



МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
Національний технічний університет України  
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»  
Радіотехнічний факультет  
Кафедра радіоконструювання та виробництва радіоапаратури

**Нелін Є.А., Ляшок А.В.**

# **Моделювання мікро- та наноструктур**

*Електронний дидактичний демонстраційний матеріал*

для студентів радіотехнічного факультету,  
спеціальності 172 Телекомунікації та радіотехніка,  
спеціалізація «Інтелектуальні технології мікросистемної радіоелектронної техніки»

*Рекомендовано вченою радою радіотехнічного факультету  
Національного технічного університету України  
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»*

Київ 2016

Моделювання мікро- та наноструктур: електронний дидактичний демонстраційний матеріал для студентів радіотехнічного факультету спеціальності 172 Телекомунікації та радіотехніка / Уклад. : Є.А. Нелін, А.В. Ляшок — К. : НТУУ «КПІ ім. Ігоря Сікорського», 2016. — 48 с.

Гриф надано вченою радою радіотехнічного факультету  
НТУУ «КПІ ім. Ігоря Сікорського»  
(Протокол № 11/2016 від 28 листопада 2016)

Рекомендовано навчально-методичною комісією радіотехнічного факультету  
(Протокол № 11/2016 від 25 листопада 2016)

Навчальне видання

### **Моделювання мікро- та наноструктур**

Електронний дидактичний демонстраційний матеріал

для студентів радіотехнічного факультету,

спеціальності 172 Телекомунікації та радіотехніка,

спеціалізація «Інтелектуальні технології мікросистемної радіоелектронної техніки»

Укладач:

*Нелін Євгеній Андрійович, док. тех. наук., професор*

*Ляшок Аліна Вікторівна, канд. тех. наук., асистент*

Рецензент:

*Мірських Георгій Олександрович, канд. тех. наук., доцент*

Відповідальний редактор: *Нелін Євгеній Андрійович, док. тех. наук., професор*

# ВСТУП

Сучасна проблематика радіотехніки пов'язана з інтенсивним розвитком інформаційно-телекомунікаційних радіотехнологій на основі новітніх пристроїв оброблення сигналів, мікро- та наносистемної радіоелектронної техніки. Пристрої оброблення сигналів нового покоління в значній мірі базуються на штучних хвильових бар'єрних структурах, до яких належать одно- та двобар'єрні, одно- та двоямні структури, кристалоподібні структури (КС) — напівпровідникові надґрати для квантово-механічних хвиль, електромагнітні та фотонні кристали для електромагнітних хвиль радіо та оптичного діапазонів, фононні кристали для акустичних хвиль.

Для прикладної мікро- та наноелектроніки значну актуальність мають моделі хвильових мікро- та наноструктур, що дозволяють безпосередньо перейти до синтезу, аналізу й конструювання пристроїв оброблення сигналів на основі математичного апарата радіотехнічних кіл.

# 1 Вступ до моделювання мікро- та наноструктур

## 1.1 Фізико-технічні основи мікро- та наноструктур

Мікро- та наноелектромеханічні структури та системи розвиваються в міждисциплінарній науково-технічній області, що об'єднує радіотехніку, електроніку, класичну та квантову механіку, хімію, біологію.

Визначення мікросистеми не є усталеним. Прийнято, що така система має об'єм порядку декількох сантиметрів. Перетворення сигналів в такій системі виконують мініатюрні елементи розмірами від декількох міліметрів до мікро- і нанометрів.

Перетворення полів різної природи – базовий узагальнюючий ефект мікросистем. Transduction – від латинського дієслова, що означає “вести крізь”. Базовий структурний елемент – межа між областями. Обмежена область формує “бар'єр” у загальному розумінні.

**Взаємодоповнення  
структур і фізичних  
ефектів**

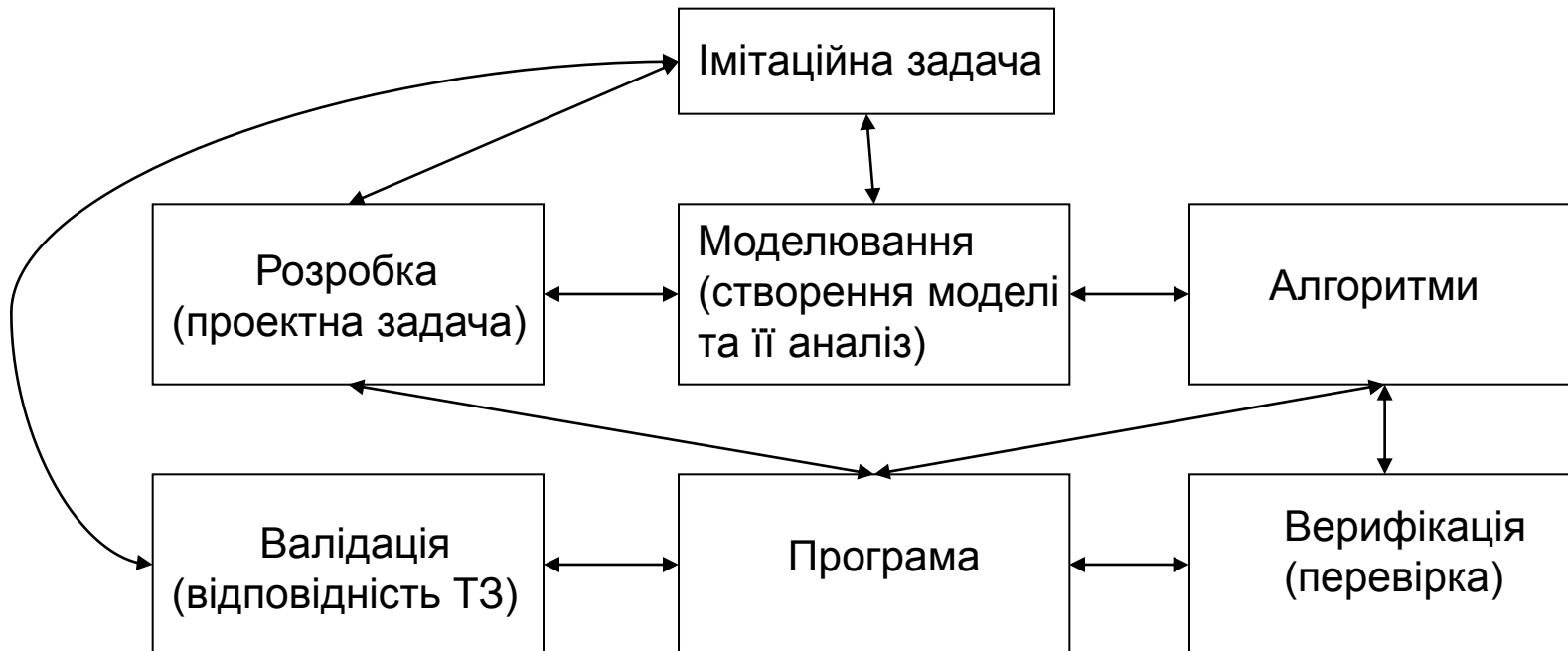


## 1.2 Особливості моделювання мікро- і наноструктур

В мікро- і наноструктурах і системах використовують різноманітні фізичні ефекти та матеріали, їх застосовують в різних технічних областях.

Дослідження ↔ Модель ↔ Об'єкт

### Блок-схема розробки як імітаційної задачі



Адекватність, простота, наочність моделі. Математична, фізична модель, одно-, дво- та тривимірне моделювання, дискретна, сіткова модель, власні значення, наукова візуалізація.

## 1.3 Імпедансна модель мікро- та наноструктур

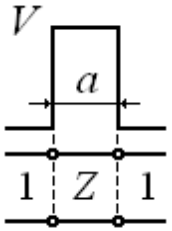
Імпеданс (від лат. impedio – перешкоджаю) характеризує реакцію середовища на хвильове збурювання. На межі середовищ з різними імпедансами хвильове збурювання і реакція середовища різні, що викликає появу відбитої хвилі.

$$\frac{V}{Z} \Big|_{z=0}^{z=Z_1} \quad r = \frac{Z - Z_1}{Z + Z_1} = \frac{1 - \rho}{1 + \rho} \quad \rho = \frac{Z_1}{Z} \quad U_{\text{п}} = 1 \quad \Psi = e^{ikx} + re^{-ikx}$$

Хвильове середовище	Імпеданс	Коментар
Механічне	$\frac{F}{v}$	вектори сили і швидкості
Електричне	$\frac{U}{I}$	
Електромагнітне	$\frac{E}{H}$	вектори напруженості електричного та магнітного полів
Електромагнітне, оптичний діапазон	$\frac{1}{n}$	$n$ – показник заломлення
Акустичне	$\nu\rho$	$\nu$ – швидкість, $\rho$ – густина
Квантово-механічне	$Z = 2\sqrt{2E/m}$ $Z_1 = 2\sqrt{2(E-V)/m_1}$	$E$ – енергія електрона; $m$ – ефективна маса електрона

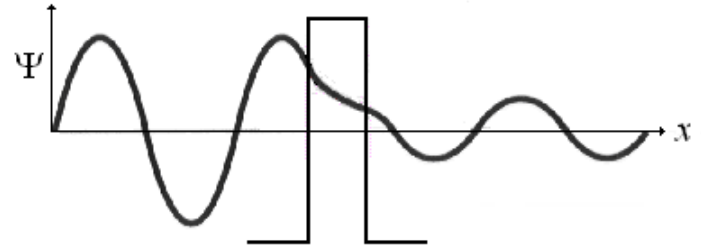
# Розділ 2. Моделі, характеристики та власні значення ТИПОВИХ КВАНТОВО-РОЗМІРНИХ СТРУКТУР

## 2.1 Поодинокий бар'єр



$$Z = \sqrt{\frac{m_b(E-V)}{m_a E}} \quad Z_{\text{BX}} = Z \frac{1-ZA}{Z-A} \quad A = \text{th}(ik_a a) \quad k_a = \frac{\sqrt{2m_a(E-V)}}{\hbar} \quad k_b = \frac{\sqrt{2m_b E}}{\hbar}$$

$E < V \rightarrow Z$ ,  $k_a$  – уявні  $\text{th}(ik_a a) = -\text{th}(|k_a| a)$



$|R|^2 + |T|^2 = 1$  При тунелюванні  $|T|^2 \ll 1$

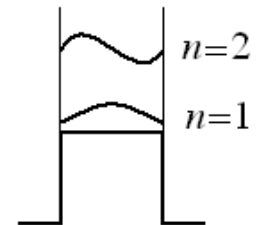
$|T| \approx 4 \frac{\sqrt{E(V-E)}}{V} e^{-|k_a| a}$   $V = 0,4\text{eВ}$ ,  $E = 0,2\text{eВ}$ ,  $a = 6\text{нм}$   $|T| \approx 2 * 10^{-6}$

$E > V \rightarrow Z$ ,  $k_a$  – дійсні  $\text{th}(ik_a a) = i \text{tg}(k_a a)$

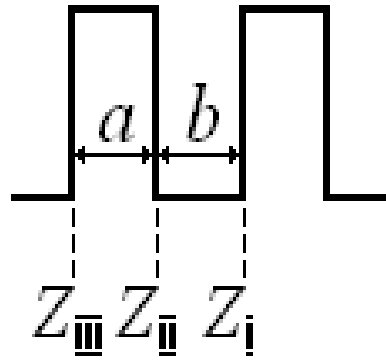
$R = \frac{1-Z_{\text{BX}}}{1+Z_{\text{BX}}} = \frac{(Z^2-1)A}{2Z-(Z^2+1)A}$   $R=0$   $Z=1$   $\text{tg}(k_a a) = 0$

$k_a a = \frac{2\pi}{\lambda_a} a = \pi n$ ,  $n = 1, 2, \dots$

$a = \frac{\lambda_a}{2} n$



## 2.2 Двобар'єрна структура



$$R = \frac{1 - Z_{\text{III}}}{1 + Z_{\text{III}}} \quad R=0 \quad \Rightarrow \quad AB = -\frac{2Z}{Z^2 + 1} \quad (1)$$

$$A = \text{th}(ik_a a) \quad B = i \text{tg} k_b b \quad k_a = \frac{\sqrt{2m_a(E-V)}}{\hbar} \quad k_b = \frac{\sqrt{2m_b E}}{\hbar}$$

$$Z = \sqrt{\frac{m_b(E-V)}{m_a E}} \quad Z = \frac{k_a m_b}{k_b m_a}$$

$$E < V \quad k_a = i\chi \quad Z = i|Z| \quad \Rightarrow \quad \text{tg} k_b b = \frac{2 \text{cth} \chi a}{|Z|^{-1} - |Z|} \quad (2)$$

