

# 有间隙 II - VI 族半导体材料散射特性的 三维边缘元分析

盛新庆 徐善驾

(中国科技大学电子工程与信息科学系, 安徽, 合肥, 230027)

TN304.25

P. Greiner C. R. Becker R. Geick

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

**A** **摘要** 用三维边缘元方法分析了有间隙 II - VI 族半导体材料的散射特性. 该方法直接从泛函变分出发, 避开了其它方法中求解有损超薄介质填充波导本征值和本征函数的困难, 简化了求解过程. 计算结果与实验值的比较证实了本方法具有有效、可靠和精确的特点.

**关键词** II - VI 族半导体, 散射特性, 三维边缘元方法.

401-406

## 引言

近年来, II - VI 族半导体因具有很宽的频率适用范围, 越来越引起人们的关注. 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<sup>[1]</sup>. 为此, 我们曾提出一种无接触微波测量方法. 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, 其关键就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. 在过去的实验中, 为了分析方便, 通常选择样品与矩形波导窄边等高, 使整个不连续性问题简化为二维. 对这类我们称之为无间隙 II - VI 族半导体散射问题, 已被多种方法成功地解决<sup>[1~3]</sup>. 但是, 在实验中要使样品与波导窄边完全等高是很困难的, 为此需要分析有间隙 II - VI 族半导体材料的散射特性. 文献[4]用模匹配与多模网络相结合的方法对它进行了分析. 但是此方法中超越方程的求解不大容易, 给方法的使用带来了不便.

本文直接从全磁场矢量泛函出发, 将三维边缘元推广应用于求解这种有耗介质三维不连续问题, 因而从根本上避开了求解波导本征值和本征函数的问题, 简化了求解过程. 计算结果与实验值的比较证实了本文方法具有有效、可靠和精确的特点.

## 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. 此不连续性问题可归结为下列全磁场矢量泛函的变分问题<sup>[5]</sup>:

\* 国家自然科学基金会和德国研究联合会(DFG)联合资助项目  
本文 1995 年 9 月 28 日收到, 修改稿 1996 年 6 月 17 日收到

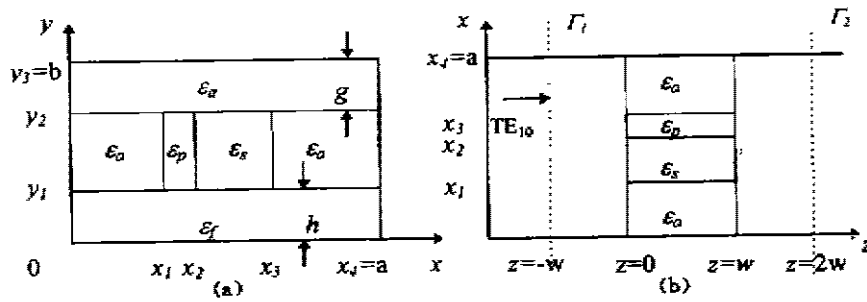


图 1 矩形波导中有耗层状介质块截面图  
(a)横截面图 (b)纵截面图

Fig. 1 Cross-section of the stratified lossy dielectric discontinuity structure  
(a) transverse section (b) longitudinal section

$$F(\vec{H}) = \iiint_n (\nabla \times \vec{H}) \cdot (\epsilon^{-1} \nabla \times \vec{H}) d\Omega - k_0^2 \iiint_n \vec{H} \cdot \vec{H} d\Omega + j\omega\epsilon_0 \iint_\Gamma \vec{H} \cdot (\vec{n} \times \vec{E}) d\Gamma, \quad (1)$$

用有限元方法求解上述变分问题时,需先构造有限元空间. 为了消除伪解,本文采用如图 2 所示的三维边缘元空间构造形式. 此构造的特点是用长方体中平行于  $x$  轴的四条边中点的切向分量  $H_{x1}, H_{x2}, H_{x3}, H_{x4}$  来插值  $H_x$ ; 平行于  $y$  轴的四条边中点的切向分量  $H_{y1}, H_{y2}, H_{y3}, H_{y4}$  来插值  $H_y$ ; 平行于  $z$  轴的四条边中点的切向分量  $H_{z1}, H_{z2}, H_{z3}, H_{z4}$  来插值  $H_z$ . 由于这样构造的有限元空间不仅在旋度空间中是协调的,而且能正确模拟旋度算子的 0 空间,因而能消除伪解. 在此构造下磁场  $\vec{H}$  可表示为:

