

DISEÑO, ANALISIS Y OPTIMIZACION DE DISPOSITIVOS PARA HIPERSONIDO

Norberto D. Lanzillotti Kimura* y Alejandro Fainstein†

Laboratorio de Propiedades Ópticas
Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro, CNEA
Av. Bustillo Km 9,500, San Carlos de Bariloche, (8400) Río Negro, Argentina
e-mail: *lanzilln@ib.cnea.gov.ar, †afains@cab.cnea.gov.ar

Key words: Optimización, algoritmos genéticos, multivariable, downhill simplex, dispositivos, multicapa, superredes, hipersonido, fonones, reflectividad, Raman.

Resumen. *Se espera que el desarrollo de microcavidades que confinan vibraciones acústicas (fonones) dé lugar a nuevas posibilidades para la generación de hipersonido coherente (en el rango de los THz), la implementación de “láseres de fonones”, e incluso el aumento de la coherencia de dispositivos electrónico-cuánticos. Las cavidades y los espejos usuales de sonido se obtienen con estructuras artificiales diseñadas con una modulación periódica en las constantes elásticas de los materiales.*

Por otra parte, extendiendo conceptos similares aplicados en el área de la óptica, es posible prever que con ordenamientos no periódicos sea posible realizar una “ingeniería” de las vibraciones acústicas que lleve a dispositivos fonónicos altamente optimizados. Algunas aplicaciones posibles incluyen a espejos de ancho espectro, filtros de color, filtros “notch” y filtros de borde para hipersonido.

En este trabajo abordamos el problema de la optimización de estructuras artificiales de medios elásticos inhomogéneos para objetivos específicos, utilizando métodos de optimización multivariables como ser el downhill simplex y algoritmos genéticos. Consideramos como sistema modelo el caso de superredes de GaAs/AlAs. Aplicando herramientas de optimización multivariable a la función de reflectividad, estudiamos el efecto de modificar los espesores de las capas, la composición de los materiales, y la posibilidad de obtener patrones de reflectividad característicos de los dispositivos buscados. Los resultados muestran que existen ordenamientos no periódicos realizables experimentalmente con las características espectrales deseadas.

1 INTRODUCCION

Recientemente se ha demostrado una forma novedosa de optimizar el acoplamiento de luz y sonido en microcavidades que confinan a la vez fotones y vibraciones acústicas (fonones)^{1,2}. Se espera que este desarrollo dé lugar a nuevas posibilidades para la generación de hipersonido coherente (en el rango de los THz), la implementación de “láseres de fonones”, e incluso el aumento de la coherencia de dispositivos electrónico-cuánticos mediante el control de la interacción electrón-fonón³. Las cavidades y los espejos de luz y sonido se obtienen con estructuras artificiales diseñadas con una modulación periódica en las constantes dieléctricas y elásticas de los materiales.

Las propiedades elásticas de las estructuras periódicas han sido extensamente estudiadas. En particular la reflectividad acústica de este tipo de estructuras presenta zonas de alta reflectividad denominadas “stop-bands”, debidas al replegamiento de la primera zona de Brillouin producida por la periodicidad introducida por la superred. Los anchos espectrales de estas regiones dependen exclusivamente del contraste de impedancia acústica entre los dos materiales que forman la estructura. Asimismo la reflectividad (transmitividad) de estas regiones aumenta (disminuye) con el número de períodos que forman la superred.

