

УДК 535.3:538.975:544.015.4:620.18

МОДЕЛИРОВАНИЕ МНОГОСЛОЙНЫХ СИСТЕМ С ПЕРЕСТРАИВАЕМЫМИ ОПТИЧЕСКИМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ

© 2023 г. Н. М. Толкач^{a, b, *}, Н. В. Вишняков^{b, **}, В. Г. Литвинов^b, А. А. Шерченков^a,
Е. П. Трусов^b, В. Б. Глухенькая^a, Д. В. Пепеляев^a

^aНациональный исследовательский университет “МИЭТ”, Зеленоград, 124498 Россия

^bРязанский государственный радиотехнический университет им. В.Ф. Уткина, Рязань, 390005 Россия

*e-mail: n.m.tolkach@gmail.com

**e-mail: rcpt-rgrtu@yandex.ru

Поступила в редакцию 14.01.2023 г.

После доработки 16.03.2023 г.

Принята к публикации 16.03.2023 г.

Материалы с фазовым переходом МФП, в частности халькогенидные стеклообразные полупроводники и соединения из системы Ge–Sb–Te представляют интерес для применения в оптических технологиях обработки информации. Уникальность этих материалов состоит в том, что они обладают низкоэнергетичным, быстрым и обратимым фазовым переходом, приводящим к значительному изменению показателя преломления в инфракрасной области оптического спектра. Модельные расчеты, проведенные в настоящей работе, позволили исследовать трансформацию оптических свойств в многослойных системах, состоящих из слоев SiO₂, Si, Si₃N₄ и активного слоя из МФП материала с фазовым переходом при изменении его фазового состояния. Целью этих исследований ставилось выполнение условия наименьших оптических потерь при пропускании и отражении излучения 1550 нм в таких системах в случае аморфного и кристаллического состояния активного слоя соответственно. В результате была спроектирована наиболее удовлетворяющая указанным условиям девятислойная система “SiO₂/111 нм Si/277 нм SiO₂/111 нм Si/251 нм SiO₂/10 нм Ge₂Sb₂Te₅/241 нм SiO₂/110 нм Si/276 нм SiO₂/112 нм Si/SiO₂”.

Ключевые слова: фазовый переход, Ge–Sb–Te, аморфное состояние, кристаллическое состояние, полностью оптическая маршрутизация, многослойная наносистема, пропускательная способность, отражательная способность, нелинейная оптимизация, целевая функция, оптические потери.

DOI: 10.31857/S1028096023110201, EDN: FQWJZK

ВВЕДЕНИЕ

В последнее время активно развиваются интегрально-оптические и оптоволоконные технологии. Их совмещение позволяет реализовывать сложные высокопроизводительные вычислительные архитектуры, например, такие как сетевые системы на чипе [1], программируемые фотонные схемы [2]. Несмотря на потребность в таких архитектурах, их производство не распространено, что обусловлено целым рядом эксплуатационно-технических проблем компонентов, из которых они состоят. Из основных проблем можно выделить такие как: высокое энергопотребление, скорость переключения, большие габаритные размеры, высокая длительность задержки сигналов, двойное преобразование сигналов из оптических в электрические сигналы и обратно [3]. Одним из основных стандартов, применяемых в перечисленных оптических технологиях и архитектурах, является использование телекоммуникационной

длины волны 1550 нм. Вблизи этой длины волны некоторые материалы с фазовым переходом (МФП), в частности халькогенидные стеклообразные полупроводники и материалы системы Ge–Sb–Te [4], способны изменять значения показателя преломления почти в два раза. Такое изменение возможно благодаря обратимому фазовому переходу (например, в Ge₂Sb₂Te₅ [5]) между аморфной и кристаллической фазами. Кроме того, сам фазовый переход является достаточно быстрым и требует приложения небольшого количества внешней энергии [6, 7]. Данные свойства МФП уже неоднократно использовали в устройствах оптических носителей информации Blu-Ray, перестраиваемой энергонезависимой памяти 3D-XPoint, инфракрасных приемниках на основе мета-поверхностей [8–10]. Несмотря на это, актуальным является полностью оптическое управление (оптическая маршрутизация) сигналами, без промежуточных электронных преобра-

