#### УДК 621.382 МОДЕЛЮВАННЯ ТРИВИМІРНИХ КРИСТАЛОПОДІБНИХ СТРУКТУР

## Бойко В. О., Березянський Б. М., Нелін Є. А.

Розглянуто особливості конструкцій та характеристик тривимірних кристалоподібних структур. Виконано аналіз таких структур, який ілюструє відповідність експериментальних та теоретичних результатів.

# Вступ

Останнім часом інтенсивно розвиваються дослідження штучних періодичних структур, аналогічних природним кристалам. Ці структури складають основу нових інтегральних пристроїв обробки сигналів, перш за все наноелектронних. З таких кристалоподібних структур (КС) значного розвитку набули фотонні кристали (ФК) для електромагнітних хвиль. В кристалах і КС за рахунок конструктивної інтерференції відбитих хвиль формуються частотні смуги, в межах яких хвилі розповсюджуватися не можуть (зони заборонених енергій для електронів, фотонні заборонені зони). Така частотна фільтрація дозволяє керувати проходженням хвиль в КС, що забезпечує значні можливості в обробці сигналів.

# Постановка задачі

КС характеризуються значною конструктивною складністю. Для їх аналізу необхідно використовувати методи тривимірного електромагнітного моделювання. Програмний пакет *CST Microwave Studio (MWS)* компанії *COMPUTER SIMULATION TECHNOLOGY* одна з найрозвиненіших систем тривимірного електромагнітного моделювання [1]. В роботі розглянуто особливості використання цього пакету при моделюванні КС.

Особливості конструкцій та характеристик кристалоподібних структур ФК для оптичного діапазону є просторовими гратами з періодом, що має порядок довжини хвилі світла, та з просторово модульованим показником заломлення. Розрізняють два основні типи тривимірних ФК (рис. 1). В першому випадку (рис. 1а) у вузлах грат ФК розміщені однакові діелектричні частинки, наприклад, кулі. Протилежне рішення — періодично розташовані отвори в діелектрику. В другому випадку (рис. 1б) вузли грат в діелектрику пов'язані один з одним стрижнями з іншою діелектричною проникністю. Крім значення постійних грат, характеристики ФК визначаються глибиною модуляції показника заломлення — оптичним контрастом, що дорівнює відношенню показників заломлення елементів грат і середовища, в якому вони розміщені. ФК можуть бути одно-, двох- і тривимірними. До одновимірних ФК відносять тонкоплівкові оптичні фільтри, планарні відбивні грати інтегральних пристроїв оптоелектроніки.



Рис. 1. Основні типи тривимірних ΦК (ε<sub>1</sub>, ε<sub>2</sub> — діелектричні проникності середовища і частинок або стрижнів відповідно): а - у вузлах грат розміщені діелектричні частинки; б - вузли грат пов'язані стрижнями;

Принципові особливості ФК та інших КС виявляються в одновимірному варіанті. Основна характеристика КС, що визначає всі властивості цієї структури — зонна діаграма, яка відповідає дисперсійній характеристиці  $\omega(k)$ . Тут  $\omega$  — циклічна частота; k — хвильове число. Вплив кристалічних грат на електрон характеризує його ефективна маса. Відповідно вплив ФК на електромагнітну хвилю характеризує ефективний показник заломлення. В залежності від співвідношення довжини хвилі до періоду КС ці параметри змінюються в широких межах і можуть бути від'ємними. Таким чином, КС штучно змінюють властивості частинок-хвиль, що забезпечує формування різноманітних, часто незвичайних, характеристик.



Рис. 2. ФК для мікрохвильового діапазону: а - металевий; б - з діелектричними стрижнями; в - на основі мікросмужкової лінії

ФК для мікрохвильового діапазону зображені на рис. 2. На рис. 2а показаний металевий ФК, що має просту тетрагональну структуру. Кристалічні грати ФК утворені металевими брусками суміжних шарів. ФК, показаний на рис. 2б, утворений діелектричними стрижнями, розташованими між провідними площинами. На рис. 2в показаний ФК на основі несиметричної мікросмужкової лінії передачі з періодично розташованими круглими отворами в діелектрику і заземленій металізованій поверхні.

