

АНАЛІЗ РОЗСІЮВАННЯ СВІТЛА НА НЕРЕГУЛЯРНІЙ ПОВЕРХНІ ХАЛЬКОГЕНІДНИХ СКЛОПОДІБНИХ ТОНКИХ ПЛІВОК В РАМКАХ СТАТИСТИЧНОГО ПІДХОДУ

М.І. Козак, І.М. Миголинець, Н.В. Юркович

Ужгородський національний університет, 88000, вул. Волошина, 52, Ужгород

З точки зору теоретико-імовірнісного підходу проаналізовано рельєф поверхні тонких плівок халькогенідних склоподібних напівпровідників, одержаних термічним напиленням у вакуумі. За допомогою статистично-кореляційних параметрів профілю поверхні плівок розраховано індикатриси розсіювання світла на їх поверхні. Розрахунки проведені для експериментально досліджених п'ятьох типів тонких плівок: на основі чистого Ge_2S_3 та модифікованого Ge_2S_3 алюмінієм, свинцем, вісмутом та телуrom .

I. ВСТУП.

Реальні поверхні тонких плівок не бувають абсолютно плоскими, тому при розрахунках їх оптичних параметрів на основі експериментальних даних в рамках плоскопаралельного наближення одержуються суттєві похибки. Наявність нерегулярності та шорсткості їх поверхні приводить до дифракції та розсіювання випромінювання, а також до виникнення нелінійних поверхневих і кноїдальних хвиль. Ці ефекти необхідно враховувати як в прикладній оптиці, так і у фундаментальних дослідженнях структури конденсованого середовища спектроскопічними методами. В даному контексті дослідження тонких плівок на основі халькогенідних склоподібних напівпровідників (ХСН) представляють подвійний інтерес, так як вони уже широко використовуються в оптоелектроніці, інтегральній оптиці, голографії тощо, а з іншого боку ще не достатньо вивчені в теорії твердого тіла як некристалічні структури.

В основу методу описання рельєфу даних тонких плівок з метою розрахунку розсіювання світла на їх поверхні покладено теоретико-імовірнісний, статистичний підхід, що продиктовано самою суттю поставленої задачі, оскільки рельєф поверхні склоподібних плівок, напилених у

вакуумі, представляє собою сукупність нерегулярностей між розмірами, формою і розміщенням яких існує складний вид закономірності нефункціонального типу, тобто кореляція [1].

Рельєф плівки в найбільш загальному представленні є гладкою (але не плоскою) поверхнею, яку не можливо задати аналітично. Якщо провести вимірювання товщини плівки в певній скінченній області, то одержимо детерміновану, задану таблично функцію, за виглядом якої можна зробити лише певні, однак статистично обґрунтовані висновки про вид всієї поверхні плівки. Для цього необхідно застосувати імовірнісний формалізм теорії випадкових полів і випадкових функцій. Використовуючи параметри рельєфу плівок, одержані в результаті кореляційного аналізу, розраховуються оптичні властивості тонких плівок, зв'язані з особливостями проходження випромінювання через границю двох середовищ, а саме розсіювання випромінювання на нерегулярностях поверхні.

II. Обґрунтування теоретико-імовірнісного підходу.

Нехай в результаті вимірювання одержано значення товщини плівки в достатньо великій області D , щоб можна

було робити статистичні висновки, у вигляді функції $z=h(x)$, де $x \in D \subset \mathbf{R}^2$. Дана детермінована функція є реалізацією випадкового поля (ВП) $h(x, \omega)$ заданого на імовірнісному просторі $(\Omega, \mathbf{B}, \mathbf{P})$, де ω – елементарна подія простору елементарних подій Ω , \mathbf{B} – борелівська σ -алгебра подій, \mathbf{P} – імовірнісна міра. Реалізації ВП, які є його першою основною характеристикою, утворюють певний функціональний простір, тому описати ВП можливо методами функціонального аналізу аналогічно, як це робиться для випадкових величин скалярного типу методами класичного математичного аналізу [2-4]. Треба відмітити, що теорія випадкових полів в даний час бурхливо розвивається, але ще далека від свого завершеного виду [5]. У зв'язку з цим, а також тому, що даний підхід зв'язаний з великими математичними труднощами, він представляє на даний час більшу цінність для фундаментальних досліджень, ніж для прикладних розрахунків. Оскільки ВП можна вважати скалярною випадковою величиною, що залежить від параметра (в нашому випадку це координати точки на площині $x \in \mathbf{R}^2$), виявляється, що можливо задати ВП за допомогою класичних функцій розподілу та відповідно густин розподілу. Тоді як неперервна скалярна випадкова величина задається функцією розподілу однієї змінної, ВП задається сукупністю функцій багатьох змінних $\{F(u_1, \dots, u_k; x_1, \dots, x_k)\}$, $k \geq 1$, $u_1, \dots, u_k \in \mathbf{R}$, $x_1, \dots, x_k \in D$, $D \subset \mathbf{R}^n$, $n > 1$, що задовільняють умовам теореми Колмогорова [5] і є його скінченномірними розподілами, тобто $\forall k \geq 1$

$$F(u_1, \dots, u_k; x_1, \dots, x_k) = P\{h(x_1) < u_1, \dots, h(x_k) < u_k\}. \quad (1)$$

Однак в більшості випадків не вдається знайти всі скінченномірні розподіли (1), тому на практиці виникає питання спрощення моделі. Це виправдано в тій чи іншій мірі в залежності від задач, які підлягають розв'язуванню. Що

стосується аналізу оптичних властивостей нерегулярних поверхонь, який розглядається в даній роботі, то нам не вдалося віднайти такий метод розрахунку, де б використовувались найбільш загальні характеристики ВП цілому. Тому далі розглянемо використання лише статистичних та кореляційних параметрів для реалізації ВП, що відповідає рельєфу поверхні, $h_\omega(x)$. Щоб підкреслити, що детерміновану функцію одержано при фіксованій елементарній події ω простору $(\Omega, \mathbf{B}, \mathbf{P})$, її позначено індексом ω . Простір $(\Omega, \mathbf{B}, \mathbf{P})$ може генерувати численні підпростори, якщо значення даної функції розглядати як можливі реалізації випадкової величини іншого типу, а саме – випадкової функції (ВФ) і скалярної випадкової величини. В першому випадку в площині \mathbf{R}^2 випадковим чином вибирається пряма \mathbf{R} і вздовж неї розглядається реалізація ВП, що можна вважати заміною змінних $x=x(t, \omega')$, $h_\omega(x) = h_\omega(t, \omega')$, де t – координата відносно довільної точки на одержаній прямій, ω' – елементарна подія простору елементарних подій Ω' , який утворюють всі можливі такі вибори. В результаті одержується ВФ $h(t, \omega')$ однієї змінної (індекс ω опущено) в імовірнісному просторі $(\Omega', \mathbf{B}', \mathbf{P}')$. ВФ однієї змінної використовуються в теорії випадкових процесів, теорії передачі сигналів, тому в більшості для них вживається назва випадковий (стохастичний) процес, а параметр t інтерпретується як час. Реалізації ВФ $h(t, \omega')$ являються профілями рельєфу поверхні півки.