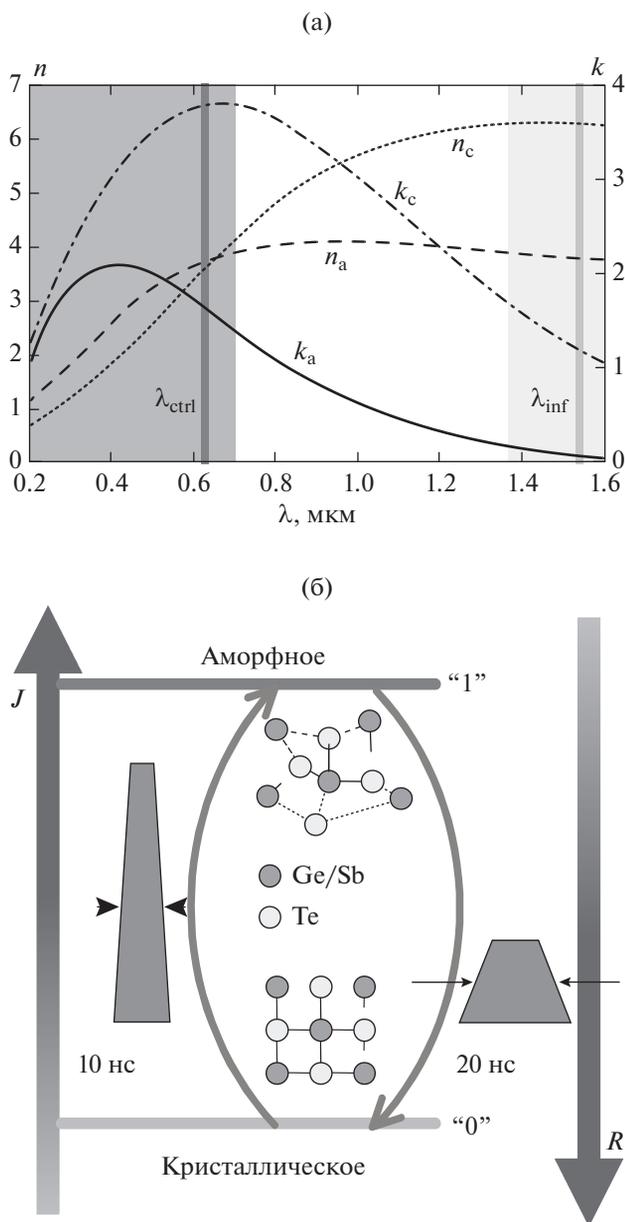


Рис. 1. Спектральные (а) и оптические (б) свойства материала $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ в аморфном и кристаллическом состояниях [11].

зований, которое можно реализовать следующим образом.

При значениях длины волны около 1550 нм наноструктурированный материал $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ является оптически бистабильным т.к. имеет показатель преломления n , отличающийся в два раза для аморфного и кристаллического фазовых состояний (рис. 1а [11]). Это позволяет варьировать отражательную (R) и пропускательную (J) способности активного МФП-слоя на основе материала $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ ($\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ слоя) или содержащей его поверхностной многослойной системы (т.е. мно-

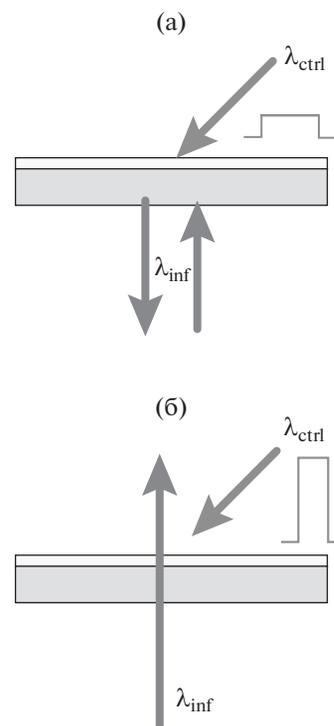


Рис. 2. Режимы работы полностью оптически управляемой системы, содержащей верхний активный МФП слой ($\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$) на кварцевой подложке: отражение при кристаллическом состоянии слоя (а); пропускание при аморфном состоянии слоя (б) [11].

гослойной системы, расположенной на поверхности, например, на волноводе, подложке и т.д.) (рис. 1б [11]). Изменяя эти свойства, можно управлять импульсами информационного сигнала на длине волны вблизи 1550 нм (λ_{inf}) (рис. 2 [11]).

В диапазоне длин волн от 200 до 700 нм (рис. 1а) материал $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ имеет коэффициент экстинкции k , превышающий значение 2 в обоих фазовых (аморфном и кристаллическом) состояниях. Благодаря этому импульсы управляющего сигнала с такой длиной волны (λ_{ctrl}) хорошо поглощаются слоем $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$. Это позволяет нагревать слой $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ и изменять его фазовое состояние, что также влияет на свойства отражения и пропускания слоя $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ для информационного сигнала.

При малой длительности и высокой интенсивности управляющего импульса (рис. 1б) нанопорядочение слоя $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ (рис. 3а) будет изменяться: материал будет переходить в аморфное состояние и затем быстро охлаждаться. Из-за этого атомы Te , окружающие Ge , не успевают создать октаэдрическое окружение, и атомы Ge остаются в тетраэдрическом окружении (рис. 3б), характерном для аморфного фазового состояния. При более высокой длительности и малой интенсивности управляющего импульса материал

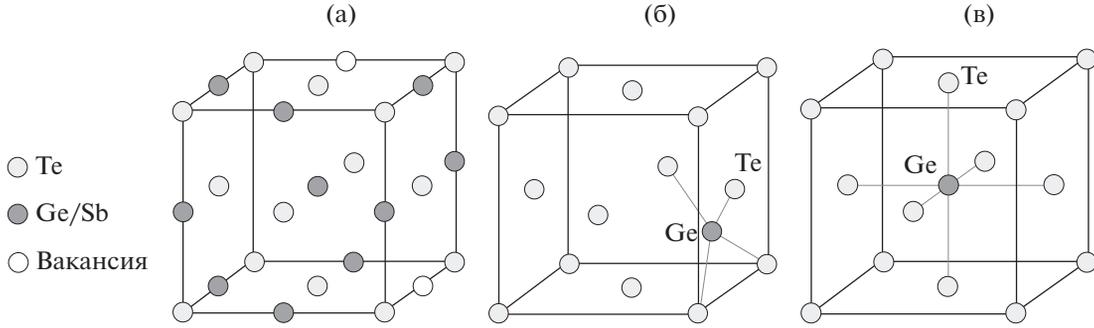


Рис. 3. Элементарная ячейка структуры $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ (а). Атом Ge в тетраэдрическом (б) и октаэдрическом (в) окружении атомов Te.

$\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ не переходит в аморфное состояние, но энергии и времени достаточно для образования октаэдрического окружения атомов Ge атомами Te, характерного для кристаллического фазового состояния (рис. 3в).

Несмотря на простоту описанного решения, его реализация затруднена высокими оптическими потерями, вызванными некомпенсированной интерференцией в слое $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$. Например, в работах [12–14] показана модуляция оптического сигнала на длине волны 1550 нм в результате изменения фазового состояния слоя $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$. Однако в системах, рассмотренных в этих работах, около 50% оптического сигнала теряется из-за поглощения, отражения или пропускания в области слоя $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$, что вызвано интерференцией волн в нем. Для полностью оптического управления в сложных оптических системах, состоящих из многослойных наносистем с активным слоем на основе МФП, важно избавиться от оптических потерь. Оптические потери приводят к возникновению вторичных волн, ослабляющих результирующую волну на выходе таких систем, это может привести к их полной неработоспособности. Поэтому целью данной работы является уменьшение оптических потерь на длине волны 1550 нм в многослойной наносистеме с активным слоем на основе МФП при изменении его фазового состояния.