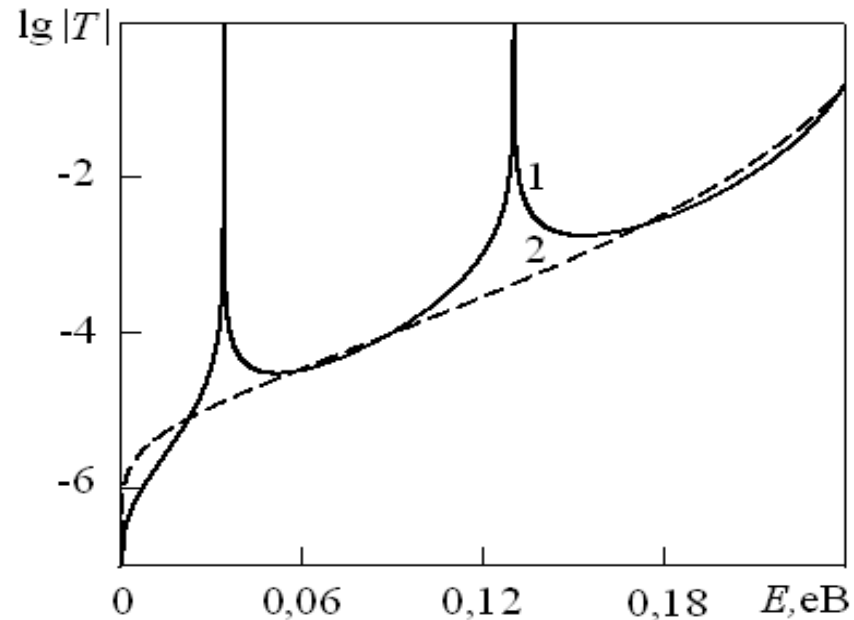
$$m_a = m_b \quad \text{tg} k_b b = \frac{\sqrt{E(V-E)} \text{cth} \chi a}{E - 0,5V} \quad (3)$$

$$\chi a \gtrsim 2 \quad \text{cth} \chi a \approx 1 \quad \text{tg} k_b b = \frac{\sqrt{E(V-E)}}{E - 0,5V} \quad (4)$$

При  $V \rightarrow \infty$   $\text{tg} k_b b = 0$ ,  $k_b b = n\pi$ ,  $n=1,2,\dots$   $b = n\lambda/2$



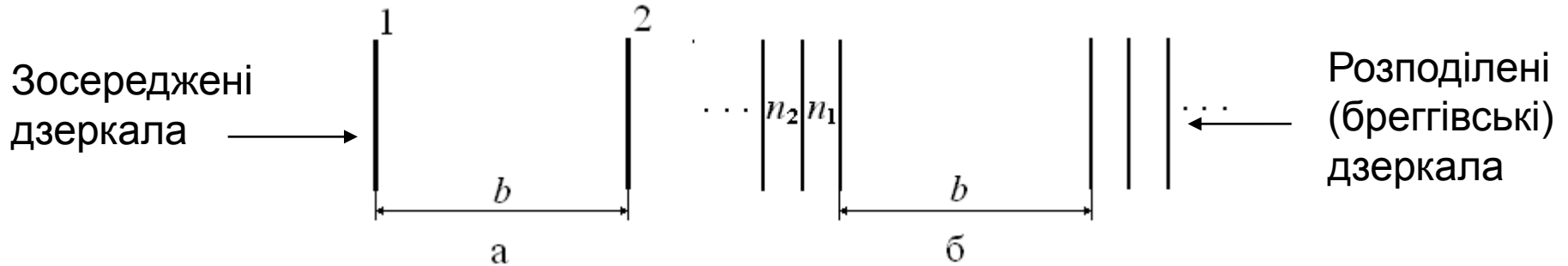
## 2.3 Типова характеристика двобар'єрної структури



Залежності коефіцієнта проходження симетричної ДБС і потенціального бар'єра подвійної товщини:  
1 — ДБС; 2 — бар'єр.  $V=0,24$  eV,  $a=b=2,5$  нм,  
 $m_a=m_b=m_0$ . де  $m_0$  — маса електрона.

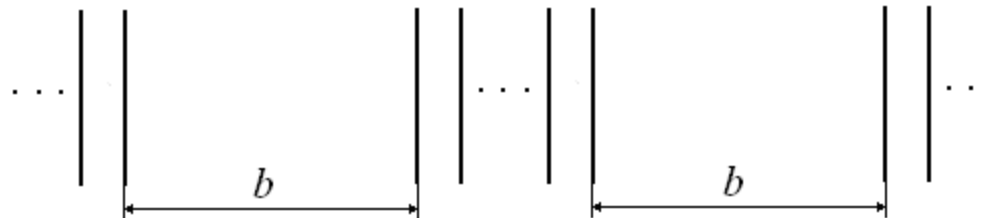
## 2.4 Мікромініатюрні резонатори

### Резонатор Фабрі-Перо



Умова резонансу  $b = n\lambda/2, n=1,2,\dots$

### Зв'язані резонатори



## 2.5 Добротність резонатора. Добротність квантовомеханічного резонатора

Добротність оптичного резонатора  $Q = \alpha\beta$

$$\alpha = \pi n, \quad \beta = \frac{1}{2 \arcsin\left[\left(\frac{1}{\sqrt{r_1 r_2}} - \sqrt{r_1 r_2}\right) / 2\right]}$$

$r_1, r_2$  — коефіцієнти відбиття від дзеркал — дійсні і одного знака

$$r_1 = r_2 = r \quad r^2 + t^2 = 1 \quad |r| \gg t$$

$$\beta = \frac{1}{2 \arcsin\left[\left(\frac{1}{|r|} - |r|\right) / 2\right]} = \frac{1}{2 \arcsin\left(\frac{1 - r^2}{2|r|}\right)} = \frac{1}{2 \arcsin\frac{t^2}{2|r|}} \approx \frac{|r|}{t^2}$$

Множник  $\alpha$  дорівнює набігу фаз у резонаторі на резонансній частоті

$$\alpha = kb \quad Q = \alpha / \Delta\varphi \quad \alpha = \Delta\varphi Q$$

Для квантово-механічного резонатора необхідно врахувати особливості залежностей  $k(E)$  і  $r(E)$

$$\Delta\varphi = \Delta\varphi_b + \Delta\varphi_r \quad \alpha = \alpha_b + \alpha_r \quad \text{де } \Delta\varphi_b = \alpha_b / Q, \quad \Delta\varphi_r = \alpha_r / Q$$

## 2.6 Амплітудні і фазові умови резонансного тунелювання хвиль

$$|r_1|=|r_2|, \quad (1)$$

$$2k_b b + \varphi_1 + \varphi_2 = 2\pi n, \quad (2)$$

$n=1, 2, \dots$  — номер енергетичного рівня

Модель резонатора дозволяє визначити і ширину рівня  $\Gamma$ , яка дорівнює смузі резонансу (ширині характеристики  $|T|^2$ ) при значенні 0,5 від максимуму:  $\Gamma = E/Q$ , де  $E$  — власний рівень згідно (2).

Відносна ширина рівня  $\hat{\Gamma} = \frac{\Gamma}{E} = \frac{1}{Q}$ .

## 2.7 Власні рівні енергії і ширина рівня двобар'єрної структури

$$Z_i = Z \frac{1-ZA}{Z-A} = \frac{1-ZA}{1-Z^{-1}A}, \quad A = -i\text{th}\chi a, \quad Z = i|Z| \qquad r = \frac{1-Z_i}{1+Z_i}$$

При  $E < V$

$$r = \frac{1-Z^{-1}A-1+ZA}{1-Z^{-1}A+1-ZA} = \frac{(Z-Z^{-1})A}{2-(Z+Z^{-1})A} = \frac{-i(|Z|+|Z|^{-1})\text{th}\chi a}{2-i(|Z|^{-1}-|Z|)\text{th}\chi a} = \frac{|Z|+|Z|^{-1}}{|Z|^{-1}-|Z|+2i\text{cth}\chi a}$$

$$\varphi = \begin{cases} \arctg \frac{2\text{cth}\chi a}{|Z|-|Z|^{-1}}, & |Z| \leq 1, \\ \pi + \arctg \frac{2\text{cth}\chi a}{|Z|-|Z|^{-1}}, & |Z| > 1. \end{cases} \qquad \begin{aligned} k_b b &= -\varphi + \pi n \\ \text{tg} k_b b &= -\text{tg} \varphi \\ \text{tg} k_b b &= \frac{2\text{cth}\chi a}{|Z|^{-1}-|Z|} \end{aligned}$$

$$\hat{\Gamma} \approx \frac{8}{\pi n} \left( \frac{\text{sh}^{-1}\chi a}{|Z|+|Z|^{-1}} \right)^2$$

При  $m_a = m_b$  і  $\chi a \geq 1$

$$\hat{\Gamma} \approx \frac{32}{\pi n} \frac{E(V-E)}{V^2} e^{-2\chi a}$$

$$\Gamma \sim 10^{-3} \dots 10^{-7} \text{ eV}$$

## 2.8 Імпедансні умови резонансного проходження і резонансної локалізації хвиль

Неоднорідності збурень падаючої хвилі на неоднорідностях структури викликають багаторазові відбиття.

В результаті інтерференції відбитих хвиль усередині структури формується стояча хвиля, резонансна при резонансному проходженні і резонансній локалізації хвиль. Резонансна стояча хвиля компенсує неоднорідності збурень падаючої хвилі.

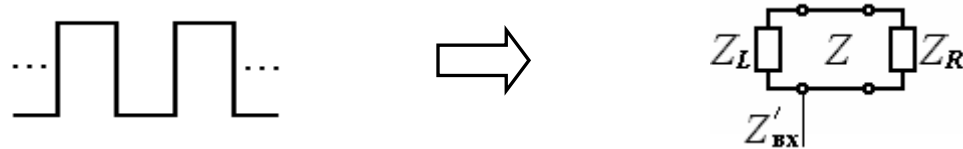


$$Z = \operatorname{Re}Z + i\operatorname{Im}Z$$

$$Z_+ = Z_-, \quad \operatorname{Re}Z_{\pm} \neq 0, \quad (1)$$

$$\operatorname{Im}Z_+ = \operatorname{Im}Z_-, \quad \operatorname{Re}Z_{\pm} = 0, \quad (2)$$

## 2.9 Узагальнена модель лінії передачі для бар'єрних структур



$$Z'_{\text{BX}} = Z \frac{Z_R - ZB}{Z - Z_R B}$$

$$B = \text{th}(ik_b b) = itgk_b b$$

$$Z'_{\text{BX}} = Z_L \Rightarrow$$

$$B = Z \frac{Z_R - Z_L}{Z^2 - Z_R Z_L}$$

Для симетричних структур

$$Z_R = \text{Re}Z_R + i \text{Im}Z_R$$

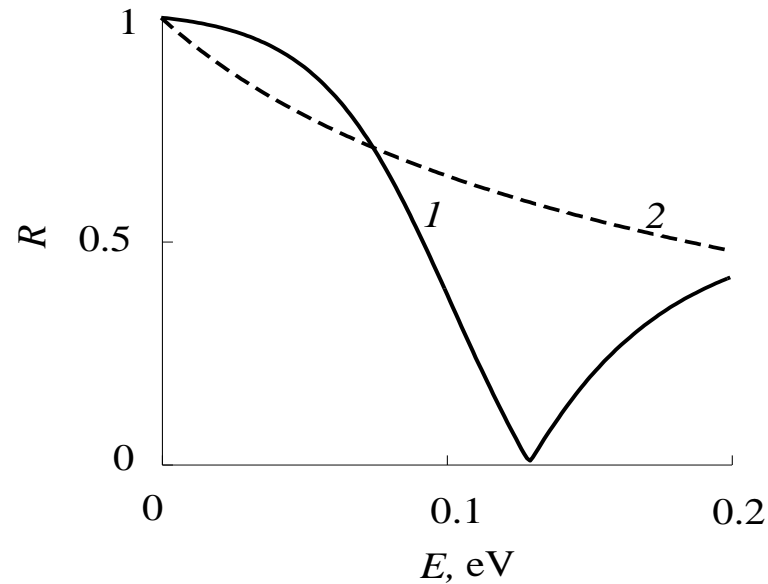
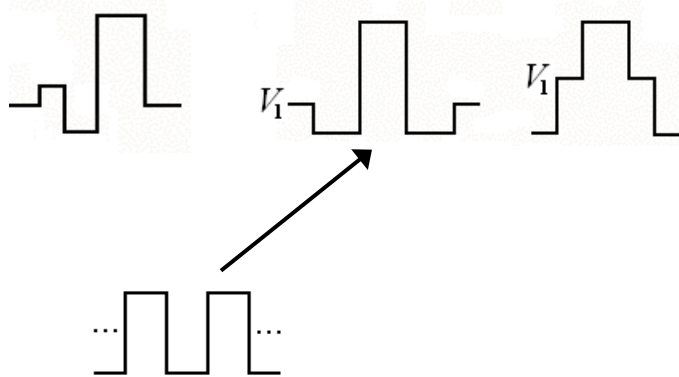
$$Z_L = \text{Re}Z_R - i \text{Im}Z_R$$

