

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

УДК 537.86

На правах рукописи

Глазунов Павел Сергеевич

**РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ
ВОЛН В ПЛОСКОСЛОИСТЫХ СРЕДАХ С
НЕОДНОРОДНЫМИ
МЕТАЛЛИЧЕСКИМИ ПЛЁНКАМИ**

Специальность:

1.3.4. Радиоп физика

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научные руководители:

доктор физико-математических наук, доцент

Слепков Александр Иванович,

доктор физико-математических наук, профессор

Салецкий Александр Михайлович

Москва – 2024

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ	6
Глава 1	
Особенности тонких металлических пленок и их применения в различных технических областях	14
1.1 Особенности тонких металлических пленок	14
1.2 Области применения тонких металлических пленок.....	19
1.3 Прозрачные электроды на основе тонких пленок (пленки толщиной $h < h_{pk}$).....	19
1.4 Поглотители электромагнитного излучения на основе тонких пленок (пленки толщиной $h \sim h_{pk}$).....	21
1.5 Оптимизация соединительных контактов в интегральных схемах (пленки толщиной $h > h_{pk}$)	24
1.6 Модели проводимости тонких металлических пленок, локальная и средняя проводимость	28
1.7 Итоги главы 1.....	41
Глава 2	
Применение метода последовательных приближений Пикара для решения задачи о распространении электромагнитной волны в неоднородной плоскостойкой среде	42
2.1 Постановка задачи о нахождении матрицы рассеяния неоднородной плоскостойкой структуры и ее решение	42
2.2 Вывод приближенной формулы для матрицы рассеяния с учетом погрешностей при помощи метода Пикара	52
2.3 Вид матрицы рассеяния в произвольной системе отсчета	58
2.4 Матрица рассеяния в нулевом приближении, импеданс металлической пленки...	60
2.5 Итоги главы 2.....	64
Глава 3	
Многослойные структуры, содержащие металлические пленки	65
3.1 Общий подход к описанию распространения электромагнитных волн в многослойных структурах, содержащих металлические пленки.....	65

3.2 Преимущества предлагаемого подхода: разбиение задач проектирования оптических приборов на два независимых блока, возможность описания двуслойных пленок при помощи одной матрицы рассеяния.....	71
3.3 Отдельно-отстоящая ультратонкая пленка	75
3.4 Диэлектрическая подложка с пленками, напыленными на нее с двух сторон.....	81
3.5 Эффект антибликовости ультратонких металлических пленок.....	87
3.6 Бесконтактный способ измерения проводимости тонких пленок.....	89
3.7 Сверхширокополосный 50%-ый поглотитель на основе тонких пленок.....	90
3.8 Узкополосный 100%-ый поглотитель.....	92
3.9 Обобщение для случая распространения электромагнитных волн в прямоугольном волноводе.....	93
3.10 Итоги главы 3.....	94

Глава 4

Эксперименты по измерению оптических коэффициентов тонких металлических пленок.....	96
4.1 Экспериментальная установка и методы измерения.....	96
4.2 Апробация предлагаемого в главах 2-3 теоретического подхода.....	101
4.3 Экспериментальные результаты.....	103
4.4 Итоги главы 4.....	110

Глава 5

Нелинейные эффекты в плоскостойких слабопроводящих материальных средах с температурной зависимостью диэлектрической проницаемости.....	112
5.1 Вывод уравнений, описывающих нелинейное распространение видеоимпульса...	114
5.2 Применение метода Хохлова для упрощения уравнений.....	119
5.3 Нелинейный эффект роста пиковой мощности импульса.....	121
5.4 Аналитическое решение в приближении постоянной фазовой скорости.....	126
5.5 Нелинейный процесс формирования ударной электромагнитной ударной волны в приближении $\theta_0 \gg 1$, решение методом характеристик.....	127
5.6 Метод конечных разностей, основанный на схеме Годунова.....	130
5.7 Результаты моделирования, полученные в приближении $\theta_0 \gg 1$	133
5.8 Результаты моделирования, полученные при $\theta_0 < 1$	138
5.9 Итоги главы 5.....	140

ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	142
Список работ в рецензируемых журналах, опубликованных автором по теме диссертации, удовлетворяющих Положению о присуждении ученых степеней...	143
Тезисы и доклады на конференциях по теме диссертации.....	145
Список литературы	147
Приложение А (справочное)	
Вывод формул для коэффициентов отражения r и прохождения t для однородного слоя металла.....	171
Приложение В (справочное)	
Обзор тонкопленочных структур использующихся в технологии прозрачных электродов в качестве альтернатив оксиду индия-олова.....	173
Приложение С (справочное)	
Основные конструкции плоскостойких поглотителей электромагнитного излучения и сравнение их эффективности.....	183
Приложение D (справочное)	
Модель Томсона проводимости тонких пленок.....	193
Приложение E (справочное)	
Модель Фукса-Зондхаймера проводимости тонких пленок.....	196
Приложение F (справочное)	
Модель Маядеса-Шаткеса-Дженека проводимости тонких металлических пленок....	213
Приложение G (справочное)	
Химический потенциал тонкой металлической пленки.....	231

Приложение Н (справочное)

Некоторые физические эффекты, влияющие на проводимость пленки (перколяционный переход, окисление металла, температурная зависимость проводимости)..... 233

Приложение J (обязательное)

Вывод формул для расчета оптических коэффициентов плоскостойко-неоднородной пластины при помощи различных приближенных методов (метода ВКБ, метода характеристической матрицы, метода усреднения, импедансных граничных условий)..... 239

Приложение К (обязательное)

Доказательства утверждений, использующихся для оценок ошибки приближенного метода Пикара..... 243

Приложение L (справочное)

Обобщение метода последовательных приближений Пикара для случая распространения электромагнитных волн в прямоугольном волноводе..... 248

Приложение M (справочное)

Доказательство ограниченности сеточного решения численной схемы Годунова..... 257

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования

Изучение свойств тонких металлических пленок (в частности, зависимостей их оптических коэффициентов и удельной проводимости от толщины слоя металла), представляет значительный практический интерес. Изготовление нанометровых металлических слоев с заданными электромагнитными свойствами актуально для многих прикладных задач, среди которых можно выделить три основных направления.

Во-первых, достаточно тонкие металлические пленки используются как альтернатива оксиду индия-олова в так называемых прозрачных электродах [1] (см. параграф 1.3, а также приложение В). Такие электроды пропускают значительную часть падающего на их поверхность электромагнитного излучения в оптическом диапазоне длин волн, но вместе с тем обладают проводимостью на постоянном токе. В настоящее время подавляющее большинство прозрачных электродов [2] выполняется на основе оксида индия-олова (ИТО). Данный материал, однако, имеет массу недостатков, таких как дороговизна [3], исчерпаемость и редкость [4], необходимость отжига при достаточно высокой температуре [5], хрупкость и плохая адгезия к гибким подложкам [6]. Поэтому технологи проводят активный поиск материалов, способных заменить ИТО. В списке альтернатив не последнее место занимают многослойные пленочные структуры на основе нанометровых металлических слоев [7-8].

Во-вторых, тонкие проводящие пленки могут использоваться в качестве детектора-поглотителя электромагнитного излучения (см. параграф 1.4, а также приложение С) в болометрах, работающих в терагерцовом [9] и инфракрасном [10] диапазонах длин волн. При оптимальном подборе толщины, отдельно-отстоящая ультратонкая пленка может поглощать до 50% энергии падающей на нее электромагнитной волны. При двухволновом когерентном поглощении возможно сверхширокополосное 100%-ое поглощение, что может быть использовано для создания нового поколения микроволновых кольцевых интерферометров, в конструкции которых пленка выступает в роли абсолютно черного тела [11]. Такие интерферометры, по оценкам [11], смогут измерять неоднородности в спектре реликтового излучения с разрешающей способностью, недостижимой на современных классических интерферометрах.

В-третьих, нанометровые слои металла используются в качестве проводящих дорожек и их соединений в микроэлектронике (см. параграф 1.5). Уменьшение размеров транзисторов сопровождается увеличением цены разработки микросхемы [12]. Цена

ошибки, совершенной при проектировании, также возрастает. Поэтому непосредственно после проектирования необходимо проводить компьютерную симуляцию работы микросхемы [13]. В настоящее время в подобных симуляциях обязательно должно учитываться влияние паразитного эффекта RC-задержки соединительных контактов [13]. Для этого необходимо располагать зависимостью удельного сопротивления металла от толщины его слоя в мега- и гигагерцовом диапазоне длин волн. Наиболее простыми структурами для изучения таких зависимостей являются тонкие пленки, напыленные на кремниевые или кварцевые подложки [14]. Например, удельное сопротивление Cu соединений, изготовленных на основе дамасского процесса, значительно увеличивается из-за размерного эффекта, уже начиная с технологического узла 14 нм [15]. По этой причине возрос интерес к поиску альтернатив меди – металлов, в которых не так сильно проявляются размерные эффекты [14, 16-23].

Можно заключить, что все вышеописанные технические задачи требуют высокой точности расчета коэффициентов прохождения и отражения тонких металлических пленок. Для целей проектирования микросхем необходимо решение обратной задачи – расчет проводимости по измеренным в эксперименте оптическим коэффициентам пленки.

Несмотря на это, в современных работах продолжают использоваться весьма примитивные модели: тонкая пленка либо заменяется однородным проводящим слоем конечной толщины, либо заменяется бесконечно тонким слоем, обладающим поверхностным сопротивлением. Между тем, в нанометровых металлических слоях в полной мере проявляются размерные эффекты. Это приводит к тому, что проводимость металла значительно изменяется вдоль его толщины. Например, из-за рассеяния электронов на поверхностях металла, значение удельной проводимости пленки в ее толще может быть до двух раз больше, чем на поверхностях.

Учет зависимости проводимости от пространственных координат становится необходим как в оптическом и инфракрасном диапазонах (поскольку в таком случае толщина скин-слоя металла может составлять десятки и даже единицы нанометров, что сопоставимо с толщиной пленки), так и в терагерцовом и гигагерцовом диапазонах (для выполнения прецизионных расчетов). В данной диссертационной работе предлагается новый приближенный метод расчета оптических коэффициентов проводящих плоскостойких структур, позволяющий рассчитывать их оптические коэффициенты с априори заданной точностью.

Стоит отметить, что традиционно используемые приближенные подходы, такие как метод Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна (метод ВКБ), уравнения геометрической оптики и

метод характеристической матрицы, плохо применимы для описания тонких металлических пленок, начиная с инфракрасного диапазона длин волн.

Дело в том, что метод характеристической матрицы применим только для тонких (в масштабе длины волны) неоднородных слоев, а метод ВКБ и приближение геометрической оптики, напротив – для материальных сред с достаточно плавной зависимостью волнового числа от пространственных координат. Тонкие металлические пленки находятся на границе применимости этих приближений, поскольку толщина пленки (начиная с инфракрасного диапазона) сравнима с длиной волны в металле и в то же время проводимость пленки значительно изменяется по ее толщине. По этой причине разработка нового приближенного подхода, приспособленного именно для неоднородных металлических слоев, представляется актуальной.

Приближенный подход, предлагаемый в диссертации, основан на методе последовательных приближений Пикара. Данный метод обладает тем преимуществом, что он позволяет найти погрешности N -ой итерации, причем с ростом номера итерации погрешности расчета равномерно стремятся к нулю. Поэтому при помощи данного метода возможно проводить расчет оптических коэффициентов для произвольных плоскостойких структур с априори задаваемой точностью.

Цель диссертационной работы

Цель диссертационной работы – разработка нового подхода к расчету оптических коэффициентов неоднородных плоскостойких сред, высокоэффективного для случая тонких металлических пленок.

Задачи диссертационной работы

1. Разработать итеративный способ расчета матрицы рассеяния для описания произвольных неоднородных плоскостойких сред.
2. Создать методику оценки погрешностей оптических коэффициентов N -й итерации предлагаемого приближенного подхода для отдельно отстоящих пленок, а также для многослойных тонкопленочных структур.
3. Предложить метод измерения проводимости тонкой пленки по оптическим коэффициентам системы «диэлектрическая подложка с напыленной пленкой».
4. Изучить нелинейные эффекты, применимые на практике, которые возникают в оптических системах, содержащих структуры на основе тонких металлических пленок..

Объект и предмет исследования

Объектом исследования являются специфические оптические свойства нанометровых слоев металла, появляющиеся вследствие размерных эффектов проводимости. В качестве предмета исследования были выбраны ультратонкие металлические пленки меди и платины, напыленные на кварцевые подложки методами термического испарения и магнетронного распыления.

Методология исследования

Предлагаемый способ расчета матрицы рассеяния основан на широко известном в математике методе Пикара.

При изучении нелинейных эффектов был использован метод Хохлова, который является одним из общепризнанных подходов, использующихся при изучении нелинейных волновых процессов. Численная схема, используемая для получения решения системы уравнений, описывающих распространение видеоимпульса в нелинейной среде, была основана на дивергентном подходе и принципе наименьшего значения производной Годунова.

Научная новизна работы

1. Впервые предложен итеративный метод расчета матрицы рассеяния плоскостойких сред, который позволяет находить погрешности расчета оптических коэффициентов для N -ой итерации как для отдельно отстоящих пленок, так и для тонкопленочных многослойных структур.
2. Предложен новый бесконтактный метод измерения проводимости тонкой металлической пленки, напыленной на диэлектрическую подложку.
3. Выявлен эффект антибликовости тонких металлических пленок.
4. Предложена конструкция 50%-ого сверхширокополосного поглотителя на основе диэлектрической подложки с двумя напыленными пленками.
5. Открыт новый нелинейный эффект – рост пиковой мощности электромагнитного видеоимпульса при его распространении в слабопоглощающих средах с температурной зависимостью диэлектрической проницаемости.

Теоретическая и практическая значимость работы

Теоретическая значимость состоит в разработке приближенного итерационного метода решения задачи о распространении волн в неоднородных средах для случаев, в которых не применимы традиционно используемые приближенные подходы.

Немаловажно, что предлагаемый подход позволяет оценивать погрешности расчета оптических коэффициентов для N -ой итерации.

Практическая значимость заключается в том, что был предложен новый метод бесконтактного измерения проводимости тонких металлических пленок, напыленных на диэлектрическую подложку. Благодаря бесконтактности ликвидируются сторонние факторы, способные исказить результаты измерений. Например, для измерения проводимости методом Ван-дер-Пау необходимо напыление дополнительных контактов на поверхность пленки. Это приводит к нагреву пленки, что может изменить кристаллитную структуру металла.

Впервые была предложена модель распространения электромагнитных видеоимпульсов в слабопроводящих средах с температурной зависимостью диэлектрической проницаемости. Данная модель важна для моделирования нелинейных длинных линий, которые используются как составные части конструкций высоковольтных генераторов наносекундных видеоимпульсов.

Полученные результаты могут представлять практический интерес для научно-исследовательских организаций, занимающихся напылением тонкопленочных структур, в частности МИИТ, МИРЭА, МФТИ, МИЭТ, ИФТТ РАН, ИФП РАН, ИОФАН, ФИАН и др.

Положения, выносимые на защиту

1. Разработанный приближенный метод расчета оптических коэффициентов неоднородных нанометровых металлических пленок высокоэффективен и позволяет оценить погрешности расчета оптических коэффициентов N -ого приближения. В области частот до 100 ГГц нулевое приближение приводит к погрешностям расчета оптических коэффициентов не превышающим 1% для отдельно отстоящей медной пленки толщиной 10 нм.

2. В нулевом приближении матрица рассеяния тонкой пленки не зависит от частоты (без учета общего фазового множителя), а все оптические свойства тонкой пленки определяются одним параметром – импедансом пленки $Z_f = (h\langle\sigma\rangle)^{-1}$, где h – толщина пленки, а $\langle\sigma\rangle$ – средняя (по толщине) удельная проводимость металла пленки.

3. Зависимость коэффициента отражения R от толщины слоя металла h , напыленного на диэлектрическую подложку, имеет минимум, наиболее выраженный в случае, когда электромагнитная волна падает со стороны подложки. Представленные аналитические формулы позволяют по коэффициенту R рассчитать среднюю по толщине проводимость пленки на диэлектрической подложке.

4. При распространении электромагнитного видеоимпульса в слабопроводящих средах с температурной зависимостью диэлектрической проницаемости наблюдается нелинейный рост его пиковой мощности. Результаты моделирования предсказывают, что максимально возможное увеличение пиковой мощности составляет 240%. Для микроволновой керамики на основе SrTiO_3 для наблюдения данного нелинейного эффекта необходима пиковая мощность начального импульса 0.48 ТВт.

Степень достоверности результатов

Полученные теоретические результаты могут быть легко верифицированы, поскольку в диссертации приведены подробные выводы формул. Корректность итерационного подхода, предлагаемого в диссертации, проверена при помощи сопоставления аналитических формул и результатов численного решения волнового уравнения. Показано, что с ростом числа итераций аналитическое решение сходится к численному.

При решении нелинейной задачи были использованы хорошо зарекомендовавшие себя методы, которые используются при моделировании ударных волн. Численное решение, полученное при помощи метода конечных разностей, было проверено при помощи решения, полученного методом характеристик, в области параметров задачи, где метод характеристик был применим.

Апробация результатов

Предлагаемый бесконтактный метод расчета проводимости тонких пленок был применен в лаборатории №201 Института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН для измерения проводимости нанометровых пленок меди и платины на частотах 8.5-12.5 ГГц в волноводе. В проведенных экспериментах был обнаружен предсказанный теорией эффект антибликовости – наличие минимума в зависимости коэффициента отражения от толщины пленки, напыленной на диэлектрическую подложку. Работа выполнялась при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 18-29-02094 и № 20-07-00903).

Результаты диссертации были представлены на международных и всероссийских конференциях: «Волны-2019», «Ломоносов-2019», «Волны-2020», «Ломоносов-2020». Также результаты диссертации докладывались и обсуждались на научных семинарах, проводимых в Институте радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН.

Публикации

Основные результаты диссертации опубликованы в 13 печатных работах, в том числе в 7 статьях в рецензируемых научных журналах, удовлетворяющих «Положению о присуждении учёных степеней в МГУ имени М.В. Ломоносова» и 6 публикациях в сборниках тезисов конференций. Список работ автора приведен в конце диссертации перед списком литературы.

Личный вклад автора

Теоретические результаты, приведенные в диссертации, получены лично автором. Экспериментальные результаты и их обработка получены совместно с соавторами работ, опубликованных по теме диссертации. Вклад автора в диссертационную работу является определяющим.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы. Общий объем работы составляет 259 страниц, включая 43 рисунка, 3 таблицы, 289 библиографических ссылок и 12 приложений.

Краткое содержание диссертации

Первая глава диссертации обзорная. В начале главы рассматриваются характерные особенности нанометровых металлических пленок, которые не свойственны макроскопически большим слоям высокопроводящих материальных сред. Далее проводится обзор технических приложений, в которых используются данные особенности (технология прозрачных электродов, поглотители электромагнитного излучения, соединительные контакты в интегральных микросхемах). Обосновывается актуальность исследования темы диссертации. В конце главы проводится обзор теорий проводимости тонких металлических пленок, наиболее часто использующихся в современных работах. Все следующие главы содержат оригинальные результаты, полученные автором диссертации.

Вторая глава посвящена разработке нового теоретического подхода решения задачи о распространении электромагнитных волн в плоскостойко неоднородных материальных средах. Проводится постановка задачи о нахождении матрицы рассеяния плоскостойко неоднородной среды, которая расположена между двумя однородными диэлектрическими средами. Затем проводится решение данной задачи.

В третьей главе результаты второй главы обобщаются на случай многослойных структур, содержащих диэлектрические слои с напыленными на них металлическими тонкими пленками. Приводятся примеры решения задач для некоторых частных случаев (отдельно отстоящая тонкая пленка, тонкая пленка, напыленная на диэлектрическую подложку).

Четвертая глава посвящена экспериментам по измерению оптических коэффициентов тонких металлических пленок. В начале главы проводится описание экспериментальной установки и методов измерения. Затем показывается, что предлагаемый в третьей главе подход существенно упрощает расчеты оптических коэффициентов исследуемых в эксперименте структур. В конце главы приводятся экспериментальные графики зависимостей проводимости и оптических коэффициентов пленок от их толщины для меди и платины.

Пятая глава посвящена изучению новых нелинейных эффектов, проявляющихся при распространении высокоинтенсивных наносекундных видеоимпульсов в плоскостойких слабопроводящих материальных средах с температурной зависимостью диэлектрической проницаемости. Проводится вывод уравнений, описывающих нелинейное искажение формы профиля видеоимпульса при его распространении. Данные уравнения решаются аналитически (в приближении постоянной фазовой скорости) и численно (при помощи метода характеристик и метода конечных разностей). Приводятся результаты сравнения трех вышеописанных методов.

В разделе «заключение» выделяются основные результаты диссертационной работы.

Глава 1

Особенности ультратонких металлических пленок и их применения в различных технических областях

1.1 Особенности ультратонких металлических пленок

Металлические пленки, толщина которых h много меньше толщины скин-слоя металла пленки δ , называются ультратонкими [11]. В зависимости от типа металла h составляет от десятков до единиц нанометров. Только при достижении таких малых толщин слой металла приобретает ряд уникальных особенностей, несвойственных высокопроводящим материальным средам. Для рассмотрения этих особенностей удобно сначала обсудить характерные свойства металлов в целом.

Главная отличительная особенность металлов – высокая концентрация свободных электронов. По порядку величины она сравнима с концентрацией атомов и составляет 10^{28} м^{-3} . Благодаря этому металлы обладают огромным значением удельной проводимости σ . Под σ в данной диссертации понимается коэффициент пропорциональности (с размерностью $\text{См/м} \equiv \text{Ом}^{-1}\text{м}^{-1}$) между вектором плотности тока свободных электронов \mathbf{j} и вектором напряженности электрического поля \mathbf{E} в материальной среде:

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}. \quad (1.1)$$

Современные модели электронного транспорта предсказывают (см. параграф 1.6), что закон Ома (1.1) с высокой степенью точности применим для тонких металлических пленок. Однако в случае наноразмерных слоев из-за размерных эффектов σ в выражении (1.1) является локальной величиной, то есть зависит от пространственных координат и от толщины пленки h : $\sigma_{\text{film}} = \sigma_{\text{film}}(x, y, z, h)$ (см. параграф 1.6). В данном разделе для простоты изложения мы будем считать, что σ_{film} является постоянной величиной, равной табличному значению проводимости металла, из которого сделана пленка σ_{bulk} . (В англоязычной научной литературе используется термин «bulk conductivity», который сложно перевести на русский язык. Этот термин используется для обозначения проводимости макроскопически большого слоя металла, для которого можно пренебречь размерными эффектами.)

Большое значение удельной проводимости металлов определяет их основные оптические свойства, которые кратко можно охарактеризовать как свойства почти идеального зеркала [11]:

1. Вплоть до видимого диапазона длин волн коэффициент отражения электромагнитных волн по интенсивности R от металлической поверхности близок к единице, а коэффициент поглощения $Q = 1 - R$ – чрезвычайно мал.

2. Так как $R \approx 1$, то амплитуда отраженной от металлической поверхности электромагнитной волны оказывается почти равной амплитуде падающей волны. Поскольку при отражении фаза волны претерпевает скачок равный π , на границе металла электрическое поле оказывается практически равно нулю. Можно считать, что суперпозиция падающей и отраженной волн образует стоячую волну с узлом на поверхности металла.

3. Проводимость металла является конечной величиной. Поэтому электромагнитное поле проникает вглубь металла на некоторое расстояние, которое обычно оценивают толщиной скин-слоя δ (расстояние, на котором амплитуда электромагнитного поля уменьшается в $e \approx 2.72$ раз). Вплоть до видимого диапазона длин волн δ на несколько порядков меньше, чем длина электромагнитной волны в вакууме λ_0 .

Все эти особенности были описаны еще в 1900-ых годах в работах Рубенса и Хагена [24]. Классическая теория движения электронов в металлах Друде была разработана в это же время [25], а зонная теория металлов была разработана тридцатью годами позднее Зоммерфельдом [26-27].

В современных электронных устройствах используются тонкие слои металла, характерные толщины которых h оказываются сравнимы с δ или даже меньше δ . При этом имеется тенденция к дальнейшему уменьшению толщин металлических структур, поскольку, во-первых, это позволяет уменьшить размеры электронных устройств, а во вторых, снизить себестоимость их производства. Возникает естественный вопрос, при каких толщинах h слой металла теряет свойства почти идеального зеркала. Впервые данная проблема была детально рассмотрена только в 1964 году Капланом [28]. Вероятно, это связано с тем, что именно с 60-х годов прошлого века началось быстрое развитие микроэлектроники из-за массового внедрения технологии CVD (chemical vapor deposition) [29].

В работах Каплана [11, 28] для оценки характерных толщин, при которых слой металла теряет зеркальные свойства, вводится толщина h_{pk} . Толщина h_{pk} соответствует тому, что коэффициент прохождения T (по интенсивности электромагнитного поля) отдельно отстоящей металлической пленки равен ее коэффициенту отражения R . На первый взгляд, из общих соображений следует, что $T = R$, когда $h \sim \delta$. Однако точные расчеты показывают, что это предположение ошибочно: $T=R$ только при достижении крайне малых толщин $h \sim \delta/100$.

Выполним расчеты по точным формулам, считая, что σ_{film} является постоянной величиной равной σ_{bulk} (для краткости далее в данном разделе для обозначения удельной проводимости мы будем использовать просто символ « σ » без индексов «bulk» или «film»). Строгий вывод формул для коэффициентов отражения r и прохождения t (по амплитуде электромагнитного поля) для отдельно отстоящего слоя металла в случае нормального падения приведен в приложении А. Здесь же мы используем более быстрый способ получения формул для r и t . Для этого рассмотрим классические формулы Френеля для слоя диэлектрика, находящегося в вакууме (см. параграф 1.6.4 в учебнике [30])

$$t = \frac{4n}{e^{-jnk_0h}(1+n)^2 - e^{jnk_0h}(n-1)^2}, \quad r = \frac{(1-n^2)(e^{-jnk_0h} - e^{jnk_0h})}{e^{-jnk_0h}(1+n)^2 - e^{jnk_0h}(n-1)^2} \quad (1.2)$$

и заменим показатель преломления диэлектрика n на показатель преломления металла $n_m = k_m/k_0$. Здесь $k_0 = \omega(\epsilon_0\mu_0)^{1/2}$, $k_m = (1+j)(\omega\mu_0\sigma/2)^{1/2}$ – соответственно волновое число вакуума и металла (см. параграф 19 в [31]), μ_0 и ϵ_0 – магнитная и электрическая постоянные, j – мнимая единица. Тогда

$$n_m = k_m/k_0 = (1+j)\sqrt{\sigma/(2\epsilon_0\omega)}. \quad (1.3)$$

Используя формулы (1.2)-(1.3), построим зависимости коэффициентов $R=|r|^2$ и $T=|t|^2$ от толщины слоя металла h для частоты 10 ГГц. Пусть проводимость $\sigma = 10$ МСм/м (табличное значение проводимости платины). Тогда расчет толщины скин-слоя $\delta = 1/\text{Im}(k_m) = (\omega\mu_0\sigma/2)^{-1/2}$ дает значение 1600 нм (символом Im обозначается операция взятия мнимой части).

На рис. 1.1 изображены зависимости коэффициентов R и T от толщины слоя металла h для интервала толщин 20...1600 нм. Как видно из графиков, коэффициент отражения даже при толщине 20 нм (что составляет 1/80-ю толщины скин-слоя) равен 0.95. Коэффициент прохождения при 20 нм равен 6.7×10^{-4} , а коэффициент поглощения $Q = 1 - T - R = 0.05$. Те же зависимости, но в диапазоне толщин 0...20 нм изображены на рис. 1.2. Из увеличительной вставки, приведенной на рис. 1.2 видно, что $R = T$ при $h = h_{pk} \approx 0.53$ нм, что составляет примерно 1/3000-ю толщины скин-слоя. При учете размерного эффекта (т.е. при учете того, что $\sigma = \sigma_{\text{film}}(x, y, z, h)$) оказывается, что $h_{pk} \sim 2...10$ нм [11], что соответствует $h_{pk} \sim 0.01\delta...0.005\delta$.

В статье [28] впервые было замечено, что независимо от типа металла и частоты электромагнитного излучения $R = T = 0.25$ и $Q = 0.5$ при $h = h_{pk}$. При этом значение h_{pk} зависит от типа металла и способа его напыления, но не зависит от частоты электромагнитного излучения в широком диапазоне длин волн (вплоть до видимого диапазона). Данное свойство легко можно доказать из формул (1.2)-(1.3). Действительно,

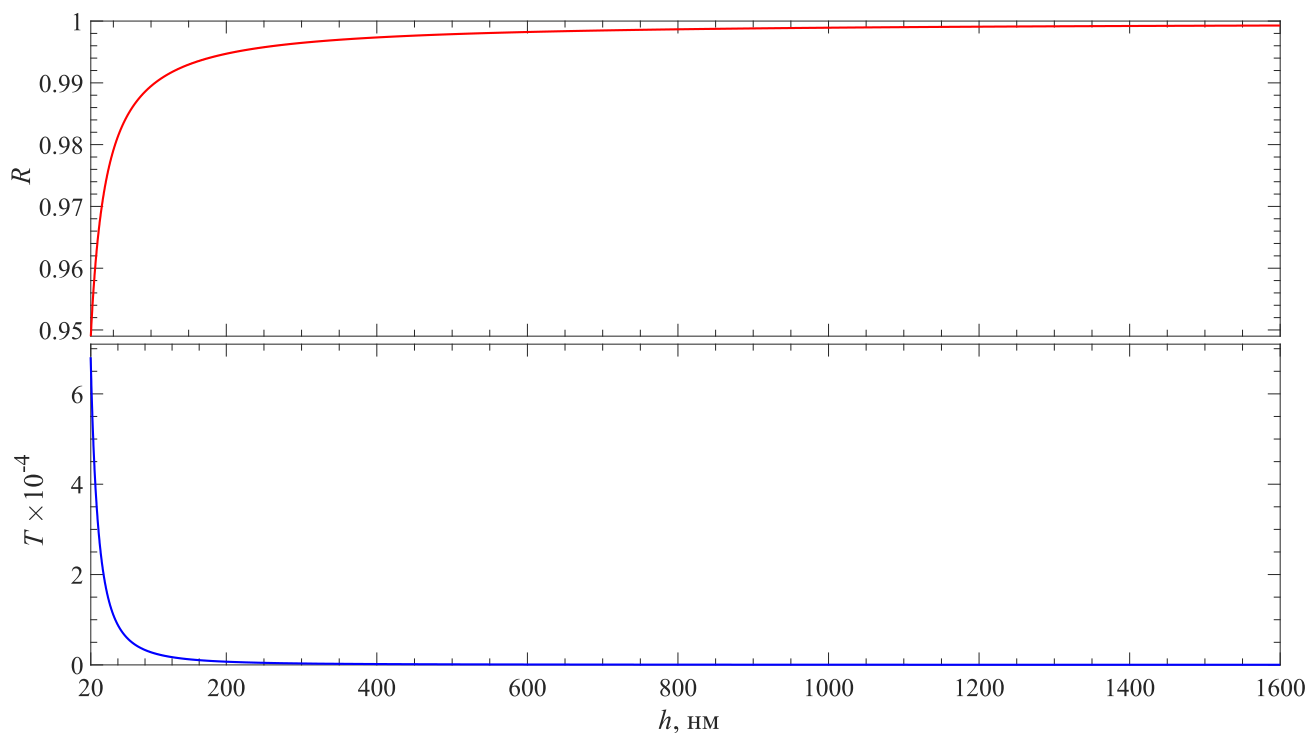


Рис. 1.1 Зависимость оптических коэффициентов R и T (по мощности электромагнитного излучения) от толщины h слоя платины для интервала толщин 20-1600 нм в предположении $\sigma_{\text{film}} = \sigma_{\text{bulk}} = 10 \text{ МСм/м}$.

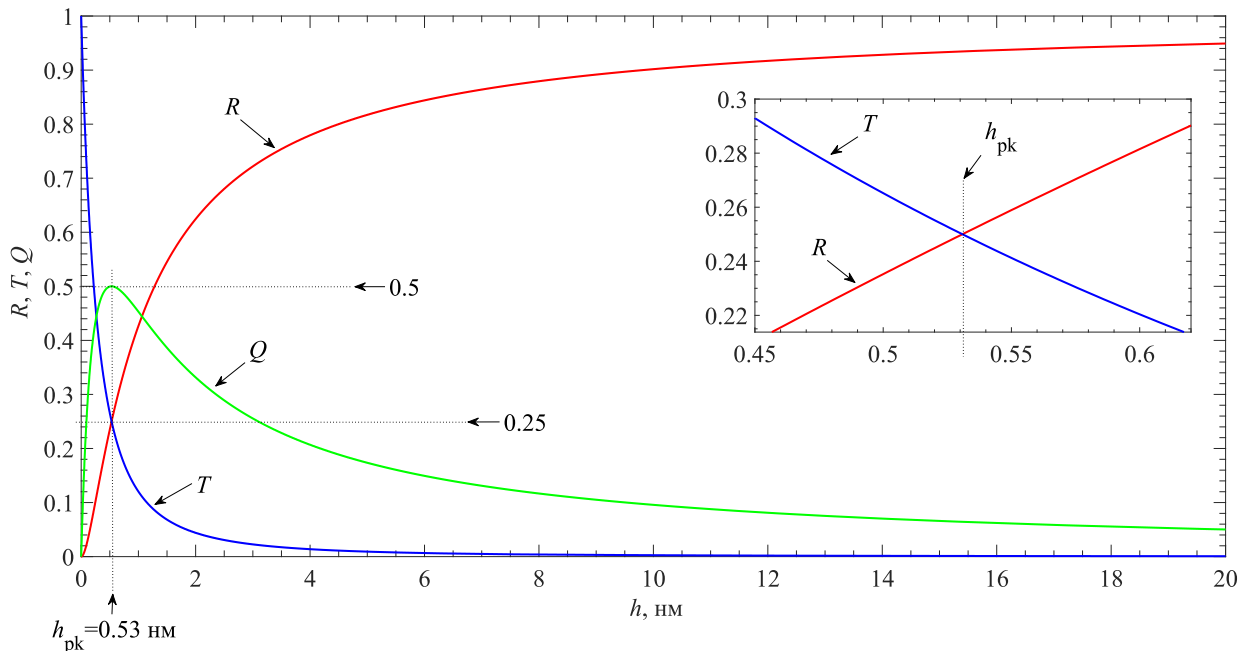


Рис. 1.2 Зависимость оптических коэффициентов R , T и Q (по мощности электромагнитного излучения) от толщины h слоя платины для интервала толщин 0-20 нм в предположении $\sigma_{\text{film}} = \sigma_{\text{bulk}} = 10 \text{ МСм/м}$.

поскольку $h_{pk} \sim 0.01\delta - 0.005\delta$, при $h \sim h_{pk}$ справедлива оценка $k_0 n_m h \sim \text{Im}(k_m) h_{pk} \sim h_{pk} / \delta \sim 0.01 \dots 0.005 \ll 1$. Значит, в формулах (1.2) можно разложить экспоненты в ряд Тейлора: $e^{\pm j n_m k_0 h} \approx 1 \pm j n_m k_0 h$. После этого формулы (1.2) принимают вид

$$t = \frac{1}{1 - 0.5 j k_0 h (1 + n_m^2)}, \quad r = \frac{-0.5 j k_0 h (1 - n_m^2)}{1 - 0.5 j k_0 h (1 + n_m^2)}. \quad (1.4)$$

Из формулы (1.3) следует, что $(n_m)^2 = j\sigma/(\omega\epsilon_0)$, что, по сути, является отношением тока проводимости σE к току смещения $\omega\epsilon_0 E$. Поэтому для металлов $|(n_m)^2| \gg 1$ и можно считать, что $1 \pm n_m^2 \approx \pm n_m^2$. Тогда формулы (1.4) сводятся к виду

$$t = \frac{1}{1 + Z_0 \sigma h / 2}, \quad r = \frac{-Z_0 \sigma h / 2}{1 + Z_0 \sigma h / 2}. \quad (1.5)$$

Здесь $Z_0 = (\mu_0/\epsilon_0)^{1/2}$ – волновое сопротивление вакуума (Z_0 имеет размерность Ом). Из формул (1.5) видно, что оптические коэффициенты при $h \sim h_{pk}$ зависят только от произведения удельной проводимости металла пленки σ на ее толщину h . Данное произведение имеет размерность 1/Ом, поэтому величину $1/(h\sigma)$ можно интерпретировать как некоторый эффективный импеданс пленки Z_f .

Из формул (1.5) также видно, что при $h = 2/(\sigma Z_0)$, оказываются выполненными равенства $T = |t|^2 = R = |r|^2 = 0.25$, $Q = 1 - R - T = 0.5$. Отсюда следует, что $h_{pk} = 2/(\sigma Z_0)$. При $h = h_{pk}$ импеданс пленки оказывается равен половине импеданса вакуума: $Z_f = Z_0/2$.

Таким образом, ультратонкие металлические пленки обладают следующими характерными особенностями:

1. Коэффициент поглощения Q ультратонких металлических пленок значительно превышает коэффициент поглощения толстых металлических слоев. Рост коэффициента поглощения начинается только при достижении крайне малых толщин пленок, составляющих сотые доли толщины скин-слоя металла.

2. Когда толщина пленки h достигает значения h_{pk} , коэффициент Q принимает максимальное значение (индекс у h_{pk} это сокращение слова «peak», то есть пик поглощения). Причем в данном максимуме $Q = 1/2$, а $R = T = 1/4$.

3. При толщине пленки $h \sim h_{pk}$ коэффициенты R , T , Q зависят только от произведения удельной проводимости пленки σ на ее толщину h . Поскольку удельная проводимость металлов вплоть до видимого диапазона длин волн не зависит от частоты электромагнитного излучения, при $h \sim h_{pk}$ коэффициенты R , T , Q также не зависят от частоты.

4. Поскольку $h_{pk} = 2/(\sigma Z_0)$, то и h_{pk} не зависит от частоты, а определяется только σ . Таким образом, максимум коэффициента поглощения при $h = h_{pk}$, в котором $Q = 1/2$, $R = T =$

1/4, наблюдается вне зависимости от типа металла в широком диапазоне длин волн. Фактически, металлическая пленка толщиной h_{pk} поглощает 50% энергии любого падающего на нее по нормали электромагнитного излучения.

1.2 Области применения ультратонких металлических пленок

Нанометровые слои металла находят свое применение во многих областях техники и электроники. Обзорные статьи и книги по данной тематике, как правило, посвящены только какому-то одному из приложений. Поэтому имеет смысл классифицировать области применения. Эту классификацию уместно проводить на основе физических свойств, предъявляемых к металлическим пленкам в тех или иных приложениях. Как было показано в предыдущем параграфе, данные свойства полностью определяются отношением h/h_{pk} . Поэтому мы будем проводить классификацию на основе отношения h/h_{pk} . Качественные зависимости оптических коэффициентов тонких пленок от их толщины h изображены на рис. 1.3.