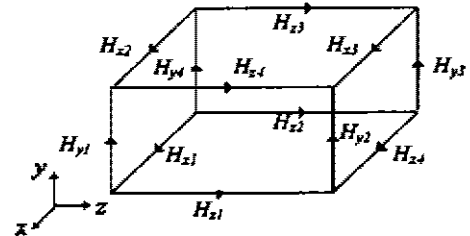


图 2 三维边缘元单元  
Fig. 2 3-D edge-element

$$\begin{aligned} H_x &= \{U\} \{H_x^e\}^T = \{U_1 U_2 U_3 U_4\} \{H_{x1}^e H_{x2}^e H_{x3}^e H_{x4}^e\}^T, \\ H_y &= \{V\} \{H_y^e\}^T = \{V_1 V_2 V_3 V_4\} \{H_{y1}^e H_{y2}^e H_{y3}^e H_{y4}^e\}^T, \\ H_z &= \{W\} \{H_z^e\}^T = \{W_1 W_2 W_3 W_4\} \{H_{z1}^e H_{z2}^e H_{z3}^e H_{z4}^e\}^T, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \text{其中 } U_1 &= (1 - \eta)(1 - \zeta)/4 & V_1 &= (1 - \zeta)(1 - \xi)/4 & W_1 &= (1 - \xi)(1 - \eta), \\ U_2 &= (1 + \eta)(1 - \zeta)/4 & V_2 &= (1 + \zeta)(1 - \xi)/4 & W_2 &= (1 + \xi)(1 - \eta), \\ U_3 &= (1 + \eta)(1 + \zeta)/4 & V_3 &= (1 + \zeta)(1 + \xi)/4 & W_3 &= (1 + \xi)(1 + \eta), \\ U_4 &= (1 - \eta)(1 + \zeta)/4 & V_4 &= (1 - \zeta)(1 + \xi)/4 & W_4 &= (1 - \xi)(1 + \eta); \end{aligned} \quad (3)$$

$$\xi = \frac{x - x_c}{l_x}, \quad \eta = \frac{y - y_c}{l_y}, \quad \zeta = \frac{z - z_c}{l_z}; \quad (4)$$

式中  $(x_c, y_c, z_c)$  是长方体的中心坐标,  $2l_x, 2l_y, 2l_z$  分别是三条边的长度. 将式(2)代入式(1), 根据变分原理可得到如下线性方程组:

$$[S]\{H\} - K_0^2[T]\{H\} + \sum_{\Gamma} \iint_{\Gamma} j\omega\epsilon_0[N](\vec{n}_1 \times \vec{E})|_{\Gamma_1} d\Gamma + \sum_{\Gamma} \iint_{\Gamma} j\omega\epsilon_0[N](\vec{n}_2 \times \vec{E})|_{\Gamma_2} d\Gamma = \{0\}, \quad (5)$$

$$[S] = \sum_{\Gamma} \iint_{\Gamma} [B]\epsilon^{-1}[B]^T d\Omega, \quad (6)$$

$$[T] = \sum_{\Gamma} \iint_{\Gamma} [N][N]^T d\Omega, \quad (7)$$

式中  $\vec{n}_1$  和  $\vec{n}_2$  分别是入射面  $\Gamma_1$  和出射面  $\Gamma_2$  上的单位外法向矢量,  $\sum_{\Gamma}$  是所有单元的求和,  $\sum_{\Gamma}$  只是与  $\Gamma_1$  和  $\Gamma_2$  接触的所有单元求和. 矩阵  $[B]$ ,  $[N]$  和列阵  $\{H\}$  分别为:

$$[B] = \begin{bmatrix} \{0\} & \partial\{U\}/\partial z & -\partial\{U\}/\partial y \\ -\partial\{V\}/\partial z & \{0\} & \partial\{V\}/\partial x \\ \partial\{W\}/\partial y & \partial\{W\}/\partial x & \{0\} \end{bmatrix}, [N] = \begin{bmatrix} \{U\} & \{0\} & \{0\} \\ \{0\} & \{V\} & \{0\} \\ \{0\} & \{0\} & \{W\} \end{bmatrix}, \{H\} = \begin{bmatrix} \{H_x\} \\ \{H_y\} \\ \{H_z\} \end{bmatrix}, \quad (8)$$

