

## II - VI 族半导体材料散射特性的 高次有限元分析\*

徐善驾 盛新庆

(中国科学技术大学无线电电子学系, 安徽, 合肥, 230026)

P. Greiner C. R. Becker R. Geick

(Physikalisches Institut der Universität, Am Hubland, 8700 Würzburg Germany)

**摘要:** 用有限元和场匹配相结合的方法分析了 II - VI 族半导体材料的散射特性. 该方法能一次求出纵向模匹配所需要的所有本征模函数, 并避开了多模网络方法中求解复超越方程的困难, 简化了求解过程. 本方法和多模网络方法计算的结果与多个样品的测试值进行了比较, 彼此吻合得很好, 表明本文方法不仅通用精确, 而且具有很高的解题效率.

**关键词:** II - VI 族半导体, 散射特性, 高次有限元, 模匹配法.

### 引言

近年来, II - VI 族半导体越来越引起了人们的关注, 这主要是因为这类半导体具有很宽的频率适用范围, 从红外到紫光都有重要应用. 但是, 由于 II - VI 族半导体很难实现良好的欧姆接触, 阻碍了对该类半导体特性参数的测量和确定. 为此, 我们曾提出一种无接触微波测量方法<sup>[1]</sup>. 这种方法的基本思想是将半导体特性参数的测定归结为对半导体样品散射特性的测量, 其关键是要在理论上确定半导体外延层特性参数和样品散射参数之间的关系, 而这是一个比较复杂的电磁场边值问题. 文献 [1] 用多模网络理论与严格场匹配相结合的方法解决了这个问题, 这个方法是将波导本征值问题的分析归结为对一个复超越方程的求解. 但是, 要精确依次求得该复超越方程的前二十多个根, 而且不漏根很费时间. 尤其是对不知道方程复根分布规律又没有求根经验的人是十分困难的.

本文用有限元和场匹配相结合的方法分析了这个问题. 该方法首先在横截面上用有限元方法求解半导体样品部分填充波导的本征值问题, 然后在纵向不连续处进行严格场匹配. 由于本文的方法避开了求解复超越方程的困难, 而且能一次求出纵向模匹配所需要的所

本文 1992 年 12 月 9 日收到, 修改稿 1993 年 3 月 11 日收到.

\* 中国国家自然科学基金会 (NSFC) 和德国研究联合会 (DFG) 联合资助项目.

有本征模的本征值和本征函数，大大简化了求解过程，并提高了解题效率。

### 1 分析方法

图 1 是本文研究的半导体不连续性结构示意图。其中外延层和基片的介电常数 ( $\epsilon_p$  和  $\epsilon_s$ ) 都是复数。各样品外延层及基片厚度  $d_p, d_s$  及  $\epsilon_p$  和  $\epsilon_s$  的数值见表 1。由于入射波是  $H_{10}$  模，它的场在  $y$  方向上没有变化；同时不连续性结构在这个方向上是均匀的，因此半导体样品不连续性在波导中只能激发起  $H_{m0}$  模。我们分两步求解这个散射问题。首先在横截面上分别求解空波导和样品填充波导的本征值问题，然后在纵向上计算半导体样品的散射特性。分析的关键在于求解样品填充波导的本征值问题。根据波导中只激发起  $H_{m0}$  模的特点，文中给出了与  $E_y$  所满足的复量常微分方程相对应的泛函表达式，然后用有限元法求解该复本征值问题。