$$B = \frac{2iZ \text{Im}Z_R}{Z^2 - |Z_R|^2}$$

$$Z = 1, Z_R = Z_{\text{BX}} \quad (\text{бар'єра}) \Rightarrow$$

$$tgk_b b = \frac{2\text{cth}\chi a}{|Z|^{-1} - |Z|}$$

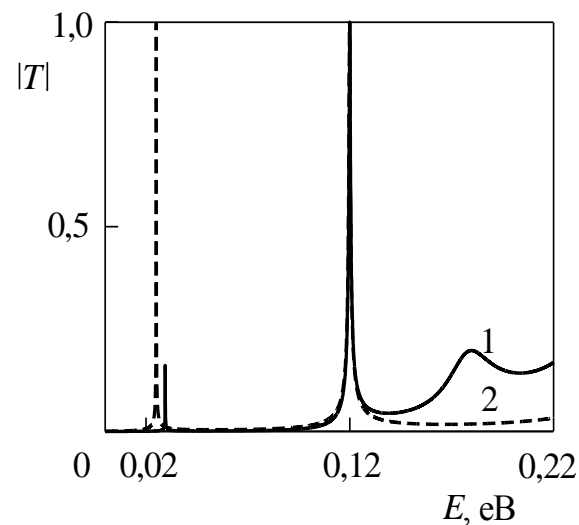
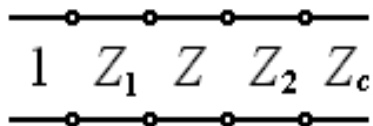
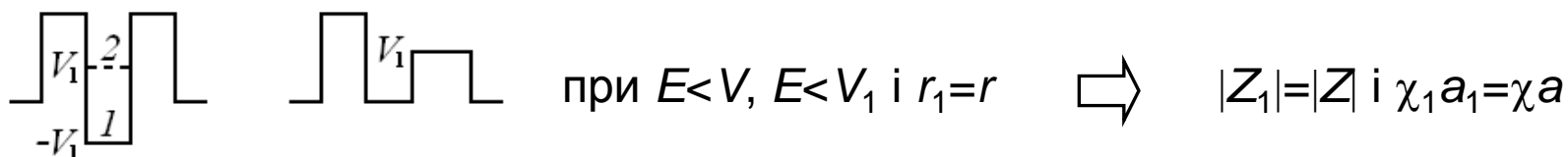
## 2.10 Однobar'єрні структури з резонансним тунелюванням



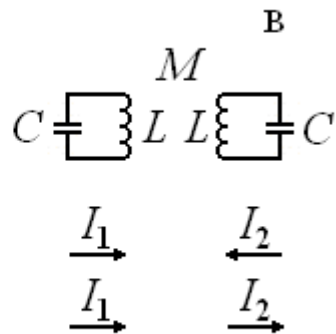
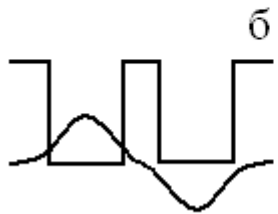
Такі структури мають високі селективні властивості. Смуга пропускання відповідає резонансному тунелюванню. Поза смугою пропускання тунельний бар'єр має надзвичайно низьку прозорість, що забезпечує значне загасання сигналу. Тунельному бар'єру відповідає кристалоподібна структура (КС) — напівпровідникові надґрати, фотонний, електромагнітний або фононний кристал — у режимі забороненої зони.



## 2.11 Симетрична двобар'єрна структура з несиметричними бар'єрами та несиметрична двобар'єрна структура

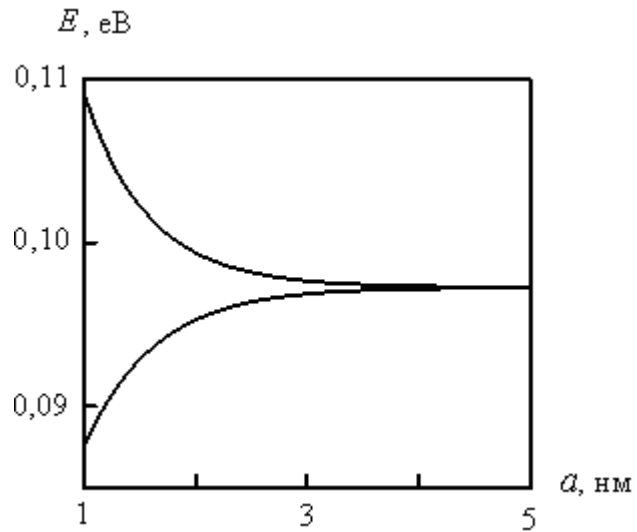


## 2.12 Двоямна структура



$$f_{I, II} = f_0 / \sqrt{1 \pm k_{3B}}$$

$$k_{3B} = M / L$$

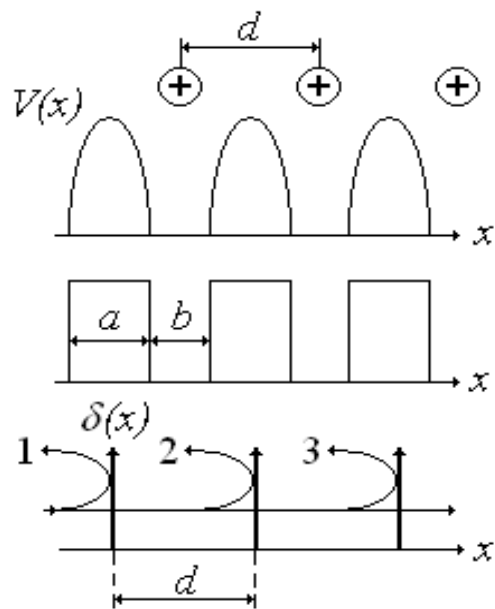


$$V = V_1 = 0,2 \text{ eB}, b=1 \text{ нм}$$

$$m_a = m_b = m_c = m_0$$

# Розділ 3. Моделювання кристалоподібних структур

## 3.1 Модель Кроніга-Пенні



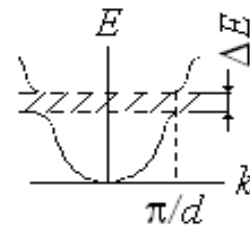
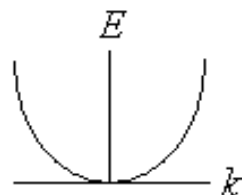
Брегівські відбиття

$$1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow \dots \Rightarrow R=1$$

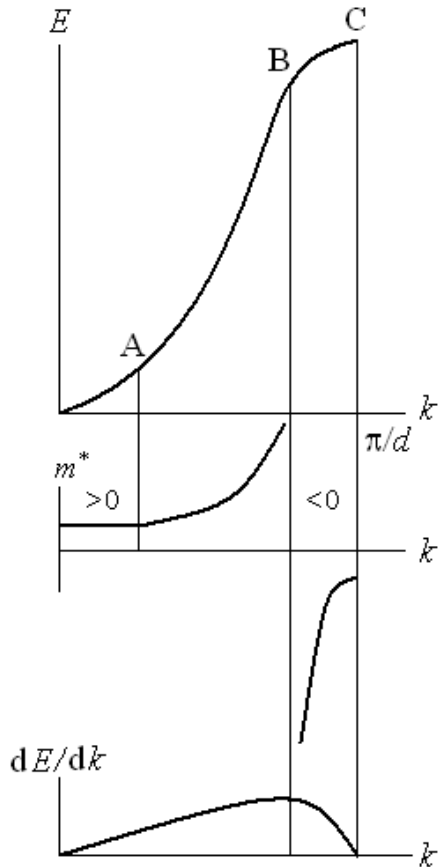
$$d = \frac{\lambda}{2} n, \quad n = 1, 2, \dots \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{2d} n = \frac{\pi}{d} n$$

$$k = \frac{\pi}{d}$$

$$E \sim k^2$$



## 3.2 Ефективна маса електрона

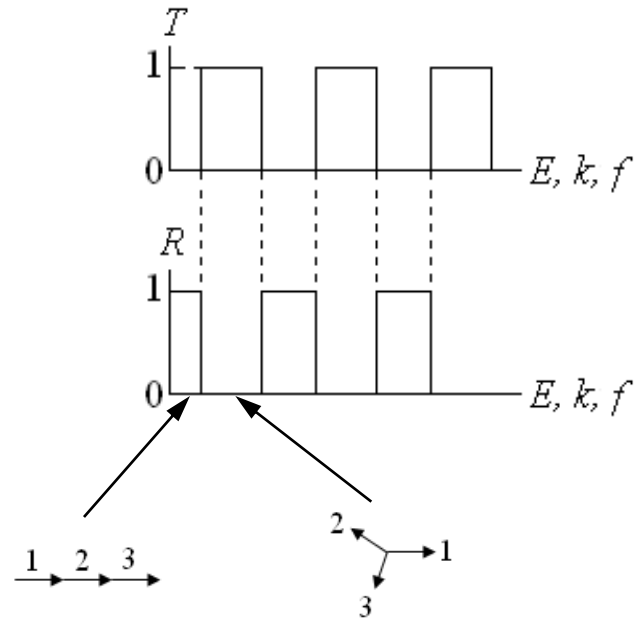
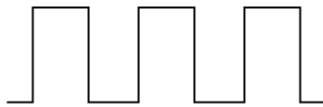


$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2}$$

	Електронний кристал	Фотонний кристал
	$m^* > 0$	$n^* > 0$
$E_c$	Зона провідності	
	Електронна заборонена зона	Фотонна заборонена зона
$E_v$		
	$m^* < 0$	$n^* < 0$
	Валентна зона	

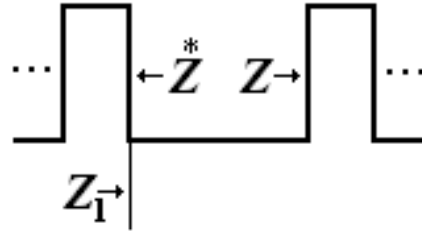
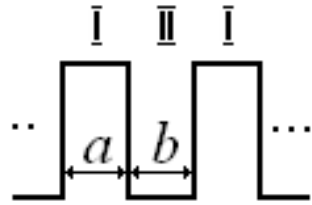
### 3.3 Зонні характеристики КС

Залежність  $V(x)$  або  $Z(x)$



Дозволені зони — зони резонансного проходження хвиль (у тому числі резонансного тунелювання). Заборонені зони — зони реактивного загасання хвиль. В дозволених зонах КС повністю прозора, в заборонених — повністю непрозора. Таким чином, забезпечується максимальне пропускання сигналів в дозволених зонах і максимальне подавлення в заборонених.

### 3.4 Вхідний імпеданс КС



$$Z^* = Z_1 = \frac{Z - iB}{1 - iZB} \quad Z = Z_a \frac{Z^* - Z_a A}{Z_a - Z^* A}$$

$$B = \operatorname{tg} k_b b \quad A = \operatorname{th}(ik_a a) = i \operatorname{tg} k_a a$$

$$\begin{cases} Z^* - iZ^* Z B = Z - iB, \\ Z Z_a - Z^* Z A = Z_a Z^* - Z_a^2 A \end{cases}$$



$$Z Z^* = \frac{Z - Z^*}{iB} + 1$$



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



$$\frac{(Z - Z^*) Z_a}{A} = Z Z^* - Z_a^2$$

$$2i\eta Z_a A^{-1} = 1 - 2\eta B^{-1} - Z_a^2$$

$$Z = \sqrt{\psi} + i\eta$$

$$Z Z^* = \operatorname{Re}^2(Z) + \operatorname{Im}^2(Z) = \psi + \eta^2$$

$$Z - Z^* = 2i\eta$$

$$Z_{\text{BX}} = \frac{i|Z| - i \operatorname{tg} k_b x}{1 + |Z| \operatorname{tg} k_b x}$$



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

### 3.5 Імпедансні умови для заборонених та дозволених зон

$$Z = \sqrt{\psi} + i\eta$$

При  $\psi < 0$  вхідний імпеданс уявний і КС стає реактивним середовищем. Ці інтервали відповідають забороненим зонам.

$$\psi = 1 - \eta^2 - 2\eta B^{-1} < 0, \quad 1 - \eta^2 - 2\eta B^{-1} - B^{-2} + B^{-2} < 0, \quad (\eta + B^{-1})^2 > 1 + B^{-2},$$

$$\frac{(\eta \sin k_b b + \cos k_b b)^2}{\sin^2 k_b b} > \frac{\sin^2 k_b b + \cos^2 k_b b}{\sin^2 k_b b}, \quad (\cos k_b b + \eta \sin k_b b)^2 > 1$$

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

В дозволених зонах повинна виконуватися умова балансу фаз

$$k_b b + \varphi = \pi n \quad r = \frac{1 - Z}{1 + Z}$$

### 3.6 Дозволені зони — зони власних значень КС

$$k_b b + \varphi = \pi n \quad \Rightarrow \quad \varphi = \pi n - k_b b \quad \operatorname{tg} \varphi = -\operatorname{tg} k_b b = -B$$

$$r = \frac{1-Z}{1+Z} = \frac{1 - \sqrt{\psi} - i\eta}{1 + \sqrt{\psi} + i\eta}$$

$$\varphi = \operatorname{arctg} \frac{\eta}{\sqrt{\psi} - 1} - \operatorname{arctg} \frac{\eta}{\sqrt{\psi} + 1}$$

$$\operatorname{arctg} x - \operatorname{arctg} y = \operatorname{arctg} \frac{x - y}{1 + xy}$$

$$\frac{x - y}{1 + xy} = \frac{\frac{\eta}{\sqrt{\psi} - 1} - \frac{\eta}{\sqrt{\psi} + 1}}{1 + \frac{\eta^2}{\psi - 1}} = \frac{\eta\sqrt{\psi} + \eta - \eta\sqrt{\psi} + \eta}{\psi - 1 + \eta^2} = \frac{2\eta}{-2\eta B^{-1}} = -B$$