设  $\{H\}_1$  和  $\{H\}_2$  分别是入射面  $\Gamma_1$  和出射面  $\Gamma_2$  上所有点的横向磁场矢量组成的列矩阵,  $\{H\}_0$  是排除入射面  $\Gamma_1$  和出射面  $\Gamma_2$  上点后求解区域中其它点的横向磁场矢量组成的列矩阵. 将式(5)重新调整写成:

$$\begin{bmatrix} [R]_{11} & [R]_{10} & [R]_{12} \\ [R]_{01} & [R]_{00} & [R]_{02} \\ [R]_{21} & [R]_{20} & [R]_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \{H\}_1 \\ \{H\}_0 \\ \{H\}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sum_{\Gamma} \iint_{\Gamma} j\omega\epsilon_0[N](\vec{n}_1 \times \vec{E})|_{\Gamma_1} d\Gamma \\ \{0\} \\ -\sum_{\Gamma} \iint_{\Gamma} j\omega\epsilon_0[N](\vec{n}_2 \times \vec{E})|_{\Gamma_2} d\Gamma \end{bmatrix} \quad (9)$$

其中  $[R]_{11}$ ,  $[R]_{10}$ , ...,  $[R]_{22}$  由形函数  $\{U\}$ ,  $\{V\}$  及  $\{W\}$  按式(5)-(7)确定. 从式(11)中消去  $\{H\}_0$ , 便可得下方程:

$$\begin{bmatrix} [P]_{11} & [P]_{12} \\ [P]_{21} & [P]_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \{H\}_1 \\ \{H\}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sum_{\Gamma} \iint_{\Gamma} j\omega\epsilon_0[N](\vec{n}_1 \times \vec{E})|_{\Gamma_1} d\Gamma \\ \{0\} \\ -\sum_{\Gamma} \iint_{\Gamma} j\omega\epsilon_0[N](\vec{n}_2 \times \vec{E})|_{\Gamma_2} d\Gamma \end{bmatrix}, \quad (10)$$

其中

$$\left. \begin{aligned} [P]_{11} &= [P]_{11} - [R]_{10}[R]_{00}^{-1}[R]_{01} & [R]_{12} &= [R]_{12} - [R]_{10}[R]_{00}^{-1}[R]_{02} \\ [P]_{21} &= [P]_{21} - [R]_{20}[R]_{00}^{-1}[R]_{01} & [R]_{22} &= [R]_{22} - [R]_{20}[R]_{00}^{-1}[R]_{02} \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

根据规则波导理论, 图 1 所示矩形波导不连续性结构的入射面  $\Gamma_1$  和出射面  $\Gamma_2$  上的横

向电场  $E_z$  和横向磁场  $H_z$  可以表示为:

$$\begin{aligned} \vec{E}_z(x, y, z_i) &= \sum_m \sum_n (a_{mn} e^{-j\beta_{mn} z_i} + b_{mn} e^{j\beta_{mn} z_i}) \vec{e}_{1mn}(x, y) \\ &+ \sum_m \sum_n \frac{j\beta_{mn}}{j\omega\epsilon_0} (c_{mn} e^{-j\beta_{mn} z_i} - d_{mn} e^{j\beta_{mn} z_i}) \vec{e}_{2mn}(x, y), \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \vec{H}_z(x, y, z_i) &= \sum_m \sum_n \frac{j\beta_{mn}}{j\omega\mu_0} (a_{mn} e^{-j\beta_{mn} z_i} + b_{mn} e^{j\beta_{mn} z_i}) \vec{h}_{1mn}(x, y) \\ &+ \sum_m \sum_n (c_{mn} e^{-j\beta_{mn} z_i} + d_{mn} e^{j\beta_{mn} z_i}) \vec{h}_{2mn}(x, y), \end{aligned} \quad (13)$$

式中  $e_{lmn}$  和  $h_{lmn}$  ( $l=1, 2$ ) 是矩形波导中归一化模式函数, 下标 1 和 2 分别对应 TE 和 TM 模,  $\beta_{mn}$  是对应于每种模的传播常数.

在主模  $TE_{10}$  入射下, 根据式(12)和式(13)便可以得到入射面  $\Gamma_1$  和出射面  $\Gamma_2$  上  $E_z$  和  $H_z$  的关系式, 将此式离散化后便得到下式:

$$\begin{bmatrix} \{E_x\}_i \\ \{E_y\}_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \{0\} \\ \{\delta_{ii}\{g\}_i\} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} [Z_{xx}]_i & [Z_{xy}]_i \\ [Z_{yx}]_i & [Z_{yy}]_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j\omega\mu_0 \{H_x\}_i \\ j\omega\mu_0 \{H_y\}_i \end{bmatrix}, \quad (14)$$