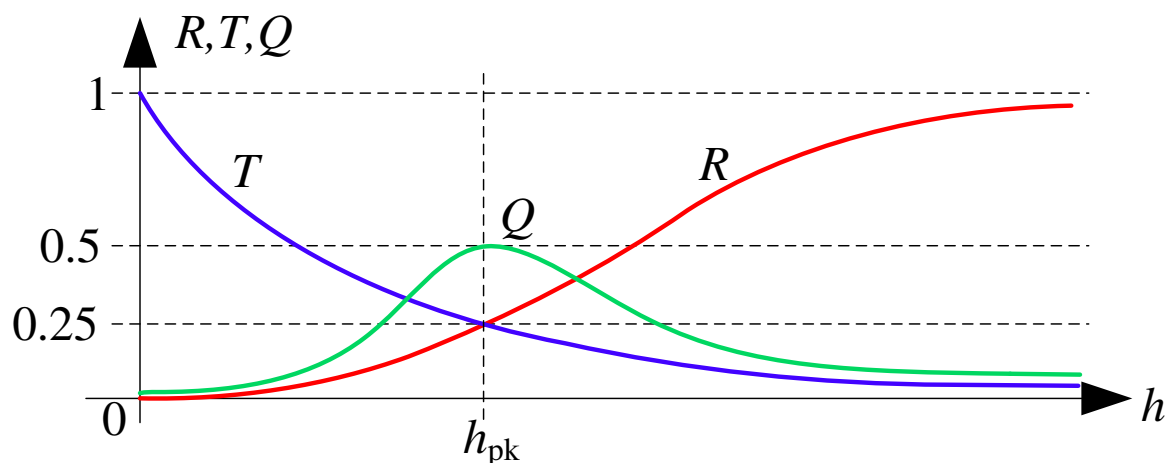


Рис. 1.3 Качественные графики зависимостей оптических коэффициентов отражения R , пропускания T и поглощения Q от толщины металлической пленки h .

1.3 Прозрачные электроды на основе тонких пленок (пленки толщиной $h < h_{pk}$)

Первый тип приложений это приложения, в которых используются проводящие пленки с $h < h_{pk}$. Такие пленки достаточно хорошо пропускают электромагнитное излучение, но в то же время обладают проводимостью. Подобные пленки используются в качестве прозрачных электродов (англ. transparency conducting electrodes) для различных оптоэлектронных устройств [1]: сенсорных экранов, умных окон – стекол с регулируемой

прозрачностью, светодиодов из органических и неорганических компонентов, почти для всех типов солнечных батарей (кремниевых, халькопиритовых, органических и перовскитовых).

В настоящее время подавляющее большинство прозрачных электродов (около 70% по данным обзора [2] на 2019 год) выполняется на основе оксида индия-олова (англ. indium tin oxide или кратко ИТО). Главный недостаток технологии ИТО состоит в том, что индий является достаточно дорогим металлом. Например, в 2021 году цена за 1 кг индия колебалась в районе 250\$ [3]. Для сравнения ниже приведены стоимости 1 кг прочих металлов (за 2021 год), используемых в электронике [3]: алюминий 2 - 3\$, цинк 3 - 4\$, медь 8 - 10\$, серебро 700 - 900\$, золото 55 000 - 60 000\$. Кроме того, индий является достаточно редким металлом, по оценкам [4], его запасы будут исчерпаны в ближайшие 20 лет. Немаловажно и то обстоятельство, что для увеличения коэффициента прохождения в оптическом диапазоне длин волн пленки оксида индия-олова необходимо отжигать при достаточно высокой температуре 250-500°C [5], которую не выдерживает большинство гибких подложек. Например, подложки из полиэтилентерефталата (ПЭТ) начинают деградировать при температурах выше 250°C [32-33]. Для пленок ариленвиниленовых олигомеров деградация начинает происходить при температурах выше 212°C (олигомер L13) и 170°C (олигомер L78) [34]. Также ИТО хрупок и обладает плохой адгезией к гибким подложкам [6]. Поэтому пленки ИТО не годятся для использования в гибких дисплеях.

По вышеописанным причинам технологи ведут активный поиск материалов, способных в будущем заменить оксид индия-олова (см. главу 5 в книге [35], главу 4 в книге [36] и обзорную статью [37]). В частности, работы [7-8] посвящены обзору различных наноматериалов (таких как металлические нанопровода, металлические сетки, углеродные нанотрубки, графен, проводящие полимеры, композитные материалы), которые могут успешно использоваться в качестве гибких прозрачных электродов. В списке материалов альтернативных ИТО не последнее место занимают слоистые тонкопленочные структуры [7-8], которые могут состоять из металлов, их сплавов или оксидов металлов. Чтобы не загромождать изложение основного материала диссертации, обзор, посвященный этим тонкопленочным альтернативам, приведен в приложении В. Здесь отметим лишь то, что явно выделяются шесть конкурентоспособных способов замены ИТО (см. приложение В). Причем ультратонкие металлические пленки толщиной 2...10 нм в пяти из шести способах играют определяющую роль.

Также отметим, что в некоторых других приложениях (например, при создании гибких органических фотодетекторов) по сравнению с прочими материалами именно

тонкие металлические пленки обладают рядом преимуществ [38]: высокой стабильностью процесса напыления, простой изготовления, невысокой стоимостью. В работе [39] показано, что по сравнению с металлическими нанопроводами ультратонкие металлические пленки имеют меньше шероховатостей, меньше рассеивают свет и поэтому почти не снижают четкость изображения на дисплеях. При этом металлическая пленка должна быть достаточно тонкой (<12 нм) [40]. В работе [41] было показано, что усталостная прочность ультратонких металлических пленок выше, чем у толстых пленок из-за увеличения предела текучести.

Крайне важным обстоятельством является тот факт, что в нанометровых металлических слоях в полной мере проявляются размерные эффекты. Как уже было сказано ранее, это приводит к зависимости проводимости пленки от пространственных координат (проводимость становится локальной характеристикой). Между тем, для поиска оптимальных технологических вариантов необходимо проводить теоретические расчеты проводимости и коэффициента прохождения. Для расчетов коэффициента прохождения обычно используется модель однородных слоев, которую, вообще говоря, из-за наличия размерного эффекта применять некорректно. Это снижает предсказательную способность расчетов. На данном этапе становится очевидной необходимость создания нового теоретического подхода для расчета оптических коэффициентов проводящих слоистых структур, учитывающего неоднородность распределения проводимости по толщине пленки.

1.4 Поглотители электромагнитного излучения на основе ультратонких пленок (пленки толщиной $h \sim h_{pk}$)

В некоторых технических областях использование в качестве поглотителя электромагнитных волн плоскостойких структур на основе тонких металлических пленок дает ряд существенных преимуществ по сравнению с прочими материалами.

В списке требований, предъявляемых к поглотителям, обычно (см. статью [42]) фигурируют следующие требования:

1. как можно больший коэффициент поглощения;
2. как можно больший диапазон частот (полоса поглощения), в котором сохраняется требуемое значение коэффициент поглощения;
3. как можно меньшая толщина поглотителя;
4. нечувствительность поглотителя к поляризации падающего на него электромагнитного излучения;

5. эффективное поглощение излучения, падающего под углом к поверхности поглотителя.

Будем изучать случай нормального падения электромагнитной волны на поглотитель, состоящий из плоскостойких структур. Тогда имеет смысл рассматривать только первые три требования в списке. Однако даже в таком случае не удается одновременно выполнить каждое из них: при фиксированной толщине поглотителя невозможно достичь сколь угодно широкой полосы поглощения [43]. Данное ограничение для N -слойной структуры, состоящей из неактивных материальных сред, было сформулировано Розановым в 2000 г. в виде неравенства [44]:

$$\left| \int_0^{\infty} \ln |r(\lambda)| d\lambda \right| \leq 2\pi^2 \sum_{i=1}^N h_i \mu_{st,i}. \quad (1.6)$$

Здесь r – коэффициент отражения (по амплитуде электромагнитной волны) от плоскостойкой структуры, λ – длина волны излучения, N – количество слоев, h_i – толщина i -ого слоя, $\mu_{st,i}$ – статическая относительная магнитная проницаемость i -ого слоя. Для случая немагнитных сред $\mu_{st,i} \equiv 1$, поэтому:

$$\left| \int_0^{\infty} \ln |r(\lambda)| d\lambda \right| \leq 2\pi^2 h_{\min}, \quad (1.7)$$

где h_{\min} – суммарная минимально возможная толщина немагнитной слоистой структуры. Неравенство (1.7) получило название предела Розанова. Реальная толщина поглотителей h_{real} всегда оказывается больше, чем h_{\min} . Для поглотителей с оптимальной конструкцией отношение h_{\min}/h_{real} близко к 100%. Поэтому для сравнения эффективности той или иной конструкции поглотителя удобно пользоваться отношением h_{\min}/h_{real} .

Чтобы не загромождать содержание диссертации техническими описаниями, основные конструкции плоскостойких поглотителей приведены в приложении С. Здесь изложим лишь основной вывод этого обзора: в случае неактивных немагнитных сред технология частотно-избирательных поверхностей (англ. frequency selective surface, кратко FSS) наилучшим образом позволяет оптимизировать толщину поглотителя и ширину его полосы поглощения. Например, в работе [45] толщина поглотителя, в котором использовалось 6 слоев диэлектрика и 4 FSS, составляла 14.5 мм, что всего на 0.7% превышает предел Розанова. В работе [46] описана конструкция поглотителя, состоящего из 4 слоев диэлектрика и 2 FSS, при этом толщина поглотителя составила 25.07 мм, что на 4% превышает предел Розанова.

По своей сути FSS является двумерным метаматериалом – набором одинаковых элементов (метаатомов), периодически расположенных на диэлектрической матрице (см.

рис. 1.4). Толщина слоя FSS, представляющая собой сумму толщин диэлектрической матрицы h_d и тонкопленочной структуры метаатома h_m , как правило, значительно меньше длины волны электромагнитного излучения в вакууме λ_0 . Поэтому FSS слой в рамках теории длинных линий может быть описан как сосредоточенный элемент, обладающий некоторым импедансом Z_{FSS} (см. приложение С). Если $h_m \gg h_{pk}$, то $\text{Re}(Z_{FSS})=0$, то есть Z_{FSS} является чисто реактивной нагрузкой. В таком случае FFS слой не поглощает электромагнитного излучения. Таким образом, чтобы успешно применять FFS слои в поглотителях, необходимо тщательно подбирать толщину металла h_m , которая по порядку своей величины должна совпадать с h_{pk} . Характерные значения импеданса ультратонких металлических слоев, используемых в конструкциях FSS-поглотителей [45-47], составляют $Z_f = 1/(h_m\sigma) = 50 \dots 500$ Ом (напомним, что волновое сопротивление вакуума $Z_0 = 376.7$ Ом).

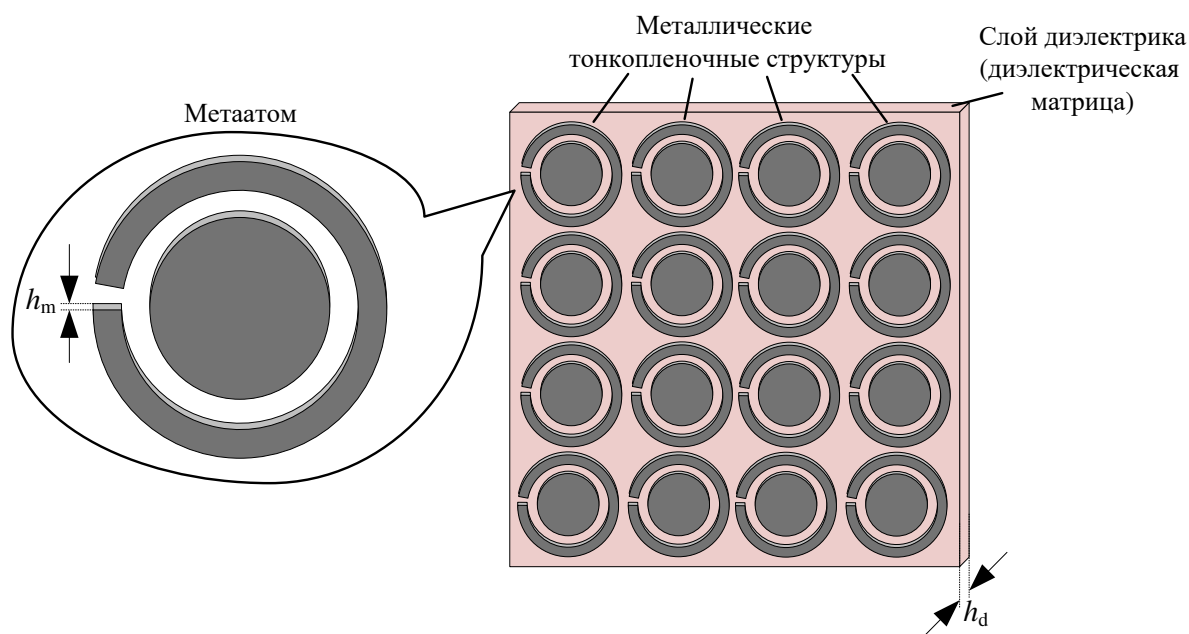


Рис. 1.4 Поясняющий рисунок к понятию частотно избирательной поверхности (FSS).

Как уже было отмечено в конце параграфа 1.3, в нанометровых металлических слоях в полной мере проявляются размерные эффекты. Это приводит к нелинейной зависимости проводимости металлизированной слоистой структуры метаатома σ (а, следовательно, и Z_f) от толщины напыленного слоя металла h_m . В итоге с технологической точки зрения задача подбора h_m значительно усложняется, поскольку для подбора необходимо располагать зависимостью $\sigma(h)$. Кроме того, σ становится локальной характеристикой и начинает зависеть от пространственных координат. Это означает, что при достаточно высоких частотах FSS слои нельзя описывать в рамках сосредоточенных элементов (как

это делается в работах [45-54]). Все это требует нового подхода для описания подобных неоднородных структур.

Отметим, что поглотители, работающие в терагерцовом диапазоне длин волн актуальны в таких практических приложениях как телекоммуникации, медицинское зондирование и задачи визуализации источников терагерцового излучения [55]. Например, наиболее чувствительными прямыми детекторами в субмиллиметровом и миллиметровом диапазонах волн являются болометрические детекторы [56]. В конструкциях болометров в качестве поглотителя часто используются тонкие металлические пленки [57-58], которые успешно применяются даже для поглотителей, работающих в видимом диапазоне длин волн [59]. Также тонкие металлические пленки могут служить термоакустическими детекторами для регистрации мощных СВЧ импульсов [60-68].

Отметим, что задача идеального согласования высокоотражающей нагрузки в условиях волноводного распространения может быть решена за счет волноводной дисперсии, при этом нагрузка поглощает 100% энергии падающей электромагнитной волны. Эта задача детально рассмотрена в работах [69-70]. Задача согласования высокоотражающей нагрузки в случае волновых пакетов при волноводном распространении рассмотрена в работах [71-73].

Наконец, ультратонкие металлические пленки толщиной h_{pk} , являются ключевым элементом конструкции так называемых когерентных поглотителей [74-75], способных поглощать 100% энергии двух встречных электромагнитных волн. В работе [11] показано, что такие поглотители могут использоваться для создания кольцевых интерферометров (интерферометров Саньяка), в которых точность измерения автокорреляционной функции входного сигнала будет значительно выше, чем у обычных интерферометров. Это позволит с большей разрешающей способностью находить неоднородности спектра микроволнового реликтового излучения.

1.5 Оптимизация соединительных контактов в интегральных схемах (пленки толщиной $h > h_{pk}$)

Для ряда технических приложений необходимо изготовление проводящих слоев одновременно сочетающих низкое сопротивление и минимальную толщину слоя. Речь идет о микроэлектронике, где тонкие слои металла используются в качестве проводящих дорожек и их соединений. Проектирование больших интегральных схем всегда было тесно связано с оптимизацией их топологии [76-78]. Например, согласно [79], закон Мура

выполнялся до 2006 года исключительно благодаря возможности хорошей масштабируемости технологии MOSFET.

Действительно, пусть одновременно геометрические размеры (расстояние между двумя любыми точками фигуры) и рабочее напряжение транзистора уменьшаются в s раз (здесь и далее $s > 1$). Такую «операцию» называют масштабированием в s раз. Тогда площадь транзистора уменьшится в s^2 раз, время его переключения уменьшится в s раз, а тепловая мощность, рассеиваемая в транзисторе уменьшится в s^2 раз [80].

Однако некоторые паразитные эффекты не уменьшаются при масштабировании, например, время RC-задержки соединительных проводящих дорожек τ_{RC} . Если удельное сопротивление провода ρ не зависит от его размеров, то при масштабировании в s раз в лучшем случае τ_{RC} не изменяется. Действительно, рассмотрим два случая *a)* и *b)*, изображенных на рис.1.5. После уменьшения линейных размеров в s раз сопротивление провода R увеличивается в s раз (из-за меньшей площади поперечного сечения провода), а емкость C , возникающая между соседними токопроводящими дорожками, уменьшается в s раз (из-за меньшей площади поверхности провода). Следовательно, время задержки $\tau_{RC} = RC$ не изменится. Однако в реальности, удельное сопротивление металла ρ из-за размерных эффектов значительно увеличивается, когда поперечные размеры проводника приближаются к h_{pk} . В итоге увеличиваются R и τ_{RC} .

Немаловажен и тот факт, что уменьшение размеров транзисторов сопровождается увеличением цены их разработки [12]. По данным компании IBS [81] примерная стоимость разработки технологий 10 нм составила 174 миллиона долларов, а технологии 7 нм – уже 298 миллиона долларов. По этой причине возрастает необходимость более детального моделирования топологий микросхем с учетом паразитных эффектов (см. главу 1 монографии [13]). По вышесказанным причинам для решения задач оптимизации RC-задержки интегральных микросхем необходимо располагать зависимостью удельной проводимости слоя металла от его толщины.

Классический размерный эффект в нанометровых металлических пленках связан с потерей электронами части импульса (а именно проекции импульса электрона на направление вектора напряженности электрического поля) вследствие частично диффузного рассеяния электронов на поверхностях металла. Это приводит к уменьшению удельной проводимости нанометрового слоя металла по сравнению с ее табличным значением.

Работы, в которых учет размерного эффекта рассматривается в прикладной задаче проектирования микросхем, появляются в начале 2000-ых годов [82-84]. Работа [82], по-видимому, является первой и датируется 1998 годом. В ней автор затрагивает вопрос о

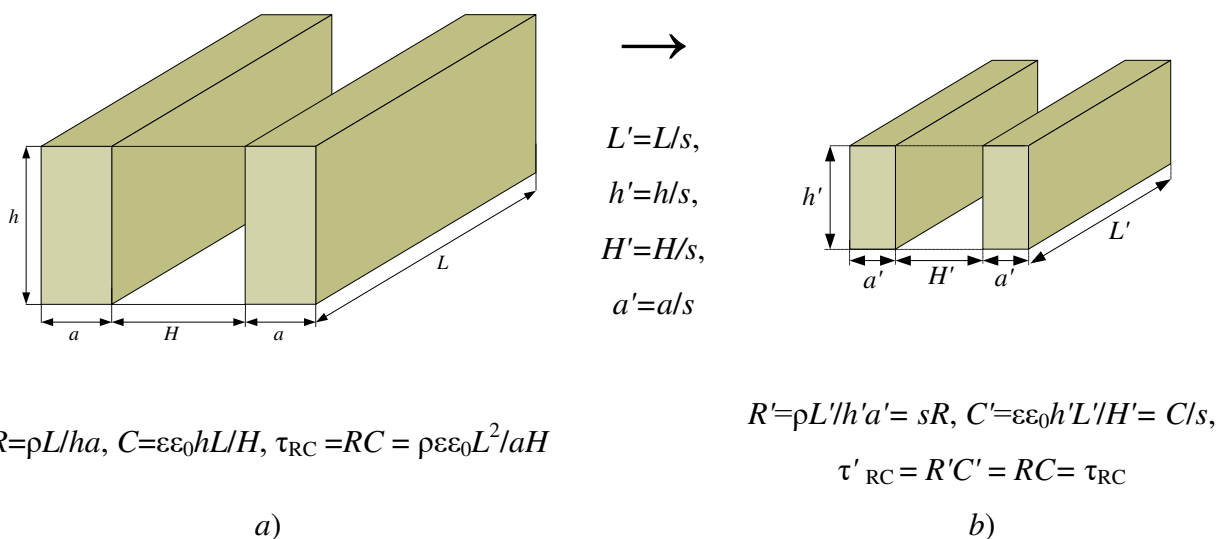


Рис. 1.5 Масштабирование RC-задержки, возникающей в соседних токопроводящих дорожках.

важности разработки соединений с гладкими поверхностями для уменьшения рассеяния на них электронов (в целях уменьшения удельной проводимости). В следующих работах [83-84] исследуется влияние размерного эффекта на RC-задержку при различных способах напыления металла. Появление данных статей, связано с тем, что в начале 1990-ых в технологии изготовления микропроцессоров началась субмикронная эра. В 1993 году компанией Intel был выпущен 32-разрядный процессор Pentium P5 по технологии с минимальными размерами 0.8 мкм [85-86]. Примерно в это же время стало очевидно, что при масштабировании микросхем рост различных паразитных эффектов происходит по-разному.

С одной стороны, увеличение плотности транзисторов на кристалле неизбежно сопровождается уменьшением поперечного сечения токопроводящих металлизированных дорожек, что приводит к росту их сопротивления. С другой стороны, как было сказано выше, при уменьшении размеров транзистора происходит уменьшение времени его переключения. Поэтому паразитная RC-задержка, возникающая в соединительных контактах, уже к 1990 году сравнялась с задержкой переключения транзисторов (см. предисловие в монографии [87]), а в настоящее время RC-задержка соединительных контактов более чем на три порядка превосходит время переключения транзисторов [88-89]. К 1990 году стало ясно, что для соединительных контактов необходимы материалы с более высоким значением проводимости. Алюминий (исторически доминирующий металл соединительных проводов) был заменен медью. Первый работающий микропроцессор, использующий медь, был изготовлен IBM в 1997 году, а крупносерийное производство таких процессоров началось с 1998 года [87]. Al контакты изготавливались методом

реактивного ионного травления, который не может быть применим к Cu. В итоге для Cu был разработан новый метод – дамаский процесс, который на настоящий момент времени является отраслевым стандартом.

Однако сопротивление Cu соединений, изготовленных на основе дамаского процесса, значительно увеличивается из-за размерного эффекта, уже начиная с технологического узла 14 нм [15] (например, процессор Intel Core i7 шестого поколения с архитектурой «Skylake» был построен в 2016-2017 годах по 14-нм техпроцессу [90]). По этой причине возрос интерес к поиску новых материалов и топологий, в которых не так сильно проявляются размерные эффекты.

Например, в работе [15] исследуется зависимость RC-задержки от формы поперечного сечения контакта, а также предлагается использовать Ru (вместо Ta) в качестве материала для диффузионного барьера, изолирующего медь. В работах [91-92] вместо Ta предлагается использовать сплав TaN. В статьях [14,16-23] изучаются альтернативные меди материалы для соединительных контактов. Наиболее перспективными считаются Co и Ru [17, 19-23], однако также исследуются силициды NiSi [16], сплав CoAl [18], переходные металлы платиновой группы Pt, Ir, Rh [14]. Как следует из обзора [93], число работ, посвященных данной тематике продолжает увеличиваться.

Естественно, что при поиске альтернатив меди, сначала изучаются более простые, чем токопроводящие дорожки, структуры – тонкие пленки, напыленные на кремниевые или кварцевые подложки [14].

Отметим, что частота следования тактовых импульсов в шинах современных процессоров варьируется от сотен мегагерц до нескольких гигагерц [94-95]. Кроме того, в настоящее время рассматривается возможность создания для средств связи аналоговых схем, работающих на частотах до сотен гигагерц [96-98].

Как итог можно сделать следующие выводы. В задачах проектирования больших интегральных схем требуется детальное моделирование паразитных эффектов. В частности, крайне важен учет RC-задержки соединительных контактов, для которого необходимо располагать зависимостью удельной проводимости нанометрового слоя металла от его толщины в мега- и гигагерцовом диапазоне длин волн.

1.6 Модели проводимости тонких металлических пленок, локальная и средняя проводимость

Создание точной модели проводимости ультратонких металлических пленок является крайне сложной задачей, которая в полной мере не решена до сих пор. Причиной этого является большое количество физических эффектов, влияющих на электронный транспорт в нанометровых слоях металла. Перечислим основные из этих эффектов.

Когда толщина слоя металла h становится сопоставима с табличным значением длины свободного пробега электрона в этом металле l_0 , удельная проводимость металла пленки σ_{film} становится локальной характеристикой, то есть начинает зависеть от h , а также от пространственных координат x, y, z . При уменьшении h проводимость σ_{film} также уменьшается, поэтому значение σ_{film} всегда меньше, чем табличное значение удельной проводимости металла σ_{bulk} , из которого сделана пленка. Уменьшение σ_{film} по сравнению с σ_{bulk} связано, по крайней мере, с тремя физическими эффектами: внешним, внутренним и квантовым размерными эффектами.

Внешний и внутренний размерные эффекты могут быть объяснены с точки зрения классической физики (применение квантовой теории, однако, позволяет найти выражения для эмпирических параметров, используемых в классической модели).

Внешний размерный эффект заключается в том, что при уменьшении толщины пленки возрастает доля электронов, которые рассеиваются не на внутренних дефектах кристаллической решетки, а на неоднородностях поверхностей металла пленки. Поэтому средняя длина свободного пробега электрона в пленке l_{film} оказывается всегда меньше, чем табличное значение длины свободного пробега электрона в металле пленки l_0 , что и приводит к меньшему значению σ_{film} по сравнению с σ_{bulk} .

Наиболее простая модель внешнего размерного эффекта была предложена Томсоном в 1901 году [99]. В этой модели предлагается геометрический расчет длины свободного пробега, выполненный для одного конкретно рассматриваемого электрона l_e (т.е. без использования усреднения по статистическому ансамблю), находящегося в толще металла пленки. Считается, что длина свободного пробега электрона равна либо l_0 (в том случае, когда электрон не сталкивается с поверхностью металла пленки), либо равна длине его траектории до столкновения с поверхностью металла пленки. При этом предполагается, что скорость электрона направлена случайным образом, а траектория его движения представляет собой ломаную линию.

Пусть плоскость, в которой находится пленка, перпендикулярна оси Oz , а слой металла пленки занимает пространственный интервал $z \in [0, h]$. В таком случае при $h < l_0$,

средняя (по всевозможным направлениям скорости) длина свободного пробега электрона, находящегося в точке с координатой z , может быть рассчитана по формуле (более подробно см. приложение D настоящей диссертации)

$$l_e(z, h) = \frac{1}{2}h \left\{ \left(1 - \frac{z}{h}\right) \ln\left(\frac{l_0}{h-z}\right) + \frac{z}{h} \ln\left(\frac{l_0}{z}\right) + 1 \right\}. \quad (1.8)$$

Согласно теории Друде (которая к 1901 году была единственной успешной теорией проводимости металлов), удельная проводимость монокристаллического макроскопически большого объема металла σ_{bulk} рассчитывается по формуле

$$\sigma_{\text{bulk}} = n_e e^2 l_0 / \langle v \rangle m, \quad (1.9)$$

где n_e и $\langle v \rangle$ – концентрация и средняя скорость свободных электронов, а e и m – заряд и масса электрона. Исходя из формулы (1.9), Томсон предположил, что выражение для $\sigma_{\text{film}}(x, z, y, h)$ может быть получено заменой l_0 в формуле (1.9) на $l_e(z, h)$. Таким образом,

$$\sigma_{\text{film}}(z, h) = \sigma_{\text{bulk}} \frac{l_e(z, h)}{l_0} = \frac{\sigma_{\text{bulk}}}{2} \frac{h}{l_0} \left\{ \left(1 - \frac{z}{h}\right) \ln\left(\frac{l_0}{h-z}\right) + \frac{z}{h} \ln\left(\frac{l_0}{z}\right) + 1 \right\}. \quad (1.10)$$

Экспериментально, как правило, возможно измерить только среднюю по толщине проводимость $\langle \sigma_{\text{film}}(h) \rangle$. Формула для $\langle \sigma_{\text{film}}(h) \rangle$ может быть выведена из выражения (1.10) путем его усреднения по интервалу $z \in [0, h]$:

$$\langle \sigma_{\text{film}}(h) \rangle = \frac{1}{h} \int_0^h \sigma_{\text{film}}(z, h) dz = \frac{\sigma_{\text{bulk}}}{2} \frac{h}{l_0} \left(\frac{3}{2} - \ln\left(\frac{h}{l_0}\right) \right). \quad (1.11)$$

Модель Томсона, несмотря на ее простоту, используется даже в современных работах для оценки сопротивления наноразмерных проводящих дорожек в интегральных микросхемах [15, 22, 100]. Она обладает тем преимуществом, что для расчета сопротивления нанопровода достаточно располагать только формой его поперечного сечения и табличным значением l_0 в металле провода. Кроме того, поскольку локальная проводимость $\sigma(x, y, z)$ в каждой точке провода рассчитывается независимо, для численного расчета могут быть использованы параллельные вычисления.

Более строгий подход к расчету проводимости тонких пленок был развит Фуксом в 1937 году [101] примерно через 10 лет после создания зонной теории проводимости металлов [27] (более подробно теория Фукса изложена в приложении E данной диссертации). В теории Фукса поэтому уже учитывается распределение Ферми. Однако для расчета проводимости используется классическое уравнение Больцмана, а распределение Ферми служит в качестве нулевого приближения для построения приближенного решения уравнения Больцмана по теории возмущений.

Еще одно новшество заключается в том, что уравнение Больцмана решается при заданных на поверхностях металла пленки при $z=0$ и $z=h$ граничных условиях, которые позволяют описывать частично диффузное отражение электронов от поверхностей металла. Вводятся два эмпирических коэффициента β_1 и β_2 – коэффициенты зеркальности нижней и верхней поверхности пленки соответственно. Физический смысл, например, коэффициента β_1 заключается в том, что при столкновении электрона с нижней поверхностью пленки $z = 0$, с вероятностью $\beta_1 \times 100\%$ этот электрон отразится от поверхности металла зеркально, а с вероятностью $(1-\beta_1) \times 100\%$ отразится диффузно. При зеркальном отражении x - и y -проекции импульса электрона сохраняются, а z -проекция изменяет знак на противоположный. При диффузном отражении направление вектора скорости электрона изменяется произвольным образом, но кинетическая энергия движения электрона сохраняется.

Наряду с концепцией длины свободного пробега электрона l_0 используется понятие времени релаксации τ_0 . Поскольку в теории Фукса поверхность Ферми металла считается близкой к сферической (что верно для щелочных (Li, K, Na, Rb, Cs) и благородных (Cu, Ag, Au) металлов), две эти физических величины оказываются связаны между собой простым соотношением $l_0 = \tau_0 v_F$, где v_F – скорость электронов на поверхности Ферми. В таком случае величина τ_0 обладает физическим смыслом – это среднее время между двумя актами рассеяния электрона на дефектах кристаллической решетки в макроскопически большом объеме металла.

Фукс (путем решения классического уравнения Больцмана при вышеописанных граничных условиях) фактически доказал следующее утверждение. Пусть τ_0 – время релаксации в макроскопически большом объеме металла. Тогда, в случае тонкой пленки толщиной h вышеописанные граничные условия эквивалентны замене τ_0 на некоторое новое $\tilde{\tau}_0$, определяемое выражением

$$\tilde{\tau}_0 = \tau_0 + \tau_{\text{surf}}, \quad (1.12)$$

где τ_{surf} – время релаксации, которое ассоциируется с частично диффузным рассеянием электронов на поверхностях металла при $z = 0$ и $z = h$ и рассчитывается по формуле (более подробно см. примечание после формулы (E.18) в приложении E данной диссертации)

$$\tau_{\text{surf}} = \tau_{\text{surf}}(z, h, \beta_1, \beta_2, v_z) = \tau_0 \left\{ \frac{\beta_1(\beta_2 - 1) + e^{\frac{h}{|v_z|\tau}}(\beta_1 - 1)}{e^{\frac{h}{|v_z|\tau}} - \beta_1\beta_2 e^{-\frac{h}{|v_z|\tau}}} \times \Theta(v_z) + \frac{(\beta_2 - 1) + e^{-\frac{h}{|v_z|\tau}}\beta_2(\beta_1 - 1)}{e^{\frac{h}{|v_z|\tau}} - \beta_1\beta_2 e^{-\frac{h}{|v_z|\tau}}} \times e^{-\frac{z}{\tau v_z}} \times \Theta(-v_z) \right\}. \quad (1.13)$$

Здесь v_z – z -проекция скорости электрона проводимости, а $\Theta(x)$ – функция Хэвисайда, определяемая равенствами:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 1/2, & x = 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}. \quad (1.13)$$

В итоге расчет локальной проводимости металла с «новым» временем релаксации $\tilde{\tau}_0$, определяемым выражениями (1.12)-(1.13), приводит к формуле

$$\sigma_{\text{film}}(z, h) = \frac{2\pi\tau e^2 m^2 v_F^3}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^1 (1-\xi^2) \left\{ 2 + \frac{(\beta_1 - 1)(e^{-\frac{z}{\xi l_0}} + \beta_2 e^{-\frac{2h-z}{\xi l_0}}) + (\beta_2 - 1)(e^{\frac{z-h}{\xi l_0}} + \beta_1 e^{-\frac{z+h}{\xi l_0}})}{1 - \beta_1 \beta_2 e^{-\frac{2h}{\xi l_0}}} \right\} d\xi. \quad (1.14)$$

Проводя усреднение $\sigma_{\text{film}}(z, h)$ по толщине пленки, можно получить формулу для средней проводимости $\langle \sigma_{\text{film}}(h) \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{\text{film}}(h) \rangle &= \frac{1}{h} \int_0^h \sigma(z, h) dz = \\ &= \frac{2\pi\tau_0 e^2 m^2 v_F^3}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^1 (1-\xi^2) \left\{ 2 + \xi \frac{l_0}{h} \left(1 - e^{-\frac{h}{\xi l_0}} \right) \frac{(\beta_1 - 1)(1 + \beta_2 e^{-\frac{h}{\xi l_0}}) + (\beta_2 - 1)(1 + \beta_1 e^{-\frac{h}{\xi l_0}})}{1 - \beta_1 \beta_2 e^{-\frac{2h}{\xi l_0}}} \right\} d\xi. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Для вычисления v_F в формулах (1.14)-(1.15) используется предположение о том, что электронный газ в металле при комнатной температуре является вырожденным, поэтому справедливо соотношение:

$$mv_F^2 / 2 = \mu_0, \quad (1.16)$$

где μ_0 – химический потенциал макроскопически большого объема металла, рассчитанный при нулевой температуре, определяемый формулой

$$\mu_0 = \hbar^2 (3\pi^2 n_e)^{2/3} / (2m). \quad (1.17)$$

Для исторической точности стоит заметить, что Фукс рассмотрел случай $\beta_1 = \beta_2$, а случай $\beta_1 \neq \beta_2$ впервые был рассмотрен Лукасом ([102] 1964 г.). Также отметим, что подход Фукса был дополнен Зондхаймером ([103] 1951 г.), который впервые рассмотрел эффект Холла и аномальный скин-эффект в тонких металлических пленках. По этой причине часто вышеизложенная модель проводимости называется моделью Фукса-Зондхаймера.

Первая работа, в которой проводится рассмотрение квантово-размерных эффектов в тонких пленках, по-видимому, принадлежит Сандомирскому ([104] 1967 г.). Автором, однако, исследовались полупроводниковые пленки с ровными поверхностями.

Далее весьма сложно прослеживается исторический путь развития теорий проводимости тонких металлических пленок. Например, весьма логичным кажется, что сразу же после создания теории Фукса-Зондхаймера должны были появиться работы, в которых проводится элементарное обобщение этой теории для случая дискретных энергетических уровней электронов в пленке. Однако автору данной диссертации не удалось найти подобных работ. После теории Фукса-Зондхаймера появлялись статьи, в которых теории проводимости были основаны на решении более фундаментальных (чем классическое уравнение Больцмана) уравнений. Обзор подобных работ можно найти в статье [105]. Среди них стоит отметить работу [106], в которой впервые было предложено вместо эмпирических параметров β_1 и β_2 использовать параметры δ и ξ автокорреляционной функции Гаусса. Параметры δ и ξ по своей сути описывают статистический разброс неровности металлических поверхностей пленки и поэтому могут быть измерены экспериментально, например, при помощи сканирующего атомно-силового микроскопа. Также стоит отметить работу [107], в которой было показано, что решение уравнения Шредингера для гамильтониана, моделирующего неровности поверхностей пленки при помощи приближения белого шума, в классическом пределе приводит к тем же результатам, что и модель Фукса-Зондхаймера. Подобные квантовые теории проводимости, однако, весьма сложны с точки зрения расчетных формул: для вычисления σ_{film} , как правило, требуется численное решение трансцендентных уравнений или даже их систем. Поэтому именно формула (1.15) (или ее более простой вариант, в котором $\beta_1 = \beta_2$) используется в подавляющем большинстве экспериментальных работ для расчета проводимости монокристаллических нанометровых слоев. В связи с этим квантовое обобщение формулы (1.15) представляет собой особую ценность (это обобщение позволяет судить о том, при каких толщинах пленки квантово-размерные эффекты становятся доминирующими). По этим причинам вышеописанное обобщение детально проведено в приложении Е настоящей диссертации. Здесь мы лишь изложим его краткие итоги.

Элементарный учет квантово-размерных эффектов применительно к модели Фукса-Зондхаймера заключается в следующем. В нулевом приближении (которое используется для построения приближенного решения классического уравнения Больцмана) учитывается наличие дискретности z -проекции импульса электрона проводимости в металле пленки. При этом наличие дискретности энергетических уровней сказывается и на расчете μ_0 . Можно показать (см. приложение G настоящей диссертации), что в случае тонкой пленки μ_0 и n_{max} (n_{max} – число энергетических подзон, которое наряду с μ_0 входит в формулу для расчета проводимости) находятся численно из системы уравнений

$$\frac{4\pi mn_{\max}}{h(2\pi\hbar)^2} \left\{ \mu_0 - \frac{1}{12m} \left(\frac{\pi\hbar}{h} \right)^2 (n_{\max} + 1)(2n_{\max} + 1) \right\} = n_e, \quad n_{\max} = \text{floor} \left(\sqrt{2m\mu_0} \frac{h}{\pi\hbar} \right). \quad (1.18)$$

Здесь функцией $\text{floor}(x)$ обозначается операция округления x до наименьшего целого числа (например, $\text{floor}(5.1) = \text{floor}(5.9) = 5$). Графики зависимостей μ_0 и n_{\max} от толщины h пленок золота и меди приведены в приложении Е (см. рис. Е.2 приложения Е). После нахождения μ_0 и n_{\max} локальная проводимость пленки рассчитывается по формуле

$$\sigma_{\text{film}}(z, h) = \frac{\pi m e^2}{h(2\pi\hbar)^2} \times \left\{ \sum_{n=1}^{n_{\max}} \left(\frac{2\mu_0}{m} - v_n^2 \right) \left[2 + \frac{\beta_1(\beta_2 - 1)e^{\frac{-z}{v_n\tau_0}} + e^{\frac{h-z}{v_n\tau_0}}(\beta_1 - 1) + (\beta_2 - 1)e^{\frac{z}{v_n\tau_0}} + e^{\frac{z-h}{v_n\tau_0}}\beta_2(\beta_1 - 1)}{e^{\frac{h}{v_n\tau_0}} - \beta_1\beta_2 e^{-\frac{h}{v_n\tau_0}}} \right] \right\}, \quad (1.19)$$

где $v_n = \pi\hbar n / (mh)$. Усредняя $\sigma_{\text{film}}(z, h)$ в (1.19) по толщине пленки, получим

$$\langle \sigma_{\text{film}}(h) \rangle = \frac{\tau_0 \pi m e^2}{h^2 (2\pi\hbar)^2} \times \left\{ \sum_{n=1}^{n_{\max}} v_n \left(\frac{2\mu_0}{m} - v_n^2 \right) \left[2 + \frac{\left(\beta_1(\beta_2 - 1) + e^{\frac{h}{\tau_0 v_n}}(\beta_1 - 1) \right) \left(1 - e^{-\frac{h}{\tau_0 v_n}} \right) + \left((\beta_2 - 1) + e^{-\frac{h}{\tau_0 v_n}}\beta_2(\beta_1 - 1) \right) \left(e^{\frac{h}{\tau_0 v_n}} - 1 \right)}{e^{\frac{h}{\tau_0 v_n}} - \beta_1\beta_2 e^{-\frac{h}{\tau_0 v_n}}} \right] \right\}. \quad (1.20)$$

Модель проводимости Фукса-Зондхаймера подходит лишь для монокристаллических пленок, поскольку в ней учитывается только два механизма рассеяния электронов: рассеяние на внутренних дефектах кристаллической решетки и рассеяние на поверхностях металла пленки. Между тем, в подавляющем большинстве экспериментальных установок напыляемые слои металла представляют собой поликристаллы с размерами кристаллитов от единиц до сотен нанометров [108-111] (стоит отметить, что современные технологии позволяют создавать металлические пленки толщиной 10...100 нм с кристаллитами, характерная площадь которых составляет 1...10 см², но для этого требуется выполнение весьма специфических условий [112]).