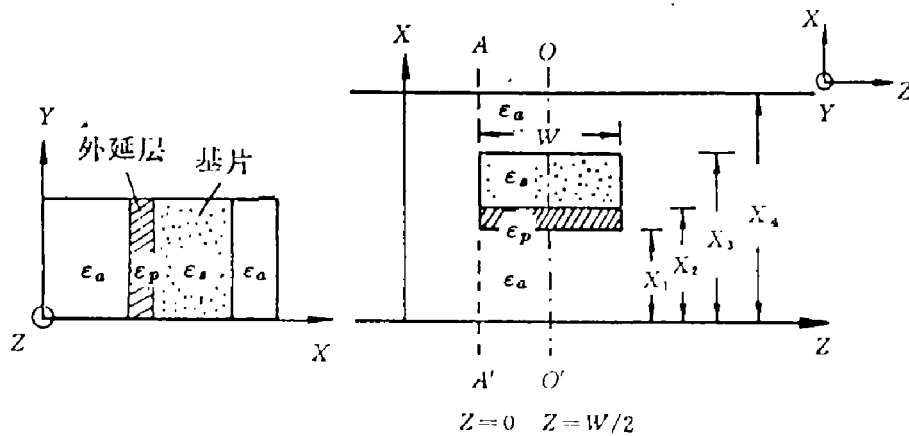


图 1 半导体样品构成的不连续性结构示意图

Fig. 1 Scheme of a discontinuity structure formed by semiconductor sample

表 1 不同半导体样品的参数

Table 1 Parameters of different semiconductor samples

样品	$\epsilon_s$	$\epsilon_p$	$d_s$ (mm)	$d_p$ ( $\mu\text{m}$ )
CMT78 (HgCdTe)	11.-j0.8	-41.-j1816	1.0	2.0
CMT76(HgTe)	11.-j0.45	-198.-j7779	1.0	1.2
Q154 (HgCdTe)	11.-j0.5	-358.-j13538	1.0	2.2
Q114 (HgCdTe)	11.-j0.5	-2861.-j103052	1.0	5.2
Q107 (HgCdTe)	11.-j11	-6254.-j223684	1.0	2.9
Q105 (HgCdTe)	11.-j0.5	-8285.-j296801	1.0	1.6

矩形波导中  $H_{m0}$  模的本征函数和本征值为

$$\varphi_m = A_m \sin(K_{xm}X), \tag{1}$$

$$K_{xm} = m\pi/X_4, \tag{2}$$

$$K_{zm}^2 = K_0^2 - K_{xm}^2; \tag{3}$$

式中  $K_0$  是自由空间的波数,  $A_m$  是  $H_{m0}$  模的幅度, 利用波导中本征模的正交归一化条件可求出  $A_m$  为

$$A_m = \sqrt{2/X_4}; \quad (4)$$

这样空波导中的横向场可以表示为

$$E_y = \sum_m^{\infty} V_m \varphi_m, \quad (5)$$

$$H_x = \sum_m^{\infty} I_m \varphi_m. \quad (6)$$

从 Maxwell 方程出发, 可以推得半导体样品填充波导中  $H_{m0}$  模的  $E_y$  分量满足下列方程

$$\frac{d^2 E_y}{dx^2} + (K_0^2 \epsilon_r(x) - K_z^2) E_y = 0, \quad (7)$$

其中  $\epsilon_r(x)$  为分区均匀时的情况, 在不同区域中分别为  $\epsilon_a$ ,  $\epsilon_p$  和  $\epsilon_s$  (见图 1)。

容易证明上列二阶常微分方程的复本征问题可归结为下列泛函的变分问题, 即

$$F(E_y) = \int_l \left[ \left( \frac{dE_y}{dx} \right)^2 - (K_0^2 \epsilon_r - K_z^2) E_y^2 \right] dx. \quad (8)$$

用有限元法求解上述变分问题时, 单元内的待求未知函数用节点参数及单元内的插值函数来表示. 采用二次有限元来计算, 这样  $E_y$  在单元内可表示为

$$E_y^e = \sum_{i=1}^3 N_i(\xi) E_{yi}^e = (N)^T (E_y^e); \quad (9)$$

其中

$$N_1(\xi) = \frac{1}{2} \xi(\xi - 1), \quad (10)$$

$$N_2(\xi) = 1 - \xi^2, \quad (11)$$

$$N_3(\xi) = \frac{1}{2} \xi(\xi + 1), \quad (12)$$

$$\xi = \frac{2}{x_j - x_i} \left( x - \frac{x_i + x_j}{2} \right). \quad (13)$$

将式 (9) 代入式 (8), 并根据变分原理可得到:

$$[A](E_y) - K_0^2 [C](E_y) + K_z^2 [B](E_y) = 0. \quad (14)$$

式 (14) 也可写成广义代数本征值方程:

$$[D](E_y) = K_z^2 [B](E_y); \quad (15)$$

其中

节点标号 (1)	(2)	(3)	$\xi$
自然坐标 -1	0	1	
直角坐标 $X_i$	$(X_i + X_j)/2$	$X_j$	$X$

图 2 二阶线元中的坐标关系  
Fig. 2 Coordinate relation of the second order line element

$$[A] = \sum_e \int_e (N_x)(N_x)^T dx, \quad (16)$$

$$[B] = \sum_e \int_e (N)(N)^T dx, \quad (17)$$

$$[C] = \sum_e \epsilon_r \int_e (N)(N)^T dx; \quad (18)$$

$$[D] = K_0^2 [C] - [A], \quad (19)$$

式中  $(N_x) = \partial(N)/\partial x$ . 式 (17)、(18) 和 (19) 中的单元积分可以利用自然坐标直接算得, 它们分别为:

$$\int_e (N_x)(N_x)^T dx = \frac{1}{3(x_j - x_i)} \begin{bmatrix} 7 & -8 & 1 \\ -8 & 16 & -8 \\ 1 & -8 & 7 \end{bmatrix}, \quad (20)$$

$$\int_e (N)(N)^T dx = \frac{(x_j - x_i)}{30} \begin{bmatrix} 4 & 2 & -1 \\ 2 & 16 & 2 \\ -1 & 2 & 4 \end{bmatrix}. \quad (21)$$

求解方程 (15), 就可得到  $H_{m0}$  模的本征值  $K_z$  和相应的特征向量  $(E_y)$ . 这样半导体样品填充波导中第  $n$  个本征函数就可以表示为

$$\bar{\varphi}_n = \bar{A}_n \sum_e \sum_{i=1}^3 N_i^e \bar{E}_{yni}^e; \quad (22)$$

其中  $E_{yni}^e$  为对应于  $H_{n0}$  模的特征向量  $(E_{yn})$  在第  $e$  个线元内第  $i$  个节点上的值. 系数  $\bar{A}_n$  可用下面归一化条件算得, 即

$$\int_0^{x_4} \bar{\varphi}_n^2 dx = 1. \quad (23)$$

于是样品填充波导中的横向场表示为

$$\bar{E}_y = \sum_n \bar{V}_n \bar{\varphi}_n, \quad (24)$$

$$\bar{H}_x = \sum_n \bar{I}_n \bar{\varphi}_n. \quad (25)$$

在纵向不连续交接面  $A-A'(z=0)$  时, 总切向场  $E_y$  和  $H_x$  必须连续:

$$E_y = \bar{E}_y, \quad (26)$$

$$H_x = \bar{H}_x; \quad (27)$$

即

$$\sum_m^\infty V_m \varphi_m = \sum_n^\infty \bar{V}_n \bar{\varphi}_n, \quad (28)$$

$$\sum_m^\infty I_m \varphi_m = \sum_n^\infty \bar{I}_n \bar{\varphi}_n. \quad (29)$$

在式 (28) 和式 (29) 两边乘上  $\varphi_n$  或  $\bar{\varphi}_n$ , 并且利用下面正交性关系:

$$\int_0^{x_4} \varphi_m \varphi_n dx = \delta_{mn}, \quad (30)$$

$$\int_0^{x_4} \bar{\varphi}_m \bar{\varphi}_n dx = \delta_{mn}; \quad (31)$$

就可得到

$$(V) = [Q](\bar{V}), \quad (32)$$

$$(I) = [Q](\bar{I}); \quad (33)$$

其中

$$Q_{mn} = \int_0^{x_4} \varphi_m \bar{\varphi}_n dx. \quad (34)$$

可以证明下面关系成立:

