

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СПЕКТРАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК КОРОТКОПЕРІОДНИХ СТРУКТУР З ЧАСТКОВО НЕОДНОРІДНИМИ ПЛІВКАМИ

Розроблено модель та досліджено вплив приповерхневої та перехідної областей з неоднорідними розподілами показника заломлення на спектральні характеристики четвертьхвильового одиничного шару, відрізаючого та вузькосмугового фільтрів.

The model has been developed and the influence of near-surface and transition regions with inhomogeneous distributions of the refractive index on spectral characteristics of a quarter-wave single layer of cut-off and narrow-band filters has been studied.

При синтезі оптичних короткоперіодних структур вважають, що межі на границях плівка-підкладка і плівка-плівка є різкими [1]. Тому неоднорідності на межах розділу плівка-підкладка є небажаними, так як затрудняють контроль геометричної товщини плівок при їх виготовленні [1]. Необхідність в нових матеріалах для оптичних покриттів стимулювала дослідження профілю показника заломлення і концентраційного профілю компонент плівок безкисневих некрystalічних матеріалів. Показники заломлення некрystalічних плівок на основі некрystalічних напівпровідників можуть неперервно змінюватися від 2.1 до 5. Такі плівки в залежності від складу є прозорими як у видимій так і у інфрачервоній ділянках спектру [2]. Межі зміни показників заломлення некрystalічних плівок є привабливими для доповнення існуючих стандартів новими високозаломлюючими матеріалами для оптичних покриттів. Експериментально виявлено, що на межах розділу високозаломлююча некрystalічна плівка-підкладка і плівка-вакуум виникають неоднорідності складу і відповідно показника заломлення [1-5]. Особливості характеристик оптичних короткоперіодних структур з частково неоднорідними плівками практично не досліджені. Тому метою даної роботи було моделювання спектральних характеристик короткоперіодних структур з частково неоднорідною високозаломлюючою компонентою.

При розрахунках спектральних характеристик короткоперіодних структур в загальному випадку будемо враховувати перехідну і приповерхневу область у високозаломлюючій компоненті [2, 3]. Позначимо їх товщини через d_v і d_p відповідно. З експерименту відомо, що геометрична товщина приповерхневої області (d_v) може досягати до 5 нм, а перехідної (d_p) – до 30 нм [2].

Задання неоднорідності показника заломлення з розподілом $n(z)$ по товщині в перехідному шарі здійснюється наступним чином. Перехідний шар розбивається на m_p рівних по товщині зон і значення показника заломлення в залежності від типу розподілу рівне значенню наведеному в таблиці 1. Аналогічно задається неоднорідність у приповерхневому шарі.

Таблиця 1. Значення показника заломлення j -ої зони приповерхневої і перехідної областей в залежності від розподілу.

Розподіли	Показник заломлення j -ої зони перехідної області, n_{pj}	Показник заломлення j -ої зони приповерхневої області, n_{vj}
Ступінчастий	n_p	n_v
Лінійний	$n_f + \frac{(n_p - n_f)}{m_p - 1} \cdot (j - 1)$	$n_v - \frac{(n_v - n_f)}{m_v - 1} \cdot (j - 1)$
Квадратичний	$n_f + \frac{(n_p - n_f)}{(m_p - 1)^2} \cdot (j - 1)^2$	$n_v - \frac{(n_v - n_f)}{(m_v - 1)^2} \cdot (j - 1)^2$
Логарифмічний	$n_f + \frac{(n_p - n_f)}{\ln(m_p)} \cdot \ln(j)$	$n_v - \frac{(n_v - n_f)}{\ln(m_v)} \cdot \ln(j)$
Експоненціальний	$n_f + \frac{(n_p - n_f)}{e^{m_p - 1} - 1} \cdot (e^{j-1} - 1)$	$n_v - \frac{(n_v - n_f)}{e^{m_v - 1} - 1} \cdot (e^{j-1} - 1)$

Значення показника заломлення в перехідному шарі за законом $n(z)$ буде змінюватись від n_f до n_p , а в приповерхневому – від n_v до n_f .

