

УДК 535.016:538.958

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ УПРАВЛЕНИЯ ПОКАЗАТЕЛЯМИ ПРЕЛОМЛЕНИЯ И ОТРАЖЕНИЯ В СЛОИСТЫХ СТРУКТУРАХ С ДЕФЕКТАМИ

© 2022 г. К. Ю. Веревкина¹, *, И. Ю. Веревкин¹, В. В. Яцьшен¹, М. Б. Белоненко¹

¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
“Волгоградский государственный университет”, Волгоград, Россия

*E-mail: verevkina@volsu.ru

Поступила в редакцию 29.07.2022 г.

После доработки 15.08.2022 г.

Принята к публикации 22.08.2022 г.

Исследованы возможности управления показателями пропускания и отражения периодической структуры, в которую встроены диэлектрические слои и приложена разность потенциалов. Данная структура была исследована при различных условиях с помощью разработанной ранее компьютерной программы для расчета соответствующих коэффициентов. Изучены характеристики слоистой структуры кристалла типа сфалерита с приложенной разностью потенциалов. Также исследованы особенности отражения периодической структуры LiF/Si/Ag₂O/C с внедренным диэлектрическим слоем с фоновым резонансом.

DOI: 10.31857/S0367676522120298

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время уделяется большое внимание изучению кристаллов типа сфалерита. Сфалерит является одним из наиболее распространенных сульфидных материалов. В чистом виде он представляет собой широкозонный полупроводник с шириной запрещенной зоны около 3.54 эВ, что делает чистый материал прозрачным в видимом спектре. В зависимости от примесей он будет флуоресцировать под УФ светом.

Кристалл типа ZnS представляет собой хороший диэлектрик. Отметим, что под действием напряжения данный кристалл обладает во всех направлениях естественным двулучепреломлением. Оптические свойства сфалеритов выделяются особенно явно его включить в периодическую структуру. Структура и физические свойства природных сфалеритов и галенита исследованы в работе [1]. Параметры элементарной ячейки сфалерита были установлены методом рентгеновской дифракции. Так же была изучена микроструктура образцов, состав которых отличается содержанием железа. Повышенное содержание железа в твердом растворе сфалерита приводит к росту параметров элементарной ячейки. Установлено, что сфалериты являются изоляторами и в температурном интервале от 4 до 300 К имеют абсолютные значения удельного электрического сопротивления более 1 МОм · м. Алмазоподобные же структуры кристаллов сфалерита изучены в рабо-

те [2]. Авторы в ходе эксперимента установили связь между определенными параметрами ячейки и табличными значениями размеров атомов (ионов) цинка и серы. Полный обзор, посвященный свойствам всех известных к настоящему времени электрооптических кристаллов изложен в работе [3]. Там же описывается и феноменологическая теория электрооптического эффекта в кристаллах. Кроме того, рассмотрены экспериментальные методы измерения двулучепреломления, индуцированного внешним электрическим полем и механическим напряжением. В работе [4] рассматривается влияние примесей на рост и морфологию кристаллов с внутренними напряжениями и аномальным двулучепреломлением, появляющимися при захвате примесей растущим кристаллом. В ходе эксперимента были изучены модельная система NH₄Cl–MnCl₂·H₂O–CONH₂ и образующиеся в ней гетероструктурные кристаллы NH₄Cl:Mn²⁺. Основы теории оптики слоистых структур изложены в фундаментальном труде [5]. Характеристики частиц α-SiO₂ в искусственных опалах были исследованы в работе [6]. В работе [7] были изучены структура и оптические свойства слоистых нанокмполитов ZnSe/SiO₂, полученных с помощью ВЧ-магнетронного напыления. В работе [8] изучены особенности новых материалов, которые формируются в результате заполнения синтетических опалов разными сегнетоэлектриками типа: нитритом натрия, титанатом