$$[Q][Q]_t = E; \quad (35)$$

式中  $t$  代表矩阵转置,  $E$  是单位阵. 根据多模网络理论中阻抗的定义:

$$(V) = [Z](I), \quad (36)$$

$$(\bar{V}) = [\bar{Z}](\bar{I}); \quad (37)$$

可以得到:

$$[Z] = [Q][\bar{Z}][Q]_t; \quad (38)$$

式中  $[Z]$ ,  $[\bar{Z}]$  分别代表不连续面  $A-A'$  ( $z=0$ ) 处左、右两侧向正  $z$  方向看去的输入阻抗. 式 (38) 实际上是不连续面处左、右两侧的阻抗变换公式. 由于我们分析的结构是纵向对称的 (见图 3). 因此整个结构的散射参数可以用奇偶模激励法分析.

假定  $[R_0]$  和  $[R_s]$  是对称面 ( $z=W/2$ ) 分别为磁壁和电壁时  $A-A'$  面向右看去的反射系数矩阵, 则半导体样品不连续性的反射系数矩阵  $[R]$  (在  $z=0$  面处) 和传输系数矩阵  $[T]$  (在  $z=W$  面处) 分别为:

$$[R] = ([R_0] + [R_s])/2, \quad (39)$$

$$[T] = ([R_0] - [R_s])/2; \quad (40)$$

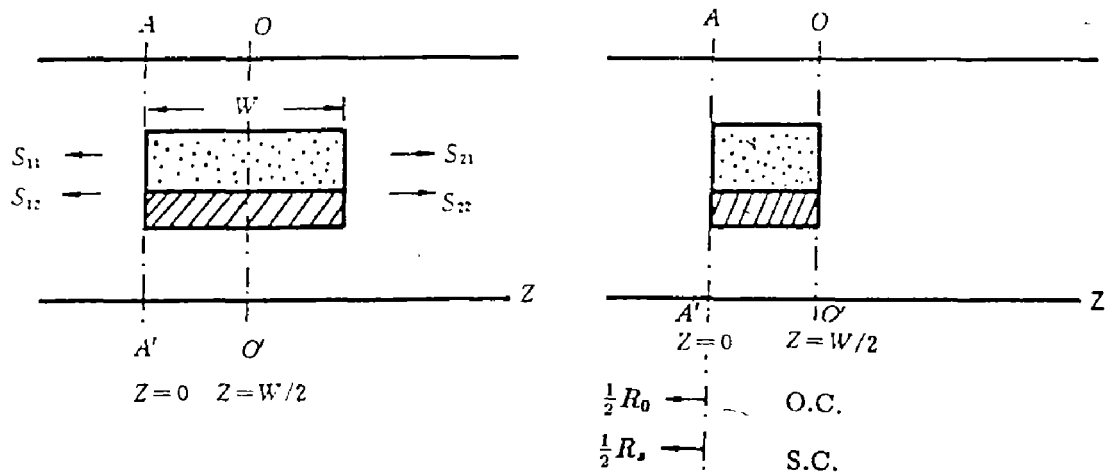


图 3 结构在纵向上的对称性考虑

Fig. 3 Symmetrical consideration of the structure in the longitudinal direction

其中矩阵  $[R_0]$  和  $[R_s]$  由下面公式得到:

$$[R_0] = ([Z_0] + [Z_c])^{-1}([Z_0] - [Z_c]), \quad (41)$$

$$[R_s] = ([Z_s] + [Z_c])^{-1}([Z_s] - [Z_c]); \quad (42)$$

式中

$$[Z_0] = [Q][\bar{Z}_0][Q]_t, \quad (43)$$

$$[Z_s] = [Q][\bar{Z}_s][Q]_t; \quad (44)$$

其中  $[\bar{Z}_0]$ ,  $[\bar{Z}_s]$ ,  $[Z_c]$  对角矩阵的元素分别为

$$\bar{Z}_{on} = -j\bar{Z}_n \text{ctg}(\bar{K}_{2n}W/2), \quad (45)$$

$$\bar{Z}_{sn} = j\bar{Z}_n \tan(\bar{K}_{2n}W/2), \quad (46)$$

$$\bar{Z}_n = W\mu/\bar{K}_{2n}, \quad (47)$$

$$Z_{cn} = W\mu/K_{2n}; \quad (48)$$

而主模的散射系数  $S_{11} = S_{22}$  和  $S_{12} = S_{21}$  分别是矩阵  $[R]$  和  $[T]$  首行首列元素, 即

