УДК 525.36

© 2002 р. **В.Г. Житарюк, Л.Б. Грушка, С.С. Перепелюк**

Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, Чернівці

ІНТЕРФЕРЕНЦІЙНИЙ ПІДХІД У ПРОГНОЗУВАННІ ДЗЕРКАЛЬНОГО ВІДБИВАННЯ ВІД ШОРСТКИХ ПОВЕРХОНЬ

Розглянута можливість прогнозування дзеркального відбивання від шорстких поверхонь теоретичними співвідношеннями оптики тонких плівок. Передумовою інтерференційного підходу є заміна поверхневого шорсткого рельєфу тонким однорідним шаром з ефективними оптичними постійними $n_{еф}$ і $\kappa_{еф}$ та товщиною $t_{еф}$. Принципова проблема такого розгляду – це встановлення вказаних параметрів ефективного шару.

The prediction possibility of mirroring from rough surfaces by theoretical relations of thin films optics is surveyed. The premise of the interference approach is the replacement of a surface rough contour by a thin homogeneous layer with n_{ef} and κ_{ef} effective optical constants and t_{ef} width. The indicated parameters definition of the effective layer is the key problem of such reviewing.

Структура шорсткої поверхні в площині нормального перетину – це деякий ламаний контур, заглиблений випадковим чином в навколишнє середовище. Обмежимо цей контур двома паралельними лініями, одна з яких – лінія виступів, а інша – впадин. Згідно з інтерференційним підходом [1], дзеркальне відбивання є результатом інтерференції променів, послідовно відбитих від площин I та II, що являють собою усереднення виступів нерівностей та використання теоретичних співвідношень оптики тонких плівок впадин відповідно. Локалізація цих площин характеризується невизначеністю з флуктуацією $\pm\delta$. Відповідна флуктуація характерна і фазам інтерферуючих променів. Перекриття рівнів флуктуації виступів і впадин зумовить втрату когерентності цих променів, тобто зникне дзеркальний блиск шорсткої поверхні. Отже, віддаль h між площинами I та II представляє інтерференційну висоту мікронерівностей. Шар матеріалу, що лежить між вказаними площинами, називають ефективним, а його оптичні параметри n, κ – ефективними оптичними постійними шорсткої поверхні [2]. Основним співвідношенням для розрахунків дзеркального відбивання від шорсткої поверхні є відома в оптиці тонких плівок формула:

$$\Re_{13} = \frac{\mathrm{ch}(\varepsilon + \chi_{23} - \chi_{12}) + \cos(\delta + \varphi_{23} - \varphi_{12})}{\mathrm{ch}(\varepsilon + \chi_{23} + \chi_{12}) + \cos(\delta + \varphi_{23} + \varphi_{12})}. \quad (1)$$

Тут $\chi_{ik} = -\ln r_{ik}/2$, а r_{ik}, τ_{ik} – енергетичні коефіцієнти відбивання і пропускання відповідних границь розділу, φ_{ik} – зсув фази при відбиванні на цих границях, $\delta = 4\pi n_2 h_2/\lambda$, $\varepsilon = 4\pi\kappa_2 h_2/\lambda$ – набіги фази хвилі довжиною λ при проходженні тонкого шару товщиною h_2 за рахунок його заломлення n_2 і поглинання κ_2.

Зі співвідношення (1) очевидно, що $\Re_{13}$ – осцилююча функція товщини шару. При дуже малих δ і ε ($h \to 0$) значення $\Re_{13}$ прямує до R_{13}, тобто до величини коефіцієнта відбивання масивного матеріалу підкладки:

$$\Re_{13} \to R_{13} = \frac{(n_1 - n_3)^2 + (\kappa_1 - \kappa_3)^2}{(n_1 + n_3)^2 + (\kappa_1 + \kappa_3)^2} = \Re_0. \quad (2)$$