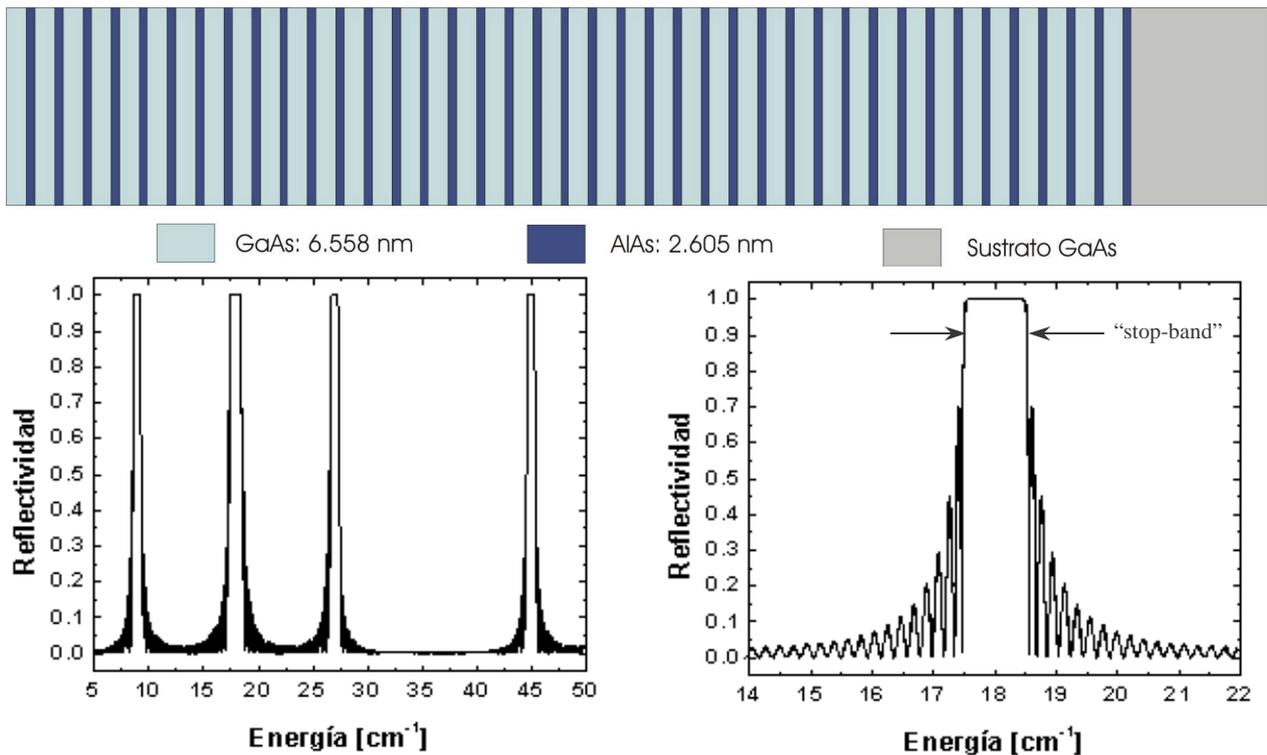


Figura 1. Esquema de una superred de GaAs/AlAs, diseñada con un “stop-band” centrado en 18 cm^{-1} (arriba). Reflectividad acústica en función de la energía para la misma estructura (abajo izquierda). Detalle de la reflectividad acústica en la región de energías sobre la que se trabajó.

En la figura 1 (abajo izquierda) se muestra el perfil de reflectividad de una muestra de 40

períodos de GaAs/AlAs de 6.558nm/2.605nm, diseñada de manera tal que el segundo “stop-band” se encuentre centrado en 18 cm^{-1} , donde se pueden observar cuatro regiones de alta reflectividad. En la misma figura (abajo derecha) se encuentra un detalle de la reflectividad acústica en la región espectral sobre la que se diseñaron los dispositivos fonónicos. De $\sim 17.5 \text{ cm}^{-1}$ a $\sim 18.5 \text{ cm}^{-1}$ se extiende una región donde la reflectividad es aproximadamente 1. Las oscilaciones a los dos lados del “stop-band” son características de los arreglos periódicos, su número depende del número de períodos de la muestra, y la envolvente de los materiales utilizados.

Extendiendo conceptos similares aplicados en el área de la óptica⁴, es posible prever que con ordenamientos no periódicos sea posible realizar una “ingeniería” de las vibraciones acústicas que lleve, por ejemplo, a dispositivos fonónicos altamente optimizados. Algunas aplicaciones posibles incluyen a espejos de ancho espectro, filtros de color, filtros “notch” y filtros de borde para hipersonido.

En este trabajo abordamos el problema de la optimización de estructuras artificiales no periódicas de medios elásticos inhomogéneos para objetivos específicos. Utilizamos como métodos de optimización multivariables el downhill simplex y algoritmos genéticos. Planteamos la optimización de propiedades acústicas y el diseño de dispositivos para hipersonido en el rango GHz-THz ($1 \text{ THz} \approx 33.44 \text{ cm}^{-1}$).