Аналогічно здійснюється перехід до елементарної випадкової величини скалярного типу. При цьому випадковим чином вибирається точка x або в площині \mathbf{R}^2 , або на одній з прямих реалізацій ВФ, тоді одержується випадкова величина $h(\omega'')$, де ω'' – елементарна подія зв'язана з таким вибором у відповідному просторі $(\Omega'', \mathbf{B}'', \mathbf{P}'')$. Дана випадкова величина співпадає з другою основною характеристикою випадкового поля

(випадкової функції) – перерізом ВП (ВФ).

Таким чином, можна перейти від описання рельєфу в рамках теорії випадкових полів до його описання в рамках теорії випадкових функцій та навіть скалярних випадкових величин. Звичайно, даний перехід є уже наближенням і зв'язаний з пониженням рівня адекватності моделі, однак для різних практичних випадків це відбувається не в однаковій мірі, а залежить від кількох факторів. По-перше, для ергодичних полів воно може вважатися допустимим. Ергодичність в даному випадку можна інтерпретувати як можливість усереднення не по всьому простору Ω , тобто по багатьом варіантам вибору області D , а лише по самій області достатньо великих розмірів досліджуваної поверхні. Оскільки нерегулярності проявляються на лінійних розмірах порядку нанометрів, то статистично оправдано вибирати D порядку мкм^2 , і одержувані результати можна вважати усередненими по великому канонічному ансамблю для досліджень відбивання пучка світла на площі $\sim 1\text{мм}^2$.

По-друге, пониження розмірності відбувається з незначною втратою точності, якщо випадкове поле однорідне (аналогічно стаціонарному випадковому процесові), тобто усереднене значення реалізації ВП не залежить від вибору D в \mathbf{R}^2 , $Mh(x)=h_{\text{cp}}=\text{const}$, де \mathbf{M} – символ математичного сподівання. У випадку описання рельєфу тонкої плівки ВП будемо вважати однорідним, оскільки розглядаються структури одержані в однорідних технологічних умовах.

$$K = \begin{bmatrix} M(h_1 - m_1)^2 & M(h_1 - m_1)(h_2 - m_2) & \dots & M(h_1 - m_1)(h_n - m_n) \\ M(h_2 - m_2)(h_1 - m_1) & M(h_2 - m_2)^2 & \dots & M(h_2 - m_2)(h_n - m_n) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ M(h_n - m_n)(h_1 - m_1) & M(h_n - m_n)(h_2 - m_2) & \dots & M(h_n - m_n)^2 \end{bmatrix} \quad (2)$$

Для однорідної ВФ компоненти вектора середніх значень рівні, і їх можна прийняти рівними нулю. Тоді вираз (2) для кореляційної матриці спрощується. Як

Звичайно, існують тонкоплівкові структури, на незначній площі яких порівняно з усією їх площею створюються різкі переходи за товщиною, наприклад, клиновидні, які описуються не однорідним ВП.

По-третє, необхідно розглянути тип розподілу випадкових величин та їх залежність. Цей пункт має фундаментальне значення. Можна прослідкувати рівень адекватності моделі, розглядаючи перехід від простішого типу випадкових величин до складнішого. Розглянемо перерізи ВФ у двох точках з фіксованою віддалю між ними. Для кожної з них можна одержати однакову одномірну функцію розподілу. Вона буде характеризувати ВФ і ВП лише в деякій мірі, оскільки ці дві випадкові величини не є незалежними. Легко бачити, що при відомому результаті випробовування у першій з них легше передбачити результат у другій, ніж без нього. В залежності від віддалі між точками міра достовірності передбачення буде різною. Встановити кількісні характеристики даної залежності можна за допомогою кореляційного аналізу.

Оскільки в подальшому буде проводитися комп'ютерний статистичний аналіз, то природньо перейти від випадкових функцій до випадкових векторів, тобто дискретизованих ВФ. Для випадкового n -мірного вектора $\mathbf{h}=(h_1, h_2, \dots, h_n)$ з відповідним йому вектором середніх значень $\mathbf{m}=(m_1, m_2, \dots, m_n)$ кореляційна матриця, що показує ступінь статистичної когерентності випадкового вектора, має вигляд:

правило, практично вдається одержати лише один профіль рельєфу поверхні, лише одну реалізацію ВФ $h(t)$, $t \geq 0$, тому замість кореляційної матриці (2)

одержується кореляційний вектор, якому відповідає кореляційна функція (її також можна назвати автокореляційною)

$$K(\tau) = M[h(t)h(t+\tau)] \quad (3)$$

Очевидно, при $\tau=0$ кореляційна функція рівна дисперсії

$$K(0) = M[h^2(t)] = \sigma^2,$$

де σ - середньоквадратичне відхилення.

Якщо наблизити кореляційну функцію експонентою

$$K(\tau) = K(0)\exp[-\tau/\tau_0], \quad (4)$$

то можна одержати при цьому важливий параметр τ_0 - радіус кореляції, що показує на якому проміжку кореляційна функція спадає в e разів. Важливість τ_0 і σ полягає в тому, що саме за допомогою цих параметрів можна розрахувати, як буде показано далі, кількісні характеристики розсіювання світла на поверхні тонких плівок.