#### Моделювання кристалоподібних структур

Розглянемо особливості тривимірного моделювання на основі програмного пакету *CST MWS* 5.0. В пакеті використано метод кінцевих інтегралів - достатньо загальний підхід, в якому рівняння Максвела розглядаються на просторовій сітці. В результаті формується система диференціальних рівнянь. Метод кінцевих інтегралів у часовій області найбільш ефективний, якщо сітка прямокутна. Для покращення моделювання об'ємних структур використовують такі методи. 1. Метод апроксимації для ідеальних граничних умов — дає можливість розбити кубічну комірку сітки на дві частини так, щоб границя розбиття проходила на межі двох середовищ. Це забезпечує оптимальне повторення об'ємних структур, що моделюються. 2. Метод тонких стінок — забезпечує покращене моделювання металічних корпусів довільної форми і нахилених екранів. 3. Метод підсіток — дає можливість для ліній розбиття розпочинатися і закінчуватися у будь-якій точці об'єму, що аналізується. Завдяки цьому поблизу та на межах елементів довільної форми можна отримати шари з подрібненою сіткою розбиття.

Для моделювання резонансних структур необхідна висока розділова здатність по частоті, що при частотному аналізі потребує значного часу. Аналіз у часовій області не має такого недоліку, в результаті чого значно зменшується імовірність втрати гострих резонансних екстремумів. При створенні моделі необхідно враховувати: 1. Для створення форм елементів конструкції при моделюванні об'єктів, що мають певну періодичність у просторі (наприклад, КС), корисною є можливість трансформування, в тому числі багаторазового, уже створених форм; 2. При виборі портів слід враховувати, що хвилеводні порти використовуються для моделювання нескінченно довгої лінії передачі, в тому числі і мікросмужкової лінії. Вони розташовуються на межах області розрахунку. Саме тут визначається хвильовий опір структури і властивості порту автоматично обираються таким чином, щоб забезпечити мінімальний коефіцієнт відбиття у місці з'єднання; З. Необхідно визначити властивості середовища, що знаходиться між моделлю та геометричними границями обчислень - ідеальний провідник або звичайний матеріал без втрат, що характеризується відповідними значеннями магнітної та діелектричної проникностей. Можливе введення додаткового простору між границями, що оточують модель, і границями обчислень. При моделюванні КС на основі мікросмужкових ліній це дуже важливо для врахування не лише полів хвиль, що розповсюджуються у самій лінії, але й тих, що присутні у середовищі біля неї.

# Мікроконденсатор у мікросмужковій лінії

Мікроконденсатори необхідні для мікрохвильових схем різного призначення. Їх використовують в конструкціях з безпосереднім монтажем на поверхню. Вертикальне розміщення мікроконденсатора мінімізує площу, яку він займає. Розглянемо моделювання такого мікроконденсатора в середовищі *CST MWS*.



Рис. 3. Мікроконденсатор в мікросмужковій лінії (а): 1—мікроконденсатор, 2—мікросмужка, 3—розрив мікросмужки; та частотні залежності коефіцієнта проходження структури (б): 1—експериментальна крива, 2—теоретична крива

