

Untersuchungen zu stochastischen Abweichungen in periodischen Strukturen

Sven Backhove, Orkun Konc

Abstract—Es werden Untersuchungen zu stochastischen Abweichungen in periodischen Strukturen, wie einem Bragg-Spiegel und einem Fishnet-Metamaterial, vorgestellt. Dabei werden die Reflexion und Transmission, unter Schwankungen der Materialparameter, betrachtet. Zur Untersuchung wurden die Ergebnisse sowohl analytisch als auch numerisch bestimmt.

Index Terms—bragg-spiegel, fishnet-metamaterial.

I. EINLEITUNG

STOCHASTISCHE Untersuchungen sind ein Mittel um Abweichungen der Modellierung mit der Realität zu berücksichtigen. Vor allem bei periodischen Strukturen, wird durch eine Abweichung der Parameter, die Periodizität zerstört. Abb. 1 zeigt ein Fishnet-Metamaterial, links das Modell und rechts eine Aufnahme des gefertigten Materials. Es sind deutlich die Unterschiede zu erkennen (ausgefranzte Kanten, Rechtecke laufen keilförmig zu, die Oberfläche wirkt rau). Um die Wirklichkeit besser zu Modellieren, werden ver-

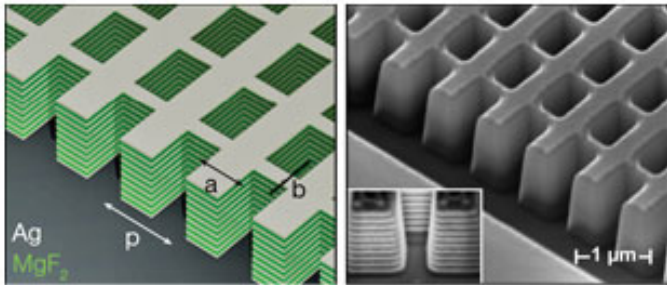


Fig. 1. Fishnet-metamaterial: Modell (links), mikroskopische Aufnahme (rechts), beides aus [1].

schiedene Variationen der geometrischen Abweichungen betrachtet. Mit der Annahme, dass man genügend viele Variationen betrachtet, lassen sich Aussagen über die Stabilität der Eigenschaften treffen. Jede stochastische Variable (Brechungsindex, Schichtdicke) wird als gaussverteilt angenommen. Da die Variablen unabhängig sind, ergeben sich Parametersätze, bei denen jede einzelne Variable gaussverteilt um den Ausgangswert schwankt.

II. BRAGG-SPIEGEL

Ein Bragg-Spiegel ist eine periodische Struktur zur Realisierung hoher Reflexionsfaktoren. Fällt eine elektromagnetische Welle ein, interferieren die transmittierten Wellen dabei mit den reflektierten, dies trägt zu den hohen Reflexionen, die

erreicht werden können, bei.

Aufgebaut wird der Bragg-Spiegel aus Perioden von $\lambda/4$ -Schichten aus zwei verschiedenen, i.d.R. dielektrischen, Materialien. Ein Material mit größerem Brechungsindex (Galliumarsenid (GaAs) mit $n_{GaAs} = 3.49$) und ein Material mit kleinerem Brechungsindex (Aluminiumarsenid (AlAs) mit $n_{AlAs} = 2.95$).

Das analytische 1D-Modell weist nur in Ausbreitungsrichtung (\vec{e}_z) eine Änderung der Brechungszahlen und Schichtdicken auf und wird in \vec{e}_x - und \vec{e}_y -Richtung als homogen angenommen. Der Aufbau ist in Abb. 2 gezeigt. Die Schichtdicken sind dabei jeweils

$$d_{GaAs} = \frac{1}{4} \frac{\lambda}{n_{GaAs}} = \frac{1}{4} \frac{980nm}{3.49} = 69.69nm \quad (1)$$

$$d_{AlAs} = \frac{1}{4} \frac{\lambda}{n_{AlAs}} = \frac{1}{4} \frac{980nm}{2.95} = 82.61nm \quad (2)$$

für eine Wellenlänge von 980 nm bei $f = 306$ THz.

