

РАСЧЕТ ОПТИМАЛЬНЫХ ПЕРЕСЕЧЕНИЙ ФОТОННОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ВОЛНОВОДОВ МЕТОДОМ ПЕРЕДАТОЧНОЙ МАТРИЦЫ© 2002 Н.Л. Казанский¹, П.Г. Серафимович¹, С.И. Харитонов²¹Институт систем обработки изображений РАН, г. Самара²Самарский государственный аэрокосмический университет

Расчитано распределение электромагнитного поля в пересечении двух фотоннокристаллических волноводов (ФКВ). С помощью введения диэлектрической неоднородности в центр пересечения ФКВ выполнена минимизация поперечных потерь в пересечении. Показано, что использованный в данной работе метод передаточной матрицы (МПМ) может применяться для оценки потерь в пересечениях ФКВ. По сравнению с другими методами расчета электромагнитного поля использование МПМ существенно сокращает время вычислительного эксперимента.

Введение

Фотонными кристаллами называются периодические диэлектрические структуры, имеющие "запретную зону" (band gap), т.е. не пропускающие свет в определенном частотном диапазоне [1]. Предложено много оптических устройств на базе таких структур [2]. В частности, при создании интегральных оптических микросхем из-за стремления к миниатюризации возникает необходимость работать с пересечениями фотоннокристаллических волноводов (ФКВ). Эффективность пересечений волноводов является важной характеристикой работы интегральной оптической микросхемы. В целях упрощения технологического производства таких структур, их, как правило, делают двумерными. Распространение света в ФКВ ограничивается структурой фотонного кристалла в одном измерении и эффектом полного отражения в другом. В данной работе рассматривается пересечение ФКВ только под прямым углом. Однако это не является серьезным ограничением, т.к. известно, что ФКВ могут изгибаться под прямым углом на площади несколько квадратных длин волн практически без потерь энергии.

Для расчета электромагнитного (ЭМ) поля в диэлектрических структурах используются три основных подхода [3]. При первом из них в результате расчета получаются непосредственно отсчеты ЭМ поля. Так ра-

ботает, например, метод конечных разностей. При втором подходе искомыми являются коэффициенты разложения ЭМ поля по определенному базису, например, по плоским волнам. Третий подход является "гибридным". В этом случае расчетная зона разбивается на ячейки. Затем рассчитывается передаточная матрица, связывающая коэффициенты разложения ЭМ поля с одной стороны ячейки с коэффициентами разложения с другой стороны. Поэтому методы, принадлежащие к группе "гибридных" методов, часто называют методами передаточной матрицы (МПМ). МПМ требуют значительно меньших затрат машинного времени по сравнению с методами первых двух групп. Как правило, МПМ используют, когда исследуемая диэлектрическая структура может быть разбита на зоны, для которых легко найти передаточную матрицу, например, аналитическими методами [4]. В данной работе показано, что МПМ может использоваться для расчета ЭМ поля в сложной диэлектрической структуре, в которой присутствуют не только элементы с кусочно-постоянной функцией диэлектрической проницаемости (ФДП), но и элементы с непрерывно изменяющейся ФДП.

Вычислительный метод

Электромагнитные (ЭМ) поля удовлетворяют уравнениям Максвелла. Для диэлектрических сред, в отсутствие внешних токов

и зарядов, уравнения Максвелла записываются в виде [5]:

$$\begin{aligned} \nabla \times E &= -\frac{\partial B}{\partial t} \\ \nabla \times H &= \frac{\partial D}{\partial t} \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \nabla \cdot D &= 0 \\ \nabla \cdot B &= 0 \end{aligned} \quad (2)$$

Материальные уравнения для линейной среды записываются в виде:

$$\begin{aligned} D(r) &= \varepsilon(r)E(r) \\ B(r) &= \mu(r)H(r) \end{aligned} \quad (3)$$

Для инвариантных по координате z сред, т.е. таких, где выполняется условие $\varepsilon = \varepsilon(x, y)$, и, следовательно, $\partial\varepsilon/\partial z = 0$, волновое уравнение для поперечных компонент электрического вектора ЭМ-поля записывается в виде:

$$\begin{aligned} \nabla_t^2 E_x + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{k^2} E_x \frac{\partial k^2}{\partial x} \right) + (k^2 - \beta^2) E_x &= \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{k^2} E_y \frac{\partial k^2}{\partial y} \right) \\ \nabla_t^2 E_y + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{k^2} E_y \frac{\partial k^2}{\partial y} \right) + (k^2 - \beta^2) E_y &= \\ = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{k^2} E_x \frac{\partial k^2}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (4)$$

где $k = \omega(\varepsilon\mu)^{1/2} = \frac{2\pi n}{\lambda}$ и $\nabla_t^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$.

Аналогичные соотношения можно записать для магнитного вектора H .

Для ЭМ полей, у которых вектора E или H параллельны плоскостям xz или yz , и для областей с кусочно-постоянным коэффициентом преломления задача нахождения модовых функций может быть сведена к нахождению собственных функций в следующей задаче:

$$\begin{aligned} \nabla_t^2 E &= (\beta^2 - k^2)E \\ \nabla_t^2 H &= (\beta^2 - k^2)H \end{aligned} \quad (5)$$

Чтобы найти константу распространения β в каждом инвариантном по координате z слое, рассмотрим слой, состоящий из M участков толщиной d_i и коэффициентом преломления n_i в каждом (рис.1). Тогда для n -й моды, распространяющейся вдоль оси z в i -м участке, можно записать выражение для электрического поля (ТЕ-поляризация):

$$\bar{E}_{in}(x, y, z) = \bar{u}_y E_{in}(x) \exp(i\beta_n z), \quad (6)$$

где \bar{u}_y - единичный вектор по координате y .

Уравнение (5) преобразуется к виду:

$$\frac{d^2 E_{in}(x)}{dx^2} - (\beta_n^2 - k_i^2) E_{in}(x) = 0, \quad (7)$$

где $k_i = 2\pi n_i / \lambda$ - волновое число.

Общее решение уравнения (7) представляется в виде суммы двух плоских волн, распространяющихся в противоположных направлениях относительно координаты x :

$$\begin{aligned} E_{in}(x) &= A_{in} \exp[i\gamma_{in}(x - x_i)] + \\ &+ B_{in} \exp[-i\gamma_{in}(x - x_i)] \end{aligned} \quad (8)$$

где $\gamma_{in}^2 = \beta_n^2 - k_i^2$.

Коэффициенты A_{in} и B_{in} определяются из условий непрерывности электрического поля и его производной по координате x на

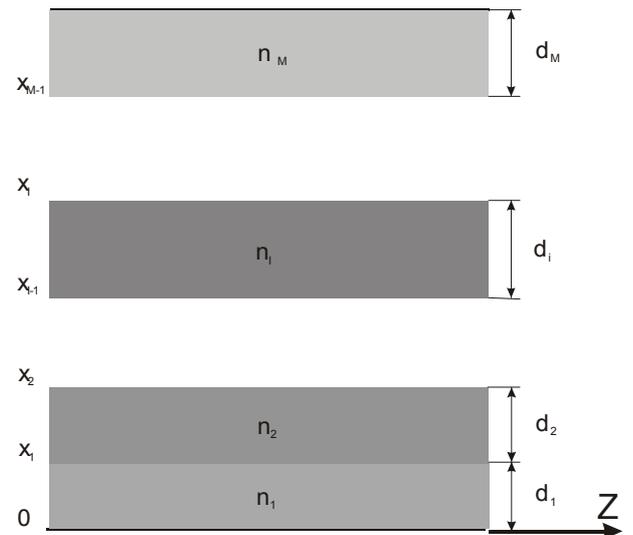


Рис.1. Слой диэлектрической структуры с кусочно-постоянным показателем преломления

границе между соседними участками:

$$\begin{aligned} A_{in} \exp(i\gamma_{in} d_i) + B_{in} \exp(-i\gamma_{in} d_i) &= \\ = A_{i+1n} + B_{i+1n} \\ \gamma_{in} [A_{in} \exp(i\gamma_{in} d_i) - B_{in} \exp(-i\gamma_{in} d_i)] &= \\ = \gamma_{i+1n} (A_{i+1n} - B_{i+1n}). \end{aligned} \quad (9)$$

Переходя к матричным обозначениям, получим:

$$\begin{bmatrix} A_{i+1n} \\ B_{i+1n} \end{bmatrix} = T_{in} \begin{bmatrix} A_{in} \\ B_{in} \end{bmatrix}, \quad (10)$$

где

$$T_{in} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{\gamma_{in}}{\gamma_{i+1n}}\right) \exp(i\gamma_{in} d_i) & \left(1 - \frac{\gamma_{in}}{\gamma_{i+1n}}\right) \exp(-i\gamma_{in} d_i) \\ \left(1 - \frac{\gamma_{in}}{\gamma_{i+1n}}\right) \exp(i\gamma_{in} d_i) & \left(1 + \frac{\gamma_{in}}{\gamma_{i+1n}}\right) \exp(-i\gamma_{in} d_i) \end{bmatrix} \quad (11)$$

В случае идеально отражающих стенок получаем дисперсионное уравнение для определения β_n :

$$\begin{bmatrix} A_{Mn} \\ B_{Mn} \end{bmatrix} = \prod_{i=1}^M T_{in} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad (12)$$

$$A_{Mn} + B_{Mn} = 0$$

Пусть исследуемая нами двумерная структура периодична по оси z с периодом p . Тогда, в соответствии с теоремой Блоха [6], решения соответствующих волновых уравнений можно записать в виде:

$$U_{k_z}(z) = \ell^{-ik_z p} u_{k_z}(z), \quad (13)$$

где U - любая из компонент ЭМ поля, $u_{k_z}(z)$ - периодичная функция с периодом p . Различные решения U - соответствуют различным волновым векторам k_z . Выражение (13) можно записать в виде:

$$u_{k_z}(p) = \ell^{-ik_z p} u_{k_z}(0). \quad (14)$$

Представив ЭМ поле в виде разложения по N модам, получим систему уравнений размера $2N \times 2N$, т.к. учитываются коэффициенты мод, распространяющихся в положительном направлении оси z - A и в проти-

воположном направлении - B

$$T \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \ell^{-ik_z p} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}, \quad (15)$$

где T - передаточная матрица периода диэлектрической структуры.

Тогда собственные значения λ матрицы T связаны с волновым вектором k_z следующим соотношением

$$\lambda = \ell^{-ik_z p}. \quad (16)$$

Рассчитываемые значения k_z ограничены размером первой зоны Брюллиена [7] для одномерных периодических структур

$$-\pi/p < k_z \leq \pi/p. \quad (17)$$

Из найденных $2N$ значений k_z отберем N значений с положительной вещественной частью. Оставшиеся N значений k_z имеют отрицательную вещественную часть, равную по модулю соответствующим значениям отобранных N значений k_z .

Передаточную матрицу T можно получить, используя соотношения для прошедшей и отраженной волн на границе каждого слоя.

$$\begin{aligned} A_{i+1} &= T_{i,i+1} \cdot A_i + R_{i+1,i} \cdot B_{i+1} \\ B_i &= R_{i,j+1} \cdot A_i + T_{i+1,i} \cdot B_{i+1} \end{aligned}, \quad (18)$$

где $T_{i,i+1}$ и $T_{i+1,i}$ - коэффициенты пропуска на границе между i и $i+1$ слоями для прямой и обратной ЭМ волны, соответственно. Соответствующие коэффициенты отражения обозначены как $R_{i,i+1}$ и $R_{i+1,i}$.

С помощью матричных преобразований матрица T представляется в виде:

$$\begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{i,i+1} - R_{i+1,i} \cdot T_{i+1,i}^{-1} \cdot R_{i,i+1} & T_{i+1,i}^{-1} \cdot R_{i+1,i} \\ T_{i+1,i}^{-1} \cdot R_{i,i+1} & T_{i+1,i}^{-1} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix} = \Gamma_i \cdot \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix}. \quad (19)$$

Распространение ЭМ-волны в инвариантном по координате z слое описывается в виде:

$$\begin{bmatrix} \hat{A}_i \\ \hat{B}_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_i^- & | & 0 \\ \hline 0 & | & D_i^+ \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix} = D_i \cdot \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix}, \quad (20)$$

где D_i^\pm - диагональная матрица

$$D_i^\pm = \begin{bmatrix} \exp(\pm i\beta_0 d_{i,i+1}) & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & & \exp(\pm i\beta_m d_{i,i+1}) & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & \exp(\pm i\beta_M d_{i,i+1}) \end{bmatrix} \quad (21)$$

Здесь β_m - константа распространения m -й моды.

Передаточная матрица T для всей структуры представляется в виде

$$T = \prod_{i=0}^M D_i \Gamma_i. \quad (22)$$

Так как матрица T , как правило, является сингулярной, то нахождение матрицы обратной к передаточной матрице T выполнялось методом декомпозиции сингулярного значения [8].

Можно показать [9], что для непоглощающих структур набор модовых функций (6) является полным. Кроме этого, модовые функции (6) являются ортогональными.