Використання кореляційної функції розрахованої з однієї лише реалізації ВФ відповідає тому, що ВФ можна задати функцією розподілу двох змінних. Це, в свою чергу, є наближенням, котре можна вважати допустимим, якщо розподіл нормальний або марківський. Марківському процесу характерна кореляційна функція виду (4), тому мірою адекватності моделі служить ступінь відхилення $K(\tau)$ від експоненціального. Оцінку нормальності розподілу можна зробити на основі двох параметрів - середньоквадратичного відхилення σ та R_a - середнього арифметичного відхилення профілю від середньої лінії на проміжку L

$$R_a = \frac{1}{L} \int_0^L |h(t)| dt \quad (5)$$

Між параметром R_a і середньоквадратичним відхиленням σ для нормального розподілу існує зв'язок

$$R_a = \sigma \sqrt{\frac{2}{\pi}} \approx 0,8\sigma, \quad (6)$$

тому формула (6) є найбільш простим критерієм існування нормального розподілу для певного профілю рельєфу

III. Розсіювання світла на нерегулярній поверхні.

Розглянемо спочатку у наближенні геометричної оптики падіння паралельного пучка світла на типову нерегулярність рельєфу плівки з лінійними розмірами $2l$ і δh (рис.1). Різниця ходу променів, для яких кут падіння θ_i дорівнює куту відбивання θ_r , рівна

$$\begin{aligned} \Delta &= AD - BC = \\ &= l(\sin \theta_r - \sin \theta_i) + \delta h(\cos \theta_r + \cos \theta_i) = \\ &= 2\delta h \cos \theta_i. \end{aligned}$$

При різниці ходу $\Delta \ll \lambda$, λ - довжина хвилі випромінювання, буде дзеркальне відбивання [6]. При досить великих розмірах нерегулярностей по товщині, $\delta h \approx \lambda$, дзеркальне відбивання буде лише тоді, коли кут падіння достатньо малий. Однак в рельєфі плівок, що досліджувались, спостерігаються тільки нерегулярності в межах $5 \div 40$ нм (див. в табл. параметр R_z), тоді $\delta h \ll \lambda$, і дзеркальне відбивання, як видно, буде завжди. При нормальному падінні пучка $\Delta = 2\delta h$, тому відбивна здатність у дзеркальному напрямі залежить лише від величини неоднорідностей, значить вона може бути мірою цих неоднорідностей. Для променів, у яких кут падіння не співпадає з кутом відбивання (рис.1), різниця ходу з однаковою імовірністю приймає як додатні, так і від'ємні значення, тобто гаситься. Випромінювання, що відповідає цим променям, буде розсіюватися. Важливо знати не лише якісні, а й кількісні характеристики, наприклад, індикатрису даного розсіювання. Точний аналіз даного процесу можна провести лише на основі векторної теорії дифракції Гюйгенса-Кірхгофа-Гельмгольца, що базується на розв'язуванні рівнянь Максвелла з крайовими умовами неперервності складових електромагнітного поля [7]. Такий точний підхід зв'язаний з

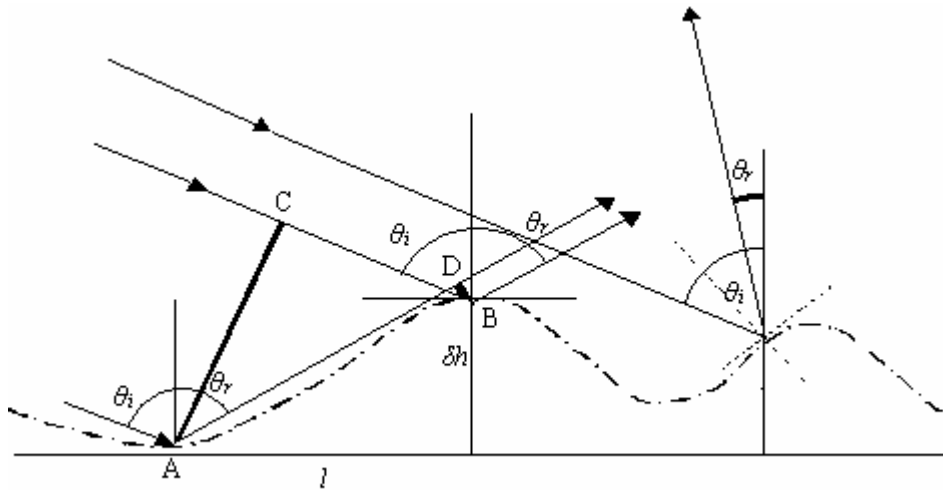


Рис. 1. Відбивання променів від нерегулярностей рельєфу тонкої плівки в наближенні геометричної оптики.

неабиякими труднощами у зв'язку з кількома особливостями даної задачі. По-перше, це особливість крайових умов, які по двох декартових координатах ставляться на нескінченності. По-друге, оскільки розміри неоднорідностей по товщині значно менші довжини хвилі, то перехід до скалярної теорії можна зробити лише з великою втратою точності, а математична задача чисельного аналізу спрощується при цьому незначно. По-третє, розглядаючи задачу у видимій області спектра і ближній зоні ІЧ випромінювання, бачимо, що оптичні властивості ХСН змінюються з близьких до металічних на цілком діелектричні, що надзвичайно ускладнює задачу дифракції навіть для тіл простої форми, оскільки вже неможливо скористатися нульовими граничними умовами.

В цілому дану задачу можна інтерпретувати як задачу розсіювання на статистично невпорядкованій двохмірній дифракційній ґратці скінченної або нульової провідності. В наближенні одномірної ґратки з нескінченною провідністю можна одержати кількісні характеристики розсіювання в енергетичних термінах фотометрії в рамках статистичного підходу [8].

Розмістимо зразок в центрі півсфери зв'язаної з декартовою і відповідною сферичною системами

координат так, щоб його площина співпадала з площиною xu . Джерело освітлення виберемо так, щоб падаючий і дзеркально відбитий пучки знаходилися в площині xz (рис.2).

Елемент площі поверхні плівки $d\sigma$, що містить точку (x,y) , за одиницю часу відбиває в напрямі (θ,φ) та в межах елементарного тілесного кута $d\omega$ усереднену по часу енергію $dP=B\cos\theta d\sigma d\omega$. Відбивання вважаємо абсолютним, тоді падаючий світловий потік $d\Phi_i$ рівний відбитому світловому потоку $d\Phi_r$, що містить дзеркально відбите когерентне випромінювання і дифузно розсіяне випромінювання у півпростір. Коефіцієнт $B(x,y,\theta,\varphi)$ являється енергетичною яскравістю в

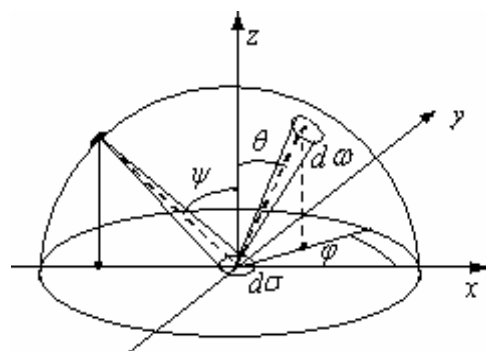


Рис. 2. Схема ілюстрації падаючого і розсіяного світлових потоків в декартовій і сферичній системах координат.

