

01;05

## Импедансные характеристики кристаллоподобных структур

© Е.А. Нелин

Национальный технический университет Украины „Киевский политехнический институт“,  
03056 Киев, Украина  
e-mail: ye.nelin@gmail.com

(Поступило в Редакцию 14 октября 2008 г.)

Рассмотрено моделирование кристаллоподобных структур (КС) на основе импедансной модели. Показано, что КС своеобразно трансформируют волновой импеданс, формируя необычные волновые свойства среды. Представлены импедансные характеристики различных КС.

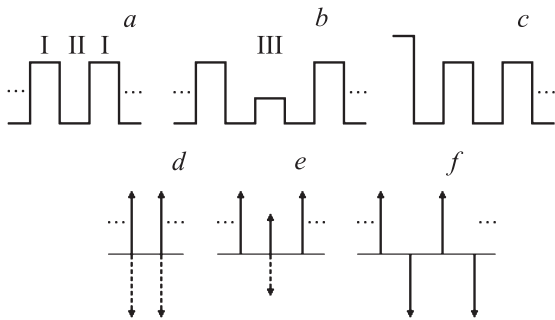
PACS: 81.05-t

Кристаллоподобные структуры (КС) обладают уникальными спектральными характеристиками. Эти структуры составляют основу новых разнообразных устройств обработки сигналов. Традиционное моделирование кристаллов и КС сводится к решению волнового уравнения с периодическими граничными условиями и основано на теореме Блоха. Моделирование КС на основе концепции импеданса позволяет получить новые результаты, обобщающие волновые свойства различных КС [1,2].

В настоящей работе рассмотрены импедансные характеристики, иллюстрирующие формирование особых спектральных свойств КС. Из импедансной модели зонный характер КС, условия для запрещенных зон следуют без теоремы Блоха. Такой подход отличается универсальностью, наглядностью, возможностью использования аналогий из различных технических областей.

### Входной импеданс КС

Принципиальные особенности КС проявляются в одномерных структурах. На рис. 1, *a* показана обобщенная КС для волн различной природы, образованная чередующимися слоями I и II. Среда слоев I в общем случае реактивная, а слоев II — дисперсивная (прозрачная).



**Рис. 1.** Импедансные зависимости КС и решетки потенциальных  $\delta$ -неоднородностей: *a* — неограниченная КС; *b* — дефект КС; *c* — поверхность КС; *d* — периодическая решетка потенциальных  $\delta$ -неоднородностей; *e* — дефект кристалла; *f* — решетка, образованная чередованием  $\delta$ -барьера и  $\delta$ -ямы.

Импеданс и волновое число реактивной среды мнимые, а слой такой среды — туннельный.

Обозначим параметры слоев I и II индексами *a* и *b*, а входной импеданс в положительном направлении на границе между слоями II и I через *Z*. Исходя из формулы для входного импеданса отрезка линии передачи, приравняв входные импедансы на ближайших соответствующих границах между слоями II и I, получим

$$Z = Z_a \frac{Z_1 - Z_a A}{Z_a - Z_1 A},$$

$$Z_1 = \frac{Z - iB}{1 - iZB}, \quad (1)$$

где  $Z_a$  — импеданс слоя I;  $Z_1$  — входной импеданс на границе между слоями I и II;  $A = \text{th} ik_a a$ ;  $B = \text{tg} k_b b$ ,  $k$  — волновое число,  $a$  и  $b$  — толщина слоев I и II соответственно. Для упрощения выкладок импедансы слоев пронормированы к импедансу слоя II, так что  $Z_b = 1$ . Выполнив преобразования, получим

$$Z = \sqrt{\psi} + i\eta, \quad (2)$$

$$\eta = \frac{1 - Z_a^2}{2(B^{-1} + iZ_a A^{-1})}, \quad (3)$$

где

$$\psi = 1 - \eta^2 - 2\eta B^{-1}.$$

Величина  $\eta$  действительная при любом характере слоев I.