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

$$\varphi = -\operatorname{arctg} B$$

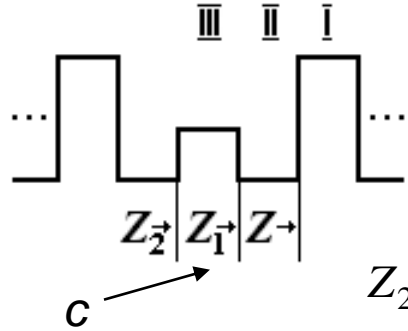
$$\operatorname{tg} \varphi = -B$$



$$\varphi = \pi n - k_b b$$



### 3.7 Власні значення дефектів КС



$$Z_1 = \frac{Z - iB}{1 - iZB} \quad Z_2 = Z_c \frac{Z_1 - Z_c C}{Z_c - Z_1 C} \quad C = \text{th}(ik_c c) = itgk_c c$$

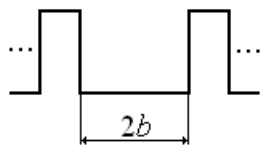
$$Z_2 = -Z_1 \quad Z_1 = Z_c \frac{Z_c C - Z_1}{Z_c - Z_1 C} \quad Z_1 Z_c - Z_1^2 C = Z_c^2 C - Z_c Z_1$$

$$C(Z_c^2 + Z_1^2) = 2Z_c Z_1$$

$$C = \frac{2Z_c Z_1}{Z_c^2 + Z_1^2}$$

$$C = \frac{2Z_c Z}{Z_c^2 + Z^2}$$

$c = 0$



$$Z_1 = 0 \quad B = |Z| \quad Z = i(\sqrt{-\psi} + \eta) \quad B = \sqrt{2\eta B^{-1} + \eta^2 - 1} + \eta$$

$$(B - \eta)^2 = 2\eta B^{-1} + \eta^2 - 1 \quad B^2 + \eta^2 - 2B\eta = 2\eta B^{-1} + \eta^2 - 1$$

$$2\eta(B + B^{-1}) = B^2 + 1 = B(B + B^{-1})$$

$$B = 2\eta$$

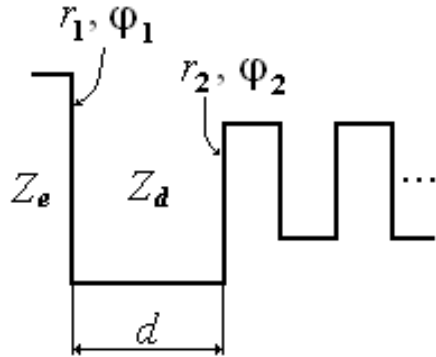
$$4k_b b + 2\varphi = 2\pi n \quad \text{tg}\varphi = -\text{tg}2k_b b$$

$$Z = 2i\eta \quad r = \frac{1 - Z}{1 + Z} = \frac{1 - 2i\eta}{1 + 2i\eta}$$

$$\varphi = -2\text{arctg}2\eta \quad \text{tg}\varphi = -\text{tg}2k_b b$$

# 3.8 Поверхневі рівні КС

## Реактивний поверхневий потенціал



$$2k_d d + \varphi_1 + \varphi_2 = 2\pi n$$

$$r_1 = \frac{Z_d - Z_e}{Z_d + Z_e} = \frac{Z_d - i|Z_e|}{Z_d + i|Z_e|}$$

$$r_2 = \frac{Z_d - Z}{Z_d + Z} = \frac{Z_d - i|Z|}{Z_d + i|Z|}$$

$$\varphi_1 = -2\text{arctg} \frac{|Z_e|}{Z_d}$$

$$\varphi_2 = -2\text{arctg} \frac{|Z|}{Z_d}$$

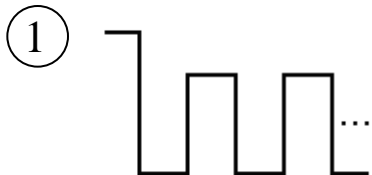
$$2k_d d - 2\text{arctg} \frac{|Z_e|}{Z_d} - 2\text{arctg} \frac{|Z|}{Z_d} = 2\pi n$$

$$\text{arctg} x + \text{arctg} y = \text{arctg} \frac{x + y}{1 - xy}$$

$$k_d d - \text{arctg} \frac{(|Z_e| + |Z|)Z_d}{Z_d^2 - |ZZ_e|} = \pi n$$

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

$$D = \text{tg} k_d d$$



$$B = \frac{2\eta}{1 + |Z_e|^2 - 2\eta|Z_e|}$$

$$d = b \quad k_d = k_b$$

$$Z_d = 1$$

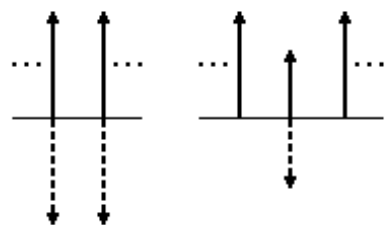
②

$$Z_e = \sqrt{\frac{(E - V_e)m_b}{Em_e}}$$

$$m_e = m_b$$

$$B = \frac{1}{V_e / 2\eta E - \sqrt{V_e / E - 1}}$$

### 3.9 Решітка потенціальних $\delta$ -неоднорідностей



$$s \quad a \rightarrow 0 \quad V = s/a \rightarrow \infty \quad Z_a = \sqrt{\frac{(E-V)m_b}{Em_a}} = i \sqrt{\frac{sm_b}{aEm_a}}$$

$$|Z_a| \rightarrow \infty$$

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

$$A = \text{th}(ik_a a) \quad k_a = \frac{\sqrt{2m_a(E-V)}}{\hbar} = \frac{i}{\hbar} \sqrt{2sm_a}$$

$$A = -\text{th}\left(\frac{\sqrt{2sm_a a}}{\hbar}\right) = -\frac{\sqrt{2sm_a a}}{\hbar}$$

$$\eta = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{sm_b}{aEm_a}} \frac{\sqrt{2sm_a a}}{\hbar} = \frac{sm_b}{\hbar^2} \left( \frac{\hbar}{\sqrt{2Em_b}} \right) \Rightarrow \frac{1}{k_b}$$

Для  $\delta$ -ями

$$Z_a = \sqrt{\frac{(E+V)m_b}{Em_a}} = \sqrt{\frac{sm_b}{aEm_a}}$$

$$k_a = \frac{\sqrt{2m_a(E+V)}}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2sm_a}$$

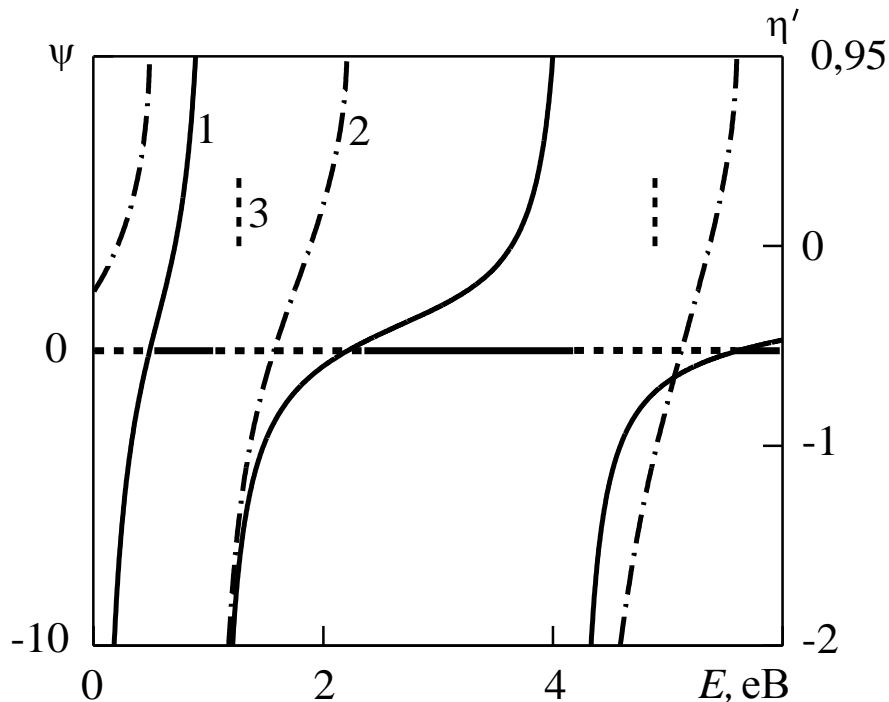
$$\eta = \pm \frac{sm_b}{\hbar^2 k_b}$$

$$\text{th}(ix) = itg(x)$$

### 3.10 Характеристики решітки потенціальних $\delta$ -неоднорідностей

$$Z = \sqrt{\psi} + i\eta \quad \psi = 1 - \eta^2 - 2\eta B^{-1} \quad \psi = 0 \quad \psi = \pm\infty \quad \boxed{|\cos k_b b + \eta \sin k_b b| > 1} \quad (1)$$

$$C = \frac{2Z_c Z_1}{Z_c^2 + Z_1^2} \quad C = \frac{2Z_c Z_1}{Z_c^2 + Z_1^2} = \frac{2Z_1}{Z_c} \quad \Rightarrow \quad \eta_c = iZ_1 \quad Z_1 = \frac{Z - iB}{1 - iZB} \quad \boxed{B = \frac{|Z| + \eta_c}{1 - |Z|\eta_c}} \quad (2)$$

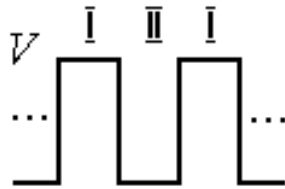


$$\boxed{B = \frac{1}{V_e / 2\eta E - \sqrt{V_e / E - 1}}} \quad (3)$$

Залежності  $\psi(E)$  решітки  $\delta$ -бар'єрів і рівнів дефекта кристала (криві 1 і 2); поверхневі рівні (3).  $b=d=0,6$  нм,  $s=0,5$  еВ·нм,  $V_e=20$  еВ,  $m_d=m_b=m_0$ , де  $m_0$  — маса електрона;

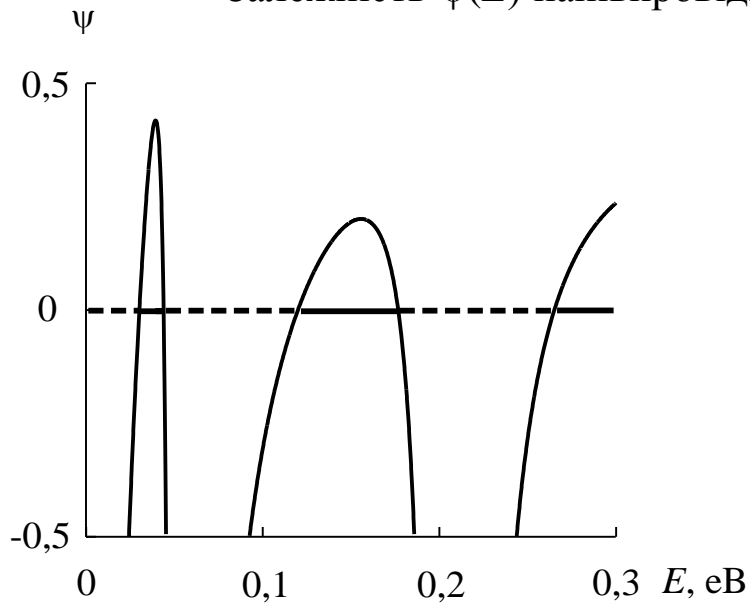
$$\eta' = \frac{\eta_c}{\eta}$$

### 3.11 Характеристики напівпровідникових надґрат



$$Z_a = \sqrt{\frac{(E - V)m_b}{Em_a}} = \frac{k_a m_b}{k_b m_a}$$

Залежність  $\psi(E)$  напівпровідникових надґрат  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$



$$a=10t, b=30t, t=2,82665 \text{ \AA}$$

$t$  — товщина моношару GaAs в напрямку [100]