Коэффициенты $T_{i,j+1}$, $T_{i+1,i}$, $R_{i,j+1}$ и $R_{i+1,i}$ из выражений (18) находятся из условия непрерывности тангенциальных компонент n -й моды на границе между слоями i и $i+1$. Если n -я мода падает на границу между слоями i и $i+1$ из слоя i , то верны соотношения

$$\begin{aligned} \bar{E}_{i,n} + \sum_k R_{i,j+1}^{k,n} \bar{E}_{i,k} &= \sum_k T_{i,j+1}^{k,n} \bar{E}_{i+1,k} \\ \bar{H}_{i,n} - \sum_k R_{i,j+1}^{k,n} \bar{E}_{i,k} &= \sum_k T_{i,j+1}^{k,n} \bar{H}_{i+1,k} \end{aligned} \quad (23)$$

Используя свойство ортогональности модовых функций, можно получить соотношения для матриц $T^{i,j+1}$ и $R^{i,j+1}$, в которых каждый n -й столбец состоит из коэффициентов $T_{i,j+1}^{k,n}$ и $R_{i,j+1}^{k,n}$, соответственно

$$\begin{aligned} T^{i,j+1} &= 2 \left(\langle \bar{E}_{i,n}, \bar{H}_{i+1,k} \rangle + \langle \bar{E}_{i+1,n}, \bar{H}_{i,k} \rangle^T \right)^{-1} \\ R^{i,j+1} &= \frac{1}{2} \left(\langle \bar{E}_{i+1,n}, \bar{H}_{i,k} \rangle^T - \langle \bar{E}_{i,n}, \bar{H}_{i+1,k} \rangle \right) \cdot T^{i,j+1}, \end{aligned} \quad (24)$$

где

$$\langle \bar{E}_{i,n}, \bar{H}_{i+1,k} \rangle = \iint_S (\bar{E}_{i,n} \times \bar{H}_{i+1,k}) \cdot \bar{u}_z dS. \quad (25)$$

Здесь интегрирование ведется по поверхности, которая ограничивает исследуемую структуру. Для рассматриваемого нами двумерного случая вычисление интегралов (13) упрощается из-за того, что $\bar{E}_{i,n}$ и $\bar{H}_{i,k}$ являются скалярами и выражаются простыми соотношениями типа (8).

Для того, чтобы загасить паразитные отражения от границ расчетной области в данной работе использовался метод PML (Perfectly Matched Layers) первоначально предложенный в [10]. Для реализации метода PML была выбрана его интерпретация, при которой гасящий слой имеет комплексную толщину [11]:

$$\hat{x} = \int_0^x f(\tilde{x}) d\tilde{x}, \quad (26)$$

где $f(x)$ выбрана в виде:

$$f(x) = \begin{cases} 1+ib, & \text{если } x \in PML \\ 1, & \text{иначе} \end{cases}, \quad (27)$$

здесь b - параметр регулирующий, наряду с толщиной PML, уровень гашения паразитных отражений.

При использовании PML корни дисперсионного уравнения (12) становятся комплексными. Для поиска комплексных корней уравнения (12) использовался метод спуска, описанный в статье [12].

Анализ метода вычислений

Таким образом, оптическое моделирование фотонного кристалла, выполненное в данной работе, включает следующие этапы:

1. Разбиение расчетной зоны, соответствующей исследуемой диэлектрической

структуре, на слои, перпендикулярные направлению распространения света.

2. Вычисление констант распространения модовых функций в каждом слое. Для этого необходимо найти корни дисперсионного уравнения.

3. Вычисление передаточной матрицы, соответствующей исследуемой диэлектрической структуре. Для этого используется сшивка разложения ЭМ поля по модовым функциям на границах слоев.

4. Расчет ЭМ поля внутри исследуемой структуры, используя передаточную матрицу и коэффициенты разложения падающего ЭМ поля по модовым функциям.

Описанный метод численного решения уравнений Максвелла можно отнести к "гибридным" методам, если пользоваться классификацией, приведенной в начале статьи. В публикациях [13, 14] авторов данной работы использовался похожий метод численного решения уравнений Максвелла для моделирования дифракционного оптического элемента (ДОЭ). Тем не менее, схожесть этих методов ограничивается первым этапом из вышеприведенного списка. В работах [13, 14] использовалось разложение ЭМ поля по плоским волнам, а не по модовым функциям. В общем случае, использование модовых функций позволяет сократить количество коэффициентов разложения ЭМ поля, не снижая точности представления. Чтобы рассчитать прохождение ЭМ поля через слой диэлектрика, в работах [13, 14] решалась система дифференциальных уравнений, для чего использовались или метод экспоненциальной матрицы в двумерном случае или метод Рунге-Кутты в трехмерном. При разложении ЭМ поля по модовым функциям расчет прохождения ЭМ поля через слой диэлектрика выполняется путем умножения каждого коэффициента разложения ЭМ поля на величину, постоянную для каждого слоя. Кроме этого, в работах [13, 14] не использовался метод "PML" для гашения паразитных отражений от границ расчетной области. Это препятствует точному моделированию исследуемой структуры в открытом простран-

стве. Отметим, что выполненное в данной работе моделирование работы диэлектрической структуры в центре пересечения двух фотоннокристаллических волноводов можно интерпретировать как исследование ДОЭ, квантованного по 34 уровням.

Результаты численного моделирования

В численном эксперименте рассчитывалось ЭМ поле в двумерной диэлектрической структуре, представленной на рис.2. Стержни состоят из материала GaAs с коэффициентом преломления $n = 3,4$. Период структуры связан с диаметром стержня соотношением $d/a = 1/4$. Известно [2], что данная структура имеет "запретную зону" в частотном диапазоне для ТЕ-поляризации.

На рис.3 показано распределение компоненты E_x вектора электрического поля в пересечении двух волноводов со следующими параметрами: $a = 0,6$ мкм, $d = 0,15$ мкм, $r=0$, $l = 1,5$ мкм. Размеры расчетной зоны без использования PML 6,6 мкм на 4,8 мкм, с использованием PML 6,6 мкм на 8,8 мкм. Использовалось разложение ЭМ поля по 60 модовым функциям. Слева на рис.3 показано распределение в случае металлических стенок, справа – со слоем PML толщиной 4 мкм, с параметром $b = 0,1$. Визуализируемая область в обоих случаях имеет размеры 6,6 мкм на 4,8 мкм. Время расчета ЭМ поля в каждом случае составило около минуты на компьютере с процессором Pentium III 800МГц.

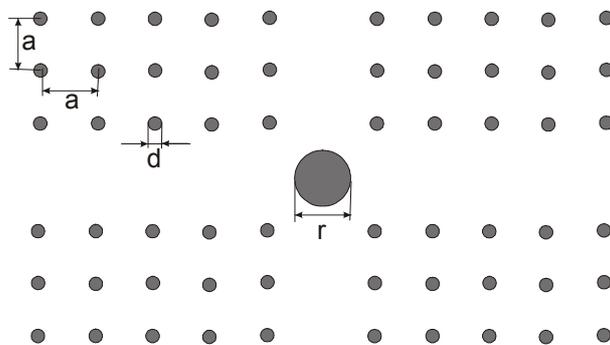


Рис.2. Пересечение двух волноводов в двумерном фотонном кристалле

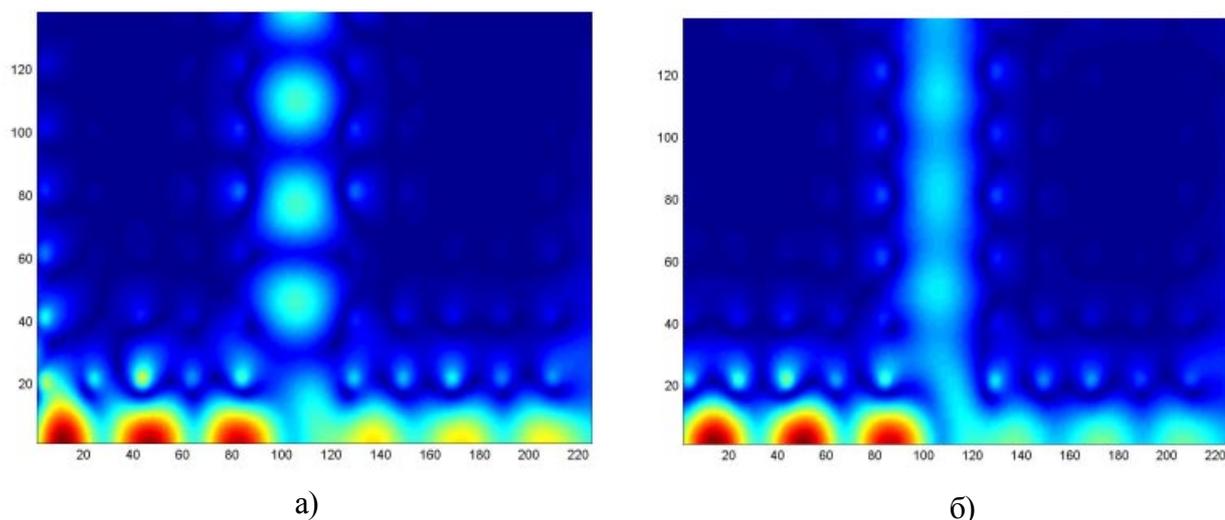


Рис.3. Распределение электрического поля в отсутствие неоднородности в центре пересечения волноводов с идеально отражающими стенками (а) и при использовании PML (б)

На рис.4 показано распределение компоненты E_x вектора электрического поля при различных значениях r . Диэлектрическая неоднородность в центре пересечения ФКВ была разбита на 34 слоя, одинаковых по толщине

и перпендикулярных направлению распространения волны. Для $r = 2,5a$ количество прошедшей энергии составило 97%, для $r = 2,7a$ - 81%, для $r = 2,9a$ - 35%, для $r = 3,0a$ - 19%.

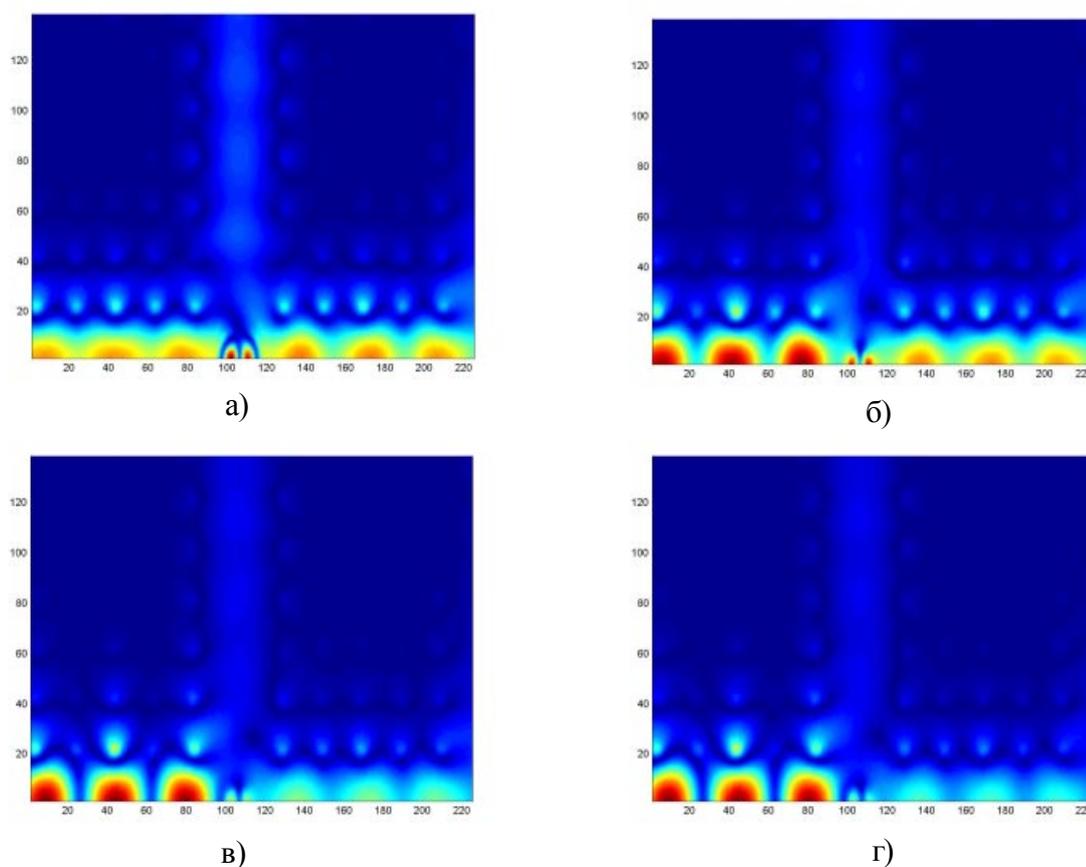


Рис.4. Распределение электрического поля с неоднородностью в центре пересечения волноводов; размер неоднородности (а) $r = 2,5a$, (б) $r = 2,7a$, (в) $r = 2,9a$, (г) $r = 3,0a$

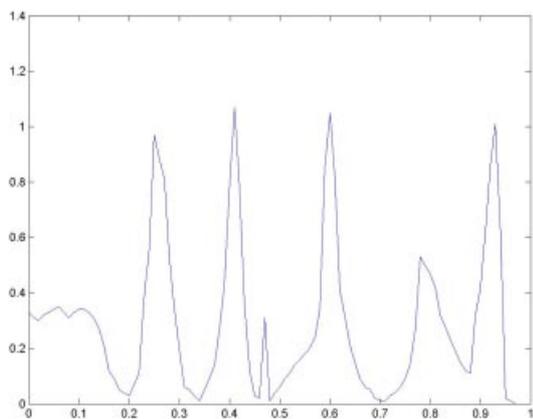


Рис.5. Зависимость количества прошедшей энергии от размера неоднородности

Отметим, что при всех значениях r утечка энергии в перекрестный волновод не превышает нескольких процентов. Эта особенность соответствует результату, полученному в [15], и может быть объяснена резонансной природой взаимодействия неоднородности в центре пересечения волноводов с ЭМ полем. При создании реального оптического устройства количество энергии, ушедшей в перекрестный волновод, является более важной характеристикой, чем количество энергии, прошедшей прямо, т.к. операция фильтрации сигнала является значительно более сложной, чем операция его усиления.

