13

Исследование поглощения СВЧ излучения в сверхтонких проводящих пленках

© В.В. Старостенко, В.Б. Орленсон, А.С. Мазинов, И.Ш. Фитаев

Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, 295007 Симферополь, Россия e-mail: mazinovas@cfuv.ru

Поступило в Редакцию 22 ноября 2019 г. В окончательной редакции 3 февраля 2020 г. Принято к публикации 20 марта 2020 г.

> Проведено численное моделирование взаимодействия электромагнитных волн СВЧ диапазона с проводящими пленками нанометровой толщины в приближении однородной области и структурой, представленной микро- и наночастицами. С помощью метода связанных волн исследована динамика изменения оптических коэффициентов от значений, характерных для диэлектрика, к значениям однородной проводящей пленки, проведен анализ влияния размеров и распределения проводящих островков на электродинамические характеристики.

> Ключевые слова: СВЧ, метод связанных волн, RCWA, металлодиэлектрические структуры, сверхтонкие пленки, модель Френеля-Эйри.

DOI: 10.21883/JTF.2020.08.49546.375-19

Введение

Проводящие пленки являются объектом внимания в полупроводниковой электронике, в оптике, при экранировании изделий и радиотехнических устройств от воздействия внешних электромагнитных полей, а также в других областях науки и техники. Они широко применяются в электромагнитных поглотителях, а также используются в области аккумулирования солнечной энергии [1,2].

Свойства проводящих пленок существенно зависят от различных параметров, в частности, от их толщины, которая определяет механизмы преобразования энергии электромагнитных полей (ЭМП) в тепловую энергию. Физические процессы в нанометровых проводящих пленках неразрывно связаны с характеристиками подложек, образующими с пленками металлодиэлектрическую структуру (МДС). При толщинах менее 10 nm пленка не сплошная, а представляет собой совокупность проводящих островков — наночастиц (множество рассеивающих центров) [3]. Физические и электродинамические свойства пленок при переходе через эту условную границу сильно разнятся. Для проводящих пленок на аморфных бюджетных подложках (боросиликатное стекло, ситалл, полимерные пленки и т.д.) с шероховатостью менее 10 nm, такие понятия, как толщина и удельная проводимость, являются достаточно условными. Как правило, пленкам толщиной менее 10 nm ставится в соответствие время напыления. Для пленки с поверхностью единичных размеров и толщиной d сопротивление $Rs = 1/\sigma d(\Omega)$ меняет свои физические свойства от диэлектрика ($\sigma = 0$) до хорошо проводящей структуры, "закорачивающей" пространство, которое практически полностью отражает падающую волну [4]. В интервале толщин 2–10 nm находится максимум поглощения энергии ЭМП в радиодиапазоне. При исследовании и анализе оптических коэффициентов нанометровых пленок в [5] используют понятия характеристических сопротивлений, аппарат длинных линий, что не учитывает возможность преобразования плоской волны в другие типы волн, пространственную и омическую неоднородность пленок — реальные физические характеристики подложек и пленок. В различной степени результаты исследований дифракционных свойств МДС содержатся в работах [6–12]. Для исследования свойств нанометровых проводящих пленок в радиодиапазоне в настоящей работе предлагается использовать метод связанных волн (RCWA) [13,14], как наиболее приемлемый численный метод, в котором учитываются особенности МДС.

Целью настоящей работы являются численные исследования в различных приближениях электродинамических свойств сверхтонких проводящих пленок в СВЧ диапазоне в зависимости от толщины пленки и степени перекрытия диэлектрической подложки тонким металлизированным покрытием.

Приближение Френеля—Эйри

С учетом того что реальная нанометровая пленка представлена в виде совокупности проводящих частиц с размерами, много меньшими длин волн СВЧ диапазона, в качестве первого приближения, как правило, рассматривают модель рассеяния плоской ЭМ волны на плоскопараллельной проводящей пластине нанометровой толщины. В модели предполагается, что пространство делится на два полупространства *1* и *3* и область толщиной *d*, отделяющей их друг от друга (рис. 1). В области *1*



Рис. 1. Модель однородной проводящей пленки. *1* и 3 — области свободного пространства, 2 — проводящий слой.



Рис. 2. Зависимости оптических коэффициентов: *а* — частотные зависимости, *b* — от толщины пленки.

поле представляется в виде падающей и отраженной волн, структура области 2 может быть многослойной, включая как проводящие, так и диэлектрические пленки.