В 1969 году в работах Маядеса, Шаткеса и Дженека [113-114] впервые была создана модель проводимости тонких пленок, в которой наряду с двумя первыми механизмами рассеяния был также учтен механизм рассеяния электронов на межкристаллитных границах. По этой причине модель Маядеса-Шаткеса-Дженека (далее модель МЖД) включает в себя модель Фукса-Зондхаймера как частный случай и подходит для расчета проводимости поликристаллических пленок. Эффект уменьшения σ_{film} по сравнению с σ_{bulk} , связанный с рассеянием электронов на межкристаллитных границах получил

название внутреннего размерного эффекта. Теория МШД в деталях и ее обобщение для случая квантования энергетических уровней изложены в приложении F данной диссертации, здесь приведены лишь основные положения и следствия данной теории.

Главное предположение, сделанное в теории МШД, состоит в том, что включение в модель проводимости механизма рассеяния электронов на межкристаллитных границах может быть проведено независимо от наличия (или отсутствия) механизмов рассеяния, рассмотренных в модели Фукса-Зондхаймера (другими словами, предполагается, что справедливо правило Матиссена). Поэтому авторы в своих работах [113-114] вообще сначала рассматривают макроскопически большой объем металла, в котором присутствует единственный механизм рассеяния – на межкристаллитных границах. При этом предполагается, что вектор напряженности внешнего электрического поля (из-за которого появляется электрический ток) постоянен и направлен вдоль оси Ox . Для простоты считается, что межкристаллитные границы представляют собой бесконечно тонкие стенки, плоскости которых перпендикулярны оси Ox . При столкновении с межкристаллитной границей с вероятностью R_{Cr} электрон зеркально отражается от нее, а с вероятностью $1-R_{Cr}$ проходит через нее без взаимодействия. Таким образом, R_{Cr} представляет собой коэффициент отражения электрона от межкристаллитной границы. Оказывается, что и в таком случае возможно ввести время релаксации τ_{MSJ} , однозначно характеризующее этот процесс рассеяния. Время τ_{MSJ} рассчитывается по формуле

$$\tau_{MSJ} = \tau_{MSJ}(v_x) = \frac{1}{2} \frac{|v_x| d_{Cr}}{v_F^2} \times \frac{1-R_{Cr}}{R_{Cr}}, \quad (1.21)$$

где v_x – x -проекция скорости электрона проводимости, d_{Cr} – средний размер кристаллита (другими словами, среднее расстояние между соседними межкристаллитными границами).

Стоит отметить, что в оригинальных работах МШД вводится несколько иной коэффициент – R_{MSJ} . Коэффициент R_{MSJ} связан с коэффициентом R_{Cr} соотношением $R_{Cr} / (1 - R_{Cr}) = 0.5 R_{MSJ} / (1 - R_{MSJ})$ или $R_{Cr} = x / (x + 1)$, где $x = 0.5 R_{MSJ} / (1 - R_{MSJ})$. Для наглядности график зависимости $R_{Cr} = R_{Cr}(R_{MSJ})$ приведен в приложении F на рис. F.1.

Для того чтобы включить в модель Фукса-Зондхаймера механизм рассеяния электронов на межкристаллитных границах, оказывается достаточным в модели Фукса-Зондхаймера время релаксации $\tau_0 = l_0/v_F$ заменить на «новое» время релаксации τ^* , определяемое соотношением

$$\tau^* = \tau^*(v_x) = \left(\frac{1}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_{MSJ}(v_x)} \right)^{-1}. \quad (1.22)$$

Отметим, что при $d_{Cr} \rightarrow \infty$, а также при $R_{Cr} \rightarrow 0$, время релаксации τ^* стремится к τ_0 . Благодаря этому модель МШД включает в себя модель Фукса-Зондхаймера как частный случай.

Локальная σ_{film} и средняя $\langle \sigma_{\text{film}}(h) \rangle$ проводимости в модели МШД без учета квантовых эффектов рассчитываются по формулам

$$\sigma_{\text{film}}(z, h) = \frac{2e^2 m^2 v_F^3}{(2\pi\hbar)^3} \{J_1 + J_+(z, h) + J_-(z, h)\}, \quad (1.23)$$

$$\langle \sigma_{\text{film}}(h) \rangle = \frac{2e^2 m^2 v_F^3}{(2\pi\hbar)^3} \{J_1 + \langle J_+(h) \rangle + \langle J_-(h) \rangle\}, \quad (1.24)$$

где

$$J_1 = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \tau^*(v_F |\cos \varphi \sin \theta|) \sin^3 \theta \cos^2 \varphi,$$

$$J_+(z, h) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} d\theta \tau^*(v_F |\cos \varphi \sin \theta|) g^+(v_F, v_F \cos \varphi \sin \theta, v_F \cos \theta) \times \\ \times \exp\left(\frac{-z}{v_F \cos \theta \tau^*(v_F, v_F |\cos \varphi \sin \theta|)}\right) \sin^3 \theta \cos^2 \varphi,$$

$$J_-(z, h) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{\pi/2}^\pi d\theta \tau^*(v_F, v_F |\cos \varphi \sin \theta|) g^-(v_F, v_F \cos \varphi \sin \theta, v_F \cos \theta) \times \\ \times \exp\left(\frac{-z}{v_F \cos \theta \tau^*(v_F, v_F |\cos \varphi \sin \theta|)}\right) \sin^3 \theta \cos^2 \varphi,$$

$$\langle J_+(h) \rangle = \frac{1}{h} \int_0^h J_+(z, h) dz = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} d\theta \tau^*(v_F, v_F |\cos \varphi \sin \theta|) g^+(v_F, v_F \cos \varphi \sin \theta, v_F \cos \theta) \times \\ \times \frac{v_F \cos \theta \tau^*(v_F, v_F |\cos \varphi \sin \theta|)}{h} \left\{ 1 - \exp\left(\frac{-h}{v_F \cos \theta \tau^*(v_F, v_F |\cos \varphi \sin \theta|)}\right) \right\} \sin^3 \theta \cos^2 \varphi,$$

$$\langle J_-(h) \rangle = \frac{1}{h} \int_0^h J_-(z, h) dz = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{\pi/2}^\pi d\theta \tau^*(v_F, v_F |\cos \varphi \sin \theta|) g^-(v_F, v_F \cos \varphi \sin \theta, v_F \cos \theta) \times \\ \times \frac{v_F \cos \theta \tau^*(v_F, v_F |\cos \varphi \sin \theta|)}{h} \left\{ 1 - \exp\left(\frac{-h}{v_F \cos \theta \tau^*(v_F, v_F |\cos \varphi \sin \theta|)}\right) \right\} \sin^3 \theta \cos^2 \varphi,$$

$$g^+(v_x, v_z) = \frac{\beta_1(\beta_2 - 1) + e^{\frac{h}{|v_z| \tau^*(v_x)}} (\beta_1 - 1)}{e^{\frac{h}{|v_z| \tau^*(v_x)}} - \beta_1 \beta_2 e^{-\frac{h}{|v_z| \tau^*(v_x)}}}, \quad g^-(v_x, v_z) = \frac{(\beta_2 - 1) + e^{\frac{h}{|v_z| \tau^*(v_x)}} \beta_2 (\beta_1 - 1)}{e^{\frac{h}{|v_z| \tau^*(v_x)}} - \beta_1 \beta_2 e^{-\frac{h}{|v_z| \tau^*(v_x)}}}.$$

Если учитывать эффект квантования энергетических уровней, формулы (1.23)-(1.24) приобретают вид

$$\sigma_{\text{film}}(z, h) = \frac{e^2 m}{h(2\pi\hbar)^2} \sum_{n=1}^{n_{\text{max}}} (v_F^2 - v_n^2) \int_0^{2\pi} d\varphi \tau^* (\sqrt{v_F^2 - v_n^2} \cos \varphi) \times \cos^2 \varphi \times$$

$$\times \left\{ 2 + g^+ (\sqrt{v_F^2 - v_n^2} \cos \varphi, v_n) \exp \left(\frac{-z}{v_n \tau^* (\sqrt{v_F^2 - v_n^2} \cos \varphi)} \right) + \right.$$

$$\left. + g^- (\sqrt{v_F^2 - v_n^2} \cos \varphi, v_n) \exp \left(\frac{z}{v_n \tau^* (\sqrt{v_F^2 - v_n^2} \cos \varphi)} \right) \right\}, \quad (1.25)$$

$$\langle \sigma_{\text{film}}(h) \rangle = \frac{e^2 m}{h(2\pi\hbar)^2} \sum_{n=1}^{n_{\text{max}}} (v_F^2 - v_n^2) \int_0^{2\pi} d\varphi \tau^* (\sqrt{v_F^2 - v_n^2} \cos \varphi) \times \cos^2 \varphi \times$$

$$\times \left\{ 2 + g^+ (\sqrt{v_F^2 - v_n^2} \cos \varphi, v_n) \frac{v_n \tau^* (\sqrt{v_F^2 - v_n^2} \cos \varphi)}{h} \left[1 - \exp \left(\frac{-h}{v_n \tau^* (\sqrt{v_F^2 - v_n^2} \cos \varphi)} \right) \right] + \right.$$

$$\left. + g^- (\sqrt{v_F^2 - v_n^2} \cos \varphi, v_n) \frac{v_n \tau^* (\sqrt{v_F^2 - v_n^2} \cos \varphi)}{h} \left[\exp \left(\frac{h}{v_n \tau^* (\sqrt{v_F^2 - v_n^2} \cos \varphi)} \right) - 1 \right] \right\}. \quad (1.26)$$

Здесь, как и ранее $v_n = \pi\hbar n / (mh)$, а μ_0 и n_{max} находятся из системы (1.18).

Во всей вышеописанной теории считается, что электрическое поле и токи постоянны во времени. Однако обобщение теории МШД для случая гармонически изменяющегося (по закону $e^{-j\omega t}$) электромагнитного поля проводится элементарно при помощи замены (это также показано в приложении F)

$$\frac{1}{\tau^*} \rightarrow \frac{1}{\tau^*} - j\omega. \quad (1.27)$$

Здесь j – мнимая единица, а ω – частота электромагнитного излучения.

Заметим, что такой подход не учитывает возможности квантовых переходов электронов между энергетическими подзонами. Характерная разность энергий между двумя подзонами составляет $\Delta W \approx p_z \Delta p_z / m \approx (2\pi\hbar)^2 / (2mh^2)$. Для $h = 10$ нм, например, $\Delta W \approx 0.01$ эВ, поэтому отношение энергии фотона $\hbar\omega$ к ΔW составляет $3 \cdot 10^{-13} \cdot \nu$, где ν – частота в герцах. Для микроволнового ($\nu \approx 10^9$ Гц) диапазона $\hbar\omega / \Delta W \approx 3 \cdot 10^{-4}$, для терагерцового ($\nu \approx 10^{12}$ Гц) диапазона $\hbar\omega / \Delta W \approx 0.3$, для оптического ($\nu \approx 10^{14}$ Гц) $\hbar\omega / \Delta W \approx 30$.

Стоит отметить, что в работах [105, 115] методом одночастичной функции Грина было получено точное решение уравнения Шредингера с гамильтонианом, моделирующим межкристаллитные границы при помощи потенциала типа «гребенки» из δ -функций. Было продемонстрировано, что экспериментально полученные зависимости $\langle \sigma_{\text{film}}(h) \rangle$ хорошо описываются, как при помощи модели МШД, так и при помощи расчета проводимости по формулам Кубо напрямую из найденной авторами одночастичной

функции Грина. Конечно, квантовый подход является более точным. Он, например, позволяет более корректным образом из экспериментальных зависимостей $\langle \sigma_{\text{film}}(h) \rangle$ определять коэффициент R_{Cr} . Стоит также отметить, что квантовый подход лучше описывает эффект Холла и магнетосопротивление в нанометровых слоях металла, а также предсказывает возникновение некоторых новых эффектов, связанных со слабой андерсоновской локализацией [105]. Однако численный алгоритм расчета проводимости, изложенный в работах [105, 115] настолько сложен, что фактически используется только самими авторами этих работ.

При использовании формул (1.23)-(1.26) следует учитывать, что средний размер кристаллитов d_{Cr} в общем случае зависит от толщины пленки h . Вид зависимости $d_{\text{Cr}}(h)$ определяется типом металла, условиями его напыления, а также характерным порядком величины h . Например, Маядесом, Шаткесом и Дженеком было выявлено, что для пленок алюминия при толщинах 100-1000 нм $d_{\text{Cr}} \approx h$ [113]. В диапазоне толщин от 10 до 100 нм для пленок Cu и Al экспериментальным данным больше соответствует степенная зависимость вида $d_{\text{Cr}}(h) = Ah^\gamma$, где A и γ – эмпирические параметры [116-117]. В работах [118-119] отмечено что, иногда рост кристаллитов ограничен сверху (это происходит при столбчатом росте кристаллитов) и достигает некоторого максимального значения d_{max} . В таком случае больше подходит зависимость

$$d_{\text{Cr}}(h) = \left((Ch)^{-1} + d_{\text{max}}^{-1} \right)^{-1}. \quad (1.28)$$

Параметр C здесь характеризует скорость увеличения размера кристаллитов на начальных этапах формирования пленки.

В конце данного раздела построим графики зависимостей средней удельной проводимости пленки $\langle \sigma_{\text{film}}(h) \rangle$ от толщины пленки h , а также графики зависимостей локальной проводимости $\sigma_{\text{film}}(z, h)$ от координаты z при фиксированной толщине h .

Для модели Томсона (ф-лы (1.8), (1.10)) будем использовать обозначение «Th», для классических моделей Фукса-Зондхаймера (ф-лы (1.14), (1.15)) и МШД (ф-лы (1.23), (1.24)) – соответственно обозначения «FS» и «MSJ», а для квантовых обобщений моделей Фукса-Зондхаймера (ф-лы (1.19), (1.20)) и МШД (ф-лы (1.25)-(1.26)) – соответственно обозначения «q-FS» и «q-MSJ». Все графики будут построены для пленок золота. Согласно работе [119], в макроскопически большом объеме золота $\sigma_{\text{bulk}} = 44.6$ МСм/м, $l_0 = 37.5$ нм, $n_e = 5.9 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$, а в нанометровых пленках золота коэффициент зеркальности $\beta \approx 0.8$, коэффициент $R_{\text{MSJ}} \approx 0.9$ (что соответствует $R_{\text{Cr}} \approx 0.82$), при этом размер кристаллита хорошо описывается формулой (1.28) при $C = 9$, $d_{\text{max}} = 79$ нм.

На рисунке 1.6 изображены зависимости отношения средней удельной проводимости пленки $\langle \sigma_{\text{film}}(h) \rangle$ к табличному значению $\sigma_{\text{bulk}} = 44.6$ МСм/м от толщины h пленок золота для вышеописанных моделей (верхний и нижний графики отличаются только масштабом по оси ординат). Для того чтобы результаты модели Томсона можно было сравнить с результатами модели Фукса, был построен график зависимости $\langle \sigma_{\text{film}}(h) \rangle$, соответствующий классической модели Фукса с $\beta_1 = \beta_2 = 0$ (случай абсолютно диффузного рассеяния). Из рисунка 1.6 можно сделать следующие выводы.

- Учет квантования энергетических уровней приводит к уменьшению проводимости пленки, однако существенное различие между классическими и квантовыми моделями Фукса-Зондхаймера проявляется только при толщинах менее 2 нм.
- Различие между классической и квантовой моделями МШД (см. нижний график на рис. 1.6) пренебрежимо мало во всем диапазоне толщин.
- Модель Томсона качественно правильно описывает зависимость $\langle \sigma_{\text{film}}(h) \rangle$.
- Учет рассеяния электронов проводимости на межкристаллитных границах может являться доминирующим механизмом рассеяния, следовательно, он необходим для корректного описания зависимости $\langle \sigma_{\text{film}}(h) \rangle$.

В иллюстративных целях на рисунках 1.7 изображены также зависимости отношения локальной удельной проводимости пленки $\sigma_{\text{film}}(z, h)$ к табличному значению $\sigma_{\text{bulk}} = 44.6$ МСм/м от координаты z при фиксированных толщинах h пленок золота. На рис. 1.7.d-f рассмотрен случай $\beta_1 = 0$, $\beta_2 = 1$.

В конце отметим некоторые важные аспекты. Во-первых, во всех изложенных выше теориях проводимости неявно предполагается, что пленка представляет собой сплошной слой металла. В реальности это может быть не так: для очень тонких (единицы нанометров) металлических пленок необходим учет эффекта перколяционного перехода. Во-вторых, стоит учитывать, что напыление пленок обычно проводится в вакуумных камерах, однако измерения проводимости пленок, как правило, происходит при атмосферных условиях. Процесс окисления слоя металла атмосферным кислородом начинается сразу же после помещения пленки в воздушную среду. С течением времени на поверхности пленки образуется слой окисла, что также может влиять на проводимость. В-третьих, стоит иметь в виду, что вышеописанные теории не учитывают температурного вклада фононов в проводимость. Все эти вопросы, обсуждаются в приложении Н данной диссертации.

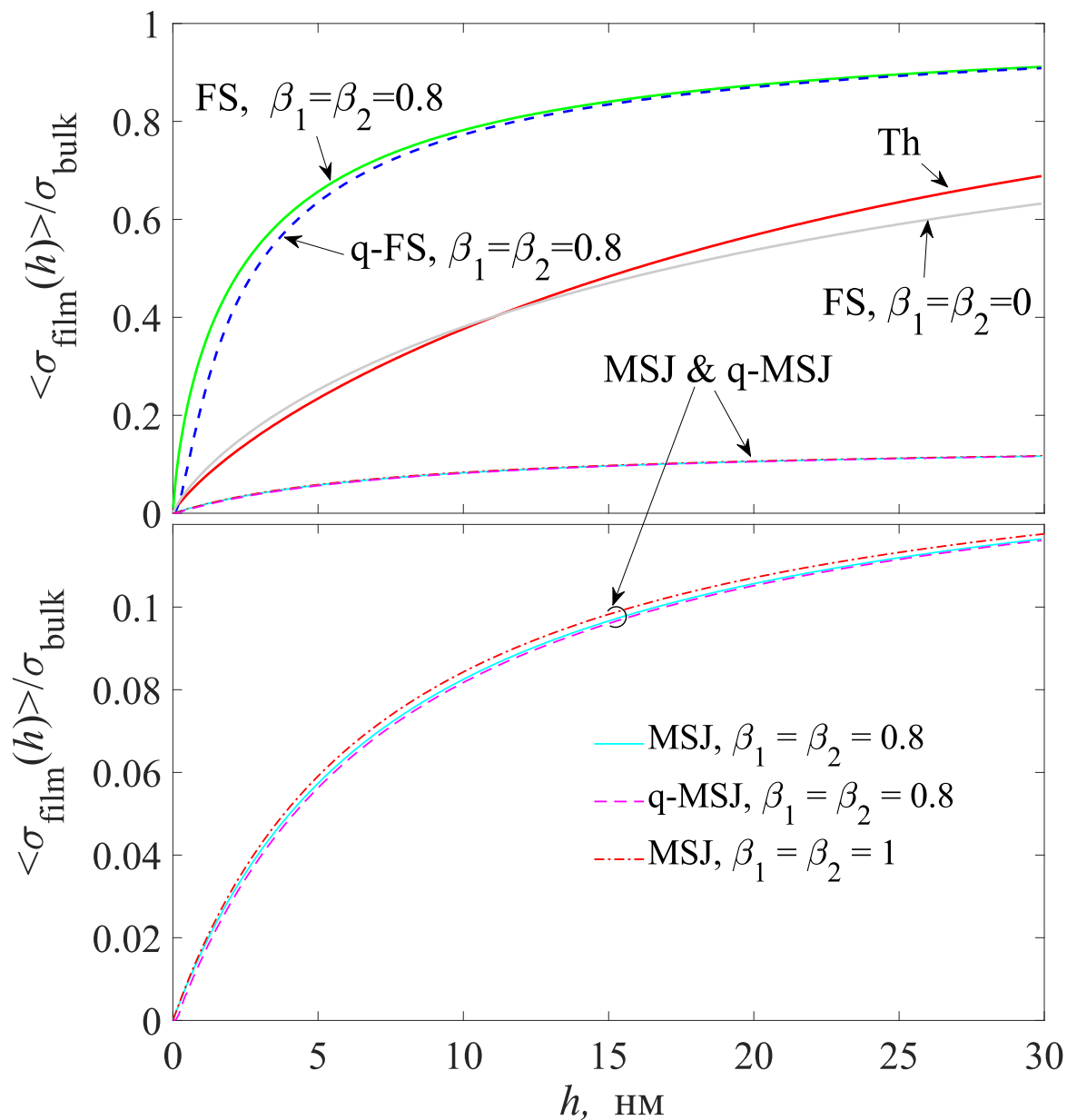
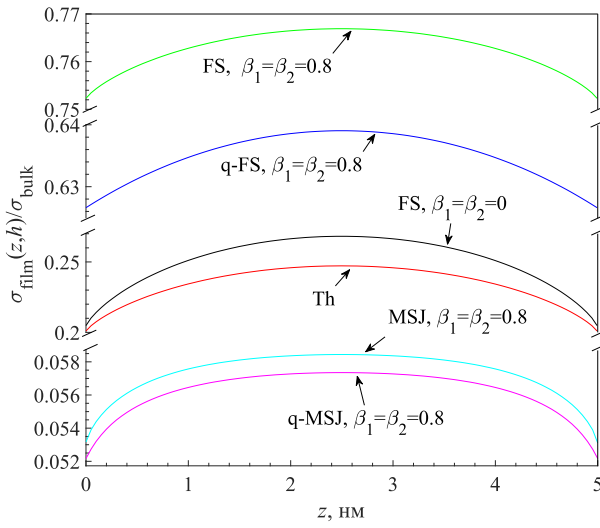
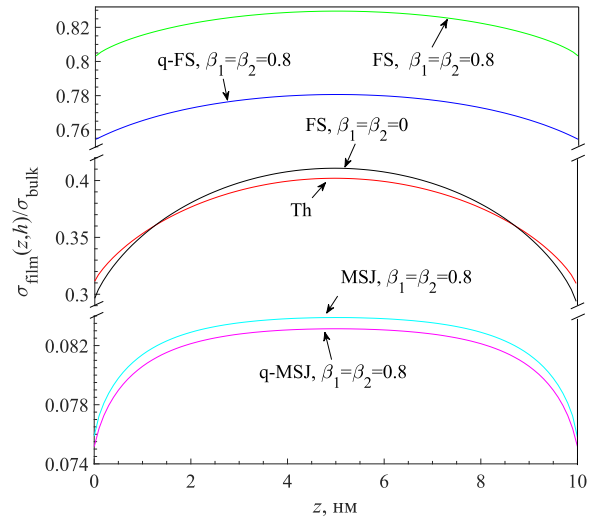


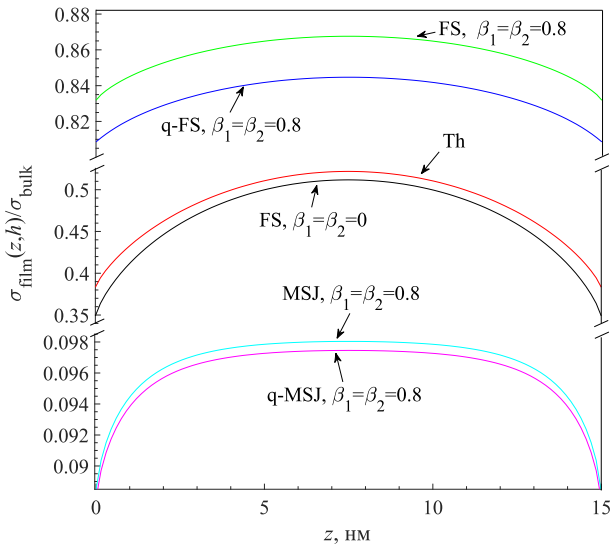
Рис. 1.6 Теоретические зависимости отношения средней удельной проводимости пленки $\langle \sigma_{\text{film}}(h) \rangle$ к табличному значению проводимости металла пленки σ_{bulk} от толщины пленки h для различных моделей проводимости.



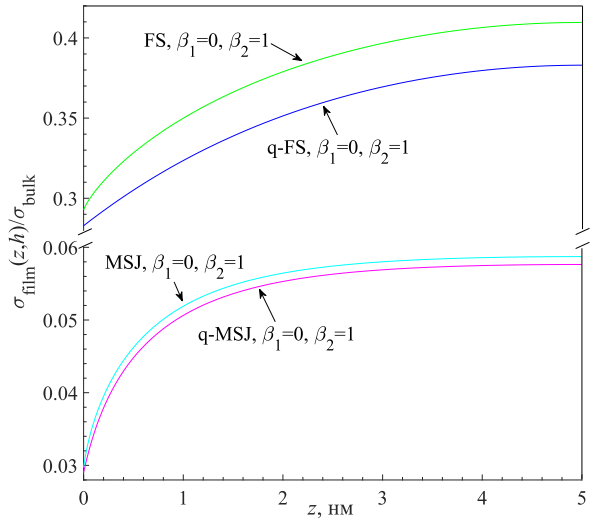
a)



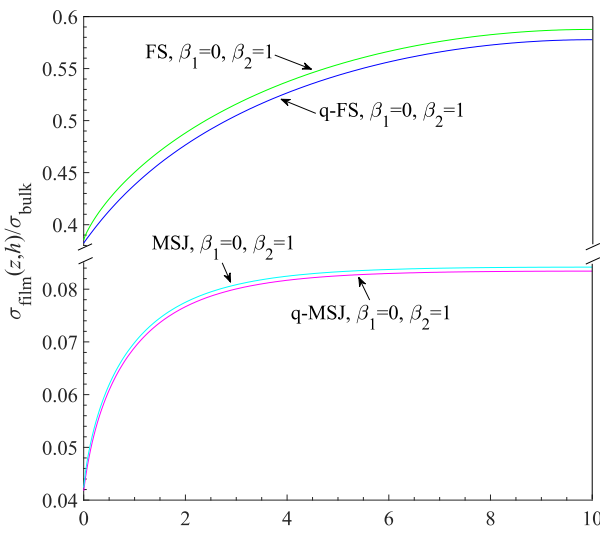
b)



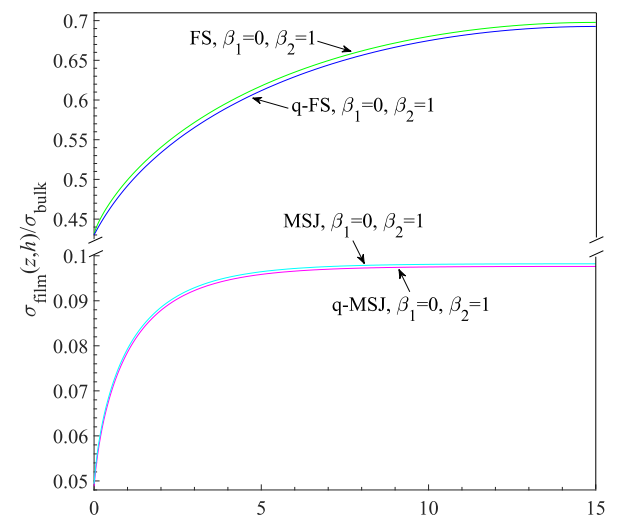
c)



d)



e)



f)

Рис. 1.7 Зависимости отношения локальной проводимости пленки $\sigma_{\text{film}}(z, h)$ к табличному значению проводимости металла пленки σ_{bulk} от координаты z при фиксированной толщине пленки h . На рис. *a)-c)* изображены графики, соответствующие $\beta_1=\beta_2=0.8$ и $\beta_1=\beta_2=0$. На рис. *d)-f)* изображены графики, соответствующие $\beta_1=0, \beta_2=1$. Графики *a), d)* построены для $h=5$ нм; графики *b), e)* – для $h=10$ нм; графики *c), f)* – для $h=15$ нм.

1.7 Итоги главы 1

Кратко сформулируем итоги первой главы.

Нанометровые металлические слои используются во множестве технических приложений. В подобных приложениях цена ошибки проектирования высока, поэтому при проектировании требуется проведение точных предварительных расчетов.

В видимом диапазоне длин волн прецизионный расчет коэффициента прохождения электромагнитных волн через тонкопленочные нанометровые структуры необходим для задачи поиска альтернативы индия-олова в технологии прозрачных электродов. В терагерцовом диапазоне расчеты коэффициента поглощения необходимы для проектирования поглотителей и детекторов микроболометров. Наконец, необходимо располагать зависимостью проводимости металлического слоя от его толщины в гигагерцовом частотном диапазоне для проектирования топологий больших интегральных схем с учетом паразитных эффектов.

В нанометровых слоях металла в полной мере проявляются размерные эффекты. Можно выделить, по крайней мере, три размерных эффекта, влияющих на проводимость. Внешний размерный эффект связан с рассеянием электронов на неоднородностях поверхностей металла; внутренний – с рассеянием на межкристаллитных границах; квантовый – с дискретностью энергетических состояний.

Вследствие описанных выше размерных эффектов удельная проводимость нанометровой пленки становится локальной характеристикой. Пленка, следовательно, представляет собой неоднородную материальную среду – среду с изменяющимся волновым числом. В современных работах последнее обстоятельство не учитывается: тонкая пленка моделируется либо при помощи однородного проводящего слоя конечной толщины, либо при помощи бесконечно тонкого импедансного слоя. На данном этапе становится очевидной необходимость разработки нового подхода (являющегося в некотором роде промежуточным), который позволит проводить более точные расчеты оптических коэффициентов неоднородных металлических слоев.

Глава 2

Применение метода последовательных приближений Пикара для решения задачи о распространении электромагнитной волны в неоднородной плоскостой среде

В данной главе используются материалы, опубликованные в статьях [A1-A2].

2.1 Постановка задачи о нахождении матрицы рассеяния неоднородной плоскостой структуры и ее решение

Естественное требование, предъявляемое к любому теоретическому методу, используемому в физике, состоит в том, что данный метод должен позволять предсказывать физические величины, измеряемые в эксперименте. В случае тонких пленок, при выполнении измерений на частоте такими физическими величинами являются амплитуды вектора напряженности электрического поля падающей, прошедшей и отраженной волн.

В случае нормального падения электромагнитной волны на плоскостой среду, с точки зрения эксперимента, существует всего два типа постановок задач. Рассмотрим их.

Первый тип постановки задачи (рис 2.1a) мы условимся называть «задача рассеяния одной падающей электромагнитной волны». На неоднородную плоскостой среду 2 из однородной среды 1 по нормали падает плоская электромагнитная волна с заданной амплитудой A_{inc} . Требуется найти амплитуду A_{trans} прошедшей в среду 3 волны (среда 3 так же, как и среда 1, считается однородной), а также амплитуду A_{refl} отраженной волны. В эксперименте величина амплитуды A_{inc} настраивается генератором, а амплитуды A_{trans} и A_{refl} измеряются, например, при помощи векторного анализатора цепей.

Второй тип задач (рис 2.1b) мы условимся называть «задача рассеяния двух встречных электромагнитных волн». На неоднородную плоскостой среду 2 с двух сторон – из однородной среды 1 и из однородной среды 3 – падают плоские электромагнитные волны с заданными амплитудами A_{1inc} и A_{3inc} соответственно. Требуется найти амплитуды волн, исходящих от неоднородной среды 2 A_{1out} и A_{3out} . В эксперименте величины амплитуд A_{1inc} и A_{3inc} настраиваются генератором, а амплитуды A_{1out} и A_{3out} измеряются.

Интуитивно может показаться, что это две разные задачи. Однако если абстрагироваться от того, какие из амплитуд считаются заданными, а какие необходимо

найти, обе эти задачи можно свести к одной – задаче о поиске матрицы рассеяния неоднородной среды 2. Покажем это.

Начнем с некоторой конкретизации и уточнений.

1) Будем рассматривать только нормальное падение электромагнитных волн на среду 2.

2) Введем декартову систему координат (см. рис. 2.2). Система координат на рис. 2.2 введена таким образом, что распространение волн происходит вдоль оси Oz , а вектор напряженности электрического поля имеет только одну проекцию (x -проекцию) отличную от нуля: $\mathbf{E} = \{E(z), 0, 0\}$. При этом вектор напряженности магнитного поля имеет лишь y -проекцию, отличную от нуля: $\mathbf{H} = \{0, H(z), 0\}$.

3) Пусть толщина среды 2 равна h и для определенности среда 2 занимает пространственный интервал $z \in [0, h]$. Чтобы не учитывать краевые эффекты, будем считать, что среда 2 является бесконечно протяженной вдоль осей Ox и Oy .

4) Будем рассматривать только немагнитные среды.

5) Пусть среды 1 и 3 однородны и обладают волновыми числами $k_1 = \text{const}$ и $k_3 = \text{const}$ соответственно, а среда 2 представляет собой плоскостроистую неоднородную структуру с волновым числом k_2 , которое зависит от координаты z : $k_2 = k_2(z)$.

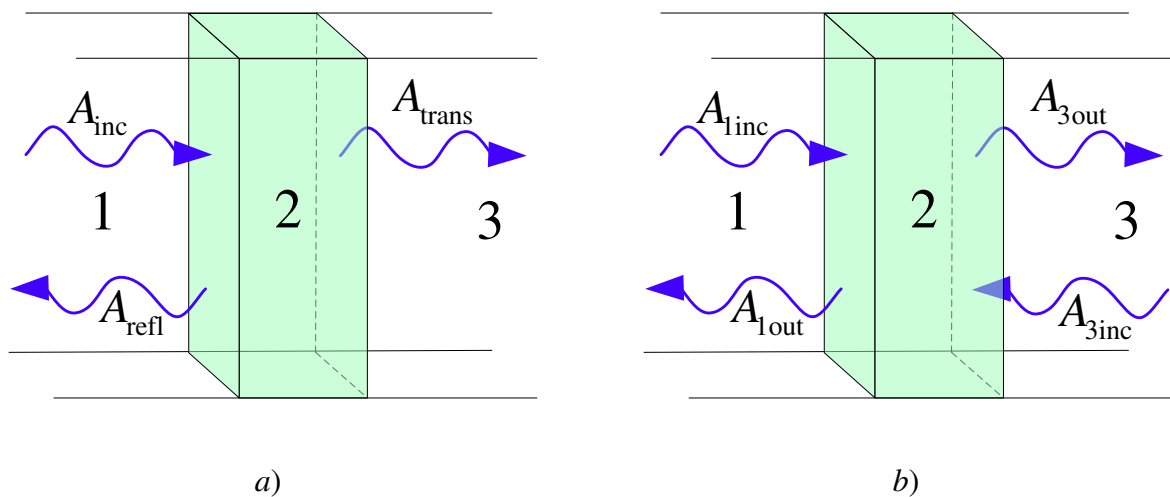


Рис. 2.1 Два типа задач о рассеянии электромагнитных волн на плоскостроистой структуре.

При вышеописанных предположениях комплексная амплитуда вектора напряженности электрического поля $E(z)$ в этих трех средах удовлетворяет уравнению Гельмгольца [A1-A2]:

$$E_i'' + k_i^2 E_i = 0, \quad (2.1)$$

где для i -той среды: $k_i^2 = \omega^2 \hat{\epsilon}_i \mu_0$ – волновое число, $\hat{\epsilon}_i = \epsilon_i + j\sigma_i/\omega$ – комплексная диэлектрическая проницаемость, ϵ_i – абсолютная диэлектрическая проницаемость, σ_i – удельная проводимость, μ_0 – магнитная постоянная, j – мнимая единица, ω – циклическая частота (используется гармоническая зависимость $e^{-j\omega t}$). Штрихами обозначается операция взятия частной производной по координате z .

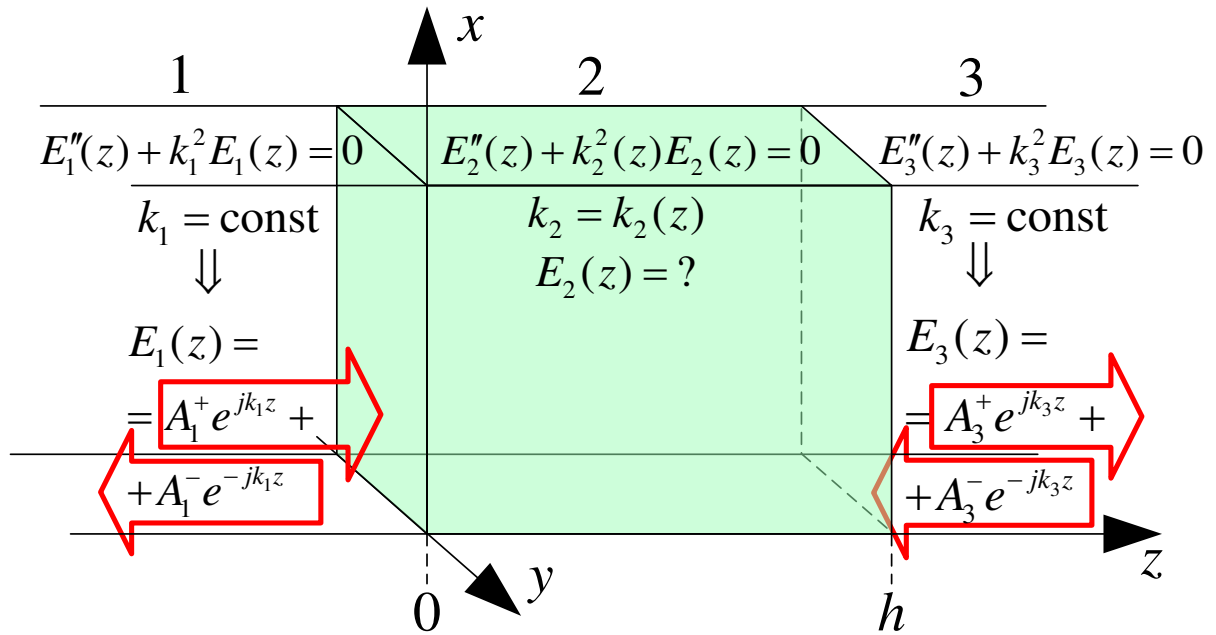


Рис. 2.2 Схема, поясняющая постановку задачи.

То, что среды 1 и 3 однородны, с математической точки зрения, означает, что в этих средах поле $E(z)$ вне зависимости от типа постановки задачи может быть представлено в виде суперпозиции двух встречных волн (см. рис 2.2):

$$E_i(z) = A_i^+ e^{jk_i z} + A_i^- e^{-jk_i z}, \quad i = 1, 3. \quad (2.2)$$

Здесь A_i^+ – амплитуды плоских волн, бегущих по направлению оси Oz , A_i^- – против направления оси Oz в i -ой среде.