На рис.5 показана зависимость количества энергии, прошедшей через пересечение по горизонтальному волноводу, от размера неоднородности в центре пересечения волноводов. Размер неоднородности дан в относительных к периоду фотонного кристалла единицах.

Выводы

В данной работе показано, что использование метода передаточной матрицы для расчета электромагнитного поля в окрестности диэлектрической неоднородности, расположенной в пересечении двух фотоннокристаллических волноводов, позволяет получать достоверные результаты. Данные результаты соответствуют результатам, полученным в [15] с помощью метода конечных разностей, который требует значительно больших затрат

машинного времени по сравнению с методом передаточной матрицы.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке Министерства образования РФ, Администрации Самарской области и Американского фонда гражданских исследований и развития (CRDF Project SA-014-02) в рамках российско-американской программы "Фундаментальные исследования и высшее образование" (BRHE) и федеральной целевой программы "Интеграция", а также Российского фонда фундаментальных исследования (гранты № 01-01-00097, 00-15-96114).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Yablonovitch E.* Inhibited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Electronics // *Phys. Rev. Lett.* 1987. Vol.58.
2. *Joannopoulos J.D., Meade R.D., Winn J.N.* Photonic crystals: molding the flow of the light. Princeton University Press, 1995.
3. *Johnson S.G., Joannopoulos J.D.* Block-iterative frequency-domain methods for Maxwell's equations in plainwave basis // *Optics Express.* 2001. Vol.8. №3.
4. *Elson J.M., Tran P.* Dispersion in photonic media and diffraction from gratings: a different modal expansion for the R-matrix propagation technique // *J. Opt. Soc. Am., A.* 1995. Vol.12.
5. *Борн М., Вольф Э.* Основы оптики. М.: Наука, 1973.
6. *Ashcroft N.W., Mermin N.D.* Solid State Physics, chap. 8, p. 132ff. (Saunders College, Philadelphia, 1976), International edn.
7. *Беляков В.А.* Дифракционная оптика периодических сред сложной структуры, Москва.: Наука, 1988.
8. *Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P.* Numerical recipes in C: the art of scientific computing. Cambridge: Cambridge University Press, 1993.
9. *Sagan H.* Boundary and eigenvalue problems in mathematical physics. New York: Dover Publications Inc., 1989.
10. *Berenger J.P.* A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves // *Journ. Comput. Phys.*, 1994. Vol.114. №1.
11. *Chew W.C., Weedon W.H.* A 3D perfectly matched medium from modified Maxwell'

- equations with stretched coordinates // *Microwave Opt. Technol. Lett.* 1994. Vol.7. №13.
12. *Schlereth K., Tacke M.* The complex propagation constant of multilayer waveguides // *IEEE J. Quantum. Electron.* 1990. Vol.26. №4.
13. *Харитонов С.И., Серафимович П.Г.* Асимптотические методы расчета поля, формируемого ДОЭ в рамках электромагнитной теории // *Компьютерная оптика.* 1999. №19.
14. *Волотовский С.Г., Серафимович П.Г., Харитонов С.И.* Решение уравнений Максвелла в пространственно-частотном представлении // *Компьютерная оптика.* 2000. №20.
15. *Johnson et al.* Optical Waveguide Crossings // US Patent №: 6,198,860 B1. Mar. 6. 2001.

COMPUTING THE OPTIMAL COUPLING OF PHOTONIC CRYSTAL WAVEGUIDES USING A TRANSMISSION MATRIX METHOD

© 2002 N.L. Kazanskiy¹, P.G. Seraphimovich¹, S.I. Kharitonov²

¹Image Processing Systems Institute of Russian Academy of Sciences, Samara

²Samara State Aerospace University

The electromagnetic field distribution at the coupling of two photonic crystal waveguides (PCW) is computed. By introducing an electric nonhomogeneity at the center of the PCW crosstalking is minimized. The transmission matrix method (TMM) employed in this work is shown to be suitable for evaluating the losses suffered at the PCW coupling. Compared with other methods for calculating the electromagnetic field, the use of the TMM essentially reduces the computation time.

ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СОБСТВЕННЫХ ВОЛН МНОГОПРОВОДНОЙ ПОЛОСКОВОЙ ЛИНИИ ПЕРЕДАЧИ

© 2002 А.С. Арефьев, В.А. Неганов

Поволжская государственная академия телекоммуникаций
и информатики, г. Самара

Проведено обобщение метода частичного обращения оператора на случай экранированной многопроводной полосковой линии передачи. Представлены результаты исследования фазовых и групповых скоростей, а также распределения полей собственных волн направляющей структуры.

Введение

Краевые задачи для ряда направляющих структур СВЧ и КВЧ диапазонов могут быть сформулированы в виде векторных интегральных уравнений первого рода. Элементы ядер таких уравнений представляют собой бесконечные ряды и содержат в неявном виде логарифмические особенности и сингулярности Коши. Применение к такому уравнению проекционной схемы требует усечения рядов в ядре. Последнее означает замену сингулярного ядра ограниченной функцией. Но, как известно, решение интегрального уравнения первого рода с ограниченным ядром представляет собой некорректно поставленную задачу [1]. В результате, приближённое решение приобретает неустойчивость и проявляет относительную сходимость [2].

Эффективный путь преодоления указанных трудностей заключается в переходе к уравнению второго рода на основе процедуры частичного обращения исходного интегрального оператора. С помощью данной методики было решено большое количество краевых задач прикладной электродинамики, допускающих формулировку в виде интегральных уравнений, определённых на единичных интервалах [3]. В [4] метод частичного обращения оператора был обобщён на случай направляющей структуры с несколькими щелями.

Настоящая работа посвящена исследованию экранированной многопроводной полосковой линии передачи (ЭМПЛ), поперечное сечение которой изображено на рис.1. На границу диэлектрических слоёв 1 и 2 нанесено произвольное количество бесконечно

тонких идеально проводящих полосок. Направляющая структура помещена в прямоугольный экран. Потери в экране и средах заполнения считаются пренебрежимо малыми.

Интегральное уравнение первого рода

Задача о собственных волнах ЭМПЛ может быть сформулирована в виде векторного интегрального уравнения первого рода [3]

$$\int_X \vec{K}(x, x') \vec{J}(x') dx' = 0, \quad (x \in X). \quad (1)$$

Здесь X – совокупность интервалов оси x , соответствующих металлизированным участкам границы областей 1 и 2 (рис.1)

$$X = \bigcup_{j=1}^L X_j, \quad X_j = (x_{j1}, x_{j2})$$

Вектор \vec{J} содержит искомые компоненты плотности поверхностного тока на полосках J_z, J_x

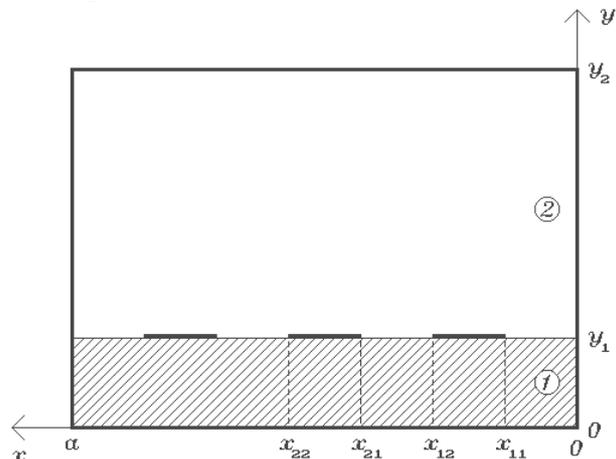


Рис.1. Поперечное сечение ЭМПЛ

$$\tilde{J} = \left(J_z(x), -\frac{a}{\pi} J'_x(x) \right)^T.$$

Штрих при J_x означает производную по аргументу. Элементы ядра представляют собой тригонометрические ряды:

$$\begin{aligned} K_{11} &= \frac{2}{a} \sum_{m=1}^{\infty} Z_{m11} \sin \beta_m x \sin \beta_m x', \\ K_{12} &= \frac{2}{a} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m} Z_{m12} \sin \beta_m x \sin \beta_m x', \\ K_{21} &= \frac{2}{a} \sum_{m=1}^{\infty} Z_{m21} \cos \beta_m x \sin \beta_m x', \\ K_{22} &= Z_{022} \beta_1 \frac{x'}{a} + \\ &+ \frac{2}{a} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m} Z_{m22} \cos \beta_m x \sin \beta_m x', \end{aligned} \quad (2)$$

где $\beta_m = \pi m / a$, Z_{mij} – элементы тензора импедансов, выражаемые через частоту колебаний, а также поперечные размеры и проницаемости диэлектрических слоёв 1,2 (рис.1).

Последовательности Z_{mij} удовлетворяют следующим предельным соотношениям:

$$\begin{aligned} \lim_{m \rightarrow \infty} (m Z_{m11}) &= r_{11}, & \lim_{m \rightarrow \infty} Z_{m12} &= r_{12}, \\ \lim_{m \rightarrow \infty} Z_{m21} &= r_{21}, & \lim_{m \rightarrow \infty} (m^{-1} Z_{m22}) &= r_{22}. \end{aligned}$$

Явный вид величин Z_{mij} , r_{ij} приведён в [3]. Подставляя в (2) вместо импедансов их асимптотики, приходим к выводу, что функции K_{ij} имеют особенности при $x = x'$. А именно

$$\begin{aligned} K_{1j} &\sim \frac{2}{a} r_{1j} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m} \sin \beta_m x \sin \beta_m x' = \\ &= \frac{1}{a} r_{1j} \ln \left| \frac{\sin(\beta_1(x'+x)/2)}{\sin(\beta_1(x'-x)/2)} \right|, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} K_{2j} &\sim \frac{2}{a} r_{2j} \sum_{m=1}^{\infty} \cos \beta_m x \sin \beta_m x' = \\ &= \frac{1}{a} r_{2j} \frac{\sin \beta_1 x'}{\cos \beta_1 x - \cos \beta_1 x'}, \\ &(j = 1, 2). \end{aligned}$$

Очевидно, что на множестве $X^2 \setminus \bigcup_{j=1}^L X_j^2$ элементы ядра ограничены. По-

этому сингулярные части функций K_{ij} можно представить в виде:

$$\begin{aligned} K_{1j}^{(s)} &= I(x, x') \frac{1}{a} r_{1j} \ln \left| \frac{\sin(\beta_1(x'+x)/2)}{\sin(\beta_1(x'-x)/2)} \right|, \\ K_{2j}^{(s)} &= I(x, x') \frac{1}{a} r_{2j} \frac{\sin \beta_1 x'}{\cos \beta_1 x - \cos \beta_1 x'}, \\ &(j = 1, 2), \end{aligned} \quad (3)$$

где $I(x, x')$ – индикатор множества $\bigcup_{j=1}^L X_j^2$

$$I(x, x') = \begin{cases} 1, & \left((x, x') \in \bigcup_{j=1}^L X_j^2 \right) \\ 0, & \left((x, x') \in X^2 \setminus \bigcup_{j=1}^L X_j^2 \right) \end{cases}$$

Введём функции:

$$\begin{aligned} \tilde{K}_{1j}^{(s)} &= -I(x, x') \frac{1}{a} r_{1j} \ln |2(\cos \beta_1 x' - \cos \beta_1 x)|, \\ \tilde{K}_{2j}^{(s)} &= I(x, x') \frac{1}{a} r_{2j} \frac{\sin \beta_1 x}{\cos \beta_1 x - \cos \beta_1 x'}, \\ &(j = 1, 2). \end{aligned}$$

На основании соотношений:

$$\begin{aligned} K_{1j}^{(s)} - \tilde{K}_{1j}^{(s)} &= I(x, x') \frac{2}{a} r_{1j} \ln \left| 2 \sin \beta_1 \frac{x'+x}{2} \right|, \\ K_{2j}^{(s)} - \tilde{K}_{2j}^{(s)} &= I(x, x') \frac{1}{a} r_{2j} \operatorname{ctg} \beta_1 \frac{x'+x}{2}, \\ &(j = 1, 2) \end{aligned}$$

можно сделать вывод, что элементы тензоров $\vec{K}^{(S)}$ и $\vec{\tilde{K}}^{(S)}$ имеют идентичные особенности.