Для достижения поставленной цели путем математического моделирования были исследованы свойства многослойной наносистемы при двух вариантах модификации ее структуры: при добавлении дополнительных слоев и изменении активного слоя системы.

МОДЕЛИРОВАНИЕ

Для исследования оптических свойств (отражения и пропускания) многослойной наносистемы было проведено моделирование распространения излучения (при нормальном падении к поверхности) в многослойных наносистемах,

состоящих из слоев SiO_2 , Si, Si_3N_4 и активного слоя из МФП при изменении его фазового состояния. Моделирование выполнено в программной среде MathLAB [15]. Для этого были использованы рекуррентные соотношения Френеля и Эйри [16], позволяющие рассчитать отражательную R и пропускательную J способности многослойной системы.

При нормальном падении излучения (угол $\varphi_1 = 0^\circ$, рис. 4) отражательная R и пропускательная J способности многослойной системы определяются следующими рекуррентными соотношениями Эйри [16]:

$$R = |r_{m-1, N+1}|^2, \quad J = |t_{m-1, N+1}|^2 n_{N+1}/n_{m-1}, \quad (1)$$

$$r_{m-1, N+1} = (r_{m-1, m} + r_{m, N+1} \times \exp(i\beta m)) / (1 + r_{m-1, m} r_{m, N+1} \exp(i\beta m)), \quad (2)$$

$$t_{m-1, N+1} = r_{m-1, m} r_{m, N+1} \times \exp(i\beta m) / (1 + r_{m-1, m} r_{m, N+1} \exp(i \times 0.5\beta m)), \quad (3)$$

$$\beta_m = 4\pi \bar{n}_m h_m / \lambda, \quad (4)$$

где индексами от $m - 1$ до $N + 1$ указаны номера слоев системы на рис. 4; $r_{m-1, N+1}$ и $t_{m-1, N+1}$ — коэффициенты отражения и пропускания для слоев от $m - 1$ до $N + 1$; \bar{n}_m — комплексный показатель преломления ($\bar{n} = n + ik$) материала слоя с индексом m ; n — показатель преломления; i — мнимая единица; k — коэффициент экстинкции; h_m — толщина слоя m ; λ — длина волны излучения; $r_{m-1, m}$, $r_{m, m+1} \dots r_{N-1, N}$, $r_{N, N+1}$ и $t_{m-1, m}$, $t_{m, m+1} \dots t_{N-1, N}$, $t_{N, N+1}$ — коэффициенты френелевского отражения и пропускания соответственно для двух соседних слоев:

$$r_{m-1, m} = (\bar{n}_m - \bar{n}_{m-1}) / (\bar{n}_m + \bar{n}_{m-1}), \quad (5)$$

$$t_{m-1, m} = 2\bar{n}_{m-1} / (\bar{n}_m + \bar{n}_{m-1}).$$

Основная проблема, которая возникла при моделировании наносистемы, заключалась в необходимости подбора параметров слоев многослойной системы таким образом, чтобы при

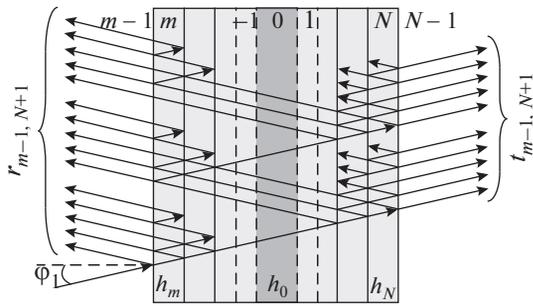


Рис. 4. Распространение излучения в многослойной системе.

аморфном состоянии слоя МФП многослойная наносистема пропускала, а при кристаллическом отражала излучение или наоборот. Для решения этой проблемы был использован метод нелинейной оптимизации. В соответствии с этим методом была составлена следующая целевая функция:

$$F(h_m, \dots, h_N) = (R_a(h_m, \dots, h_N) + (1 - J_a(h_m, \dots, h_N)) + (1 - R_c(h_m, \dots, h_N)) + J_c(h_m, \dots, h_N))/4, \quad (6)$$

где R_a, R_c и J_a, J_c являются отражательными и пропускательными способностями многослойной системы, соответствующими аморфному или кристаллическому фазовым состояниям активного слоя. Целевая функция характеризует оптические потери в многослойной системе: чем меньше значение целевой функции, тем меньше оптические потери как при пропускании излучения через систему с аморфным МФП слоем, так и при отражении излучения от системы с кристаллическим МФП слоем.

Возможен и противоположный вариант, когда целевая функция F принимает максимальные значения, что соответствует отражению излучения от системы с аморфным слоем МФП и пропусканию излучения через систему с кристаллическим МФП слоем.

Расчет решений целевой функции выполнялся относительно комбинаций значений толщин $h_m \dots h_N$ слоев многослойной наносистемы. Решения целевой функции собирали в большой массив значений, среди которых выполняли поиск минимального значения. Значения толщин слоев, соответствующие найденному минимальному или максимальному значению целевой функции, идентифицировали как оптимальные значения. Кроме того, предпочтение отдавали комбинациям с наименьшей толщиной слоя МФП, потому что для изменения фазового состояния слоя МФП меньшей толщины требуется меньшее количество оптической мощности управляющего лазера.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Материал $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ имеет широкий спектр применения, а его оптические свойства наиболее широко исследованы среди материалов, расположенных на линии квазибинарного разреза $\text{GeTe}-\text{Sb}_2\text{Te}_3$. Поэтому материал $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ был использован в качестве отправной точки для исследования и моделирования однослойных и многослойных наносистем с активным слоем МФП. Результаты моделирования показаны в табл. 1, и представляют собой значения оптимальных толщин слоев h_m и соответствующие им отражательные R_a, R_c и пропускательные способности J_a, J_c и значения целевой функции F . В табл. 2 представлены значения комплексного показателя преломления, использованные при моделировании материалов в аморфном (\bar{n}_a) или кристаллическом (\bar{n}_c) фазовых состояниях.