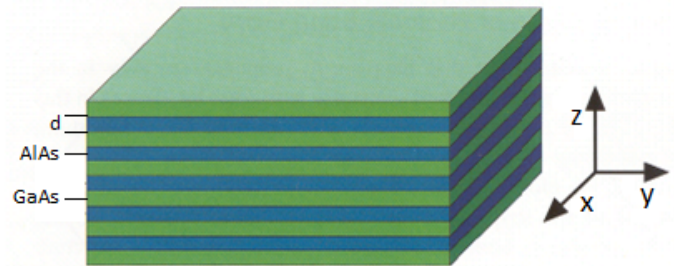


Fig. 2. Aufbau eines Bragg-Spiegels, Bild aus [2].

A. Analytische Berechnung der S-Parameter

Mit der Methode der Impedanztransformation [3] werden die S-Parameter $|S_{11}|$ und $|S_{21}|$ analytisch bestimmt und deren Abhängigkeit von den Schichtdicken und Brechungszahlen untersucht. In Abb. 3 ist der Verlauf für den verlustlosen Fall gezeigt für einen Bragg-Spiegel aus 20 Schichtperioden, eine Schichtperiode ist dabei eine Elementarzelle bestehend aus einer Schicht n_{GaAs} und einer Schicht n_{AlAs} . Die Betriebsfrequenz soll bei $f = 306$ THz liegen und berechnet wird der Spiegel für den Bereich 260 THz bis 340 THz. Das Band, in dem sich die Betriebsfrequenz befindet, wird als Stopband bezeichnet. Neben dem Reflexionsmaß $|S_{11}|$, der bei Bragg-Spiegeln hoch sein soll, ist zur besseren Beurteilung auch jeweils der Parameter $|S_{21}|$ gezeigt, da dort die Auswirkungen besser zu sehen sind.

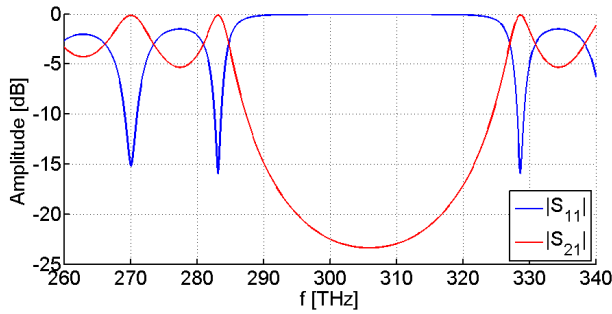


Fig. 3. Verläufe von $|S_{11}|$ und $|S_{21}|$ für einen Bragg-Spiegel mit 20 Schichtperioden.

B. Anzahl der Schichtperioden

Die Anzahl der Schichtperioden aus GaAs und AlAs wirkt sich direkt auf die Transmission aus, wie in Abb. 4 gezeigt.

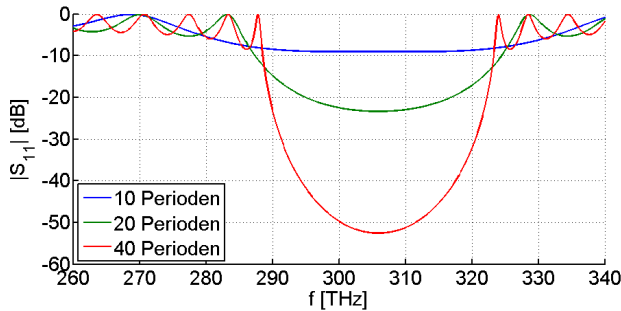


Fig. 4. Verlauf von $|S_{21}|$ für verschiedene verlustlose Anzahlen der Schichtperioden.

Das Stopband wird schmaler, dafür sinkt die Transmission sehr stark und damit steigt die Reflexion.

Für die weitere Analyse wird der Bragg-Spiegel mit 20 Schichtperioden betrachtet.

C. Untersuchung von Materialschwankungen

Für die Untersuchung von Materialschwankungen werden Materialverluste berücksichtigt durch Einsetzen einer komplexen Brechzahl \underline{n} . Die Werte für den Real- und Imaginärteil

$$\text{Im}\{n_{\text{GaAs}}(306\text{THz})\} = 4.5230 \cdot 10^{-5} \quad (3)$$

$$\text{Im}\{n_{\text{AlAs}}(306\text{THz})\} = 0 \quad (4)$$

stammen aus [4]. Mit dem Statistik Programm R [5] werden 1000 gaussförmig verteilte Parametersätze für \underline{n} und die Schichtdicken d mit minimaler Diskrepanz bestimmt.