Запишем интегральное уравнение (1) в виде

$$\int_X \left[\left(\vec{K}(x, x') - \vec{K}^{(S)}(x, x') \right) + \left(\vec{K}^{(S)}(x, x') - \vec{\tilde{K}}^{(S)}(x, x') \right) \right] \vec{J}(x') dx' = - \int_X \vec{\tilde{K}}^{(S)}(x, x') \vec{J}(x') dx', \quad (x \in X).$$

Выполняя замену переменных

$$v = \cos \beta_1 x, \quad v' = \cos \beta_1 x',$$

имеем

$$\int_V \vec{P}^{(R)}(v, v') \vec{j}(v') dv' = - \int_V \vec{P}^{(S)}(v, v') \vec{r} \vec{j}(v') dv', \quad (v \in V). \tag{4}$$

Областью определения последнего уравнения служит совокупность интервалов

$$V = \bigcup_{j=1}^L V_j, \quad V_j = (v_{j1}, v_{j2}), \\ v_{j1} = \cos \beta_1 x_{L+1-j,2}, \quad v_{j2} = \cos \beta_1 x_{L+1-j,1}.$$

Искомый вектор \vec{j} имеет вид

$$\vec{j}(v) = \frac{1}{\sqrt{1-v^2}} \left(\begin{array}{c} J_z \left(\frac{a}{\pi} \arccos v \right) \\ - \frac{a}{\pi} J'_x \left(\frac{a}{\pi} \arccos v \right) \end{array} \right)$$

Сингулярная $\vec{P}^{(S)}$ и регулярная $\vec{P}^{(R)}$ части ядра задаются соотношениями:

$$\vec{P}^{(S)}(v, v') = \frac{1}{\pi} \tilde{I}(v, v') \begin{pmatrix} \ln|v'-v| & 0 \\ 0 & (v'-v)^{-1} \end{pmatrix}$$

$$P_{1j}^{(R)} = - \frac{1}{\pi} \left(\tilde{I}(v, v') \left[r_{1j} \ln 2 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \Delta_{m1j} u_{m-1}(v) u_{m-1}(v') \right] \right) +$$

$$+ 2r_{1j} \ln \left(\sin \frac{\theta(v') + \theta(v)}{2} \right) + \left. \left(1 - \tilde{I}(v, v') \right) 2 \sum_{m=1}^{\infty} \tilde{\Delta}_{m1j} u_{m-1}(v) u_{m-1}(v') \right\}$$

$$P_{2j}^{(R)} = - \frac{1}{\pi} \left(Z_{022} \theta(v') \delta_{2j} + \tilde{I}(v, v') \times \left[2 \sum_{m=1}^{\infty} m \Delta_{m2j} t_m(v) u_{m-1}(v') + \frac{r_{2j}}{\sqrt{1-v^2}} \operatorname{ctg} \frac{\theta(v') + \theta(v)}{2} \right] + \left. \left(1 - \tilde{I}(v, v') \right) 2 \sum_{m=1}^{\infty} m \tilde{\Delta}_{m2j} t_m(v) u_{m-1}(v') \right\} \quad (j = 1, 2),$$

где δ_{2j} – символ Кронекера,

$$\tilde{I}(v, v') = \begin{cases} 1, & \left((v, v') \in \bigcup_{j=1}^L V_j^2 \right) \\ 0, & \left((v, v') \in V^2 \setminus \bigcup_{j=1}^L V_j^2 \right) \end{cases}$$

– индикатор множества $\bigcup_{j=1}^L V_j^2$,

$$\tilde{\Delta}_m = \frac{1}{m} \begin{pmatrix} m Z_{m11} & Z_{m12} \\ Z_{m21} & m^{-1} Z_{m22} \end{pmatrix}$$

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} \\ r_{21} & r_{22} \end{pmatrix}$$

$$\tilde{\Delta}_m = \tilde{\tilde{\Delta}}_m - m^{-1} \vec{r}, \quad \theta(v) = \arccos v,$$

функции t_m, u_m выражаются через многочлены Чебышёва первого T_m и второго U_m рода:

$$t_m(v) = \frac{1}{\sqrt{1-v^2}} T_m(v), \quad u_m(v) = \sqrt{1-v^2} U_m(v).$$

Обращение интегралов

Рассмотрим интеграл

$$\frac{1}{\pi} \int_V \tilde{I}(v, v') \frac{\varphi(v')}{v'-v} dv' = f(v), \quad (v \in V), \quad (5)$$

ядро которого содержит сингулярность Коши $(v'-v)^{-1}$. Будем предполагать, что функция $\varphi(v)$ удовлетворяет условию Гёльдера [5] внутри интервалов V_j и допускает интегрируемую бесконечность на их концах. Введём системы функций

$$T_n^{(j)}(v) = \begin{cases} T_n(a_j + b_j v), & (v \in V_j) \\ 0, & (v \in V \setminus V_j) \end{cases}$$

$$U_n^{(j)}(v) = \begin{cases} U_n(a_j + b_j v), & (v \in V_j) \\ 0, & (v \in V \setminus V_j) \end{cases}$$

определяемые через многочлены Чебышёва. Здесь величины a_j и b_j подобраны так, чтобы линейное преобразование

$$u_j = a_j + b_j v$$

переводило V_j в интервал $(-1 < u_j < 1)$:

$$a_j = -\frac{v_{j2} + v_{j1}}{v_{j2} - v_{j1}}, \quad b_j = \frac{2}{v_{j2} - v_{j1}},$$

$$(j = \overline{1, L})$$

Очевидно, что системы $T_n^{(j)}(v)$ и $U_n^{(j)}(v)$ ортогональны на множестве V с весовыми функциями $Q^{-1}(v)$ и $Q(v)$, соответственно, где

$$Q(v) = \sqrt{1 - (a_j + b_j v)^2}, \quad (v \in V_j), \quad (j = \overline{1, L})$$

Ядро интеграла (5) допускает следующее представление

$$\tilde{I}(v, v') \frac{1}{v'-v} = 2 \sum_{j=1}^L b_j \sum_{n=1}^{\infty} U_{n-1}^{(j)}(v) T_n^{(j)}(v'). \quad (6)$$

Умножая обе части (5) на $U_{n-1}^{(j)}(v) Q(v)$, $(j = \overline{1, L}; n = 1, 2, \dots)$ и интегрируя по V , находим

$$\frac{\pi}{2b_j} \varphi_n^{(j)} = \int_V f(v) U_{n-1}^{(j)}(v) Q(v) dv, \quad (7)$$

где

$$\varphi_n^{(j)} = \frac{2b_j}{\pi(1 + \delta_{0j})} \int_V \varphi(v) T_n^{(j)}(v) dv$$

– коэффициент Фурье в разложении

$$\varphi(v) = Q^{-1}(v) \sum_{j=1}^L \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n^{(j)} T_n^{(j)}(v). \quad (8)$$

Подставляя (7) в (8) и вновь учитывая соотношение (6), получаем следующую формулу обращения для интеграла $f(v)$

$$\varphi(v) = \frac{1}{Q(v)} \sum_{j=1}^L \varphi_0^{(j)} T_0^{(j)}(v) - \frac{1}{\pi Q(v)} \int_V \tilde{I}(v, v') \frac{Q(v')}{v'-v} f(v') dv', \quad (v \in V). \quad (9)$$

Рассмотрим интеграл с логарифмической особенностью

$$\frac{1}{\pi} \int_V \tilde{I}(v, v') \ln|v'-v| \varphi(v') dv' = g(v), \quad (v \in V). \quad (10)$$

Продифференцировав (10), получаем сингулярный интеграл вида

$$\frac{1}{\pi} \int_V \tilde{I}(v, v') \frac{\varphi(v')}{v'-v} dv' = -g'(v).$$

На основании формулы обращения (9), имеем

$$\varphi(v) = \frac{1}{Q(v)} \sum_{j=1}^L \varphi_0^{(j)} T_0^{(j)}(v) + \frac{1}{\pi Q(v)} \int_V \tilde{I}(v, v') \frac{Q(v')}{v'-v} g'(v') dv'. \quad (11)$$

Определим коэффициенты $\varphi_0^{(j)}$. Умно-

жим (10) на $T_0^{(j)}(v)Q^{-1}(v)$, ($j = \overline{1, L}$) и проинтегрируем. С учётом соотношения

$$\frac{1}{\pi} \int_V \tilde{T}(v, v') \ln|v'-v| T_0^{(j)}(v) \frac{dv}{Q(v)} = -\frac{\ln(2b_j)}{b_j}$$

находим

$$-\frac{\pi \ln(2b_j)}{b_j^2} \varphi_0^{(j)} = \int_V g(v) T_0^{(j)}(v) \frac{dv}{Q(v)}. \quad (12)$$

Подставляя (12) в (11), получаем формулу обращения для интеграла $g(v)$

$$\varphi(v) = \frac{1}{\pi Q(v)} \left[\int_V \tilde{T}(v, v') \frac{Q(v')}{v'-v} g'(v') dv' - \int_V \sum_{j=1}^L \frac{b_j^2}{\ln(2b_j)} T_0^{(j)}(v) T_0^{(j)}(v') g'(v') \frac{dv'}{Q(v')} \right], \quad (13)$$

$(v \in V).$

В результате применения формул обращения (9),(13) к интегралам с ядрами $P_{ij}^{(s)}$, равенство (4) преобразуется в интегральное уравнение второго рода. Для решения последнего может быть использован проекционный метод. При этом элементы вектора \vec{j} разлагаются в ряд по системе функций $T_n^{(j)}(v)Q^{-1}(v)$:

$$j_i(v) = Q^{-1}(v) \sum_{k=1}^L \sum_{n=i-1}^{\infty} j_{in}^{(k)} T_n^{(k)}(v), \quad (i = 1, 2). \quad (14)$$

Равенство нулю коэффициентов $j_{20}^{(k)}$ ($k = \overline{1, L}$) является следствием поведения поперечной составляющей плотности тока на рёбрах проводящих полосок

$$J_x(x_{k1}) = J_x(x_{k2}) = 0, \quad (k = \overline{1, L}).$$

Результаты расчётов

В дальнейшем положим $L = 2$ рассматривая экранированную двухпроводную полосковую линию передачи (ЭДПЛ). Числовые значения параметров направляющей структу-

ры выбирались следующим образом: $y/a = 0,1$; $y_2/a = 0,5$; $x_{11}/a = 0,35$; $x_{12}/a = 0,45$; $x_{21}/a = 0,5$; $x_{22}/a = 0,65$; проницаемости диэлектрических слоёв: $\epsilon^{(1)} = 10$, $\epsilon^{(2)} = \mu^{(1)} = \mu^{(2)} = 1$.

На рис.2 представлены зависимости фазовых (кривые P1, P2) и групповых (кривые G1, G2) скоростей основной и первой высшей волн ЭДПЛ от волнового числа свободного пространства $k = \omega/c$. Как следует из графиков, с увеличением частоты колебаний нормированные фазовые и групповые скорости обеих волн асимптотически приближаются к предельному значению

$$\frac{v}{c} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon^{(1)} \mu^{(1)}}} \approx 0,3162$$

соответствующему скорости распространения идеальной поперечной волны в среде с проницаемостями $\epsilon^{(1)}$, $\mu^{(1)}$. Таким образом, предельные переходы $v_\phi \rightarrow v$, $v_{гр} \rightarrow v$ можно рассматривать как следствие увеличения увеличения относительной части энергии волны ЭДПЛ, сконцентрированной в области 1, имеющий более высокую оптическую плотность.

Следует отметить, что на некоторой частоте групповые скорости волн равны между собой. Предположим, в двухпроводной полосковой линии передачи возбуждается амплитудно-модулированный сигнал. При этом высокочастотное заполнение распро-

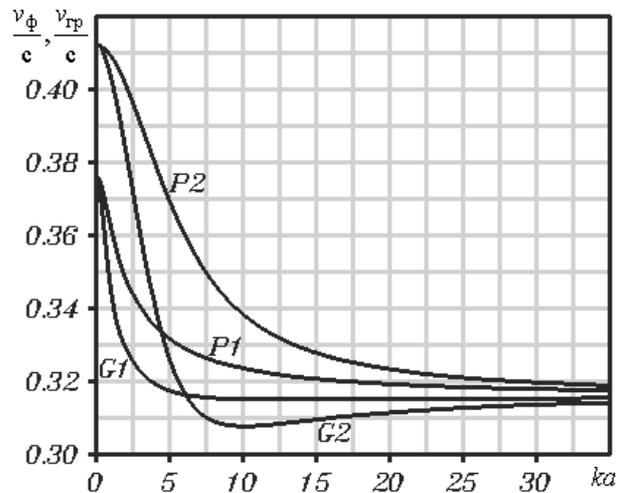


Рис.2. Зависимости фазовых и групповых скоростей волн ЭДПЛ от волнового числа (P1 – $v_{\phi,1}$; P2 – $v_{\phi,2}$; G1 – $v_{гр,1}$; G2 – $v_{гр,2}$)