Consideramos como sistema modelo el caso de superredes de GaAs/AlAs. Aplicando herramientas de optimización multivariable a la función de reflectividad, calculada a través del método matricial de Abelès-Herpin, estudiamos el efecto de modificar los espesores de las capas, la composición de los materiales utilizados, y la posibilidad de obtener patrones de reflectividad característicos de los dispositivos buscados.

El presente artículo se encuentra ordenado de la siguiente manera: en la segunda sección se encuentra una descripción matemática del problema, es decir el formalismo matricial para calcular la reflectividad acústica de una multicapa con espesores específicos. En la sección 3 presentamos los dos métodos de optimización multivariable utilizados. En la sección 4 se encuentran los resultados obtenidos, y un análisis de los mismos. Finalmente, en la sección 5 se encuentran las conclusiones generales.

2 DESCRIPCION MATEMATICA DEL PROBLEMA

Las ondas acústicas longitudinales que se propagan a lo largo de una estructura unidimensional como la que se muestra en la figura 1 responden a la ecuación de movimiento:

$$\rho_j \frac{\partial^2 u(z,t)}{\partial t^2} - C_j \frac{\partial^2 u(z,t)}{\partial z^2} = 0, \quad (1)$$

donde j es el índice que indica la capa, ρ la densidad del material, y C la constante de fuerza.

Suponiendo una dependencia armónica en el tiempo las soluciones son de la forma:

$$\begin{aligned} u(z,t) &= \phi(z)e^{i\omega t} \\ \phi(z) &= a_j e^{ik_j z} + b_j e^{-ik_j z} \end{aligned} \quad (2)$$

La frecuencia ω está relacionada con el vector de ondas en cada capa, k_j , por la relación de dispersión $\omega = v_j k_j$, donde $v_j = (C_j / \rho_j)^{1/2}$, y z corresponde a una coordenada espacial, local de cada capa.

En analogía con el caso de campos eléctricos en superredes ópticas, es posible utilizar el método de las matrices de transferencia, propuesto por Abelès-Herpin⁵⁻⁷, en el cual cada capa tiene asociada una matriz de la forma:

$$A_j = \begin{bmatrix} \cos(k_j d_j) & -\frac{1}{n_j} \sin(k_j d_j) \\ n_j \sin(k_j d_j) & \cos(k_j d_j) \end{bmatrix} \quad (3)$$

que relaciona los coeficientes a y b de una capa con los de la siguiente, donde d_j es el espesor de la capa j , y $n_j = C_j k_j$.

De esta manera, la matriz que caracteriza a la estructura completa, relacionando los coeficientes a y b de la primer capa con los de la última, resulta de multiplicar las matrices individuales de cada una de las capas:

$$M = \prod_{j=1}^N A_j \quad (4)$$

donde N es el número total de capas, y A_j es la matriz asociada a la capa j . De esta manera la amplitud de la reflexión queda determinada por (5)

$$R = |r|^2 = \left| \frac{m_{21}}{m_{11}} \right|^2 \quad (5)$$

siendo m_{ij} es el elemento ij de la matriz M .

3 OPTIMIZACION

Para el diseño de los dispositivos para fonones se utilizaron dos métodos de optimización multivariable: downhill simplex y algoritmos genéticos. En ambos casos la función a minimizar es la distancia entre la curva de reflectividad del dispositivo fonónico buscado y la curva de reflectividad de la muestra evaluada. Las dos rutinas de optimización fueron modificadas para prevenir la aparición de espesores negativos, o composiciones químicas incompatibles.

Para todos los dispositivos diseñados se eligió una región espectral de operación sobre la cual se realizó la optimización. Fuera de la misma no se impuso ninguna condición sobre la reflectividad.

3.1 Downhill simplex

Un simplex se define como una figura de $N+1$ vértices en un espacio de N dimensiones (por ejemplo, un triángulo en un espacio bidimensional). En el método downhill simplex,

cada punto de un simplex representa una posible solución del problema. El simplex correspondiente a una función de N variables se representa por una matriz de $(N+1) \times N$. Cada columna de la matriz contiene las N coordenadas de un vértice de la figura. En el caso estudiado, las coordenadas están dadas por los espesores (eventualmente composición química) de cada una de las capas.