При  $\psi < 0$  входной импеданс — мнимый и КС становится реактивной средой. Эти интервалы отвечают запрещенным зонам. Коэффициент прохождения в запрещенных зонах равен нулю. В результате преобразований из неравенства  $\psi < 0$  следует соотношение для запрещенных зон

$$|\cos k_b b + \eta \sin k_b b| > 1. \quad (4)$$

Другая форма записи этого соотношения:

$$\left| \text{ch} ik_a a \cos k_b b - \frac{1 + z_a^2}{2iZ_a} \text{sh} ik_a a \sin k_b b \right| > 1. \quad (5)$$

Границы зон определяются условиями  $\psi = 0$  и  $\psi = \pm\infty$ . Из этих условий получим

$$B = \frac{2}{\eta^{-1} - \eta}, \quad (6)$$

$$B = \frac{iA}{Z_a}. \quad (7)$$

Коэффициент отражения от границы между слоями II и I равен  $r = (1 - Z)/(1 + Z)$ . Согласно условию баланса фаз волн, отраженных от границ слоя II,  $k_b b + \varphi = \pi n$ , где  $\varphi$  — фаза коэффициента отражения  $r$ ;  $n = 1, 2, \dots$ . Исходя из (2) в разрешенной зоне  $\varphi = \pi n - k_b b$ . Таким образом, баланс фаз выполняется во всей разрешенной зоне, что соответствует резонансу и формированию стоячей волны в слое II. Разрешенные зоны — зоны собственных значений КС. Стоячая волна компенсирует волновые неоднородности на границах слоя II и падающая волна резонансно туннелирует сквозь КС. Коэффициент прохождения в разрешенных зонах равен единице.

Поскольку стоячая волна представима суперпозицией двух волн равной амплитуды, распространяющихся в противоположных направлениях, в режиме стоячих волн входные импедансы в противоположных направлениях в любой точке слоя II равны. Из таких равенств для границ слоя II также следуют выражения (2) и (3).

## Дефекты и поверхность КС

Значительный интерес представляет моделирование дефектов и поверхности КС. Нарушение периодичности КС приводит к формированию уровней в запрещенных зонах.

Рис. 1, *b* иллюстрирует дефект КС в слое I (слой III). Для нахождения уровней дефекта воспользуемся равенством входных импедансов в противоположных направлениях в любой точке слоя II, смежного со слоем III, в запрещенной зоне. Обозначим через  $Z_+$  и  $Z_-$  входные импедансы на границах слоя III соответственно в положительном направлении на левой границе и в отрицательном — на правой. Поскольку импедансы  $Z_+$  и  $Z_-$  комплексно сопряжены, а в запрещенной зоне импедансы  $Z$  и  $Z_1$  — мнимые, имеем  $Z_- = Z_1$  и  $Z_+ = -Z_1$ . Из последнего равенства получим

$$C = \frac{2Z_c Z_1}{Z_c^2 + Z_1^2}, \quad (8)$$

где индексом  $c$  обозначены параметры слоя III;  $C = \text{th} ik_c c$ ,  $c$  — толщина слоя III.

В частном случае  $c = 0$ . КС с таким дефектом представляет собой резонатор Фабри–Перо с резонансной полостью шириной  $2b$  и отражателями, образованными полубесконечными КС. При этом  $C = Z_1 = 0$ . Из (1) и (2) следуют собственные значения резонатора:

$$B = 2\eta. \quad (9)$$

В случае дефекта в слое II имеем

$$C = \frac{2Z_c Z}{i(Z_c^2 + Z^2)}, \quad (10)$$

где  $C = \text{tg} k_c c$ . При  $c = 2b$  и  $Z_c = 1$ , как и следовало ожидать, получим (9).

Рассмотрим формирование поверхностных уровней (рис. 1, *c*). Воспользуемся условием баланса фаз в поверхностном слое между КС и поверхностным скачком потенциала.

В случае реактивного поверхностного потенциала имеем

$$D = \frac{(|Z| + |Z_e|)Z_d}{Z_d^2 - |ZZ_e|}, \quad (11)$$

где индексами  $d$  и  $e$  обозначены параметры соответственно поверхностного слоя и области скачка;  $D = \text{tg} k_d d$ ,  $d$  — толщина поверхностного слоя.

