

Сахнюк О. В.,
здобувач третього (освітньо-
наукового) рівня вищої освіти,
Ніжинський державний університет
імені Миколи Гоголя, м. Ніжин

УДК 535.343:538.9
DOI: <https://doi.org/10.64076/ihrc251026.06>



ТЕОРЕТИЧНЕ ОБҐРУНТУВАННЯ МОДЕЛЮВАННЯ ІЧ-ВІДБИВАННЯ І ППВВ ТОНКИХ ПЛІВОК ОКСИДІВ МЕТАЛІВ НА ОПТИЧНО-АНІЗОТРОПНИХ ПІДКЛАДКАХ ВИКОРИСТОВУЮЧИ ФОРМАЛІЗМ БЕРРЕМАНА

Анотація

Подано повністю теоретичний та обчислювальний підхід до опису спектрів ІЧ-відбивання (s/p-поляризації) та порушеного повного внутрішнього відбивання (ППВВ/ATR) для системи "повітря / тонка плівка оксиду металу / оптично-анізотропна підкладка".

Для моделювання плівки використовуємо дисперсійну модель Друде-Лоренца, для підкладки – одноосне середовище з різними о- та е-компонентами діелектричної проникності.

Електродинамічну задачу розв'язуємо у формалізмі 4x4 Берремана з урахуванням довільного кута падіння і поляризації, а також призмної геометрії ATR.

Запропоновано алгоритм чисельного фіту параметрів (товщина, фонові параметри) та наведено аналіз чутливості й ідентифікованості на основі синтетичних спектрів. Показано, що сумісний фіт $R(\nu, \theta, \rho_l)$ та $R_{ATR}(\nu, \phi)$ зменшує кореляції параметрів і підвищує стійкість оцінювання.

Постановка задачі

Мета – побудувати узгоджену теоретичну модель для розрахунку та інверсії спектрів ІЧ-R і ATR тонких плівок на анізотропних підкладках, яка:

- коректно враховує тензорну діелектричну проникність підкладки;
- підтримує багатокутові та багатополяризаційні режими;
- забезпечує чутливість до параметрів плівки (товщина, ω_p , γ , ϵ_∞ , TO/LO) без прямих вимірювань;

Математична модель

Діелектрична функція плівки (Друде-Лоренц):

$$\epsilon_f(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} + \sum_{j=1}^N \frac{S_j \Omega_j^2}{\Omega_j^2 - \omega^2 - i\gamma_j \omega}$$
$$\omega = 2\pi c \tilde{\nu}$$

де ω_p, γ – параметри вільних носіїв;

Ω_j, γ_j, S_j – параметри фононних/міжзонних осциляторів [3]

Анізотропна підкладка:

Одноосне середовище з тензором $\varepsilon^s = \text{diag}(\varepsilon_o, \varepsilon_o, \varepsilon_e)$, орієнтація осі c (с-а-/r-зріз) враховується поворотом тензора. Дисперсії $\varepsilon_o(\omega), \varepsilon_e(\omega)$ описуємо сумою лоренцівських осциляторів, узгоджених з ТО/ЛО-модами з довідників [3,4].

Оптика багатошарових анізотропних структур (4×4 Берреман) :

Електромагнітне поле у шарі розкладається за чотирма власними модами; граничні умови дають добуток матриць меж і поширення. Формалізм Берремана забезпечує прямий обрахунок коефіцієнтів Френеля r_s, r_p та $R_{s,p} = |r_{s,p}|^2$ для довільних ω, ϑ і поляризацій [1].

Геометрія ППВВ (ATR):

У призмі з показником n_p при $\phi > \phi_c$ збуджується еванесцентна хвиля; ефективне відбивання визначається імпедансним узгодженням у системі "призма/плівка/анізотропна підкладка".

$R_{ATR}^{s,p}(\omega, \phi)$ обчислюється тим самим 4×4-підходом із додатковим шаром призми та трансформацією кутів [2].

Обчислювальна схема інверсії:

1. Формуємо вектор параметрів $p = (d, \omega_p, \gamma, \varepsilon_\infty, \{\Omega_j, \gamma_j, S_j\}, \{\text{параметри } \varepsilon_{o,e}\})$;
2. Обчислюємо модельні спектри:

поляризований:

$$R(\tilde{\nu}, \theta, pol) = |r_{pol}(\tilde{\nu}, \theta)|^2, pol \in \{s, p\}$$

неполяризований:

$$R_u(\tilde{\nu}, \theta) = \frac{1}{2} (|r_s|^2 + |r_p|^2)$$

3. Мінімізуємо $\chi^2(p)$ (Левенберга–Марквардта або квазі-Ньютон) з вагами та обмеженнями; можливий одночасний фіт кількох кутів і поляризацій.

$$\chi^2(p) = \sum_k \omega_k (R_k^{mod}(p) - R_k^{tar})^2$$

4. Оцінюємо невизначеності через Гессіан (псевдоінверсія Якобіана) і/або бутстреп; застосовуємо регуляризацію слабоідентифікованих параметрів (часткове фіксування частини ε_s , Tikhonov-penalty) [2].

5. Перевіряємо стабільність: масштабування частот і товщини, контроль кондиційності, уникнення числових резонансів поблизу мод ЛО.

Аналіз чутливості та ідентифікованості

Вводимо нормовані чутливості $Si(\nu) = \partial \ln R$ та досліджуємо їх залежність від ϑ, ϕ і поляризації.

Основні висновки: р-поляризація на s-cut підкладці підсилює чутливість до $\varepsilon_e(\omega)$ і точності оцінки ω_p ; сумісний фіт R + ATR декорелює d і ε_∞ ; s-поляризація краще ідентифікує вузькі фононні осцилятори [1–3].

Наукова новизна та практична значущість

Створено узагальнену теоретично-обчислювальну рамку для багатокутного та багатополяризаційного аналізу тонких плівок на анізотропних підкладках у середньому ІЧ-діапазоні; підхід може слугувати модулем для програм контролю процесів осадження.

Висновки

- Формалізм 4×4 Берремана з Друде-Лоренцом для плівки та лоренцівськими о/е-осциляторами підкладки забезпечує повний інструментарій для моделювання ІЧ-R і ATR.
- Сумісний аналіз R та ATR знижує кореляції параметрів і підвищує стійкість інверсії.
- Оптимізація кутів і поляризацій дозволяє підсилити чутливість до конкретних параметрів (d , ω_p , TO/LO).

Список використаних джерел

1. Berreman, D. W. Optics in stratified and anisotropic media: 4×4-matrix formulation // Journal of the Optical Society of America. — 1972. — Vol. 62, No. 4. — P. 502–510.
2. Born, M.; Wolf, E. Principles of Optics. 7th ed. — Cambridge: Cambridge University Press, 1999. — 952 с.
3. Schubert, M. Infrared Ellipsometry on Semiconductor Layer Structures. — Berlin; Heidelberg: Springer, 2004.
4. Palik, E. D. (Ed.). Handbook of Optical Constants of Solids. Vol. 1. — San Diego: Academic Press, 1998.