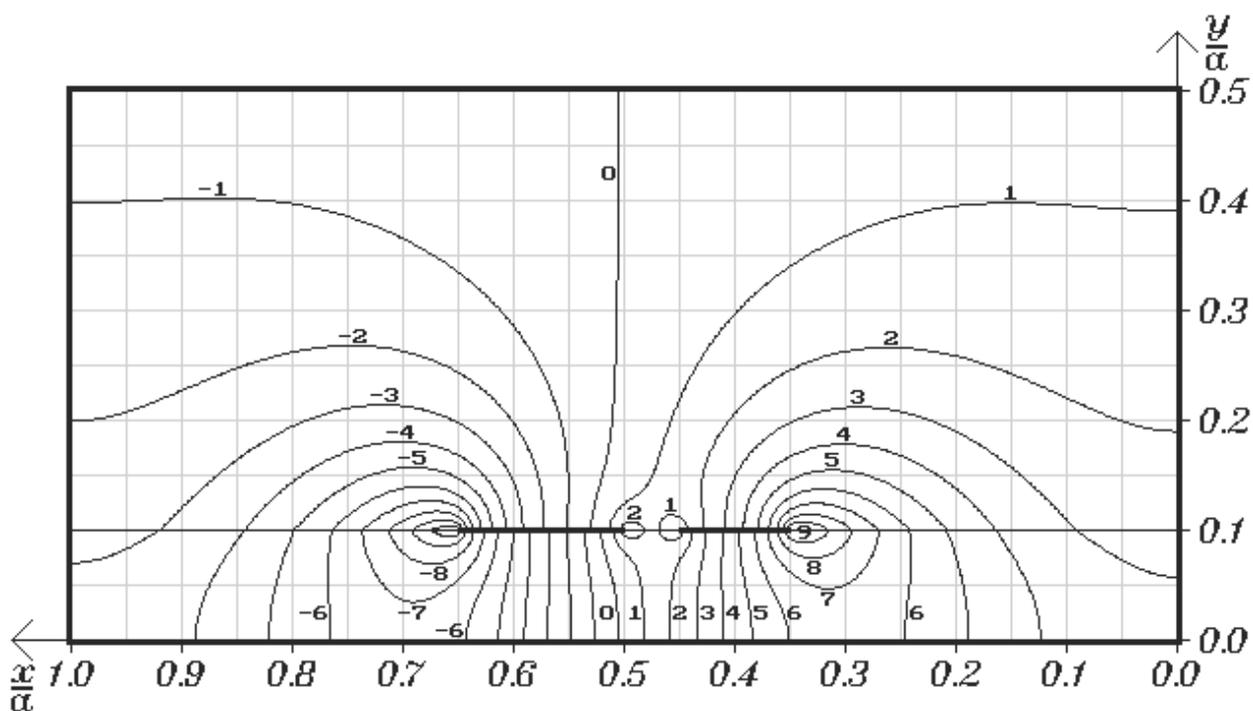


Рис.3. Распределение функции $H_z(x, y) / j_{10}^{(1)}$ для основной волны ЭДПЛ

транеется с фазовой скоростью рабочей волны. Если сигнал узкополосный, то можно приближённо считать, что огибающая переносится с групповой скоростью волны [6]. На любой частоте волны 1 и 2 будут одновременно возбуждаться в ЭДПЛ. Вследствие различия их групповых скоростей, на выходе

линии передачи огибающие сигналов, переносимых обеими волнами, окажутся сдвинутыми по фазе. Обусловленное этим искажение модулирующего сигнала можно исключить, выбрав частоту несущего заполнения вблизи абсциссы точки пересечения кривых G1 и G2.

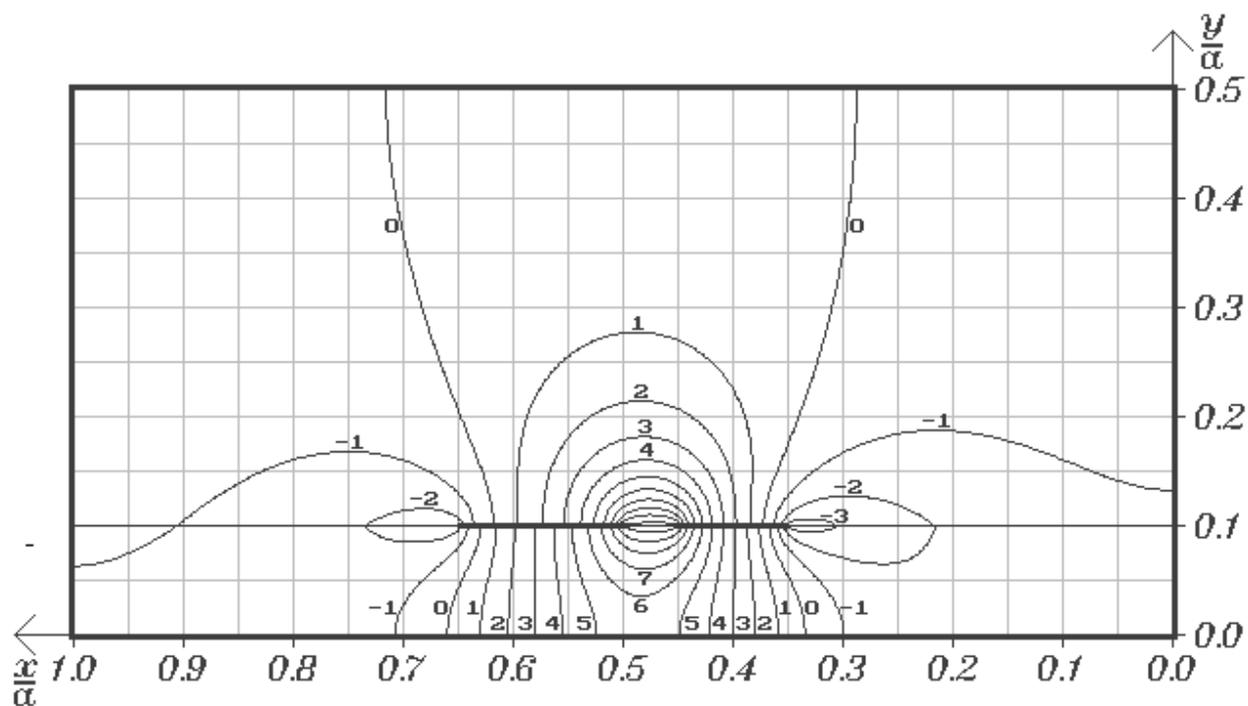


Рис.4. Распределение функции $H_z(x, y) / j_{10}^{(1)}$ для первой высшей волны ЭДПЛ

При построении графиков производилось усечение рядов (14) на слагаемых с индексами $n = N$, где $N = 2$. В каждом из элементов ядра интегрального уравнения второго рода учтено по $M = 28$ слагаемых. При этом абсолютные погрешности определения нормированных фазовых и групповых скоростей волн не превышали значения $\Delta v/c = 0,0004$.

На рис.3 и рис.4 представлены распределения комплексных амплитуд продольных составляющих напряжённости магнитного поля волн 1 и 2 в поперечном сечении ЭДПЛ. В качестве нормировочного множителя использован один из коэффициентов Фурье в разложениях (14). Предельные индексы суммирования выбирались равными $N = 2$, $M = 500$. Как видно, линии уровня, соответствующие максимальным значениям $|H_z|$, локализованы вблизи границы областей 1 и 2 (рис.1).

Заключение

Модификация метода частичного обращения оператора, предложенная в настоящей работе, может быть использована при решении задач дифракции волн на металлических решётках в однородно заполненном прямоугольном волноводе, а также при анализе па-

дения плоской электромагнитной волны на частично металлизированный диэлектрический стержень.

Работа выполнена при поддержке гранта ТОО – 2.4 – 2171 Министерства образования Российской Федерации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Верлань А.Ф., Сизиков В.С.* Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы: Справ. пособие / АН УССР, Ин-т пробл. моделирования в энергетике. Киев: Наукова думка, 1986.
2. *Миттра Р., Ли С.* Аналитические методы теории волноводов: Пер. с англ. / Под ред. Г. В. Воскресенского. М.: Мир, 1974.
3. *Неганов В.А., Нефедов Е.И., Яровой Г.П.* Полосково-щелевые структуры сверх- и крайневых частот. М.: Наука. Физматлит, 1996.
4. *Арефьев А.С., Коликов В.В., Неганов В.А.* Исследование собственных волн компланарной линии передачи с использованием метода частичного обращения оператора // Известия ВУЗов. Радиофизика. 2000. Т. 43. № 6.
5. *Гахов Ф.Д.* Краевые задачи. М.: Наука, 1977.
6. *Вайнштейн Л.А.* Электромагнитные волны. М.: Радио и связь, 1988.

THE ELECTRODYNAMIC ANALYSIS OF EIGEN WAVES OF STRIP TRANSMISSION LINE WITH SEVERAL CONDUCTORS

© 2002 A.S. Arefyev, V.A. Neganov

Volga State Academy of Telecommunications and Informatics, Samara

The extension of a partial inversion method on a strip transmission line with several conductors is implemented. The results of investigation of phase and group velocities and field distributions of eigen waves of that guiding structure are represented.

ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ БЕНЗИНОВ ПО СРАВНЕНИЮ С ИЗООКТАНОМ В ОБЛАСТИ 1090-1220 нм

© 2002 В.Г. Мурадов, Д.Г. Санников, Ю.Ю. Воронов, А.А. Широков

Ульяновское отделение Института радиотехники и электроники РАН

Выполнены экспериментальные исследования спектров поглощения бензинов разных марок (АИ-80, А-92, АИ-95) по сравнению с чистым углеводородом - изооктаном - в области инфракрасного диапазона длин волн $\lambda = (1090-1220)$ нм, где расположены вторые обертоны групп метила CH_3 , метилена CH_2 и ароматики CH . Полученные разностные спектры поглощения позволили четко выделить максимумы полос CH_3 , CH_2 и CH и обнаружить четвертый максимум, природа которого не установлена. Подтверждена связь октанового числа бензина с величиной поглощения.

Введение

В последнее время проводятся широкие исследования многокомпонентных жидкостей, в том числе бензинов, методом абсорбционной спектроскопии ближнего инфракрасного (БИК) диапазона (800-1250) нм [1-3]. Основное внимание уделяется прикладной стороне вопроса, в частности, определению октанового числа (ОЧ) бензина по величине измеренного поглощения при нескольких выбранных длинах волн (λ) с применением линейного регрессионного анализа [4].

В меньшей степени уделяется внимание исследованию структуры спектра поглощения в области $\lambda = (1100-1250)$ нм, где расположены основные полосы абсорбции 2-х обертонов колебательных частот групп CH_3 , CH_2 и CH . В [5] приведены колебательные спектры некоторых чистых углеводородов, в частности гексана и бензола, в области 1 и 2-го обертонов по сравнению с основным спектром для интервала (1000-3000) нм.

Абсорбционные спектры бензинов разных марок и трех чистых углеводородов (н-гептана, бензола, изооктана) представлены в [1]. Их анализ показывает, что авторам [1] удалось изучить сравнительно слабые полосы углеводородных групп 3-го обертона (величина поглощения порядка 0,1), а более сильные полосы CH , CH_2 и CH_3 (примерно в 5 раз) 2-го обертона оказались неразрешенными. По-видимому, это связано с использованием в [1] кремниевого детектора, чувствительность которого минимальна вблизи $\lambda=1150$ нм. К сожалению, авторы [2, 3] ре-

родуцируют спектры бензинов из [1].

Таким образом, следует признать, что колебательные спектры поглощения групп CH , CH_2 , CH_3 в области 2-го обертона изучены недостаточно полно.

В представленной работе описана экспериментальная установка и результаты проведенных на ней исследований спектров поглощения чистого изооктана и трех бензинов разных марок по ОЧ (АИ-80, А-92, АИ-95) в области (1090-1220)нм, где расположены абсорбционные полосы 2-го обертона указанных углеводородных групп.

Эксперимент

Для решения поставленной задачи создана экспериментальная установка, блок-схема которой представлена на рис. 1. Она включает источник неселективного излучения (лампа накаливания мощностью 4,8 Вт) (1), фокусирующую линзу (2) для создания параллельного светового пучка.

Исследуемое вещество заливалось в плоскопараллельную кювету (3) длиной $L = 0,5$ см. Световой пучок через отсекающий фильтр ИКС-6 (4) попадал на входную щель S_1 монохроматора МДР-3 (5). Применялась дифракционная решетка 600 штр/мм. Поэтому применение фильтра ИКС-6 с областью прозрачности длин волн более 1000 нм позволяло устранить наложение дифракционных максимумов 2-го порядка, соответствующих области (400-650) нм, на исследуемую область (1090-1220) нм.

За выходной щелью S_2 монохроматора

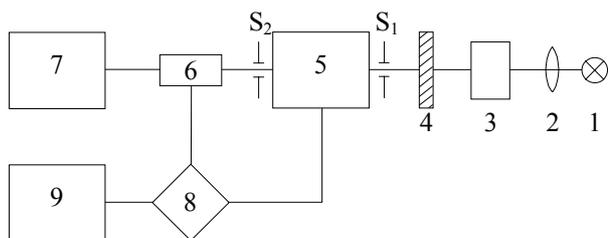


Рис.1. Блок-схема экспериментальной установки

размещалась фотоэлектрическая приставка с фотоэлектронным умножителем (6) ФЭУ-112, который питался от стабилизированного выпрямителя ВС-22 (7). Электрический сигнал от ФЭУ поступает в блок автоматизации (8) [6]. Последний содержит устройство синхронного запуска развертки монохроматора [7] и сопрягается с системным блоком (9) обработки информации и питания лампы накаливания. Блок (9) связан с ЭВМ, с помощью которой по специализированным программам проводилась обработка всей записанной информации.

Основные измерения спектров поглощения бензинов и изооктана проведены со щелями величиной $S_1 = 0,15$ и $S_2 = 4,00$ мм, т.е. по методу широкой щели [8], что обеспечивало хорошее соотношение сигнал/шум. Для выяснения возможной тонкой структуры полос поглощения проведены контрольные эксперименты с одинаковыми по величине щелями монохроматора $S_1 = S_2 = 0,15$ мм, которые показали отсутствие тонкой (вращательной) структуры исследованных молекулярных спектров.

При напряжении питания ФЭУ 1260В темновой ток составлял (25-40) мА.