Однослойные системы 1–3 на основе МФП не позволяют достичь поставленной цели, т.к. имеют достаточно большие значения целевой функции $F = 0.27$. Для уменьшения целевой функции необходимо, чтобы в одном из фазовых состояний слой МФП почти полностью отражал падающее излучение и имел значения показателя преломления, гораздо большие, чем у $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ или других известных материалов, что труднодостижимо.

В двухслойных системах 4 и 5 целевая функция уменьшается до 0.18, что позволяет незначительно улучшить оптические характеристики системы. Как видно, применение слоя Si с показателем преломления большим, чем у Si_3N_4 , оказывает больший эффект на уменьшение значения целевой функции.

В трехслойных системах 6 и 7 целевая функция не сильно уменьшается в сравнении с образцами 4 и 5. Тенденция, по которой слой Si с показателем преломления большим, чем у Si_3N_4 , оказывает больший эффект на уменьшение значения целевой функции, сохраняется.

Значительное улучшение характеристик можно наблюдать в системах 8–10 при чередовании большого количества слоев с разными значениями показателя преломления и подобранными толщинами. Могут быть различные вариации расположения слоев, но наилучших характеристик получилось добиться при их симметричном расположении относительно слоя $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ в пятислойной системе 10.

В девятислойных системах 11–15 целевая функция F достигает значения 0.066. При рассмотрении других вариантов с большим числом слоев дальнейшее улучшение оптических параметров многослойных систем и уменьшение целевой функции также возможно. Из-за большого

Таблица 1. Результаты моделирования многослойных систем. При моделировании использованы следующие показатели преломления слоев: $n_{\text{Air}} = 1$, $n_{\text{SiO}_2} = 1.4$, $n_{\text{Si}} = 3.5$, $n_{\text{Si}_3\text{N}_4} = 2.1$. У многослойных систем левой и правой стороны являются бесконечными (∞) слоями, их толщина не влияет на результаты моделирования и поэтому она условно приравнялась к бесконечной

№	Многослойные системы	Оптимальная толщина h_m слоя m в нанометрах										Отражение и пропускание системы, %				Целевая функция F		
		$h_{-4,6}$	$h_{-3,5}$	h_{-2}	h_{-1}	h_0	h_1	h_2	$h_{3,5}$	$h_{4,6}$	R_a	J_a	R_c	J_c				
1	Air//Ge ₂ Sb ₂ Te ₃ //Air	—	—	—	—	19	—	—	—	—	—	—	—	20	77	52	19	0.28
2	Air//Ge ₂ Sb ₂ Te ₃ //SiO ₂	—	—	—	—	24	—	—	—	—	—	—	—	23	74	57	18	0.27
3	SiO ₂ //Ge ₂ Sb ₂ Te ₃ //SiO ₂	—	—	—	—	27	—	—	—	—	—	—	—	18	78	50	19	0.27
4	SiO ₂ //Ge ₂ Sb ₂ Te ₃ /Si ₃ N ₄ //SiO ₂	—	—	—	—	51	199	—	—	—	—	—	—	19	77	55	15	0.26
5	SiO ₂ //Ge ₂ Sb ₂ Te ₃ /Si//SiO ₂	—	—	—	—	61	158	—	—	—	—	—	—	1	90	51	11	0.18
6	SiO ₂ //Ge ₂ Sb ₂ Te ₃ /SiO ₂ /Si ₃ N ₄ //SiO ₂	—	—	—	—	41	77	184	—	—	—	—	—	6	88	51	15	0.21
7	SiO ₂ //Ge ₂ Sb ₂ Te ₃ /SiO ₂ /Si//SiO ₂	—	—	—	—	63	18	140	—	—	—	—	—	1	90	51	10	0.18
8	SiO ₂ //Si ₃ N ₄ /SiO ₂ /Ge ₂ Sb ₂ Te ₃ /SiO ₂ /Si ₃ N ₄ //SiO ₂	—	—	185	145	39	130	185	—	—	—	—	—	3	90	61	9	0.15
9	SiO ₂ //Si/SiO ₂ /Ge ₂ Sb ₂ Te ₃ /SiO ₂ /Si ₃ N ₄ //SiO ₂	—	—	110	90	46	195	195	—	—	—	—	—	1	87	72	5	0.12
10	SiO ₂ //Si/SiO ₂ /Ge ₂ Sb ₂ Te ₃ /SiO ₂ /Si//SiO ₂	—	—	111	169	32	169	111	—	—	—	—	—	1	82	82	2	0.096
11	SiO ₂ //2(Si/SiO ₂)/Ge ₂ Sb ₂ Te ₃ /2(SiO ₂ /Si)//SiO ₂	111	139	111	258	8	290	111	139	111	—	—	—	1	81	84	2	0.093
12	SiO ₂ //2(Si/SiO ₂)/Ge ₂ Sb ₂ Te ₃ /2(SiO ₂ /Si)//SiO ₂	56	137	111	250	19	256	111	137	56	—	—	—	0	86	89	1	0.068
13	SiO ₂ //2(Si/SiO ₂)/Ge ₂ Sb ₂ Te ₃ /2(SiO ₂ /Si)//SiO ₂	111	137	56	334	19	340	56	137	111	—	—	—	0	86	89	1	0.068
14	SiO ₂ //2(Si/SiO ₂)/Ge ₂ Sb ₂ Te ₃ /2(SiO ₂ /Si)//SiO ₂	111	277	56	313	5	337	56	277	111	—	—	—	0	87	89	2	0.066
15	SiO ₂ //2(Si/SiO ₂)/Ge ₂ Sb ₂ Te ₃ /2(SiO ₂ /Si)//SiO ₂	111	277	111	258	3	274	111	277	111	—	—	—	0	86	89	2	0.066
16	SiO ₂ //Si/SiO ₂ /GeSb ₂ Te ₄ /SiO ₂ /Si//SiO ₂	—	—	111	180	24	189	112	—	—	—	—	—	1	76	82	3	0.12
17	SiO ₂ //Si/SiO ₂ /GeTe/SiO ₂ /Si//SiO ₂	—	—	110	180	40	190	110	—	—	—	—	—	0	83	89	4	0.08
18	SiO ₂ //Si/SiO ₂ /GeSb ₄ Te ₇ /SiO ₂ /Si//SiO ₂	—	—	110	152	32	151	111	—	—	—	—	—	0	88	85	3	0.075
19	SiO ₂ //Si/SiO ₂ /Ge ₈ Sb ₂ Te ₁₁ /SiO ₂ /Si//SiO ₂	—	—	111	190	22	193	110	—	—	—	—	—	0	85	87	1	0.074
20	SiO ₂ //Si/SiO ₂ /Ge ₃ Sb ₂ Te ₆ /SiO ₂ /Si//SiO ₂	—	—	109	205	21	208	110	—	—	—	—	—	0	86	88	1	0.069
21	SiO ₂ //Si/SiO ₂ /Ge ₃ Sb ₂ Se ₄ Te ₁ /SiO ₂ /Si//SiO ₂	—	—	111	143	52	136	111	—	—	—	—	—	0	100	82	7	0.065
22	SiO ₂ //Si/SiO ₂ /Ge ₂ Sb ₂ Te ₃ /Si ₂₀ /SiO ₂ /Si//SiO ₂	—	—	112	200	20	209	111	—	—	—	—	—	0	86	91	2	0.062
23	SiO ₂ //Si/SiO ₂ /Ge ₂ Sb ₂ Te ₃ /Bi ₃ /SiO ₂ /Si//SiO ₂	—	—	110	214	15	225	111	—	—	—	—	—	0	87	92	2	0.057
24	SiO ₂ //2(Si/SiO ₂)/Ge ₂ Sb ₂ Te ₃ /Bi ₃ /2(SiO ₂ /Si)//SiO ₂	111	277	111	236	2	302	111	277	111	—	—	—	0	89	91	2	0.056
25	SiO ₂ //2(Si/SiO ₂)/Ge ₂ Sb ₂ Te ₃ /Bi ₃ /2(SiO ₂ /Si)//SiO ₂	111	140	112	274	4	298	112	140	112	—	—	—	0	88	92	2	0.055
26	SiO ₂ //2(Si/SiO ₂)/Ge ₂ Sb ₂ Se ₄ Te/2(SiO ₂ /Si)//SiO ₂	111	277	111	251	10	241	110	276	112	—	—	—	0	100	92	0	0.02
27	SiO ₂ //2(Si/SiO ₂)/Ge ₂ Sb ₂ Se ₄ Te/2(SiO ₂ /Si)//SiO ₂	110	277	110	139	54	139	109	277	109	—	—	—	0	100	98	0	0.006
28	SiO ₂ //3(Si/SiO ₂)/Ge ₂ Sb ₂ Se ₄ Te/3(SiO ₂ /Si)//SiO ₂	111	277	111	246	10	246	111	277	111	—	—	—	0	100	99	0	0.003