Если поверхностный слой — слой II, (11) примет вид

$$B = \frac{2\eta}{1 + |Z_e|^2 - 2\eta|Z_e|}. \quad (12)$$

Преобразуем (12) для квантово-механической среды, импеданс которой равен

$$Z = 2\sqrt{2(E \mp V)/m},$$

где  $E$  — энергия электрона;  $V$  — потенциальная энергия;  $m$  — эффективная масса электрона. Здесь и далее верхний и нижний знаки соответствуют потенциальным барьеру и яме. При  $m_e = m_b$  имеем

$$B = \frac{1}{V_e/2\eta E - \sqrt{V_e/E} - 1}. \quad (13)$$

В случае дисперсивного поверхностного потенциала

$$D = \begin{cases} |Z|/Z_d, & Z_d > Z_e, \\ -Z_d/|Z|, & Z_d < Z_e. \end{cases} \quad (14)$$

Если поверхностный слой — слой II и  $Z_e < 1$ , из (14) следует (9); при  $Z_e > 1$  решений нет.

## Решетка потенциальных $\delta$ -неоднородностей

Периодическая решетка потенциальных  $\delta$ -неоднородностей ( $\delta$ -барьеров или  $\delta$ -ям, рис. 1, *d*) — удобная наглядная модель для анализа характеристик кристаллов и КС.

Потенциал  $\delta$ -неоднородности площадью  $\alpha$  и шириной  $a \rightarrow 0$  равен  $V = \alpha/a \rightarrow \infty$ . Согласно (3), для  $\delta$ -неоднородности  $\eta = iZ_a A/2$ . Подставив нормированные импедансы  $\delta$ -барьера и  $\delta$ -ямы, получим

$$\eta = \pm \alpha m_b / \hbar^2 k_b.$$

Обратим внимание, что параметр  $\eta$  не зависит от эффективной массы электрона в области  $\delta$ -неоднородности. Условие (4) для запрещенных зон идеального кристалла, моделируемого неограниченной решеткой  $\delta$ -барьеров, выражение (9) для уровней вакансии кристалла и выражение (13) для поверхностных уровней совпадают с полученными в [3] традиционным решением квантово-механических задач.

В случае  $\delta$ -неоднородностей (7) принимает вид  $B = 0$ . При  $E \rightarrow 0$   $\eta \rightarrow \pm\infty$  и  $|Z| \rightarrow \infty$ , что соответствует запрещенной зоне. Выражения (6) и (7) определяют нижнюю и верхнюю границы запрещенной и разрешенной зоны соответственно для решеток  $\delta$ -ям и  $\delta$ -барьеров. При  $|\eta| \gg 1$  разрешенные зоны узкие, а при  $|\eta| \ll 1$  — широкие. Поскольку для нижних зон  $|\eta| \gg 1$ , то (6) преобразуется к виду  $B \approx -2\eta^{-1}$ . Таким образом, ширина каждой из нижних разрешенных зон, выраженная в масштабе  $B$ , приближенно равна  $2|\eta|^{-1}$ .

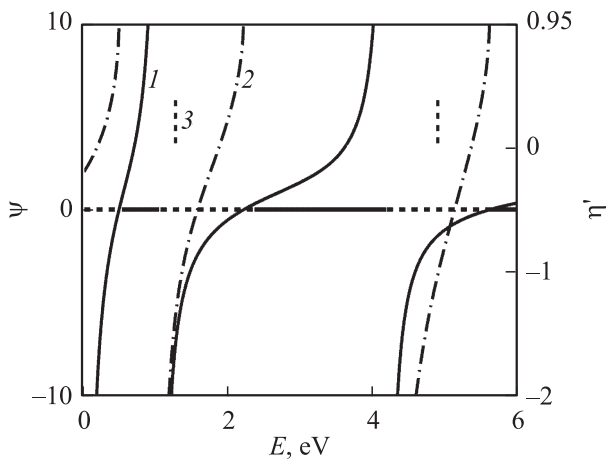
Рассмотрим моделирование атома внедрения или замещения (рис. 1, *e*). Исходя из (8)  $\eta_c = iZ_1$ . В этом случае (1) преобразуется к виду