El algoritmo^{8,9} consiste en la búsqueda de un mínimo siguiendo una sucesión de operaciones sobre el simplex: expansión, contracción, y reflexión. Primero se localiza el vértice n_{max} donde la función objetivo f toma el valor máximo, y se lo refleja respecto de la cara opuesta del simplex determinando un nuevo punto n_{prueba} . Se evalúa la función en una serie de puntos que pertenezcan a la recta perpendicular a dicha cara y que contiene a n_{prueba} . Si en alguno de esos puntos, la función toma un valor menor que $f(n_{max})$, entonces ese punto reemplaza a n_{max} en el simplex. En caso contrario, se conserva el simplex original y se lo contrae en todas las direcciones alrededor del mínimo (disminuyendo su volumen) y se vuelve a ejecutar el algoritmo. El método invariablemente converge a un mínimo luego de una serie de contracciones.

En el caso de la optimización sobre los espesores, un vértice del simplex inicial representa un arreglo periódico de espesores 6.558nm/2.605nm y el resto de los vértices son puntos tomados al azar dentro de un hipercubo de 10.0 nm de lado.

3.2 Algoritmos genéticos

El método de optimización por algoritmos genéticos simula un proceso de evolución y selección natural en una población de individuos. Cada individuo de la población representa una posible solución. Por otra parte, un cromosoma caracteriza a un individuo y está formado por un conjunto de genes, cada uno de los cuales es un parámetro de optimización.

En el caso discutido en el presente artículo, los genes son los espesores de cada una de las capas de las estructuras semiconductoras a optimizar y cada estructura es un individuo de la población. Casos semejantes en el área de la óptica han sido extensamente estudiados¹⁰⁻¹¹.

Los operadores de evolución que se utilizan son:

- entrecruzamiento (reproducción): este operador intercambia los genes de dos individuos (padres) para producir nuevos individuos que reemplazan a los padres.
- mutación: estocásticamente se modifica cierto porcentaje de genes dentro de la población;
- selección: probabilísticamente se seleccionan los individuos que sobrevivirán e integrarán la siguiente generación. Los más aptos (definidos como los que poseen menor valor de la función objetivo) son los que tienen mayores probabilidades de reproducirse.

La evolución, y por lo tanto el nivel de optimización, es un proceso que continúa hasta que la población converge a un resultado, o hasta que se alcanza un número máximo de generaciones.

En el presente trabajo se utilizó el código GENESIS¹², y dentro de la población inicial de individuos se incluyó una estructura periódica de GaAs/AlAs de 6.558nm/2.605nm. Se

estableció como condición que el mejor individuo siempre sobrevive intacto de una generación a la siguiente para evitar que desaparezca debido a los mecanismos de entrecruzamiento y mutación. Asimismo se impuso como condición que todos los espesores fueran menores a 10.0 nm.

4 RESULTADOS Y DISCUSION

4.1 Filtro de borde

El filtro de borde tiene una transmisión alta para una determinada banda de frecuencias, y una alta reflectividad para frecuencias superiores. En este caso nos propusimos remover las oscilaciones a un lado del “stop-band”, para una estructura de 81 capas.

En la figura 2 se muestran la curva de reflectividad de una multicapa luego de la optimización por el método downhill simplex, y la de un arreglo periódico diseñado con el “stop-band” en la misma región espectral. En la figura 2a se muestran los resultados de la optimización sobre los espesores de las capas. Se lograron eliminar con éxito las oscilaciones en la banda de transmisión entre 14 cm^{-1} y $\sim 17.5 \text{ cm}^{-1}$, manteniendo una reflectividad aproximadamente del 100% entre $\sim 17.5 \text{ cm}^{-1}$ y 18.5 cm^{-1} . La región de transición entre las bandas de reflexión y transmisión se extiende por un intervalo menor a 0.1 cm^{-1} , determinado por el número de períodos de la estructura, característica que no se vio afectada por el proceso de optimización. Se puede notar que las mayores desviaciones respecto de la superred se producen en las primeras y en las últimas capas. En la figura 2b se muestran los resultados de una optimización en la composición de una aleación GaAs-AlAs en cada capa, permaneciendo los espesores constantes e iguales a 6.558 nm y 2.605 nm para capas impares y pares respectivamente. En este caso, las oscilaciones en la región de transmisión no se pudieron eliminar totalmente, aunque se mantuvo la reflectividad por debajo del 5% en esta región. Por otro lado, en la banda de reflexión se distingue una depresión, donde la reflectividad cae a $\sim 90\%$. En esta optimización se observa que las variaciones en composición se producen a lo largo de toda la estructura.