Общее решение уравнения Гельмгольца (2.1) во 2-ой среде накладывает связь между амплитудами $A_{1,3}^\pm$. Действительно, поскольку рассматривается случай немагнитных сред, на границе раздела сред поле $E(z)$ обязано удовлетворять граничным условиям

$$A_1^+ + A_1^- = E_1(z=0) = E_2(z=0), \quad (2.3)$$

$$jk_1(A_1^+ - A_1^-) = E_1'(z=0) = E_2'(z=0), \quad (2.4)$$

$$A_3^+ e^{jk_3 h} + A_3^- e^{-jk_3 h} = E_3(z=h) = E_2(z=h), \quad (2.5)$$

$$jk_3(A_3^+ e^{jk_3 h} - A_3^- e^{-jk_3 h}) = E_3'(z=h) = E_2'(z=h). \quad (2.6)$$

Хотя во 2-ой среде вид общего решения уравнения (2.1) в случае произвольного $k_2(z)$ неизвестен, из того факта, что уравнение (2.1) является линейным дифференциальным уравнением второго порядка, следует, что общее решение уравнения (2.1) можно представить в виде [120]

$$E_2(z) = E_2(0)g_1(z) + E_2'(0)g_2(z), \quad (2.7)$$

где $g_{1,2}(z)$ – частные решения уравнения (2.1), удовлетворяющие граничным условиям:

$$g_1(0)=1, g_1'(0)=0, g_2(0)=0, g_2'(0)=1. \quad (2.8)$$

Равенства (2.8) гарантируют выполнение граничных условий (2.3)-(2.6). Таким образом, функции $g_{1,2}(z)$ определяются только зависимостью $k_2(z)$ и не зависят от $E_2(0)$ и $E_2'(0)$. Заметим, что g_1 безразмерна, а g_2 обладает размерностью [м]. Дифференцируя уравнение (2.7) по переменной z и рассматривая его при $z=h$, получим

$$E_2(h) = E_2(0)g_1(h) + E_2'(0)g_2(h), \quad (2.9)$$

$$E_2'(h) = E_2(0)g_1'(h) + E_2'(0)g_2'(h). \quad (2.10)$$

С учетом всего вышесказанного, подставляя (2.9) и (2.10) в граничные условия (2.3)-(2.6) получим систему четырех линейных алгебраических уравнений относительно амплитуд $A_{1,3}^\pm$:

$$A_1^+ + A_1^- = E_2(0), \quad (2.11)$$

$$jk_1(A_1^+ - A_1^-) = E_2'(0), \quad (2.12)$$

$$A_3^+ e^{jk_3 h} + A_3^- e^{-jk_3 h} = E_2(0)g_1(h) + E_2'(0)g_2(h), \quad (2.13)$$

$$jk_3(A_3^+ e^{jk_3 h} - A_3^- e^{-jk_3 h}) = E_2(0)g_1'(h) + E_2'(0)g_2'(h). \quad (2.14)$$

Исключим из этой системы $E_2(0)$ и $E_2'(0)$, получим систему из двух уравнений

$$\begin{cases} A_3^+ e^{jk_3 h} + A_3^- e^{-jk_3 h} = A_1^+(g_1(h) + jk_1 g_2(h)) + A_1^-(g_1(h) - jk_1 g_2(h)) \\ A_3^+ e^{jk_3 h} - A_3^- e^{-jk_3 h} = A_1^+(g_1'(h) + jk_1 g_2'(h)) / jk_3 + A_1^-(g_1'(h) - jk_1 g_2'(h)) / jk_3 \end{cases}. \quad (2.15)$$

Систему (2.15) можно записать в матричном виде

$$\begin{pmatrix} A_3^+ \\ A_3^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1^+ \\ A_1^- \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-jk_3h} \left\{ g_1(h) + \frac{k_1}{k_3} g_2'(h) + j \left(k_1 g_2(h) - \frac{g_1'(h)}{k_3} \right) \right\} & e^{-jk_3h} \left\{ g_1(h) - \frac{k_1}{k_3} g_2'(h) + j \left(-k_1 g_2(h) - \frac{g_1'(h)}{k_3} \right) \right\} \\ e^{jk_3h} \left\{ g_1(h) - \frac{k_1}{k_3} g_2'(h) + j \left(k_1 g_2(h) + \frac{g_1'(h)}{k_3} \right) \right\} & e^{jk_3h} \left\{ g_1(h) + \frac{k_1}{k_3} g_2'(h) + j \left(-k_1 g_2(h) + \frac{g_1'(h)}{k_3} \right) \right\} \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Матричные элементы S_{ij} могут записать в более компактном виде

$$S_{nm} = 0.5 e^{(-1)^n j k_3 h} \left\{ g_1(h) + (-1)^{n+m} \frac{k_1}{k_3} g_2'(h) + j \left((-1)^{m+1} k_1 g_2(h) + (-1)^n \frac{g_1'(h)}{k_3} \right) \right\}. \quad (2.17)$$

Напомним, что $g_{1,2}(z)$ определяются только зависимостью $k_2(z)$. Поэтому матричные элементы S_{nm} в (2.17) определяются зависимостью $k_2(z)$, волновыми числами k_1 и k_3 , а также толщиной h среды 2 и не зависят от величины напряженности электрического поля.

Таким образом, действительно, обе постановки задачи рассеяния сводятся к одной – задаче о поиске матрицы рассеяния S_{nm} неоднородной среды 2.

В случае задачи рассеяния одной падающей электромагнитной волны $A_1^+ = A_{\text{inc}}$, $A_1^- = A_{\text{refl}}$, $A_3^+ = A_{\text{trans}}$, $A_3^- = 0$. При такой постановке задачи обычно искомыми величинами являются коэффициенты отражения r и пропускания t по амплитуде вектора напряженности электрического поля:

$$r = \frac{A_1^-}{A_1^+} = -\frac{S_{21}}{S_{22}}, \quad t = \frac{A_3^+ e^{jk_3h}}{A_1^+} = \frac{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}}{S_{22}} e^{jk_3h}. \quad (2.18)$$

Также вводятся коэффициенты отражения R , пропускания T и поглощения Q по интенсивности электромагнитного поля:

$$R \equiv |r|^2, \quad T \equiv k_3 |t|^2 / k_1, \quad Q \equiv 1 - R - T. \quad (2.19)$$

В случае задачи рассеяния двух встречных электромагнитных волн $A_1^+ = A_{\text{inc}}$, $A_1^- = A_{\text{out}}$, $A_3^+ = A_{\text{out}}$, $A_3^- = A_{\text{inc}}$. При такой постановке задачи обычно интересуются только коэффициентом поглощения Q , рассчитываемым по формуле:

$$Q = \frac{k_1 |A_1^+|^2 + k_3 |A_3^-|^2 - k_1 |A_1^-|^2 - k_3 |A_3^+|^2}{k_1 |A_1^+|^2 + k_3 |A_3^-|^2} = 1 - \frac{k_1 |A_1^-|^2 + k_3 |A_3^+|^2}{k_1 |A_1^+|^2 + k_3 |A_3^-|^2}, \quad (2.20)$$

где неизвестные амплитуды рассчитывается по формулам

$$A_3^+ = \frac{S_{11}S_{22} - S_{12}S_{21}}{S_{22}} A_1^+ + \frac{S_{12}}{S_{22}} A_3^-, \quad A_1^- = -\frac{S_{21}}{S_{22}} A_1^+ + \frac{1}{S_{22}} A_3^-. \quad (2.21)$$

Задачу нахождения S_{nm} будем называть задачей о нахождении матрицы рассеяния неоднородной плоскостройной структуры.

Главный результат, полученный в данной диссертационной работе, состоит в разработке способа приближенного аналитического вычисления S_{nm} при помощи метода последовательных приближений Пикара. Введем следующий интегральный оператор

$$\hat{J}(f(z)) \equiv -\int_0^z dz_1 \left(\int_0^{z_1} dz_2 k_2^2(z_2) f(z_2) \right), \quad (2.22)$$

здесь $f(z)$ – произвольная функция. Введем также степень α оператора \hat{J} (α здесь целое число) по следующим правилам. Если $\alpha < 0$, то $\hat{J}^\alpha(f(z)) \equiv 0$. Если $\alpha = 0$, $\hat{J}^\alpha(f(z)) \equiv f(z)$.

Если же $\alpha > 0$, то действие оператора \hat{J}^α на функцию $f(z)$ равно последовательному действию α раз оператора \hat{J} на функцию $f(z)$, то есть

$$\begin{aligned} \hat{J}^\alpha(f(z)) = & \quad (2.23) \\ = (-1)^\alpha \int_0^z dz_1 \int_0^{z_1} dz_2 k_2^2(z_2) \int_0^{z_2} dz_3 \int_0^{z_3} dz_4 k_2^2(z_4) \dots & \int_0^{z_{2\alpha-4}} dz_{2\alpha-3} \int_0^{z_{2\alpha-3}} dz_{2\alpha-2} k_2^2(z_{2\alpha-2}) \int_0^{z_{2\alpha-2}} dz_{2\alpha-1} \int_0^{z_{2\alpha-1}} dz_{2\alpha} k_2^2(z_{2\alpha}) f(z_{2\alpha}). \end{aligned}$$

В следующем параграфе данной главы будет доказано, что матрицу S_{nm} для среды 2 можно представить в виде ряда:

$$S_{nm} = 0.5 e^{(-1)^n j k_3 h} \sum_{\alpha=1}^{\alpha=\infty} B_{nm}^{[\alpha]}, \quad (2.24)$$

где матрицы $B_{nm}^{[\alpha]}$ вводятся следующим образом:

$$B_{nm}^{[\alpha]} = \left\{ \hat{J}^{\alpha-1}(1) + (-1)^{n+m} \frac{k_1}{k_3} \frac{\partial \hat{J}^{\alpha-1}(z)}{\partial z} + j \left[(-1)^{m+1} k_1 \hat{J}^{\alpha-2}(z) + \frac{(-1)^n}{k_3} \frac{\partial \hat{J}^\alpha(1)}{\partial z} \right] \right\} \Big|_{z=h}. \quad (2.25)$$

Непосредственно из формул (2.23) и (2.25) можно доказать следующее утверждение. В случае, когда $k_2^2(z)$ пропорционально ω , матрицы $B_{nm}^{[\alpha]}$ могут быть представлены в виде $B_{nm}^{[\alpha]} = \omega^{\alpha-1} \tilde{B}_{nm}^{[\alpha]}$, где матрицы $\tilde{B}_{nm}^{[\alpha]}$ не зависят от ω . Пропорциональность $k_2^2(z) \sim \omega$ выполняется для металлов вплоть до терагерцевого диапазона частот. Действительно, для металлов $\varepsilon_2 \ll \sigma_2/\omega$, а $\sigma_2(z)$ слабо зависит от ω , поэтому $k_2^2(z) = \mu \omega \sigma(z) \sim \omega$. Таким образом, в случае, когда среда 2 представляет собой слой металла, ряд (2.24) фактически представляет собой ряд по степеням ω и при этом первое слагаемое этого ряда не зависит от ω .

Разумеется, при проведении расчетов ряд (2.24) необходимо обрывать на каком-то слагаемом. В связи с этим удобно ввести N -ое приближение для матрицы S_{nm} :

$$S_{nm}^{[N]} = 0.5 e^{(-1)^n j k_3 h} \sum_{\alpha=1}^{N+1} B_{nm}^{[\alpha]}. \quad (2.26)$$

Из приведенных выше свойств матрицы $B_{nm}^{[\alpha]}$ можно заключить, что $S_{nm}^{[N]}$ является полиномом ω степени N (если не учитывать фазового множителя $e^{(-1)^n jk_3 h}$). При этом если вместо S_{nm} в первую из формул (2.16) подставить $S_{nm}^{[N]}$, матричное уравнение (2.16) будет выполняться неточно. Этот факт удобно записать в виде

$$\begin{pmatrix} A_3^+ \\ A_3^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11}^{[N]} & S_{12}^{[N]} \\ S_{21}^{[N]} & S_{22}^{[N]} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1^+ \\ A_1^- \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta A^+ \\ \delta A^- \end{pmatrix}, \quad (2.27)$$

где δA^\pm – погрешности, с которыми выполняется матричное равенство (2.27). Оказывается (это будет доказано в следующем параграфе), что метод Пикара позволяет найти точное неравенство для оценки $|\delta A^\pm|$. Это неравенство приведено ниже.

$$\begin{aligned} |\delta A^\pm| &\leq 0.5A \left(\sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{p_2^{2n}}{(2n)!} + \frac{p_1}{p_3} \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{p_2^{2n}}{(2n)!} + p_1 \sum_{n=N}^{\infty} \frac{p_2^{2n}}{(2n+1)!} + \frac{p_2}{p_3} \sum_{n=N+2}^{\infty} \frac{p_2^{2n-1}}{(2n-1)!} \right) = \\ &= 0.5A \left(\left(\operatorname{ch}(p_1) - \sum_{n=0}^N \frac{p_2^{2n}}{(2n)!} \right) \left(1 + \frac{p_1}{p_3} \right) + \frac{p_1}{p_2} \left(\operatorname{sh}(p_2) - \sum_{n=0}^{N-1} \frac{p_2^{2n+1}}{(2n+1)!} \right) + \frac{p_2}{p_3} \left(\operatorname{sh}(p_2) - \sum_{n=0}^N \frac{p_2^{2n+1}}{(2n+1)!} \right) \right), \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$p_2 = h \max_{z \in [0, h]} |k_2(z)|, \quad (2.29)$$

$$p_1 = h|k_1|, \quad p_3 = h|k_3|, \quad (2.30)$$

$$A \geq |A_1^+| + |A_1^-|. \quad (2.31)$$

Здесь $\max |k_2| = \max_{z \in [0, h]} |k_2(z)|$ – максимальное значение модуля волнового числа во 2-ой среде, а $p_{1,2,3}$ – безразмерные параметры, $\operatorname{ch}(x)$ и $\operatorname{sh}(x)$ – гиперболический косинус и синус. Как видно из формул (2.29)-(2.30), по своей сути $p_{1,2,3}$ характеризуют отношение характерного масштаба длины, на котором изменяется электромагнитное поле, к толщине h среды 2 (т.е. к толщине пленки). Действительно, параметр $p_2 \approx h/\delta$, где δ – толщина скин-слоя в металле (в среде 2). Параметры $p_{1,3} \approx h/\lambda_{1,3}$, где $\lambda_{1,3}$ – длина волны электромагнитного излучения в среде 1 и среде 3 соответственно. Для металлов в СВЧ диапазоне $p_{1,3} \ll p_2 \ll 1$ (напомним, что ультратонкими называются пленки, для которых $h/\delta \ll 1$, см. параграф 1.1, поэтому для ультратонких пленок заведомо оказывается, что $p_{1,3} \ll p_2 \ll 1$). Коэффициент p_2 по сути являются малым параметром, по которым проводится разложение $S_{nm}^{[N]}$ в ряд (2.26). Поэтому при $p_{1,2,3} \ll 1$ в ряде (2.26) достаточно учитывать только первое слагаемое. Отметим, однако, что при $N \rightarrow \infty$, погрешность $|\delta A^\pm|$ в выражении (2.28) стремится к нулю при любых конечных $p_{1,2,3}$. Это означает, что ряд (2.24) сходится при любых конечных $p_{1,2,3}$. В параграфе 2.4 показано, что при $N=0$ (т.е. в нулевом приближении), матрица рассеяния в (2.26) выглядит следующим образом:

$$S_{nm}^{(0)} = 0.5e^{(-1)^n jk_3 h} \{k_3 + (-1)^{n+m} k_1 + (-1)^{n+1} jh <k_2^2 >\} / k_3, \quad (2.32)$$

где $<k_2^2 >$ – усредненное по толщине среды 2 волновое число, определяемое по формуле

$$<k_2^2 > = \frac{1}{h} \int_0^h k_2^2(z) dz. \quad (2.33)$$

Неравенство (2.31) служит нижней оценкой для коэффициента A . Таким образом, в качестве коэффициента A можно выбрать любую величину большую, чем $|A_1^+| + |A_1^-|$. При помощи такого произвола в выборе коэффициента A его всегда можно выразить через известные амплитуды (амплитуды падающих на среду 2 волн).

Например, в случае задачи рассеяния одной падающей электромагнитной волны (когда $A_1^+ = A_{\text{inc}}$, $A_1^- = A_{\text{refl}}$, $A_3^+ = A_{\text{trans}}$, $A_3^- = 0$) удобно положить $A = 2|A_1^+| = 2|A_{\text{inc}}|$. При этом очевидно, что $A = 2|A_1^+| \geq |A_1^+| + |A_1^-|$, поскольку модуль амплитуды отраженной волны $|A_1^-|$ должен быть меньше, чем модуль амплитуды падающей волны $|A_1^+|$.

В случае задачи рассеяния двух встречных электромагнитных волн (когда $A_1^+ = A_{\text{inc}}$, $A_1^- = A_{\text{out}}$, $A_3^+ = A_{\text{out}}$, $A_3^- = A_{\text{inc}}$) удобно положить

$$A = |A_1^+| + \sqrt{|A_1^+|^2 + k_3 |A_3^-|^2 / k_1} = |A_{\text{inc}}| + \sqrt{|A_{\text{inc}}|^2 + k_3 |A_{\text{inc}}|^2 / k_1}.$$

Действительно, условие того, что исходящий от среды 2 поток энергии должен быть меньше, чем поток падающей на среду 2 энергии может быть записано в виде

$$k_1 |A_1^+|^2 + k_3 |A_3^-|^2 \geq k_1 |A_1^-|^2 + k_3 |A_3^+|^2.$$

Очевидно, что отсюда следует неравенство

$$|A_1^+|^2 + k_3 |A_3^-|^2 / k_1 \geq |A_1^-|^2.$$

Поэтому

$$A = |A_1^+| + \sqrt{|A_1^+|^2 + k_3 |A_3^-|^2 / k_1} \geq |A_1^+| + |A_1^-|.$$

Прежде чем приступить к доказательству вышеизложенного алгоритма приближенного расчета матрицы рассеяния $S_{nm}^{[N]}$, ниже мы проведем сравнение существующих приближенных методов решения задачи о распространении волн в неоднородных средах и предлагаемого подхода для отдельно отстоящей тонкой пленки. Результаты сравнения приведены ниже. Все расчетные формулы, использующиеся для построения графиков, получены в приложении J.

Для предлагаемого подхода, основанного на методе Пикара, мы будем использовать обозначение «Pic($N = 0$)» для нулевого приближения, «Pic($N = 1$)» – для первого и т.д.; для метода ВКБ будем использовать обозначение «WKB»; для метода характеристической

матрицы – «Ch»; для метода усреднения – «Av»; для импедансных граничных условий (условий Щукина-Леонтовича) – «Imp»; для формул Френеля (1.2) – «Fr»; для численного метода (метода Рунге-Кутты 4-ого порядка, который используется для решения уравнения Гельмгольца (2.1) в неоднородной среде 2) – «Num». Метод «Num» мы будем считать наиболее точным и будем рассматривать его в качестве «эталонного».

В качестве примера на рис. 2.3 изображены графики зависимости коэффициента отражения R (по интенсивности электромагнитного излучения) от частоты для пленки серебра ($l_0 = 53.3$ нм, $n_e = 5.86 \times 10^{28}$ м⁻³) толщиной 3 нм. Для расчета проводимости использовалась квантовая модель Фукса с коэффициентами зеркальности $\beta_1 = \beta_2 = 0$, в которой учитывалась частотная зависимость проводимости, согласно формуле (1.27). Толщина 3 нм была выбрана специально, поскольку для такой толщины $R \sim 50\%$, что интересно с практической точки зрения (см. параграф 1.4). Точное равенство $R = 50\%$ выполняется для частоты 81.5 ТГц. Из рисунка видно, что методы Pic($N = 0$), Pic($N = 1$), Ch, Num и Fr дают адекватные результаты, а методы WKB, Imp, Av приводят к значительным ошибкам.

Из увеличительных выносок, приведенных на рис. 2.3, следует, что во всем оптическом диапазоне метод Pic($N=0$) приводит к погрешностям расчета, не превышающим 1%. Интересно заметить, что формулы Френеля даже еще более точно описывают зависимость R от частоты. Однако в параграфе 4.1 будет показано, что именно метод Pic($N=0$) позволяет существенно упростить расчетные формулы для оптических коэффициентов. Использование же формул Френеля приводит к гораздо более громоздким выражениям. Кроме того для достаточно толстых пленок применение метода Пикара приводит к более точным результатам. В качестве следующего примера на рис.2.4. изображены графики зависимости коэффициента отражения R от частоты для случая пленок серебра толщиной 20 нм. Из рисунка видно, что на частотах порядка десятков ТГц метод Pic($N=0$) более корректно описывает частотную зависимость R , чем формулы Френеля. Подобные расчеты для достаточно толстых пленок необходимы, например, для оценки теплового нагрева металлических зеркал, используемых в качестве защитных экранов космических спутников. С одной стороны, вес подобных зеркал должен быть минимальным, поэтому пленки следует делать достаточно тонкими. С другой стороны, пленки все же должны обладать достаточной толщиной, чтобы они играли роль хорошего зеркала, а их нагрев был незначителен.

Отметим также, что область применимости предлагаемого подхода не ограничивается тонкими металлическими пленками. Подход хорошо работает и для диэлектрических плоскостойких слоев неоднородных по толщине. В качестве третьего

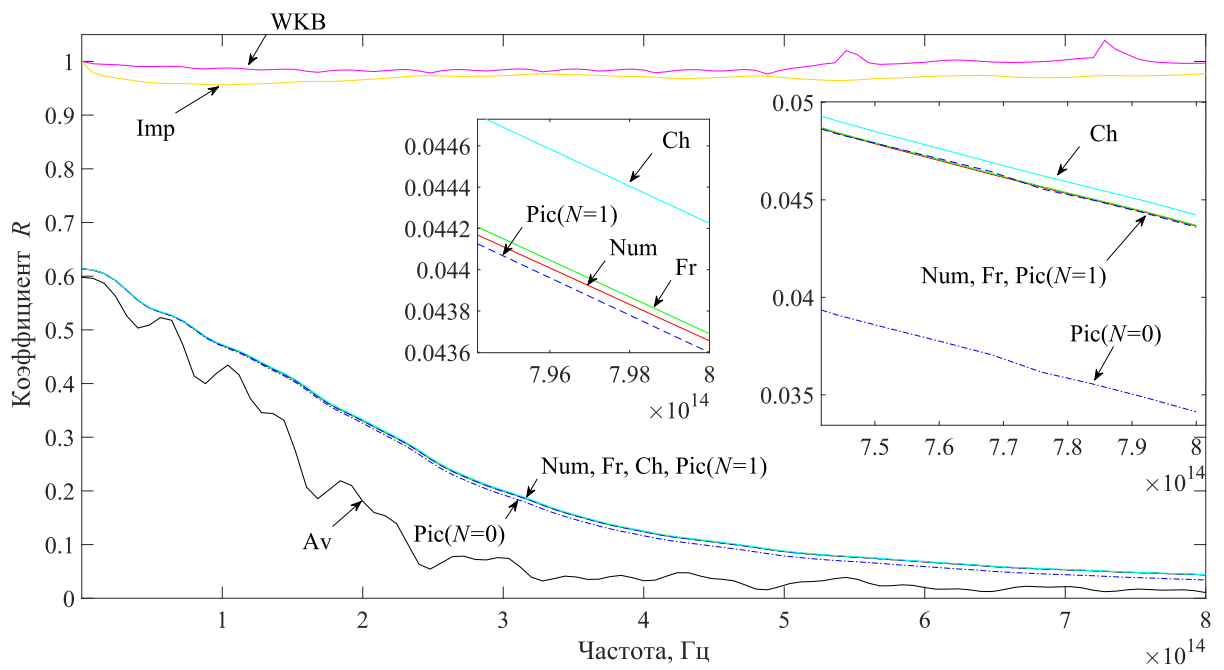


Рис. 2.3 Графики зависимости коэффициента отражения R (по интенсивности электромагнитного излучения) от частоты для пленки серебра толщиной 3 нм.

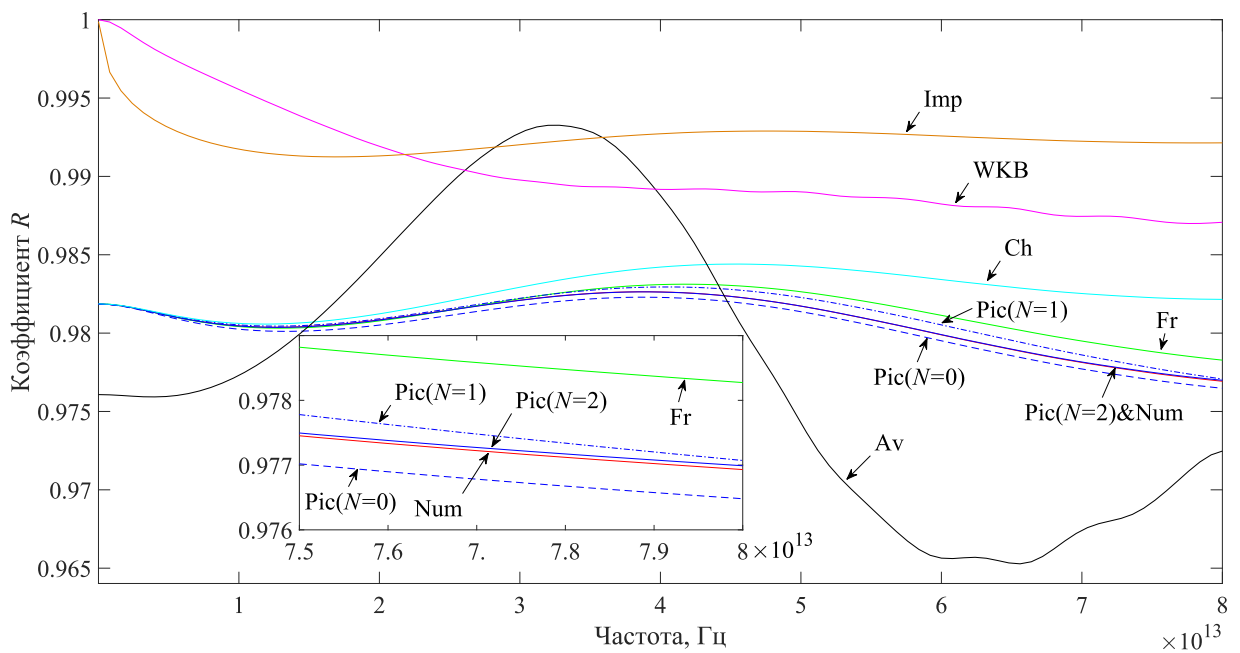


Рис. 2.4 Графики зависимости коэффициента отражения R (по интенсивности электромагнитного излучения) от частоты для пленки серебра толщиной 20 нм.

примера проведем расчеты для диэлектрической пластины, показатель преломления которой не зависит от частоты и изменяется по закону

$$n(z) = 4 + 0.25(1 - \cos(2\pi z/h)).$$

На рис. 2.5. приведены графики зависимости коэффициента отражения R от произведения $k_0h = \omega h(\mu_0\epsilon_0)^{1/2}$. Отметим, что произведение k_0h по порядку величины совпадает с безразмерным параметром p_2 , входящим в формулу для оценки погрешностей (2.28). Как видно из формулы (2.28) с ростом p_2 увеличивается и погрешность N -ого приближения. Поскольку $k_0h = \omega h(\mu_0\epsilon_0)^{1/2}$ с увеличением частоты для расчетов необходимо использовать приближения все более высоких порядков. Данный пример также иллюстрирует границы применимости формул Френеля (1.7).

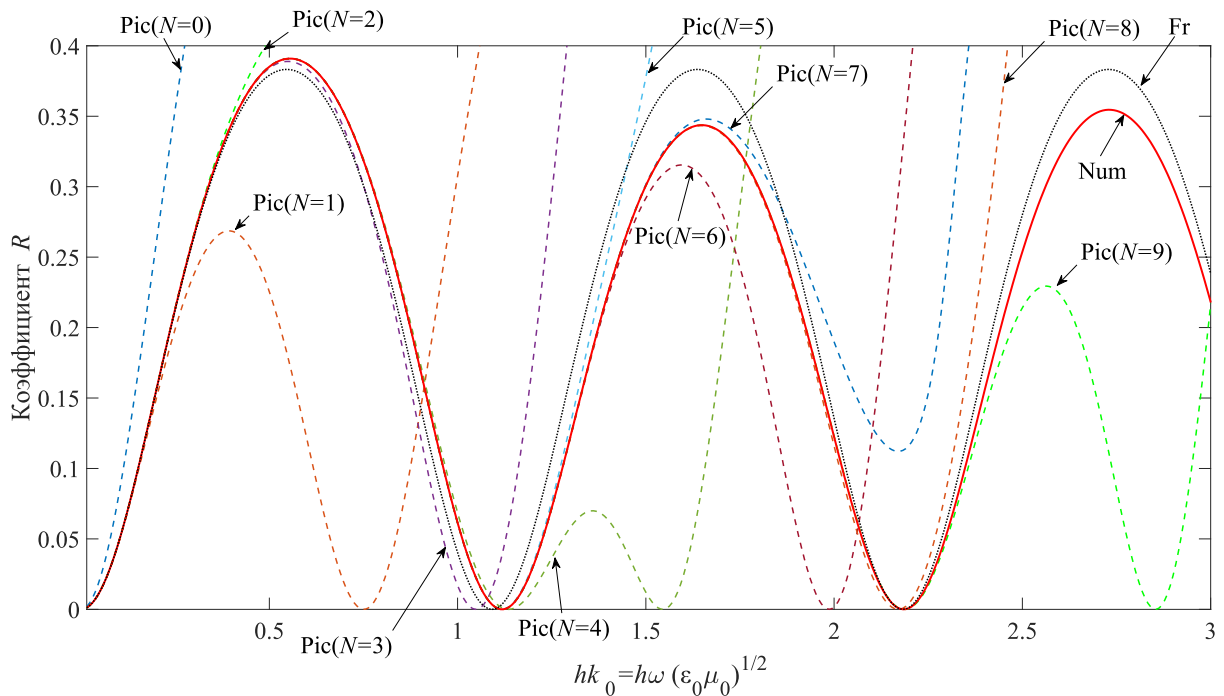


Рис. 2.5 Зависимости коэффициента отражения R от произведения $k_0h = \omega h(\mu_0\epsilon_0)^{1/2}$ для неоднородной диэлектрической пластины.

2.2 Вывод приближенной формулы для матрицы рассеяния с учетом погрешностей при помощи метода Пикара

Как следует из общего формализма, изложенного в параграфе 2.1, алгоритм нахождения элементов матрицы рассеяния S_{ij} сводится к тому, чтобы:

- 1) найти функции $g_1(z)$ и $g_2(z)$;
- 2) посчитать производные $g'_2(z) \equiv \partial g_2(z) / \partial z$, $g'_1(z) \equiv \partial g_1(z) / \partial z$;

3) выполнить подстановку $z=h$ и найти $g_1(h), g_2(h), g_1'(h), g_2'(h)$;

4) подставить $g_1(h), g_2(h), g_1'(h), g_2'(h)$ в формулу (2.17).

Функции $g_{1,2}(z)$ удовлетворяют уравнению Гельмгольца

$$g_i''(z) + k_2^2(z)g_i(z) = 0, \quad i=1,2 \quad (2.34)$$

при граничных условиях

$$g_1(0) = 1, \quad g_1'(0) = 0, \quad (2.35)$$

$$g_2(0) = 0, \quad g_2'(0) = 1. \quad (2.36)$$

Для получения решений для $g_1(z)$ и $g_2(z)$, удовлетворяющих граничным условиям (2.35)-(2.36), воспользуемся методом последовательных приближений Пикара [121]. Проинтегрируем два раза уравнение Гельмгольца (2.34) от 0 до некоторого $z \in [0, h]$, получим

$$g_i(z) = g_i(0) + z \cdot g_i'(0) - \int_0^z dz_1 \left(\int_0^{z_1} k_2^2(z_2) g_i(z_2) dz_2 \right). \quad (2.37)$$

Выражение (2.37) удобно использовать для реализации метода последовательных приближений. Для сокращения выкладок введем обозначение $g_i^{[0]}(z) = g_i(0) + z \cdot g_i'(0)$, а операцию умножения на $-k_2^2(z)$ и последующего двойного интегрирования кратко запишем в виде действия линейного оператора \hat{J} . Таким образом, результат действия оператора \hat{J} на произвольную функцию $f(z)$ записывается в виде:

$$\hat{J}(f(z)) \equiv - \int_0^z \int_0^{z_1} k_2^2(z_2) f(z_2) dz_2 dz_1. \quad \text{Тогда выражение (2.37) может быть переписано в более}$$

простой форме:

$$g_i = g_i^{[0]} + \hat{J}(g_i). \quad (2.38)$$

Последовательно подставляя $g_i(z)$ из левой части равенства (2.38) в его правую часть, легко показать, что

$$g_i = g_i^{[0]} + \hat{J}(g_i^{[0]}) + \hat{J}(\hat{J}(g_i^{[0]})) + \hat{J}(\hat{J}(\hat{J}(g_i^{[0]}))) + \dots \quad (2.39)$$

Далее для удобства записи формулы (2.39) введем степень l оператора \hat{J} , которую будем кратко записывать как \hat{J}^l (здесь l – целое число). Определим \hat{J}^l следующим образом. При $l > 0$ запись $\hat{J}^l(f(z))$ обозначает l -кратное последовательное применение оператора \hat{J} к функции $f(z)$. При $l=0$ будем считать, что $\hat{J}^l(f(z)) \equiv f(z)$. При $l < 0$ будем считать, что $\hat{J}^l(f(z)) \equiv 0$. Тогда формулу (2.39) можно записать в виде ряда

$$g_i(z) = g_i^{[0]}(z) + \hat{J}(g_i^{[0]}(z)) + \hat{J}^2(g_i^{[0]}(z)) + \hat{J}^3(g_i^{[0]}(z)) + \dots = \sum_{l=0}^{\infty} \hat{J}^l(g_i^{[0]}(z)) . \quad (2.40)$$

Если считать, что ряд (2.39) сходится, то $g_i^{[0]}(z)$ можно интерпретировать, как нулевое приближение к функции $g_i(z)$. Соответственно в качестве N -ого приближения к функции $g_i(z)$ логично рассматривать величину:

$$g_i^{[N]}(z) = (1 + \hat{J} + \hat{J}^2 + \dots + \hat{J}^N)g_i^{[0]}(z) . \quad (2.41)$$

Для более краткой записи (2.41) удобно ввести операторы \hat{L} , \hat{L}_N , определяемые следующими соотношениями

$$\hat{L} = \sum_{l=0}^{\infty} \hat{J}^l, \quad \hat{L}_N = \sum_{l=0}^N \hat{J}^l . \quad (2.42)$$

В таком случае $g_i^{[N]}(z) = \hat{L}_N(g_i^{[0]}(z))$, $g_i(z) = \hat{L}(g_i^{[0]}(z))$. Операторы \hat{L}_N и \hat{L} также являются линейными операторами.

Итак, мы теперь располагаем приближенным решением $g_i^{[N]}(z)$. Подставляя $g_i^{[N]}(z)$ и $g_i^{[N]}(z)$ при $z=h$ в формулу (2.17) мы в принципе найдем матрицу рассеяния. Однако на данном этапе встает вопрос о том, каким образом следует выбрать номер итерации N при подстановке. Покажем, что выбирать N имеет смысл таким образом, чтобы матрица рассеяния представлялась бы в виде ряда по степеням ω . Действительно, такое представление матрицы рассеяния крайне удобно для тонких пленок. С одной стороны, как это было показано в параграфе 1.1, оптические коэффициенты ультратонких пленок не зависят от частоты электромагнитного излучения, поскольку $h/\delta \ll 1$ (здесь δ – толщина скин-слоя в металле пленки, которую можно оценить как $(\omega\mu_0\sigma_{\text{bulk}}/2)^{-1/2}$). Однако, с другой стороны, δ уменьшается при увеличении частоты, поэтому существует частота, при которой неравенство $h/\delta \ll 1$ перестает выполняться. Тогда матрица рассеяния начинает зависеть от ω .

Итак, в общем случае матрица рассеяния зависит от ω . Но при $\omega \rightarrow 0$ в достаточно широком диапазоне частот (уже начиная с терагерцового диапазона) эта зависимость от ω исчезает. Таким образом, можно предположить, что разложение матрицы рассеяния в ряд по степеням ω представляет собой разложение в ряд по некоторому малому параметру p_1 , который пропорционален ω . Ниже мы докажем справедливость этого предположения. В подобном контексте разложение матрицы рассеяния в виде ряда по степеням ω представляется весьма обоснованным.

Если считать, что проводимость среды 2 не зависит от частоты, а сама среда 2 является достаточно хорошим проводником, то квадрат волнового числа среды 2

оказывается пропорционален ω . Действительно, для металлов $k_{\text{metal}}^2 = i\mu_0\omega\sigma$, поэтому для неоднородной тонкой пленки (т.е. для среды 2) $k_2^2(z) = i\mu_0\omega\sigma_2(z) \sim \omega$. Поскольку

$$\hat{J}(f(z)) \equiv -\int_0^z \int_0^{z_1} k_2^2(z_2) f(z_2) dz_2 dz_1, \text{ то каждое действие оператора } \hat{J} \text{ приводит к появлению}$$

множителя пропорционального ω . Таким образом, функции $g_i^{[N]}(z)$ и их производные $g_i'^{[N]}(z)$ являются полиномами ω степени N . В формулу (2.17) для элементов матрицы рассеяния, однако, входят также волновые вектора 1-ой и 3-ей сред. Как это уже было сказано в параграфе 2.1, мы будем считать, что среды 1 и 3 являются однородными немагнитными диэлектрическими средами, поэтому $k_{1,3} = \omega\sqrt{\epsilon_{1,3}\mu_0}$. Если считать, что абсолютные диэлектрические проницаемости $\epsilon_{1,3}$ сред 1 и 3 не зависят от ω , то волновые вектора $k_{1,3}$ оказываются пропорциональны ω .