Геометрична товщина центральної частини плівки (d_f) у цьому випадку:

$$d_f(d_p, d_v) = \frac{1}{n_f} \left(\frac{\lambda_0}{k} - d_p \cdot n_{sp} - d_v \cdot n_{sv} \right), \text{ де } n_{sp} = \frac{1}{m_p} \sum_{j=1}^{mp} n_{pj}, \quad n_{sv} = \frac{1}{m_v} \sum_{j=1}^{mv} n_{vj}. \quad (1)$$

Змінні n_{sp} і n_{sv} – середні значення показника заломлення в перехідному і приповерхневому шарах відповідно; m_p і m_v – кількість розбиттів перехідного і приповерхневого шару відповідно; $k=2$ – коли розглядається напівхвильовий шар і $k=4$ – коли розглядається четвертьхвильовий шар; n_f – показник заломлення центральної частини плівки; n_{pj} і n_{vj} – показники заломлення j -тої зони при розбитті перехідної і приповерхневої області відповідно (табл.1), λ_0 – робоча довжина хвилі.

Промодельємо вплив перехідного і поверхневого шару в високозаломлюючій компоненті на спектральні характеристики структур за допомогою матричного методу Абеле [6].

Вибираючи за параметри показник заломлення n , геометричну товщину шару d і довжину хвилі λ , можна записати характеристичну матрицю одного шару таким чином [2-6]:

$$M_s(n, d, \lambda) = \begin{vmatrix} \cos \delta(n, d, \lambda) & -\frac{i}{p} \sin \delta(n, d, \lambda) \\ -ip \sin \delta(n, d, \lambda) & \cos \delta(n, d, \lambda) \end{vmatrix},$$

де $\delta(n, d, \lambda) = \frac{2\pi \cdot n \cdot d \cdot \cos \theta}{\lambda}$, $i = \sqrt{-1}$, θ – кут між променем і нормаллю до площини падіння.

Значення $p = n \cos \theta$ для ТЕ хвилі (s -поляризація) і $p = \frac{n}{\cos \theta}$ для ТМ хвилі (p -поляризація). Будемо вважати, що кут падіння співпадає з перпендикуляром до площини падіння ($\theta \approx 0$) і, відповідно, $p = n$.

Характеристичні матриці перехідного і приповерхневого шару будуть рівні відповідно:

$$M_p(\lambda) = \prod_{j=0}^{mp-1} M_s(n_{pj}, d_p, \lambda), \quad (2)$$

$$M_v(\lambda) = \prod_{j=0}^{mv-1} M_s(n_{vj}, d_v, \lambda). \quad (3)$$

Отже, якщо брати до уваги наявність приповерхневого і перехідного шарів, то використовуючи формули (1)-(3), можна записати характеристичну матрицю даної неоднорідної структури [7]:

$$M(\lambda) = M_v(\lambda) \cdot M_s(n_f, d_f(d_p, d_v), \lambda) \cdot M_p(\lambda),$$

де n_f – показник заломлення центральної частини плівки. Як бачимо, вона рівна добутку характеристичних матриць приповерхневого шару, центральної частини і перехідного шару.

Перейдемо до розгляду багат шарових структур. Спочатку розглянемо елементарний відрізаючий фільтр конструкції S-BНВ..ВНВ.

Будемо вважати, що високозаломлюючий шар містить перехідну і приповерхневу область. Тоді його характеристична матриця буде рівною:

$$M_B(\lambda) = M_v(\lambda) \cdot M_s(n_B, d_f(d_p, d_v), \lambda) \cdot M_p(\lambda), \quad (4)$$

де n_B – показник заломлення центральної частини високозаломлюючого шару.

Низькозаломлюючий шар буде мати характеристичну матрицю рівною:

$$M_H(\lambda) = M_s(n_H, d_f(d_p, d_v), \lambda), \quad (5)$$

де n_H – показник заломлення низькозаломлюючого шару.