Выражения для коэффициентов отражения и прохождения по полю находятся из формул Френеля—Эйри для распространения волны через многослойное пространство, которые для среды из трех областей имеют вид [14]:

$$r = r_{12} + r_{23} \exp(-j2\psi)/1 + r_{12}r_{23} \exp(-j2\psi), \quad (1)$$

$$t = (1 - r_{23})(1 - r_{12})\exp(-j\psi)/1 + r_{12}r_{23}\exp(-j2\psi),$$
(2)

где r, t — комплексные коэффициенты отражения и прохождения соответственно $(R = |r|^2, T = |t|^2), A = 1 - -(|r|^2 + |t|^2)$ — коэффициент поглощения, r_{12}, r_{23} комплексные коэффициенты отражения между слоями 1 и 2, 2 и 3 соответственно. При нормальном падении $\psi = k_0 \tilde{n} d$, где k_0 — волновой вектор в свободном пространстве, d — толщина проводящей пленки и $\tilde{n} = \sqrt{\varepsilon_r \mu_r}$ — показатель преломления. Диэлектрическая проницаемость для проводящего пространства описывается выражением

$$\varepsilon_r = -j\sigma/\omega\varepsilon_0,$$
 (3)

где σ — удельная проводимость металлической области, ω — круговая частота падающего излучения, $j = \sqrt{-1}$ и ε_0 — абсолютная диэлектрическая проницаемость в вакууме.

Проведенные вычисления показали, что при толщине проводящей области $d \approx 2$ nm и удельной проводимости $\sigma = 3 \cdot 10^6$ S/m коэффициент поглощения A равен 50% при том, что глубина скин-слоя для рассматриваемого материала в исследуемой области частот равна $d_{\rm skin} \approx 550$ nm. Следует отметить, что в СВЧ диапазоне оптические характеристики имеют частотно-независимый характер (рис. 2, *a*), что позволило исследовать зависимость оптических коэффициентов от толщины проводящей пленки в широком диапазоне частот. На рис. 2, *b* виден максимум поглощения, соответствующий толщине проводящего слоя ~ 2 nm, что в отличие от частотного резонанса можно интерпретировать как пространственный резонанс поглощения.

Недостатком рассмотренной модели является невозможность оценки влияния пространственной и омической неоднородностей проводящего слоя на его оптические характеристики. Для решения этой задачи был проведен более глубокий анализ поверхности такого рода пленок на разных стадиях их получения.

Численное моделирование с использованием метода связанных волн

Рассматриваемая задача предполагает, что длина электромагнитной волны падающего излучения много больше линейных размеров наночастиц. Для адекватного исследования использовать численные методы, оперирующие во временном пространстве, например, метод конечных разностей во временной области (FDTD) [15], нецелесообразно, поскольку эти методы привязаны к размерам наночастиц, длине воздействующей волны и времени установления стационарного режима. Для нахождения оптических коэффициентов использовался численный метод связанных волн [12,13]. Данный метод решает уравнения Максвелла в обратном (частотном) пространстве. Для исследования многослойных оптических систем со сложным рельефом в поперечном направлении каждого слоя решается задача на собственные значения и собственные вектора, после чего производится сшивка полученных результатов на границе раздела всех слоев. Двумерная функция диэлектрической проницаемости каждого слоя представляется дискретной сеткой высокого разрешения в обратном пространстве (пространственно-спектральной форме):

$$\varepsilon(k_x, k_y) = (1/N_x N_y) \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{k=1}^{N_y} \varepsilon(x_i, y_k)$$
$$\times \exp(-j \cdot (k_x \cdot x_i + k_y \cdot y_k)), \qquad (4)$$

где $k_x, k_y - x$ и у компоненты волнового вектора, N_x, N_y — количество точек разбиения модельного пространства.

Для процедуры сшивки и расчета оптических коэффициентов используется метод *S*-матриц [14]. Оптические коэффициенты находятся путем суммирования энергетических вкладов отраженных, прошедших и поглощенных волн (закон сохранения):

$$R + T + A = 1, \tag{5}$$

$$T = \sum_{p=1}^{P} \sum_{q=1}^{Q} T(p,q), \quad R = \sum_{p=1}^{P} \sum_{q=1}^{Q} R(p,q), \quad (6)$$

где R — коэффициент отражения, T — коэффициент прохождения и A — коэффициент поглощения, T(p, q), R(p, q) — коэффициенты гармоник (мод) соответствующих волн.

В качестве прототипа теоретической модели МДС взята типичная структура, полученная с помощью измерительной установки СЗМ (сканирующий зондовый микроскоп) INTEGRA, оснащенная оптической головкой с разрешающей способностью по высоте 0.8 nm (рис. 3, *a*). Материал пленки — алюминий, подложка из ситалла, перед напылением подложка подвергалась плазменной шлифовке — убирались неоднородности высотой более 10 nm [16]. Аналогичный вид имели МДС с пленками из меди, нихрома и титана с подложками из различных видов стекла.