точці (x,y) в напрямку елементарного тілесного кута $d\omega$, а інтеграл

$$E(x, y, \theta, \varphi) = \iint_{\Omega} B(x, y, \theta, \varphi) \cos \theta d\omega$$

– енергетичною освітленістю в точці (x,y) в напрямку тілесного кута Ω [9]. Освітленість по всьому півпростору, тобто в межах тілесного кута $\Omega=2\pi$, є енергетичною світністю

$$M = \iint_{\Omega=2\pi} B(x, y, \theta, \varphi) \cos \theta d\omega.$$

При нормальному падінні напрямленого потоку світла освітленість буде співпадати з інтенсивністю випромінювання, що визначається через вектор Умова-Пойнтінга.

Введемо коефіцієнт відбивання як відношення відбитого потоку до падаючого, а для того, щоб описати розподіл потужності в просторі, тобто мати індикатрису розсіювання, введемо коефіцієнт яскравості як відношення освітленості в напрямку (θ, φ) до

світності. Зручно замість світності досліджуваної поверхні взяти світність еквівалентної ламбертової поверхні, тобто такої, що кожна елементарна її площадка у всіх напрямках буде мати однакову яскравість B_L при такому ж падаючому світловому потокові. Тоді коефіцієнт відбивання

$$\rho = E(x, y, \theta, \varphi) / M = E(x, y, \theta, \varphi) / \pi B_L =$$

$$= \frac{1}{\pi} \iint_{\Omega} \frac{B(x, y, \theta, \varphi)}{B_L} \cos \theta d\omega = \frac{1}{\pi} \iint_{\Omega} \beta \cos \theta d\omega = \frac{1}{\pi} \iint_{\Omega} (\beta_c + \beta_{nc}) \cos \theta d\omega$$

де $\beta, \beta_c, \beta_{nc}$ – коефіцієнт яскравості та його когерентна і некогерентна складові відповідно.

Некогерентну складову можна розрахувати за формулою [7]:

$$\beta_{nc}(\psi; \theta, \varphi) = \frac{\pi^2 (\tau_0 / \lambda)^2}{\cos \psi \cos \theta} F(\psi; \theta, \varphi) \exp[-G(\sigma / \lambda, \psi, \theta)] \times \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n! n} [G(\sigma / \lambda, \psi, \theta)]^n \exp[-\pi^2 n^{-1} (\tau_0 / \lambda)^2 H(\psi; \theta, \varphi)] \quad (7)$$

де

$$F(\psi; \theta, \varphi) = \left[\frac{1 + \cos \psi \cos \theta - \sin \psi \sin \theta \cos \varphi}{\cos \psi + \cos \theta} \right]^2,$$

$$G(\sigma / \lambda, \psi, \theta) = [2\pi(\sigma / \lambda)(\cos \psi + \cos \theta)]^2,$$

$$H(\psi; \theta, \varphi) = \sin^2 \psi + \sin^2 \theta - 2 \sin \psi \sin \theta \cos \varphi,$$

де σ - середньоквадратичне відхилення, τ_0 - кореляційна довжина, λ - довжина хвилі світла.

Розрахувавши коефіцієнт яскравості для всіх напрямків поширення дифузно розсіяного випромінювання, можна знайти коефіцієнт розсіювання,

тобто дифузно розсіяну частину світлового потоку

$$\rho_{nc} = \frac{1}{\pi} \iint_{\Omega=2\pi} \beta_{nc}(\psi; \theta, \varphi) \cos \theta d\omega.$$

Очевидно, що повний коефіцієнт відбивання ρ становить одиницю.

IV. Розрахунки і аналіз результатів.

На основі викладеного вище підходу аналізувалися поверхні тонких плівок, одержаних термічним напленням у вакуумі халькогенідних склоподібних напівпровідників $Ge_2S_3:M$, де M – модифікатор Al, Bi, Pb або Te . Введення певного модифікуючого елемента в ХСН приводило до значних змін в морфології поверхні плівок, які експериментально досліджувалися на атомно-силовому мікроскопі Dimension™ 3000 [10]. Одержані профілі поверхні на проміжках 1-5 мкм оцифровувалися за допомогою комп'ютерної програми-дігітайзера і розміщувалися в масиви розмірності $n=100$. Далі проводився кореляційний аналіз на основі формули (3), представлені в дискретизованому вигляді. Компоненти вектора $k=(k_1, k_2, \dots, k_{n/2})$ відповідного кореляційній функції $K(t)$ для вектора профілю $h=(h_1, h_2, \dots, h_n)$ обчислювалися за формулою:

$$k_j = \frac{2}{n} \sum_{i=1}^{n/2} h_i h_{i+j-1}, j = 1, 2, \dots, n/2.$$

Кореляційні функції і відповідні їм профілі поверхні для плівок різних складів наведені на рис. 3-8. Кордината t і змінна τ наводяться в мікрометрах, значення функції зміни товщини плівки $h(t)$ в нанометрах і кореляційна функція нормована на σ^2 в безрозмірних одиницях.

Далі визначався радіус кореляції τ_0 . Оскільки цей параметр має зміст віддалі, якій відповідає середньостатистична похила грань рельєфу, то визначався ще один

статистичний параметр – відношення σ/τ_0 , що є середньоквадратичним нахилом граней (тангенсом кута нахилу). Ці та інші статистичні параметри, наприклад, R_z – висота нерівностей, середня відстань між п'ятьма найвищими і п'ятьма найнижчими точками профілю на проміжку L :

$$R_z = \frac{1}{5} \left(\sum_{i=1}^5 h_i^{\max} - \sum_{i=1}^5 h_i^{\min} \right)$$

для різних типів тонких плівок наведені в таблиці.

Оцінки за допомогою кореляційної функції приводять до таких результатів. Кореляційній функції, що досить різко спадає до нуля, а потім осцилює із помітно затухаючою амплітудою відповідає тонка структура без періодичної компоненти. Як видно із даних, найбільш близькою до такої є структура рельєфу плівки на основі чистого Ge_2S_3 (рис. 3).

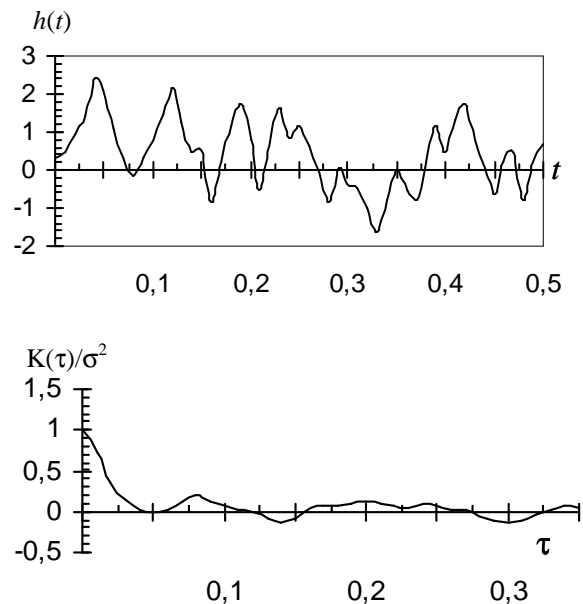


Рис.3. Профіль рельєфу і кореляційна функція для плівки складу Ge_2S_3 .