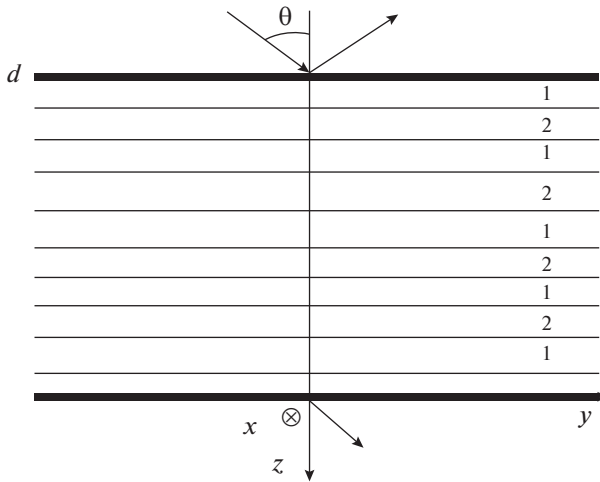


Рис. 1. Геометрия отражения волны от слоистой периодической среды.

бария, ниобатом лития и др. Все это делает структуры на основе данных веществ весьма перспективными для практических приложений. Отметим, что, несмотря на изучение разных параметров данных веществ, свойства многослойных тонких пленок на их основе не изучены.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

На среду, имеющую повторяющийся показатель преломления, и занимающую область от $z = 0$ до $z = d$, из вакуума падает плоская гармоническая световая волна (рис. 1). Область $z < 0$ – это подложка, заполненная однородным диэлектриком. Рассматриваемая среда состоит из периодически повторяющихся слоев с заданными диэлектрическими проницаемостями. В данную структуру введен диэлектрический слой, к которому приложена разность потенциалов, или внедрен слой с фононным резонансом. Необходимо рассчитать угловые спектры отражения и пропускания для такой структуры, дополнив разработанный ранее [10] программный комплекс для расчета амплитудных и энергетических коэффициентов отражения и прохождения для такого класса веществ. Разработанный ранее программный продукт используется для анализа спектров отражения и пропускания вышеупомянутых пленочных многослойных покрытий. В частности, как уже было описано во введении, были изучены характеристики практически важного кристалла типа сфалерита.

ПРОХОЖДЕНИЕ И ОТРАЖЕНИЕ СВЕТА ДЛЯ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СЛОИСТОЙ СТРУКТУРЫ

Приведем для полноты изложения формулы, необходимые для расчета нашей структуры со

слоями типа сфалерита. Изложение будет вестись согласно [9].

Пусть T , A и R амплитуды электрических векторов преломленной, падающей и отраженной волн, соответственно, ϵ_1, ϵ_2 и μ_1, μ_2 – диэлектрические и магнитные проницаемости граничных сред, θ_1 и θ_2 – углы между нормальными к падающей и прошедшей волнами и направлениями оси z . Амплитудные коэффициенты пропускания (t) и отражения (r) будут определяться как:

$$t = \frac{T}{A} = \frac{2p_1}{(m_{11} + m_{12}p_l)p_1 + (m_{21} + m_{22}p_l)}, \quad (1)$$

$$r = \frac{R}{A} = \frac{(m_{11} + m_{12}p_l)p_1 - (m_{21} + m_{22}p_l)}{(m_{11} + m_{12}p_l)p_1 + (m_{21} + m_{22}p_l)}, \quad (2)$$

где величины p_1 и p_l определены ниже формулой (6б), а величины m_{ij} определены как матричные элементы матрицы M в формуле (5).

Пропускательная (T) и отражательная (R) способности, выраженные через t и r , имеют вид:

$$T = \frac{p_l}{p_1} |t|^2, \quad R = |r|^2. \quad (3)$$

Соответствующие формулы для волны p -поляризации получаются из (1) и (2) путем замены p_1 и p_l на $q_i = \sqrt{\mu_i/\epsilon_i} \cos \theta_i$. В этом случае t и r являются отношением амплитуд не электрических, а магнитных векторов.

Рассмотрим случай диэлектрической однородной пленки, расположенной между двумя однородными средами. Все среды будем считать немагнитными ($\mu = 1$).

