01.1;06.4

Моделирование антиотражающих свойств композиционных материалов на основе полупроводниковых нитевидных нанокристаллов

© Л.И. Горай^{1,2}, А.Д. Буравлев^{2,3-5}, С.А. Поняев^{5,6}

¹ Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург

² Академический университет, Санкт-Петербург

³ Санкт-Петербургский государственный университет

⁴ Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

⁵ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург

⁶ Военно-космическая академия им. А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург E-mail: lig@pcgrate.com

Поступило в Редакцию 4 февраля 2015 г.

С помощью теории эффективной среды (ТЭС) впервые продемонстрирована возможность применения пленок композиционных материалов на основе полупроводниковых нитевидных нанокристаллов (ННК) для уменьшения отражения электромагнитного излучения радиоволнового диапазона. Показано, что коэффициенты отражения однослойной модели могу быть уменьшены в несколько раз, а двухслойной — до двух порядков в широком диапазоне параметров. Совпадение данных ТЭС с результатами расчетов, полученных строгим методом, позволяет применять ТЭС 0-го порядка для анализа и синтеза антиотражающих композиционных материалов на основе ННК.

Слоистые периодические и апериодические среды, состоящие из пленок полупроводников, ферромагнетиков и диэлектриков, рассматриваются в настоящее время как новый тип искусственных материалов с определенными физическими свойствами. Материальными параметрами таких сред можно эффективно управлять, например, с помощью искусственного внедрения в материал пленки наночастиц или наноструктур, изменяющих необходимым образом характеристики среды, т.е. путем создания композиционных материалов. Разработка новых композиционных антиотражающих и поглощающих покрытий (КАП) представляет значительный интерес, благодаря как постоянному

16



Рис. 1. Изображение массива ННК GaAs, синтезированных с помощью МПЭ на подложке GaAs(111)В и помещенных в матрицу на основе полиметилметакрилата, полученное с помощью растрового электронного микроскопа Supra 25 (масштабная метка соответствует $1 \mu m$).

совершенствованию радиолокационных систем и систем распознавания различных объектов, так и их применению в микроэлектронике, акустооптике, голографии, рефлектометрии и других областях науки. Создание современных антиотражающих покрытий длинноволнового диапазона с заданными характеристиками, в частности с малым коэффициентом отражения, возможно только с применением того или иного рода композиционного материала. Несмотря на большое количество работ, посвященных данной тематике, возможность применения пленок на основе полупроводниковых нитевидных нанокристаллов (ННК) для уменьшения отражения радиоволнового излучения не была исследована.

Хорошо известно, что синтез полупроводниковых ННК может быть осуществлен с помощью различных методик. Наиболее часто с этой целью используют методы газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений [1] и молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) [2,3]. Следует отметить, что существующие технологические методы позволяют контролировать не только геометрические размеры (длину, диаметр) и состав ННК, но и плотность, и при определенной предварительной обработке поверхности образцов расположение одиночных ННК. Кроме этого, было показано, что ННК могут обладать ферромагнитными свойствами [2,3], а также слабыми поляризационными и угловыми

зависимостями [4]. При этом они могут быть помещены достаточно простыми способами в эластичные матрицы на основе различных полимерных материалов (рис. 1). Это создает дополнительные возможности для оптимизации их электромагнитных характеристик и открывает широкие перспективы для создания материалов с заранее предопределенными физическими свойствами (в первую очередь значениями показателей преломления). Использование многослойных покрытий из пленок одинаковых или различных материалов достаточной толщины на основе ННК позволяет в принципе продвинуться в наиболее важные длинноволновые (сантиметровый и дециметровый) диапазоны. К тому же КАП на основе ННК могут потенциально обладать высокой механической прочностью [5].

Исследование особенностей распространения электромагнитных волн через слоистые композиционные структуры является достаточно сложной теоретической задачей. Современные математические и расчетные модели рассеяния электромагнитных волн базируются на решении граничных задач дифракции на поверхностях сложной формы, содержащих КАП. Оценка отражательных свойств поверхностей, как правило, начинается с математического моделирования рассеяния электромагнитного излучения на КАП [6,7]. Такой подход дает возможность получить верхние оценки потенциально достижимого результата уменьшения интенсивности рассеяния излучения на объектах и оптимизировать процессы отражения, поглощения и прохождения. Исследование электромагнитных характеристик КАП проводится на основе моделирования коэффициента отражения в зависимости от длины волны, толщины слоев и эффективных показателей преломления в широком диапазоне углов падения.

В данной работе мы рассмотрим антиотражательные свойства однослойных и двуслойных КАП на основе ННК с выбранными материальными характеристиками слоев. Мы исследуем угловые зависимости коэффициента отражения η КАП различной толщины при падении из воздуха излучения с длиной волны λ миллиметрового или сантиметрового диапазонов. Вопросу синтеза композиционных материалов на основе ННК и измерений их физических характеристик будет посвящена отдельная публикация. Для простоты проведения расчетов мы использовали в основном теорию эффективной среды (ТЭС) 0-го порядка [4] в сочетании с электромагнитной теорией рассеяния в тонких пленках. Полученные с помощью ТЭС результаты сравнивались

с данными расчетов на основе строгого метода граничных интегральных уравнений [8].