Im Folgenden werden zwei Ergebnisse der Studie gezeigt. Abb. 5 und 6 zeigen die Verläufe von $|S_{11}|$ und $|S_{21}|$ für eine Abweichung von 1% der Brechzahlen $\underline{n}_{\text{GaAs}}$ und $\underline{n}_{\text{AlAs}}$ und der Schichtdicken d und Abb. 7 zeigt den Verlauf für eine Abweichung von 0.005%.

In rot ist der verlustbehaftete Verlauf des jeweiligen Streuparameters ohne eine Abweichung der Parameter gezeigt und in blau ist ein Fehlerbalkendiagramm aufgetragen der für den jeweiligen Frequenzpunkt den minimalen und maximalen Wert aller Variationen anzeigt.

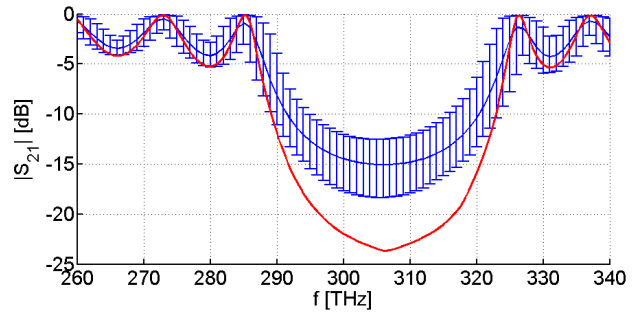


Fig. 5. Verlauf von $|S_{21}|$ für eine Variation der Parameter \underline{n} und d von 1%.

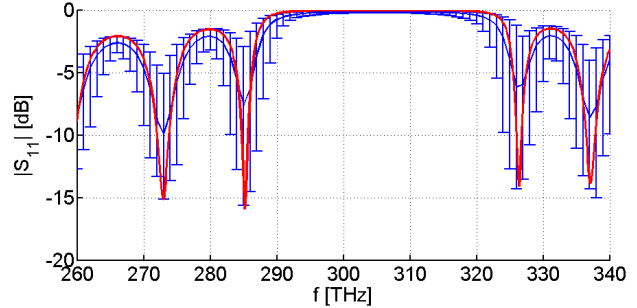


Fig. 6. Verlauf von $|S_{11}|$ für eine Variation der Parameter \underline{n} und d von 1%.

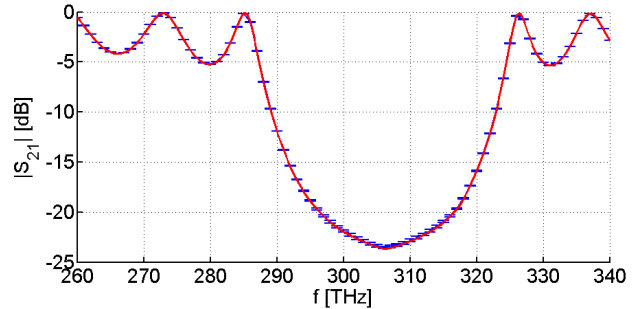


Fig. 7. Verlauf von $|S_{21}|$ für eine Variation der Parameter \underline{n} und d von 0.005%.

Es ist deutlich zu sehen, je geringer die Abweichung ist, desto näher kann der Verlauf ohne Variation nachgebildet werden.

Die Anzahl der Schichtperioden ist neben einer geringen Abweichung der Parameter entscheidend für den Reflexionsfaktor.

Je nach Anforderung, können sehr hohe Reflexionen erzielt werden.

Sven Backhove

III. FISHNET-METAMATERIAL

Das Fishnet-Metamaterial ist eine periodische angeordnete Struktur aus zwei unterschiedlichen Materialien. Die Besonderheit dieser Struktur ist es, dass sie einen komplexen Brechungsindex hat. Dieser komplexe Brechungsindex kommt nicht in der Natur vor, sondern wird durch bestimmte Anordnung von Materialien erzeugt (z.B. Fishnet-Struktur). Eine TEM-Welle fällt auf das Fishnet-Metamaterial ein und es wird die Reflexion und die Transmission sowie das Dispersionsdiagramm analysiert. Im Vordergrund steht die Robustheit der

Fishnet-Struktur bei Variation der dispersiven Materialparametern im Frequenzbereich von 190 bis 230 THz. Es wird betrachtet, ab welcher prozentualer Variation der Materialparameter das Fishnet-Metamaterial nicht mehr robust ist.