Итак, пусть для функции $g_1(z)$ мы выбрали приближение N . Следовательно, $g_1(z)$ является полиномом ω степени N . Тогда для того, чтобы все слагаемые внутри фигурных скобок в формуле (2.17)

$$S_{nm} = 0.5e^{(-1)^n jk_3 h} \left\{ g_1(h) + (-1)^{n+m} \frac{k_1}{k_3} g_2'(h) + j \left((-1)^{m+1} k_1 g_2(h) + (-1)^n \frac{g_1'(h)}{k_3} \right) \right\}$$

также являлись бы полиномами ω степени N , необходимо (с учетом того, что $k_{1,3} \sim \omega$) выбрать для $g_2'(z)$ также N -ое приближение, для $g_2(z)$ выбрать $(N-1)$ -ое приближение, а для $g_1'(z)$ выбрать $(N+1)$ -ое приближение. Однако при подстановке приближений $g_1^{[N]}(h)$, $g_2'^{[N]}(h)$, $g_2^{[N-1]}(h)$, $g_1'^{[N+1]}(h)$ в формулу (2.17), равенство (2.17) уже не будет выполняться точно. Этот факт можно отразить путем введения погрешностей $\Delta_1^{[N]}$, $\Delta_2^{[N]}$, $\Delta_1'^{[N]}$, $\Delta_2'^{[N]}$, определяемых равенствами

$$g_1(z) = g_1^{[N]}(z) + \Delta_1^{[N]}(z), \quad (2.43)$$

$$g_2(z) = g_2^{[N-1]}(z) + \Delta_2^{[N-1]}(z), \quad (2.44)$$

$$g_1'(z) = g_1'^{[N+1]}(z) + \Delta_1'^{[N+1]}(z), \quad (2.45)$$

$$g_2'(z) = g_2'^{[N]}(z) + \Delta_2'^{[N]}(z). \quad (2.46)$$

Стоит отметить, что $\Delta_1^{[N]}$, $\Delta_2^{[N]}$, $\Delta_1'^{[N]}$, $\Delta_2'^{[N]}$ являются в общем случае комплексными функциями координаты z . Однако Метод Пикара позволяет найти неравенства, ограничивающие по модулю $\Delta_1^{[N]}$, $\Delta_2^{[N]}$, $\Delta_1'^{[N]}$, $\Delta_2'^{[N]}$. Ниже эти неравенства приведены в четырех виде утверждений (их доказательства приведены в приложении К):

Утверждение №1: $|\Delta_1^{[N]}(h)| = |g_1(h) - g_1^{[N]}(h)| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} p_2^{2n} / (2n)!, \quad (2.47)$

Утверждение №2: $|\Delta_2^{[N]}(h)| = |g_2(h) - g_2^{[N]}(h)| \leq h \sum_{n=N+1}^{\infty} p_2^{2n} / (2n+1)!, \quad (2.48)$

Утверждение №3: $|\Delta_1'^{[N]}(h)| = |g_1'(h) - g_1'^{[N]}(h)| \leq \max |k_2| \sum_{n=N+1}^{\infty} p_2^{2n-1} / (2n-1)! \quad (2.49)$

Утверждение №4: $|\Delta_2'^{[N]}(h)| = |g_2'(h) - g_2'^{[N]}(h)| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} p_2^{2n} / (2n)! \quad (2.50)$

Здесь $p_2 = \max |k_2| h$ – безразмерный параметр, $\max |k_2| = \max_{z \in [0, h]} |k_2(z)|$ – максимальное значение модуля волнового числа в пленке (на интервале $z \in [0, h]$). Безразмерный параметр p_2 обладает очевидным физическим смыслом: $p_2 \approx h/\delta$, где δ – толщина скин-слоя металла пленки.

Подставим (2.43)-(2.46) в формулу (2.17), получим точное равенство

$$S_{nm} = S_{nm}^{[N]} + \Delta S_{nm}^{[N]}, \quad (2.51)$$

где $S_{nm}^{[N]}$ и $\Delta S_{nm}^{[N]}$ определяются равенствами

$$S_{nm}^{[N]} = 0.5 e^{(-1)^n j k_3 h} \left\{ g_1^{[N]}(h) + (-1)^{n+m} \frac{k_1}{k_3} g_2'^{[N]}(h) + j \left((-1)^{m+1} k_1 g_2^{[N-1]}(h) + (-1)^n \frac{g_1'^{[N+1]}(h)}{k_3} \right) \right\}, \quad (2.52)$$

$$\begin{aligned} \Delta S_{nm}^{[N]} = & 0.5 e^{(-1)^n j k_3 h} \Delta_1^{[N]}(h) + 0.5 e^{(-1)^n j k_3 h} (-1)^{n+m} \frac{k_1}{k_3} \Delta_2'^{[N]}(h) + \\ & + 0.5 j e^{(-1)^n j k_3 h} (-1)^{m+1} k_1 \Delta_2^{[N-1]}(h) + 0.5 j e^{(-1)^n j k_3 h} (-1)^n \frac{\Delta_1'^{[N+1]}(h)}{k_3}. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Матрицу $S_{nm}^{[N]}$ мы будем называть N -ым приближением матрицы рассеяния S_{nm} , а величины $\Delta S_{nm}^{[N]}$ мы будем называть погрешностями N -ого приближения. Используя известные из комплексного анализа формулы $|a+b| \leq |a| + |b|$ и $|ab| = |a||b|$, выполним оценку $\Delta S_{nm}^{[N]}$ по модулю сверху:

$$\begin{aligned} |S_{nm}^{[N]}| \leq & 0.5 \underbrace{\left| e^{(-1)^n j k_3 h} \right|}_1 \times |\Delta_1^{[N]}(h)| + 0.5 \underbrace{\left| e^{(-1)^n j k_3 h} (-1)^{n+m} \right|}_1 \times \frac{k_1}{k_3} \times |\Delta_2'^{[N]}(h)| + \\ & + 0.5 \underbrace{\left| j e^{(-1)^n j k_3 h} (-1)^{m+1} \right|}_1 k_1 |\Delta_2^{[N-1]}(h)| + 0.5 \underbrace{\left| j e^{(-1)^n j k_3 h} (-1)^n \right|}_1 |\Delta_1'^{[N+1]}(h)| / k_3. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$|\Delta S_{nm}^{[N]}| \leq 0.5 \left(|\Delta_1^{[N]}(h)| + \frac{k_1}{k_3} \times |\Delta_2'^{[N]}(h)| + k_1 |\Delta_2^{[N-1]}(h)| + |\Delta_1'^{[N+1]}(h)| / k_3 \right). \quad (2.54)$$

Подставляя в (2.54) неравенства (2.47)-(2.50), получим

$$|\Delta S_{nm}^{[N]}| \leq 0.5 \left(\sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{p_2^{2n}}{(2n)!} + \frac{p_1}{p_3} \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{p_2^{2n}}{(2n)!} + p_1 \sum_{n=N}^{\infty} \frac{p_2^{2n}}{(2n+1)!} + \frac{p_2}{p_3} \sum_{n=N+2}^{\infty} \frac{p_2^{2n-1}}{(2n-1)!} \right). \quad (2.55)$$

Здесь введены безразмерные параметры

$$p_1 = hk_1, \quad p_3 = hk_3. \quad (2.56)$$

Физический смысл параметров $p_{1,3}$ ясен – это отношение толщины h среды 2 (тонкой пленки) к длине волны в среде 1 и среде 3 соответственно.

Если в третьей сумме выражения (2.55) сделать замену индекса суммирования $n' = n + 1$, а в четвертой сумме замену $n = n' - 1$, все суммы в (2.55) можно записать в виде одной:

$$|\Delta S_{nm}^{[N]}| \leq 0.5 \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{p_2^{2n}}{(2n-1)!} \left(\frac{1}{2n} + \frac{1}{2n} \frac{p_1}{p_3} + \frac{p_1}{p_2^2} + \frac{1}{2n(2n+1)} \frac{p_2^2}{p_3} \right). \quad (2.57)$$

Из формул (2.56)-(2.57) видно, что суммы, входящие в (2.55), обладают одинаковым порядком малости. Действительно,

$$(p_2)^2 / (p_{1,3}) \approx (h \max |k_2|)^2 / (k_{1,3} h) \approx h^2 \mu_0 \omega \sigma_{\text{bulk}} / (h \omega n_{1,3} \sqrt{\epsilon_0 \mu_0}) \approx 0.4 \cdot \sigma_{\text{bulk}} [\text{МСм/м}] \cdot h [\text{нм}] / n_{1,3},$$

где $n_{1,3}$ – показатель преломления среды 1 и среды 3 соответственно. Поскольку для металлов тонких пленок $\sigma \sim 0.1-60 [\text{МСм/м}]$, толщина ультратонких пленок $h \sim 1-20 [\text{нм}]$, а $n_{1,3} \sim 1-2$, можно сделать вывод о том, что $(p_2)^2 / (p_{1,3}) = 0.05 \dots 500$. Поэтому при выполнении оценок порядков малости можно считать, что $(p_2)^2 \sim p_{1,3}$. Тогда при не очень большом n

$$1 \sim \frac{1}{2n} \sim \frac{1}{2n} \frac{p_1}{p_3} \sim \frac{p_1}{p_2^2} \sim \frac{1}{2n(2n+1)} \frac{p_2^2}{p_3}.$$

Подставляя (2.51) в матричное равенство $\begin{pmatrix} A_3^+ \\ A_3^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1^+ \\ A_1^- \end{pmatrix}$, получим

$$\begin{pmatrix} A_3^+ \\ A_3^- \end{pmatrix} = \left\{ \begin{pmatrix} S_{11}^{[N]} & S_{12}^{[N]} \\ S_{21}^{[N]} & S_{22}^{[N]} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta S_{11}^{[N]} & \Delta S_{12}^{[N]} \\ \Delta S_{21}^{[N]} & \Delta S_{22}^{[N]} \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} A_1^+ \\ A_1^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11}^{[N]} & S_{12}^{[N]} \\ S_{21}^{[N]} & S_{22}^{[N]} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1^+ \\ A_1^- \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta A^+ \\ \delta A^- \end{pmatrix}, \quad (2.58)$$

где столбец погрешностей

$$\begin{pmatrix} \delta A^+ \\ \delta A^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta S_{11}^{[N]} A_1^+ + \Delta S_{12}^{[N]} A_1^- \\ \Delta S_{21}^{[N]} A_1^+ + \Delta S_{22}^{[N]} A_1^- \end{pmatrix}. \quad (2.59)$$

Снова пользуясь свойствами $|a+b| \leq |a| + |b|$ и $|ab| = |a||b|$ и формулой (2.55), можно получить следующую оценку для δA^\pm по модулю:

$$\begin{aligned} |\delta A^\pm| &\leq |\Delta S_{nm}^{[N]}| |A_1^+| + |\Delta S_{nm}^{[N]}| |A_1^-| \leq |\Delta S_{nm}^{[N]}| (|A_1^+| + |A_1^-|) \leq \\ &\leq 0.5 (|A_1^+| + |A_1^-|) \left(\sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{p_2^{2n}}{(2n)!} + \frac{p_1}{p_3} \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{p_2^{2n}}{(2n)!} + p_1 \sum_{n=N}^{\infty} \frac{p_2^{2n}}{(2n+1)!} + \frac{p_2}{p_3} \sum_{n=N+2}^{\infty} \frac{p_2^{2n-1}}{(2n-1)!} \right) \leq \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\leq 0.5A \left(\sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{p_2^{2n}}{(2n)!} + \frac{p_1}{p_3} \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{p_2^{2n}}{(2n)!} + p_1 \sum_{n=N}^{\infty} \frac{p_2^{2n}}{(2n+1)!} + \frac{p_2}{p_3} \sum_{n=N+2}^{\infty} \frac{p_2^{2n-1}}{(2n-1)!} \right) = \\
&= 0.5A \left(\left(\operatorname{ch}(p_1) - \sum_{n=0}^N \frac{p_2^{2n}}{(2n)!} \right) \left(1 + \frac{p_1}{p_3} \right) + \frac{p_1}{p_2} \left(\operatorname{sh}(p_2) - \sum_{n=0}^{N-1} \frac{p_2^{2n+1}}{(2n+1)!} \right) + \frac{p_2}{p_3} \left(\operatorname{sh}(p_2) - \sum_{n=0}^N \frac{p_2^{2n+1}}{(2n+1)!} \right) \right),
\end{aligned} \tag{2.60}$$

где $A > 0$ – некоторая константа, такая что

$$|A_1^+| + |A_1^-| \leq A. \tag{2.61}$$

При выводе последнего выражения в цепочке неравенств (2.60) были использованы формулы Маклорена для гиперболического косинуса $\operatorname{ch}(x)$ и синуса $\operatorname{sh}(x)$. Наконец, представим $g_i^{[N]}(z)$ и $g_i'^{[N]}(z)$ в виде сумм

$$g_1^{[N]}(z) = \hat{L}_N(g_1^{[0]}(z)) = \hat{L}_N(1) = \sum_{l=0}^N \hat{J}^l(1) = \sum_{\alpha=1}^{\alpha=N+1} \hat{J}^{\alpha-1}(1), \tag{2.62}$$

$$g_2'^{[N]}(z) = \frac{\partial}{\partial z} \hat{L}_N(g_2^{[0]}(z)) = \frac{\partial}{\partial z} \hat{L}_N(z) = \frac{\partial}{\partial z} \sum_{l=0}^N \hat{J}^l(z) = \frac{\partial}{\partial z} \sum_{\alpha=1}^{N+1} \hat{J}^{\alpha-1}(z), \tag{2.63}$$

$$g_2^{[N-1]}(z) = \hat{L}_{N-1}(g_2^{[0]}(z)) = \hat{L}_{N-1}(z) = \sum_{l=0}^{N-1} \hat{J}^l(z) = \sum_{\alpha=2}^{N+1} \hat{J}^{\alpha-2}(z) = \sum_{\alpha=1}^{N+1} \hat{J}^{\alpha-2}(z), \tag{2.64}$$

$$g_1'^{[N+1]}(z) = \frac{\partial}{\partial z} \hat{L}_{N+1}(g_1^{[0]}(z)) = \frac{\partial}{\partial z} \hat{L}_{N+1}(1) = \frac{\partial}{\partial z} \sum_{\alpha=0}^{N+1} \hat{J}^{\alpha}(1) = \frac{\partial}{\partial z} \sum_{\alpha=1}^{N+1} \hat{J}^{\alpha}(1). \tag{2.65}$$

В (2.62)-(2.65) было использовано определение l -ой степени оператора \hat{J} . Подставим (2.62)-(2.65) в (2.52), вынося знак суммы, получим

$$S_{nm}^{[N]} = 0.5e^{(-1)^n jk_3 h} \sum_{\alpha=1}^{N+1} B_{nm}^{[\alpha]}, \tag{2.66}$$

$$B_{nm}^{[\alpha]} = \left\{ \hat{J}^{\alpha-1}(1) + (-1)^{n+m} \frac{k_1}{k_3} \frac{\partial \hat{J}^{\alpha-1}(z)}{\partial z} + j \left((-1)^{m+1} k_1 \hat{J}^{\alpha-2}(z) + \frac{(-1)^n}{k_3} \frac{\partial \hat{J}^{\alpha}(1)}{\partial z} \right) \right\} \Big|_{z=h}. \tag{2.67}$$

Еще раз заметим, что $k_{1,3} \sim \omega$, а $\hat{J}^{\alpha} \sim \omega^{\alpha}$ в случае, когда $k_2^2(z)$ пропорционально ω . Поэтому матрицы $B_{nm}^{[\alpha]}$ могут быть представлены в виде $B_{nm}^{[\alpha]} = \omega^{\alpha-1} \tilde{B}_{nm}^{[\alpha]}$, где матрицы $\tilde{B}_{nm}^{[\alpha]}$ не зависят от ω . Таким образом, если не учитывать фазового множителя $e^{(-1)^n jk_3 h}$, то $S_{nm}^{[N]}$ в выражении (2.66) оказывается полиномом ω степени N .

2.3 Вид матрицы рассеяния в произвольной системе отсчета

Поставленная задача о приближенном нахождении матрицы переноса была решена в системе координат, в которой среда 2 занимает пространственный интервал $z \in [0, h]$.

Проведем обобщение формул (2.66)-(2.67) для случая произвольной системы координат, в которой среда 2 занимает пространственный интервал $z \in [a, a + h]$. Систему координат, в которой среда 2 занимает пространственный интервал $[0, h]$ будем называть старой системой отсчета, а систему координат, в которой среда 2 занимает пространственный интервал $[a, a + h]$ – новой.

В таком случае, координата точек в новой системе отсчета \tilde{z} связана с координатой точек в старой системе отсчета z соотношением: $\tilde{z} = z + a$. Перенос начала системы отсчета не влияет на параметры $p_{1,2,3}$, поэтому оценки погрешности расчета амплитуд (2.28)-(2.31) не изменятся. Изменяются пределы интегрирования в выражениях для оператора \hat{J} : интервал $[0, h]$ заменится на $[a, a+h]$, значение интегралов при этом, разумеется, не изменится. В граничных условиях (2.3)-(2.6) произойдут замены:

$$\begin{aligned} E_2(0) &= A_1^+ + A_1^- \rightarrow E_2(a) = A_1^+ e^{jk_1 a} + A_1^- e^{-jk_1 a}, \\ E_2(h) &= A_3^+ e^{jk_3 h} + A_3^- e^{-jk_3 h} \rightarrow E_2(a+h) = A_3^+ e^{jk_3(a+h)} + A_3^- e^{-jk_3(a+h)}, \\ E_2'(0) &= jk_1(A_1^+ - A_1^-) \rightarrow E_2'(a) = jk_1(A_1^+ e^{jk_1 a} - A_1^- e^{-jk_1 a}), \\ E_2'(h) &= jk_3(A_3^+ e^{jk_3 h} - A_3^- e^{-jk_3 h}) \rightarrow E_2'(a+h) = jk_3(A_3^+ e^{jk_3(a+h)} - A_3^- e^{-jk_3(a+h)}). \end{aligned}$$

Для краткости обозначим $\tilde{e}_3^\pm = e^{\pm jk_3(a+h)}$, $e_1^\pm = e^{\pm jk_1 a}$. Тогда система уравнений (2.15), из которой получается выражение для матрицы переноса, примет вид

$$\begin{cases} A_3^+ \tilde{e}_3^+ + A_3^- \tilde{e}_3^- = A_1^+ e_1^+ (g_1(h+a) + jk_1 g_2(h+a)) + A_1^- e_1^- (g_1(h+a) - jk_1 g_2(h+a)) \\ A_3^+ \tilde{e}_3^+ - A_3^- \tilde{e}_3^- = A_1^+ e_1^+ (g_1'(h+a) + jk_1 g_2'(h+a)) / jk_3 + A_1^- e_1^- (g_1'(h+a) - jk_1 g_2'(h+a)) / jk_3 \end{cases}$$

Записывая эту систему в матричном виде $\begin{pmatrix} A_3^+ \\ A_3^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1^+ \\ A_1^- \end{pmatrix}$ можно показать,

что в новой системе отсчета матрица переноса будет иметь вид

$$\begin{aligned} &\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e_1^+ \tilde{e}_3^+ \left\{ g_1(h+a) + \frac{k_1}{k_3} g_2'(h+a) + j \left(k_1 g_2(h+a) - \frac{g_1'(h+a)}{k_3} \right) \right\} & e_1^- \tilde{e}_3^- \left\{ g_1(h+a) - \frac{k_1}{k_3} g_2'(h+a) + j \left(-k_1 g_2(h+a) - \frac{g_1'(h+a)}{k_3} \right) \right\} \\ e_1^+ \tilde{e}_3^+ \left\{ g_1(h+a) - \frac{k_1}{k_3} g_2'(h+a) + j \left(k_1 g_2(h+a) + \frac{g_1'(h+a)}{k_3} \right) \right\} & e_1^- \tilde{e}_3^- \left\{ g_1(h+a) + \frac{k_1}{k_3} g_2'(h+a) + j \left(-k_1 g_2(h+a) + \frac{g_1'(h+a)}{k_3} \right) \right\} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.68)$$

или в более компактной форме

$$S_{mm} = 0.5 e_1^{(-1)^{m+1}} \tilde{e}_3^{(-1)^m} \left\{ g_1(h+a) + (-1)^{n+m} \frac{k_1}{k_3} g_2'(h+a) + j \left((-1)^{m+1} k_1 g_2(h+a) + (-1)^n \frac{g_1'(h+a)}{k_3} \right) \right\}. \quad (2.69)$$

Таким образом, в системе отсчета, где среда 2 занимает пространственный интервал $[a, a+h]$, для N -ого приближения получаем

$$S_{nm}^{[N]} = 0.5e_1^{(-1)^{m+1}} \tilde{e}_3^{(-1)^n} \left\{ g_1^{[N]}(h+a) + (-1)^{n+m} \frac{k_1}{k_3} g_2^{[N]}(h+a) + j \left((-1)^{m+1} k_1 g_2^{[N-1]}(h+a) + (-1)^n \frac{g_1^{[N+1]}(h+a)}{k_3} \right) \right\} = 0.5e_1^{(-1)^{m+1}} \tilde{e}_3^{(-1)^n} \sum_{\alpha=1}^{N+1} B_{nm}^{[\alpha]}. \quad (2.70)$$

Поскольку выражение в фигурных скобках (2.70) зависит только от значений функций $g_i^{[N]}$ взятых в точке, соответствующей границе раздела 2-ой и 3-ей сред, то очевидно, что значение выражения в фигурных скобках не зависит от того, в какой системе координат оно рассчитывается. Это означает, что для расчета $B_{nm}^{[\alpha]}$ можно пользоваться формулой (2.67), записанной в системе отсчета, где среда 2 занимает пространственный интервал $[0, h]$.

2.4 Матрица рассеяния в нулевом приближении, импеданс металлической пленки

Нулевое приближение соответствует $N = 0$. Тогда, согласно (2.67), (2.70) в системе отсчета, где среда 2 занимает пространственный интервал $[a, a+h]$

$$S_{nm}^{[0]} = 0.5e_1^{(-1)^{m+1}} \tilde{e}_3^{(-1)^n} B_{nm}^{[1]} \equiv 0.5e^{(-1)^{m+1} jk_1 a} e^{(-1)^n jk_2(a+h)} B_{nm}^{[1]}, \quad (2.71)$$

$$B_{nm}^{[1]} = \left\{ \hat{J}^0(1) + (-1)^{n+m} \frac{k_1}{k_3} \frac{\partial \hat{J}^0(z)}{\partial z} + j \left((-1)^{m+1} k_1 \hat{J}^{-1}(z) + \frac{(-1)^n}{k_3} \frac{\partial \hat{J}(1)}{\partial z} \right) \right\} \Bigg|_{z=h}. \quad (2.72)$$

Учитывая, что

$$\hat{J}^0(1) = 1, \frac{\partial \hat{J}^0(z)}{\partial z} = \frac{\partial z}{\partial z} = 1, \hat{J}^{-1}(z) = 0, \frac{\partial \hat{J}(1)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(-\int_0^z \int_0^{z_1} k_2^2(z_2) dz_2 dz_1 \right) = -\int_0^z k_2^2(z_2) dz_2,$$

приходим к выражению

$$B_{nm}^{[1]} = \frac{1}{k_3} \left(k_3 + (-1)^{n+m} k_1 + j(-1)^n h \langle k_2^2 \rangle \right). \quad (2.73)$$

Здесь для краткости введен средний по толщине среды 2 квадрат волнового числа $\langle k_2^2 \rangle$, определяемый соотношением:

$$\langle k_2^2 \rangle = \frac{1}{h} \int_a^{a+h} k_2^2(z_2) dz_2. \quad (2.74)$$

Выражение (2.60) для погрешности амплитуд при $N=0$ упрощается:

$$|\delta A^\pm| \leq 0.5A \left(\left(1 + \frac{p_1}{p_3} \right) (\text{ch}(p_2) - 1) + \frac{p_1}{p_2} \text{sh}(p_2) + \frac{p_2}{p_3} (\text{sh}(p_2) - p_2) \right). \quad (2.75)$$

Далее оказывается уместным сделать некоторое упрощение в расчетной формуле (2.71). В этих формулах только экспоненты $\tilde{e}_3^\pm = e^{\pm jk_3(a+h)}$ напрямую зависят от h . Учет данной зависимости является излишним в рамках первого приближения. Введем матрицу рассеяния $S_{nm}^{\text{exp}[0]} = 0.5e^{(-1)^{m+1}jk_1a}e^{(-1)^njk_3a}B_{nm}^{[1]}$, в которой пренебрегается зависимостью экспоненты от h . Выведем формулу для погрешности амплитуд $\delta A_{\text{exp}}^\pm$, которая соответствует матрице $S_{nm}^{\text{exp}[0]}$.

Введем обозначения $e^{(-1)^njk_3h} = 1 + \Delta_{\text{exp}}^n$, $e^{\pm jk_3a} = e_3^\pm$. Тогда,

$$S_{nm}^{[0]} = 0.5e^{(-1)^{m+1}jk_1a}e^{(-1)^njk_3(a+h)}B_{nm}^{[1]} = 0.5e^{(-1)^{m+1}jk_1a}e^{(-1)^njk_3a}e^{(-1)^njk_3h}B_{nm}^{[1]} = 0.5e_1^{(-1)^{m+1}}e_3^{(-1)^n}(1 + \Delta_{\text{exp}}^n)B_{nm}^{[1]},$$

следовательно

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A_3^+ \\ A_3^- \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} S_{11}^{[0]} & S_{12}^{[0]} \\ S_{21}^{[0]} & S_{22}^{[0]} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1^+ \\ A_1^- \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta A^+ \\ \delta A^- \end{pmatrix} = \\ 0.5 \left\{ \begin{pmatrix} e_1^+ e_3^- B_{11}^{[1]} & e_1^- e_3^- B_{12}^{[1]} \\ e_1^+ e_3^+ B_{21}^{[1]} & e_1^- e_3^+ B_{22}^{[1]} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta_{\text{exp}}^1 e_1^+ e_3^- B_{11}^{[1]} & \Delta_{\text{exp}}^1 e_1^- e_3^- B_{12}^{[1]} \\ \Delta_{\text{exp}}^2 e_1^+ e_3^+ B_{21}^{[1]} & \Delta_{\text{exp}}^2 e_1^- e_3^+ B_{22}^{[1]} \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} A_1^+ \\ A_1^- \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta A^+ \\ \delta A^- \end{pmatrix} = \\ 0.5 \begin{pmatrix} e_1^+ e_3^- B_{11}^{[1]} & e_1^- e_3^- B_{12}^{[1]} \\ e_1^+ e_3^+ B_{21}^{[1]} & e_1^- e_3^+ B_{22}^{[1]} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1^+ \\ A_1^- \end{pmatrix} + 0.5 \begin{pmatrix} \Delta_{\text{exp}}^1 e_1^+ e_3^- B_{11}^{[1]} & \Delta_{\text{exp}}^1 e_1^- e_3^- B_{12}^{[1]} \\ \Delta_{\text{exp}}^2 e_1^+ e_3^+ B_{21}^{[1]} & \Delta_{\text{exp}}^2 e_1^- e_3^+ B_{22}^{[1]} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1^+ \\ A_1^- \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta A^+ \\ \delta A^- \end{pmatrix} = \\ \begin{pmatrix} S_{11}^{\text{exp}[0]} & S_{12}^{\text{exp}[0]} \\ S_{21}^{\text{exp}[0]} & S_{22}^{\text{exp}[0]} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1^+ \\ A_1^- \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta A^+ + 0.5\Delta_{\text{exp}}^1 e_1^+ e_3^- B_{11}^{[1]} A_1^+ + 0.5\Delta_{\text{exp}}^1 e_1^- e_3^- B_{12}^{[1]} A_1^- \\ \delta A^- + 0.5\Delta_{\text{exp}}^2 e_1^+ e_3^+ B_{21}^{[1]} A_1^+ + 0.5\Delta_{\text{exp}}^2 e_1^- e_3^+ B_{22}^{[1]} A_1^- \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Введем новый столбец погрешностей $\delta A_{\text{exp}}^\pm$, в которых учитывается неточность, связанная с пренебрежением $e^{\pm jk_3h}$ в (2.71):

$$\begin{pmatrix} \delta A_{\text{exp}}^+ \\ \delta A_{\text{exp}}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta A^+ + 0.5\Delta_{\text{exp}}^1 e_1^+ e_3^- B_{11}^{[1]} A_1^+ + 0.5\Delta_{\text{exp}}^1 e_1^- e_3^- B_{12}^{[1]} A_1^- \\ \delta A^- + 0.5\Delta_{\text{exp}}^2 e_1^+ e_3^+ B_{21}^{[1]} A_1^+ + 0.5\Delta_{\text{exp}}^2 e_1^- e_3^+ B_{22}^{[1]} A_1^- \end{pmatrix}.$$

Пользуясь свойствами $|a+b| \leq |a|+|b|$ и $|ab|=|a||b|$, и тем, что

$$B_{nm}^{[1]} \equiv 1 + (-1)^{n+m} \frac{p_1}{p_3} + j(-1)^n \frac{h^2 \langle k_2^2 \rangle}{p_3} \Rightarrow |B_{nm}^{[1]}| \leq 1 + \frac{p_1}{p_3} + \frac{p_2^2}{p_3}$$

можно получить следующую оценку для $|\delta A_{\text{exp}}^+|$.

$$\begin{aligned} |\delta A_{\text{exp}}^+| &\leq |\delta A^+| + 0.5|\Delta_{\text{exp}}^1| |B_{11}^{[1]}| |A_1^+| + 0.5|\Delta_{\text{exp}}^1| |B_{12}^{[1]}| |A_1^-| = |\delta A^+| + 0.5|e^{-jk_3h} - 1| (|B_{11}^{[1]}| |A_1^+| + |B_{12}^{[1]}| |A_1^-|) = \\ &= |\delta A^+| + |e^{-jk_3h/2}| \left| \frac{e^{-jk_3h/2} - e^{jk_3h/2}}{2} \right| (|B_{11}^{[1]}| |A_1^+| + |B_{12}^{[1]}| |A_1^-|) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= |\delta A^+| + |\sin(k_3 h / 2)| \left(|B_{11}^{[1]}| |A_1^+| + |B_{12}^{[1]}| |A_1^-| \right) \leq |\delta A^+| + A |\sin(p_3 / 2)| \left(|B_{11}^{[1]}| + |B_{12}^{[1]}| \right) \leq \\
&\leq |\delta A^+| + 2A \sin(p_3 / 2) \left(1 + \frac{p_1}{p_3} + \frac{p_2^2}{p_3} \right). \quad (2.76)
\end{aligned}$$

Для $|\delta A_{\text{exp}}^-|$ получается аналогичная оценка. Используя в формуле (2.76) для расчета $|\delta A^\pm|$ неравенство (2.75) в итоге получаем, что для матрицы рассеяния

$$S_{nm}^{\text{exp}[0]} = 0.5 e^{(-1)^{m+1} j k_1 a} e^{(-1)^n j k_3 a} B_{nm}^{[1]} = 0.5 e^{(-1)^{m+1} j k_1 a} e^{(-1)^n j k_3 a} \frac{1}{k_3} \left(k_3 + (-1)^{n+m} k_1 + j(-1)^n h \langle k_2^2 \rangle \right), \quad (2.77)$$

в которой не учитывается зависимость от толщины h среды 2, погрешность амплитуд рассчитывается по формуле

$$|\delta A_{\text{exp}}^\pm| \leq 0.5 A \left\{ \left(1 + \frac{p_1}{p_3} \right) (\text{ch}(p_2) - 1) + \frac{p_1}{p_2} \text{sh}(p_2) + \frac{p_2}{p_3} (\text{sh}(p_2) - p_2) + 4 \sin(p_3 / 2) \left(1 + \frac{p_1}{p_3} + \frac{p_2^2}{p_3} \right) \right\}. \quad (2.78)$$

Из формулы (2.95) следует важный вывод: в первом приближении предлагаемого метода все оптические свойства среды 2 определяются только произведением $h < k_2^2 >$. Данное произведение обладает размерностью [1/м], удобнее, однако, работать с безразмерными величинами. Поэтому введем следующий безразмерный коэффициент

$$\eta = h < k_2^2 > / (j k_0). \quad (2.79)$$

Здесь $k_0 = \omega(\epsilon_0 \mu_0)^{1/2}$ – волновое число электромагнитной волны в вакууме. Как будет видно из дальнейших выкладок, η входит в формулы для элементов матрицы рассеяния вместе с коэффициентами преломления первой и третьей сред n_1 и n_3 , (показатель преломления i -ой среды мы определяем как отношение волнового числа i -ой среды к волновому числу вакуума: $n_i = k_i / k_0$). Поэтому мы будем называть коэффициент η показателем преломления пленки или показателем преломления поверхности. Отметим, что η не является отношением скорости света в вакууме к скорости распространения электромагнитной волны в пленке, но данному коэффициенту можно придать физический смысл, что будет сделано ниже.

Под средой 2 с настоящего момента мы будем подразумевать тонкую металлическую пленку. Поскольку для металлов дисперсионная зависимость имеет вид $k_{\text{metal}} \cong (1 + j) \sqrt{\omega \sigma_{\text{metal}} \mu_0 / 2}$, поэтому $k_2^2(z) = j \mu_0 \omega \sigma_2(z)$. С учетом последнего равенства формулу (2.79) можно записать в виде:

$$\eta = Z_0 h \langle \sigma_2 \rangle, \quad \langle \sigma_2 \rangle = \frac{1}{h} \int_a^{a+h} \sigma_2(z) dz. \quad (2.80)$$

Здесь $Z_0 = (\mu_0/\varepsilon_0)^{1/2} = 376.73$ Ом – волновое сопротивление вакуума; $\langle\sigma_2\rangle$ – усредненная (вдоль толщины пленки h) проводимость металла пленки. Введем величину $Z_f = 1/(h\langle\sigma_2\rangle)$, которую будем называть импедансом пленки. Напомним также, что $R_s = 1/(h\langle\sigma_2\rangle)$, где R_s – поверхностное сопротивление (более подробно о R_s написано в приложении В). R_s обладает размерностью [Ом] и оказывается равно сопротивлению пленки квадратной формы.

В итоге коэффициент η можно интерпретировать как отношение некоторых сопротивлений (отношение импеданса вакуума к импедансу пленки): $\eta = Z_0/Z_f$.

Перейдя от волновых векторов к показателям преломления сред можно значительно упростить формулу (2.77) для элементов матрицы рассеяния и записать ее в виде

$$\mathbf{S}^{\text{exp}[0]} = 0.5 \begin{pmatrix} e_1^+ e_3^- \{n_3^- + n_1\} / n_3 & e_1^- e_3^- \{n_3^- - n_1\} / n_3 \\ e_1^+ e_3^+ \{n_3^+ - n_1\} / n_3 & e_1^- e_3^+ \{n_3^+ + n_1\} / n_3 \end{pmatrix}. \quad (2.81)$$

Здесь используются обозначения: $n_3^\pm = n_3 \pm \eta$, $e_1^\pm = e^{\pm jk_1 a}$, $e_3^\pm = e^{\pm jk_3 a}$. Данные формулы можно кратко записать в виде

$$S_{nm}^{\text{exp}[0]} = 0.5 e_1^{(-1)^{m+1}} e_3^{(-1)^n} \{n_3^{(-1)^n} + (-1)^{n+m} n_1\} / n_3. \quad (2.82)$$

Из формул (2.81)-(2.82) видно, что показатель преломления пленки η действительно входит в формулы только вместе с коэффициентами преломления материальных сред. Оценим порядок величины коэффициента η .

$$|\eta| = h^2 \langle k_2^2 \rangle / (hk_0) \sim (h \max |k_2|)^2 / (hk_0) \sim n_1 p_2^2 / p_1 \sim 0.4 \cdot \sigma [\text{МСм/м}] \cdot h [\text{нм}] = 0.05 \dots 500.$$

Отсюда следует, что в зависимости от толщины пленки и от проводимости ее металла, коэффициент η может варьироваться в достаточно больших пределах. Но поскольку проводимость металлов в широком диапазоне длин волн (вплоть до длин волн видимого диапазона [31]) слабо зависит от частоты электромагнитного излучения, коэффициент η в рамках данного диапазона длин волн можно считать константой. Таким образом, пленки, для которых выполняется неравенство $p_{1,2,3} \ll 1$, являются частотно независимыми сосредоточенными элементами. Это обстоятельство позволяет использовать тонкие пленки для создания оптических приборов нового поколения. Например, для создания интерферометров нового поколения, обладающих более высокой разрешающей способностей по времени [11].

2.5 Итоги главы 2

В данной главе была рассмотрена система, состоящая из одной плоскослоисто неоднородной пленки с произвольной зависимостью волнового числа по толщине, находящейся между двумя диэлектрическими средами. Было показано, что метод последовательных приближений Пикара позволяет найти приближенное аналитическое выражение матрицы рассеяния такой пленки. В главе был предложен метод приближенного расчета данной матрицы N -ого приближения, согласно которому, матрица разлагается в ряд по четным степеням безразмерного параметра p_2 . Данный параметр равен произведению толщины пленки на максимальное значение модуля волнового числа пленки. В случае металлических пленок параметр p_2 можно оценить как отношение толщины пленки к толщине скин-слоя металла пленки.

Показано, что для ультратонких металлических пленок, в том случае, когда дисперсионной зависимостью проводимости металла можно пренебречь, первое слагаемое ряда не зависит от частоты. В общем же случае элементы матрицы рассеяния ультратонких металлических пленок N -ого приближения являются полиномами ω степени $N-1$.

Также показано, что для случая ультратонких пленок элементы матрицы рассеяния нулевого приближения зависят всего от одного параметра η . Таким образом, η полностью определяет все оптические свойства пленки в нулевом приближении. Параметр η равен отношению волнового сопротивления вакуума к поверхностному сопротивлению тонкой металлической пленки.

Были выведены точные формулы (в виде неравенств сверху) для ошибок, возникающих при расчете амплитуд электромагнитного поля при использовании матрицы рассеяния N -ого приближения. Показано, что для ультратонких металлических пленок, толщина которых близка к h_{pk} , погрешность расчета оптических коэффициентов нулевого приближения метода Пикара не превышает 1% даже в оптическом диапазоне.

Следующая глава будет посвящена общему способу описания многослойных оптических структур, состоящих из произвольного числа диэлектрических слоев с напыленными на них ультратонкими металлическими пленками.

Глава 3

Многослойные структуры, содержащие металлические пленки

В данной главе используются материалы, опубликованные в статье [А3].

3.1 Общий подход к описанию распространения электромагнитных волн в многослойных структурах, содержащих металлические пленки

Изложенная в главе 2 теория пригодна только для описания распространения электромагнитных волн через одну металлическую пленку, находящуюся на границе раздела двух диэлектрических сред. Обобщим результаты второй главы для случая многослойных структур, содержащих произвольное число диэлектрических слоев и металлических пленок. На рис. 3.1 изображена подобная структура, состоящая из N диэлектрических сред. Нумерацию диэлектрических сред будем вести с единицы и проводить слева направо. Точно таким же образом будем нумеровать показатели преломления диэлектрических сред n_l , их волновые числа k_l , а также амплитуды вектора напряженности электрического поля A_l^\pm . Таким образом, порядковый номер амплитуды, показателя преломления и волнового числа совпадает с порядковым номером диэлектрического слоя, см. рис. 3.1. Для столбца амплитуд и их погрешностей введем краткие обозначения

$$|A_l\rangle = \begin{pmatrix} A_l^+ \\ A_l^- \end{pmatrix}, \quad |\delta A_l\rangle = \begin{pmatrix} \delta A_l^+ \\ \delta A_l^- \end{pmatrix}.$$

Вектор напряженности электрического поля волны, распространяющейся в l -том диэлектрическом слое в положительном направлении оси Oz , будем обозначать E_l^+ , а в отрицательном будем обозначать E_l^- . Таким образом, $E_l^+ \equiv A_l^+ e^{jk_l z}$, $E_l^- \equiv A_l^- e^{-jk_l z}$.

Между некоторыми слоями диэлектрика могут быть напылены пленки (например, согласно рис. 3.1, между 2-ым и 3-им слоями диэлектрика есть пленка, а между 3-им и 4-ым – нет). В общем случае слои диэлектрика обладают разными толщинами $H_l = a_l - a_{l-1}$, а металлические пленки обладают разными показателями преломления η_l .