$$V=0,2 \text{ eV}$$

$$m_b=0,0665m_0$$

$$m_a=(0,0665 + 0,0835x)m_0$$

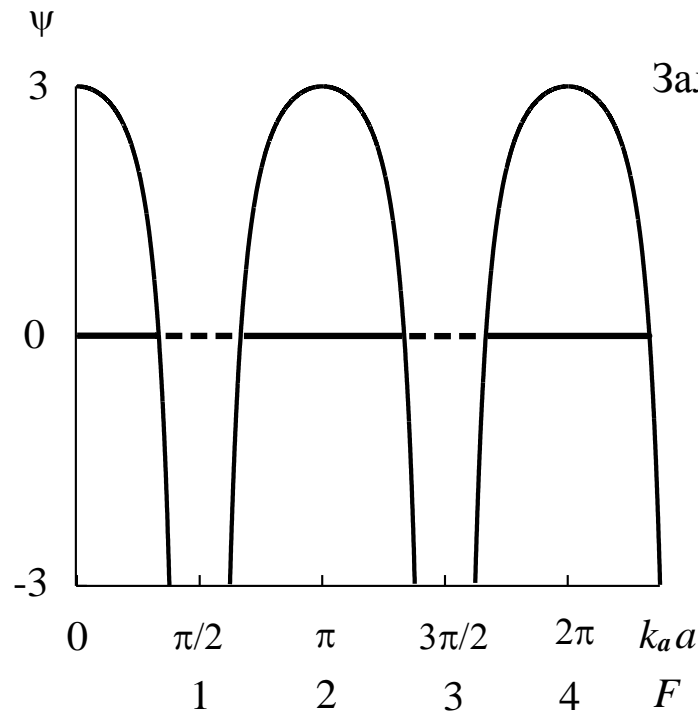
$$V=0,7731x$$

### 3.12 Характеристики фотонних і фононних кристалів

$$k_a a = k_b b \quad A = iB \quad \eta = \frac{1 - Z_a^2}{2(B^{-1} + iZ_a A^{-1})} = \frac{1 - Z_a^2}{2B^{-1}(1 + Z_a)} = \frac{(1 - Z_a)B}{2}$$

$$\psi = 1 - \eta^2 - 2\eta B^{-1} = 1 - \eta^2 - (1 - Z_a) = Z_a - \eta^2 \quad \psi = 0 \Rightarrow B = \frac{2\sqrt{Z_a}}{|Z_a - 1|}$$

$$\psi = -\infty \Rightarrow k_a a = \pi(2n - 1)/2, \quad n = 1, 2, \dots$$

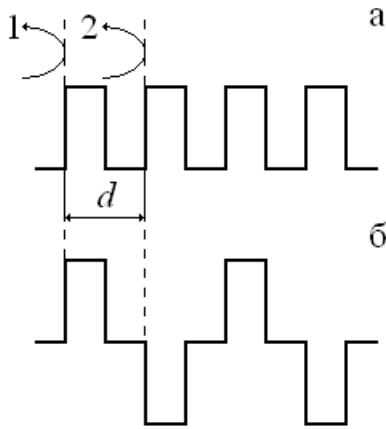


Залежність  $\psi(k_a a)$  чвертьхвильової КС.  $Z_a = 3$ .

$$F = f / f_0$$

### 3.13 Двофазні кристалоподібні структури

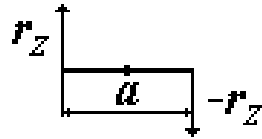
Позначимо неоднорідності та індекси їх параметрів буквами  $h$  і  $l$  (high- і low-impedance).



$$Z_h > 1 > Z_l \quad r_Z = \frac{1-Z}{1+Z} \quad r_h < 0 \quad r_l > 0$$

$$\boxed{\Delta\varphi_r + 2\varphi_d = 2\pi} \quad \Delta\varphi_r = 0 \quad \varphi_d = \pi \quad \Delta\varphi_r = \pi \quad \varphi_d = \pi/2$$

$$\varphi_d = kd \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi f}{v}$$



$$\varphi = ka$$

$$r_{од} = r_Z e^{i\varphi} - r_Z e^{-i\varphi} = 2ir_Z \sin \varphi$$

$$Z_h = Z_l^{-1}$$

$$\varphi_h = \varphi_l \quad (1)$$



$$r_h = -r_l$$

$$r = \frac{1-Z_i}{1+Z_i}$$

$$Z_i = \frac{1-iZ_t \operatorname{tg} \varphi}{1-iZ^{-1} \operatorname{tg} \varphi}$$

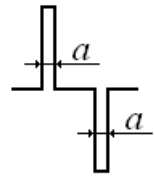
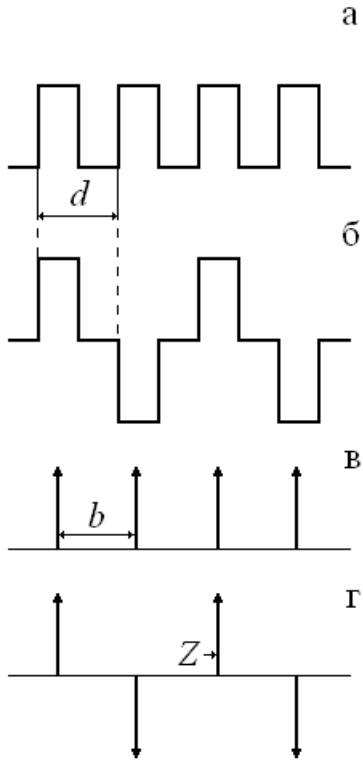
$$\varphi_r = \begin{cases} -\operatorname{arctg} X, & Z < 1, \\ \pi - \operatorname{arctg} X, & Z > 1, \end{cases}$$

$$X = \frac{2\operatorname{ctg} \varphi}{Z + Z^{-1}}$$

$$\Delta\varphi_r = \pi - \operatorname{arctg} \frac{X_h - X_l}{1 + X_h X_l} + \varphi_h - \varphi_l$$

$$Z_h = 4, \quad Z_l = 0,5, \quad \varphi_h = \varphi_l = \pi/4 \quad \Delta\varphi_r = 167^\circ$$

### 3.14 Імпедансні $\delta$ -неоднорідності



$$Z_h = \frac{\alpha_h}{a} \quad Z_l = \frac{a}{\alpha_l} \quad a \rightarrow 0 \quad Z_h \rightarrow \infty \quad Z_l \rightarrow 0$$

$$\text{tg}ka \rightarrow ka$$

$$Z_{ih} = \frac{1 - iZ_h k_h a}{1 - iZ_h^{-1} k_h a} = 1 - i\alpha_h k_h \quad Z_{il} = \frac{1}{1 - i\alpha_l k_l}$$

$$B = \text{tg}k_b b$$

$$Z = \sqrt{\psi} + \eta_h \quad \psi = \frac{(B - \eta_h)[1 - \eta_h \eta_l + B(\eta_h + \eta_l)]}{B - \eta_l} \quad \eta_{h,l} = -\frac{\alpha_{h,l} k_{h,l}}{2}$$

$$\frac{(B - \eta_h)[1 - \eta_h \eta_l + B(\eta_h + \eta_l)]}{B - \eta_l} = \frac{(B - \eta_h)[1 + \eta_h(B - \eta_l) + B\eta_l + B^2 - B^2]}{B - \eta_l} =$$

$$= \frac{(B - \eta_h)[1 + \eta_h(B - \eta_l) - B(B - \eta_l) + B^2]}{B - \eta_l} = \frac{(B - \eta_h)(1 + B^2)}{B - \eta_l} - (B - \eta_h)^2 =$$

$$= \frac{B - \eta_h}{(B - \eta_l) \cos^2 k_b b} - (B - \eta_h)^2 \quad 1 + \text{tg}^2 k_b b = \frac{\cos^2 k_b b + \sin^2 k_b b}{\cos^2 k_b b} = \frac{1}{\cos^2 k_b b}$$



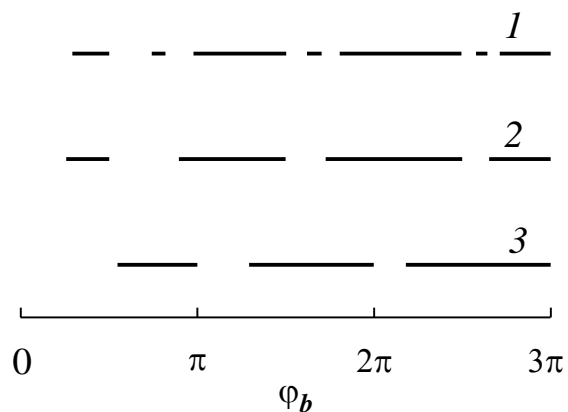
### 3.15 Зонні діаграми двофазних КС

$$\psi < 0 \quad \frac{B - \eta_h}{(B - \eta_l) \cos^2 k_b b} < (B - \eta_h)^2 \quad 1) \frac{B - \eta_h}{B - \eta_l} > 0 \quad 2) \frac{B - \eta_h}{B - \eta_l} < 0$$

$$(B - \eta_h)(B - \eta_l) > \frac{1}{\cos^2 k_b b} \Rightarrow (\eta_h \cos k_b b - \sin k_b b)(\eta_l \cos k_b b - \sin k_b b) > 1 \quad (1)$$

$$(B - \eta_h)(B - \eta_l) < 0 \Rightarrow (\eta_h \cos k_b b - \sin k_b b)(\eta_l \cos k_b b - \sin k_b b) < 0 \quad (2)$$

$$\eta_h = \eta_l = \eta \quad (\eta \cos k_b b - \sin k_b b)^2 > 1 \quad (\eta \cos k_b b - \sin k_b b)^2 < 0$$

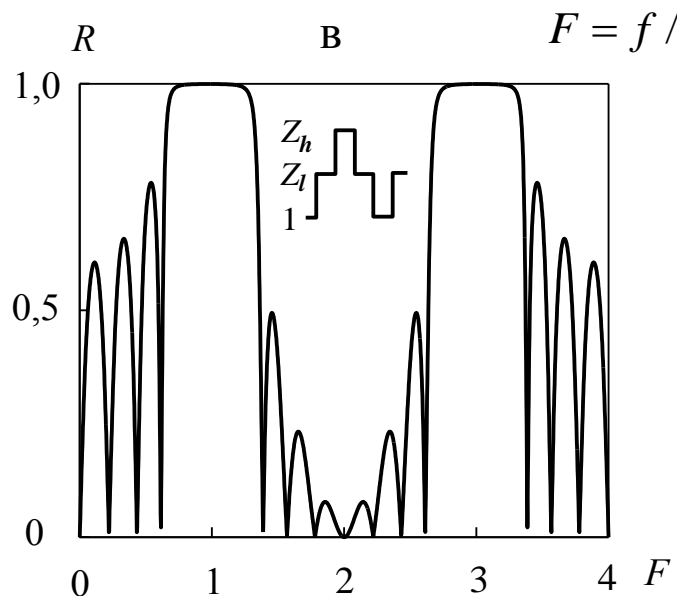
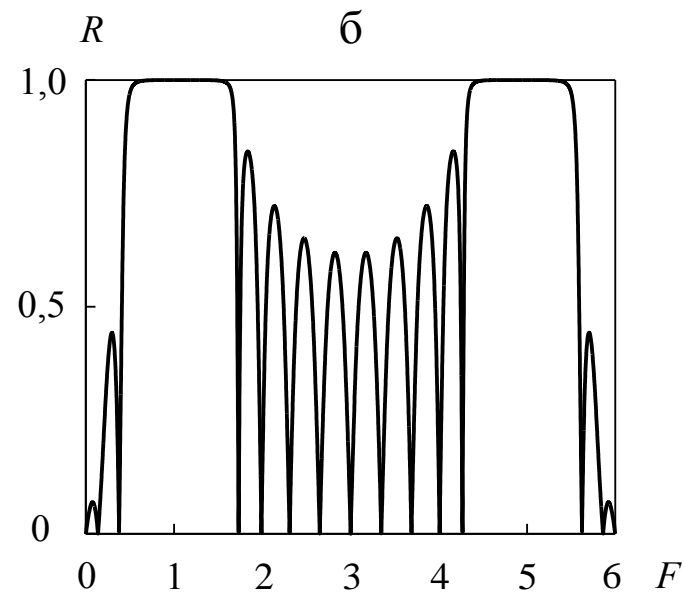
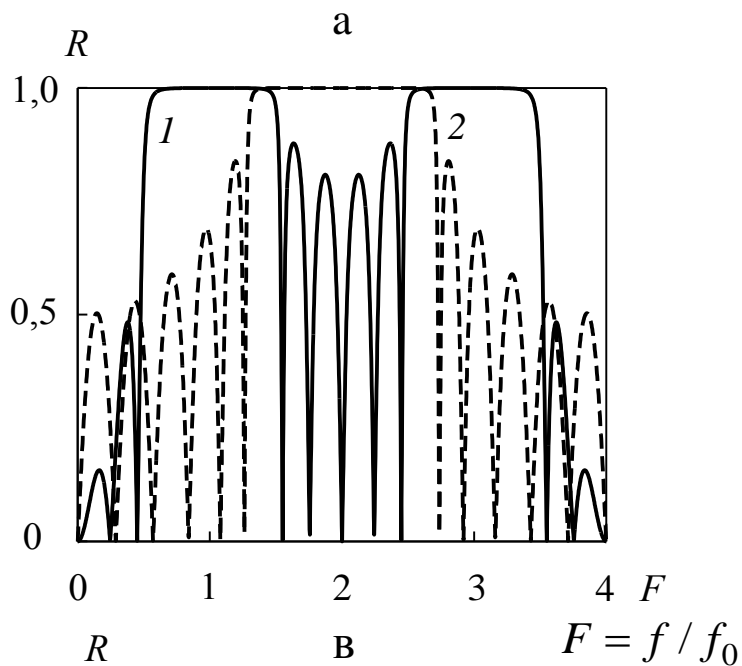