В нашей модели предполагается, что исследуемый материал состоит из одного или нескольких слоев КАП, содержащего периодические (имеющие дальний порядок) или квазипериодические (имеющие ближний порядок, например, при самоорганизованном росте) полупроводниковые ННК с пространством между ними, заполненным материалом матрицы. Эффективный показатель преломления подобного материала может быть оценен из ТЭС 0-го или 2-го порядка, используемой для подобных изотропных бипериодических структур [4]. Если длина волны падающего излучения много больше среднего расстояния между ННК d и $\lambda \gg h$, где h — толщины слоя, то волна не чувствует структуры рельефа, а интенсивность отражения (существует только 0-й отраженный порядок) определяется эффективным показателем преломления, который различен для различных поляризаций. Тогда бипериодическая (2D) решеточная (или квазирешеточная) структура может быть заменена в общем случае многослойной структурой с плоскими границами (многослойным зеркалом), коэффициенты отражения которой могут быть рассчитаны быстро и с любой степенью точности, с использованием, например, подхода S-matrix [8]. Рекуррентные формулы для вычисления эффективного показателя преломления $n_{2D}^{(0)}$ среды, заполненной 2D-решеткой ННК, в 0-м порядке ТЭС выглядят следующим образом [4]:

$$n_{2\mathrm{D}}^{(0)} = \left[n' + 2\tilde{n}_{2\mathrm{D}}^{(0)} + 2n''_{2\mathrm{D}}^{(0)}\right] / 5, \quad n' = (1 - f^2)n_1 + f^2n_2,$$

$$\tilde{n}_{2\mathrm{D}}^{(0)} = \left[(1 - f)\varepsilon_1 + f\varepsilon_p^{(0)}\right]^{0.5}, \quad n''_{2\mathrm{D}}^{(0)} = \left[(1 - f)/\varepsilon_1 + f/\varepsilon_s^{(0)}\right]^{-0.5},$$

$$\varepsilon_s^{(0)} = (1 - f)\varepsilon_1 + f\varepsilon_2, \quad 1/\varepsilon_p^{(0)} = (1 - f)/\varepsilon_1 + f/\varepsilon_2, \quad (1)$$

где f — фактор заполнения, ε_1 и n_1 — диэлектрическая проницаемость и показатель преломления среды матрицы ($\varepsilon = n^2$), ε_2 и n_2 — диэлектрическая проницаемость и показатель преломления ННК, ε_s (TE) и ε_p (TM) — параллельная и перпендикулярная поляризационные составляющие диэлектрической проницаемости.

Во всех проведенных расчетах предполагалось, что пленочное покрытие нанесено на идеально отражающую поверхность. Данное предположение не является существенным для определения η в рассматриваемом диапазоне длин волн и может при необходимости быть



Рис. 2. Коэффициент отражения однослойного КАП с толщиной слоя h в зависимости от угла падения θ для различных длин волн λ .

уточнено с учетом конечной проводимости применяемого материала подложки. С целью проверки применимости ТЭС 0-го порядка для случая самой короткой λ и самых больших d (для простоты одинакового в двух перпендикулярных направлениях) и h, сравнимых с λ , полученные результаты сравнивались с данными расчетов на основе строгого метода граничных интегральных уравнений [8]. В расчетах предполагалось, что ННК имеют цилиндрическую форму с одинаковой высотой h и фактором заполнения f, а значения поперечного сечения (перпендикулярного направлению роста) могут быть различными.

Подробные исследования η КАП проводились в неполяризованном излучении для 3 модельных длин волн: $\lambda = 3 \text{ mm}$ (100 GHz), $\lambda = 7.49 \text{ mm}$ (40 GHz) и $\lambda = 30 \text{ mm}$ (10 GHz) в широком диапазоне углов падения $\theta = 0 - 60^{\circ}$ с шагом 0.1° . Для вычислительных примеров были взяты типовые эффективные показатели преломления материалов слоев в рассматриваемом диапазоне длин волн: для однослойного мате-



Рис. 3. Коэффициент отражения двуслойного КАП с толщиной каждого слоя h в зависимости от угла падения θ для различных длин волн λ : $a - \lambda = 3 \text{ mm}$ (линии — ТЭС, символы — строгая теория); $b - \lambda = 7.49 \text{ mm}$ и $\lambda = 30 \text{ mm}$.

риала КАП использовался $n_{2D}^{(0)} = (4, 1.5)$; для верхнего слоя двуслойного материала КАП — $n_{2D}^{(1)} = (1.05, 0.25)$ [9]. Толщины слоев в двуслойной модели выбирались одинаковыми, а их значения брались h = 1 mm, h = 2 mm и h = 7.5 mm. Первый эффективный показатель преломления может быть легко получен, например, с использованием ферромагнитных ННК в полимерной матрице, второй — с использованием немагнитных ННК в воздушной матрице.