Беручи це до уваги, ми можемо записати характеристичну матрицю $(2k+1)$ -шарової структури типу S-BНВ..ВНВ:

$$M(\lambda) = \prod_{i=1}^k (M_B(\lambda) \cdot M_H(\lambda)) \cdot M_B(\lambda).$$

Розглянемо вузькосмуговий фільтр з конструкцією S-ВН..2В..НВ. Якщо вважати, що високозаломлюючий шар містить перехідну і приповерхневу область, тоді його характеристична матриця визначається формулою (4), а низькозаломлюючого шару – формулою (5). Характеристичну матрицю $(4k+1)$ -шарової структури типу S-BНВ..2В..ВНВ можемо задати формулою:

$$M(\lambda) = \prod_{i=1}^k (M_B(\lambda) \cdot M_H(\lambda)) \cdot M_S \left(n_B, \frac{1}{n_B} \left(\frac{\lambda_0}{2} - d_p \cdot n_{sp} - d_v \cdot n_{sv} \right), \lambda \right) \cdot \prod_{i=1}^k (M_H(\lambda) \cdot M_B(\lambda)).$$

Знаючи характеристичну матрицю всієї структури, ми легко можемо знайти коефіцієнт пропускання:

$$T(\lambda) = 1 - \left[\frac{n_0(M_{11}(\lambda) + n_s \cdot M_{12}(\lambda)) - (n_s \cdot M_{22}(\lambda) + M_{21}(\lambda))}{n_0(M_{11}(\lambda) + n_s \cdot M_{12}(\lambda)) + (n_s \cdot M_{22}(\lambda) + M_{21}(\lambda))} \right]^2,$$

де n_0, n_s – показники заломлення зовнішнього середовища і підкладки відповідно.

Беручи до уваги вищевказані теоретичні відомості, дослідимо як буде впливати перехідна і приповерхнева області на спектральні характеристики одношарової четвертьхвильової структури при різних робочих довжинах хвиль. Для таких розрахунків було розроблено відповідне програмне забезпечення.

Предметом дослідження буде некрystalічна плівка a-GeS₂ нанесена на скляну підкладку ($n_s=1.51$). В якості робочих довжин хвиль використаємо довжини хвиль найбільш розповсюджених лазерів – 480 [7], 630, 750, 1000, 3000 нм.

Перехідний і приповерхневий шари розглядалися з максимально можливими товщинами $d_p=30$ нм і $d_v=5$ нм. Значення показників заломлення в центральній частині плівки, перехідного та приповерхневого шарів при різних робочих довжинах хвиль показано в таблиці 2.

Таблиця 2. Значення коефіцієнтів заломлення центральної частини плівки, перехідного та приповерхневого шарів для різних робочих довжин хвиль

№ п/п	λ_0 , нм	n_f	n_p	n_v
1	480	2.1	2.6	2.6
2	630	2.05	2.5	2.5
3	750	2.05	2.45	2.45
4	1000	2.00	2.4	2.4
5	3000	2.00	2.4	2.4