$$\boxed{|\eta \cos k_b b - \sin k_b b| > 1} \quad (3)$$

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

$$\alpha_l = 2\alpha_h = b, \quad \alpha_{l,h} = b \quad \alpha_h = b$$

### 3.16 Конструктивні варіанти і характеристики двофазних КС



**а**  $N = 11, Z_h = Z = 3, \varphi_0 = \pi / 4$

**б**  $N = 9, Z = 3, \varphi_0 = \pi / 3$

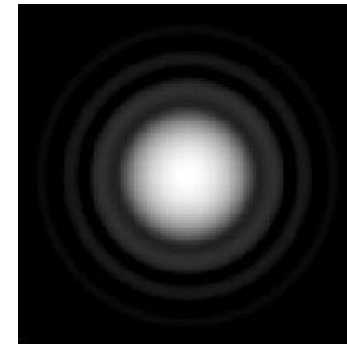
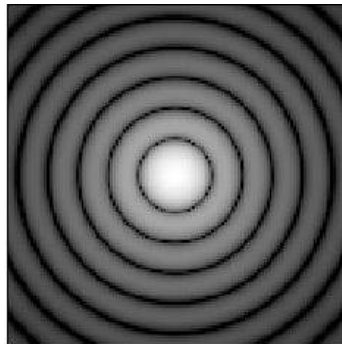
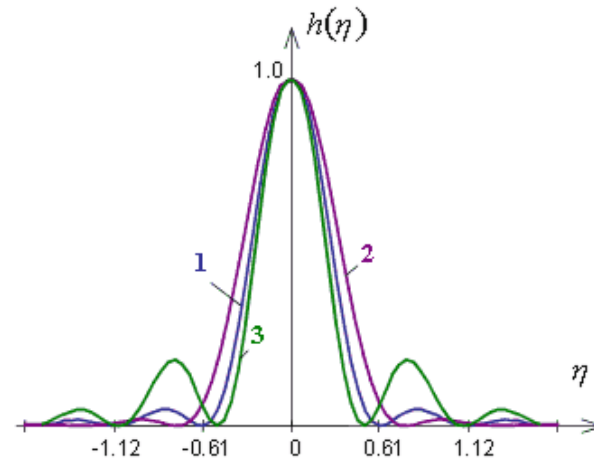
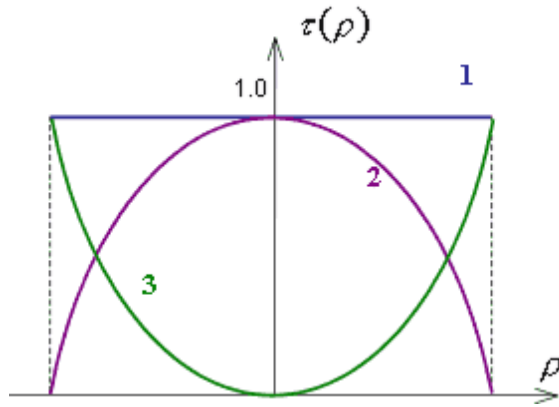
**в**  $N = 15, Z_h = 4, Z_l = 2, \varphi_0 = \pi / 4$

# Розділ 4. Формування характеристик мікро- і наноструктур. Аподизація

## 4.1 Аподизація в оптиці

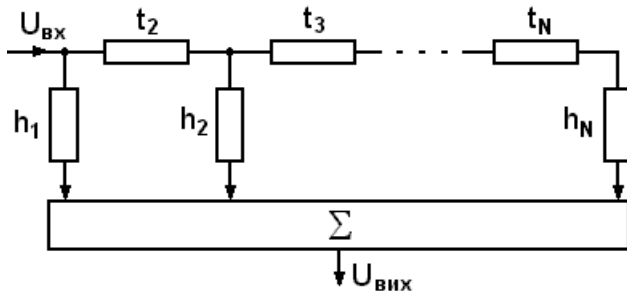
Термін «аподизація» використовується в математиці та різних технічних областях і означає вибір необхідної функції, що характеризує пропускання або фільтрацію. Ця процедура фактично є фундаментальною при розробці різноманітних хвильових структур як відомих, так і новітніх. При синтезі нових структур використовують розроблені методи аподизації з урахуванням конкретної її конструктивної реалізації. Важливий аспект реалізації — необхідність врахування конструктивно-технологічних обмежень аподизації при конкретному її застосуванні.

В оптиці аподизація відповідає вибору функції пропускання для подавлення вторинних дифракційних максимумів.



## 4.2 Модель трансверсального фільтра для багатоелементних структур

Загальна модель багатоелементних структур з однократним проходженням хвиль-сигналів — модель трансверсального фільтра (ТФ). Вхідний сигнал розглядається як хвиля, що поширюється вздовж лінії затримки з відводами без втрат. Відводи забезпечують вибірку сигналу. Модель ТФ відповідає інтерференції парціальних сигналів, кожний з яких у загальному випадку характеризується своєю амплітудою і фазою.



$U_{\text{вх, вих}}$  — відповідно вхідний та вихідний сигнали ТФ;  
 $t_2, \dots, t_N$  — елементи затримки;  $h_1, \dots, h_N$  — вагові коефіцієнти;  $N$  — кількість відводів ТФ;  $\Sigma$  — суматор.

Частотна характеристика ТФ та часова або просторова функція, що відповідає його структурі, зв'язані перетворенням Фур'є:

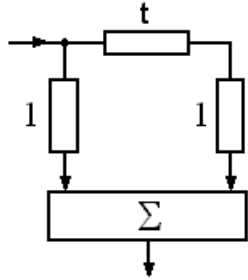
$$H(f) = \sum_1^N h_n \exp(i\varphi_n);$$

$$h(t) = \sum_1^N h_n \delta(t - T_n),$$

де  $\varphi_n = \omega T_n$ ;  $T_n = \sum_2^n t_n$ ,  $T_1 = 0$ ,  $h(t)$  — імпульсна характеристика (ІХ) ТФ;  $\delta(t)$  —  $\delta$ -функція.

Структура ТФ відповідає його ІХ, а значення вагових коефіцієнтів прямо пропорційні значенням дискретної ІХ. Синтез ТФ зводиться до знаходження необхідної ІХ оберненим перетворенням Фур'є від частотної характеристики.

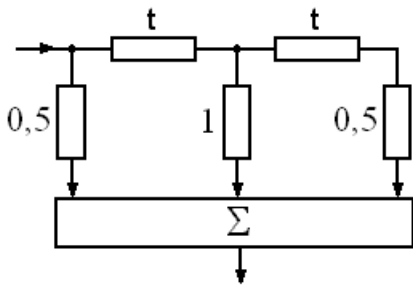
## 4.3 Прості трансверсальні фільтри



$$1 + e^{i\omega t} = e^{i\omega t/2} (e^{-i\omega t/2} + e^{i\omega t/2}) = e^{i\omega t/2} 2 \cos \frac{\omega t}{2} = 2 \cos \frac{\pi f}{f_0} e^{i\omega t/2}$$

$$t = \frac{1}{f_0} \quad F = \frac{f}{f_0}$$

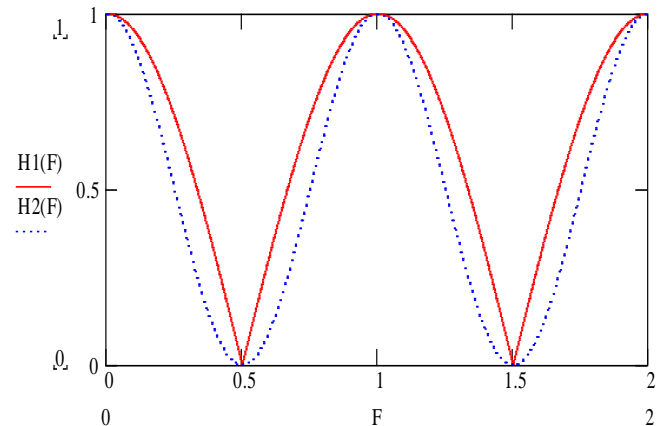
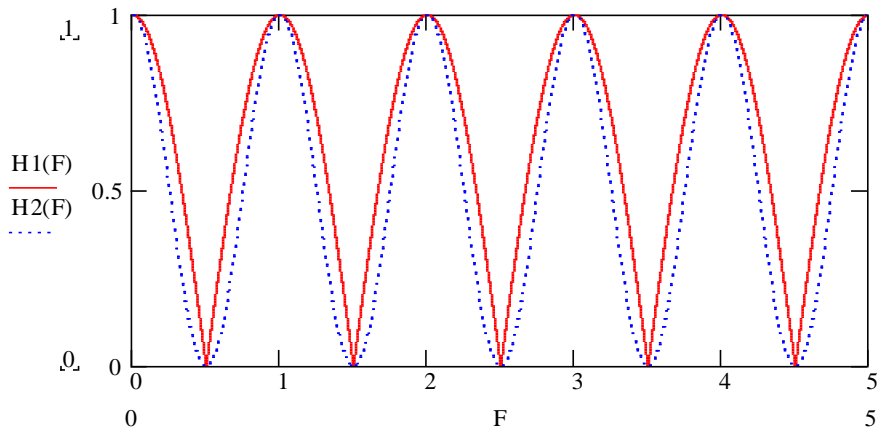
$|H_1(F)| = |\cos \pi F|$



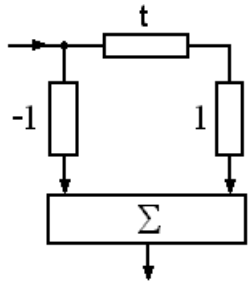
$$0,5 + e^{i\omega t} + 0,5e^{2i\omega t} = e^{i\omega t} (0,5e^{-i\omega t} + 1 + 0,5e^{i\omega t}) =$$

$$e^{i\omega t} (1 + \cos \omega t) = e^{i\omega t} 2 \cos^2 \frac{\omega t}{2} = 2 \cos^2 \frac{\pi f}{f_0} e^{i\omega t}$$

$|H_2(F)| = \cos^2 \pi F$

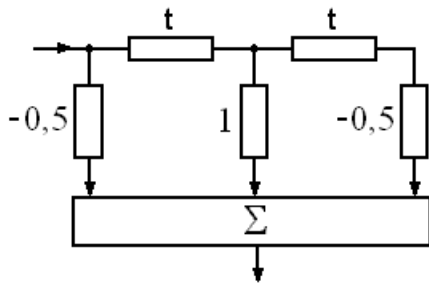


# Прості трансверсальні фільтри (продовження)

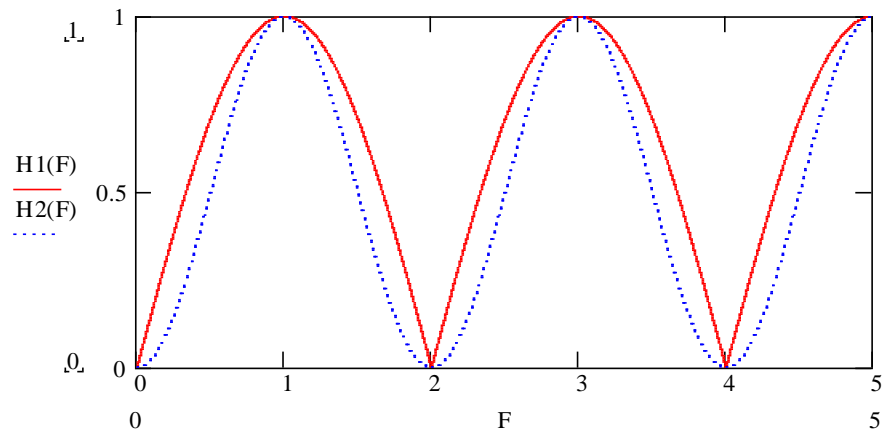


$$t = \frac{1}{2f_0}$$

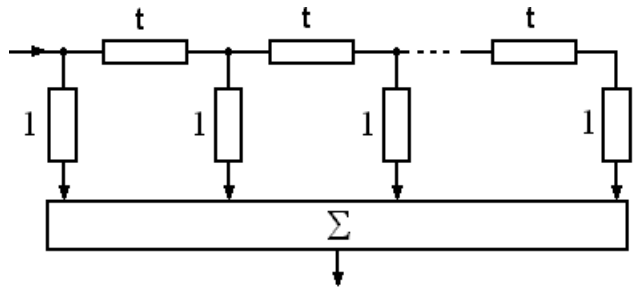
$$|H_1(F)| = \left| \sin \frac{\pi F}{2} \right|$$



$$|H_2(F)| = \sin^2 \frac{\pi F}{2}$$

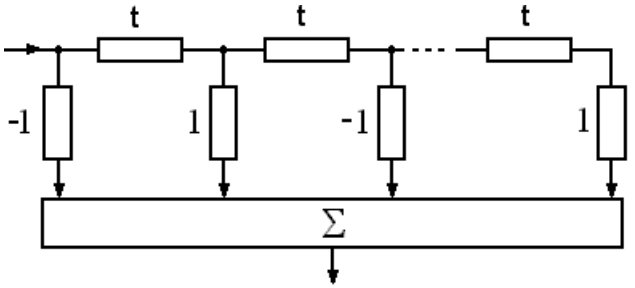
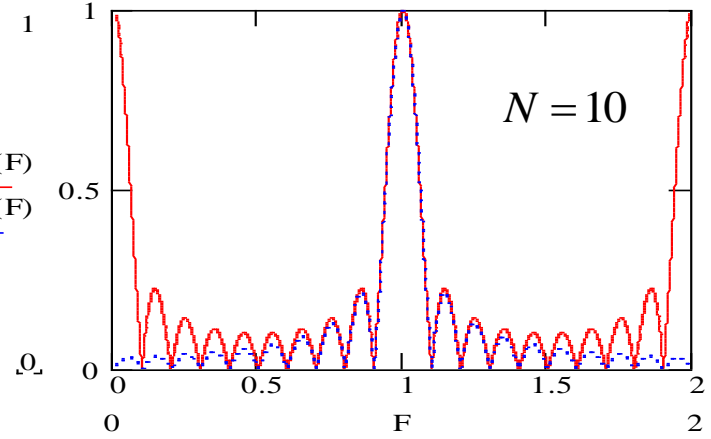