$$B = \frac{|Z| + \eta_c}{1 - |Z|\eta_c}. \quad (15)$$

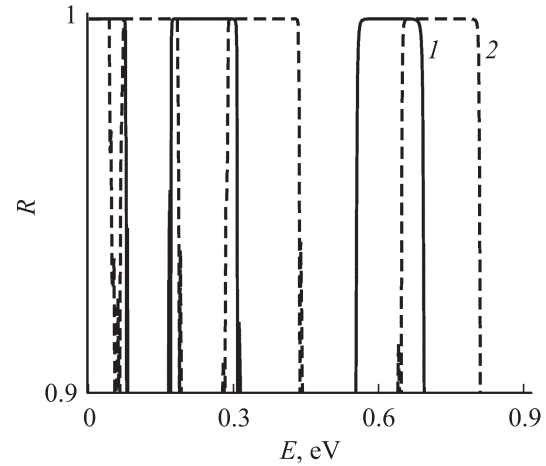
На рис. 2 приведена зависимость  $\psi(E)$ , иллюстрирующая зонный характер пропускания неограниченной периодической структуры. Запрещенные и разрешенные зоны обозначены штриховой и сплошной линией на оси абсцисс. Зависимости 2 и 3 соответствует (15) и (13).

Запрещенная зона решетки  $\delta$ -барьеров продолжает запрещенную зону решетки  $\delta$ -ям. Сочетание решеток  $\delta$ -ям и  $\delta$ -барьеров в одной комбинированной КС позволит сформировать широкие запрещенные зоны.

Дельта-неоднородность моделирует высокий тонкий барьер или глубокую узкую яму, которые обозначим как  $\varepsilon$ -неоднородность. Рис. 3 иллюстрирует формирование



**Рис. 2.** Зависимости  $\psi(E)$  решетки  $\delta$ -барьеров и уровней дефекта кристалла (кривые 1 и 2); поверхностные уровни (3);  $b = 0.6$  nm,  $\alpha = 0.5$  eV·nm,  $V_e = 20$  eV,  $m_d = m_b = m_0$ , где  $m_0$  — масса электрона;  $\eta' = \eta_c/\eta$ .



**Рис. 3.** Зависимости коэффициента отражения  $R$  (по модулю) КС, образованных  $\varepsilon$ -ямами (1) и  $\varepsilon$ -барьерами (2), от энергии электрона;  $V = 1$  eV,  $a = 0.2$ ,  $b = 2$  и  $b = 2.1$  nm соответственно для КС 1 и КС 2;  $m_a = m_b = m_0$ . Число неоднородностей в каждой из КС — 15.

широких запрещенных зон сочетанием КС 1 и КС 2, образованных соответственно  $\varepsilon$ -ямами и  $\varepsilon$ -барьерами. Для перекрытия запрещенных зон КС 1 и КС 2 запрещенные зоны КС 2 несколько смещены вниз выбором большего значения  $b$ . Комбинированная КС имеет две запрещенные зоны соответственно от 0 до 0.43 eV и от 0.56 до 0.8 eV.

Для решетки, образованной чередованием  $\delta$ -барьера и  $\delta$ -ямы с равными площадями (рис. 1, *f*), получим

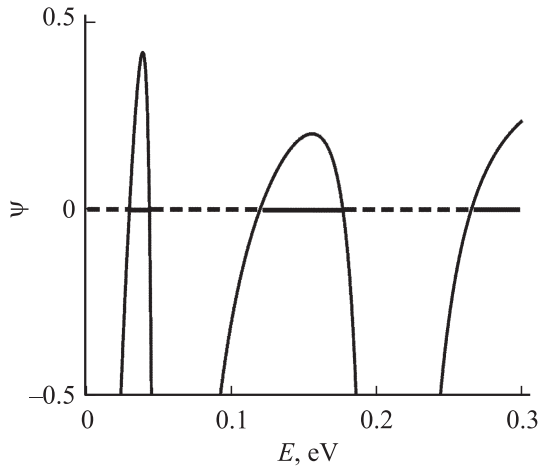
$$\psi = (1 + \eta^2)(1 + \eta B)/(1 - \eta B),$$