Якщо кореляційна функція має вигляд майже періодичної функції, то в профілі є періодична складова. Такими будуть профілі всіх інших типів, а особливо це помітно на структурі

$Ge_2S:Te$, яку слід розглянути окремо (рис. 4).

На рис. 4 наведено типовий профіль даної структури на проміжку 5 мкм. Як бачимо, характер нерегулярностей поверхні суттєво відрізняється на різних частинах проміжку. На інтервалах АВ, CD ділянки неоднорідності хоча і добре корелюють, однак є розподіленими по закону досить близькому до гаусівського (табл.), а на інтервалі ВС спостерігається майже функціональна залежність (рис. 5). Такі „викиди” по товщині в рельєфі даної структури, як на інтервалі ВС, спостерігаються всюди по поверхні

плівки [10]. Віддаль між ними становить близько 1 мкм, розміщення їх майже впорядковане, тому в даному випадку було б доцільним представити функцію профілю сумою двох складових – нормальної і майже періодичної складової. В даному випадку ми стикаємося не з однорідною ВФ, коли аналіз на основі даного підходу малоєфективний, коли розглядати профіль по всій довжині. Однак, якщо провести аналіз на різних проміжках, можна зробити певні припущення і щодо самої внутрішньої структури даних плівок.

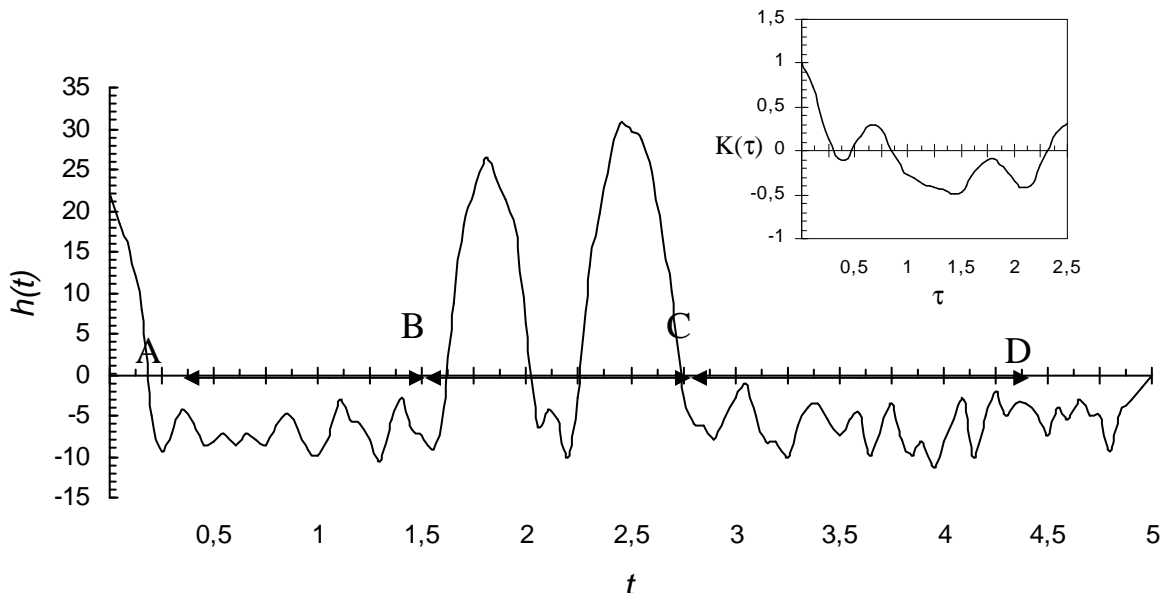


Рис.4. Профіль рельєфу і кореляційна функція для плівок складу $Ge_2S_3:Te$.

Як бачимо, на проміжках, де не спостерігається великих амплітуд нерегулярностей, розподіл близький до нормального, що характерно для стехіометричного складу у випадку чистого Ge_2S_3 . Таким чином, не виключено, що на цих областях плівки сполуки утворюють випадкову сітку, в той час як в областях „викидів” ймовірно утворення мікросталічної структури. Результати кореляційного аналізу для плівок з вмістом $Ge_2S_3:Pb$, $Ge_2S_3:Al$ та $Ge_2S_3:Bi$ приведено на рис. 6-8 відповідно. Інтерес представляють наступні особливості. Для складу із

свинцем розподіл дуже близький до нормального, є великий рівень кореляції, періодична складова і, що відрізняє цей формування зв'язків в склоподібній структурі, так і з певними неоднорідностями технологічних умов. Структура з вісмутом має добре корельовані форми нерегулярностей, при цьому розподіл в даному випадку найбільш близький до нормального.

Найбільше відхилення від нормального розподілу спостерігається в профілі для складу $Ge_2S_3:Al$. Крім цього, як і у випадку плівок з вмістом телуру, в даному рельєфі спостерігаються