Характеристическая матрица диэлектрической однородной пленки имеет вид

$$M(z) = \begin{bmatrix} \cos(k_0 n z \cos \theta) - \frac{i}{p} \sin(k_0 n z \cos \theta) \\ -i p \sin(k_0 n z \cos \theta) \cos(k_0 n z \cos \theta) \end{bmatrix}, \quad (4)$$

$$M = \begin{pmatrix} \cos \beta & -\frac{i}{p_1} \sin \beta \\ -i p_2 \sin \beta & \cos \beta \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где

$$\beta = \frac{2\pi}{\lambda_0} n_2 h \cos \theta_2, \quad (6a)$$

$$p_j = n_j \cos \theta_j, \quad j = 1, 2, 3. \quad (6b)$$

В случае, если вместо однородной пленки взять слоистую структуру с характеристическими матрицами слоев M_1, M_2, \dots, M_n , результирующая матрица будет иметь вид:

$$M(z_N) = M_1(z_1) M_2(z_2 - z_1) * \dots * M_N(z_N - z_{N-1}). \quad (7)$$

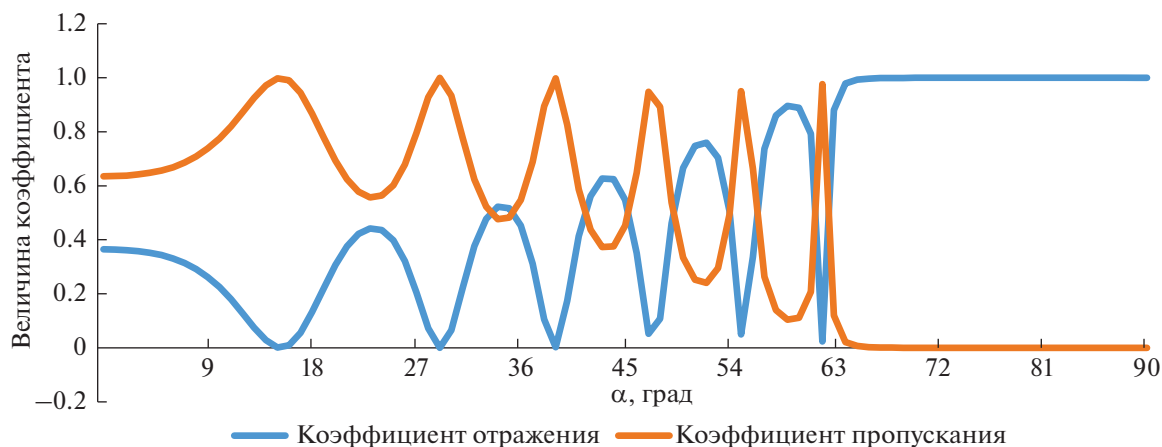


Рис. 2. Зависимость коэффициентов отражения и пропускания от угла падения α при прохождении через слоистую периодическую структуру ZnS/SiO_2 с приложенным напряжением 20 кВ для ТЕ волны.

РЕАЛИЗАЦИЯ РАСЧЕТОВ НА ЯЗЫКЕ C++

Для реализации расчетов было создано консольное приложение на языке C++. Входными данными программы является: количество слоев N ; толщины слоев $h[N-1]$; показатель преломления $n[N]$, длина волны падающего света L_0 .

Угол между нормальными к падающей и прошедшей волнам $te[N]$, а так же коэффициент β ($be[N-1]$) рассчитывается согласно формуле (6а), а коэффициенты p ($p[N]$), рассчитываются в соответствии с формулой (6б). Далее $M[N-1][2][2]$ — элемент характеристической матрицы для каждого слоя вычисляется согласно формуле (4). Элемент результирующей матрицы $M[2][2]$ есть результат произведения характеристических матриц согласно формуле (7). Так же согласно формулам (1)–(3) проводится расчет коэффициентов пропускания T и отражения R .

В выходных файлах сохраняются следующие расчетные характеристики: действительная и мнимая части изменения фазы при отражении и пропускании, а также коэффициенты отражения и пропускания.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

На рис. 2 показан угловой спектр коэффициентов отражения и пропускания при прохождении через слоистую периодическую структуру ZnS/SiO_2 при разных углах падения α для ТЕ волны. Толщина слоя: 100 и 160 нм. Длина волны падающего излучения составляет 400 нм. Количество повторов структуры равно 15. Дефектом является напряжение во втором слое в пятом повторении структуры, равное 20 кВ. Электрооптический коэффициент $r_{41} = 3.3 \cdot 10^{-8}$ эл. ст. ед.