Таблица 2. Значения комплексного показателя преломления использованных при моделировании материалов в аморфном (\bar{n}_a) или кристаллическом (\bar{n}_c) фазовых состояниях

Материал	Комплексный показатель преломления		Источник
	\bar{n}_a	\bar{n}_c	
Ge ₂ Sb ₂ Te ₅	3.8 + 0.06i	6.3 + 1.2i	[11]
GeSb ₂ Te ₄	4 + 0.1i	6.5 + 0.8i	[17]
GeTe	3.1 + 0.05i	5.2 + 0.3i	[17]
GeSb ₄ Te ₇	4.2 + 0.04i	6.8 + 0.8i	[17]
Ge ₂ Sb ₂ Se ₄ Te	3.5	5 + 0.3i	[18]
Ge ₂ Sb ₂ SeTe ₄	4.8 + 0.3i	7.8 + 1.4i	[18]
Ge ₃ Sb ₂ Te ₆	3.7 + 0.06i	7.5 + 1.2i	[19]
Ge ₈ Sb ₂ Te ₁₁	4 + 0.06i	7.6 + 1.3i	[19]
(Ge ₂ Sb ₂ Te ₅) ₈₀ Si ₂₀	–	7.4 + 0.6i	[20]
(Ge ₂ Sb ₂ Te ₅) ₉₇ Bi ₃	3.9 + 0.07i	8.4 + 0.7i	[21]

количества слоев (9 слоев) в системах 11–15 их изготовление с технологической точки зрения является сложным и нецелесообразным, поэтому при дальнейшем моделировании выбирали многослойные системы, в которых в качестве активного слоя использован не Ge₂Sb₂Te₅, а другие МФП.

Как видно из табл. 1 для пятислойных систем 16–23 использование материалов GeTe [17], GeSb₂Te₄ [17], GeSb₄Te₇ [17], Ge₈Sb₂Te₁₁ [19], Ge₃Sb₂Te₆ [19], а также материалов системы Ge–

Sb–Te с добавлением примесей Si [20], Bi [21] и Se [18], позволяет добиться меньших значений целевой функции и лучших оптических характеристик. Состав Ge₂Sb₂Se₄Te представляет особый интерес в связи с отсутствием мнимой компоненты комплексного показателя преломления в аморфном фазовом состоянии, и ее малым значением в кристаллическом.