# 4.4 Неаподизований трансверсальний фільтр

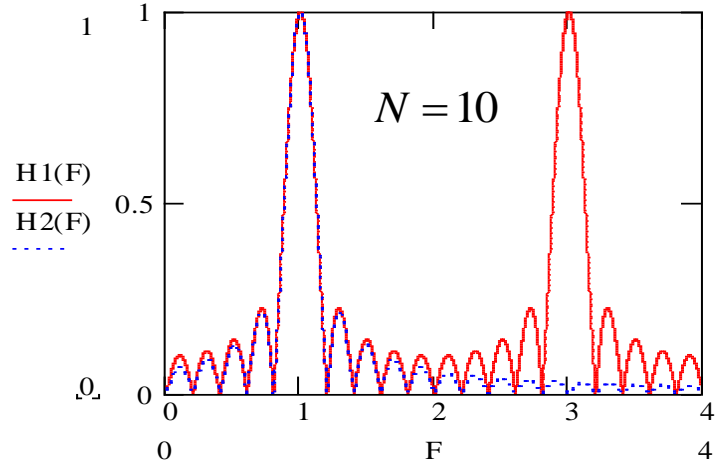


$$t = \frac{1}{f_0} \quad H(f) = \frac{\sin Nx}{N \sin x} \approx \frac{\sin Nx}{Nx} = \text{sinc } Y$$

$$x = \pi F' \quad F' = \frac{f - f_0}{f_0} \quad Y = Nx$$



$$t = \frac{1}{2f_0} \quad F'' = \frac{f - f_0}{2f_0}$$

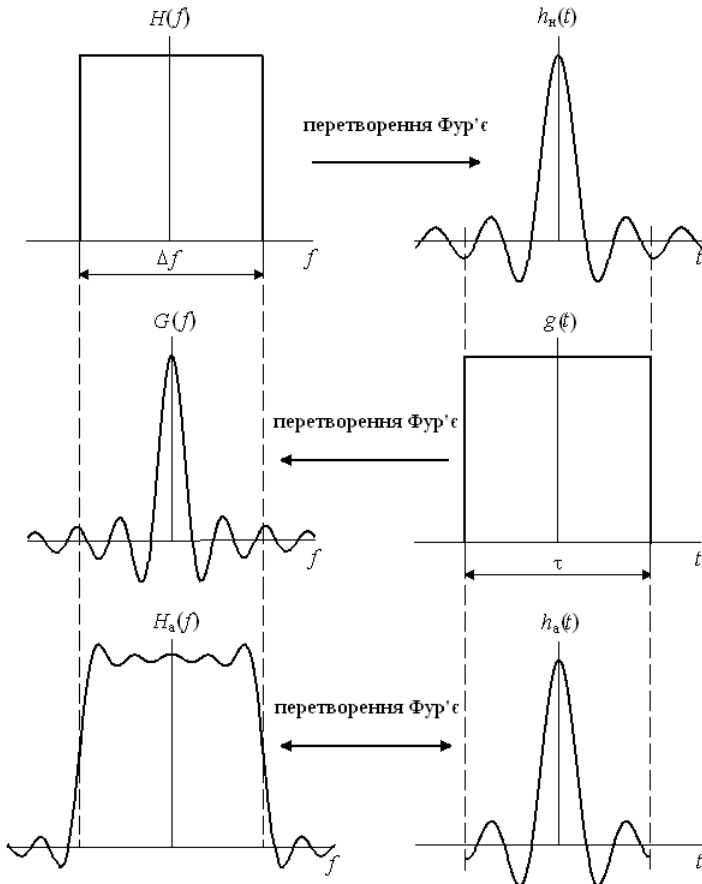


## 4.5 Принципи аподизації

$$H(f) = \sum_1^N h_n \exp(i\varphi_n),$$

$$h(t) = \sum_1^N h_n \delta(t - T_n),$$

$$h_H(t) = \text{sinc} \pi \Delta f t$$

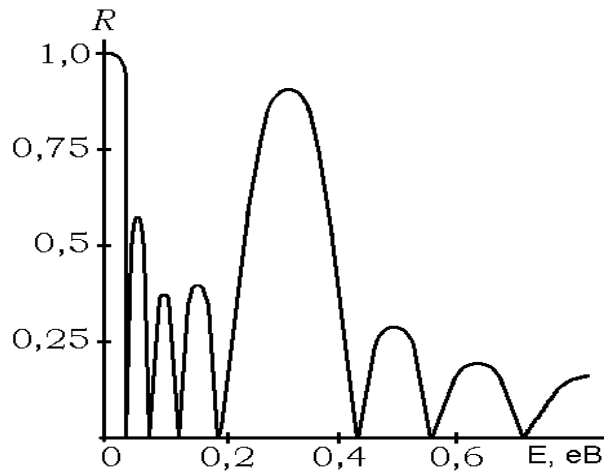
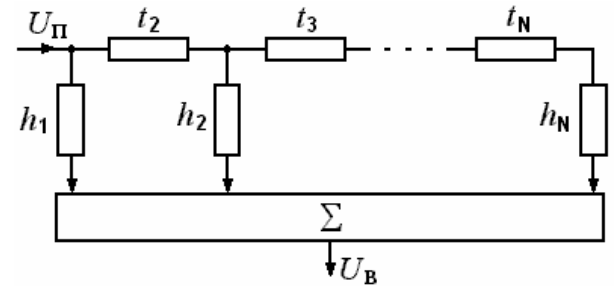
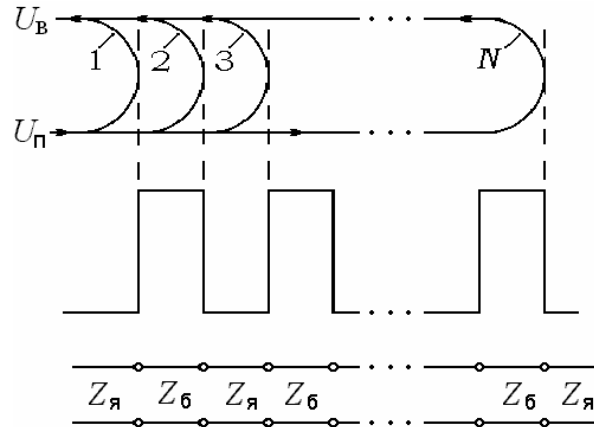




## 4.6 Модель трансверсального фільтра для багатобар'єрних структур

$$|R(f)| \ll 1,$$

$$|R(E)| \ll 1$$



$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

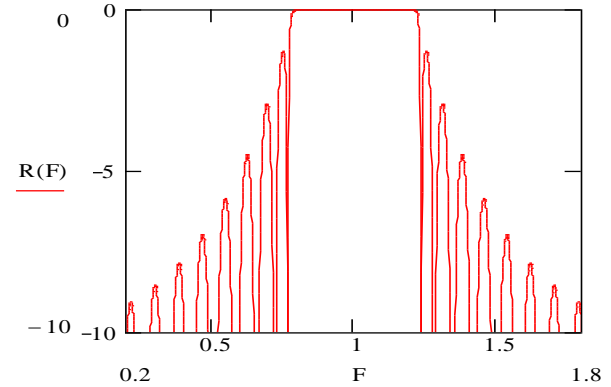
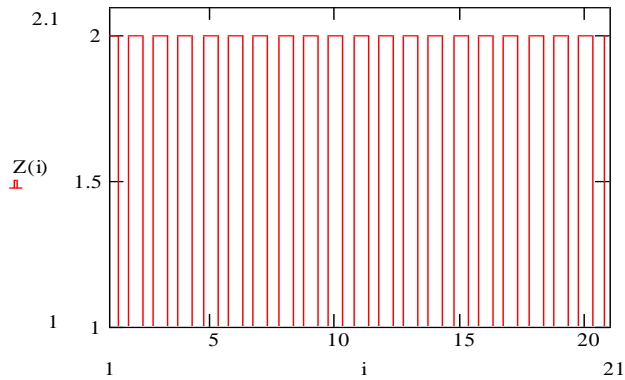
$$N = 5, \quad a = 6t, \quad b = 10t, \quad t = 2,82665 \text{ \AA}$$

$t$  – товщина моношару GaAs у напрямку [100]

$$V = 0,1\text{eV}$$

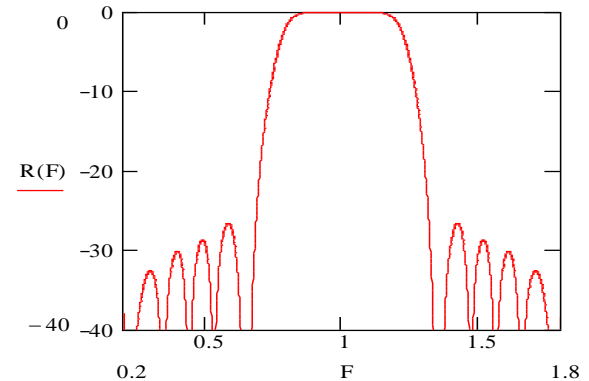
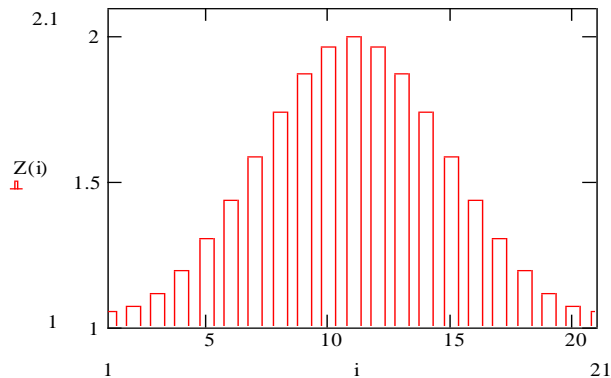
## 4.7 Амплітудна аподизація

$$H(f) = \sum_1^N h_n \exp(i\varphi_n); \quad H(F) = 1 + 2 \sum_{m=1}^M (-1)^m h_m \cos m\pi F \quad F = \frac{f}{f_0}$$



$$h_m = 0,54 + 0,46 \cos \frac{m\pi}{M} \quad r_0 = \frac{Z_0 - 1}{Z_0 + 1} \quad r_m = r_0 h_m \quad r_m = \frac{Z_m - 1}{Z_m + 1} \quad \Rightarrow \quad Z_m = \frac{1 + r_m}{1 - r_m}$$