Теоретическая модель проводящей пленки с учетом реальной структуры, размещенной на поверхности диэлектрической подложки, представлена как слоистая двумерно-периодическая (в поперечном сечении) решетка с периодами Λ_x и Λ_y вдоль соответствующих осей x и y. Элементарную ячейку проводящей пленки описывает двумерная функция $\varepsilon_r(x, y)$, вещественная часть которой показана на рис. 3, b, 4 и 5. Диэлектрическая проницаемость проводящего материала описана выражением (3). Удельная проводимость проводящих

а Al 4c **E** 1 1.0X,μm $\mu_{\rm m}$ 0 5 b $\operatorname{Re}(\varepsilon_r(x, y))$ -1.010 -0.89 8 -0.67 -0.4-0.26 $\Lambda_y, \mu m$ 5 0.2 4 3 0.4 0.6 2 1 0.8 0 1.0-0.5 0 0.5 1.0 -1.0 $\Lambda_x, \mu m$

Рис. 3. Типичный рельеф структуры МДС с пленкой из алюминия $(d \cong 3 \text{ nm})$ (*a*) и ее модельная аппроксимация в виде цилиндров d = 3 nm (*b*).



Рис. 4. Начало формирования проводящих каналов, d = 5 nm.

рассеивающих центров была принята, так же как и в вышеприведенных вычислениях, равной $\sigma = 3 \cdot 10^6$ S/m. Толщина слоя, описывающего подложку, $d_{\rm sud} = 12\,\mu{\rm m~c}$



Рис. 5. Образование сплошной проводящей пленки, d = 10 nm.

относительной диэлектрической проницаемостью, равной $\varepsilon_{r.sub} = 10$. Проводящие островки аппроксимировались цилиндрами разных радиусов и высот, причем высота цилиндров соответствовала толщине проводящей пленки. Для каждой стадии изменения проводящего слоя на подложке рассчитаны оптические коэффициенты.

При использовании пространственно-временных численных методов точность результатов и выполнения баланса мощностей (5) зависит от степени разрешения модельной сетки, тогда как при использовании метода RCWA важным является вопрос сходимости результатов при условии постоянного соблюдения сохранения баланса мощностей. Для решения задачи было выбрано $N_x = N_y = 512$ точек разбиения пространственной сетки (4). В расчетах минимальное количество пространственных гармоник определялось условием незначительного изменения оптических коэффициентов (6) и зависело как от толщины пленок, так и от степени заполнения ячейки проводящим материалом.

Модельная толщина пленок определялась, исходя из среднеквадратичной шероховатости, полученной с помощью статистического анализа АСМ изображения (рис. 3, a) [16]. В начальный момент магнетронного напыления, при толщинах d до 3 nm, осажденный материал представляет собой слабо пересекающиеся области металлизации (рис. 3, b). Таким образом, коэффициент прохождения падающей волны выше 80%, при этом коэффициент огражения составляет единицы процентов, а коэффициент поглощения имеет значения выше 10% соответственно. При малом заполнении (металлизации) сходимость достигается при учете большего количества пространственных гармоник (P = Q > 55) и приводит к увеличению коэффициента прохождения с соответствующим падением коэффициентов отражения и поглощения.

При достижении толщины пленки в 5 nm, площадь цилиндров (элементарных островков) значительно увеличивается, что приводит к множественным перекрытиям металлизации (рис. 4) и образованию сплошных проводящих каналов на поверхности подложки. В данном случае коэффициент поглощения имеет максимальное значение в $A \cong 50\%$. Оптические коэффициенты отражения и прохождения равны T = 42% и R = 14%и не зависят частоты, как и в случае приближения Френеля-Эйри (рис. 2, *a*). При образовании проводящих каналов сходимость результатов достигается при малом количестве пространственных гармоник, в данном случае P = Q = 25.

Дальнейший рост пленки и увеличение радиуса проводящих цилиндров (рис. 5) приводит к падению уровня поглощения и превалированию коэффициента отражения над коэффициентом прохождения (A = 28%; R = 70%; T = 2%.). Так же как и в предыдущем случае, сходимость результатов достигается при малом количестве пространственных гармоник. Такое поведение сходимости будет соблюдаться и в дальнейших расчетах.

Формирование пленки близко к сплошной и дальнейший рост толщины приводит к отсутствию прохождения и значительному росту отражения СВЧ энергии с коэффициентом отражения R > 70% (при d > 15 nm), который совпадает с аналитическим расчетом в приближении Френеля—Эйри (рис. 2, *b*).