A. Aufbau

Das Fishnet-Metamaterial besteht aus Silber (Ag)- und Magnesiumfluoridschichten (MgF_2), die sich abwechselnd wiederholen. Die periodische Struktur besteht aus quadratischen Elementarzellen mit einer Seitenlänge von 600 nm und einer Dicke von 135 nm. Diese Elementarzelle besteht aus zwei Schichten Silber, die um einer Schicht Magnesiumfluorid liegen. Jede einzelne Schicht hat eine Dicke von 45 nm. Im Zentrum dieses Quadrates ist ein rechteckiger Hohlraum mit den Maßen von 300 nm x 450 nm und einer Dicke von 135 nm. Der Aufbau ist in Abb. 8 zu sehen.

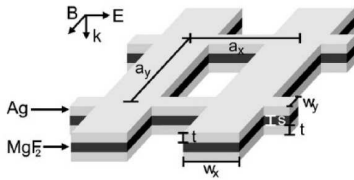


Fig. 8. Aufbau des Fishnet-Metamaterials. Bild aus [6].

Für die Frequenzabhängigkeit der Materialparameter der Silberschichten nehmen wir das Dispersionmodell nach Drude an. Das Magnesiumfluorid hat einen Brechungsindex $n = 1.38$. Dieses Material ist frequenzunabhängig und bleibt konstant, da es als Einkristall in diesem Frequenzbereich transparent bleibt.

B. Drudemodell

Im Drudemodell wird der elektrische Leiter als ein Ionenkristall betrachtet, in dem die Elektronen frei beweglich sind. Diese bilden ein Elektronengas und unterliegen den Gesetzen der kinetischen Gastheorie. Die kinetische Gastheorie besagt, dass die Größe der Elektronen vernachlässigbar ist. Die Bewegung eines Elektrons ist gleichförmig und unabhängig von den Bewegungen der anderen Elektronen. Legt man ein elektrisches Feld an, werden die Elektronen beschleunigt. Es kommt zu keiner kontinuierlichen Beschleunigung, da die Elektronen zusammenstoßen und sich gegenseitig abbremsen. Die mittlere Stoßzeit zwischen zwei Elektronen heißt Relaxationszeit τ . [9]

Die allgemeine Gleichung für dispersives Material im Drudemodell beschreibt die Frequenzabhängigkeit der Permittivität des betrachteten Materials.

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_{inf} - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega - j\omega_{col})} \quad (5)$$

In der Materialgleichung haben wir einen Real- und einen Imaginärteil der Permittivität. Diese ist abhängig von der Kollisionfrequenz ω_{col} , der Plasmafrequenz ω_p und ϵ_{inf} . Aus

[6] wurden die Parameter für die Permittivität des Silbers entnommen.

$$\omega_p = 1.37 \cdot 10^{16} \frac{1}{s} \quad (6)$$

$$\omega_{col} = 8.5 \cdot 10^{13} \frac{1}{s} \quad (7)$$

$$\epsilon_{inf} = 5 \quad (8)$$

Die Variation dieser drei Parameter vom Silber und den Brechungsindex n_{MgF_2} vom Magnesiumfluorid werden mittels elektromagnetischer Simulation untersucht. Zur Simulation wird die kommerzielle Software CST MICROWAVE STUDIO (MWS) [7] verwendet.

C. Simulationseinstellungen

Das Ziel ist es, viele Materialvariationen zu betrachten und diese in einer geringen Rechenzeit zu simulieren. Mit der Hilfe von MATLAB [8] werden die Materialparameter (ω_{col} , ω_p , ϵ_{inf} , n) an R übergeben und um wie viel Prozent diese variiert werden sollen. Das Programm R erzeugt nun wie für den Bragg-Spiegel aus Abs. II einen Parametersatz, der mit Hilfe eines Batch-Skriptes an MWS übergeben wird. Die Elemente des Parametersatzes werden einzeln per Datei an MWS übergeben und nach der Simulation werden die Reflexions- und Transmissionsfaktoren per Datei an MATLAB übergeben, wo dann die endgültige Auswertung der Simulationsergebnisse erfolgt. In MWS wird eine Elementarzelle des Fishnet-Metamaterials aufgebaut. Die periodische Lösung wird in einem Post-Processing-Schritt aus der Streumatrix gewonnen. Für die Diskretisierung werden 12 Linien pro Wellenlänge gewählt. Diese Anzahl reicht aus, um unsere Struktur korrekt darzustellen und es ermöglicht eine geringe Simulationsdauer, da nur 42 Gitterzellen entstehen. Eine Simulation dauert im Durchschnitt 4 Minuten. Bei einem bestimmten Prozentsatz an Variation des Materials im Zeitbereich mit gaussförmigem Anregungspuls ergeben sich 1000 Parametersätze. Für jeden Parametersatz wird eine Simulation durchgeführt. Die Gesamtsimulationszeit beträgt 66 Stunden.