Скорость сканирования спектра в диапазоне (1090-1220) нм выбиралась так, что общее время записи составляло порядка 4 мин. Это обеспечивало незначительное искажение записи абсорбционного спектра. Предварительно выполнена калибровка шкалы длин волн монохроматора с использованием излучения гелий-неонового лазера ЛГН-113 в области БИК-диапазона. Полученное значение $\lambda_{Ne} = (1152,4 \pm 0,1)$ нм хорошо согласуется со справочными данными [9] ($\lambda = 1152,3$ нм).

В выбранном диапазоне длин волн спектр фиксировался в 2800 точках. В даль-

нейшем каждые 50 точек сканирования давали усредненный сигнал.

Для исследования использованы химически чистый изооктан (C_8H_{18}) и промышленные бензины трех марок АИ-80, А-92, АИ-95 с паспортизованными данными.

Методика и результаты

Первоначально использована классическая методика расчета спектров поглощения [10], когда измерения проводятся с исследуемой жидкостью в оптической кювете (I) и с пустой ячейкой (I_0). Полученные данные обрабатывались на основе закона Ламберта-Бугера и определялся коэффициент поглощения K (cm^{-1}) вместо безразмерной величины поглощения $A = lg(I_0/I)$. Полученные таким способом абсорбционные спектры изооктана и трех бензинов представлены на рис.2 в интервале (1130-1220) нм. Их анализ показывает, что четко фиксируется максимум полосы поглощения группы CH_3 , в области (1193-1195) нм, которая сильно перекрывается с полосой группы CH_2 , максимум которой скрытно расположен в интервале (1208-1210) нм. Пик полосы CH расположен в области (1148-1154) нм, который в отличие от максимума полосы CH_3 существенно меняет свое положение в зависимости от ОЧ бензина и значительно отличается для изооктана.

С целью выявить более четко структуру

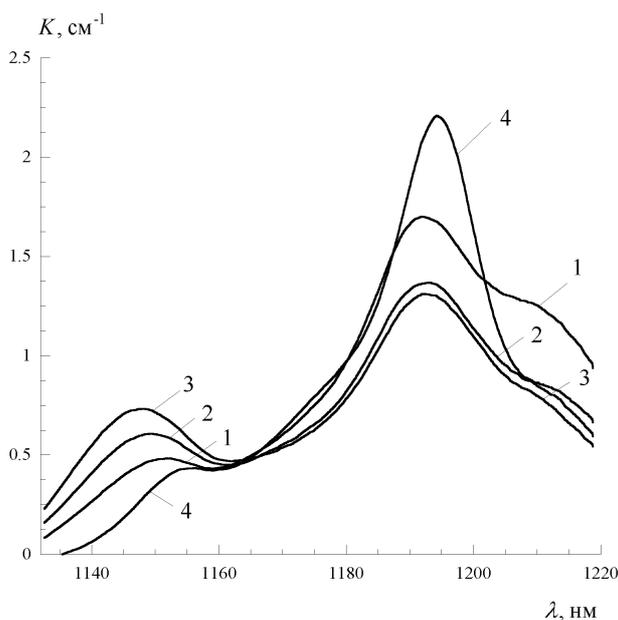


Рис.2. Спектральные зависимости коэффициентов поглощения изооктана (4) и бензинов: (1) – АИ-80, (2) – А-92, (3) – АИ-95

абсорбционных спектров, выбран метод получения разностных спектров бензинов по сравнению с изооктаном. В этом случае измерения последовательно проводились вначале с кюветой, наполненной изооктаном (I_{is}), а затем с той же кюветой, заполненной исследуемым бензином I_b . Расчет проводился по формуле

$$\Delta K = K_b - K_{is} = \frac{1}{L} \ln \frac{I_{is}}{I_b}$$

На рис.3 представлены разностные спектры, полученные усреднением по 6-ти экспериментальным кривым, измеренным в течение 3-х дней. Стандартная ошибка усреднения не превышала $0,05 \text{ см}^{-1}$.

Для устранения недостатков одноканального спектрофотометра использована нормировка на величину поглощения исследуемого вещества при $\lambda=1100 \text{ нм}$. Выбор её определялся условием, что в интервале (1050-1100) нм абсорбция изооктана и бензинов в пределах погрешности одинакова, и её можно принять за ноль отсчета.

Анализ кривых разных марок бензинов рис.3 позволяет более четко зафиксировать максимумы поглощения всех трех групп связей С-Н и обнаружить еще один максимум на кривой бензина марки АИ-80 при $\lambda = 1171,6 \text{ нм}$, который имеется и на кривых бензинов других марок, но в скрытом виде. Можно

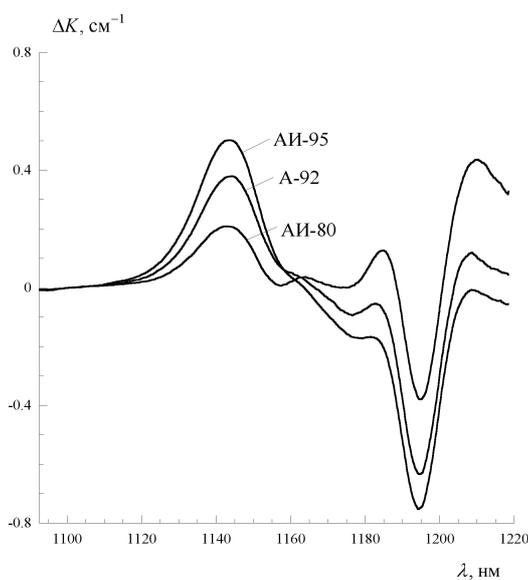
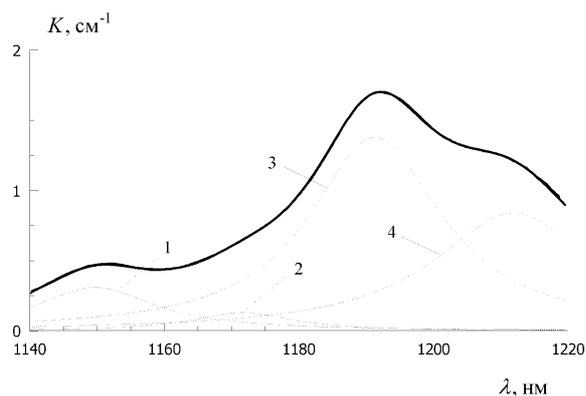


Рис.3. Спектральные зависимости разности коэффициентов поглощения бензина и изооктана для всех исследуемых бензинов

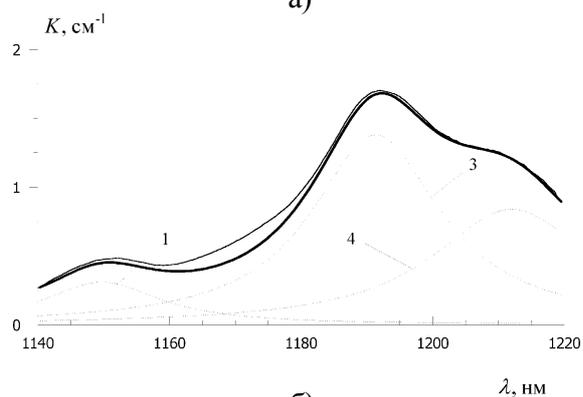
предположить, что этот пик связан с одной из комбинационных частот углеводородных групп, что требует дальнейших исследований.

Косвенным подтверждением существования максимума четвертой полосы связей С-Н в исследованном интервале длин волн может служить проведенное сравнение экспериментального контура абсорбционного спектра бензина АИ-80 с теоретически рассчитанным в предположении Лоренцевской формы трех и четырех полос поглощения с учетом их перекрытия (рис.4). Наилучшее согласие эксперимента с теоретическими расчетами получилось только при использовании четвертой полосы поглощения (рис.4а). Оценка ширины полос поглощения приводит к ширине $\Delta\lambda = (15-30 \text{ нм})$, которая включает в себя инструментальный контур.

Попытка применить другую форму по-



а)



б)

Рис.4. Теоретические (жирная) и экспериментальные (тонкая линия) спектры поглощения бензина АИ-80 при учете трех (б) и четырех (а) полос поглощения, отдельно показанных на рисунке пунктиром:

- (1) - $\lambda=1149,7 \text{ нм}$, $\Delta\lambda=21,6 \text{ нм}$, $K=0,31 \text{ см}^{-1}$;
- (2) - $\lambda=1171,6 \text{ нм}$, $\Delta\lambda=18,39 \text{ нм}$, $K=0,13 \text{ см}^{-1}$;
- (3) - $\lambda=1191,3 \text{ нм}$, $\Delta\lambda=24 \text{ нм}$, $K=1,38 \text{ см}^{-1}$;
- (4) - $\lambda=1212 \text{ нм}$, $\Delta\lambda=29,5 \text{ нм}$, $K=0,84 \text{ см}^{-1}$

лос поглощения (доплеровскую или фойгтовскую) практически не повлияло на полученные результаты, чего можно было ожидать [10, 12].

Расчеты [13] также указывают на возможность существования комбинационной полосы поглощения в спектрах компонентов бензинов (алканы, нефтены).

Из рис.3 следует, что величины ΔK закономерно и однозначно зависят от марки бензина. Исследование связи продолжается и планируется изучить зависимость ΔK от ОЧ бензина.

Работа частично выполнена в рамках Федеральной целевой программы "Государственная поддержка интеграции высшего образования и фундаментальной науки", проект А-0066.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kelley J.J., Barlow C.H., Jinguji T.M., Calles J.B. Prediction of Jasoline Octane Numbers from Near-Infrared Spectral Feature in the Range 660-1215 nm // Analytical Chemistry. 1989. V.61. №4.
2. Королев В.Н., Маругин А.В., Цареградский В.Б. Метод определения детонационных характеристик нефтепродуктов на основе регрессионного анализа спектров поглощения в ближнем инфракрасном диапазоне // Журнал технической физики. 2000. Т.70. Вып.9.
3. Королев В.Н., Маругин А.В. Определение октанового числа топлива методом ИК спектроскопии // Журнал прикладной спектроскопии. 2000. Т.67. №2.
4. Себер Д. Линейный регрессионный анализ. М.: Мир, 1980.
5. Weyer L.G. Near-Infrared Spectroscopy of Organic Substances // Applied Spectroscopy Reviews. 1985. V.21. P.1.
6. Аксенов Д.Ю., Зарукин А.И., Зарукин Л.А. и др. Аппаратно-программный комплекс для измерения спектров оптических сигналов многокомпонентных жидкостей с выхода спектрофотометров и выхода ФЭУ монохроматора МДР-3 // Тезисы докладов школы-семинара. Ульяновск. 2000.
7. Зарукин А.И., Зиновьев В.В., Мурадов В.Г. Устройство синхронного запуска монохроматора МДР-3 // Тезисы докладов школы-семинара. Ульяновск. 2001.
8. Зайдель А.Н., Островская Г.В., Островский Ю.И. Техника и практика спектроскопии. М.: Наука, 1972.
9. Стриганов А.Р., Одинцова Г.А. Таблицы спектральных линий атомов и ионов. Справочник. М.: Энергоиздат, 1982.
10. Смит А. Прикладная ИК-спектроскопия. М.: Мир, 1982.
11. Грибов Л.А., Дементьев В.А. Моделирование колебательных спектров сложных соединений на ЭВМ. М.: Наука, 1989.
12. Грибов Л.А., Баранов В.И., Зеленцов Д.Ю. Электронно-колебательные спектры многоатомных молекул. М.: Наука, 1997.
13. Скворцов Б.В., Куляс М.О. Анализ процессов взаимодействия оптического излучения с углеводородной средой // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2001. Т.4.

INVESTIGATION OF PETROLEUM ABSORPTION SPECTRA WITH COMPARISON TO ISOCTANE IN THE RANGE 1090-1220 nm

© 2002 V.G. Muradov, D.G. Sannikov, Yu. Yu. Voronov, A.A. Shirokov

Ulyanovsk Branch of Institute of Radio Engineering and Electronics
of Russian Academy of Sciences

The experimental investigations of different types petroleums absorption spectra was carried out (AI-80, A-92, AI-95) with comparison to the pure hydrocarbon - isooctane for the infrared wavelength range 1090-1220 nm where second overtones methyl (CH_3), methylene (CH_2), aromatic (CH) groups are. The achieved differential spectra allow to select CH_3 , CH_2 and CH hand maximums reveal the forth maximum of unknown nature. The connection of petroleum octane number absorption magnitude is proved.

ИССЛЕДОВАНИЕ АНОДНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА $\text{Ag}(\text{Hg})/\text{Ag}_4\text{RbI}_5$

© 2002 Г.И. Остапенко

Ульяновское отделение Института радиотехники и электроники РАН

Методом потенциостатических импульсов исследовано электрохимическое поведение границы раздела $\text{Ag}(\text{Hg})/\text{Ag}_4\text{RbI}_5$. Выяснено, что скоростьопределяющей стадией электродной реакции является перенос электрона при плотности тока обмена 68 mA/cm^2 и коэффициенте переноса около 0,45. Из поляризационных исследований амальгамы серебра с различной концентрацией определен порядок электрохимической реакции окисления серебра. Сделано заключение, что при анодной поляризации ртуть ионизируется и внедряется в электролит вместе с серебром согласно эмпирическому уравнению: $15\text{Ag} + 85\text{Hg} - 100\text{e} = 15\text{Ag}^+ + 85\text{Hg}^+$. Из сравнения электрохимического поведения границ раздела $\text{Ag}(\text{Hg})/\text{Ag}_4\text{RbI}_5$ и $\text{Ag}/\text{Ag}_4\text{RbI}_5$ сделан вывод, что скорость анодного растворения серебра на границе раздела $\text{Ag}/\text{Ag}_4\text{RbI}_5$ лимитируется кристаллизационными эффектами.