При проведенні розрахунків на шорстких поверхнях нас цікавитиме лише перша осциляція згідно з (1). Тут можливі два варіанти. Якщо $n_1 < n_2 < n_3$ то першою осциляцією буде перший мінімум. Математичний аналіз (1) дає можливість виявити умови цього екстремуму у двох випадках, при $\kappa_2 \ll n_2$ і $\kappa_2 > n_2$. У першому разі умова мінімуму визначиться: $\cos(\delta + \varphi_{23} - \varphi_{12}) = -1$, або $\delta + \varphi_{23} - \varphi_{12} = \pi$. Розрахунки показують, що в даному випадку $\varphi_{12} \approx \varphi_{23}$, тобто умова мінімуму буде спостерігатись при $\delta = \pi$.

Одержимо: $4\pi n_2 h_2/\lambda = \pi$. Отже, $h_2 = \lambda/(4n_2)$.

Розглянемо випадок $\kappa_2 > n_2$. Дослідження першого мінімуму відбивання, згідно з (1), виявляють таку умову:

$$\delta = \frac{\pi}{2} - \frac{n_2}{\kappa_2}, \text{ тобто } h_2 = \left(\frac{\pi}{2} - \frac{n_2}{\kappa_2}\right)\lambda/(4\pi n_2).$$

Отже, при $\kappa_2 << n_2$ (діелектрик)

$$h_2 = \lambda/(4n_2), \quad (3а)$$

а при $\kappa_2 > n_2$ (метал)

$$h_2 = \left(\frac{\pi}{2} - \frac{n_2}{\kappa_2}\right)\lambda/(4\pi n_2). \quad (3б)$$

Вважаємо, що дзеркальне відбивання від шорстких поверхонь буде спостерігатись при критичному значенні висоти нерівностей h, величина якого забезпечить перший максимум у відбиванні згідно з оптикою тонких плівок. Як випливає із співвідношень (3а), (3б), для проведення розрахунків необхідно визначитись зі значеннями ефективних оптичних постійних перехідного шару і його товщиною.

Встановлення ефективних оптичних постійних перехідного шару

Надалі цю систему будемо уявляти як композитний шар – в матриці довколишнього середовища з оптичними постійними κ_1, n_1 розміщені частинки матеріалу шорсткої поверхні n_2, κ_2. Визначення оптичних постійних таких композицій проведемо в рамках класичних теорій Друде і Лоренц-Лорентца, справедливих для діелектричних середовищ [3]. Припустимо, що останні складаються з однакових "елементарних комірок". Густину середовища позначимо через N-комірок на одиницю об'єму. Якщо ззовні прикладемо електричне поле E, то в комірці індукується дипольний момент p, величина якого $p=\alpha E'$. Тут α – молекулярна поляризованість, E' – локальне електричне поле в зоні знаходження даної комірки. Повна поляризованість одиниці об'єму буде:

$$P = \sum N_\nu \alpha_\nu E'_\nu. \quad (4)$$

Вирішальним моментом у всіх теоріях діелектричної проникності є обчислення локального електричного поля E'. Згідно Друде, $E'=E$, тобто локальні збурення, викликані поляризацією навколишнього середовища, до уваги не беруться. В теорії Лоренц-Лорентца локальне поле прирівнюється до нуля в центрі сфери, яка знаходиться в однорідно-поляризованому середовищі з поляризацією P. Виходячи із чого можна показати, що

$$E'=1/3\,(\varepsilon+2)\,E. \quad (5)$$

Запишемо співвідношення для вектора P, яке встановлює його зв'язок з електричним полем E та діелектричними постійними середовища ε і вакууму ε_0:

$$P=(\varepsilon-1)\varepsilon E. \quad (6)$$

Тепер, використовуючи співвідношення (4), (5), (6), можна записати:

$$(\varepsilon-1)/(\varepsilon+2)=N\alpha/(3\varepsilon). \quad (7)$$

Аналогічно, використовуючи (1), запишемо рівність для суміші компонент:

$$(\varepsilon-1)/(\varepsilon+2)=\sum (N'_\nu / N_\nu)\,[(\varepsilon_\nu-1)/(\varepsilon_\nu+2)] \quad (8)$$