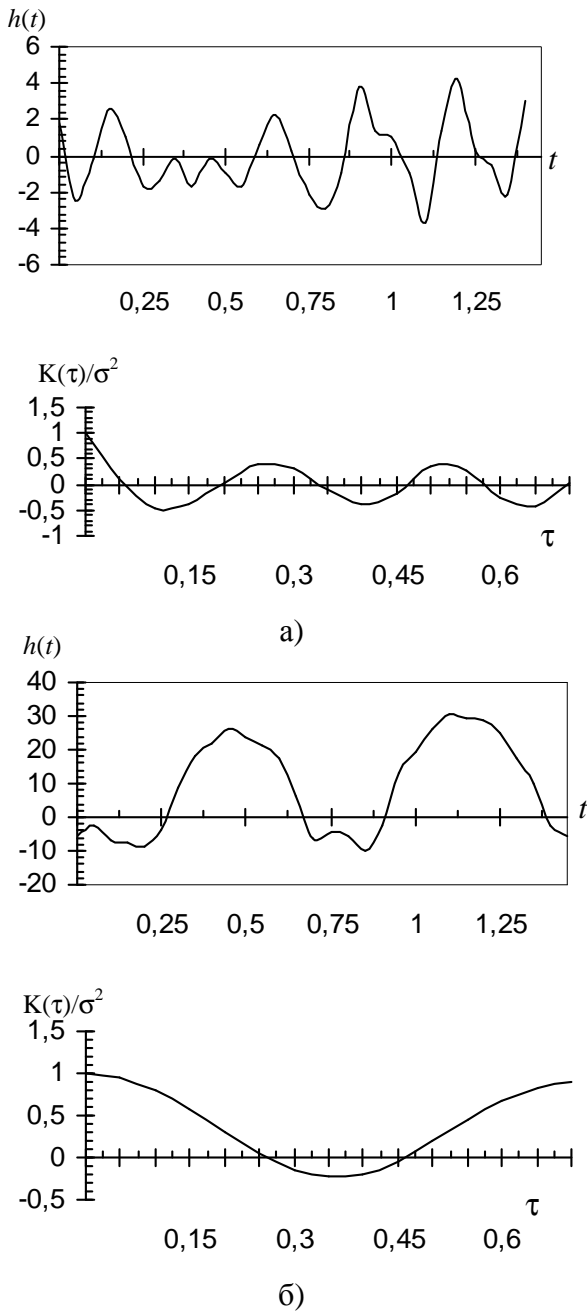


Рис.5. Профілі рельєфу і кореляційні функції для плівок складу $Ge_2S_3:Te$ на різних проміжках профілю: а) АВ, CD; б) ВС (див. також рис. 4).

великі відхилення від середнього значення в областях, що розміщені досить впорядковано, що теж свідчить про можливість мікрокристалічних утворень. При визначенні оптичних констант таких плівок необхідно враховувати не стільки дифузне розсіювання на їх поверхні, скільки дифракцію на майже періодичній двохмірній дифракційній ґратці. Однак,

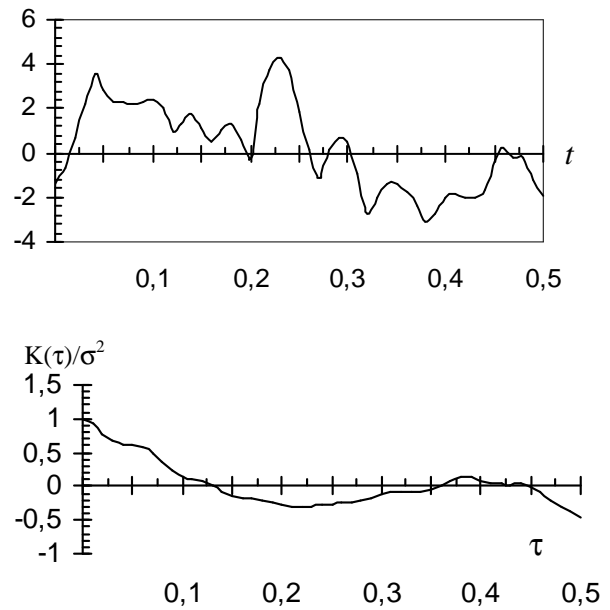


Рис. 6. Профіль рельєфу і кореляційна функція для плівки складу $Ge_2S_3:Pb$.

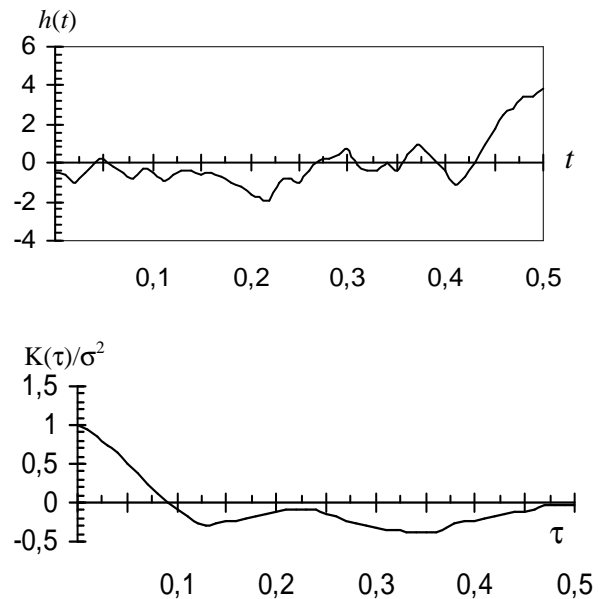


Рис. 7. Профіль рельєфу і кореляційна функція для плівок складу $Ge_2S_3:Al$.

оскільки експериментально на даний час нам не вдалося одержати числові масиви для подібних двохмірних функцій рельєфу на значно більших площах, ніж у даній роботі, то такі дослідження є поки що лише у перспективі. В даній роботі розраховувалось розсіювання світла на нерегулярностях поверхні в рамках статистичного підходу на основі формул (7). Статистичні параметри для різних

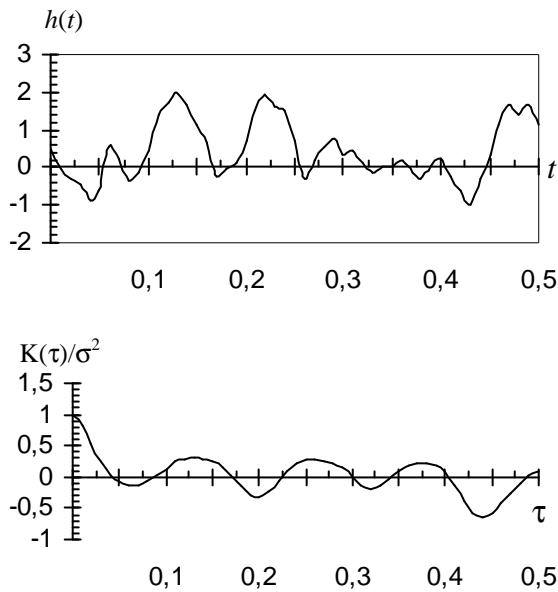


Рис. 8. Профіль рельєфу і кореляційна функція для плівок складу $Ge_2S_3:Bi$.

складів тонких плівок на різних довжинах хвилі випромінювання приведені в таблиці. Для довжини хвилі вибиралися чотири значення : у ближній УФ області $\lambda=0,2$ мкм, у видимій області спектру $\lambda=0,65$ мкм та в ближній ІЧ

області $\lambda=1,0$ мкм, $\lambda=5,0$ мкм, що пояснюється напрямками практичного використання даних тонких плівок.

Вибиралися два значення кута падіння світлового потоку ψ – одне близьке до нормального падіння $\psi=10^\circ$, а друге близьке до ковзного падіння $\psi=80^\circ$.