A diferencia del caso de optimización sobre la composición química, los resultados de la optimización sobre espesores presentan curvas de reflectividad que responden a la del filtro de borde prácticamente en forma ideal, y perturbaciones menores respecto al caso periódico. Asimismo el crecimiento de muestras con espesores variables es más simple de realizar experimentalmente que la fabricación de aleaciones.

El filtro de borde también fue optimizado con el método de algoritmos genéticos, obteniéndose resultados similares. En este caso, el número necesario de evaluaciones de la función objetivo resultó al menos un orden de magnitud superior al requerido por el downhill simplex, para obtener resultados comparables. La potencial ventaja de tener limitados los valores que pueden adoptar los genes no resultó ser determinante en este problema, ya que todas las soluciones obtenidas con downhill simplex permanecieron acotadas entre 0.1 nm y 20 nm. Dada la naturaleza de la función de reflectividad acústica, el tiempo de cálculo requerido por el método de algoritmos genéticos (eventualmente justificado por la robustez

del método para encontrar mínimos absolutos) no lo hace una opción viable frente al downhill simplex, con el cual se encontraron mínimos lo suficientemente buenos como para no requerirse mayores niveles de optimización.

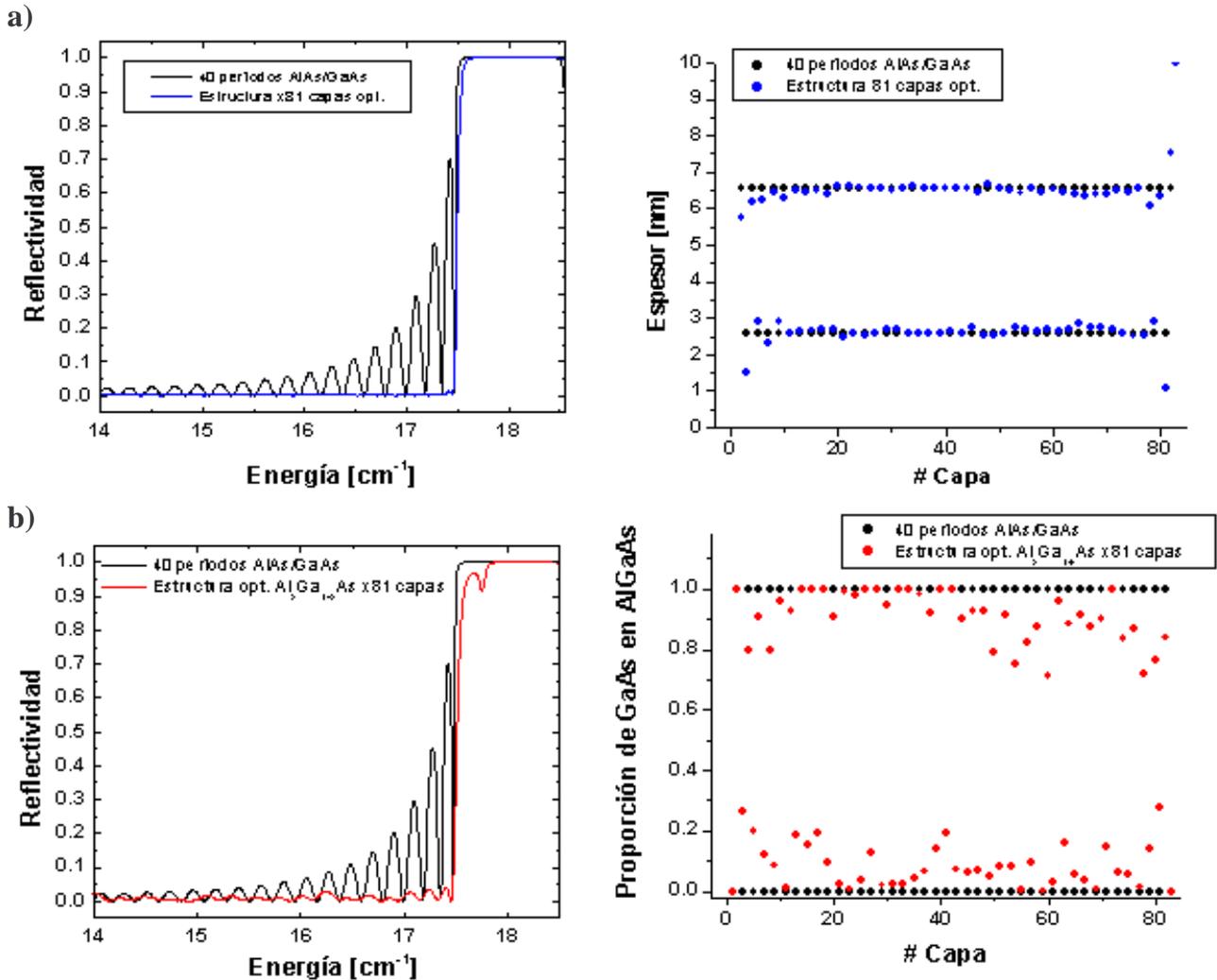