где  $\eta > 0$  — параметр  $\delta$ -барьера. Разрешенная зона расположена симметрично относительно точки  $B = 0$  в пределах  $B = \mp\eta^{-1}$ . Ширина разрешенной зоны, выраженная в масштабе  $B$ , равна  $2\eta^{-1}$ , что приближенно совпадает с шириной нижних разрешенных зон решеток  $\delta$ -барьеров или  $\delta$ -ям. Нижние разрешенные зоны решеток  $\delta$ -барьеров или  $\delta$ -ям смещены относительно разрешенной зоны решетки с чередованием  $\delta$ -барьера и  $\delta$ -ямы соответственно вниз и вверх на величину  $\eta^{-1}$ .

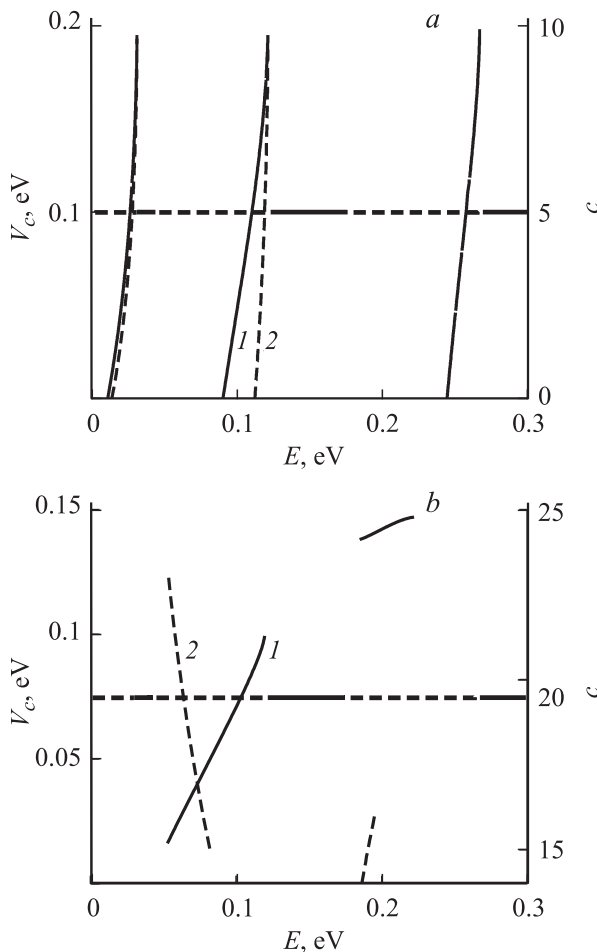
## Полупроводниковая сверхрешетка

Поскольку  $Z_a = k_a m_b / k_b m_a$ , то (5) совпадает с известным соотношением для запрещенных зон сверхрешетки (СР), образованной чередующимися потенциальными барьерами и ямами [4].

На рис. 4 приведена зависимость  $\psi(E)$ , иллюстрирующая формирование зонной характеристики СР, образованной слоями  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  и GaAs толщиной 10 и 30 монослоев GaAs в направлении [100] (толщина монослоя равна 2.82665 Å [5]). Высота барьеров  $V = 0.2$  eV. Эффективная масса электрона в об-



**Рис. 4.** Зависимость  $\psi(E)$  полупроводниковой CP  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ .



**Рис. 5.** Зависимости уровня дефекта, расположенного в слое I (a) и в слое II (b), от потенциала (1) и толщины слоя (2). Толщина слоя выражена в значениях толщины монослоя GaAs.

ласти барьера  $m_a = (0.0665 + 0.0835x)m_0$  [6]; в области ямы  $m_b = 0.0665m_0$ ,  $V$  и  $x$  связаны соотношением  $V = 0.7731x$  [7].

На рис. 5 приведены зависимости уровня дефекта рассмотренной CP от потенциала и толщины дефектного слоя. Кривые на рис. 5, a и b соответствуют (8) и (10). В случае дефекта в слое I в диапазоне значений  $c$  от 0 до 10 уровни дефекта отсутствуют в верхней запрещенной зоне, а в случае дефекта в слое II — в нижней.