Нехай об'ємна концентрація молекул сорту ν $C_\nu = N'_\nu / N_\nu$. Введемо допоміжну змінну $a_\nu=1/(\varepsilon_\nu+2)$. Виконуючи алгебраїчні перетворення, знаходимо, що результуюча діелектрична проникність, згідно з теорією Лоренц-Лорентца, буде

$$\varepsilon=\sum a_\nu \varepsilon_\nu C_\nu / \sum a_\nu C_\nu. \quad (9)$$

Формула (9) свідчить, що відбувається арифметичне усереднення діелектричної проникливості ε_ν згідно з концентрацією молекул C_ν. Застосовуючи ці викладки до просторового мікрорельєфу шорсткої поверхні, під концентрацією C молекул ν-сорту необхідно розуміти відносну частку A_ν заповнення матеріалом шорсткої поверхні об'єму, обмеженого паралельними площинами, які проводяться через лінії впадин і виступів. Тоді (9) запишеться

$$\varepsilon=\sum a_\nu \varepsilon_\nu A_\nu / \sum a_\nu A_\nu. \quad (10)$$

Якщо мікровиступи знаходяться в повітрі, то впливом поляризації зовнішнього середовища нехтується, тобто $a_\nu=1$. Тоді (10) можна записати:

$$\varepsilon=(\varepsilon_1 A_1+\varepsilon_2 A_2)/(A_1+A_2).$$

Або, виходячи із того, що $A_1+A_2=1$, отримаємо:

$$\varepsilon=\varepsilon_1 A_1+\varepsilon_2 A_2. \quad (11)$$

Враховуючи комплексну форму (11), кінцеві формули для розрахунків ефективних значень оптичних постійних еквівалентного шару матимуть вигляд:

$$n=\sqrt{n_1^2 A_1 + n_2^2 A_2}, \quad \kappa=\sqrt{\kappa_1^2 A_1 + \kappa_2^2 A_2}. \quad (12)$$

Для проведення розрахунків n і κ необхідно визначитись із значенням величин A_1, A_2. Розв'язок цієї задачі здійснимо із залученням структурного параметра шорсткості tp, суть якого – відносна площа опори на рівні зрізу p. Математичною моделлю tp є інтегральна функція розподілу мікронерівностей по висоті. З прийняттям нормального розподілу ця функція буде інтеграл імовірності:

$$\Phi(z)=(1/\sqrt{2\pi})\int_0^{z_0} \exp(-v^2/2)dv. \quad (13)$$

Відомо, що в цьому інтегралі координата z_0 – нормована величина, тобто $z_0=z/\sigma_0$ де σ_0 – середньоквадратичне відхилення мікронерівностей, відлік якого здійснюється від лінії впадин. Середньоквадратичне відхилення мікронерівностей у термінах відповідних стандартів оцінюється параметром R_q, базовим відліком якого є середня лінія мікронерівностей. Можна показати, що $\sigma_0=$

$=2\sqrt{2}R_q$. Щодо змінної z у (13), то його величина відповідає стандартному параметру шорсткості R_{max}. Нормована величина z_0 буде :

$$z_0 = z_{кр} / \sigma_0 = R^*_{max} /(4\sqrt{2}R_q). \qquad (14)$$

Значення останньої для критичної висоти мікронерівностей:

$$z_0 = (1{,}97R_z)/(2\sqrt{2}R_q) =$$
$$=(9{,}85R_q)/(2\sqrt{2}R_q) = 3{,}4 \qquad (15)$$

Отже, табличне значення інтеграла ймовірності знаходиться при z_0=3,4. Тоді $\Phi_0(3{,}4)$=0,499, тобто A_1=0,499, а A_2=1–0,499. Одержані значення A_1, A_2 цілком прогнозовані для поверхонь із нормальним розподілом мікронерівностей.