Кроме перечисленных материалов также были рассмотрены (Ge₂Sb₂Te₅)_{100-x}Bi_x (при x = 0.5, 1), (Ge₂Sb₂Te₅)_{100-x}In_x (при x = 0.5, 1, 3), (Ge₂Sb₂Te₅)_{100-x}Sn_x (при x = 0.5, 1, 3) [21], Ge₂SbTe₄, Ge₂Sb₂Te₄, Ge₃Sb₄Te₈, AgInSbTe [22], Ge₂Sb₂Se_xTe_{5-x} (при x = 2, 3, 5), (Ge₂Sb₂Te₅)₉₈Ni₂ [23], (Ge₂Sb₂Se₅)_{100-x}Ag_x (при x = 0, 1, 3, 10) [24]. К улучшению целевых параметров в сравнении с Ge₂Sb₂Te₅ они не привели, поэтому в табл. 1 отражены не были.

Система 21, содержащая слой Ge₂Sb₂Se₄Te, была рассмотрена более подробно (системы 26–28). На рис. 5а показаны зависимости оптических характеристик отражательной и пропускательной способности этой системы в зависимости от толщины слоя Ge₂Sb₂Se₄Te.

Как видно в такой системе при аморфном состоянии слоя Ge₂Sb₂Se₄Te отсутствуют оптические потери, обусловленные поглощением излучения. Однако при кристаллическом состоянии слоя Ge₂Sb₂Se₄Te они наблюдаются при отражении. Для улучшения отражательной способности слоя Ge₂Sb₂Se₄Te в кристаллическом состоянии нужно сделать переходы к экстремальным значе-

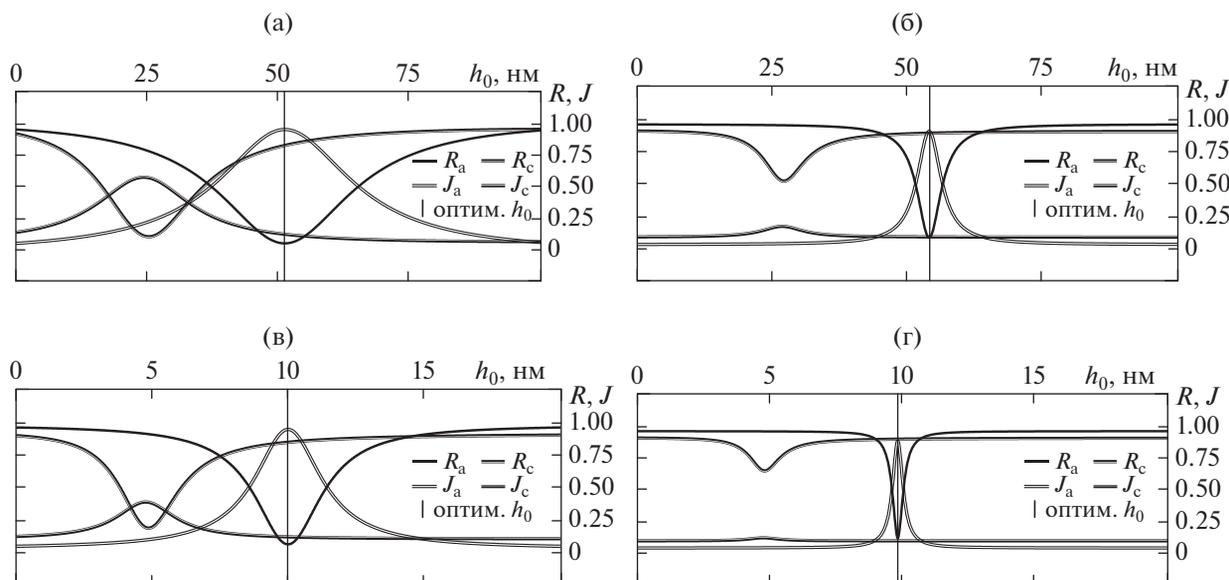


Рис. 5. Моделированные зависимости коэффициентов отражения R и пропускания J от толщины h_0 слоя Ge–Sb–Te в аморфном (R_a, J_a) и кристаллическом (R_c, J_c) состояниях для многослойных систем 21 (а), 27 (б), 26 (в), 28 (г).

ниям на кривых R_a , J_a , R_c , J_c (рис. 5а) более узкими. Это оказалось возможным при введении в систему дополнительных чередующихся симметричных пар слоев Si и SiO₂, оптическая толщина которых соответствует $\lambda/4$. Как видно из рис. 5б, при большем количестве таких дополнительных слоев наблюдаются более узкие переходы к экстремальным значениям R и J . Сужение переходов зависит от мнимой компоненты комплексного показателя преломления. Введение симметричных чередующихся слоев с оптической толщиной $\lambda/4$, превращает многослойную наносистему в замкнутый оптический резонатор, в котором волны подвергаются многократному прохождению через слой Ge₂Sb₂Se₄Te. Это ведет к значительному возрастанию поглощения в образце, что заметно для отражательной способности кристаллического слоя, комплексный показатель преломления которого содержит мнимую составляющую. Для слоя Ge₂Sb₂Se₄Te в аморфном состоянии эта тенденция не выполняется т.к. его комплексный показатель преломления не содержит мнимую компоненту.

В тоже время, кроме сужения переходов к экстремальным значениям R и J , желательным является перемещение положения экстремумов на кривых R_a , J_a в зону меньших толщин слоя Ge₂Sb₂Se₄Te от 0 до 52 нм. Это возможно при увеличении толщины слоев $h_{-1,1}$ от значений $h_{-1,1} = \lambda/(8n_{\text{SiO}_2})$ до $h_{-1,1} = \lambda/(4n_{\text{SiO}_2})$, что продемонстрировано на рис. 5в. Возможно и дальнейшее уменьшение толщины слоя Ge₂Sb₂Se₄Te, но для сохранения узких переходов к экстремальным значениям потребуется введение дополнительных симметричных относительно слоя Ge₂Sb₂Se₄Te чередующихся пар слоев Si и SiO₂ (рис. 5г). Также необходимо учитывать, что сужение переходов к экстремальным значениям будет накладывать требования к точности изготовления такого слоя Ge₂Sb₂Se₄Te. Как видно из рис. 5г, погрешность при изготовлении слоя Ge₂Sb₂Se₄Te в 0.5 нм приведет к неработоспособности такой системы.