Розрахунки привели до наступних результатів. При кутові падіння близькому до нормального $\psi=10^\circ$ на малій довжині хвилі ($\lambda=0,2$ мкм) процес розсіювання, як і слід було очікувати, суттєво чутливий до рельєфу структури. По мірі зростання розміру нерегулярностей змінюється вигляд розподілу розсіяної частини світлового потоку – максимум розподілу зсувається від напрямку по нормалі до напрямку дзеркального відбивання. Для складів Ge_2S_3 та $Ge_2S_3:Bi$ найбільше розсіювання в напрямку нормальному до площини поверхні, а при збільшенні кута спостереження величина світлового потоку зменшується

Таблиця. Статистичні параметри рельєфу плівок різних складів.

	Ge_2S_3	$Ge_2S_3:Al$	$Ge_2S_3:Bi$	$Ge_2S_3:Pb$	$Ge_2S_3:Te$ (AD)	$Ge_2S_3:Te$ (AB,CD)	$Ge_2S_3:Te$ (BC)	
R_a (нм)	0,741	1,013	0,634	2,03	8,43	1,631	12,94	
R_z (нм)	3,862	6,597	3,094	8,58	38,82	5,827	36,22	
σ (нм)	0,938	1,494	0,796	2,35	11,14	1,979	13,98	
τ_0 (мкм)	0,02	0,06	0,03	0,08	0,20	0,05	0,20	
σ/τ_0	0,047	0,025	0,027	0,029	0,056	0,040	0,070	
σ/λ	$\lambda=0,2$ мкм	0,005	0,007	0,004	0,012	0,056	0,010	0,070
	$\lambda=0,65$ мкм	0,001	0,002	0,001	0,004	0,017	0,003	0,022
	$\lambda=1$ мкм	0,001	0,001	0,001	0,002	0,011	0,002	0,014
	$\lambda=5$ мкм	0,0002	0,0003	0,0002	0,0005	0,0022	0,0004	0,0028
τ_0/λ	$\lambda=0,2$ мкм	0,10	0,30	0,15	0,40	1,00	0,25	1,00
	$\lambda=0,65$ мкм	0,03	0,09	0,05	0,12	0,31	0,08	0,31
	$\lambda=1$ мкм	0,02	0,06	0,03	0,08	0,20	0,05	0,20
	$\lambda=5$ мкм	0,004	0,01	0,01	0,02	0,04	0,01	0,04
Критерій нормальності розподілу $R_a/0,8\sigma$	0,99	0,85	1,00	1,08	0,95	1,03	1,16	

майже лінійно (рис. 7). У випадку більших нерегулярностей, як для складів $Ge_2S_3:Al$ та $Ge_2S_3:Pb$, спадання величини світлового потоку змінюється на експоненціальне. Для складу $Ge_2S_3:Te$, якому відповідає найбільш груба структура рельєфу, характер розсіювання суттєво змінюється. Максимум коефіцієнта яскравості знаходиться в напрямі кута дзеркального відбивання, а в напрямках відхилення від дзеркального відбувається його стрімке зменшення (рис. 7).

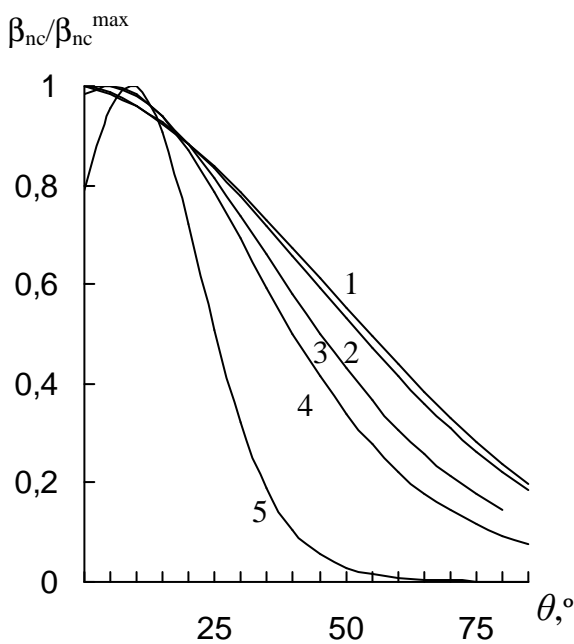


Рис. 7. Індикатриси розсіювання випромінювання на поверхні тонких плівок : 1- Ge_2S_3 , 2- $Ge_2S_3:Bi$, 3- $Ge_2S_3:Al$, 4- $Ge_2S_3:Pb$, 5- $Ge_2S_3:Te$; $\lambda=0,2$ мкм; $\psi=10^\circ$.

У видимому діапазоні спектру при $\lambda=0,65$ мкм структури з $R_z=3 \div 10$ нм характеризуються практично однаковими індикатрисами розсіювання, однак залежать від кута падіння світлового потоку (рис. 8,9). При кутах близьких до ковзного падіння спостерігається різкий експоненціальний спад потужності розсіяного потоку від максимуму в напрямку по нормалі до нуля в напрямку дзеркального відбивання (рис. 9). Це свідчить про те, що частина розсіяного потоку в цьому випадку

значно менша, ніж у випадку кута падіння близького до нормалі, що пояснюється зростанням ролі дифракційних ефектів при ковзному падінні по відношенню до процесу розсіювання.

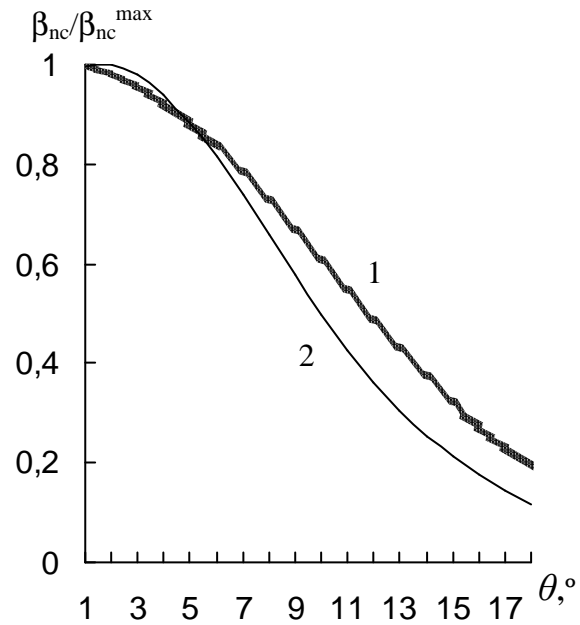


Рис. 8. Індикатриси розсіювання випромінювання на поверхні тонких плівок : 1- Ge_2S_3 , $Ge_2S_3:Bi$, $Ge_2S_3:Al$, $Ge_2S_3:Pb$, 2- $Ge_2S_3:Te$; $\lambda=0,65$ мкм; $\psi=10^\circ$.