Введение

Для оптимизации эксплуатационных характеристик различных электрохимических устройств с твердыми электролитами требуется тщательное исследование возможных электродных материалов. Поэтому было опубликовано достаточно много работ по кинетике серебряного электрода в контакте с низкотемпературным твердым электролитом Ag_4RbI_5 . Эти работы можно условно разделить на три группы. В одних работах утверждается, что скоростьопределяющей стадией электродного процесса является электрокристаллизация серебра [1, 2]. В других указывается, что электрокристаллизация не есть скорость определяющая стадия процесса [3, 4]. И, наконец, в некоторых работах утверждается, что для объяснения кинетических закономерностей нужно привлекать специальные теории для твердых электролитов [5]. Во всяком случае, до сих пор отсутствует единое мнение о природе скоростьопределяющей стадии на границе раздела $\text{Ag}/\text{Ag}_4\text{RbI}_5$.

В то же время известно, что на амальгамированных электродах кристаллизационные эффекты исключены [6]. В работах [7, 8] было показано, что скорость электрохимической реакции значительно возрастает на амальгамированном серебряном электроде в контакте с твердыми электролитами. Кажется логичным, что детальное исследование

амальгамированного серебряного электрода позволит внести большую ясность относительно скоростьопределяющей стадии электродной реакции на границе раздела $\text{Ag}/\text{Ag}_4\text{RbI}_5$.

В представленной работе импульсным потенциостатическим методом исследована кинетика амальгамированного серебряного электрода и амальгамы серебра в контакте с твердым электролитом Ag_4RbI_5 .

Эксперимент

Твердый электролит приготовлен по известному методу, описанному в [9].

Ячейки: $\text{Ag}(\text{Hg})/\text{Ag}_4\text{RbI}_5/\text{Ag}$ были приготовлены в атмосфере сухого воздуха (осушитель P_2O_5). Сначала давлением $2,2 \cdot 10^8 \text{ Па}$ прессовали таблетку Ag_4RbI_5 . Затем припрессовывали порошок серебра как противэлектрод. Диаметр ячейки составляет 12 мм и толщина слоя электролита - около 1 мм. Электрод сравнения из серебряной проволоки диаметром 0,2 мм впрессовывали в середину слоя электролита. Плоский амальгамированный серебряный электрод или амальгаму серебра помещали на слой электролита как рабочий электрод.

Концентрированную амальгаму серебра получали длительным выдерживанием металлического серебра в ртути. Концентрацию серебра в амальгаме снижали посредством

разбавления концентрированной амальгамы.

Поляризацию ячеек проводили через два часа после их изготовления. Импульсы потенциала подавали на ячейки посредством потенциостата П-5848 (Россия) при комнатной температуре. Потенциостатические отклики ток - время регистрировали с помощью запоминающего осциллографа С8-1 (Россия).

Результаты и дискуссия

Сразу после изготовления ячеек потенциал рабочего электрода медленно увеличивался в течение 1...2 часов до 0,08...0,1 В в зависимости от концентрации амальгамы. По-видимому, ртуть медленно химически взаимодействует с Ag_4RbI_5 [8]. Однако это не мешает протеканию тока через границу электрод/электролит.

Анодные потенциостатические отклики ток i – время t амальгмированного серебряного электрода показаны на рис.1 (Наклон фронта обусловлен быстродействием потенциостата). Видно, что ток не зависит от времени. Следовательно, скоростью определяющей стадией электродной реакции является перенос заряда. Вольт-амперная характеристика амальгмированного электрода (рис.2, кривая 1) соответствует уравнению для переноса заряда:

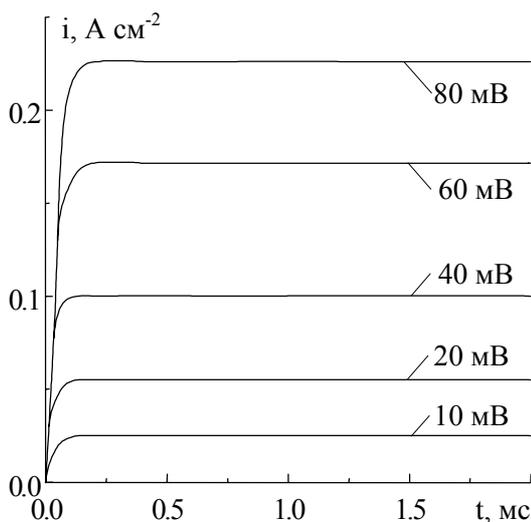


Рис.1. Потенциостатические отклики ток-время на границе раздела амальгмированный серебряный электрод / Ag_4RbI_5 при различных перенапряжениях η

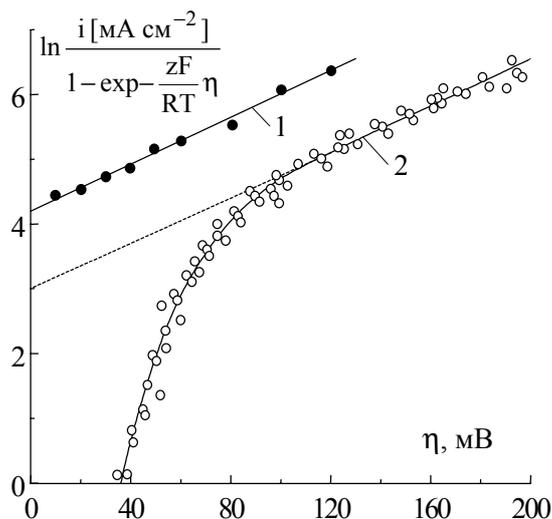


Рис.2. Вольт-амперные характеристики на границах раздела.
1 - амальгмированный серебряный электрод / Ag_4RbI_5 , 2 - Ag / Ag_4RbI_5 [2]

$$\ln \frac{i}{1 - \exp\left(-\frac{zF}{RT}\eta\right)} = \ln i_0 + \alpha \frac{zF}{RT}\eta \quad (1)$$

(где η – перенапряжение) при плотности тока обмена $i_0 = (68 \pm 5)$ $mA\ cm^{-2}$ и коэффициенте переноса α около 0,45.

Вольт-амперная характеристика границы раздела Ag/Ag_4RbI_5 показана на рис.2 (кривая 2) для сравнения. Эта характеристика получена согласно результатам аналогичных потенциостатических исследований [2] при временах переходов 0,5...2 мс. При этих временах нарушение контакта электрод/электролит вследствие образования пустот при электрохимическом растворении серебра практически не имеет места. Видно, что при перенапряжениях более 0,1 В эта характеристика описывается уравнением (1) для переноса заряда при $i_0 = (20 \pm 2)$ $mA\ cm^{-2}$ и $\alpha \approx 0,45$. Но при напряжениях менее 0,1 В вольт-амперная характеристика не соответствует уравнению (1). Следовательно, при этих перенапряжениях возникают именно кристаллизационные эффекты, т.к. на амальгмированном электроде такие эффекты не наблюдаются.

Проанализируем механизм влияния ртути на поведение серебряного электрода. Takahashi и другие [7] утверждают, что ртуть

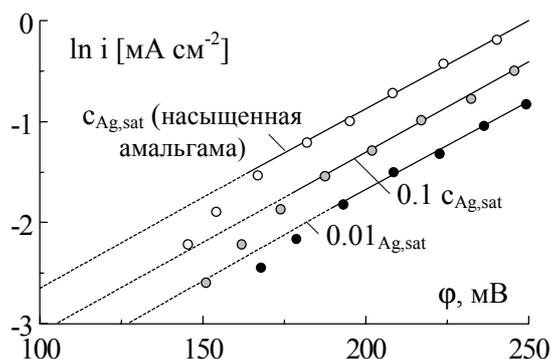


Рис.3. Вольт-амперные характеристики на границе раздела амальгама серебра / Ag_4RbI_5 при различной концентрации амальгамы

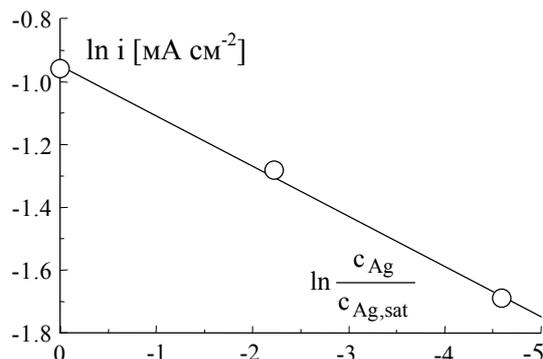


Рис.4. Зависимость тока (при $\phi = 200$ мВ) от концентрации амальгамы (из рис.3)

взаимодействует с междуузельными ионами серебра и этим устраняет скоростьопределяющую стадию их взаимодействия с вакансиями ионов серебра. Raleigh [10] предполагает улучшение микроконтакта на границе электрод/электролит при жидкой границе, что приводит к увеличению эффективной площади этой границы.

Для выяснения механизма влияния ртути мы предположили, что ртуть может взаимодействовать с Ag_4RbI_5 не только химически, но и электрохимически. Для проверки этого предположения также потенциостатическим методом было исследовано анодное поведение амальгамы серебра с различной концентрацией.

Анодные вольт-амперные характеристики амальгам серебра показаны на рис.3. Видно, что положение поляризационных кривых зависит от концентрации c_{Ag} амальгамы. Это дает возможность определить порядок электрохимической реакции окисления серебра [6]:

$$Z_{Ag} = \frac{\partial \ln i}{\partial \ln c_{Ag}} \quad \text{при} \quad \eta \gg \frac{RT}{zF}.$$

Зависимость $\ln i$ от $\ln c_{Ag}$ при потенциале $\phi = 200$ мВ показана на рис.4. Наклон этой прямой, т.е. Z_{Ag} , равен приблизительно 0,15. Для жидкого металлического электрода при единичной валентности переноса электрона, порядок электрохимической реакции равен стехиометрическому числу окисляющегося серебра. Следовательно, 0,15 атома серебра

требуется для переноса одного электрона через границу. Поэтому необходимо предположить, что недостаток заряда поставляется (предоставляется) атомами ртути в соответствии с эмпирическим уравнением:



Следовательно, при анодной поляризации границы раздела $Ag(Hg)/Ag_4RbI_5$, ртуть ионизируется и внедряется в электролит вместе с серебром.

Выводы

Скоростьюопределяющей стадией электродного процесса на границе раздела $Ag(Hg)/Ag_4RbI_5$ является перенос электронов. При анодной поляризации ртуть вместе с серебром ионизируется и внедряется в Ag_4RbI_5 .

На границе раздела Ag/Ag_4RbI_5 при перенапряжениях менее 0,1 В скорость анодного растворения серебра лимитируется кристаллизационными эффектами.

Закономерности исследованных электрохимических реакций хорошо соответствуют классическим уравнениям электрохимической кинетики и для описания реакции переноса электронов для твердых электролитов разработка специальных уравнений не требуется.

По-видимому эти выводы могут быть полезны при исследовании других твердофазных электрохимических реакций с участием металлических электродов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Armstrong R.D., Dickinson T., Willis P.M.* The anodic dissolution of silver onto silver rubidium iodide // *J.Electroanal.Chem.* 1974. V.57.
2. *Коломоец А.М., Остапенко Г.И.* Механизм анодного растворения серебра в твердом электролите Ag_4RbI_5 // *Электрохимия.* 1980. Т.16.
3. *Вершинин Н.Н., Укше Е.А.* Отклик твердотельной структуры $\text{Ag} - \text{Ag}_4\text{RbI}_5$ при воздействии потенциостатического импульса // *Электрохимия.* 1983. Т.19.
4. *Михайлова А.М.* Вольт-амперные характеристики серебряного электрода в твердых электролитах // *Электрохимия.* 1990. Т.26.
5. *Itskovich E.M., Kornyshev A.A., Vorotyntsev M.A.* Electric current across the metal – solid electrolyte interface // *Phys. Stat. Sol.(a).* 1977. V.39.
6. *Феттер К.* Электрохимическая кинетика. М.: Химия, 1967.
7. *Takahashi T., Yamamoto O.* Polarization of the solid – electrolyte cell $\text{Ag}/\text{Ag}_3\text{SI}/\text{I}_2$ // *Electrochim. Acta.* 1966. V.11.
8. *Scrosati B., Butherus A.D.* Electrochemical properties of Ag_4RbI_5 solid electrolyte // *J. Electrochem. Soc.* 1972. V.119.
9. *Owens B.B., Argue G.R.* High-conductivity solid electrolytes: Ag_4RbI_5 // *Science.* 1967. V.157.
10. *Raleigh D.O.* The interface between a solid electrolyte systems // in: Paper presented at the Electrochemical Society Meeting, Atlantic City. Oct.1970.