На рис. 3 показана такая же структура как на рис. 2. Длина волны падающего излучения составляет 500 нм. В качестве неоднородности в данном случае было выбран способ, в котором прикладывалось напряжение во втором слое в пятом повторении структуры, равное 15 кВ. Электрооптический коэффициент был взят для данной длины волны как $r_{41} = 5.5 \cdot 10^{-8}$ эл. ст. ед.

На рис. 2 и 3 наблюдается периодическая зависимость коэффициентов отражения и прохождения от угла падения (углы меняются от 0° до 90°). Благодаря этому, изменяя угол падения, можно подбирать оптимальные коэффициенты. На рис. 2 так же наблюдается полное отражение при угле падения от 66° до 90° . Отметим, что характер отражения и пропускания на рисунках существенно разный, поскольку соответствующий электрооптический коэффициент увеличился более чем в 1.5 раза, при изменении длины волны в 100 нм [3]. Так же из сравнения рис. 2 и 3 видно, что с увеличением электрооптического коэффициента можно обойтись меньшим напряжением и получить коэффициенты пропускания равные 1. Однако, как видно из сравнения вышеупомянутых рисунков, на длине волны 400 нм, наблюдается лучшая избирательная способность по углу (т.е. кривые коэффициента пропускания падают более резко при отклонении угла от угла соответствующего максимуму). Полученные результаты можно распространить на диапазон приложенных напряжений от 0 до величин, когда будут видны эффекты высших порядков (или до напряжения пробоя вследствие дефектной структуры), т.е. по нашим оценкам до 50 кВ, при характерных размерах предложенной в работе структур. Это может быть полезно в различных приложениях. Физически данное поведение связано с многократными отражениями от границы раздела сред и дальнейшей интерференцией всех волн. Если оптическая

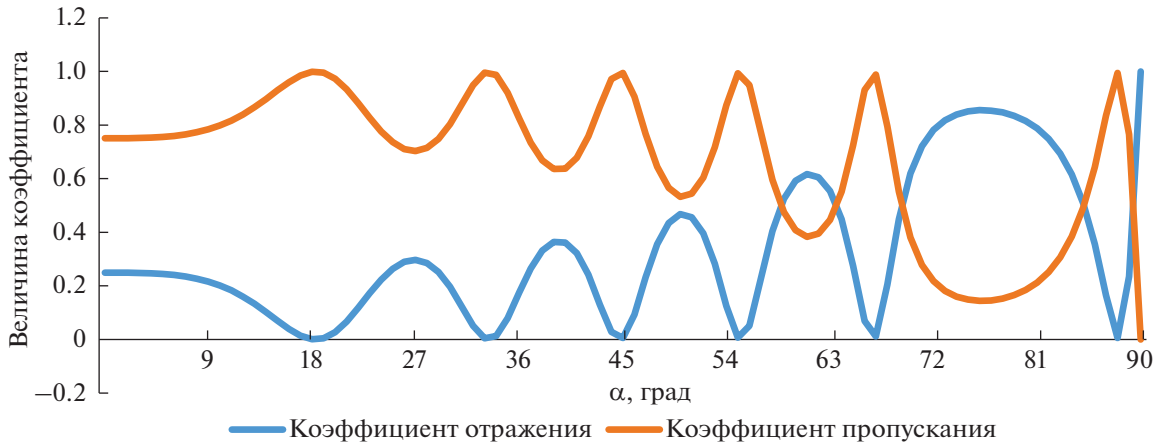


Рис. 3. Зависимость коэффициентов отражения и пропускания от угла падения α при прохождении через слоистую периодическую структуру ZnS/SiO_2 с приложенным напряжением 15 кВ для ТЕ волны.

длина пути при отражении от границ раздела при увеличении числа слоев структуры становится несоизмеримой (например, от АВАВАВ и АВАВАВАВ), то вместо сложения волн при интерференции может произойти их вычитание и появится соответствующий провал. Еще более изменяет характер взаимодействия волн внедрения слоя с иным показателем преломления (как в случае с прилагаемым напряжением выше или с фотонным резонансом ниже). В этом случае происходит резкое изменение фаз волн уже для относительно небольшого количества слоев.