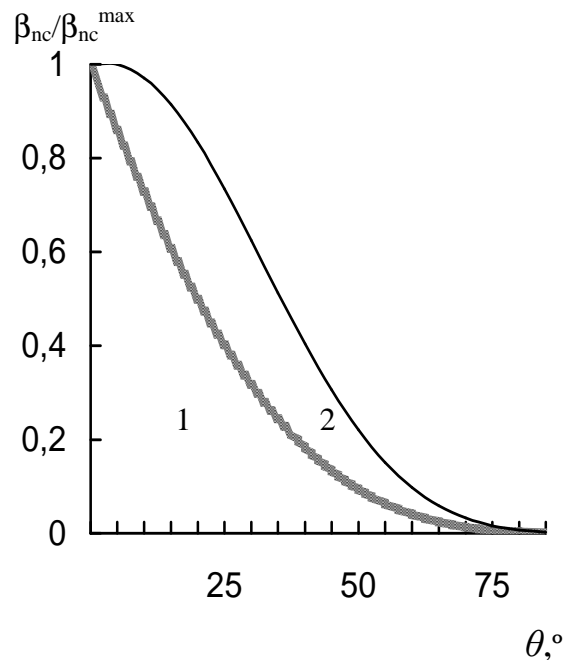


Рис. 9. Індикатриси розсіювання випромінювання на поверхні тонких плівок : 1- Ge_2S_3 , $Ge_2S_3:Bi$, $Ge_2S_3:Al$, $Ge_2S_3:Pb$, 2- $Ge_2S_3:Te$; $\lambda=0,65$ мкм; $\psi=80^\circ$.

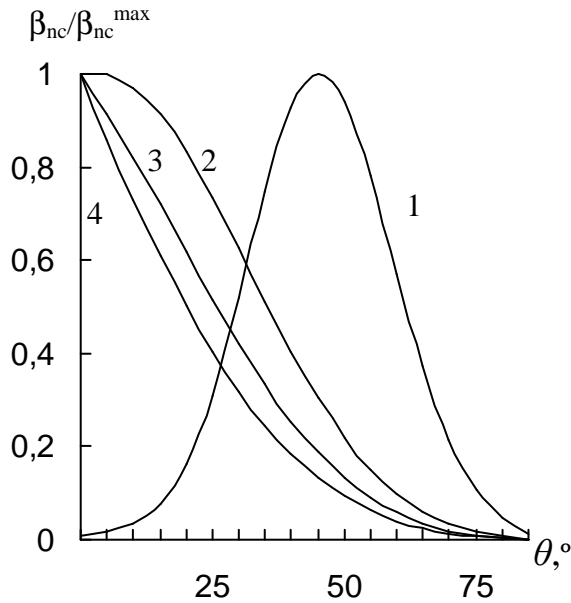


Рис. 10. Індикатриси розсіювання випромінювання на поверхні тонкої плівки складу $Ge_2S_3:Te$ на різній довжині хвилі: 1- 0,2 мкм, 2- 0,65 мкм, 3- 1,0 мкм, 4- 5,0 мкм; $\psi=80^\circ$.

Як видно з рис. 8-10, індикатриса розсіювання для рельєфу поверхні плівок складу $Ge_2S_3:Te$, якому властиві великі розміри нерегулярностей ($R_z \approx 35$ нм), порівняно з довжиною хвилі світла, в значній мірі відрізняється від усіх інших випадків. Таким чином, при дослідженні оптичних властивостей тонких плівок ХСН у видимому діапазоні спектру

Література:

1. А.П.Хусу, Ю.Р.Витенберг, В.А.Пальмов, Шероховатость поверхностей (теоретико-вероятностный подход) (Наука, Москва, 1975).
2. А.Н.Колмогоров, С.В.Фомин, Элементы теории функций и функционального анализа (Наука, Москва, 1989).
3. Ю.П.Пытьев, И.А.Шишмарев, Курс теории вероятностей и математической статистики для физиков (Изд. МГУ, Москва, 1983).

важливо враховувати ефекти дифракції та розсіювання світла.

V. Висновки.

1. Проаналізовано різні форми підходу до створення математичної моделі розрахунку кількісних характеристик розсіювання випромінювання на поверхні тонких плівок, одержаних вакуумним напиленням. Показано, що найбільш строгим шляхом є введення відповідного імовірнісного простору і розгляд на ньому випадкового поля, як найбільш загальної теоретико-імовірнісної моделі рельєфу тонких плівок. Обґрунтовано перехід до розгляду реалізацій випадкових функцій як спрощення моделі і розрахунку в її рамках статистичних параметрів, що відображають закономірності рельєфу поверхні тонких плівок.

2. На основі експериментально одержаних профілів тонких плівок різного складу ХСН розраховано кореляційні функції та інші статистичні характеристики, що впливають на якісні і кількісні показники розсіювання. Показано, що різні особливості в рельєфі плівок суттєво впливають на їх оптичні властивості зв'язані з розсіюванням випромінювання на поверхні.

4. Ю.А.Розанов, Теория вероятностей, случайные процессы и математическая статистика (Наука, Москва, 1989).
5. Н.Н.Леоненко, М.И.Ядренко, О некоторых нерешенных проблемах анализа и теории вероятностей (В кн.: Математика сегодня, вып. 5, Вища школа, Киев, 1989).
6. Д.В.Сивухин, Оптика (Наука, Москва, 1985).
7. С.Солимено, Б.Крозиньяни, П.Ди Порто, Дифракция и волноводное распространение оптического излучения (Мир, Москва, 1989).

8. А.С.Топорец, Оптика шероховатой поверхности (Машиностроение, Ленинград, 1988).

9. М.Борн, С.Вольф, Основы оптики (Наука, Москва, 1973).

10. Н.В.Юркович, Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика. 13 (2003).

ANALYSIS OF LIGHT SCATTERING BY IRREGULAR SURFACE OF GLASSY CHALCOGENIDE THIN FILMS IN THE FRAMEWORK OF STATISTICAL APPROACH

M.I. Kozak, I.M. Myholynets, N.V. Yurkovych

Uzhgorod national university

Surface relief of vacuum-evaporated glassy chalcogenide semiconductor thin films is analysed from the point of view of theory of probability. Using statistical correlation parameters of the film surface profile the indicatrices of light scattering on their surface are calculated. The calculations are performed for five experimentally studied types of the thin films: based on pure Ge_2S_3 and Ge_2S_3 modified with aluminium, lead, bismuth and tellurium.