Как было показано в предыдущей главе, в рамках первого приближения пленки можно считать бесконечно тонкими. То есть мы пренебрегаем зависимостью $e^{\pm jk_l h_l}$ и используем для расчетов формулы (2.99)-(2.100) для матрицы рассеяния. По этой же причине z -координаты поверхностей пленки мы будем считать равными z -координате поверхности диэлектрика, на которую напылена пленка. z -координату l -ой границы

диэлектрика будем обозначать символом a_l . Нумерация поверхностей также ведется слева направо и начинается с единицы. Пленки и матрицы рассеяния будем нумеровать точно по такому же правилу, как и границы. Таким образом,

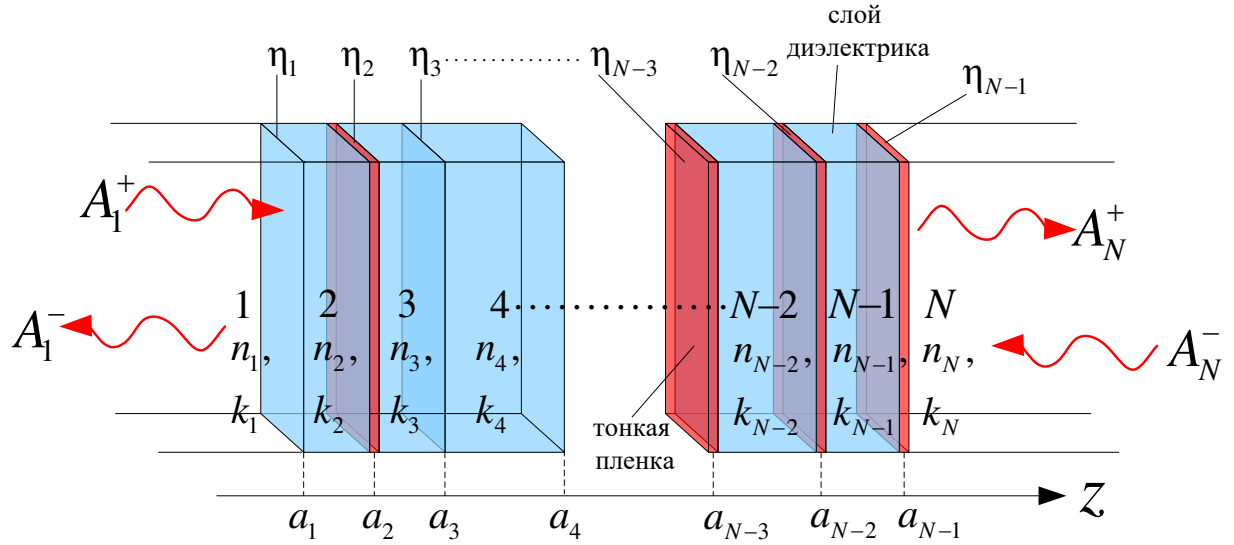


Рис. 3.1 Схема, поясняющая постановку задачи о распространении электромагнитных волн через плоскостойкие структуры.

порядковый номер показателя преломления пленки η_l совпадает с порядковым номером матрицы рассеяния $\hat{S}_{(l)}^{\text{exp}[0]}$ (формулы (2.99)-(2.100)) и с порядковым номером z -координаты границы a_l . Показатель преломления l -той поверхности η_l равен нулю в случае, если на данную поверхность не напылена пленка (например, из рис. 3.1 следует, что $\eta_1 = \eta_3 = 0$).

Согласно общему формализму, изложенному в главе 2, столбцы амплитуд в соседних диэлектрических слоях $|A_l\rangle$ и $|A_{l+1}\rangle$ связаны матричным соотношением:

$$|A_{l+1}\rangle = \hat{S}_{(l)}^{\text{exp}[0]} |A_l\rangle + |\delta A_{l+1}\rangle. \quad (3.1)$$

Стоит отметить, что элементы столбца $|A_l\rangle$ включают в себя погрешности метода Пикара всех предыдущих слоев. Учет этого обстоятельства, как мы увидим из дальнейших выкладок, приводит к тому, что с увеличением количества слоев N суммарная погрешность расчета амплитуд также возрастает. Отметим, что в первой среде $|\delta A_1\rangle = 0$, поскольку мы считаем, что погрешности δA_l^\pm появляются только из-за погрешности метода Пикара, то есть только из-за неточности выражения матричных

элементов $S_{(l)nm}^{\text{exp}[0]}$, а столбец $|A_1\rangle$ является первым в рекуррентном выражении (3.1), следовательно, он не обладает погрешностью метода Пикара.

Элементы матрицы $\hat{S}_{(l)}^{\text{exp}[0]}$ вычисляются по формулам типа (2.99)-(2.100), которые мы перепишем в новых обозначениях:

$$S_{11}^{(l)} = 0.5e_i^{+-} \{n_{l+1}^- + n_l\} / n_{l+1}, \quad (3.2)$$

$$S_{12}^{(l)} = 0.5e_i^{--} \{n_{l+1}^- - n_l\} / n_{l+1}, \quad (3.3)$$

$$S_{21}^{(l)} = 0.5e_i^{++} \{n_{l+1}^+ - n_l\} / n_{l+1}, \quad (3.4)$$

$$S_{22}^{(l)} = 0.5e_i^{+-} \{n_{l+1}^+ + n_l\} / n_{l+1}. \quad (3.5)$$

Здесь введены обозначения: $n_{l+1}^\pm = n_{l+1} \pm \eta_l$, $e_i^{\pm\pm} = \exp[ja_l(\pm k_l \pm k_{l+1})]$, то есть $e_i^{--} = \exp[ja_l(-k_l - k_{l+1})]$, $e_i^{+-} = \exp[ja_l(+k_l - k_{l+1})]$ и т.д. Формулы (3.2)-(3.5) также могут быть записаны в компактном виде

$$S_{(l)nm}^{\text{exp}[0]} = 0.5 \exp[ja_l((-1)^{m+1} k_l + (-1)^n k_{l+1})] \{n_{l+1}^{(-1)^n} + (-1)^{n+m} n_l\} / n_{l+1}. \quad (3.6)$$

Пусть $p_1^{(l)}, p_2^{(l)}, p_3^{(l)}$ – параметры p_1, p_2, p_3 , рассчитанные для l -той тонкой пленки.

Тогда для элементов столбца погрешностей $|\delta A_{l+1}\rangle$ справедливы оценки типа (2.96):

$$\begin{aligned} |\delta A_{\text{exp}}^{\pm(l+1)}| \leq 0.5 A^{(l)} & \left\{ \left(1 + \frac{p_1^{(l)}}{p_3^{(l)}} \right) \left(\text{ch}(p_2^{(l)}) - 1 \right) + \frac{p_1^{(l)}}{p_2^{(l)}} \text{sh}(p_2^{(l)}) + \right. \\ & \left. + \frac{p_2^{(l)}}{p_3^{(l)}} \left(\text{sh}(p_2^{(l)}) - p_2^{(l)} \right) + 4 \sin(p_3^{(l)} / 2) \left(1 + \frac{p_1^{(l)}}{p_3^{(l)}} + \frac{(p_2^{(l)})^2}{p_3^{(l)}} \right) \right\}. \quad (3.7) \end{aligned}$$

Здесь, согласно формулам (2.74), (2.79), $A^{(l)} \geq |A_l^+| + |A_l^-|$, $p_2^{(l)} = h_l \max |k_{\text{film}}^{(l)}|$, $p_1^{(l)} = h_l k_l$, $p_3^{(l)} = h_l k_{l+1}$, где $\max |k_{\text{film}}^{(l)}|$ – максимальное значение модуля волнового числа металла l -ой металлической пленки.

В основном интерес представляют амплитуды электрического поля в 1-ой и N -ой средах (поскольку обычно только эти амплитуды можно измерить в эксперименте). Используя формулу (3.1) для $l=1$, а затем, рекуррентно применяя ее для $l=2, 3, \dots, N-1$ можно показать, что связь амплитуд A_1^\pm и A_N^\pm также записывается в матричном виде:

$$|A_N\rangle = \hat{S}^{(\text{tot})} |A_1\rangle + |\delta A^{(\text{tot})}\rangle \quad (3.8)$$

Здесь $\hat{S}^{(\text{tot})}$ – матрица рассеяния всей структуры, состоящей из N диэлектрических слоев с напыленными пленками, а $|\delta A^{(\text{tot})}\rangle$ – столбец суммарных погрешностей метода Пикара.

Напомним, что элементы $\delta A^{+(\text{tot})}$, $\delta A^{-(\text{tot})}$ являются погрешностями, с которыми

выполняются равенства, определяемые матричным соотношением (3.8). То, какие из амплитуд A_1^\pm , A_N^\pm считаются заданными точно, определяется постановкой задачи рассеяния. Матрица $\hat{\mathbf{S}}^{(\text{tot})}$ может быть получена последовательным матричным умножением матриц $\hat{\mathbf{S}}_{(l)}^{\text{exp}[0]}$:

$$\hat{\mathbf{S}}^{(\text{tot})} = \begin{pmatrix} S_{11}^{(\text{tot})} & S_{12}^{(\text{tot})} \\ S_{21}^{(\text{tot})} & S_{22}^{(\text{tot})} \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{S}}_{(N-1)}^{\text{exp}[0]} \hat{\mathbf{S}}_{(N-2)}^{\text{exp}[0]} \dots \hat{\mathbf{S}}_{(2)}^{\text{exp}[0]} \hat{\mathbf{S}}_{(1)}^{\text{exp}[0]}. \quad (3.9)$$

Столбец суммарной погрешностей метода Пикара $|\delta A^{(\text{tot})}\rangle$ вычисляется по формуле, следующей из рекуррентного соотношения (3.1), в котором учитывается, что $|\delta A_1\rangle = 0$:

$$\begin{aligned} |\delta A^{(\text{tot})}\rangle &= |\delta A_N\rangle + \hat{\mathbf{S}}_{(N-1)}^{\text{exp}[0]} |\delta A_{N-1}\rangle + \hat{\mathbf{S}}_{(N-1)}^{\text{exp}[0]} \hat{\mathbf{S}}_{(N-2)}^{\text{exp}[0]} |\delta A_{N-2}\rangle + \hat{\mathbf{S}}_{(N-1)}^{\text{exp}[0]} \hat{\mathbf{S}}_{(N-2)}^{\text{exp}[0]} \hat{\mathbf{S}}_{(N-3)}^{\text{exp}[0]} |\delta A_{N-3}\rangle + \dots \\ &\dots + \hat{\mathbf{S}}_{(N-1)}^{\text{exp}[0]} \hat{\mathbf{S}}_{(N-2)}^{\text{exp}[0]} \hat{\mathbf{S}}_{(N-3)}^{\text{exp}[0]} \dots \hat{\mathbf{S}}_{(3)}^{\text{exp}[0]} |\delta A_3\rangle + \hat{\mathbf{S}}_{(N-1)}^{\text{exp}[0]} \hat{\mathbf{S}}_{(N-2)}^{\text{exp}[0]} \hat{\mathbf{S}}_{(N-3)}^{\text{exp}[0]} \dots \hat{\mathbf{S}}_{(3)}^{\text{exp}[0]} \hat{\mathbf{S}}_{(2)}^{\text{exp}[0]} |\delta A_2\rangle. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Видно, что с ростом N количество слагаемых в выражении (3.10) увеличивается, что соответствует увеличению суммарной погрешности метода Пикара.

Далее рассмотрим сформулированные в параграфе 2.1 два типа постановок задач рассеяния.

Рассмотрим сначала задачу рассеяния одной падающей электромагнитной волны. Тогда $A_N^- = 0$, а A_1^+ задана точно (т.е. без погрешностей), а погрешностями обладают амплитуды A_1^- и A_N^+ (напомним, погрешности связаны с тем, что матрица $\hat{\mathbf{S}}^{(\text{tot})}$ в выражении (3.8) рассчитана приближенно). Решая систему двух линейных алгебраических уравнений (3.8) относительно амплитуд A_1^- и A_N^+ , получим:

$$\begin{aligned} A_N^+ &= \frac{S_{11}^{(\text{tot})} S_{22}^{(\text{tot})} - S_{12}^{(\text{tot})} S_{21}^{(\text{tot})}}{S_{22}^{(\text{tot})}} A_1^+ + \Delta A_N^+, \quad \Delta A_N^+ = -\frac{S_{12}^{(\text{tot})}}{S_{22}^{(\text{tot})}} \delta A^{-(\text{tot})} + \delta A^{+(\text{tot})}, \\ A_1^- &= -\frac{S_{21}^{(\text{tot})}}{S_{22}^{(\text{tot})}} A_1^+ + \Delta A_1^-, \quad \Delta A_1^- = -\frac{\delta A^{-(\text{tot})}}{S_{22}^{(\text{tot})}}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Здесь ΔA_N^+ , ΔA_1^- – погрешности расчета амплитуд A_N^+ и A_1^- соответственно. Для модулей ΔA_N^+ , ΔA_1^- , очевидно, справедливы следующие оценки:

$$|\Delta A_N^+| \leq |\delta A^{+(\text{tot})}| + |\delta A^{-(\text{tot})}| \cdot |S_{12}^{(\text{tot})}| / |S_{22}^{(\text{tot})}|, \quad |\Delta A_1^-| \leq |\delta A^{-(\text{tot})}| / |S_{22}^{(\text{tot})}|. \quad (3.12)$$

При такой постановке задачи обычно вводятся коэффициенты отражения r и пропускания t по амплитуде вектора напряженности электрического поля

$$r \equiv \frac{E_1^-(z=a_1)}{E_1^+(z=a_1)} = \frac{A_1^- e^{-jk_1 a_1}}{A_1^+ e^{+jk_1 a_1}}, \quad t \equiv \frac{E_N^+(z=a_N)}{E_1^+(z=a_1)} = \frac{A_N^+ e^{jk_N a_{N-1}}}{A_1^+ e^{jk_1 a_1}}. \quad (3.13)$$

Из-за того, что амплитуды A_1^- и A_N^+ обладают погрешностями ΔA_1^- и ΔA_N^+ , коэффициенты r и t также обладают некоторыми погрешностями Δr и Δt . Отметим, что как коэффициенты r , t , так и их погрешности Δr , Δt в общем случае являются комплексными величинами. Подставим амплитуды A_1^- и A_N^+ с учетом погрешностей из (3.11) в (3.13), получим:

$$r = \tilde{r} + \Delta r, \quad \tilde{r} = -\frac{S_{21}^{(\text{tot})}}{S_{22}^{(\text{tot})}} e^{-2jk_1 a_1}, \quad |\Delta r| \leq \frac{|\Delta A_1^-|}{|A_1^+|} \leq \frac{1}{|S_{22}^{(\text{tot})}|} \frac{|\delta A^{-(\text{tot})}|}{|A_1^+|},$$

$$t = \tilde{t} + \Delta t, \quad \tilde{t} = e^{j(k_N a_{N-1} - k_1 a_1)} \frac{S_{11}^{(\text{tot})} S_{22}^{(\text{tot})} - S_{12}^{(\text{tot})} S_{21}^{(\text{tot})}}{S_{22}^{(\text{tot})}}, \quad |\Delta t| \leq \frac{|\Delta A_N^+|}{|A_1^+|} \leq \frac{|\delta A^{+(\text{tot})}|}{|A_1^+|} + \frac{|\delta A^{-(\text{tot})}|}{|A_1^+|} \frac{|S_{12}^{(\text{tot})}|}{|S_{22}^{(\text{tot})}|}. \quad (3.14)$$

Здесь \tilde{r} и \tilde{t} – коэффициенты отражения и пропускания без учета погрешностей, то есть при нулевых погрешностях. Отметим, что погрешности равны нулю, когда все малые параметры $p_{1,2,3}^{(l)}$ равны нулю, в таком случае $r \equiv \tilde{r}, t \equiv \tilde{t}$. Такое возможно в случае, который можно рассмотреть только чисто математически. Если проводимость пленок устремить к бесконечности, а толщины пленок устремить к нулю, но таким образом, чтобы коэффициенты η_l для всех пленок оставались константами, то $p_{1,2,3}^{(l)}$ также будут стремиться к нулю.

Также вводятся коэффициенты отражения R , пропускания T и поглощения Q по интенсивности электромагнитного поля:

$$R \equiv |r|^2, \quad T \equiv n_N |t|^2 / n_1, \quad Q \equiv 1 - R - T \quad (3.15)$$

Аналогично, запишем формулы (3.15) с учетом погрешностей ΔR , ΔT и ΔQ . Но сначала сделаем одно замечание. В формуле $r = \tilde{r} + \Delta r$ значение \tilde{r} мы можем рассчитать точно, а формула для погрешности Δr нам неизвестна. Нам известно лишь то, что $|\Delta r|$ меньше некоторого числа. Будем считать, что это число мы также можем вычислить точно. Поэтому при расчете погрешности ΔR мы будем исходить из следующих соображений. Согласно определению (3.15): $R \equiv |\tilde{r} + \Delta r|^2 \equiv |\tilde{r}^2 + 2\tilde{r}\Delta r + (\Delta r)^2|$. Оценим максимальные отклонения от значения $R \equiv |\tilde{r}|^2$, которые могут вносить слагаемые $2\tilde{r}\Delta r + (\Delta r)^2$. Очевидно, что таковыми являются случаи, когда $R \equiv |\tilde{r}|^2 \pm |2\tilde{r}\Delta r + (\Delta r)^2|$. Поэтому мы будем считать, что

$$\Delta R \leq |2\tilde{r}\Delta r + (\Delta r)^2| \leq |2\tilde{r}\Delta r| + |\Delta r|^2 = |\Delta r| (2|\tilde{r}| + |\Delta r|).$$

Применяя те же соображения для коэффициента T , в итоге получим:

$$R \equiv |\tilde{r} + \Delta r|^2 = \tilde{R} + \Delta R, \quad \tilde{R} \equiv |\tilde{r}|^2, \quad |\Delta R| \leq |\Delta r| (2|\tilde{r}| + |\Delta r|),$$

$$T = n_N |\tilde{t} + \Delta t|^2 / n_1 = \tilde{T} + \Delta T, \quad \tilde{T} = n_N |\tilde{t}|^2 / n_1, \quad |\Delta T| \leq \frac{n_N}{n_1} |\Delta t| (2|\tilde{t}| + |\Delta t|), \quad (3.16)$$

$$Q \equiv 1 - \tilde{R} - \tilde{T} + \Delta Q, \quad |\Delta Q| \leq |\Delta R| + |\Delta T|.$$

Здесь \tilde{R} , \tilde{T} – коэффициенты отражения и пропускания без учета погрешностей.

Рассмотрим теперь задачу рассеяния двух встречных волн. Тогда амплитуды A_1^+ и A_N^- заданы точно (с нулевыми погрешностями) и не равны нулю, а амплитуды A_1^- и A_N^+ , которые необходимо найти, обладают погрешностями. Решение данной задачи записывается следующим образом:

$$A_N^+ = \frac{S_{11}^{(\text{tot})} S_{22}^{(\text{tot})} - S_{12}^{(\text{tot})} S_{21}^{(\text{tot})}}{S_{22}^{(\text{tot})}} A_1^+ + \frac{S_{12}^{(\text{tot})}}{S_{22}^{(\text{tot})}} A_N^- + \Delta A_N^+, \quad \Delta A_N^+ = -\frac{S_{12}^{(\text{tot})}}{S_{22}^{(\text{tot})}} \delta A_N^{-(\text{tot})} + \delta A_N^{+(\text{tot})},$$

$$A_1^- = -\frac{S_{21}^{(\text{tot})}}{S_{22}^{(\text{tot})}} A_1^+ + \frac{1}{S_{22}^{(\text{tot})}} A_N^- + \Delta A_1^-, \quad \Delta A_1^- = -\frac{1}{S_{22}^{(\text{tot})}} \delta A_N^{-(\text{tot})}. \quad (3.17)$$

Аналогично, здесь ΔA_N^+ , ΔA_1^- – погрешности расчета амплитуд A_N^+ и A_1^- соответственно. При такой постановке задачи обычно интересуются только коэффициентом поглощения Q , рассчитываемым по формуле:

$$Q = \frac{n_1 |A_1^+|^2 + n_N |A_N^-|^2 - n_1 |A_1^-|^2 - n_N |A_N^+|^2}{n_1 |A_1^+|^2 + n_N |A_N^-|^2} = 1 - \frac{n_1 |A_1^-|^2 + n_N |A_N^+|^2}{n_1 |A_1^+|^2 + n_N |A_N^-|^2}. \quad (3.18)$$

Также запишем формулу (3.18) в виде $Q = \tilde{Q} + \Delta Q$, где ΔQ – погрешность коэффициента поглощения, а \tilde{Q} – коэффициент поглощения без учета погрешности. Для этого оказывается удобным ввести \tilde{A}_N^+ и \tilde{A}_N^- – амплитуды (3.17) без учета погрешностей

$$\tilde{A}_N^+ = \frac{S_{11}^{(\text{tot})} S_{22}^{(\text{tot})} - S_{12}^{(\text{tot})} S_{21}^{(\text{tot})}}{S_{22}^{(\text{tot})}} A_1^+ + \frac{S_{12}^{(\text{tot})}}{S_{22}^{(\text{tot})}} A_N^-, \quad \tilde{A}_N^- = -\frac{S_{21}^{(\text{tot})}}{S_{22}^{(\text{tot})}} A_1^+ + \frac{1}{S_{22}^{(\text{tot})}} A_N^-. \quad (3.19)$$

Тогда:

$$Q = \tilde{Q} + \Delta Q, \quad \tilde{Q} = 1 - \frac{n_1 |\tilde{A}_1^-|^2 + n_N |\tilde{A}_N^+|^2}{n_1 |A_1^+|^2 + n_N |A_N^-|^2},$$

$$|\Delta Q| \leq \frac{n_1 |2\tilde{A}_1^- \Delta A_1^- + (\Delta A_1^-)^2| + n_N |2\tilde{A}_N^+ \Delta A_N^+ + (\Delta A_N^+)^2|}{n_1 |A_1^+|^2 + n_N |A_N^-|^2} \leq$$

$$\leq \frac{n_1 |\Delta A_1^-| (2|\tilde{A}_1^-| + |\Delta A_1^-|) + n_N |\Delta A_N^+| (2|\tilde{A}_N^+| + |\Delta A_N^+|)}{n_1 |A_1^+|^2 + n_N |A_N^-|^2}. \quad (3.20)$$

Иногда вводится еще один коэффициент P , который определяется равенством

$$P = 1 - Q. \quad (3.21)$$

Данный коэффициент равен доле энергии электромагнитных волн, возвращающейся обратно в генераторы, т.е. доле непоглощенной энергии.

Поясним, что выражение (3.15) для коэффициента T и выражение (3.18) для коэффициента Q выводятся из формулы для вектора Умова-Пойтинга $\mathbf{\Pi}$, усредненного по периоду колебаний электромагнитной волны: $\langle \mathbf{\Pi} \rangle = \text{Re}[\mathbf{E}, \mathbf{H}^*] / 2$. Здесь символами $\langle \rangle$, $*$, $[\dots, \dots]$ обозначаются соответственно операции усреднения по периоду колебаний, комплексного сопряжения и векторного произведения. Учитывая, что в рассматриваемом случае $\mathbf{E} = \{E(z), 0, 0\}$, $\mathbf{H} = \{0, H(z), 0\}$, $E' = j\omega\mu_0 H$, для l -ого слоя диэлектрика получим:

$$\langle \mathbf{\Pi}_l \rangle = \mathbf{e}_z n_l \sqrt{\varepsilon_0 / \mu_0} (|A_l^+|^2 - |A_l^-|^2) / 2. \quad (3.22)$$

Здесь \mathbf{e}_z – единичный вектор, направленный вдоль оси Oz . Из формулы (3.18) следует, что энергия, переносимая электромагнитными волнами E_l^\pm вдоль оси Oz за единицу времени пропорциональна $\pm n_l |A_l^\pm|^2$.

Таким образом, выражение для коэффициента T в формуле (3.15) является отношением энергии, падающей на N -слойную структуру волны ($n_1 |A_1^+|^2$), к энергии волны, прошедшей через все N слоев ($n_N |A_N^+|^2$). В формуле (3.18) слагаемое $n_1 |A_1^+|^2 + n_N |A_N^-|^2$ соответствует энергии волн, излучаемых генераторами (т.е. энергии волн, падающих на N -слойную структуру); а слагаемое $-n_1 |A_1^-|^2 - n_N |A_N^+|^2$ соответствует энергии волн, возвращающихся обратно в генераторы.

3.2 Преимущества предлагаемого подхода: разбиение задач проектирования оптических приборов на два независимых блока, возможность описания двуслойных пленок при помощи одной матрицы рассеяния

Рассмотрим, в чем заключаются преимущества предлагаемого подхода. Неоднородная среда конечной толщины (пленка толщиной h с проводимостью $\sigma(z)$) описывается матрицей рассеяния. В нулевом приближении метода Пикара эта матрица

рассеяния содержит всего один параметр η , который полностью характеризует оптические свойства пленки. Таким образом, для описания распространения электромагнитных волн через неоднородную тонкую пленку не нужно обладать информацией ни о ее толщине h , ни о зависимости проводимости $\sigma(z)$. Это является существенным упрощением, позволяющим разбивать задачи, связанные с проектированием оптических N -слойных структур, содержащих тонкие металлические пленки, на два независимых блока.

Действительно, как правило, целью проектирования является создание оптической системы с требуемым свойством. Если необходимо создать оптическую систему, обладающую требуемым свойством только на одной частоте ω_1 , данное свойство можно записать в виде равенства

$$F(r(\omega_1), t(\omega_1)) = 0. \quad (3.23)$$

Здесь F – целевая функция, при равенстве нулю которой выполняется требуемое свойство.

Если же необходимо, чтобы требуемое свойство выполнялось в диапазоне частот $[\omega_1, \omega_2]$, то данное свойство удобнее формулировать в виде задачи о минимизации некоторого функционала S на интервале $[\omega_1, \omega_2]$ (поскольку, как правило, равенства типа (3.23) не могут выполняться точно на интервале частот)

$$\min S = \min \int_{\omega_1}^{\omega_2} |F[r(\omega), t(\omega)]| d\omega. \quad (3.24)$$

Предлагаемый подход позволяет разбить задачу проектирования оптического прибора на два независимых блока:

1) подбор толщины диэлектрических слоев H_l , их показателей преломления n_l , показателей преломления тонких пленок η_l , при которых выполняется равенство (3.23) или обеспечивается минимум функционала (3.24);

2) подбор материалов диэлектрических слоев, металла и способа напыления пленок, толщин пленок, обеспечивающих требуемые значения n_l, η_l .

Важно, что для решения задач первого блока не требуется обладать информацией о толщине пленки h и зависимости $\sigma(z)$. Данная информация нужна только для решения задач второго блока, поскольку коэффициент η определяется толщиной пленки и зависимостью $\sigma(z)$. Относительно создания плоскостойких диэлектрических сред с заданными свойствами см. также работу [122].

Кроме того, предлагаемые приближенные граничные условия значительно упрощают описание распространения электромагнитных волн через многослойные тонкопленочные структуры. Дело в том, что несколько последовательно напыленных на

подложку пленок (многослойная пленка) также могут быть описаны одной матрицей рассеяния, содержащей всего один параметр η . Действительно, пусть на подложку сначала была напылена тонкая пленка толщиной h_1 с зависимостью проводимости $\sigma_1(z)$ и коэффициентом преломления поверхности η_1 . Пусть затем поверх первой пленки была напылена вторая с другими значениями h_2 , η_2 и другой зависимостью $\sigma_2(z)$. Из свойства аддитивности интеграла, стоящего в выражении (2.98), следует, что две данные пленки можно рассматривать в совокупности как один металлический слой с толщиной $h=h_1+h_2$ и коэффициентом преломления поверхности $\eta=\eta_1+\eta_2$. При этом параметры $p_{1,2,3}$ для данного металлического слоя необходимо рассчитать заново (поскольку для этого металлического слоя значения $p_{1,2,3}$ окажутся большими, чем для каждой из пленок по отдельности).

Появляется возможность сделать еще одно важное упрощение. Если металлическая пленка нанесена на тонкую диэлектрическую пленку, такую систему также можно в совокупности рассматривать как один слой с некоторым значением η .

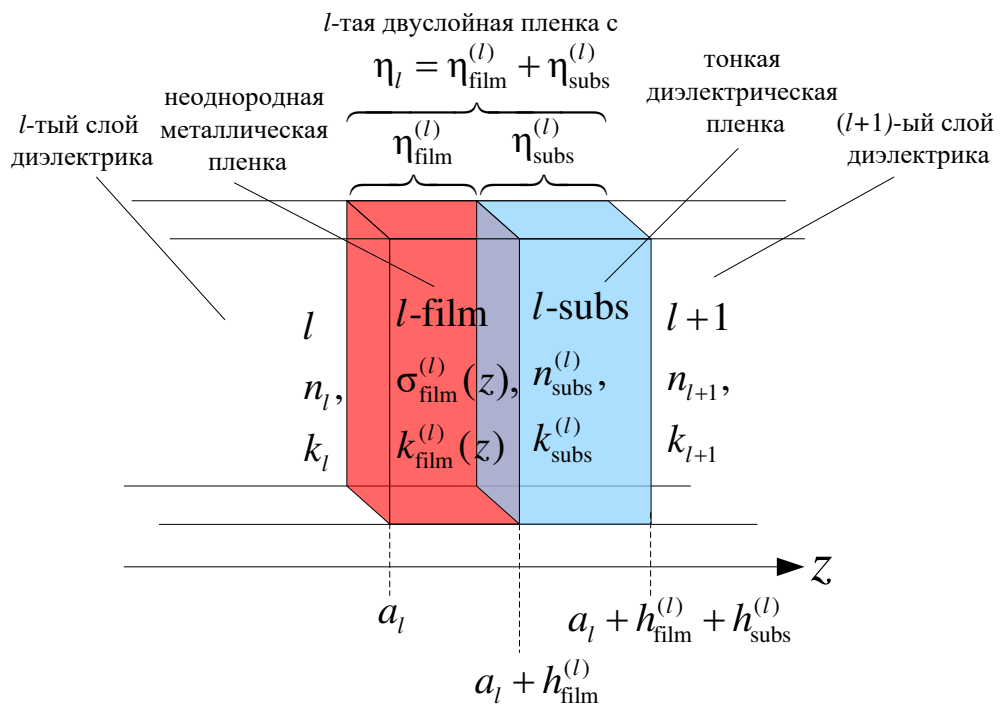


Рис. 3.2 Двуслойная пленка – структура, состоящая из двух тонких пленок: пленки металла и пленки диэлектрика

Этот случай крайне важен с практической точки зрения, поскольку отдельно-отстоящие от подложек металлические нанометровые пленки крайне сложны в изготовлении. Нанесение металла на тонкие диэлектрические пленки является компромиссным решением этой проблемы. Поэтому рассмотрим данную систему более подробно.

Чтобы не изменять терминологию, введенную в начале этого раздела, мы добавим некоторые обозначения. Слой, соответствующий l -той тонкой металлической пленке, здесь мы будем называть « l -film». Слой, соответствующий l -той тонкой диэлектрической пленке, здесь мы будем называть « l -subs», см. рис. 3.2. Будем говорить, что в совокупности слой « l -film» и слой « l -subs» образуют l -тую двуслойную пленку. Покажем, что l -тую двуслойную пленку также можно описать при помощи матрицы рассеяния.

Пусть l -тая двуслойная пленка находится между l -тым и $(l+1)$ -ым слоями диэлектрика. Снова будем считать, что тонкая металлическая пленка представляет собой неоднородный слой конечной толщины $h_{\text{film}}^{(l)}$. Пусть данная металлическая пленка напылена (или нанесена каким-либо другим образом) на диэлектрическую пленку толщиной $h_{\text{subs}}^{(l)}$ из однородного диэлектрика с показателем преломления $n_{\text{subs}}^{(l)}$ (см. рис.3.2).

При вычислении коэффициента η_l l -ой двуслойной пленки (см. определение (2.97)) интеграл в выражении (2.92) разбивается на два слагаемых:

$$\eta_l = \eta_{\text{film}}^{(l)} + \eta_{\text{subs}}^{(l)}, \quad \eta_{\text{film}}^{(l)} = \int_{a_l}^{a_l+h_{\text{film}}^{(l)}} (k_{\text{film}}^{(l)}(z))^2 / (jk_0), \quad \eta_{\text{subs}}^{(l)} = \int_{a_l+h_{\text{film}}^{(l)}}^{a_l+h_{\text{film}}^{(l)}+h_{\text{subs}}^{(l)}} (k_{\text{subs}}^{(l)})^2 / (jk_0). \quad (3.25)$$

Коэффициент $\eta_{\text{film}}^{(l)}$, как было показано ранее, равен отношению импеданса вакуума Z_0 к импедансу металлической пленки $Z_{\text{film}}^{(l)} = 1/(h_{\text{film}}^{(l)} \langle \sigma_{\text{film}}^{(l)} \rangle)$, где $\langle \sigma_{\text{film}}^{(l)} \rangle$ – усредненная по толщине l -ой пленки проводимость ее металла.

Коэффициент $\eta_{\text{subs}}^{(l)}$, с учетом того, что $k_{\text{subs}}^{(l)} = \omega n_{\text{subs}}^{(l)} (\epsilon_0 \mu_0)^{1/2}$, равен $-j h_{\text{subs}}^{(l)} k_0 (n_{\text{subs}}^{(l)})^2$. Напомним, что здесь, как и ранее $k_0 = \omega (\epsilon_0 \mu_0)^{1/2}$ – волновое число вакуума. В итоге, для l -той двуслойной пленки получаем:

$$\eta_l = \eta_{\text{film}}^{(l)} + \eta_{\text{subs}}^{(l)}, \quad \eta_{\text{film}}^{(l)} = Z_0 h_{\text{film}}^{(l)} \langle \sigma_{\text{film}}^{(l)} \rangle, \quad \eta_{\text{subs}}^{(l)} = -j h_{\text{subs}}^{(l)} k_0 (n_{\text{subs}}^{(l)})^2. \quad (3.26)$$

Поскольку $|k_{\text{film}}^{(l)}| > k_{\text{subs}}^{(l)}$, для l -ой двуслойной пленки параметры $p_{1,2,3}$ рассчитываются следующим образом:

$$p_2^{(l)} = (h_{\text{film}}^{(l)} + h_{\text{subs}}^{(l)}) \max |k_{\text{film}}^{(l)}|, \quad p_1^{(l)} = (h_{\text{film}}^{(l)} + h_{\text{subs}}^{(l)}) k_l, \quad p_3^{(l)} = (h_{\text{film}}^{(l)} + h_{\text{subs}}^{(l)}) k_{l+1}. \quad (3.27)$$

Естественно ожидать, что $h_{\text{film}}^{(l)} < h_{\text{subs}}^{(l)}$ и $n_{\text{subs}}^{(l)} \sim n_l \sim n_{l+1}$, поэтому $p_1^{(l)} \sim p_3^{(l)} \sim h_{\text{subs}}^{(l)} k_0 (n_{\text{subs}}^{(l)})^2 \ll 1$. Между тем, как было показано ранее, $Z_0 h_{\text{film}}^{(l)} \langle \sigma_{\text{film}}^{(l)} \rangle \sim (p_2^{(l)})^2 / p_{1,3}^{(l)} \sim 1$. Поэтому $\eta_{\text{film}}^{(l)} \gg \eta_{\text{subs}}^{(l)}$ при $p_{1,2,3}^{(l)} \ll 1$. Поэтому имеет смысл включить $\eta_{\text{subs}}^{(l)}$ в выражении (3.25) в общую погрешность нахождения амплитуд (3.7). Для этого матрицу рассеяния l -той границы (3.2)-(3.5) представим в виде суммы двух матриц:

$$\hat{S}^{(l)} = \hat{S}_{\text{film}}^{(l)} + \hat{S}_{\text{subs}}^{(l)}. \quad (3.28)$$

Здесь элементы матрицы $\hat{\mathbf{S}}_{\text{film}}^{(l)}$ определяются выражениями (3.2)-(3.5), в которых $\eta_l \equiv \eta_{\text{film}}^{(l)}$
 $= Z_0 h_{\text{film}}^{(l)} \langle \sigma_{\text{film}}^{(l)} \rangle$. Элементы матрицы $\hat{\mathbf{S}}_{\text{subs}}^{(l)}$ рассчитываются по формуле:

$$\hat{\mathbf{S}}_{\text{subs}}^{(l)} = \frac{\eta_{\text{subs}}^{(l)}}{2n_{l+1}} \begin{pmatrix} -e_l^{+-} & -e_l^{--} \\ +e_l^{++} & +e_l^{-+} \end{pmatrix}. \quad (3.29)$$

Включим столбец $\hat{\mathbf{S}}_{\text{subs}}^{(l)} |A_l\rangle$ в столбец погрешностей метода Пикара $|\delta A_{l+1}\rangle$,
получим столбец новых погрешностей $|\delta \tilde{A}_{l+1}\rangle \equiv |\delta A_{l+1}\rangle + \hat{\mathbf{S}}_{\text{subs}}^{(l)} |A_l\rangle$, элементы которого
рассчитываются по формулам:

$$\delta \tilde{A}_{l+1}^+ = -\frac{\eta_{\text{subs}}^{(l)}}{2n_{l+1}} (e_l^{+-} A_l^+ + e_l^{--} A_l^-) + \delta A_{l+1}^+, \quad (3.30)$$

$$\delta \tilde{A}_{l+1}^- = -\frac{\eta_{\text{subs}}^{(l)}}{2n_{l+1}} (e_l^{++} A_l^+ + e_l^{-+} A_l^-) + \delta A_{l+1}^-. \quad (3.31)$$

Возьмем модуль от равенств (3.30)-(3.31). Затем используем свойства $|ab|=|a||b|$ и
 $|a+b| < |a|+|b|$. Учтем, что $|e_l^{\pm\pm}|=1$, а также то, что по определению $A^{(l)} = |A_l^+| + |A_l^-|$. Получим
оценку для новых погрешностей:

$$\begin{aligned} |\delta \tilde{A}_{l+1}^{\pm}| &\leq 0.5 A^{(l)} |\eta_{\text{subs}}^{(l)}| / n_{l+1} + |\delta A_{l+1}^{\pm}| \equiv \\ &\equiv 0.5 A^{(l)} \left\{ \left(1 + \frac{p_1^{(l)}}{p_3^{(l)}} \right) (\text{ch}(p_2^{(l)}) - 1) + \frac{p_1^{(l)}}{p_2^{(l)}} \text{sh}(p_2^{(l)}) + \right. \\ &\left. + \frac{p_2^{(l)}}{p_3^{(l)}} (\text{sh}(p_2^{(l)}) - p_2^{(l)}) + 4 \sin(p_3^{(l)} / 2) \left(1 + \frac{p_1^{(l)}}{p_3^{(l)}} + \frac{(p_2^{(l)})^2}{p_3^{(l)}} \right) + |\eta_{\text{subs}}^{(l)}| / n_{l+1} \right\}. \quad (3.32) \end{aligned}$$

Выражение (3.32) отличается от выражения (3.7) только наличием последнего
слагаемого в фигурных скобках.

В следующих разделах мы рассмотрим вышеописанные N -слойные структуры,
содержащие конкретное число диэлектрических слоев и металлических (однослойных или
двуслойных) пленок, изучим их характерные особенности и свойства

3.3 Отдельно-отстоящая ультратонкая пленка

Рассмотрим самый простой случай $N=1$, изображенный на рис. 3.3. Будем считать,
что металлическая пленка (или двуслойная пленка, состоящая из тонкой металлической
пленки, нанесенной на тонкую диэлектрическую пленку) расположена между двумя

диэлектрическими средами, каждая из которых занимает полупространство (среда 1 занимает левое полупространство, а среда 2 – правое).

С практической точки зрения, такая система реализуется в случае свободно-отстоящей пленки. Если пленка находится в воздушном пространстве, то $n_1 = n_2 = 1$. Но для общности изложения мы рассмотрим случай, произвольных значений n_1, n_2 , больших единицы.

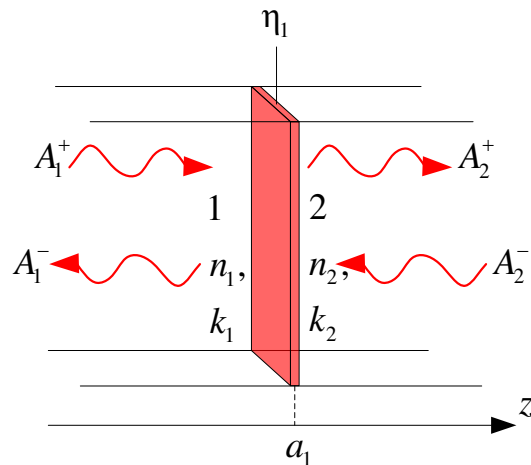


Рис. 3.3 Тонкая пленка располагается между двумя диэлектрическими средами, каждая из которых занимает полупространство.