К сожалению, получить аналитические зависимости от величины приложенного электрического поля, не представляется возможным. Изменение показателя преломления в зависимости от приложенного напряжения учитывалось в рамках линейного электрооптического эффекта, т.е. $\delta n \sim E$, причем коэффициент пропорциональности сложным нелинейным образом зависит от длины волны. В силу многослойности структуры, даже небольшие изменения показателя преломления, могут привести к существенному изменению коэффициента пропускания. Вследствие этого указанные зависимости могут быть получены только численно.

СРЕДА С ФОНОННЫМ РЕЗОНАНСОМ

Диэлектрическая проницаемость кристалла $\epsilon(\omega)$ вблизи фонованного резонанса вычисляется по формуле

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 + \frac{4\pi N e^2}{\mu} \frac{1}{\omega_{T0}^2 - \omega^2} = \epsilon_0 + \frac{\Omega_p^2}{\omega_{T0}^2 - \omega^2}. \quad (8)$$

Здесь введено обозначение Ω_p для плазменной частоты:

$$\Omega_p^2 = \frac{4\pi N e^2}{\mu}.$$

Мы видим, что выражение для диэлектрической проницаемости описывает резонанс в области частот вблизи частоты поперечных оптических фононов ω_{T0} . Наличие резонанса значительно влияет на характер распространения электромагнитной волны в среде.

При расчете коэффициентов отражения и прохождения света от слоистой структуры с резонансным слоем, в качестве последнего использовался слой, диэлектрическая проницаемость которого задавалась формулой (8). Наличие резонанса при варьировании частоты в области $\omega \sim \omega_{T0}$ приводит к резкому изменению энергетических коэффициентов отражения и прохождения, что особенно сильно проявляется в том случае, когда этот слой находится в периодической структуре и образует своего рода дефект такой периодичности.

На рис. 4 показан частотный спектр коэффициентов отражения и пропускания при прохождении через слоистую периодическую структуру ($\text{LiF}/\text{Si}/\text{Ag}_2\text{O}/\text{C}$) при разных углах падения α . Толщина слоя: 100, 160, 80 и 120 нм. Длина волны падающего излучения составляет 640 нм. Количество повторений структуры: 10. В качестве дефекта выбирался второй слой в пятом повторении структуры с резонансным законом для диэлектрической проницаемости, и его толщина была увеличена в пять раз.

В зависимости показателей отражения и прохождения данной структуры, в отличие от обсуждавшихся выше, имеются не отдельные области

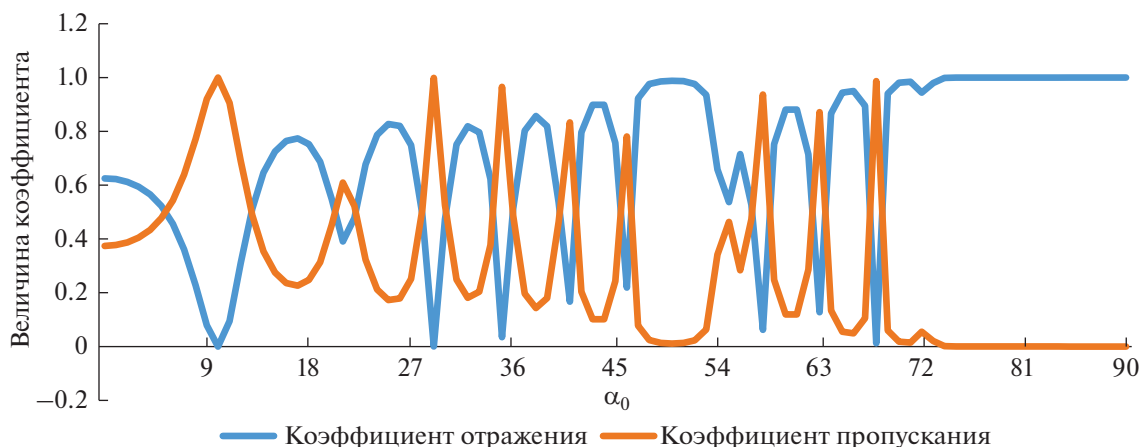


Рис. 4. Энергетические коэффициенты отражения (синий) и пропускания (красный) при различных углах падения α при прохождении через слоистый LiF/Si/Ag₂O/C с внедренным слоем с фоновым резонансом.