Figura 2. a) Reflectividad acústica de una superred de 40 períodos de GaAs/AlAs y de un arreglo optimizado en espesores de 81 capas de los mismos materiales (izquierda). Comparación entre la distribución de los espesores de la superred y del dispositivo optimizado (derecha). b) Reflectividad acústica de una superred de GaAs/AlAs y de un arreglo de 81 capas de aleaciones de GaAs y AlAs optimizado (izquierda). Comparación de las composiciones de las aleaciones del dispositivo y de la superred.

4.2 Filtro “notch”

Un filtro “notch” se utiliza para bloquear una frecuencia no deseada dentro de un espectro, idealmente sin afectar el resto de las señales. En el caso del filtro para hipersonido, se buscó eliminar las oscilaciones a ambos lados del “stop-band”, quedando una región de reflectividad

aproximada al 100%, rodeada por dos regiones de reflectividad cercana al 0%.

El ancho del “stop-band” queda determinado por el contraste de impedancias acústicas entre los materiales utilizados, por lo que si se requiere una región de alta reflectividad con un ancho menor, se podrían utilizar otros materiales como GaAs y $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$.

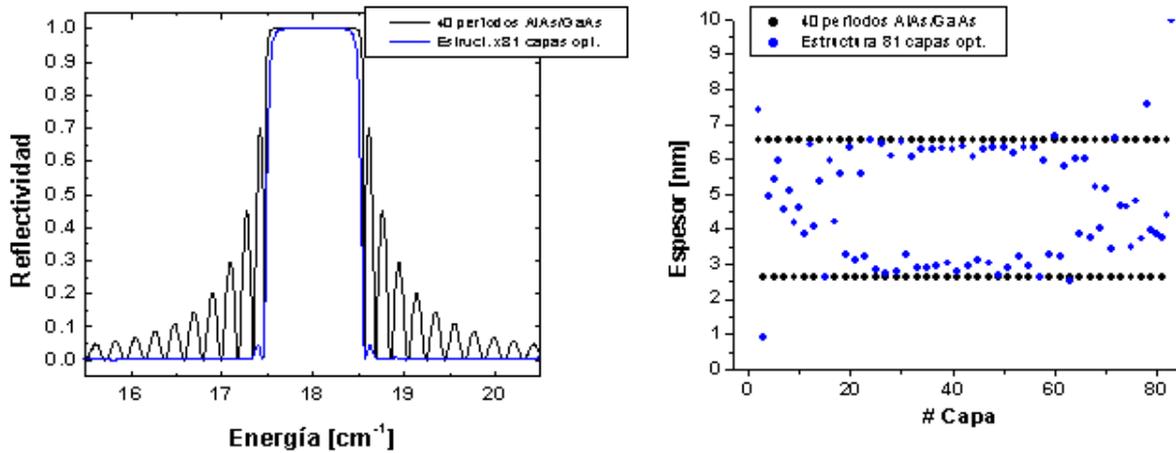


Figura 3. a) Reflectividad acústica de una superred de 40 períodos de GaAs/AlAs y de un arreglo optimizado en espesores como filtro “notch” de 81 capas de los mismos materiales (izquierda). Comparación entre la distribución de los espesores de la superred y del dispositivo optimizado (derecha).