Рассматриваемая система содержит всего один слой ($N=1, l=1$), поэтому, согласно (3.9) и (3.10):

$$\hat{\mathbf{S}}^{(\text{tot})} \equiv \hat{\mathbf{S}}^{(1)} = \frac{1}{2n_2} \begin{pmatrix} e^{ja_1(+k_1-k_2)}(n_2^- + n_1) & e^{ja_1(-k_1-k_2)}(n_2^- - n_1) \\ e^{ja_1(+k_1+k_2)}(n_2^+ - n_1) & e^{ja_1(-k_1+k_2)}(n_2^+ + n_1) \end{pmatrix}, \quad (3.33)$$

$$|\delta A^{(\text{tot})}\rangle \equiv |\delta A_2\rangle. \quad (3.34)$$

Для оценки элементов столбца погрешностей δA_2^\pm в (3.34) будем использовать либо неравенство (3.7) в случае свободно-отстоящей металлической пленки, либо неравенство (3.32) в случае двуслойной пленки, состоящей из металлической пленки, нанесенной на диэлектрическую пленку.

Рассмотрим задачу рассеяния одной падающей электромагнитной волны (амплитуда $A_2^- = 0$, амплитуда A_1^+ задана, а амплитуды A_1^- и A_2^+ нужно найти). Воспользуемся формулами (3.11), найдем неизвестные амплитуды с учетом погрешностей:

$$A_2^+ = e^{ja_1(k_1 - k_2)} \frac{2n_1}{n_2^+ + n_1} A_1^+ + \Delta A_2^+, \quad |\Delta A_2^\pm| \leq |\delta A_2^\pm| \left(1 + \frac{|n_2^- - n_1|}{n_2^+ + n_1} \right), \quad (3.35)$$

$$A_1^- = e^{2ja_1k_1} \frac{n_1 - n_2^+}{n_1 + n_2^+} A_1^+ + \Delta A_1^-, \quad |\Delta A_1^-| \leq |\delta A_2^\pm| \frac{2n_2}{n_2^+ + n_1}. \quad (3.36)$$

Воспользуемся формулами (3.14), найдем оптические коэффициенты без учета погрешностей:

$$\tilde{r} = \frac{n_1 - n_2^+}{n_1 + n_2^+}, \quad (3.37)$$

$$\tilde{t} = \frac{2n_1}{n_1 + n_2^+} e^{-2jk_2a_1}. \quad (3.38)$$

Оценки погрешностей Δr и Δt можно записать в виде:

$$|\Delta r| = \frac{|\Delta A_1^-|}{|A_1^+|} \leq \frac{|\delta A_2^\pm|}{|A_1^+|} \frac{2n_2}{n_2^+ + n_1}, \quad (3.39)$$

$$|\Delta t| \leq \frac{|\delta A_2^\pm|}{|A_1^+|} \left(1 + \frac{|n_2^- - n_1|}{n_2^+ + n_1} \right). \quad (3.40)$$

При этом, согласно (3.7) и (3.32),

$$|\delta A_2^\pm| \leq 0.5A \left\{ \left(1 + \frac{p_1}{p_3} \right) (\text{ch}(p_2) - 1) + \frac{p_1}{p_2} \text{sh}(p_2) + \frac{p_2}{p_3} (\text{sh}(p_2) - p_2) 4 \sin(p_3 / 2) \left(1 + \frac{p_1}{p_3} + \frac{p_2^2}{p_3} \right) + \frac{|\eta_{\text{subs}}|}{n_2} \right\}. \quad (3.41)$$

В (3.41) в качестве коэффициента A мы можем выбрать величину большую, чем $|A_1^+| + |A_1^-|$, пусть например, $A = 2|A_1^+|$, тогда в формулах (3.39)-(3.40) погрешности $|\Delta r|$ и $|\Delta t|$ не будут зависеть от абсолютного значения амплитуд, так как

$$\frac{|\delta A_2^\pm|}{|A_1^+|} \leq \left(1 + \frac{p_1}{p_3} \right) (\text{ch}(p_2) - 1) + \frac{p_1}{p_2} \text{sh}(p_2) + \frac{p_2}{p_3} (\text{sh}(p_2) - p_2) 4 \sin(p_3 / 2) \left(1 + \frac{p_1}{p_3} + \frac{p_2^2}{p_3} \right) + \frac{|\eta_{\text{subs}}|}{n_2}. \quad (3.42)$$

Если мы рассматриваем отдельно-отстоящую металлическую пленку, то в выражении (3.41)-(3.42) $\eta_{\text{subs}} \equiv 0$. Из соотношений (3.16) получим формулы для коэффициентов R , T , Q :

$$R \equiv \left| \frac{n_1 - n_2^+}{n_1 + n_2^+} \right|^2 + \Delta R, \quad T = \frac{4n_1 n_2}{|n_1 + n_2^+|^2} + \Delta T, \quad Q = \frac{4n_1 \eta_1}{|n_1 + n_2^+|^2} + \Delta Q. \quad (3.43)$$

Погрешности ΔR , ΔT и ΔQ , согласно (3.16), выражаются через Δr , Δt , \tilde{r} , \tilde{t} , которые определяются соотношениями (3.39)-(3.40).

Исследование коэффициента поглощения $Q=Q(\eta_1)$ на экстремум приводит к следующим результатам. При $\eta_1=n_1+n_2$ наблюдается максимум коэффициента поглощения. В данном максимуме коэффициенты R , T , Q принимают следующие значения:

$$R \equiv \left(\frac{n_2}{n_1 + n_2} \right)^2 + \Delta R, \quad T = \frac{n_1 n_2}{(n_1 + n_2)^2} + \Delta T, \quad Q = \frac{n_1}{n_1 + n_2} + \Delta Q. \quad (3.44)$$

В случае, когда металлическая пленка (или двуслойная пленка) находится в воздушной среде $n_1=n_2$, поэтому из (3.44) получаем:

$$R \equiv 1/4 + \Delta R, \quad T = 1/4 + \Delta T, \quad Q = 1/2 + \Delta Q. \quad (3.45)$$

Из формул (3.45) следует, что вне зависимости от типа металла, путем подбора η_1 (а поскольку $\eta_1=Z_0 h_1 < \sigma(h_1) >$, то фактически путем подбора толщины металлического слоя h_1) возможно получить пленку, поглощающую ровно 50% энергии падающего электромагнитного излучения. Оставшиеся 50% энергии распределяются поровну между энергиями прошедшей и отраженной волн. Поскольку вплоть до видимого диапазона частот коэффициент η_1 не зависит от частоты, вышеописанный эффект 50%-ого поглощения является сверхширокополосным.

Данный эффект сверхширокополосного 50%-ого поглощения является уникальным свойством нанометровых металлических пленок. Действительно, как было показано в параграфе 1.4, поглотители из неактивных сред работают в весьма ограниченном диапазоне частот, а макроскопически толстые слои металла являются хорошими зеркалами и поэтому почти не поглощают электромагнитного излучения (см. параграф 1.1). Поглотители, коэффициент поглощения которых не зависит от частоты в широком диапазоне длин волн, актуальны для ряда технических приложений, в частности, для создания болометрических датчиков электромагнитного излучения (см. параграф 1.4). Болометры часто применяются в астрономии для регистрации излучения субмиллиметровой длины волны (в этом диапазоне длин волн болометры обладают рядом преимуществ по сравнению с прочими датчиками). По вышеописанным причинам интерес

представляют в основном только пленки со специально подогнанной толщиной $h=h_{pk}$, для которых наблюдается эффект 50%-го поглощения.

Графики зависимостей коэффициентов R , T , Q от толщины пленки, построенные по формулам (3.44) для частоты 10 ГГц, изображены на рис. 3.4. Для расчета проводимости использовалась квантовая модель проводимости Фукса (без учета дисперсионной зависимости проводимости) для меди с длиной свободного пробега электрона проводимости $l_0=39.9$ нм и концентрацией свободных электронов $n_e=8.47 \times 10^{28} \text{ м}^{-3}$. Коэффициенты зеркальности поверхностей металла считались равными нулю: $\beta_1 = \beta_2 = 0$. Толщина $h_{pk} = 1.5$ нм. При толщине $h_{pk} = 10$ нм коэффициент отражения составляет уже 95.5%, а коэффициент прохождения $5.2 \times 10^{-2} \%$. Поэтому основной интерес представляет область толщин 0...10 нм.

На рисунке 3.5 изображены погрешности коэффициента Q (погрешность Q всегда наибольшая в силу последней из формул (3.16)) для приближения $N=0$, соответствующего матрице $S_{nm}^{exp[0]}$. На рисунке 3.6 изображены те же погрешности для приближения $N=1$, соответствующего матрице $S_{nm}^{[1]}$, а на рисунке 3.7 – для $N=2$ и $N=3$, соответственно для матриц $S_{nm}^{[2]}$ и $S_{nm}^{[3]}$.

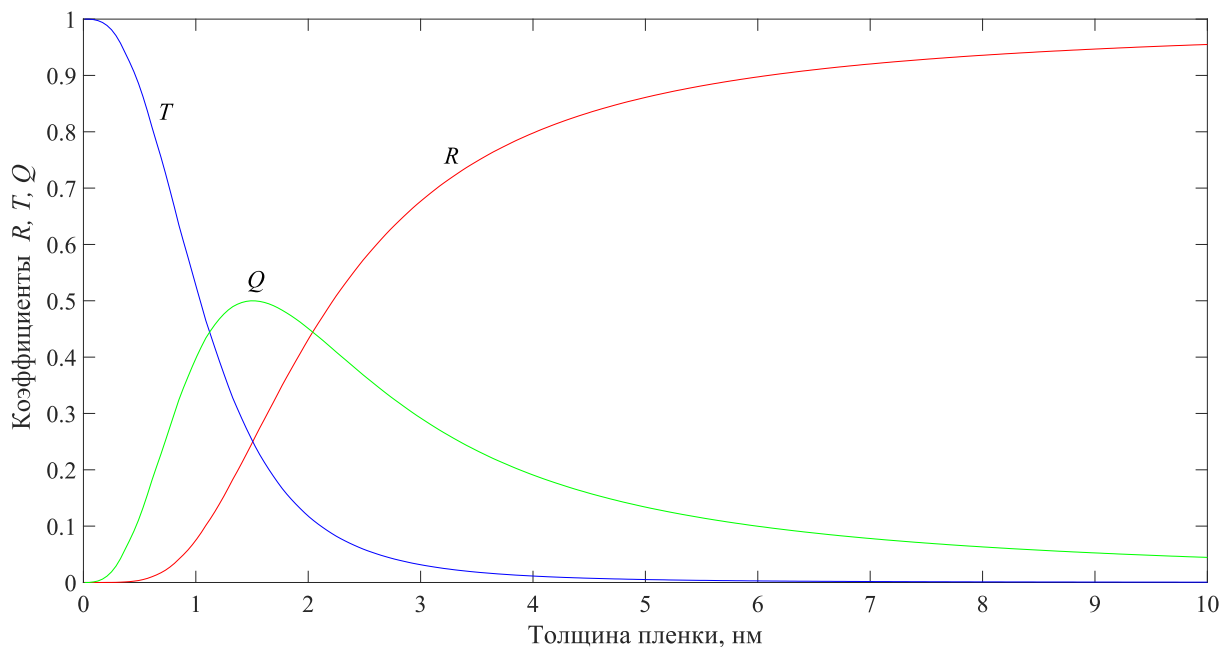


Рис. 3.4 Графики зависимостей коэффициентов R , T , Q от толщины пленки, построенные по формулам (3.44) для частоты 10 ГГц.

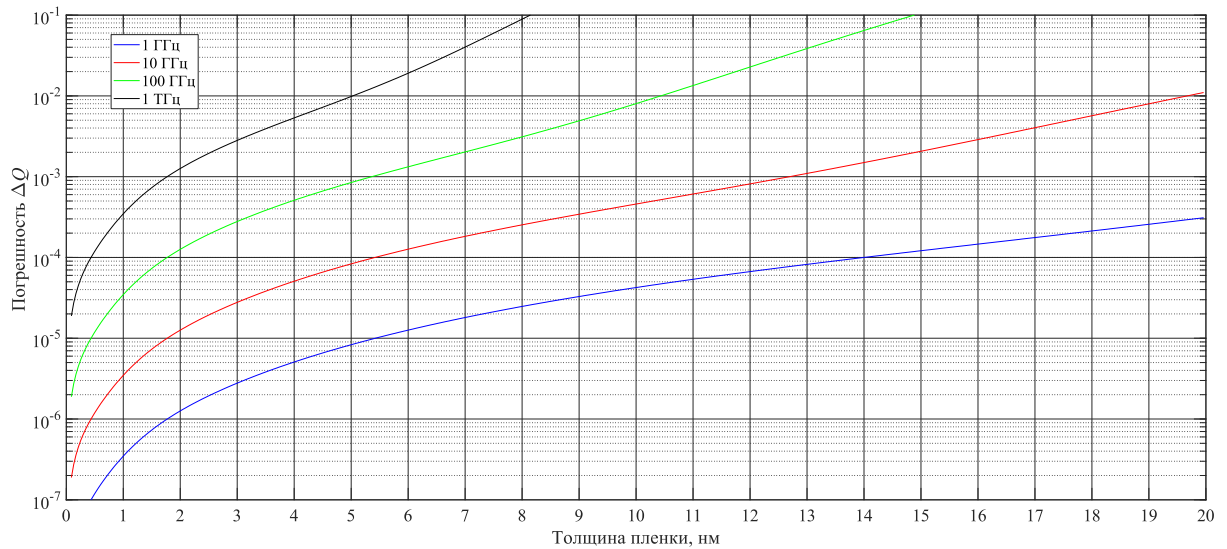


Рис. 3.5 Графики погрешностей коэффициента Q от толщины пленки, построенные по формулам (3.16) для частот 1, 10, 100 ГГц, 1 ТГц в нулевом приближении матрицы рассеяния.

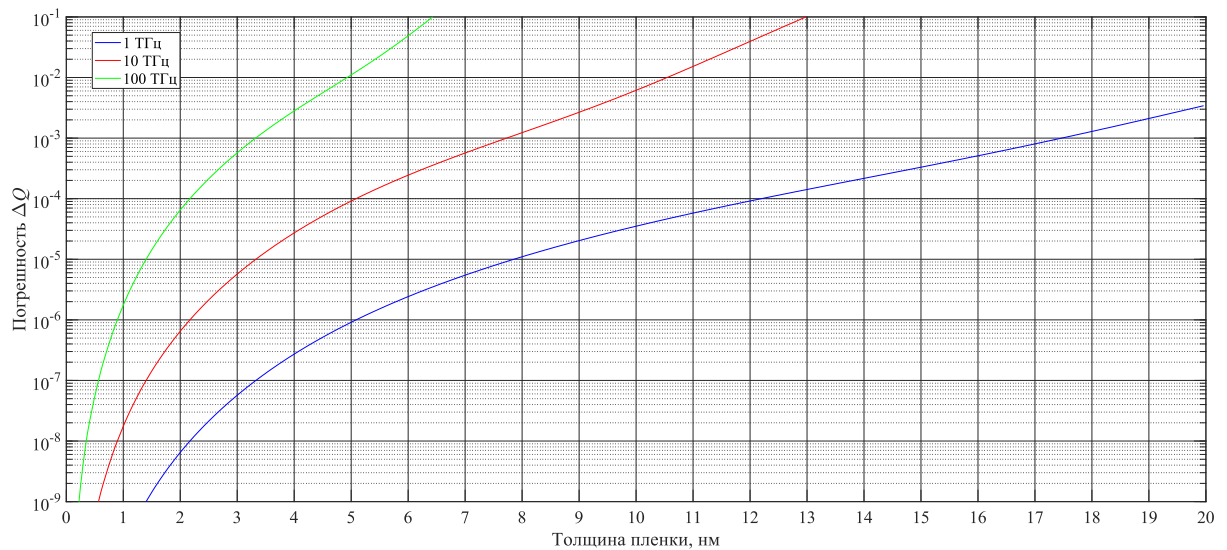


Рис. 3.6 Графики погрешностей коэффициента Q от толщины пленки, построенные по формулам (3.16) для частот 1, 10, 100 ТГц в первом приближении матрицы рассеяния.

Из графиков, изображенных на рисунке 3.5 можно заключить, что приближение $N=0$ достаточно хорошо работает вплоть до частоты 100 ГГц (на такой частоте при $h = 10$ нм, погрешность расчета коэффициента Q составляет менее 1%). Как следует из рисунка 3.6, в случае терагерцевого диапазона следует использовать приближение $N=1$: вплоть до частоты 100 ТГц при $h = 10$ нм погрешность расчета коэффициента Q составляет 1%. Из рисунка 3.7 можно заключить, что в случае оптических частот в зависимости от того, для

какого диапазона толщин необходимо проводить расчеты, следует использовать приближение $N=2$, 3 или даже более высокие приближения.

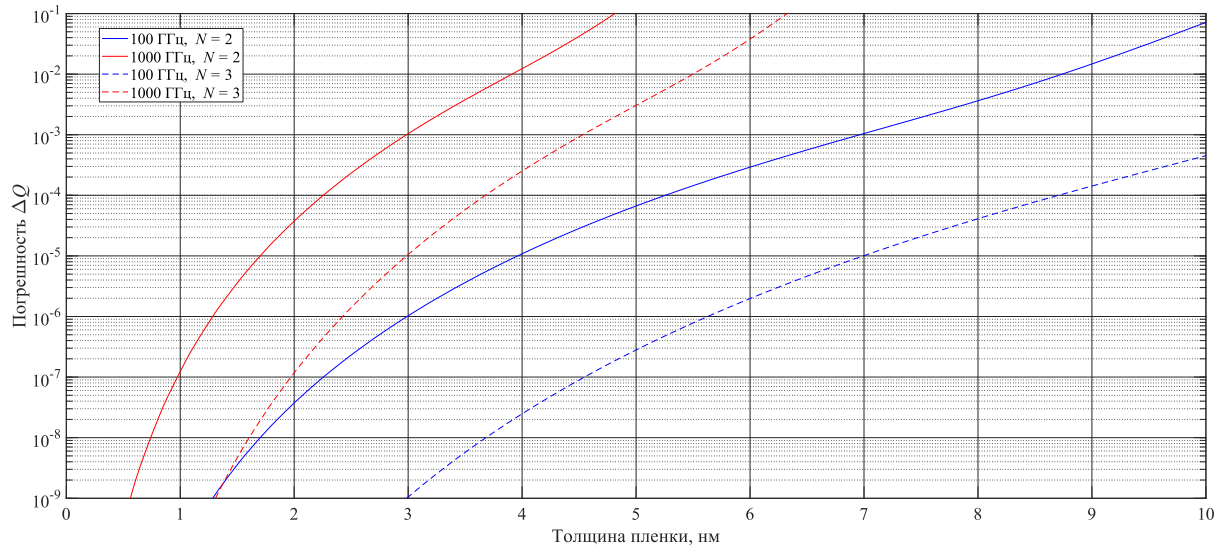


Рис. 3.7 Графики погрешностей коэффициента Q от толщины пленки, построенные по формулам (3.16) для частот 100 и 1000 ТГц во втором и третьем приближениях матрицы рассеяния.

3.4 Диэлектрическая подложка с пленками, напыленными на нее с двух сторон

Рассмотрим систему типа «диэлектрическая подложка толщиной H с двумя металлическими пленками, напыленными на нее с двух сторон» ($H = a_2 - a_1$ см. рис. 3.8). Будем интересоваться постановкой задачи, в которой амплитуда $A_3^- = 0$. Найдем оптические коэффициенты отражения r и прохождения t . В данном случае присутствуют три среды и две границы раздела сред, поэтому:

$$\hat{S}^{(\text{tot})} \equiv \hat{S}_{(2)}^{\text{exp}[0]} \hat{S}_{(1)}^{\text{exp}[0]}, \quad (3.46)$$

$$\hat{S}_{(1)}^{\text{exp}[0]} = \frac{1}{2n_2} \begin{pmatrix} e^{ja_1(+k_1-k_2)}(n_2^- + n_1) & e^{ja_1(-k_1-k_2)}(n_2^- - n_1) \\ e^{ja_1(+k_1+k_2)}(n_2^+ - n_1) & e^{ja_1(-k_1+k_2)}(n_2^+ + n_1) \end{pmatrix}, \quad (3.47)$$

$$\hat{S}_{(2)}^{\text{exp}[0]} = \frac{1}{2n_3} \begin{pmatrix} e^{ja_2(+k_2-k_3)}(n_3^- + n_2) & e^{ja_2(-k_2-k_3)}(n_3^- - n_2) \\ e^{ja_2(+k_2+k_3)}(n_3^+ - n_2) & e^{ja_2(-k_2+k_3)}(n_3^+ + n_2) \end{pmatrix}. \quad (3.48)$$

Здесь $n_3^\pm = n_3 \pm n_2$, $n_2^\pm = n_2 \pm n_1$. Вычисляя матричное произведение (3.46), получим:

$$S_{11}^{(\text{tot})} = e^{j(+a_1k_1-a_2k_3)} \left[e^{jk_2(a_2-a_1)}(n_3^- + n_2)(n_2^- + n_1) + e^{-jk_2(a_2-a_1)}(n_3^- - n_2)(n_2^+ - n_1) \right] / (4n_2n_3), \quad (3.49)$$

$$S_{12}^{(\text{tot})} = e^{j(-a_1 k_1 - a_2 k_3)} \left[e^{jk_2(a_2 - a_1)} (n_3^- + n_2)(n_2^- - n_1) + e^{-jk_2(a_2 - a_1)} (n_3^- - n_2)(n_2^+ + n_1) \right] / (4n_2 n_3), \quad (3.50)$$

$$S_{21}^{(\text{tot})} = e^{j(+a_1 k_1 + a_2 k_3)} \left[e^{jk_2(a_2 - a_1)} (n_3^+ - n_2)(n_2^- + n_1) + e^{-jk_2(a_2 - a_1)} (n_3^+ + n_2)(n_2^+ - n_1) \right] / (4n_2 n_3), \quad (3.51)$$

$$S_{22}^{(\text{tot})} = e^{j(-a_1 k_1 + a_2 k_3)} \left[e^{jk_2(a_2 - a_1)} (n_3^+ - n_2)(n_2^- - n_1) + e^{-jk_2(a_2 - a_1)} (n_3^+ + n_2)(n_2^+ + n_1) \right] / (4n_2 n_3). \quad (3.52)$$

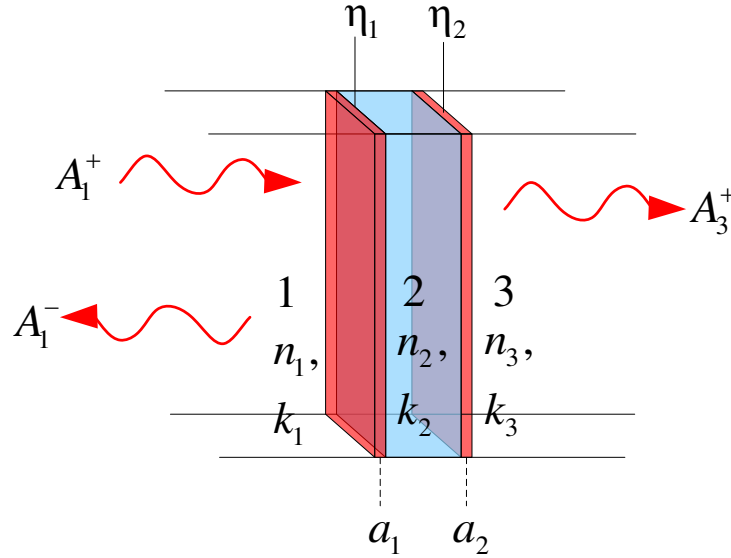


Рис. 3.8 Структура типа «диэлектрическая подложка с двумя напыленными на нее металлическими пленками».

Погрешность вычисляется, согласно формулам (3.10), (3.11), (3.14):

$$|\delta A^{(\text{tot})}\rangle = |\delta A_3\rangle + \hat{S}_{(2)}^{\text{exp}[0]} |\delta A_2\rangle. \quad (3.53)$$

Производя матричное умножение в (3.53), получим:

$$|\delta A^{+(\text{tot})}| \leq |\delta A_3^+| + |S_{(2)11}^{\text{exp}[0]}| \cdot |\delta A_2^+| + |S_{(2)12}^{\text{exp}[0]}| \cdot |\delta A_2^-|, \quad (3.54)$$

$$|\delta A^{-(\text{tot})}| \leq |\delta A_3^-| + |S_{(2)21}^{\text{exp}[0]}| \cdot |\delta A_2^+| + |S_{(2)22}^{\text{exp}[0]}| \cdot |\delta A_2^-|. \quad (3.55)$$

Учитывая формулу (3.14), получим:

$$|\Delta r| \leq \frac{|\Delta A_1^-|}{|A_1^+|} \leq \frac{1}{|S_{22}^{(\text{tot})}|} \frac{|\delta A^{-(\text{tot})}|}{|A_1^+|}, \quad |\Delta t| \leq \frac{|\Delta A_3^+|}{|A_1^+|} \leq \frac{|\delta A^{+(\text{tot})}|}{|A_1^+|} + \frac{|\delta A^{-(\text{tot})}|}{|A_1^+|} \frac{|S_{12}^{(\text{tot})}|}{|S_{22}^{(\text{tot})}|}. \quad (3.56)$$

Подставляя (3.54)-(3.55) в (3.56), получим:

$$|\Delta r| \leq \frac{1}{|S_{22}^{(\text{tot})}|} \left(\frac{|\delta A_3^-|}{|A_1^+|} + |S_{(2)11}^{\text{exp}[0]}| \frac{|\delta A_2^+|}{|A_1^+|} + |S_{(2)12}^{\text{exp}[0]}| \frac{|\delta A_2^-|}{|A_1^+|} \right), \quad (3.57)$$

$$|\Delta t| \leq \frac{|\delta A_3^+|}{|A_1^+|} + \frac{|S_{12}^{(\text{tot})}|}{|S_{22}^{(\text{tot})}|} \frac{|\delta A_3^-|}{|A_1^+|} + \frac{|\delta A_2^+|}{|A_1^+|} (|S_{(2)21}^{\text{exp}[0]}| + |S_{(2)11}^{\text{exp}[0]}|) + \frac{|\delta A_2^-|}{|A_1^+|} (|S_{(2)12}^{\text{exp}[0]}| + |S_{(2)22}^{\text{exp}[0]}|). \quad (3.58)$$

Непосредственно из матричного равенства

$$|A_1\rangle = \hat{S}_{(1)}^{\text{exp}[0]} |A_2\rangle + |\delta A_2\rangle \quad (3.59)$$

можно выразить A_2^+ через A_1^+ и δA_2^+ :

$$A_2^+ = \frac{A_1^+ S_{(1)22}^{\text{exp}[0]} - A_1^- S_{(1)12}^{\text{exp}[0]} - \delta A_2^+ S_{(1)22}^{\text{exp}[0]} + \delta A_2^- S_{(1)12}^{\text{exp}[0]}}{S_{(1)11}^{\text{exp}[0]} S_{(1)22}^{\text{exp}[0]} - S_{(1)21}^{\text{exp}[0]} S_{(1)12}^{\text{exp}[0]}}. \quad (3.60)$$

Учитывая (3.7) и то, что из законов сохранения энергии $n_1 |A_1^+|^2 \geq n_1 |A_1^-|^2 + n_3 |A_3^+|^2$ и $n_2 |A_2^+|^2 \geq n_2 |A_2^-|^2 + n_3 |A_3^+|^2$ следует соответственно $|A_1^-| \leq |A_1^+|$ и $|A_2^-| \leq |A_2^+|$, формулу (3.60) можно переписать в виде

$$|A_2^+| \leq |A_1^+| \frac{|S_{(1)22}^{\text{exp}[0]}| + |S_{(1)12}^{\text{exp}[0]}| + \{\dots\}_1 (|S_{(1)22}^{\text{exp}[0]}| + |S_{(1)12}^{\text{exp}[0]}|)}{|S_{(1)11}^{\text{exp}[0]} S_{(1)22}^{\text{exp}[0]} - S_{(1)21}^{\text{exp}[0]} S_{(1)12}^{\text{exp}[0]}|}, \quad (3.61)$$

$$\begin{aligned} \{\dots\}_1 = & \left\{ \left(1 + \frac{p_1^{(1)}}{p_3^{(1)}} \right) (\text{ch}(p_2^{(1)}) - 1) + \frac{p_1^{(1)}}{p_2^{(1)}} \text{sh}(p_2^{(1)}) + \right. \\ & \left. + \frac{p_2^{(1)}}{p_3^{(1)}} (\text{sh}(p_2^{(1)}) - p_2^{(1)}) + 4 \sin(p_3^{(1)}/2) \left(1 + \frac{p_1^{(1)}}{p_3^{(1)}} + \frac{(p_2^{(1)})^2}{p_3^{(1)}} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (3.62)$$

Таким образом, для оценки сверху коэффициентов $A^{(1)}$, $A^{(2)}$ получаем:

$$A^{(1)} \equiv |A_1^+| + |A_1^-| \leq 2|A_1^+|, \quad A^{(2)} \equiv |A_2^+| + |A_2^-| \leq 2|A_2^+| = 2|A_1^+| \frac{(1 + \{\dots\}_1) (|S_{(1)22}^{\text{exp}[0]}| + |S_{(1)12}^{\text{exp}[0]}|)}{|S_{(1)11}^{\text{exp}[0]} S_{(1)22}^{\text{exp}[0]} - S_{(1)21}^{\text{exp}[0]} S_{(1)12}^{\text{exp}[0]}|},$$

ПОЭТОМУ

$$\begin{aligned} |\delta A_3^\pm| \leq 0.5 A^{(2)} \{\dots\}_2 \Rightarrow \frac{|\delta A_3^\pm|}{|A_1^+|} & \leq 2 \{\dots\}_2 \frac{(1 + \{\dots\}_1) (|S_{(1)22}^{\text{exp}[0]}| + |S_{(1)12}^{\text{exp}[0]}|)}{|S_{(1)11}^{\text{exp}[0]} S_{(1)22}^{\text{exp}[0]} - S_{(1)21}^{\text{exp}[0]} S_{(1)12}^{\text{exp}[0]}|}, \\ |\delta A_2^\pm| \leq 0.5 A^{(1)} \{\dots\}_1 \Rightarrow \frac{|\delta A_2^\pm|}{|A_1^+|} & \leq \{\dots\}_1, \end{aligned} \quad (3.63)$$

где

$$\{\dots\}_k = \left\{ \left(1 + \frac{p_1^{(k)}}{p_3^{(k)}} \right) (\text{ch}(p_2^{(k)}) - 1) + \frac{p_1^{(k)}}{p_2^{(k)}} \text{sh}(p_2^{(k)}) + \right.$$

$$+ \frac{p_2^{(k)}}{p_3^{(k)}} \left(\text{sh}(p_2^{(k)}) - p_2^{(k)} \right) + 4 \sin(p_3^{(k)} / 2) \left(1 + \frac{p_1^{(k)}}{p_3^{(k)}} + \frac{(p_2^{(k)})^2}{p_3^{(k)}} \right) \left. \right\}. \quad (3.64)$$

Подставляя отношения $\frac{|\delta A_2^\pm|}{|A_1^+|}$ и $\frac{|\delta A_3^\pm|}{|A_1^+|}$ в формулы (3.57)-(3.58), получим:

$$|\Delta r| \leq \frac{1}{|S_{22}^{(\text{tot})}|} \left(2\{\dots\}_2 \frac{(1 + \{\dots\}_1) \left(|S_{(1)22}^{\text{exp}[0]}| + |S_{(1)12}^{\text{exp}[0]}| \right)}{|S_{(1)11}^{\text{exp}[0]} S_{(1)22}^{\text{exp}[0]} - S_{(1)21}^{\text{exp}[0]} S_{(1)12}^{\text{exp}[0]}|} + \left(|S_{(2)11}^{\text{exp}[0]}| + |S_{(2)12}^{\text{exp}[0]}| \right) \{\dots\}_1 \right), \quad (3.65)$$

$$|\Delta t| \leq 2\{\dots\}_2 \frac{(1 + \{\dots\}_1) \left(|S_{(1)22}^{\text{exp}[0]}| + |S_{(1)12}^{\text{exp}[0]}| \right)}{|S_{(1)11}^{\text{exp}[0]} S_{(1)22}^{\text{exp}[0]} - S_{(1)21}^{\text{exp}[0]} S_{(1)12}^{\text{exp}[0]}|} \left(1 + \frac{|S_{12}^{(\text{tot})}|}{|S_{22}^{(\text{tot})}|} \right) + \{\dots\}_1 \left(|S_{(2)21}^{\text{exp}[0]}| + |S_{(2)11}^{\text{exp}[0]}| + |S_{(2)12}^{\text{exp}[0]}| + |S_{(2)22}^{\text{exp}[0]}| \right). \quad (3.66)$$

Используя формулы (3.14), получим выражение для самих оптических коэффициентов:

$$t = \frac{4n_1 n_2}{e^{jk_2 H} (n_3^+ - n_2)(n_2^- - n_1) + e^{-jk_2 H} (n_3^+ + n_2)(n_2^+ + n_1)}, \quad (3.67)$$

$$r = -\frac{e^{+jk_2 H} (n_3^+ - n_2)(n_2^- + n_1) + e^{-jk_2 H} (n_3^+ + n_2)(n_2^+ - n_1)}{e^{+jk_2 H} (n_3^+ - n_2)(n_2^- - n_1) + e^{-jk_2 H} (n_3^+ + n_2)(n_2^+ + n_1)}. \quad (3.68)$$

Данные формулы представляют собой решение вышеописанной задачи. При этом $\eta_1=0$, $\eta_2 \neq 0$, соответствует тому, что на подложку напылена одна пленка со стороны $z = a_2$ (этот случай мы будем обозначать символами «sf», от сокращения «substrate-film»); $\eta_1 \neq 0$, $\eta_2=0$, соответствует тому, что на подложку напылена одна пленка со стороны $z = a_1$ (этот случай мы будем обозначать символами «fs», от сокращения «film-substrate»); $\eta_1 = \text{const}$, $\eta_2 \rightarrow \infty$ соответствует тому, что стороны $z = a_1$ напылена пленка, а со стороны $z = a_2$ находится толстая металлическая пластина (металлическое зеркало).

На рис. 3.9 построены графики зависимостей коэффициентов Q , R , T для частоты 10 ГГц. Графики построены для двух случаев «fs» и «sf». Толщина подложки $H = 2$ мм, а ее показатель преломления $n_2 = 2$, при этом считается, что $n_1 = n_3 = 1$. Проводимость пленки рассчитывалась по квантовой теории Фукса (в которой пренебрегалось дисперсией проводимости) при коэффициентах зеркальности $\beta_1 = \beta_2 = 0$. Так же как и в предыдущем параграфе для расчетов использовались характеристики меди.

На рис. 3.10-3.12 построены зависимости погрешностей расчета коэффициента Q от толщины пленки соответственно для приближений $N=0$, $N=1$, $N=2$.

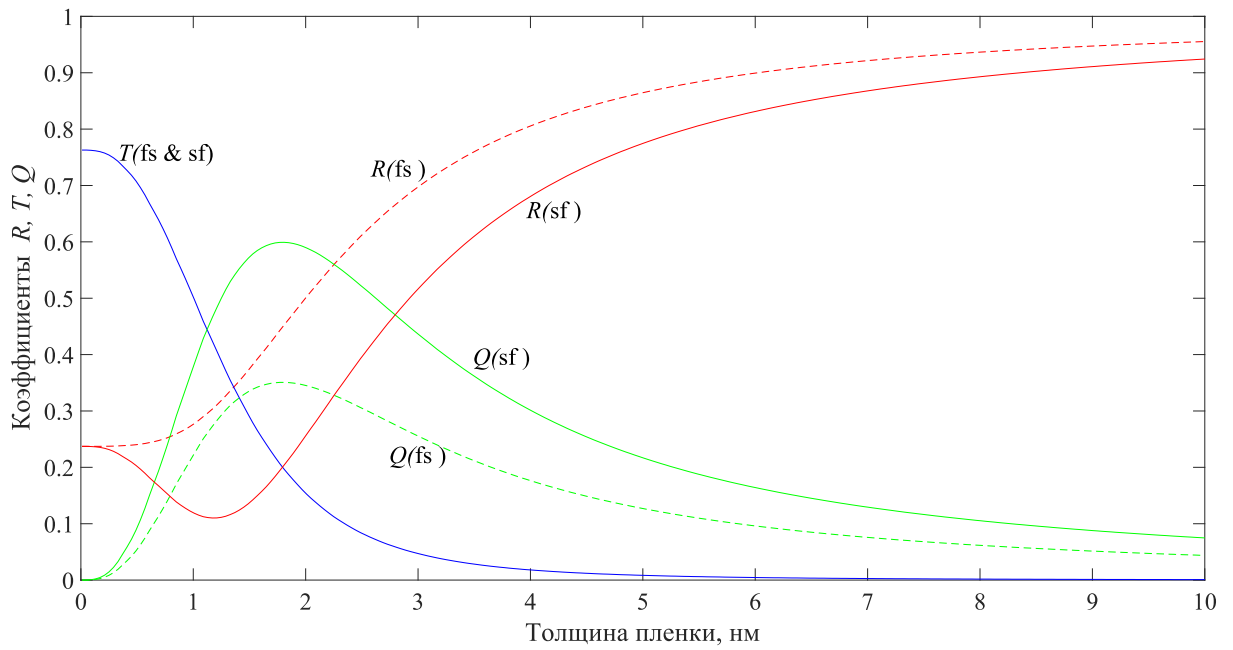


Рис. 3.9 Зависимости оптических коэффициентов R , T , Q от толщины пленки меди на частоте 10 ГГц при использовании квантовой модели проводимости Фукса с коэффициентами зеркальности $\beta_1 = \beta_2 = 0$.

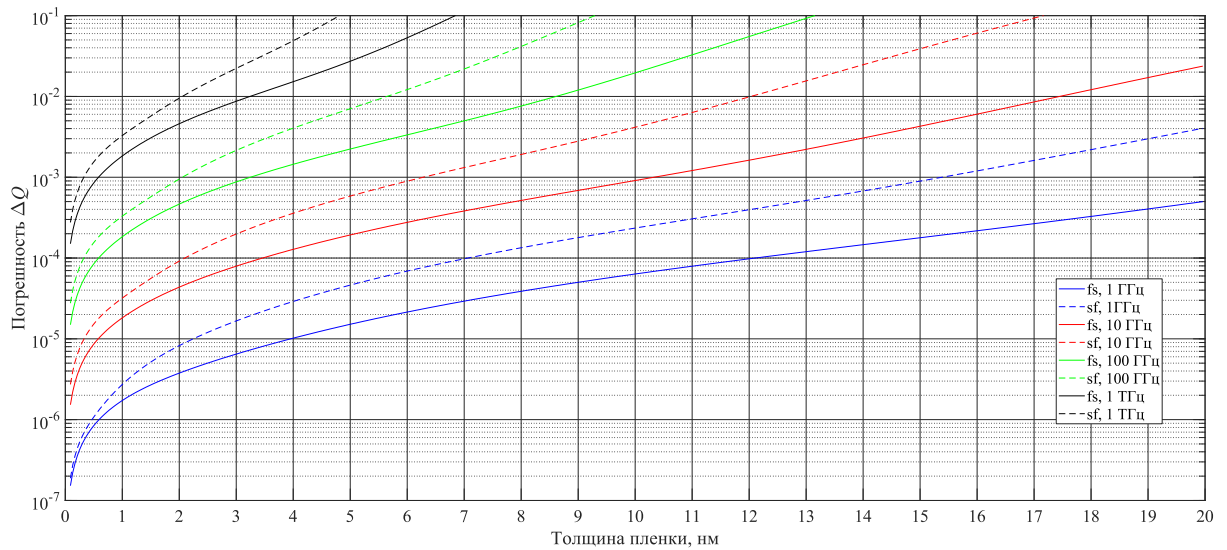


Рис. 3.10 Зависимости погрешностей коэффициента Q в приближении $N = 0$ от толщины пленки меди для случая $n_1 = n_2 = 1$, $\eta_1 = 0$, $\eta_2 \neq 0$ при использовании квантовой модели проводимости Фукса с коэффициентами зеркальности $\beta_1 = \beta_2 = 0$.