Заключение

При малых толщинах проводящих пленок $(d \approx 2 - 10 \,\mathrm{nm})$ коэффициент поглощения сильно зависит от степени перекрытия диэлектрической подложки проводящим материалом. В случае, когда пленка не сплошная, коэффициент поглощения обладает меньшими значениями и определяется отношением токов смещения и токов проводимости, но в любом случае в радиодиапазоне практически не зависит от частоты.

Увеличение площади металлизации в функции $\varepsilon_r(x, y)$ приводит к возрастанию коэффициента поглощения A и для сплошной пленки толщиной d = 2-3 nm он стремится к предельному значению $A \rightarrow 50\%$. Наличие же мелких дефектов в сплошном проводящем покрытии практически не влияет на характер оптических коэффициентов, которые имеют вид, аналогичный электродинамическим характеристикам однородной сплошной пленки.

Дальнейший процесс напыления, в ходе которого увеличивается металлическое покрытие как по толщине, так и по степени однородности, приводит к увеличению отражения с уменьшением поглощения и прохождения, и при толщинах более 15–20 nm практически вся ЭМ волна отражается от МДС.

Исследования мощностного состава пространственных гармоник показали, что в рассматриваемом диа-

пазоне частот вся прошедшая и отраженная мощность определяется лишь основным (главным) порядком дифракции. Это обусловлено тем, что линейные размеры проводящих островков много меньше длин волн воздействующего излучения.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- Ahmad N., Stokes J., Fox N.A., Teng M., Cryan M.J. // Nano Energy. 2012. Vol. 1. N 6. P. 777–782.
- [2] Nimtz G., Panten U. // Ann. Phys. 2010. Vol. 19. N 1–2.
 P. 53–59. DOI: 10.1002/andp.200910389
- [3] Андреев В.Г., Вдовин В.А., Пронин С.М., Хорин И.А. // Журн. радиоэлектроники. 2017. Вып. 11. Режим доступа: http://jre.cplire.ru/jre/nov17/17/text.pdf
- [4] *Abdellaoui N.* et al. // Appl. Surf. Sci. 2017. Vol. 418. P. 517–521. DOI:

http://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2016.11.234

- [5] Bosman H., Lau Y.Y., Gilgenbach R.M. // Appl. Phys. Lett. 2003. Vol. 82. P. 1353. DOI: 10.1063/1.1556969
- [6] Sucheng L., Shahzad A., Weixin L., Zhi Hong Hang, Bo Hou, Mingrong Shen, Chin-Hua. // AIP Advances. 2014. Vol. 4. P. 017130. DOI: http://dx.doi.org/10.1063/1.4863921
- [7] Пронин С.М., Вдовин В.А., Андреев В.Г. // Ученые записки физ. фак. МГУ. 2016. Вып. 5. С. 165411.
- [8] *Вдовин В.А.* // III Всерос. конф. "Радиолокация и радиосвязь" ИРЭ РАН. 2009. С. 832–836.
- [9] Pham Phi H.Q., Zhang W., Quach N.V., Li J., Zhou W., Scarmardo D., Brown E.R., Burke P.J. // Nature Commun. 2017. Vol. 18. P. 2233 DOI: 10.1038/s41467-017-02336-z
- [10] Антонец И.В., Котов Л.Н., Некипелов С.В., Карпушов Е.Н. // ЖТФ. 2004. Т. 74. Вып. 11. С. 102–106.
- [11] Антонец И.В., Котов Л.Н., Голубев Е.А., Шаров В.Г., Щеглов В.И. // Журн. радиоэлектроники. 2018. Вып. 5. Режим доступа: http://jre.cplire.ru/jre/may18/2/text.pdf. DOI: 10.30898/1684-1719.2018.5.2
- [12] Moharam M.G., Pommet D.A., Grann E.B. // J. Opt. Soc. Am. A. 1995. Vol. 12. N 5. P. 1077–1086.
- [13] *Rumpf R.C..* // Progr. Electromagnet. Res. B. 2011. Vol. 35. P. 241–261.
- [14] *Евтихов М. Г.* // Журн. радиоэлектроники. 2017. Вып. 9. Режим доступа: http://jre.cplire.ru/jre/sep17/11/text.pdf
- [15] Taflove A., Hagness S.C. Computational Electrodynamics. The FDTD Method. ArtechHouse. 3rd edition. 2005. P. 852.
- [16] Старостенко В.В., Мазинов А.С., Фитаев И.Ш., Таран Е.П., Орленсон В.Б. // Прикладная физика. 2019.
 Вып. 4. С. 60–65. [Starostenko V.V., Mazinov A.S., Fitaev I.Sh., Taran E.P., Orlenson V.B.] // Appl. Phys. 2019.
 N 4. P. 60–65.]