En la figura 3 se muestran los resultados obtenidos con el método downhill simplex en el diseño de un filtro “notch”. Se consiguieron eliminar casi en su totalidad las oscilaciones en las regiones de transmisión entre 15.5 cm^{-1} y $\sim 17.5 \text{ cm}^{-1}$, y entre $\sim 18.5 \text{ cm}^{-1}$ y 20.5 cm^{-1} , la región de alta reflectividad se vio levemente afectada, disminuyendo el ancho de la misma (efecto comparable al de disminuir el número de períodos en una superred). A ambos lados de la banda de reflexión se pueden distinguir dos picos de reflectividad $\sim 5\%$. A diferencia del filtro de borde, se puede notar que todos los espesores varían respecto del arreglo periódico en forma apreciable. Sin embargo, el dispositivo sigue siendo experimentalmente realizable.

4.3 Espejo de banda ancha

Se buscó obtener un dispositivo en donde una banda de reflectividad próxima al 100% se extienda sobre un intervalo de energías muy superior al característico de una red periódica. Se sometió al proceso de optimización a una estructura de 160 capas, y además del arreglo periódico, se incluyó en el simplex inicial un estructura donde los espesores se incrementan en forma lineal (semilla).

En la figura 4 se pueden observar los perfiles de reflectividad del arreglo periódico y de la semilla. También se muestran los resultados de la optimización, donde se puede apreciar que no produce resultados que mejoren notablemente los de la muestra inicialmente diseñada. En todos los casos la reflectividad es mayor al 95%, y la banda de reflexión se extiende desde $\sim 18.5 \text{ cm}^{-1}$ hasta 23.5 cm^{-1} , es decir, cinco veces más grande que el “stop-band” del arreglo periódico. Disminuir la zona de transición entre las bandas de reflexión y transmisión implica

la aparición de picos que no se encontraban en el diseño original.

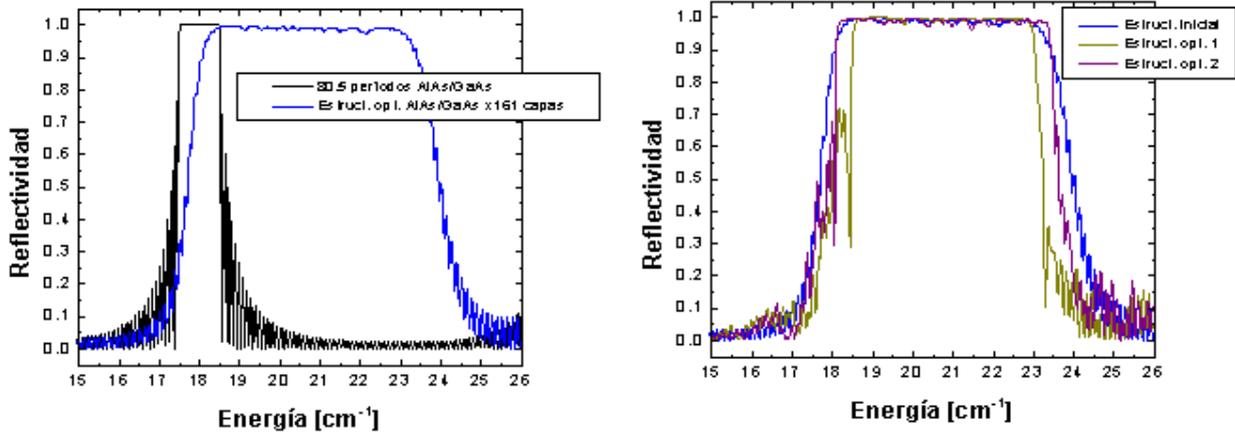


Figura 4. Reflectividad en función de la energía de una estructura con un gradiente de espesores en las capas lineal, y de una superred, ambos de 161 capas (izquierda). Resultados del proceso de optimización comparados con la estructura propuesta.