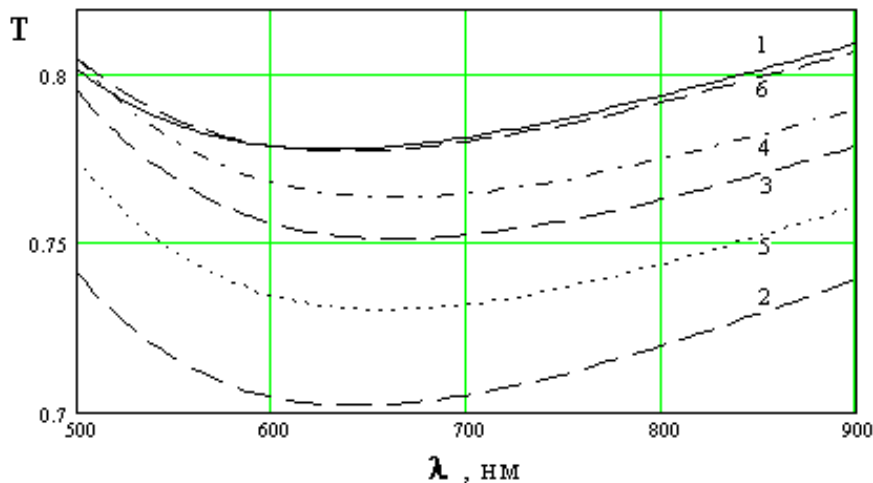


Рис.1. Спектральні характеристики одиночного четвертьхвильового шару ($\lambda_0=630$ нм) в ідеальному випадку та при наявності перехідної області з різними розподілами показника заломлення:

- 1 – ідеальний випадок;
- 2 – зі ступінчастим розподілом показника заломлення;
- 3 – з лінійним розподілом показника заломлення;
- 4 – з квадратичним розподілом показника заломлення;
- 5 – з логарифмічним розподілом показника заломлення;
- 6 – з експоненціальним розподілом показника заломлення.

Модельний експеримент показав, що в одиночному четвертьхвильовому шарі, коефіцієнт пропускання при наявності перехідної чи приповерхневої областей зменшується (рис.1-2). Найбільше впливає на спектральні характеристики ступінчастий розподіл показника заломлення. Далі йдуть логарифмічний, лінійний, квадратичний та

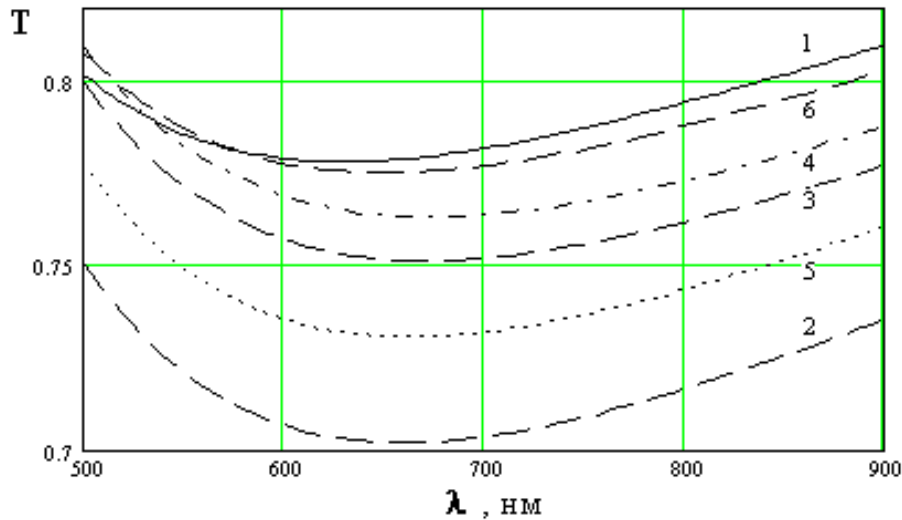


Рис.2. Спектральні характеристики одиночного четвертьхвильового шару ($\lambda_0=630$ нм) в ідеальному випадку та при наявності приповерхневої та перехідної області з різними розподілами показника заломлення:

- 1 – ідеальний випадок;
- 2 – зі ступінчастим розподілом показника заломлення;
- 3 – з лінійним розподілом показника заломлення;
- 4 – з квадратичним розподілом показника заломлення;
- 5 – з логарифмічним розподілом показника заломлення;
- 6 – з експоненціальним розподілом показника заломлення.

експоненціальний. Це твердження поширюється на всі розглядувані довжини хвилі як при наявності перехідної області, так і при наявності перехідної та приповерхневої області.

Використавши обчислювальні методи можна визначити числові характеристики впливу приповерхневої і перехідної областей на спектральні характеристики структури.

При наявності перехідної і приповерхневої областей з ступінчастим розподілом показника заломлення, коефіцієнт пропускання при робочій довжині хвилі $\lambda_0=480$ нм зменшується на $\Delta T = 0.125$, при $\lambda_0=630$ нм – на $\Delta T = 0.076$, при $\lambda_0=750$ нм – на $\Delta T = 0.051$, при $\lambda_0=1000$ нм – на $\Delta T = 0.031$ і при $\lambda_0=3000$ нм – на $\Delta T = 0.005$.