Для поверхонь із шорсткістю R^p_{max}, яка менша за критичну, значення біжучої координати z_{0p} знаходиться при наперед встановленому R^p_{max} та рівні перетину p, що використовуються для обрахунків структурного параметра t_p:

$$z_{0p} = z_0 p = 3{,}4p. \qquad (16)$$

Рівність (16) одержана з використанням (14), (15), а також очевидної пропорції між R_{max}, R^p_{max}, p, а саме:

$$R^p_{max} = R_{max} p. \qquad (17)$$

Отже, для обчислення ефективних оптичних постійних у функції висоти мікронерівностей необхідно: 1) знати параметр R_{max} – максимальне значення висоти мікронерівностей, при якій ще спостерігається дзеркальний блиск для конкретного матеріалу поверхні, з якої виготовлений досліджуваний зразок; 2) встановити вимірюванням параметр R^p_{max} – реальну висоту мікронерівностей даної поверхні; 3) розрахувати p згідно з (17); 4) обчислити координату z_0 і встановити за таблицями з довідників значення інтеграла імовірності.

Розрахунки і аналіз

Проведені розрахунки ефективних значень оптичних постійних згідно з (12) у випадку z_0=3,4 зведені в таблицю 1.

В області непрозорості матеріалів можна здійснити додаткову перевірку цих результатів, використовуючи формулу (2), яка допускає обернений розв'язок при нехтуванні поглинанням. Проведемо ці дії для кремнію. За коефіцієнт відбивання візьмемо величину інтегрального (тобто повного) відбивання з результатів [1] для поверхонь із максимальною шорсткістю, при якій ще виявляється дзеркальний блиск. Перетворена формула (2) має наступний вигляд:

$$n = n_1\left(1+\sqrt{\Re_{кр}} \Big/ 1-\sqrt{\Re_{кр}}\right) \qquad (18)$$

Тут $\Re_{кр}$ – інтегральний коефіцієнт відбивання при критичній висоті мікронерівностей шорсткої поверхні.

У результаті розрахунків, згідно з формулою (18), при підстановці $\Re_{кр}$=0,255 (для Si R_q≅0,225 мкм) отримаємо, що n=3,04. Як бачимо, одержане значення дещо відрізняється від наведеного у таблиці 1. Це пояснюється тим, що для вказаних висот мікронерівностей функція їх розподілу відрізняється від нормального вигляду. Із використанням даних профілометрії [1] можна показати, що значення нормованої координати z_0 відрізнятиметься від попередньо встановленого значення z_0=3,4 в напрямок спадання, що спричинить зменшення величини A_2, тобто зменшення ефективного значення показника заломлення еквівалентного шару.

Порівняльний аналіз результатів таблиці 1 для Si з результатами, наведеними в [2], виявляють деяку розбіжність, яка, на наш погляд, викликана лише метрологією встановлення значень параметрів шорсткості поверхонь.

Із результатів даної роботи випливає, що аналітичні співвідношення оптики тонких плівок можуть бути використані для прогнозування дзеркального відбивання від шорстких поверхонь.

Таблиця 1. Оптичні постійні матеріалу поверхні n_2, κ_2 і еквівалентного шару n, κ для λ=0,63 мкм.

Матеріал	n_2	κ_2	n	κ
ІКС3	1,52	$4\cdot10^{-4}$	1,18	0
Si	3,87	0,17	2,83	0,093
Al (на Si)	0,90	6,40	0,97	3,63

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Житарюк В.Г.* Использование спектрофотометрических методов для определения параметров шероховатости поверхностей и оптических параметров тонких пленок: Дис. ..канд. физ.-мат. наук. - Черновцы, 1993.
2. *Караванов В.Б., Сахновский М.Ю.* Определение высоты неровности шероховатой поверхности на основе стокс-поляриметрических измерений // Опт. и спектр. - 1990. - **68**, вып.4. - С.905.
3. *Якобсон Р.* Неоднородные и совместно напыленные пленки / Физика тонких пленок. В 8 книгах / Под ред. Г.Хасса. - М.: Мир, 1975. Кн. 8. -С. 61-105.