Мікроконденсатор зображено на рис. За. Геометричні розміри мікроконденсатора, властивості матеріалів, а також розміри і властивості підкладки відповідають [2]. На рис. Зб представлені залежності коефіцієнта проходження. Експериментальна залежність взята з [2], теоретична отримана моделюванням в середовищі CST MWS. Залежності мають добру відповідність, за виключенням області режекції. Відмінності в цій області обумовлені недостатньою розділовою здатністю по частоті для експериментальної залежності. При створенні і аналізі моделі зроблено такі висновки стосовно параметрів моделювання. 1. Використання методів апроксимації для ідеальних граничних умов, підсіток і тонких стінок дає можливість значно скоротити час розрахунку і збільшити точність моделювання. 2. При виборі оптимального кроку сітки *h* необхідно враховувати, що при зменшенні розмірів комірки спочатку спостерігається зростання точності обчислень. Починаючи з певного значення відношення  $h/\lambda$  (де  $\lambda$  — довжина хвилі на максимальній частоті), при його зменшенні результати майже не змінюються. При подальшому зменшенні відношення  $h/\lambda$  спостерігається зниження точності обчислень, що, можливо, пов'язано з кінцевою точністю машинних розрахунків, крім того, помітно зростає час розрахунку. З. Необхідно забезпечити достатню розділову здатність по частоті, принаймні чотири точки в області екстремуму. 4. Границі обчислення електромагнітних полів у просторі навколо моделі слід розширювати доти, доки подальше їх розширення не впливатиме суттєво на результати моделювання.

#### Фотонний кристал на основі мікросмужкової лінії

З урахуванням наведеного розроблена модель ФК на основі мікросмужкової лінії, що відповідає рис. 2в. Дані про геометричні розміри і властивості матеріалів взято з [3]. Додатково прийнято: питома провідність металу —5,65·10<sup>7</sup> См/м, тангенс кута діелектричних втрат—10<sup>-3</sup> на частоті 10 ГГц. На рис. 4 наведені частотні залежності коефіцієнта відбиття. Моделювання

виконано за допомогою пакету *CST MWS*. Розбіжності з експериментом [3]: експериментальні значення ширини смуги відбиття по перших нулях—4 ГГц, мінімального рівня коефіцієнта проходження—-39 дБ, відповідні теоретичні значення—3,4 ГГц і -23 дБ. Смуга розширюється до 3,6 ГГц, при зміні втрат у діелектрику, але при цьому вся смуга зміщується на 0,6 ГГц уверх по частоті. Суттєвого зменшення рівня режекції не вдалося досягти зміною будь-яких параметрів моделі. З наведеного видно:

- програмний пакет *CST MWS* 5.0 можна використовувати для моделювання і розробки пристроїв на основі ФК;



- при розбитті простору моделі на комірки вибір їх лінійних розмірів завдовжки  $\lambda/10 \in$  оптимальним, або близьким до нього, лише за умови, що визначальні геометричні розміри елементів принаймні на порядок більші.

## Висновки

Програмний пакет *CST MWS* забезпечує проектування складних тривимірних ФК. При цьому для отримання заданих характеристик пристроїв необхідно виконати аподизацію — зміну параметрів елементів структури.

#### Література

- 1. Ощутить вселенную трехмерной//Инженерная микроэлектроника. 2002. № 2. С. 41-45.
- 2. Sokol V., Hoffmann K. Analysis of 3D vertical stub on microstrip line // www.rfprop.com/mikrovlny/data/Analisis of 3D Vertical Stub on Microstrip Line.pdf
- 3. Rodriguez-Pereyra V., Elsherbeni A., Smith C. Photonic bandgap structures for minimizing the coupling between microstrip lines//IEEE AP-S International Symposium and USNC/URSI National Radio Science Meeting. Orlando. 1999. P. 125—128.

Бойко В.О., Березянский Б.М., Нелин Е. А. **Моделирование трехмерных кристаллопо**добных структур Рассмотрены особенности конструкций и характеристик трехмерных кристаллоподобных структур. Осуществлен анализ таких структур, structures are shown. The analysis of the который иллюстрирует соответствие экспериментальных и теоретических результатов. Војко V.O.,Berezjanskyi B.M.,Nelin E.A. **Modeling three-dimensional crystal-like** structures are shown. The analysis of the mental and theoretical results.