(при больших углах падения), а несколько участков, где происходит полное отражение. Это связано с наличием фотонного резонанса во внедренном слое. Для выбранной длины волны коэффициент пропускания равен и близок к 1 только при углах падения примерно в 54° (при другой длине волны угол, как показали расчеты, соответственно изменится). Это позволяет использовать данную структуру как фильтр длин волн. Также, в отличие от случая, обсужденного выше, данные спектры имеют более резкий характер. Наличие изломов не связано с расчетным шагом (что было проверено при моделировании), а связано по нашему мнению с резким характером резонансной зависимости во внедренном слое (8). Кроме того, верификация расчетов проводилась не только изменением шага, но и изменением толщин пленок и их количества. Везде наблюдалась подобное поведение. Как уже отмечалось выше, такая зависимость связана с резким изменением оптической длины пути пройденной волной даже в одном слое отличном от других. Заметим, что выбор слоев связан с практическим характером их получения и широкого распространения данных веществ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, развита методика, позволяющая изучать оптические свойства периодической структуры, содержащей слои с электрооптическим эффектом. В качестве исследуемого объекта был выбран кристалл типа сфалерита. Полученные результаты соответствуют поставленным задачам. Показана возможность управления отражательными способностями слоистой структуры при помощи приложенной разности потенциалов, что дает возможность использовать полученные результаты для расчета спектральных филь-

тров и покрытий для видимого и ближнего ИК диапазона. Методику также можно использовать для конструирования сверхчувствительных нанорезонаторов и нановолноводов для использования в плазмонике и нанофотонике электрооптических структур для избирательного рассеяния световых волн, усиления и управляемой передачи в заданном направлении оптических сигналов. Отметим, что все вышесказанное относится и к структурам с внедренным слоем с фоновым резонансом.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гуляева Р.И., Селиванов Е.Н., Дорогина Г.А. и др. // Геология и геофиз. 2017. Т. 58. № 8. С. 1242.
2. Лиопо В.А., Лявшук И.А., Овчинников Е.В., Секерджицкий С.С. // Веснік Брэсцкага ўніверсітэта. Сер. 4. Фізіка. Матэматыка. 2020. № 1. С. 36.
3. Сонин А.С., Василевская А.С. Электрооптические кристаллы. М.: Атомиздат, 1971. 328 с.
4. Пьянкова Л.А., Пунин Ю.О., Франке В.Д. и др. // Кристаллография. 2009. Т. 54. № 4. С. 697.
5. Борн М., Вольф Э. Основы оптики: М.: Наука, 1973. С. 66.
6. Самусев К.Б., Юшин Г.Н., Рыбин М.В., Лимонов М.Ф. // ФТТ. 2008. Т. 50. № 7. С. 1230.
7. Крылов П.Н., Закирова Р.М., Кобзиев В.Ф. и др. // ЖТФ. 2016. Т. 86. № 7. С. 69.
8. Горелик В.С. // ФТТ. 2009. Т. 51. № 7. С. 1252.
9. Verevkina K.Yu., Yatsyschen V.V. // AIP Conf. Proc. 2020. V. 2313. Art. No. 060026.
10. Веревкина К.Ю. Программа для расчета коэффициентов пропускания и отражения слоистых и периодических сред. Свид. о гос. рег. прогр. для ЭВМ № 2019614152. 2019.

Study of the possibility of control of the refractive and reflection indices in layered structures with defects

K. Yu. Verevkina^{a, *}, I. Yu. Verevkin^a, V. V. Yatsyshen^a, M. B. Belonenko^a

^aVolgograd State University, Volgograd, Russia

**e-mail: verevkina@volsu.ru*

The possibilities of controlling the transmission and reflection indices of a periodic structure in which dielectric layers are embedded and a potential difference is applied are investigated. This structure was investigated under various conditions using a previously developed computer program to calculate the corresponding coefficients. The characteristics of the layered structure of a sphalerite-type crystal with an applied potential difference are studied. The reflection features of the periodic LiF/Si/Ag₂O/C structure with an embedded dielectric layer with phonon resonance are also studied.