. 2001. Vol. 560. Issue 1. P. 99–106.
- [3] Косевич А.М., Мамалуй М.А. // ЖЭТФ. 2002. Т. 122. Вып. 4(10). С. 897–908.
- [4] Gralak B., Maestre D. // J. Modern Optics. 2000. Vol. 47. N 7. P. 1253–1272.
- [5] Рытов С.М. // ЖЭТФ. 1955. Т. 29. Вып. 5(11). С. 605–616.
- [6] Рытов С.М. // Акуст. журн. 1956. Т. 2. Вып. 1. С. 71–83.
- [7] Косевич А.М. // Письма в ЖЭТФ. 2001. Т. 74. Вып. 11. С. 633–637.
- [8] Ярив А. Введение в теорию и приложения квантовой механики. М.: Мир, 1984. 360 с.
- [9] Brennan K.F. // IEEE Trans. on E. 1992. Vol. 35. N 1. P. 60–68.
- [10] Khondker A.N., Khan M.R., Anwar A.F.M. // J. Appl. Phys. 1988. Vol. 63. N 10. P. 5191–5193.
- [11] Anwar A.F.M., Khondker A.N., Khan M.R. // J. Appl. Phys. 1989. Vol. 65. N 7. P. 2761–2765.
- [12] Gaylord T.K., Glytsis E.N., Brennan K.F. // J. Appl. Phys. 1989. Vol. 65. N 6. P. 2535–2540.
- [13] Nakamura K., Shimizu A., Fujii K. et al. // IEEE J. of QE. 1992. Vol. 28. N 7. P. 1670–1677.
- [14] Wilson D.W., Glytsis E.N., Gaylord T.K. // IEEE J. of QE. 1993. Vol. 29. N 5. P. 1364–1382.
- [15] Телен А. Конструирование многослойных интерференционных фильтров. В кн. Физика тонких пленок. Т. 5. М.: Мир, 1972. 344 с.