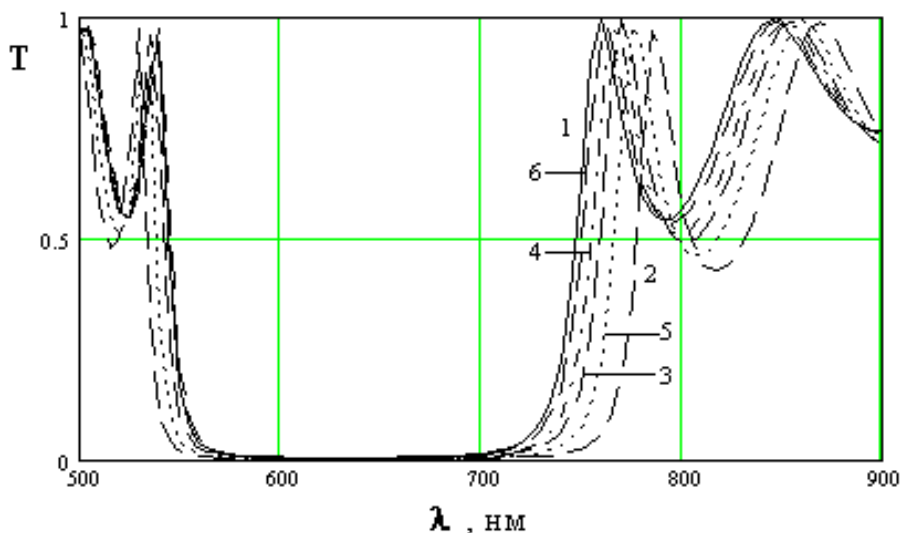


Рис.3. Спектральні характеристики 17-шарової структури S-VNB..VNB ($\lambda_0=630$ нм) в ідеальному випадку та при наявності приповерхневої та перехідної області з різними розподілами показника заломлення:

- 1 – ідеальний випадок;
- 2 – зі ступінчастим розподілом показника заломлення;
- 3 – з лінійним розподілом показника заломлення;
- 4 – з квадратичним розподілом показника заломлення;
- 5 – з логарифмічним розподілом показника заломлення;
- 6 – з експоненціальним розподілом показника заломлення.

Отже, із збільшенням робочої довжини хвилі, значення коефіцієнта пропускання в точці мінімуму менше відрізняється від ідеального випадку.

Розглянемо найбільші можливі зсуви точки мінімуму для четвертьхвильового одиничного шару при різних робочих довжинах хвиль. При робочій довжині хвилі $\lambda_0=480$ нм найбільший зсув здійснює квадратичний розподіл – на $\Delta\lambda = 35$ нм, при $\lambda_0=630$ нм – квадратичний на $\Delta\lambda = 43$ нм, при $\lambda_0=750$ нм – лінійний на $\Delta\lambda = 46$ нм, при $\lambda_0= 1000$ нм – ступінчастий на $\Delta\lambda = 79$ нм і при $\lambda_0=3000$ нм – ступінчастий на $\Delta\lambda = 163$ нм. Отже, із збільшенням робочої довжини хвилі, при наявності перехідної та приповерхневої областей, збільшується зсув точки мінімуму в область довгих хвиль.