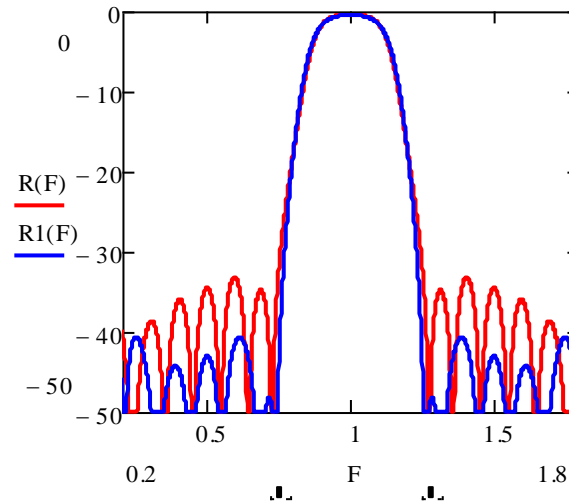
$Z_0 = 2, \quad N = 21$



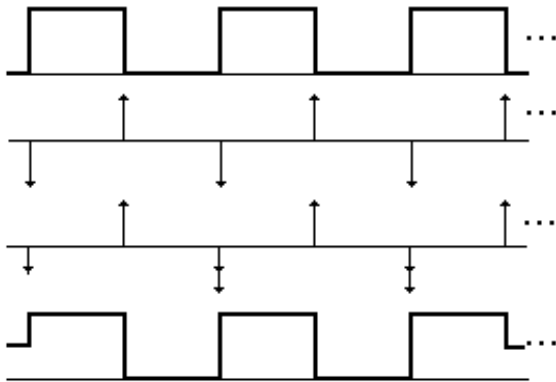
## 4.8 Оптимізація вагової функції

$$h_m = \alpha + (1-\alpha) \cos \frac{\pi(M+1-2m)}{M-1}$$

$$\alpha = 0,515$$



## 4.9 Крайова аподизація



$$r_1 = -re^{i\varphi} + re^{-i\varphi} = -2irs\sin\varphi$$

$$\varphi = k \frac{\lambda_0}{4} = \frac{2\pi}{\lambda} \frac{\lambda_0}{4} = \frac{\pi f}{v} \frac{v}{2f_0} = \frac{\pi f}{2f_0} = \frac{\pi F}{2}$$

$$r_1 = -2irs\sin \frac{\pi F}{2} \quad h(F) = \left| \sin \frac{\pi F}{2} \right|$$

Функція  $h(F)$  визначає характер убуття пульсацій коефіцієнтів відбиття  $R(F)$  і проходження  $T(F)$  кристалоподібних структур у заборонених зонах. Степінь убуття бокових пелюсток залежності  $R(F)$  визначається степінню  $n$  характеристики  $h(F)$ .

$$r_2 = -0,5re^{2i\varphi} + r - 0,5re^{-2i\varphi} = r(1 - \cos 2\varphi) = 2r\sin^2\varphi$$

$$s_1 = \{-r, r\}, n=1$$

$$r_2 = r_1e^{i\varphi} - r_1e^{-i\varphi} = 2ir_1\sin\varphi = 2r\sin^2\varphi$$

$$s_2 = \{-0,5r, r, -0,5r\}, n=2$$

-0,5	0,5		
	0,5	-0,5	
	0,5	-0,5	
-0,5	1	-0,5	
-0,5	1	-1	...

$$\begin{array}{cccc} -0,25 & 0,5 & -0,25 & \\ & 0,25 & -0,5 & 0,25 \\ \hline -0,25 & 0,75 & -0,75 & 0,25 \end{array}$$

$$s_3 = \{-0,25r, 0,75r, -0,75r, 0,25r\}, n=3$$

$$\begin{array}{ccccccc} -0,25 & 0,5 & -0,25 & & & & \\ & 0,25 & -0,5 & 0,25 & & & \\ & & -0,25 & 0,5 & -0,25 & & \\ & & & 0,25 & -0,5 & 0,25 & \\ \hline -0,25 & 0,75 & -1 & 1 & \dots & & \end{array}$$

$$n=2 \quad 0,5$$

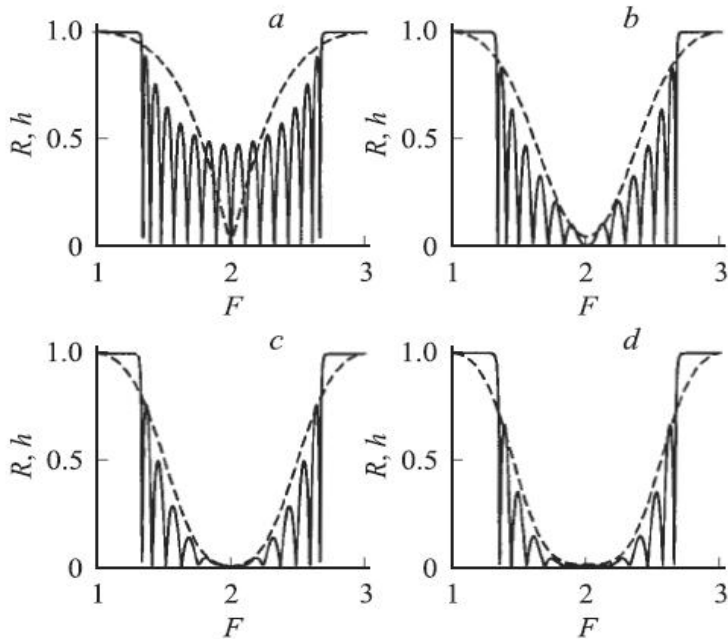
$$n=3 \quad 0,25 \quad 0,75$$

$$n=4 \quad 0,125 \quad 0,5 \quad 0,875$$

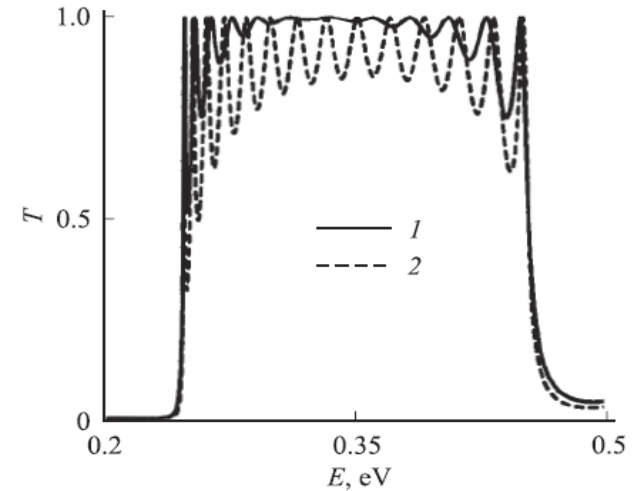
$$T = \sqrt{1 - R^2}$$

$$R \ll 1$$

$$T \approx 1 - R^2 / 2$$



$$N = 15 \quad Z = 2,8$$



$$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$$

$$N_0 = 15, \quad a = 10t, \quad b = 15t, \quad t = 2,82665 \text{ \AA}$$

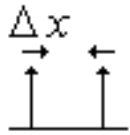
$t$  – товщина моношару GaAs у напрямку [100]

$V = 0,1\text{eV}$ , варіант аподизації –  $s_4$

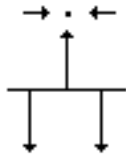
## 4.10 Фазова аподизація

Фазове формування вагового коефіцієнта виконується зміщенням локальних відбивачів з еквідистантних положень.

- 1) Для високовибірних характеристик необхідний широкий діапазон вагових коефіцієнтів.
- 2) При фазовому формуванні вагові коефіцієнти частотно-залежні.
- 3) Розміри елемента кристалоподібної структури мають мінімально допустимі конструктивно-технологічні обмеження.



а



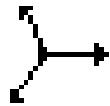
б

варіант а: номінальна відстань  $b = \lambda_0 / 2$ , мінімальна відстань  $b = \lambda_0 / 4$ ,

$$\Delta x_{\text{макс}} = \lambda_0 / 8$$

варіант б: номінальна відстань  $b = \lambda_0 / 4$ , мінімальна відстань  $b = \lambda_0 / 12$ ,

$$\Delta x_{\text{макс}} = \lambda_0 / 6$$

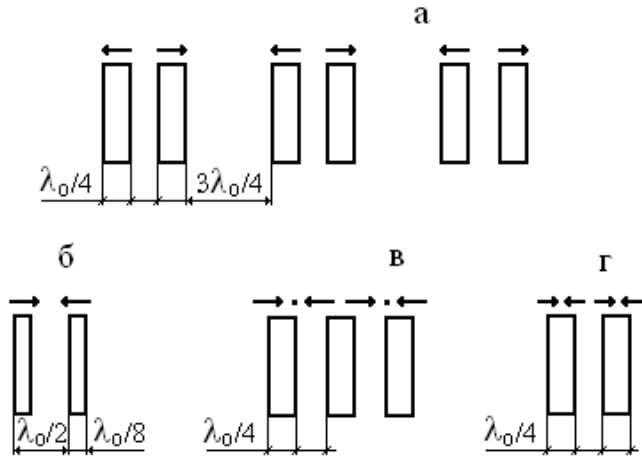


$$re^{i2k\Delta x} + re^{-i2k\Delta x} = 2r \cos 2k\Delta x = 2r \cos \frac{4\pi f \Delta x}{v} \quad h_n = \cos \frac{4\pi \Delta x}{\lambda_0}, \quad \Delta x = \frac{\lambda_0}{4\pi} \operatorname{arccosh} h_n$$

$$-re^{i2k(\lambda_0/4 - \Delta x)} + r - re^{-i2k(\lambda_0/4 - \Delta x)} = r - 2r \cos [2k(\lambda_0/4 - \Delta x)]$$

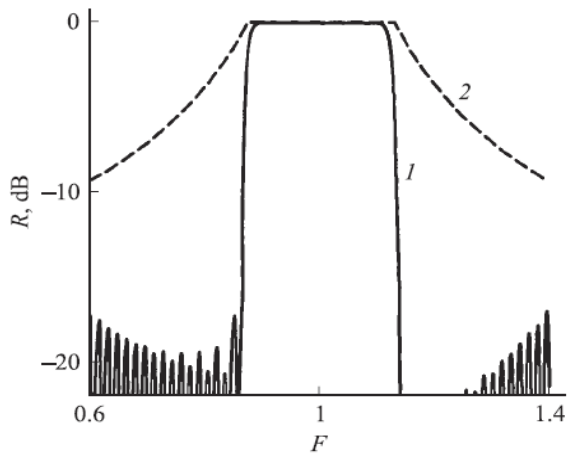
$$h_n = \frac{1}{3} \left\{ 1 - 2 \cos \left[ \frac{4\pi}{\lambda_0} \left( \frac{\lambda_0}{4} - \Delta x \right) \right] \right\}, \quad \Delta x = \frac{\lambda_0}{4\pi} \arccos \frac{3h_n - 1}{2}$$

# Фазова аподизація (продовження)



максимальні зміщення  $\Delta x_{\text{макс}}$   
 $a, б \text{ і } г - \lambda_0/8, \quad в - \lambda_0/6$

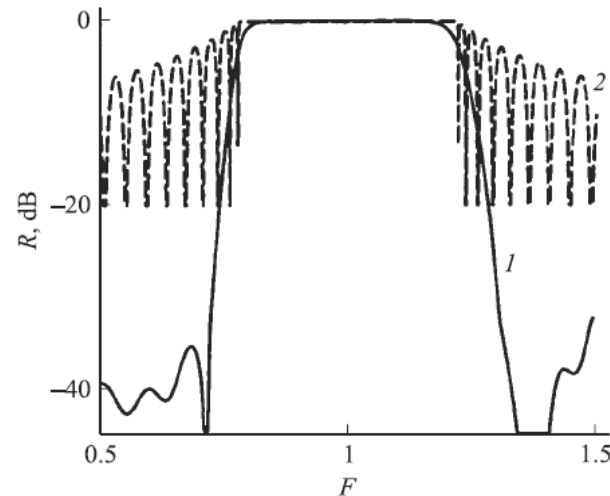
мінімальні розміри елементів  
 $\lambda_0/4, \lambda_0/8, \lambda_0/12 \text{ і } 0$



$$f_m = \exp\{-[12(m - 0.5)/(N - 2)]^3\},$$

$$m = 1, 2, \dots, (N + 1)/6$$

$$N = 119, Z = 1.5, \text{ варіант } c$$



$$f_m = \exp\{-[4(m - 0.5)/N]^{2.4}\}, \quad m = 1, 2, \dots, (N + 1)/2$$

$$N = 39, Z = 2, \text{ варіант } d$$

# ЛІТЕРАТУРА

**Література в електронному вигляді розміщена на сайті кафедри за адресою:  
[ftp://10.17.47.3/pub/study/Моделювання мікро- та наноструктур](ftp://10.17.47.3/pub/study/Моделювання_мікро-та_наноструктур)**

1. Markos P. Wave propagation from electrons to photonic crystals and left-handed materials / P. Markos, C. M. Soukoulis. — Princeton and Oxford: Princeton University Press, 2008. — 352 p.

2. Basdevant J.-L. Lectures on quantum mechanics / J.-L. Basdevant. — N. Y.: Springer, 2007. — 308 p.

3. Нелин Е. А. Импедансная модель для «барьерных» задач квантовой механики / Е. А. Нелин // УФН. — 2007. — Т. 177, №3. — С. 307 – 313.

4. Korvink J., Haber O. MEMS a practical guide to design, analysis, and applications / J. Korvink, O. Haber. — N. Y.: William Andrew, Inc., Springer, 2006. — 965 p.

5. Власов А. И. Основы моделирования микро- и наносистем : учеб. пособие / А. И. Власов, А. В. Назаров. — М. : Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана. — 2011. — 144 с.

6. Усанов Д. А. Компьютерное моделирование наноструктур: Учеб. пособие для студентов факультета нано- и биомедицинских технологий / Д. А. Усанов, Ал. В. Скрипаль, Ан. В. Скрипаль, А. В. Абрамов. — Саратов, 2013. — 100 с.: ил. Электронное издание