Подбор оптимальной толщины слоя Ge–Sb–Te в зоне положения экстремумов R и J возможен и для слоев с другим составом. При малых толщинах снижается требование к мнимой части комплексного показателя преломления аморфного слоя, однако повышаются требования к точности изготовления такого слоя. В табл. 1 приведены значения толщин слоев для девятислойных систем 15 с толщиной слоя Ge–Sb–Te 3 нм и 24 с толщиной слоя Ge–Sb–Te 2 нм. Как видно, такие системы обладают относительно маленькими значениями целевой функции в сравнении с системами 11–14, 16–23 с аналогичным числом сло-

ев и оптическими характеристиками, достаточными для выполнения модуляции оптического сигнала с наименьшим значением оптических потерь. Однако, если сравнивать их с девятислойной системой 26 с толщиной слоя Ge₂Sb₂Se₄Te 10 нм, то видно, что характеристики последней гораздо лучше. К тому же к слою Ge₂Sb₂Se₄Te толщиной 10 нм технологические требования ниже и изготовить его проще, чем слой Ge–Sb–Te с толщиной 2 или 3 нм. Как видно, на примере систем 27 и 28 при увеличении толщины слоя Ge₂Sb₂Se₄Te или увеличении количества слоев возможно и дальнейшее уменьшение целевой функции. Однако это не является целесообразным, т.к. система 26 уже обладает вполне удовлетворительными оптическими характеристиками. Таким образом, девятислойная система 26 является оптимальным решением поставленной в настоящей работе цели.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведения теоретических и модельных исследований предложена модель оптимизации параметров многослойной наносистемы для выполнения модуляции оптического сигнала с наименьшим значением оптических потерь. Предложенная модель позволила провести моделирование многослойных поверхностных наносистем с их последующей оптимизацией для улучшения значений отражательной и пропускательной способностей до целевых значений, при которых многослойная система эффективно пропускает излучение на длине волны 1550 нм при аморфном состоянии активного слоя МФП и отражает его при кристаллическом состоянии. Кроме того, модель позволяет определить значения толщины и комплексного показателя преломления слоев, а также установить критерии их выбора.

На основе полученных модельных данных среди материалов системы Ge–Sb–Te различного состава, находящихся на линии квазибинарного разреза GeTe–Sb₂Te₃ и содержащих примеси In, Bi, Si, Se, Sn, Ag, Ni, были выбраны материалы с подходящими значениями комплексного показателя преломления и определены оптимальные значения толщин слоев многослойной системы.

Основным итогом настоящей работы является нахождение оптимальной многослойной системы “SiO₂/111 нм Si / 277 нм SiO₂/111 нм Si/251 нм SiO₂/10 нм Ge₂Sb₂Se₄Te/241 нм SiO₂/110 нм Si/276 нм SiO₂/112 нм Si//SiO₂”, обладающей нулевыми оптическими потерями для аморфного слоя Ge₂Sb₂Se₄Te и связанными с поглощением 8% потерями при кристаллическом слое Ge₂Sb₂Se₄Te. Эта система содержит оптимальное количество

слоев и имеет наименьшую оптимальную толщину активного слоя.