式中  $i$  取 1 或 2, 分别对应于入射面  $\Gamma_1$  和出射面  $\Gamma_2$ . 设  $[A]_{11}, [A]_{12}, [A]_{21}, \dots, [A]_{44}$  是式(10)中  $[P]_{11}, [P]_{12}, [P]_{21}, [P]_{22}$  的子矩阵, 将式(14)代入式(10)便可得到下面方程:

$$\begin{bmatrix} [\bar{A}]_{11} & [\bar{A}]_{12} & [A]_{13} & [A]_{14} \\ [\bar{A}]_{21} & [\bar{A}]_{22} & [A]_{23} & [A]_{24} \\ [A]_{31} & [A]_{32} & [\bar{A}]_{33} & [\bar{A}]_{34} \\ [A]_{41} & [A]_{42} & [\bar{A}]_{43} & [\bar{A}]_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j\omega\mu_0 \{H_x\}_1 \\ j\omega\mu_0 \{H_y\}_1 \\ j\omega\mu_0 \{H_x\}_2 \\ j\omega\mu_0 \{H_y\}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [B]_1^y \\ \{0\} \\ \{0\} \\ \{0\} \end{bmatrix}, \quad (15)$$

$$\text{式中} \quad \left. \begin{aligned} [\bar{A}]_{11} &= [A]_{11} + [B]_1^y [Z_{xx}]_1 & [\bar{A}]_{12} &= [A]_{12} + [B]_1^y [Z_{xy}]_1 \\ [\bar{A}]_{21} &= [A]_{21} + [B]_1^x [Z_{xx}]_1 & [\bar{A}]_{22} &= [A]_{22} + [B]_1^x [Z_{xy}]_1 \\ [\bar{A}]_{33} &= [A]_{33} + [B]_2^y [Z_{xx}]_2 & [\bar{A}]_{34} &= [A]_{34} + [B]_2^y [Z_{xy}]_2 \\ [\bar{A}]_{43} &= [A]_{43} + [B]_2^x [Z_{xx}]_2 & [\bar{A}]_{44} &= [A]_{44} + [B]_2^x [Z_{xy}]_2 \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

$$[B]_1^x = \sum_r \iint_r k_0^2 \{V\} \{U\}^T |_{\Gamma_1} d\Gamma \quad [B]_1^y = \sum_r \iint_r k_0^2 \{V\} \{U\}^T |_{\Gamma_1} d\Gamma. \quad (17)$$

求解式(15), 得到入射面  $\Gamma_1$  和出射面  $\Gamma_2$  上点的横向磁场  $H_z$ , 利用下面公式便可确定主模  $TE_{10}$  的反射系数  $S_{11}$  和传输系数  $S_{21}$ .

$$S_{11} = \frac{\iint_{\Gamma_1} \vec{h}_{110} \cdot j\omega\mu_0 \vec{H}_{z1} d\Gamma - j\beta_{10} \alpha_{110} e^{-j\beta_{10} z_1}}{-j\beta_{10} \alpha_{110} e^{-j\beta_{10} z_1}}, \quad S_{21} = \frac{\iint_{\Gamma_2} \vec{h}_{110} \cdot j\omega\mu_0 \vec{H}_{z2} d\Gamma}{-j\beta_{10} \alpha_{110} e^{-j\beta_{10} z_2}}. \quad (18)$$

## 2 数值计算结果

为了证实本文方法对分析Ⅱ-V族半导体散射特性的有效性,我们进行了一些数值计算.表1是无间隙Ⅱ-V族半导体(即 $y_1=0$ , $y_3-y_2=0$ )传输系数实验值与本文计算值的比较.表2列出了每种样品的具体特性参数.样品在矩形波导( $a=22.86\text{mm}$ , $b=10.16\text{mm}$ )中的放置位置为 $x_1\sim x_3=10.15\text{mm}$ ,测试频率是 $8.9\text{GHz}$ .在计算中, $y$ 方向只剖分2个单元, $x$ 方向的 $0\sim x_1$ 段和 $x_3\sim x_4$ 段分别剖分3个单元,外延层和基片分别剖分1个单元.由表1可见本文的计算值与实验值吻合得很好.图3是有间隙Ⅱ-V族半导体传输系数随间隙高度变化的曲线.样品的特性参数为 $\epsilon_p=(-2861,-103052)$ , $\epsilon_s=(11,-0.5)$ , $d_p=0.0047\text{mm}$ , $d_s=1.0\text{mm}$ .为了克服样品与波导底面直接接触给实验带来的不稳定性困难,我们在样品与波导底面之间放了一块介电常数为2.33,厚为0.2mm的介质块,其它测试参数与无间隙情形相同.在此计算中, $x$ 方向剖分和上述无间隙情况完全一样, $y$ 方向的 $0\sim y_1$ 段剖分1个单元, $y_2\sim y_3$ 段的剖分随 $g$ 的增大由1个单元逐渐增至3个单元, $y_1\sim y_2$ 段的剖分则由6个单元减至4个单元.由图3可见,传播系数的计算值普遍略大于实验值,这是因为实验中还有其它损耗未计在内.由此可见,本文方法分析Ⅱ-V族半导体散射特性不仅有效,而且可靠、精确.