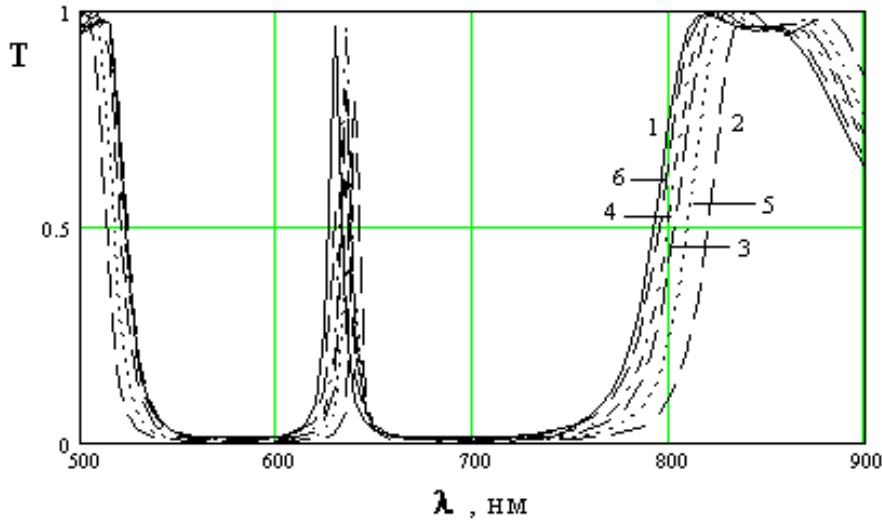


Рис.4. Спектральні характеристики 17-шарової структури S-BНВ..2В..ВНВ ($\lambda_0=630$ нм) в ідеальному випадку та при наявності приповерхневої та перехідної області з різними розподілами показника заломлення:

- 1 – ідеальний випадок;
- 2 – зі ступінчастим розподілом показника заломлення;
- 3 – з лінійним розподілом показника заломлення;
- 4 – з квадратичним розподілом показника заломлення;
- 5 – з логарифмічним розподілом показника заломлення;
- 6 – з експоненціальним розподілом показника заломлення.

Цікавим виявився той факт, що приповерхневий шар практично не впливає на коефіцієнт пропускання в точці мінімуму, а лише здійснює зсув мінімуму в область довгих хвиль.

Вплив приповерхневої та перехідної областей на спектральні характеристики в різних конструкціях можна дослідити розглянувши 17-шаровий відрізаючий фільтр S-BНВ..ВНВ (рис.3) та 17-шаровий вузькосмуговий фільтр S-BНВ..2В..ВНВ (рис.4).

Дослідження показали, що наявність приповерхневої та перехідної областей з різними типами розподілів показника заломлення приводить до збільшення діапазону відбивання (рис.3). Знову ж, найбільше впливає на розширення спектрального діапазону ступінчастий розподіл показника заломлення, далі йдуть – логарифмічний, лінійний, квадратичний та експоненціальний. Слід відзначити, що при ступінчастому розподілі показника заломлення в приповерхневій та перехідній областях та при робочій довжині хвилі $\lambda_0=630$ нм, діапазон відбивання ($T<0.1$) збільшується на 46.39 нм (рис.3, крива 2). Із збільшенням робочої довжини хвилі зменшується різниця ширини спектрального діапазону при різних розподілах показника заломлення від ідеального випадку, і збільшується зсув її в область довгих хвиль.

Дещо подібне спостерігається і при дослідженні 17-шарового вузькосмугового фільтру S-BНВ..2В..ВНВ (рис.4). Типи розподілів впливають на спектральні характеристики в такій же послідовності, як і в попередньому випадку. Знову ж збільшується діапазон відбивання і відбувається зсув в область довгих хвиль. Напівширина спектрального діапазону пропускання зменшується, а максимум збільшується і зсувається в область довгих хвиль (табл.3).

При наявності приповерхневої та перехідної областей зі ступінчастим розподілом показника заломлення при робочій довжині хвилі $\lambda_0=630$ нм, збільшується пропускання в точці максимуму з 0.959 до 0.99, значення довжини хвилі в максимумі зсувається від вибраної в ідеальному випадку при 630 нм до 640.695 нм, а напівширина пропускання зменшується з 6.164 до 2.931 нм (табл.3).

Таблиця 3. Вплив частково неоднорідного високозаломлюючого шару на спектральні характеристики 17-шарового вузькосмугового фільтру S-BНВ..2В..ВНВ.