## Фотонный кристалл, фононный кристалл

В фотонном кристалле (ФК) и фононном кристалле (ФнК) среда слоев I — дисперсионная и (5) соответствует известному соотношению для запрещенных зон ФК и ФнК, выраженному через отношение импедансов слоев [1].

В случае четвертьволновых слоев  $k_a a = k_b b$ ,  $\eta = (1 - Z_a)B/2$  и  $\psi = Z_a - \eta^2$ . Границы зон определяются условием  $\psi = 0$ , чему соответствует

$$B = \pm \frac{2\sqrt{Z_a}}{1 - Z_a}. \quad (16)$$

В серединах запрещенных зон  $\psi = -\infty$ . При этом  $k_a a = \pi(2n - 1)/2$ ,  $n = 1, 2, \dots$

На рис. 6 приведена зависимость  $\psi(k_a a)$  четвертьволновой КС. Под значениями  $k_a a$  указаны соответствующие значения нормированной частоты  $F = f/f_0$ , где  $f$  — частота;  $f_0$  — средняя частота первой запрещенной зоны.

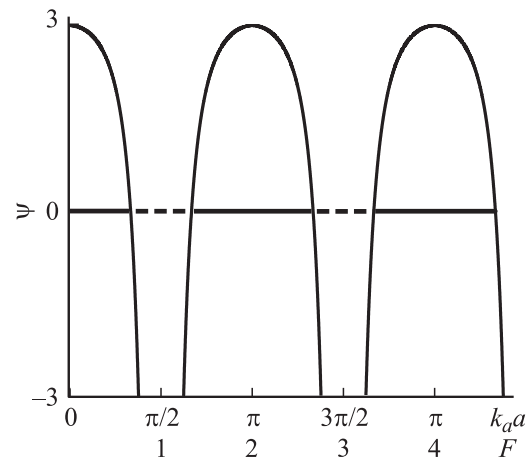
Исходя из (16) относительная ширина запрещенной зоны в частотной области определяется выражением

$$\Delta F = \frac{4}{\pi} \arcsin \frac{|Z_a - 1|}{Z_a + 1}.$$

Для ФК  $Z_a = n_b/n_a$ , где  $n_{a,b}$  — показатели преломления слоев. В случае  $n_a > n_b$  и  $n_a - n_b \ll n_a + n_b$  имеем

$$\Delta F \approx 4(n_a - n_b)/(n_a + n_b)/\pi.$$

Полученные выражения для  $\Delta F$  соответствуют [8].



**Рис. 6.** Зависимость  $\psi(k_a a)$  четвертьволновой КС;  $Z_a = 3$ .

Если поверхностный слой — слой II и  $Z_e < 1$ , то поверхностные уровни расположены в серединах запрещенных зон.

Импеданс как реакция среды на волновое возмущение обобщенно характеризует волновые свойства КС. Импедансные характеристики позволяют исследовать формирование спектральных свойств КС, влияние параметров и дефектов КС на эти свойства, дают подсказки в отношении конструирования КС с требуемыми характеристиками.

## Список литературы

- [1] *Нелин Е.А.* // ЖТФ. 2004. Т. 74. Вып. 11. С. 70–74.
- [2] *Нелин Е.А.* // УФН. 2007. Т. 177. № 3. С. 307–313.
- [3] *Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И.* Задачи по квантовой механике. Ч. 1. М: Едиториал УРСС, 2001. 304 с.
- [4] *Ярив А.* Введение в теорию и приложения квантовой механики. М: Мир, 1984. 360 с.
- [5] *Gaylord T.K., Glytsis E.N., Brennan K.F.* // J. Appl. Phys. 1989. Vol. 65. N 6. P. 2535–2540.
- [6] *Nakamura K., Shimizu A., Fujii K.* et. al. // IEEE J. of QE. 1992. Vol. 28. N 7. P. 1670–1677.
- [7] *Wilson D.W., Glytsis E.N., Gaylord T.K.* // IEEE J. of QE. 1993. Vol. 29. N 5. P. 1364–1382.
- [8] *Ярив А., Юх П.* Оптические волны в кристаллах. М.: Мир, 1987. 616 с.