INVESTIGATION OF ANODIC POLARIZATION OF THE $\text{Ag}(\text{Hg})/\text{Ag}_4\text{RbI}_5$ INTERFACE

© 2002 G.I. Ostapenko

Ul'yanovsk Branch of Institute of Radio Engineering and Electronics
of Russian Academy of Sciences

The electrochemical behaviour of $\text{Ag}(\text{Hg})/\text{Ag}_4\text{RbI}_5$ interface is investigated by potentiostatic pulse method. It is found out, that the rate-determining step of electrode reaction is the electron transfer with the exchange current density of 68 mA cm^{-2} and the transfer coefficient of approximately 0,45. The order of electrochemical reaction of silver oxidizing is estimated from polarization investigations of silver amalgam with various concentration. From here it is deduced, that the quicksilver is ionized and is implanted in the electrolyte together with silver at anodic polarization: $15 \text{ Ag} + 85 \text{ Hg} - 100e = 15 \text{ Ag}^+ + 85 \text{ Hg}^+$. From comparison of electrochemical behaviour of $\text{Ag}(\text{Hg})/\text{Ag}_4\text{RbI}_5$ and $\text{Ag}/\text{Ag}_4\text{RbI}_5$ interfaces it is concluded, that the rate of anodic silver dissolution on $\text{Ag}/\text{Ag}_4\text{RbI}_5$ interface is limited by crystallization effects.

РАСЧЁТНАЯ ОЦЕНКА ТЕРМОДЕФОРМАЦИЙ ТРЁХСЛОЙНОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СТРУКТУРЫ

© 2002 А.М. Ходаков

Ульяновское отделение Института радиотехники и электроники РАН

Приведена математическая модель термодформационных полей, образующихся в трехслойных полупроводниковых структурах прямоугольной формы, при воздействии на внешний слой кристалла локально распределенной поверхностной тепловой нагрузки, которая возникает в результате неустойчивости однородного распределения тока и приводит к пробою полупроводниковой структуры. Найден алгоритм численного решения, представлены результаты расчетов и их сравнение с результатами эксперимента.

Степень надёжности работы микросхем, а также другой микроэлектронной аппаратуры зависит от её защиты по отношению к различному сорту воздействий (механических, радиационных, магнитных и т.д.). Как было показано в работе [1], механические напряжения в полупроводниковых структурах вызваны рядом причин, таких как: механические деформации, которые возникают при изготовлении аппаратуры; различие коэффициентов линейного расширения материалов элементов, из которых состоят изделия микроэлектроники; термонапряжения, появляющиеся в процессе функционирования микроэлектронной аппаратуры из-за неоднородности распределения температуры по объёму слоистой полупроводниковой структуры. Вообще говоря, последний вид напряжений появляется или вследствие неравномерного распределения температуры и её резкого локального роста (например, из-за неустойчивости тока по сечению эмиттера и стягивание его в шнур), или вследствие внешних связей, или при одновременном действии этих двух факторов. Так как влияние внешних связей хорошо известно [2], то ограничимся рассмотрением влияния неравномерного распределения температуры.

В работе [3] приведена расчётная математическая модель температурных полей, образующихся в трехслойных полупроводниковых структурах прямоугольной формы, при воздействии на внешний слой кристалла ло-

кально распределенной поверхностной тепловой нагрузки, которая возникает в результате неустойчивости однородного распределения тока и приводит к пробою полупроводниковой структуры. Там же проводилась оценка температурных полей от J поверхностных источников тепла, которые можно задать в виде

$$q(x, y, t) = \sum_{j=1}^J q_j(x, y) U_j(t), \quad (1)$$

где (индекс j опущен)

$$q(x, y) = \iint_{(\sigma \rightarrow 0)} q_0(\xi, \eta) \delta(x - \xi) \delta(y - \eta) d\xi d\eta; \quad (2)$$

$$U = \sum_{n=0}^{\infty} [u(t - n\tau - t_0) - u(t - \tau_u - n\tau - t_0)]; \quad (3)$$

$$q_0(\xi, \eta) = \frac{P_0(\xi, \eta)}{\pi r_0^2};$$

P_0 - тепловая мощность j -го источника; r_0 - радиус теплового пятна, получающегося от действия j -го источника; σ - площадь теплового пятна; $u(t)$ - единичная функция Хевисайда; τ - период последовательности импульсов; τ_u - длительность импульса; t_0 - время начала действия j -го источника; n - число импульсов.

При оценке термодформаций полупроводниковой структуры были сделаны следующие предположения:

а) распределение температур можно оп-

ределять без учета деформаций тела, то есть в уравнениях теплопроводности отсутствуют члены, учитывающие взаимосвязанность механической и тепловой энергий;

б) деформации малы, так что можно пренебречь различием между координатами частицы до и после деформации, и что градиенты перемещения достаточно малы, поэтому можно пренебречь их произведениями;

в) материал везде ведет себя как упругий, то есть изменения температуры и напряжений не очень велики;

г) гипотеза Кирхгофа - Лява относительно того, что деформированная нормаль к рассматриваемой поверхности остается прямолинейной и несжимаемой.

В этих предположениях основные уравнения термоупругости пластин будут выглядеть следующим образом

$$D_s \nabla^4 w = - \frac{1}{(1-\nu_s)} \nabla^2 M_{Ts}, \quad (4)$$

где $D_s = \frac{E_s t_s^3}{12(1-\nu_s^2)}$ - жесткость пластины на изгиб, отнесенная на единицу длины;

$M_{Ts} = \alpha_s E_s \int_{-t_s/2}^{t_s/2} T(z) z dz$; E_s - модуль Юнга; ν_s

- коэффициент Пуассона; $t_s = 1_{3s} - 1_{3(s-1)}$ - толщина пластины; α_s - коэффициент линейного температурного расширения; $s = 1, 2, 3$ - номер слоя.

Можно ввести приведенные коэффициенты [4]

$$\nu = \sum_{k=1}^3 \frac{E_k t_k \nu_k}{(1-\nu_k^2)} \left(\sum_{k=1}^3 \frac{E_k t_k}{(1-\nu_k^2)} \right)^{-1};$$

$$E = (1-\nu^2) t^{-1} \sum_{k=1}^3 \frac{E_k t_k}{(1-\nu_k^2)}; \quad t = \sum_{k=1}^3 t_k. \quad (5)$$

Были наложены следующие граничные условия: свободные боковые края всех пластин и внешняя верхняя поверхность первой пластины, остальные края принимались заземленными. Тогда можно записать по X:

$$1) D \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - \nu \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{M_T}{1-\nu} = 0;$$

$$D \left[\frac{\partial^3 w}{\partial x^3} + (1-\nu) \frac{\partial^3 w}{\partial x \partial y^2} \right] + \frac{1}{(1-\nu)} \frac{\partial M_T}{\partial x} = 0;$$

$$2) \frac{\partial w}{\partial x} = 0;$$

по Y: (6)

$$1) D \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} - \nu \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{M_T}{1-\nu} = 0;$$

$$D \left[\frac{\partial^3 w}{\partial y^3} + (1-\nu) \frac{\partial^3 w}{\partial y \partial x^2} \right] + \frac{1}{(1-\nu)} \frac{\partial M_T}{\partial y} = 0;$$

$$2) \frac{\partial w}{\partial y} = 0.$$

Начальное условие:

$$w(x, y, z, 0) = 0. \quad (7)$$

Так как нахождение аналитического решения задачи (4)-(7) представляет определённые трудности, то она решалась численными методами, причем конечно-разностные уравнения составлялись аналогично рассмотренной выше в работе [3] задачи распределе-

Таблица. Механические характеристики среды

Слой	E, ГПа	ν	$\alpha \cdot 10^{-6}, 1/K$	Толщина, м
Кристалл - Si	140	0,25	3	$0,45 \cdot 10^{-3}$
Припой - (Pb + Sn)	48	0,33	25	$0,05 \cdot 10^{-3}$
Кристаллодержатель - Cu	120	0,38	17	$1,5 \cdot 10^{-3}$

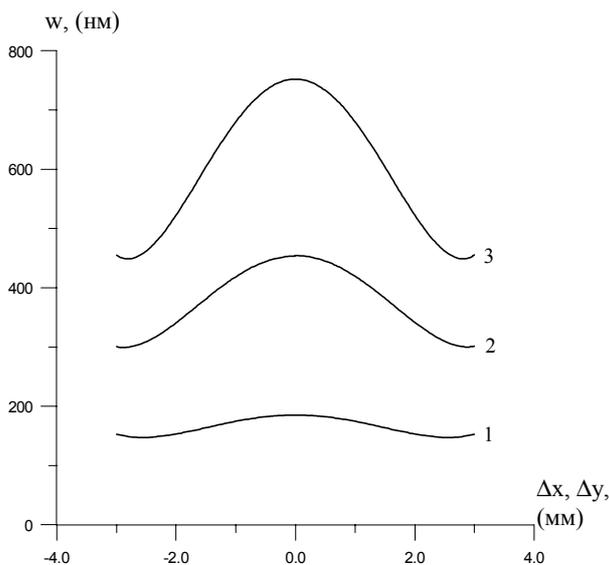


Рис.1. Распределение поперечных перемещений поверхности кристалла: $P=30\text{Вт}$; 1 – 50 мс, 2 – 300 мс, 3 – 500 мс

ния температур. Была разработана программа совместного расчёта температурных и термомодеформационных полей. Механические характеристики трёхслойной полупроводниковой среды (аналог мощного транзистора) приведены в таблице. Геометрические размеры в плоскости (XY) были равны $l_1=l_2=6 \cdot 10^{-3}$ м, число точек по этим осям равно 10, а по оси Z равнялось 45.

На рис.1 показано распределение по-

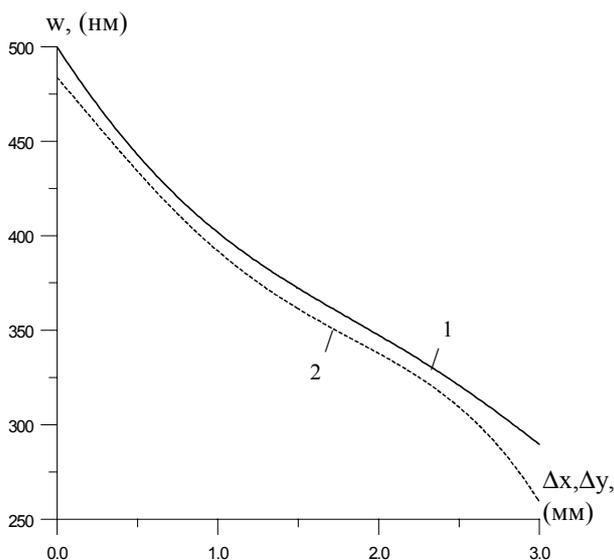
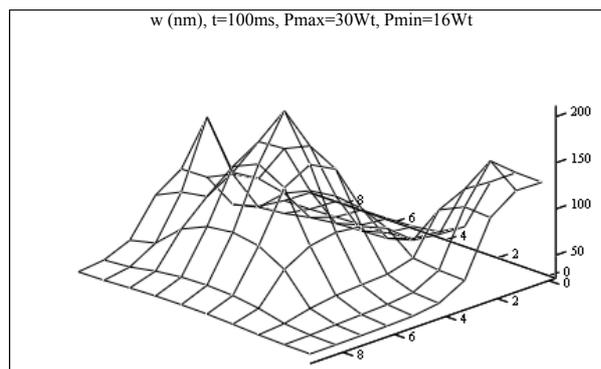


Рис.2. Зависимость поперечных перемещений поверхности кристалла от приближения механических характеристик слоёв: 1 – таблица 1, 2 – формула (5)



S

Рис.3. Профиль поверхности кристалла при действии трёх локальных источников тепла

перечных перемещений w в нанометрах поверхности кристалла ($z = 0$) в зависимости от времени при действии источника тепловой мощности $P=30$ Вт, длительность разогревающего импульса 500 мс. Результаты расчета удовлетворительно согласуются с экспериментом [5].

Было проведено сравнение расчётных значений w при использовании усреднённых механических характеристик по формуле (5). Результаты сравнения приведены на рис.2, на котором кривая 1 соответствует кривой 2 рис.1. Видно, что различие составляет в среднем порядка 5%.

На рис.3 представлен профиль поверхности кристалла при действии трёх локальных импульсных источников тепла за время 100 мс, мощности источников одного 30 Вт, двух других по 16 Вт.

Работа выполнена в рамках проекта ФЦП "Интеграция".

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Сергеев В.А.* Контроль качества мощных транзисторов по теплофизическим параметрам. Ульяновск: УлГТУ, 2000.
2. *Николаевский И.Ф., Изумнов Л.В.* Параметры и предельные режимы работы транзисторов. М.: Сов. радио, 1971.
3. *Ходаков А.М.* Распределение температуры в трёхслойной среде, при воздействии на неё локально распределённой поверхностной тепловой нагрузки // Известия Самарского научного центра РАН. Т.3.

2001. №1(5).
4. Григолюк Э.И., Чулков П.П. Устойчивость и колебания трехслойных оболочек. М.: Машиностроение, 1973.
5. Контроль термодформаций в элементах и устройствах электронного приборостроения методом теплового расширения / Алухов Е.А., Савельев А.И., Черторийский А.А., Широков А.А. // Актуальные проблемы электронного приборостроения: Сборник докл. Междунар. научн.-техн. конф. Ч.2. Саратов, 1996.

COMPUTATIONAL ESTIMATION OF THERMAL DEFORMATIONS IN THREE-LAYER SEMICONDUCTOR STRUCTURE

© 2002 A.M. Hodakov

Ul'yanovsk Branch of Institute of Radio Engineering and Electronics
of Russian Academy of Sciences

The mathematical model of thermal deformations formed in three-layers semiconductor structures of the rectangular shape is given at influence on exterior layer of a chip of the locally distributed surface thermal load, which results from instability of uniform distribution of a current and results in a break-down of semiconductor structure. The algorithm of the numerical decision is found and the results of the calculations and their comparison with results of experiment are presented.