Розподіли	Зсув робочої довжини хвилі $\Delta\lambda$, нм	Коефіцієнт пропускання T_{\max}	Напівширина спектрального діапазону пропускання (нм)
Ідеальний	0	0.959	6.164
Ступінчастий	10.695	0.99	2.931
Лінійний	6.048	0.972	4.792
Квадратичний	5.030	0.966	5.409
Логарифмічний	7.300	0.982	3.874
Експоненціальний	2.676	0.957	6.033

Збільшення робочої довжини хвилі, при дослідженні такого ж вузькосмугового фільтру S-BНВ..2В..ВНВ, приводить до ситуації, аналогічної з відрізаючим фільтром S-BНВ..ВНВ.

Розглянемо випадок, коли кількість шарів у фільтрах S-BНВ..ВНВ та S-BНВ..2В..ВНВ збільшується при робочій довжині хвилі $\lambda_0=630$ нм. Так, наявність перехідної і приповерхневої областей зі ступінчастим розподілом показника заломлення у високозаломлюючій компоненті для 25-шарового відрізаючого фільтру S-BНВ..ВНВ приводить до збільшення діапазону відбивання на 43.214 нм відносно ідеального випадку, а для 25-шарового вузькосмугового фільтру S-BНВ..2В..ВНВ зменшується напівширина пропускання з 1.121 до 0.365 нм. Як бачимо, ці відхилення є меншими, ніж у випадку з 17-шаровими структурами. Подальше збільшення шарів теж зменшує різницю між ідеальним випадком різких меж між плівками та при наявності перехідної і приповерхневої областей у високозаломлюючій компоненті. Це спостерігається при всіх можливих робочих довжинах хвиль.

Проведене дослідження дає можливість висловити наступне твердження:

Твердження. Збільшення числа шарів у фільтрах S-BНВ..ВНВ та S-BНВ..2В..ВНВ зменшує вплив перехідної і приповерхневої областей на спектральні характеристики структур в порівнянні з ідеальним випадком різких меж між плівками.

Отже, типи розподілів показника заломлення приповерхневої і перехідної областей впливають на спектральні характеристики в такому порядку: ступінчастий, логарифмічний, лінійний, квадратичний та експоненціальний. Вони призводять до зменшення пропускання одиничного четвертьхвильового шару та зміщують точку мінімуму в область довгих хвиль. Для відрізаючих фільтрів діапазон відбивання при наявності вказаних областей збільшується. Для вузькосмугових фільтрів діапазон відбивання збільшується та зменшується напівширина спектрального діапазону пропускання фільтру.

Література

1. Яковлев П.П., Мешков Б.Б. Проектирование интерференционных покрытий. – М.: Машиностроение, 1987. – 192 с.
2. Sikora S., Golovach J., Vashchuk F., Mitsa O. Brightness contrast and optical control of pressure-tightness for flat electroluminescent panels // 23 European congress on molecular spectroscopy. Balanofured. Hungary. Book of Abstract. 1997. – P. 411.
3. Golovach J., Mitsa O. Modeling spectral characteristics of structures with the layers based on dissociative materials // Book of Abstract 40th. Hungarian conference on Spectrochemistry. Debrecen. Hungary. 1997. – P. M25.
4. Vegly P.G., Tikhonravov A.V., Trubetskov M.K. Efficient refinement algorithm for the synthesis of inhomogeneous optical coatings // Applied Optics. – 1997, Vol.36, №7. – P. 1487-1495.
5. Holovacs J., Mitsa A., Mitsa V. Computer modeling of characteristics of structures with short periods // Proc. 4th International Conference on Applied Informatics. – Eger-Noszvaj (Hungary), 1999. – P. 51-57.
6. Abeles F. Ann.de Physique. – 1950. V.5. P. 596-640.
7. Міца О.В., Головач Й.Г., Первак Ю.О. Матричний метод дослідження впливу неоднорідностей компонент короткоперіодних структур на їх характеристики // Наук. вісник Ужгород. ун-ту. Сер. матем. і інф. – 2000. – Вип. 5. – ст. 75-80.