5 CONCLUSIONES

Los resultados muestran que dentro de los límites constructivos de las tecnologías actuales (con control de crecimiento al nivel de la capa atómica mediante “Molecular Beam Epitaxy”) existen ordenamientos no periódicos con las características espectrales deseadas. Incluso en el caso del espejo de banda ancha, en el que no se encontró un diseño que mejore sustancialmente el diseño optimizado en forma “manual”, los diseños obtenidos cumplen en forma satisfactoria con los requerimientos del dispositivo.

El método de optimización downhill simplex demostró ser muy efectivo al encontrar soluciones, que si bien no son óptimos absolutos, son suficientemente buenas como para no requerirse mayores niveles de optimización.

La utilización de algoritmos genéticos, por otra parte, presenta la complicación del alto número de evaluaciones que necesita el método para converger a un resultado aceptable. Sin embargo la robustez del mismo, y la característica de utilizar “poblaciones” de soluciones, lo hace ideal para el problema de optimización multivariable multiobjetivo. Creemos que una aplicación inmediata es el diseño de estructuras que presenten un determinado espectro Raman (relacionado con el espectro de generación coherente de fonones¹³), y a su vez no se desvíen del comportamiento de una cavidad. En este caso las funciones objetivo serían al mismo tiempo, el espectro Raman, y la reflectividad de una muestra.

6 REFERENCIAS

- [1] M. Trigo, A. Bruchhausen, A. Fainstein, B. Jusserand, y V. Thierry-Mieg, “Confinement of acoustical vibrations in a semiconductor planar phonon cavity”, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 227402 1-4 (2002).
- [2] A. Fainstein, B. Jusserand, y V. Thierry Mieg, “Raman scattering enhancement by optical

- confinement in a semiconductor planar microcavity”, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3764-3767 (1995).
- [3] Ver también el comentario por J. M. Worlock y M. L. Roukes, “Son et lumière” en *Nature* **421**, 802-803 (2003).
- [4] Ver, por ejemplo, el artículo de T. Erdogan y V. Mizrahi, “Thin-film filters come of age”, revista *Photonics Spectra*, 94-100, julio 2003.
- [5] G. Malpuech, A. Kavokin, “Picosecond beats in coherent optical spectra of semiconductor heterostructures: photonic Bloch and exciton-polariton oscillations”, *Semicond. Sci. Technol.* **16** (2001) R1-R23.
- [6] P.D. Lacharnoise, *Confinamiento de luz y sonido en microcavidades semiconductoras*, Instituto Balseiro, tesis de maestría.
- [7] M. Trigo, *Espectroscopía Raman de fonones en microcavidades semiconductoras*, Instituto Balseiro, tesis de licenciatura.
- [8] J.A. Nelder and R. Mead, “A simplex method for function minimization” *The Com. Jnl* **7**, 308-313 (1965).
- [9] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery, *Numerical Recipes in C, The art of scientific computing*, Second edition, Cambridge University Press.
- [10] D. Simek, D. Rafaja, J. Kub, “Genetic Algorithm applied to multilayer structure determination”, *Materials structure*, vol. 8, number 1 (2001).
- [11] K.Y. Lum, P.M. Jacquart, M. Sefrioui. Constrained Optimization of Multilayered Anti-Reflection Coatings using Genetic Algorithms. *Proceedings of the 4th Asia-Pacific Conference on Simulated Evolution and Learning (SEAL'2002)*, volume 1, pages 172-177, Singapore, November 2002. Orchid Country Club, Nanyang Technical University
- [12] J.J. Grefenstette, *A user's guide to GENESIS Version 5.0*, <http://www.aic.nrl.navy.mil/galist/src/#C>
- [13] K. Mizoguchi, M. Hase, S. Nakashima, “Observation of coherent folded acoustic phonons propagating in a GaAs/AlAs superlattice by two-color pump-probe spectroscopy”, *Phys. Rev. B* **60**, 8262–8266 (1999).