Построение сложных многоэлементных нанопорядоченных систем на основе таких поверхностных многослойных систем позволит осуществлять полностью оптическую маршрутизацию оптических сигналов.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-37-60023 с использованием оборудования Регионального центра зондовой микроскопии коллективного пользования Рязанского государственного радиотехнического университета имени В.Ф. Уткина.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Sharma K., Sehgal V.K.* // J. Supercomput. 2020. V. 76. P. 9901.
<https://www.doi.org/10.1007/s11227-020-03220-2>
2. *Bogaerts W., Perez D., Capmany J., Miller D.A.B., Poon J., Englund D., Morichetti F., Melloni A.* // Nature. 2020. V. 586. P. 207.
<https://www.doi.org/10.1038/s41586-020-2764-0>
3. *Qi H., Wang X., Hu X., Du Z., Yang J., Yu Z., Ding S., Chu S., Gong Q.* // J. Appl. Phys. 2021. V. 129. P. 210906.
<https://www.doi.org/10.1063/5.0048878>
4. *Kozyukhin S.A., Lazarenko P.I., Popov A.I., Eremenko I.L.* // Rus. Chem. Rev. 2022. V. 91. № 9. P. RCR5033.
<https://www.doi.org/10.1070/RCR5033>
5. *Lazarenko P., Kovalyuk V., An P., Kozyukhin S., Takáts V., Golikov A., Glukhenkaya V., Vorobyov Y., Kulevoy T., Prokhodtsov A., Sherchenkov A., Goltsman G.* // Acta Materialia. 2022. V. 234. P. 117994.
<https://www.doi.org/10.1016/j.actamat.2022.117994>
6. *Kozyukhin S.A., Lazarenko P.I., Vorobyov Y.V., Saveleyev M.S., Polokhin A.A., Glukhenkaya V.B., Sherchenkov A.A., Gerasimenko A.Y.* // Matériaux & Techniques. 2018. V. 180070. № 3. P. 1.
<https://www.doi.org/10.1051/mattech/2019008>
7. *Fuxi G., Yang W.* // Data Storage at the Nanoscale: Advances and Applications. Taylor & Francis Group. 2015. P. 190.
<https://www.doi.org/10.1201/b18094>
8. *Zhang Y., Ríos C., Shalaginov M.Y., Li M., Majumdar A., Gu T., Hu J.* // Appl. Phys. Lett. 2021. V. 118. P. 210501.
<https://www.doi.org/10.1063/5.0054114>
9. *Meng Y., Cao T., Long Y.* // J. Appl. Phys. 2020. V. 128. P. 140904.
<https://www.doi.org/10.1063/5.0023925>
10. *Hosokawa S., Pilgrim W.-C., Höhle A., Szubrin D., Boudet N., Bézar J.-F., Maruyama K.* // J. Appl. Phys. 2012. V. 111. P. 83517.
<https://www.doi.org/10.1063/1.3703570>
11. *Tolkach N.M., Vishnyakov N.V., Lazarenko P.I., Sherchenkov A.A., Sudakova A.U., Nazimov D.R.* // J. Phys. Conf. Ser. 2020. V. 1695. P. 012075.
<https://www.doi.org/10.1088/1742-6596/1695/1/012075>
12. *Wen S., Meng Y., Jiang M., Wang Y.* // Sci. Rep. 2018. V. 8. P. 4979.
<https://www.doi.org/10.1038/s41598-018-23360-z>
13. *Ríos C., Stegmaier M., Hosseini P., Wang D., Scherer T., Wright C.D., Bhaskaran H., Pernice W.H.P.* // Nat. Photonics. 2015. V. 9. P. 725.
<https://www.doi.org/10.1038/nphoton.2015.182>
14. *Rude M., Pello J., Simpson R.E., Osmond J., Roelkens G., van der Tol J.J., Pruneri V.* // Appl. Phys. Lett. 2013. V. 103. № 14. P. 141119.
<https://www.doi.org/10.1063/1.4824714>
15. *Ford W.* // Numerical Linear Algebra with Applications: Using MATLAB. Academic Press, 2015. 629 p.
<https://doi.org/10.1016/C2011-0-07533-6>
16. *Born M., Wolf E., Bhatia A.B., Clemmow P.C., Gabor D., Stokes A.R., Taylor A.M., Wayman P.A., Wilcock W.L.* // Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light. 7th ed. Cambridge University Press, 1999. 952 p.
<https://www.doi.org/10.1017/CBO9781139644181>
17. *Park J.W., Eom S.H., Lee H., Da Silva J.L.F., Kang Y.S., Lee T.Y., Khang Y.H.* // Phys. Rev. B. 2009. V. 80. P. 115209.
<https://www.doi.org/10.1103/PhysRevB.80.115209>
18. *Zhang Y., Chou J.B., Li J., Li H., Du Q., Yadav A., Zhou S., Shalaginov M.Y., Fang Z., Zhong H., Roberts C., Robinson P., Bohlin B., Ríos C., Lin H., Kang M., Gu T., Warner J., Liberman V., Richardson K., Hu Ju.* // Nature Commun. 2019. V. 10 № 1. P. 4279.
<https://www.doi.org/10.1038/s41467-019-12196-4>
19. *Michel A.K.U., Wuttig M., Taubner T.* // Adv. Opt. Mater. 2017. V. 5. Iss. 18.
<https://www.doi.org/10.1002/adom.201700261>
20. *Yang F., Tang X., Chen T., Wang M., Zhang L., Han J., Wan L., Ke D., Dai Y.* // Comput. Mater. Sci. 2019. V. 168. P. 253.
<https://www.doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.05.019>
21. *Lazarenko P., Phuc N., Kozyukhin S., Sherchenkov A.* // J. Optoelectron. Adv. Mater. 2011. V. 13. № 11. P. 1400
22. *Raeis-Hosseini N., Rho J.* // Mater. 2017. V. 10. Iss. 9. P. 1046.
<https://www.doi.org/10.3390/ma10091046>
23. *Guo P., Burrow J.A., Sevison G.A., Sood A., Ashoghi M., Hendrickson J.R., Goodson K.E., Agha I., Sarangan A.* // Appl. Phys. Lett. 2018. V. 113. Iss. 17. P. 171903.
<https://www.doi.org/10.1063/1.5053713>
24. *Singh P., Sharma P., Sharma V., Thakur A.* // Semicond. Sci. Technol. 2017. V. 32. № 4. P. 45015.
<https://www.doi.org/10.1088/1361-6641/aa5ee0>

Modeling of Multilayer Structures with Tunable Optical Characteristics

N. M. Tolkach^{1, 2, *}, N. V. Vishnyakov^{2, **}, V. G. Litvinov², A. A. Sherchenkov¹, E. P. Trusov²,
V. B. Glukhenkaya¹, and D. V. Pepelyaev¹

¹National Research University of Electronic Technology, Zelenograd, 124498 Russia

²Ryazan State Radio Engineering University named after V.F. Utkin, Ryazan, 390005 Russia

*e-mail: n.m.tolkach@gmail.com

**e-mail: rcpm-rgrtu@yandex.ru

Phase transition materials, in particular chalcogenide glassy semiconductors and Ge–Sb–Te system materials are of interest for application in optical information processing technologies. The uniqueness of these materials lies in the fact that they have a low-energy, fast and reversible phase transition, leading to a significant change in the refractive index in the infrared region of the optical spectrum. The model calculations carried out in the work made it possible to investigate the transformation of optical properties in multilayer structures consisting of SiO₂, Si, Si₃N₄ layers and an active layer of a phase transition material when its phase state changes. The aim of these studies was to fulfill the condition of the lowest optical losses during transmission and reflection of radiation of 1550 nm in such structures in the case of amorphous and crystalline states of the active layer, respectively. As a result, the nine-layer “SiO₂//111 nm Si/277 nm SiO₂/111 nm Si/251 nm SiO₂/10 nm Ge₂Sb₂Se₄Te/241 nm SiO₂/110 nm Si/276 nm SiO₂/112 nm Si//SiO₂” structure that most satisfies the specified conditions was designed.

Keywords: phase transition, Ge–Sb–Te, amorphous state, crystalline state, all-optical routing, multilayer structure, transmissivity, reflectivity, nonlinear optimization, target function, optical losses.