На рис. 2 и 3 представлены результаты расчетов коэффициента отражения однослойных и двуслойных КАП с эффективными показателями преломления для различных длин волн и углов падения детектирующего излучения, проведенные с помощью программы PCGrateTM–SX v.6.6 [10]. На основании анализа полученных данных можно сделать следующие выводы:

1. Применение однослойного КАП на основе ННК позволяет во всем исследуемом диапазоне изменения θ и для всех выбранных λ в 1.5–2.5 раза снизить η (рис. 2).

2. Применение двуслойного КАП на основе ННК обеспечивает на порядки большее по сравнению с аналогичным однослойным покрытием снижение η (рис. 3).

3. Применение двуслойного КАП на частоте 100 GHz приводит к снижению η материала в среднем на 2 порядка в широком диапазоне углов падения (рис. 3, *a*).

4. Применение двуслойного КАП на частоте 40 GHz приводит к снижению η от нескольких раз до более одного порядка (рис. 3, *b*).

5. Применение двуслойного КАП на частоте 10 GHz приводит к снижению η от нескольких раз до более одного порядка — при использовании слоев с h = 7.5 mm (рис. 3, *b*).

Для двуслойного КАП с h = 7.5 mm и $\lambda = 3$ mm полученные с помощью ТЭС 0-го порядка результаты сравнивались с данными строгих расчетов в предположении круглой, квадратной или гексагональной формы поперечного сечения цилиндрических ННК, помещенных в матрицу нижнего слоя. Показатель преломления ННК был получен из (1) в предположении f = 0.1 и $\varepsilon_1 = 2.25$. Результаты строгих расчетов для различных форм сечения ННК совпадают с результатами расчетов ТЭС с графической точностью (рис. 3, *a*). Практическое совпадение результатов строгих расчетов и приближенных данных для наименьших λ/d и λ/h позволяет использовать ТЭС для нахождения η КАП во

всем рассматриваемом диапазоне параметров и значительно упростить исследования.

Использование внедренных в подходящую матрицу полупроводниковых ННК, в том числе ферромагнитных, в качестве антиотражающего материала радиоволнового диапазона выглядит с точки зрения результатов моделирования многообещающим. Как следует из полученных данных, η может быть уменьшен от нескольких раз до двух порядков величины для заданных частот излучения и в широком диапазоне углов падения. Полученные результаты соответствуют известному выводу теории рассеяния в тонких пленках, состоящему в том, что для достижения определенного антиотражающего эффекта на заданной длине волны могут быть использованы различные комбинации значений показателей преломления (диэлектрической и магнитной проницаемостей) и толщин слоев. Использование для расчетов ТЭС 0-го порядка дает высокоточные результаты во всем диапазоне исследуемых параметров, что подтверждается сравнением с результатами, полученными на основе строгой теории. Применение двуслойного КАП в сантиметровом и дециметровом диапазонах приводит к снижению η на порядки при достаточно больших толщинах слоев. Требуемая толщина может быть достигнута, например, использованием КАП, состоящего из более тонких одинаковых слоев на основе ННК.

Авторы выражают благодарность И.П. Сошникову за предоставленные данные.

Массив ННК GaAs (рис. 1) был синтезирован при финансовой поддержке РНФ (грант 14-12-00393). Работа была выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (гранты 14-02-00391 и 14-02-00154) и президиума РАН (грант 1.1.8.7).

Список литературы

- [1] Bouravleuv A.D., Sibirev N.V., Statkute G., Cirlin G.E., Lipsanen H., Dubrovskii V.G. // J. Crystal Growth. 2010. V. 312. P. 1676–1682.
- [2] Bouravleuv A.D., Mitani S., Rubinger R.M., do Carmo M.C., Sobolev N.A., Ishibashi T., Koukitu A., Takanashi K., Sato K. // Physica. E. 2008. V. 40. P. 2037–2039.
- [3] Bouravleuv A., Cirlin G., Sapega V., Werner P., Savin A., Lipsanen H. // J. Appl. Phys. 2013. V. 113. N 14. P. 144 303.

- [4] Goray L.I. // SPIE Proc. 2011. V. 8083. P. 8083-20.
- [5] Буравлев А.Д., Сибирев Н.В., Безнасюк Д.В., Lebedeva N., Novikov S., Lipsanen H., Цырлин Г.Э. // ФТТ. 2013. Т. 55. В. 11. С. 2118–2122.
- [6] Лерер А.М., Цветянский Е.А. // Письма в ЖТФ. 2012. Т. 38. В. 21. С. 77–86.
- [7] Булгаков А.А., Кононенко В.К. // ЖТФ. 2005. Т. 73. В. 11. С. 15–21.
- [8] Goray L.I., Schmidt G. // Gratings: Theory and Numerical Applications / Ed. E. Popov. Presses universitaires de Provence. 2nd rev. ed. 2014. Ch. 12. P. 1–86.
- [9] Масалов С.А., Рыжак А.В., Сухаревский О.И., Шкиль В.М. // Физические основы диапазонных технологий типа "Стелс". СПб.: ВИКУ им. А.Ф. Можайского, 1999. 163 с.
- [10] Интернет-ресурс: http://www.pcgrate.com.