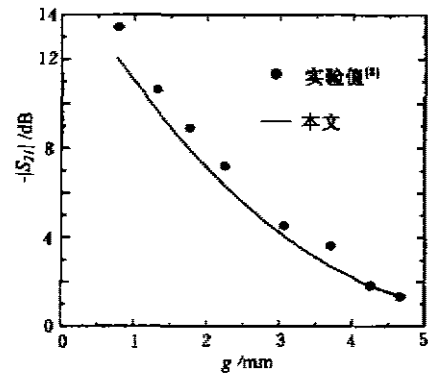


图3 有间隙Ⅱ-V族半导体样品  
传输系数随间隙高度变化曲线  
Fig. 3 Variation of the transmission coefficients  
with the gap of the II-V semiconductor sample

表1 无间隙Ⅱ-V族半导体传输系数实验值与计算值之比较

Table 1 Comparison of transmission coefficients for different II-V semiconductor materials  
(without gaps) between the experimental  
data and calculated results

样品	S <sub>21</sub> (dB)		Φ <sub>21</sub> (°)	
	实验值	计算值	实验值	计算值
CMT78	-3.25	-3.43	-63.2	-62.0
CMT76	-5.30	-5.31	-56.2	-53.3
Q154	-8.90	-9.28	-28.2	-23.3
Q114	-10.65	-10.13	31.7	37.6
Q107	-10.50	-10.30	36.8	37.2
Q105	-10.90	-10.15	31.8	36.9

表 2 不同半导体样品的参数  
Table 2 The parameters of different semiconductor samples

样品	$\epsilon_s$	$\epsilon_p$	$d_s(\text{mm})$	$d_p(\mu\text{m})$	$w(\text{mm})$
CMT78(HgCdTe)	$11-j0.8$	$-41-j1816$	1.0	2.0	5.0
CMT76(HgTe)	$11-j0.45$	$-198-j7779$	1.0	1.2	5.0
Q154(HgCdTe)	$11-j0.5$	$-358-j13538$	1.0	2.2	5.0
Q114(HgCdTe)	$11-j0.5$	$-2861-j103052$	1.0	5.2	5.0
Q107(HgCdTe)	$11-j11$	$-8254-j23684$	1.0	2.9	5.0
Q105(HgCdTe)	$11-j0.5$	$-8285-j296801$	1.0	1.6	5.0

### 参考文献

- Greiner P, Polignone L, Becker C R, et al. *Appl. Phys.* 1992, **A 55**:279~288
- Xu S J, Wu X Z, Greiner P, et al. *International Journal of Infrared and Millimeter Waves*, 1992, **13**(4): 569~587
- Xu S J, Sheng X Q, Greiner P, et al. *Chinese Journal of Infrared and Millimeter Waves*, 1992, **12**(3): 177~184
- Xu S J, Wu X Z, Boege P, et al. *International Journal of Infrared and Millimeter Waves*, 1993, **14**(10): 2155~2190
- Ise K, Inoue K, Koshiba M. *IEEE Trans.* 1990, **MTT-38**(9):1352~1359
- Ise K, Inoue K, Koshiba M. *IEEE Trans.* 1991, **MTT-39**(8):1289~1295
- 徐善驾, 盛新庆. *电子学报*, 1994, **22**(6):79~82

## 3-D EDGE-ELEMENT ANALYSIS FOR SCATTERING CHARACTERISTICS OF II-VI SEMICONDUCTOR MATERIALS WITH GAPS\*

Sheng Xinqing Xu Shanjia

(Department of Electronic Engineering and Information Science,  
University of Science and Technology of China, Hefei, Anhui 230027, China)

P. Greiner C. R. Becker R. Geick

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

**Abstract** The scattering characteristics of II-VI semiconductor materials filled in the waveguide with gaps were analyzed with the 3-D edge-element method. Since this method starts from the variation of functional directly, it avoids the difficulties met in other methods of solving the eigenvalue and eigenfunction for very thin lossy dielectric loaded waveguide. The comparisons between the calculated results and experimental data confirm the effectiveness, reliability and accuracy of the method.

**Key words** II-VI semiconductors, scattering characteristics, 3-D edge-element method.

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