D. Simulationsergebnisse

Als erstes wird ein Fishnet-Metamaterial ohne Variation des Materials simuliert. Als Anregung trifft eine TEM-Welle in z-Richtung auf die Elementarzelle des Fishnet-Metamaterials. Anschließend wird die Reflexion, Transmission und das Dispersionsdiagramm der Anordnung betrachtet. In Abb. 9 sieht man die Reflexion (rot) und die Transmission (blau). Die y-Achse stellt den Reflexions- und den Transmissionskoeffizient zu einem bestimmten Frequenzpunkt dar. Es muss gelten, dass die Summe aus Reflexions- und Transmissionskoeffizient 1 ergibt. Der Reflexionskoeffizienten hat ein Minimum von 185 THz bis 205 THz und ein Maximum von 210 THz bis 240 THz. Der Transmissionskoeffizienten hat ein Minimum von 210 THz bis 240 THz und ein Maximum von 185 THz bis 205 THz.

Das Dispersionsdiagramm ist in Abb. 10 dargestellt. Der linkshändige Mode ist in einem schmalbandigem Frequenzband von 206,68 THz bis 219 THz ausbreitungsfähig.

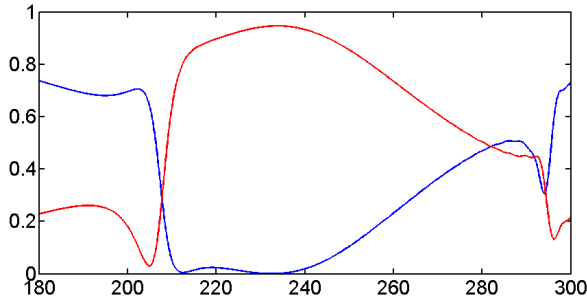


Fig. 9. Streuparameter für eine Fishnet-Metamaterial-Elementarzelle ohne Variation. Der Reflexionskoeffizient ist in rot und der Transmissionskoeffizient ist in blau dargestellt.

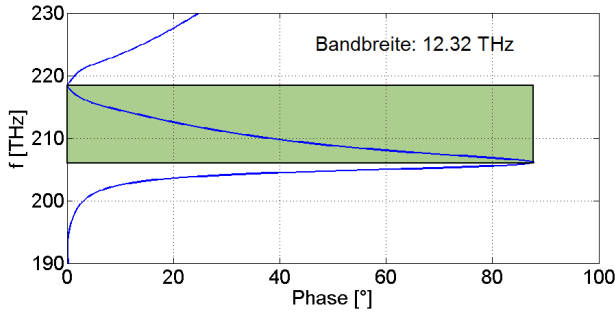


Fig. 10. Dispersionsdiagramm des Fishnet-Metamaterials ohne Variation.

Im folgenden wird nun eine Variation der Materialparameter für das Silber im Drude-Modell von 5% betrachtet. Der Real- und der Imaginärteil der Permittivität des Silbers sind in Abb. 11 gezeigt.

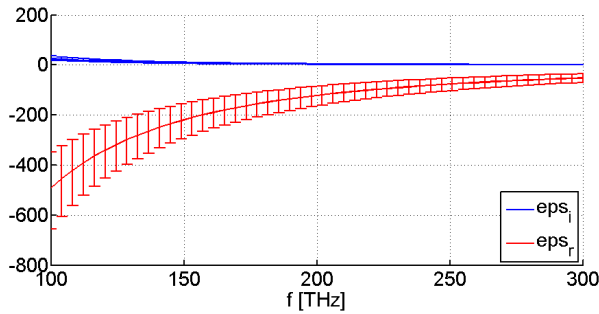


Fig. 11. Verlauf der Permittivität bei einer Variation der Silber Materialparameter von 5%.