$$S_{11} = R(1, 1) = \frac{1}{2}[R_0(1, ) + R_s(1, 1)], \quad (49)$$

$$S_{21} = T(1, 1) = \frac{1}{2}[R_0(1, ) - R_s(1, 1)]. \quad (50)$$

## 2 计算结果

为了证实本文方法的可靠性和有效性, 我们计算了不同电导率的 II - VI族半导体样品的散射特性. 表 2 给出了本文计算的各个半导体样品传输系数与实验值以及多模网络方法的计算值. 从表 2 中可见它们彼此吻合得很好. 证明本文方法是精确和可靠的. 在我们计算中, 二次元的节点数均为 83, 在模匹配过程中用了 10 个本征模; 整个计算时间在 VAX 8700 计算机上只需约二十几秒. 由此可见, 本文还具有通用性好, 效率高的特点.

表 2 不同 II - VI族半导体样品传输系数理论值与实验值的比较

Table 2 A comparison of transmission coefficients between theoretical and experimental results for different II - VI semiconductor samples

样品	$ S_{21} $ (dB)			$\varphi_{21}$ ( $^{\circ}$ )		
	实验值	文献 [1]	本文	实验值	文献 [1]	本文
CMT78	-3.25	-3.33	-3.32	-63.2	-63.75	-63.01
CMT76	-5.30	-5.19	-5.17	-56.2	-55.77	-56.76
Q154	-8.90	-9.44	-9.44	-28.2	-27.41	-27.20
Q114	-10.65	-10.28	-10.53	31.7	39.22	40.74
Q107	-10.50	-10.47	-10.64	36.8	38.74	39.08
Q105	-10.90	-10.32	-10.51	31.8	38.32	38.20

## 参考文献

- 1 Xu Shan-jia *et al.* *Int. J. Infrared and Millim. Waves*, 1992;13(4):560~587
- 2 Xu Shan-jia. *Journal of Electronics*, 1989;6(3):232~241
- 3 Greiner P *et al.* *Digest of 16th IC on IR and MMW*, 1991:308~309
- 4 Xu Shan-jia. *Journal of Electronics*, 1989;6(1):50~58
- 5 Xu Shan-jia *et al.* *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* 1989;37(4):686~690

## HIGH-ORDER FINITE-ELEMENT ANALYSIS FOR SCATTERING CHARACTERISTICS OF II-VI SEMICONDUCTOR MATERIALS\*

XU SHANJIA, SHENG XINQING

*(Department of Radio and Electronics, University of Science and Technology of China,  
Hefei, Anhui 230026, China)*

P. GREINER, C. R. BECKER, R. GEICK

*(Physikalisches Institut der Universität, Am Hülnd, 8700 Würzburg, Germany)*

**Abstract:** The scattering characteristics of the II-VI semiconductor were analyzed by a method which combines the second-order finite-element method with the rigorous mode matching procedure. The method avoids the difficulty of solving the complex transcendental equation, and calculates all the eigenvalues and eigenfunctions simultaneously needed for the mode matching treatment in the longitudinal direction. As a result, the whole solution procedure is significantly simplified. A comparison is given between the experimental data and the calculated results obtained with this analysis and the network method, showing very good agreement. The accuracy and efficiency of the present method are thus verified.

**Key words:** II-VI semiconductor, scattering characteristics, high-order finite-element, mode matching method.

---

\*The project supported jointly by the National Natural Science Foundation of China and by the Deutsche Forschungsgemeinschaft.