Nachdem in R der Parametersatz für 1000 Simulationen vorbereitet wurde, wird die Simulation 1000 mal durchgeführt und das Dispersionsdiagramm dieser Anordnung ist in Abb. 12 gezeigt.

Das Frequenzband, in dem sich der linkshändige Mode ausbreiten kann verschiebt sich und auch die Bandbreite ändert sich. In Abb. 13 ist die Bandbreite für jede einzelne Simulation dargestellt.

Die Bandbreite des linkshändigen Modes reicht von 1 THz bis 18 THz. Das Mittel der Bandbreiten jeder Simulationen beträgt 11,84 THz.

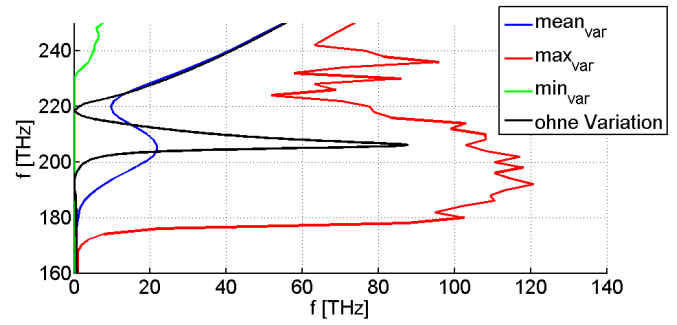


Fig. 12. Dispersionsdiagramm mit Variation des Silbers von 5%

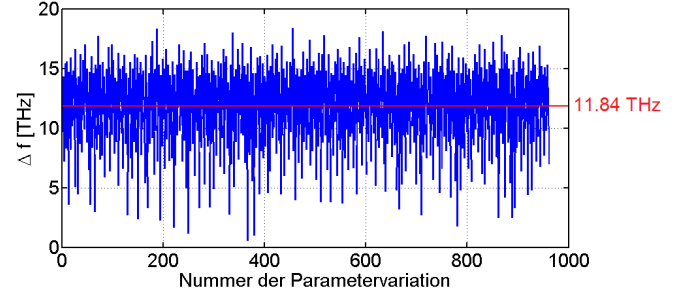


Fig. 13. Bandbreite des Modes für jede Simulation

IV. ZUSAMMENFASSUNG

Zunächst wurde die Vorgehensweise zur Analyse von stochastischen Materialschwankungen an einem Bragg-Spiegel vorgestellt. Schon bei geringen Schwankungen der Materialparameter, ist eine Auswirkung auf die Streuparameter zu erkennen. Je nach Größe der Abweichung bricht der Reflexionsfaktor mehr oder minder stark ein. Anschließend wurde das Fishnet-Metamaterial betrachtet bei dem die Materialparameter des Silbers um 5% variiert wurden. Es kommt zur Schwankung der Bandbreite des linkshändigen Modes von 50%. Zusammenfassend kann man sagen, dass man bei der Produktion vom Fishnet-Metamaterial diese Schwankungen so gering wie möglich halten sollte.

Orkun Konc

REFERENCES

- [1] Ekmel Ozbay, *The Magical World of Photonic Metamaterials*, Optics and Photonics News, Vol. 19, Issue 11, pp. 22-27 (2008)
- [2] Aufbau eines Braggspiegels, http://www.fotonik.dtu.dk/English/Research/ResearchActivities/NanoDevices_research/Photonic%20crystal%20devices.aspx, Abrufdatum 01.2013
- [3] William Hayt, John Buck, *Engineering Electromagnetics*, McGraw-Hill Companies, Incorporated (2005)
- [4] Refractive index database, <http://refractiveindex.info>, Abrufdatum 01.2013
- [5] The R Project for Statistical Computing, <http://www.r-project.org/>, Abrufdatum 01.2013
- [6] G. Dolling, C. Enkrich und M. Wegener, *Low-loss negative-index metamaterial at telecommunication wavelengths*, Optics Letters, Vol. 31, Issue 12, pp. 1800-1802 (2006)
- [7] CST Microwave Studio, CST AG, <http://www.cst.com>, 2012
- [8] Matlab 2004, The Mathworks, <http://www.mathworks.com>, 2012
- [9] Neundorf, Pfindtner, Popp, *Elektrophysik: Physikalische Grundlagen der elektrotechnischen Werkstoffe und Halbleiterbauelemente*, 1996