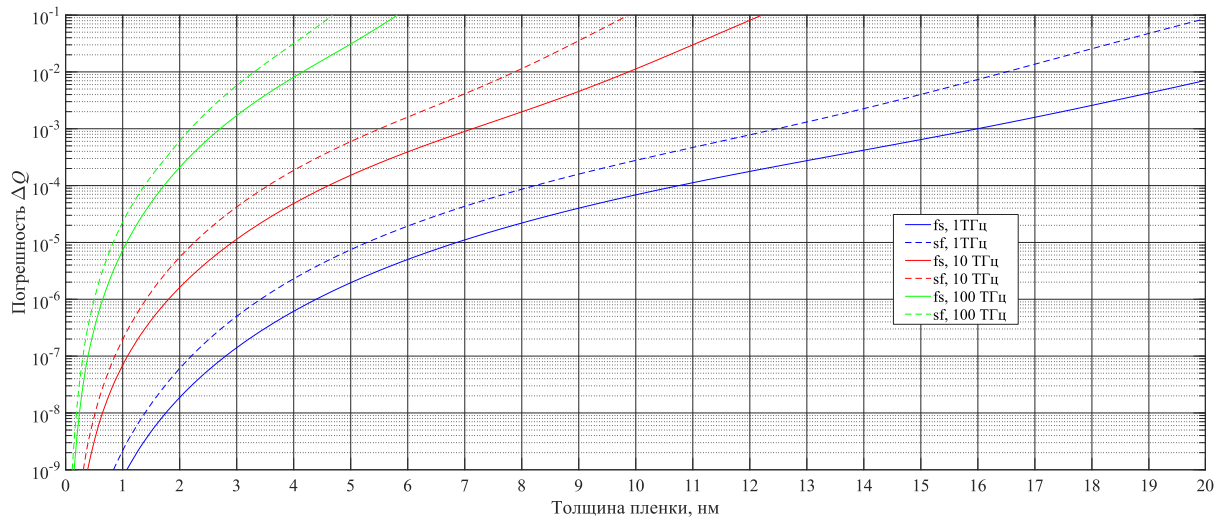


Рис. 3.11 Зависимости погрешностей коэффициента Q в приближении $N = 1$ от толщины пленки меди для случая $n_1 = n_2 = 1$, $\eta_1 = 0$, $\eta_2 \neq 0$ при использовании квантовой модели проводимости Фукса с коэффициентами зеркальности $\beta_1 = \beta_2 = 0$.

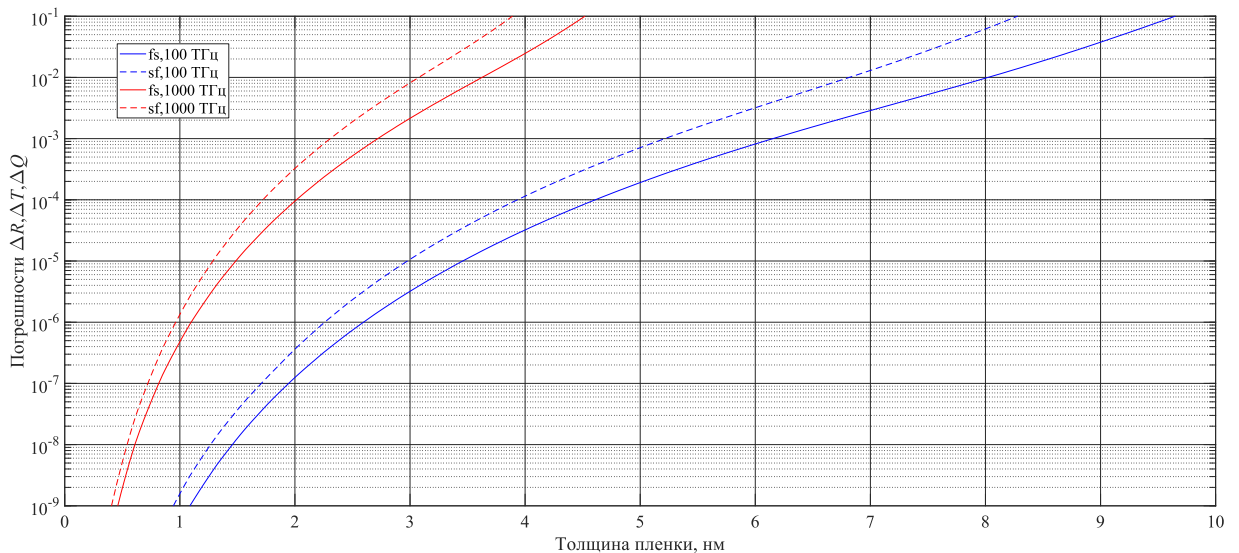


Рис. 3.12 Зависимости погрешностей коэффициента Q в приближении $N = 2$ от толщины пленки меди для случая $n_1 = n_2 = 1$, $\eta_1 = 0$, $\eta_2 \neq 0$ при использовании квантовой модели проводимости Фукса с коэффициентами зеркальности $\beta_1 = \beta_2 = 0$.

Как было отмечено в параграфе 3.1, в многослойных системах ошибка метода Пикара накапливается с каждым последующим слоем. По этой причине ошибка расчета на рисунках 3.10-3.12 больше, чем на аналогичных рисунках 3.5-3.7. В связи с этим на высоких частотах предпочтительно исследовать достаточно тонкие пленки, например, до 5 нм. Однако отметим, что для частоты 10 ГГц при $h = 10$ нм при $N = 0$ ошибка расчета коэффициента Q не превышает 1 %. Для терагерцового диапазона необходимо уже

использовать как минимум приближение $N = 1$. В частности, при $N = 1$ для частоты 1 ТГц ошибка расчета Q при $h = 10$ не превышает 1 %. Для более высоких частот необходимо использовать приближения $N = 2, 3$ и т.д.

3.5 Эффект антибликовости ультратонких металлических пленок

Видно, что на рис. 3.9 для случая «sf», когда напылена одна пленка, а волна падает на подложку с ее чистой стороны ($\eta_1=0, \eta_2 \neq 0$), наблюдается минимум коэффициента отражения R . Значение коэффициента отражения в данном минимуме R_{\min} , а также соответствующее минимуму значение η_2 , можно найти из формул (3.67)- (3.68).

Действительно, формула (3.68) может быть приведена к следующему виду:

$$r = \frac{1}{b} \times \frac{b + ae}{b^{-1} + ae}, \quad (3.69)$$

где $e = \exp(i2k_2H)$, $b = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2}$, $a = \frac{n_2 - \eta_2 - n_3}{n_2 + \eta_2 + n_3}$. Тогда квадрат модуля $|r|^2 \equiv R$ оказывается

равен:

$$R = \frac{1}{b^2} \times \frac{a^2 + 2abc + b^2}{a^2 + 2ab^{-1}c + b^{-2}}, \quad (3.70)$$

где введено обозначение: $c = \cos(2k_2H)$. Далее исследуем на экстремум функцию (3.70) как функцию аргумента η_2 . При этом удобно считать, что $R = R(a(\eta_2))$, тогда $\partial R / \partial \eta_2 = \partial R / \partial a \times \partial a / \partial \eta_2$, при этом оказывается, что равенство $\partial a / \partial \eta_2 = 0$ не представляет интереса, поскольку оно реализуется только лишь в «экзотическом» случае при $n_2 = 0$. Из дальнейшего исследования на экстремум можно заключить следующее. Функция $R = R(\eta_2)$ имеет в общем случае два экстремума. Значение этой функции в экстремумах определяется следующим соотношением:

$$R^{(\pm)} = \frac{B \pm \sqrt{B^2 - 4}}{2}, \quad (3.71)$$

где $B = \frac{b^4 - 2b^2c^2 + 1}{(1 - c^2)b^2}$. Можно показать, что в общем случае $B > 0$, откуда следует, что в выражении (3.71) необходимо выбирать знак минус (поскольку $R^{(+)} \geq R^{(-)} \equiv R_{\min}$), поэтому окончательно получаем:

$$R_{\min} = \frac{B - \sqrt{B^2 - 4}}{2}. \quad (3.72)$$

Из дальнейшего анализа на экстремум следует, что значение R_{\min} из (3.72) достигается при показателе преломления пленки

$$\eta_{2\min} = n_2 \times \frac{1-D}{1+D} - n_3, \quad D = \frac{-bc(R_{\min} - 1)}{R_{\min}b^2 - 1}. \quad (3.73)$$

Таким образом, теоретически обнаружен эффект уменьшения коэффициента отражения от диэлектрического слоя с напыленной на него металлической пленкой (эффект антибликовости).

Формулы (3.72)-(3.73) также полезны и тем, что позволяют исследовать зависимости R_{\min} и $\eta_{2\min}$ от параметров n_1, n_2, n_3, H . Например, можно найти при каких n_1, n_2, n_3, H отраженная волна отсутствует (т.е. $R_{\min} = 0$). Рассмотрим более подробно формулу (3.72). Согласно этой формуле, $R_{\min} = 0$ в том случае, когда $B - \sqrt{B^2 - 4} = 0$. Это равенство, в свою очередь, может выполняться только при $B \rightarrow \infty$. Рассмотрим более подробно выражение для B . В общем случае можно показать, что:

$$B = \frac{b^4 - 2b^2c^2 + 1}{(1-c^2)b^2} > 0. \quad (3.74)$$

Очевидно, что выражение (3.74) стремится к бесконечности при $c \equiv \cos(2k_2H) \rightarrow \pm 1$ (случай $b = 0$ мы не рассматривается, т.к. это соответствует выполнению равенства $n_1 = n_2$. Тогда $R_{\min} = 0$ в тривиальном случае, когда тонкая металлическая пленка отсутствует). Поэтому получаем: $2k_2H = \pi l, l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Или, учитывая, что $k_2 = 2\pi / \lambda_2$, где λ_2 – длина волны в кварцевой подложке, окончательно получаем следующее условие, необходимое для выполнения равенства $R_{\min} = 0$

$$H = \frac{\lambda_2}{4} l, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.75)$$

Условие (3.75) представляет собой условие резонанса $\lambda/4$ (или кратного ему резонанса). Таким образом, путем подбора толщины пленки и подложки можно создавать узкополосные антибликовые поверхности.

3.6 Бесконтактный способ измерения проводимости тонких пленок

Благодаря формуле (3.70) появляется возможность пересчета экспериментально измеренной зависимости коэффициента отражения $R(h)$ в зависимость удельной проводимости тонкой пленки $\sigma(h)$.

Действительно, вновь рассмотрим случай, когда напылена одна пленка, а волна падает на подложку с ее чистой стороны ($\eta_1=0, \eta_2 \neq 0$). Тогда оказывается, что для функции $R = R(\eta_2) = |r(\eta_2)|^2$ можно найти обратную функцию и выразить таким образом $\eta_2 = \eta_2(R) = \eta_2(R(h)) = \eta_2(h)$. Путем алгебраических преобразований формулы (3.70) можно привести ее к виду

$$\eta_2(h) = n_2 \times \begin{cases} \frac{1 - \kappa^+(h)}{1 + \kappa^+(h)} - n_3, & \text{если } h > h_{\min} \\ \frac{1 - \kappa^-(h)}{1 + \kappa^-(h)} - n_3, & \text{если } h < h_{\min} \end{cases}, \quad (3.76)$$

где для краткости были введены обозначения:

$$\kappa^\pm(h) = \frac{-bc(R(h)-1) \pm \sqrt{[bc(R(h)-1)]^2 - (b^2R(h)-1) \times (R(h)-b^2)}}{b^2R(h)-1}. \quad (3.77)$$

Здесь h_{\min} – толщина пленки, при которой, согласно теоретическим расчетам, наблюдается минимальный коэффициент отражения. Зависимость $\sigma(h)$ находится из соотношения $\eta(h) = Z_0\sigma(h)h$, таким образом,

$$\sigma(h) = \frac{n_2}{Z_0 h} \times \begin{cases} \frac{1 - \kappa^+(h)}{1 + \kappa^+(h)} - n_3, & h > h_{\min} \\ \frac{1 - \kappa^-(h)}{1 + \kappa^-(h)} - n_3, & h < h_{\min} \end{cases}. \quad (3.78)$$

Формула (3.78) позволяет по найденной из эксперимента зависимости $R(h)$ рассчитать зависимость удельной проводимости тонкой пленки $\sigma(h)$ от ее толщины. Напомним, что электромагнитная волна в таком случае падает с чистой стороны подложки, поэтому данный метод является бесконтактным. Таким способом можно проводить измерения проводимости пленки прямо в процессе ее напыления в режиме реального времени для пленок находящихся в вакууме. Такой метод пересчета позволяет напрямую сравнивать экспериментально и теоретически полученные зависимости $\sigma(h)$.

Пример подобного рода пересчета приведен в параграфе 4.3 (рис. 4.6, 4.8).

3.7 Сверхширокополосный 50%-ый поглотитель на основе тонких пленок

Из анализа формул (3.67)-(3.68) следует, что при помощи напыления металлической пленки определенной толщины на кварцевую подложку (в схеме эксперимента, где падающая волна проходит сначала через подложку, а затем через металлическую пленку) можно добиться того, что оптические коэффициенты R , T , Q перестанут зависеть от частоты излучения и толщины подложки.

Далее будем предполагать, что на кварцевую подложку напылены две тонкие металлические пленки с коэффициентами преломления η_1 и η_2 . Причем падающая волна проходит сначала через пленку с показателем преломления n_1 , затем через кварцевую подложку a , затем через пленку с показателем преломления n_2 .

Рассмотрим более подробно формулу (3.68) для коэффициента отражения r по амплитуде. Коэффициент r зависит от частоты (а также от толщины подложки) через экспоненты, входящие в выражение (3.68). Для того чтобы данная зависимость исчезла необходимо обратить в ноль некоторые выражения в круглых скобках в дроби (3.68). Если предположить, что $n_2 > n_1 > 0$, $n_2 > n_3 > 0$, $\eta_2 > 0$, $\eta_1 > 0$, можно показать, что выбором коэффициентов $\eta_{1,2} > 0$ можно обратить в ноль только лишь следующие скобки:

$$(n_2 - \eta_2 - n_3) = 0, \text{ если положить } \eta_2 = n_2 - n_3, \quad (3.79)$$

$$(n_1 - \eta_1 + n_2) = 0, \text{ если положить } \eta_1 = n_1 + n_2. \quad (3.80)$$

При этом если использовать вариант (3.80), обратится в ноль лишь одна скобка, стоящая в числителе дроби (3.68). Если использовать вариант (3.79) обращаются в ноль сразу две скобки – одна в числителе и одна в знаменателе. Поэтому имеет смысл использовать условие (3.79). Таким образом, далее будем считать, что $\eta_2 = n_2 - n_3$, а η_1 – произвольное положительное число.

При $\eta_2 = n_2 - n_3$, согласно формулам (3.67)-(3.68), получаем

$$r = \frac{n_1 - \eta_1 - n_2}{n_1 + \eta_1 + n_2}, \quad (3.81)$$

$$t = \frac{2n_1 e^{j(k_1+k_2-k_3)H}}{n_1 + \eta_1 + n_2}. \quad (3.82)$$

Можно заметить, что коэффициент отражения по амплитуде r вообще не зависит ни от частоты излучения, ни от толщины подложки, ни от показателя преломления третьей среды. Фаза коэффициента прохождения по амплитуде t , вообще говоря, зависит от данных характеристик через экспоненту. Однако, после взятия квадрата модуля от

формул (3.81) и (3.82), получаем, что коэффициенты R , T (а значит и $Q = 1 - R - T$) также не зависят ни от толщины подложки, ни ее частоты излучения, ни от показателя преломления третьей среды:

$$R = |r|^2 = \frac{(n_1 - \eta_1 - n_2)^2}{(n_1 + \eta_1 + n_2)^2}, \quad (3.83)$$

$$T = |t|^2 = \frac{4n_1^2}{(n_1 + \eta_1 + n_2)^2}. \quad (3.84)$$

Можно заметить, что показатели преломления η_1 и n_2 входят в выражения (3.83)-(3.84) в виде суммы. Это значит, что напыление металлической пленки с показателем преломления η_1 как бы увеличивает показатель преломления подложки n_2 . Сделав замену $\eta_1 + n_2 = n_2^+$, окончательно получаем:

$$R = |r|^2 = \left(\frac{n_1 - n_2^+}{n_1 + n_2^+} \right)^2, \quad T = |t|^2 = \left(\frac{2n_1}{n_1 + n_2^+} \right)^2, \quad Q = 1 - T - R = \frac{4n_1(n_2^+ - n_1)}{(n_1 + n_2^+)^2}. \quad (3.85)$$

Найдем теперь экстремум коэффициента поглощения Q как функции $Q = Q(n_2^+)$.

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q}{\partial n_2^+} &= \frac{4n_1(n_2^+ - n_1)}{(n_1 + n_2^+)^2} = \frac{4n_1(n_1 + n_2^+)^2 - 4n_1(n_2^+ - n_1)2(n_1 + n_2^+)}{(n_1 + n_2^+)^4} = \\ &= 4n_1 \frac{(n_1 + n_2^+) - 2(n_2^+ - n_1)}{(n_1 + n_2^+)^4} = 4n_1 \frac{n_1 + n_2^+ - 2n_2^+ + 2n_1}{(n_1 + n_2^+)^4} = 4n_1 \frac{3n_1 - n_2^+}{(n_1 + n_2^+)^4} \end{aligned}$$

Отсюда следует, что экстремум осуществляется, когда $3n_1 = n_2^+$, то есть когда $\eta_1 = 3n_1 - n_2$. При этом формулы (3.85) принимают вид: $R = T = 1/4$, $Q = 1/2$. В таком случае кварцевая подложка с двумя напыленными на нее пленками поглощает 1/2 всей энергии падающей на нее электромагнитной волны, 1/4 часть этой энергии отражает, и 1/4 энергии пропускает также как и в случае отдельно отстоящей ультратонкой пленки. Однако отдельно-отстоящие пленки очень сложно изготовить. Таким образом, при правильном подборе толщины пленок система типа «диэлектрическая подложка с двумя пленками» может выступать в качестве альтернативы отдельно-отстоящей тонкой пленке. Для такой структуры коэффициенты отражения по амплитуде не зависят от частоты (в предположении о том, что показатель преломления материала подложки не зависит от частоты).

3.8 Узкополосный 100%-ый поглотитель

Наконец, покажем, каким образом может быть реализован 100%-ый узкополосный поглотитель типа поглотителя Солсбери (о данном типе поглотителя см. приложение С). Пусть на кварцевую подложку с одной стороны напылили довольно толстую пленку, такую, что $\eta_2 \gg n_2, n_3$, в таком случае можно считать, что $(n_2 + \eta_2 + n_3) \cong \eta_2$, $(n_2 - \eta_2 - n_3) \cong -\eta_2$. Тогда, устремив в формуле (3.68) $\eta_2 \rightarrow \infty$, получим

$$r = \frac{e^{-jk_2H}(n_1 - \eta_1 - n_2) - e^{jk_2H}(n_1 - \eta_1 + n_2)}{e^{-jk_2H}(n_1 + \eta_1 + n_2) - e^{jk_2H}(n_1 + \eta_1 - n_2)}. \quad (3.86)$$

При $\eta_2 \rightarrow \infty$ коэффициент прохождения оказывается равен нулю, поэтому $Q = 1 - R$.

Найдем квадрат модуля выражения (3.86)

$$R = |r|^2 = \frac{[(1-c)(n_1 - \eta_1) - n_2(1+c)]^2 + [s \times (n_1 - \eta_1 + n_2)]^2}{[(1-c)(n_1 + \eta_1) + n_2(1+c)]^2 + [s \times (n_1 - \eta_1 + n_2)]^2}. \quad (3.87)$$

Здесь для краткости введены обозначения: $c = \cos(2k_2H)$, $s = \sin(2k_2H)$. Заметим, что $Q = 1$ при $R = 0$. Найдем условие, необходимое для того, чтобы $R = 0$. В числителе выражения (3.87) находится сумма квадратов. Поэтому $R = 0$ только в том случае, когда каждая из квадратных скобок в числителе (3.87) обращается в ноль, поэтому

$$R = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} (1-c)(n_1 - \eta_1) - n_2(1+c) = 0 \\ s \times (n_1 - \eta_1 + n_2) = 0 \end{cases}.$$

Рассмотрим выражение $s \times (n_1 - \eta_1 + n_2) = 0$. Оно обращается в ноль либо когда $s = 0$, либо когда $n_1 - \eta_1 + n_2 = 0$. Можно показать, что при $n_1 - \eta_1 + n_2 = 0$, коэффициент отражения R обращается в ноль только при $n_2 = 0$, что в реальности невыполнимо. Поэтому далее рассмотрим лишь случай $s = 0$.

При $s = 0$ косинус может быть равен $c = \pm 1$. Можно показать, что при $c = +1$, коэффициент отражения R обращается в ноль также только при $n_2 = 0$. При $c = -1$ коэффициент отражения обращается в ноль при $\eta_1 = n_1$, что является физический выполнимым требованием. Из равенства $c = -1$ получаем $\cos(2k_2H) = -1 \Rightarrow 2k_2H = \pi + 2\pi l$, $l = 0, 1, 2, \dots$ или $H = \lambda_2(0.5 + l) = c_0(0.25 + 0.5l) / (v n_2)$, $l = 0, 1, 2, \dots$

Здесь λ_2 – длина волны в подложке, v – частота излучения в Гц, c_0 – скорость света в вакууме. В итоге, получаем следующие условия, необходимые для реализации 100%-ого поглотителя:

- 1) показатель преломления пленки $\eta_2 \gg n_2, n_3$;
- 2) показатель преломления пленки $\eta_1 = n_1$;
- 3) толщина подложки $H = 0.5\lambda_2(0.5 + l)$, $l = 0, 1, 2, \dots$.

Отметим, что теория матрицы переноса, изложенная в параграфах 3.1-3.2 позволяет рассчитать, с какой степенью точности выполняется равенство $R = 0$ при условии четвертьволнового резонанса. Это важно для проектирования датчиков микроболометров.

3.9 Обобщение для случая распространения электромагнитных волн в прямоугольном волноводе

Вся изложенная выше теория распространения волн в неоднородных средах относилась к плоским электромагнитным волнам. Разумеется, плоская волна представляет собой удобную с математической точки зрения идеализацию, которая не встречается в природе. Можно, однако, показать, что в случае, когда в прямоугольном волноводе возбуждается только основная мода (которая также называется волной класса H_{10} или модой TE_{10}), задача рассеяния электромагнитных волн на неоднородной плоскостройной структуре в волноводе может быть сведена при помощи некоторых замен к задаче рассеяния плоских волн в свободном пространстве. Все математические выкладки, строго доказывающие корректность данного утверждения приведены в приложении L, здесь приводятся только основные выводы.

Рассмотрим волны моды TE_{10} . В таком случае, вектор напряженности электрического поля лежит в плоскости поперечного сечения волновода. Причем можно ввести декартову систему координат таким образом, что только одна компонента вектора напряженности электрического поля будет не равна нулю. Для определенности пусть это компонента E_y . Пусть плоскость Oxy декартовой системы координат совпадает с поперечным сечением волновода. Тогда, если считать стенки волновода идеальными проводниками, компонента E_y может быть представлена в виде

$$E_y(x, y, z) = e_y(z) \sin(\pi x / a). \quad (3.88)$$

Здесь a и b – длины сторон поперечного сечения волновода (причем $a > b$). Оказывается, что в случае плоскостройной неоднородной среды с волновым числом $k = k(z)$ функция $e_y(z)$ удовлетворяет в этой среде уравнению Гельмгольца

$$e_y''(z) + (k^2(z) - \tilde{k}^2) e_y(z) = 0, \quad \tilde{k} = \pi / a. \quad (3.89)$$

Уравнение (3.89) решается так же, как и уравнение (2.1) – при помощи метода последовательных приближений Пикара. Далее аналогичным образом получается выражения для приближенной матрицы рассеяния $S_{nm}^{[N]}$. Все остальные компоненты электромагнитного поля могут быть выражены через функцию $e_y(z)$.

Таким образом, задача рассеяния электромагнитных волн моды TE₁₀ на неоднородной плоскостройной структуре в волноводе заменами $k_i \rightarrow k_{\perp i} = \sqrt{k_i^2 - (\pi/a)^2}$ сводится к аналогичной задаче рассеяния плоских волн в свободном пространстве.

Помимо волновых чисел в главах 2-3 использовались также показатели преломления сред n_i и показатель преломления поверхности пленки η_i . В приложении L показано, что в случае распространения волн в волноводе, следует сделать замены

$$n_i = k_i / k_0 \rightarrow n_{\perp i} = \sqrt{k_i^2 - (\pi/a)^2} / k_0, \quad (3.90)$$

$$\eta = h \langle k_2^2 \rangle / (jk_0) \rightarrow \eta_{\perp} = h \langle k_2^2 \rangle / (jk_0) - (\pi/a)^2 / (jk_0) = \eta - (\pi/a)^2 / (jk_0). \quad (3.91)$$

Однако в случае металлов $k^2(z) \gg (\pi/a)^2$. Поэтому даже для случая волновода с хорошей степенью точности можно считать, что

$$\eta_{\perp} = \eta = h \langle k_2^2 \rangle / (jk_0). \quad (3.92)$$

3.10 Итоги главы 3

В главе 3 теория, изложенная в главе 2, была обобщена для случая многослойных структур, содержащих произвольное число диэлектрических слоев и металлических пленок. Была обобщена формула для оценки погрешностей метода. При этом использовалось нулевое приближение матрицы рассеяния для тонкой пленки.

Было показано, что использование матрицы рассеяния нулевого приближения значительно упрощает задачу проектирования оптических приборов, позволяя разбить ее на два независимых блока. Кроме того упрощенный подход позволяет описывать многослойные металлические тонкие пленки (последовательно напыленные друг на друга) при помощи одной матрицы рассеяния, которая содержит информацию о всех слоях. Это позволяет значительно упрощать формулы для оптических коэффициентов плоскостройных структур, из-за чего легче проводится анализ расчетных формул. В частности, из анализа упрощенных формул были доказаны следующие утверждения

1) при правильном подборе толщин пленок система «диэлектрическая подложка с двумя напыленными пленками» может играть роль сверхширокополосного 50%-го поглотителя или 100%-го узкополосного поглотителя;

2) в том случае, когда на диэлектрическую подложку напылена одна пленка, по измеренному коэффициенту отражения R такой структуры возможен расчет проводимости напыленного слоя металла по аналитическим формулам (фактический это бесконтактный способ измерения проводимости пленки);

3) в том случае, когда на подложку напылена одна пленка, а электромагнитная волна падает на подложку с ее чистой стороны, толщину металлической пленки можно подобрать таким образом, что коэффициент отражения R такой структуры уменьшится (т.е. при напылении пленки наблюдается антибликовый эффект);

4) в том случае, когда на диэлектрическую подложку напылены пленки с двух сторон, матрица рассеяния 1-ого приближения позволяет получить для оптических коэффициентов r , t формулы, которые по сложности не отличаются от аналогичных формул для случая чистой подложки;

5) тонкую металлическую пленку, напыленную на тонкую диэлектрическую пленку, можно также описывать при помощи одной матрицы рассеяния, которая зависит от всего одного параметра η .

Кроме того было показано, что задача рассеяния электромагнитных волн моды TE_{10} на неоднородной плоскостойкой структуре в прямоугольном волноводе заменами $k_{(i)} \rightarrow k_{\perp(i)} = \sqrt{k_{(i)}^2 - \tilde{k}_{10}^2}$ сводится к аналогичной задаче рассеяния плоских волн в свободном пространстве.

Глава 4

Эксперименты по измерению оптических коэффициентов тонких металлических пленок

В данной главе используются материалы, опубликованные в статьях [A2-A5].

В данной главе изложены результаты работ [A2-A5]. Эксперименты по измерению оптических коэффициентов проводились в Институте радиотехники и электроники имени В. А. Котельникова в лаборатории №201. Стоит отметить, что эксперименты по измерению оптических коэффициентов проводились коллегами автора данной диссертации под руководством В. А. Вдовина, а не непосредственно самим автором. Напыление металлических пленок проводилось И. И. Пятайкиным и И. А. Хориным. Автор данной диссертации, однако, принимал активное участие в разработке новых схем эксперимента, а также при обработке, обсуждении и интерпретации данных эксперимента. Наряду с автором в обсуждении эксперимента и в интерпретации его данных принимали участие: В. А. Вдовин, И. И. Пятайкин, Ю. В. Пинаев, В. Г. Андреев, В. А. Черепенин, И. А. Хорин. Автор выражает благодарность данным сотрудникам лаборатории №201 за предоставление экспериментальных данных и ценные советы по их интерпретации.

4.1 Экспериментальная установка и методы измерения

В работах [A2-A5] измерения оптических коэффициентов проводились на частотах 8.5-12.5 ГГц в волноводе с поперечным сечением 23×10 мм, в который вставлялась кварцевая подложка с поперечными размерами 22.9×9.8 мм с напыленной на нее тонкой металлической пленкой (см. рис. 4.1). Поперечные размеры подложек выбирались немного меньше поперечного сечения волновода во избежание их механического заклинивания. Толщина кварцевых подложек в работах [A2-A4] составляла 2 мм, а в работе [A5] использовались подложки с толщинами 4, 6 и 8 мм. В работах [A2-A4] была реализована измерительная схема, изображенная на рис. 4.2, а в работе [A5] – измерительная схема, изображенная на рис. 4.3. Измерения оптических коэффициентов во всех случаях проводились при помощи векторного анализатора цепей ZVA-24.

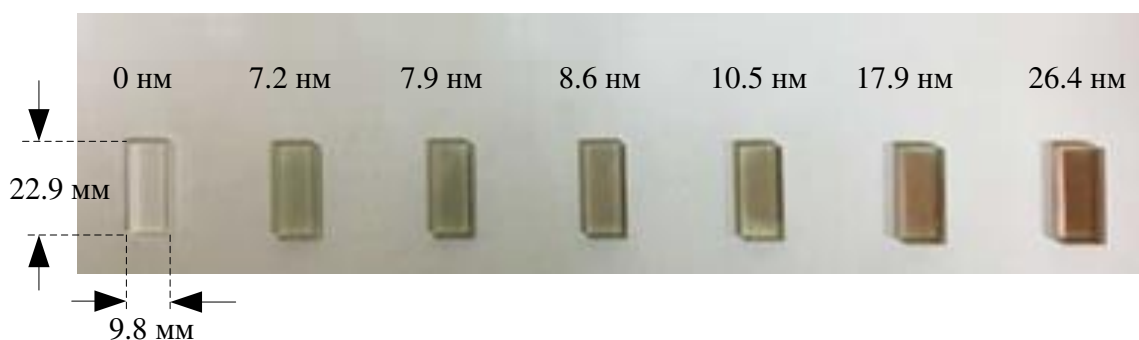


Рис. 4.1 Фото пленок меди различной толщины на кварцевых подложках из работы [A5].

Измерения возможно проводить для двух ориентаций подложки. Случай, в котором электромагнитная волна падает на подложку с той стороны, на которую напылена пленка, будем обозначать как fs (film-substrate), см. рис. 4.2a и рис. 4.3a. Случай, в котором электромагнитная волна падает на подложку с ее чистой стороны, будем обозначать как sf (substrate-film), см. рис. 4.2b и рис. 4.3b. На рис. 4.2.-4.3 используется терминология, введенная в параграфе 2.1: здесь A_{inc} – комплексная амплитуда падающей волны, которая задается генератором, A_{refl} и A_{trans} – комплексные амплитуды отраженной и прошедшей волн соответственно, которые измеряются при помощи векторного анализатора цепей.

Калибровка векторного анализатора цепей проводилась по методу TRM (trough-reflection-match) по семикомпонентной модели ошибок [123- 124]. Далее проводилась нормировка оптических коэффициентов на их референсные значения [125]. Для проведения нормировки коэффициента отражения r кварцевая подложка заменялась медной металлической пластиной, обладающей такими же размерами как у подложки, то есть $22.9 \times 9.8 \times 2$ мм. Проводилось измерение коэффициента отражения $r_M = A_{refl}/A_{inc}$ данной металлической пластины. Далее в волновод вставлялась подложка с напыленной на нее пленкой и измерялся ее коэффициент отражения r_S . Нормированный коэффициент отражения рассчитывался по формуле $r = r_S / r_M$. Подобная процедура нормировки проводилась отдельно для каждой частоты.

Напыление во всех случаях проводилось в вакуумной камере со значением предварительного вакуума не менее 10^{-3} Па. Чистота распыляемого металла составляла 99.999%. Все подложки были изготовлены из оптического кварцевого стекла марки КУ-1. Относительная диэлектрическая проницаемость кварцевого стекла ϵ_q в гигагерцовом диапазоне была рассчитана по экспериментальным данным. Значение ϵ_q было подобрано таким образом, чтобы среднеквадратичное отклонение теоретически рассчитанных и

экспериментально измеренных значений оптических коэффициентов в диапазоне 8.5-12.5 ГГц чистой подложки было минимальным. Было получено значение $\varepsilon_q = 3.6$.

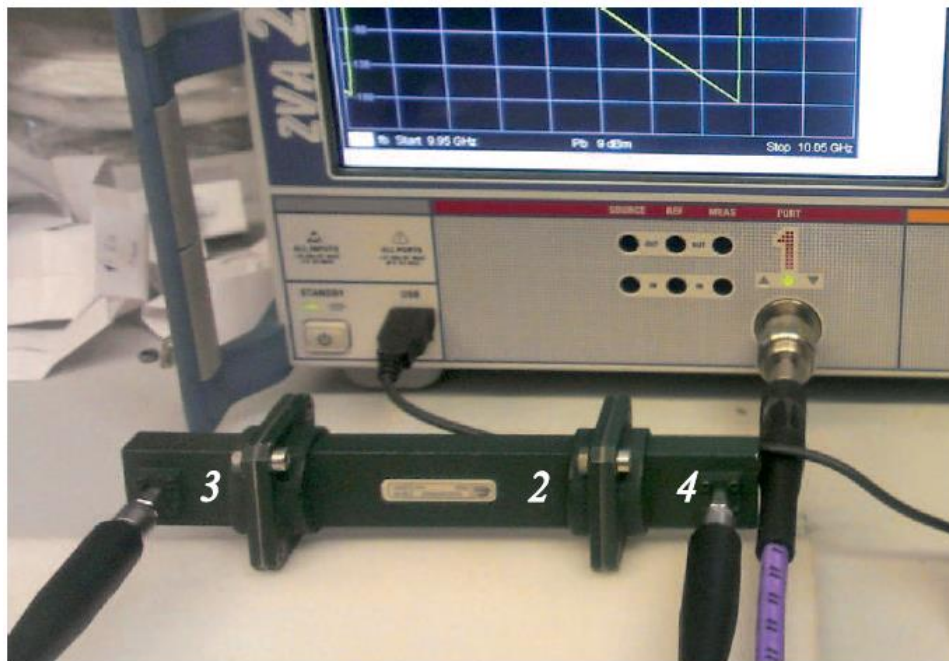
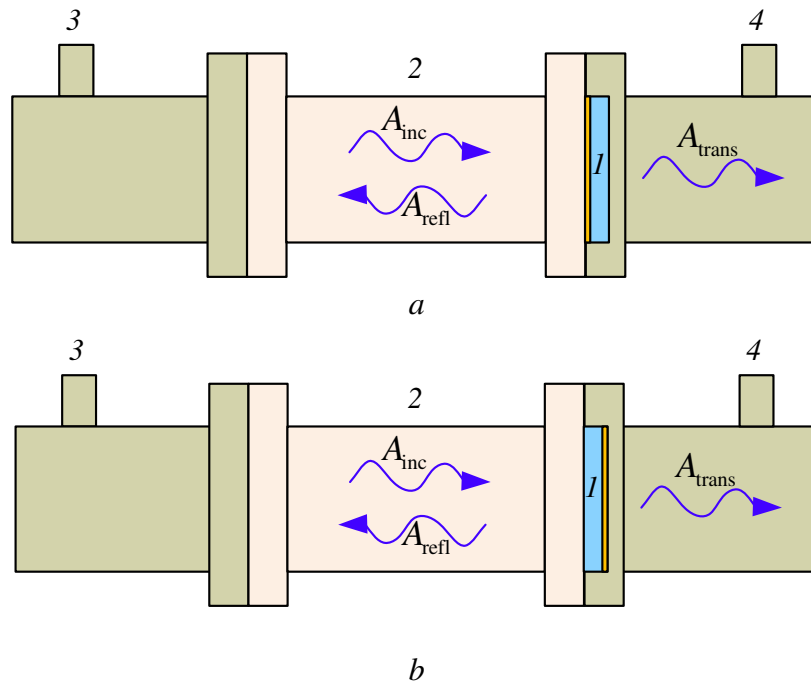
В работах [A2-A5] использовались различные условия напыления пленок. Данные условия изложены в таблице 4.1.

Статья	[A2-A3]	[A4]	[A5]
Металл	Медь	Платина	Медь
Метод напыления	Магнетронное распыление	Магнетронное распыление	Термическое испарение
Схема эксперимента	fs	fs и sf	fs и sf
Расстояние от подложки до мишени (распыляемого металла)	6 см	3 см	10 см
Подводимая к мишени мощность	100 Вт	2.4 кВт	1 кВт
Время напыления	2 нм/мин	1 нм/мин	Общее время испарения менее 10 с
Толщины пленок, нм	0.5, 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 4, 5, 7.5, 10, 20, 30	1, 3, 5, 5.5, 7, 8, 10, 15, 20, 30	4, 4.8, 5.8, 7.2, 7.9, 8.6, 10.5, 17.9, 26.4

Табл. 4.1 Условия, при которых проводилось напыление пленок в работах [A2-A5].

Стоит отметить, что при термическом испарении масса испаренного металла известна. По этой массе (если считать, что металл равномерно распыляется в полусферу, окружающую тигель, в который помещается распыляемый металл) может быть рассчитана толщина напыленной на подложку пленки. Помимо такого способа расчета толщина пленки измерялась напрямую при помощи стилусного профилометра KLA-Tencor Alpha-Step IQ. Для этого на подложку напылялись пленки от 10 до 20 нм, на поверхности которых методом литографии изготавливались полоски без напыленного слоя металла с четкой ступенькой «поверхность подложки - слой металла». Различия в определении толщины при помощи этих двух методов не превышали 5%. При магнетронном распылении масса испаренного металла неизвестна, поэтому необходимо проводить калибровку напылительной установки для определения скорости напыления.

Подобная калибровка осуществлялась вышеописанным методом измерения толщины при помощи стилусного профилометра KLA-Tencor Alpha-Step IQ.



c

Рис. 4.2 Схема эксперимента, использовавшаяся в работах [A2-A4]. *a* – схема с ориентацией f_s , *b* – схема с ориентацией f_s , *c* – фото экспериментальной установки. 1 – подложка с напыленной металлической пленкой; 2 – волновод; 3, 4 – коаксиально волноводные переходы (КВП).

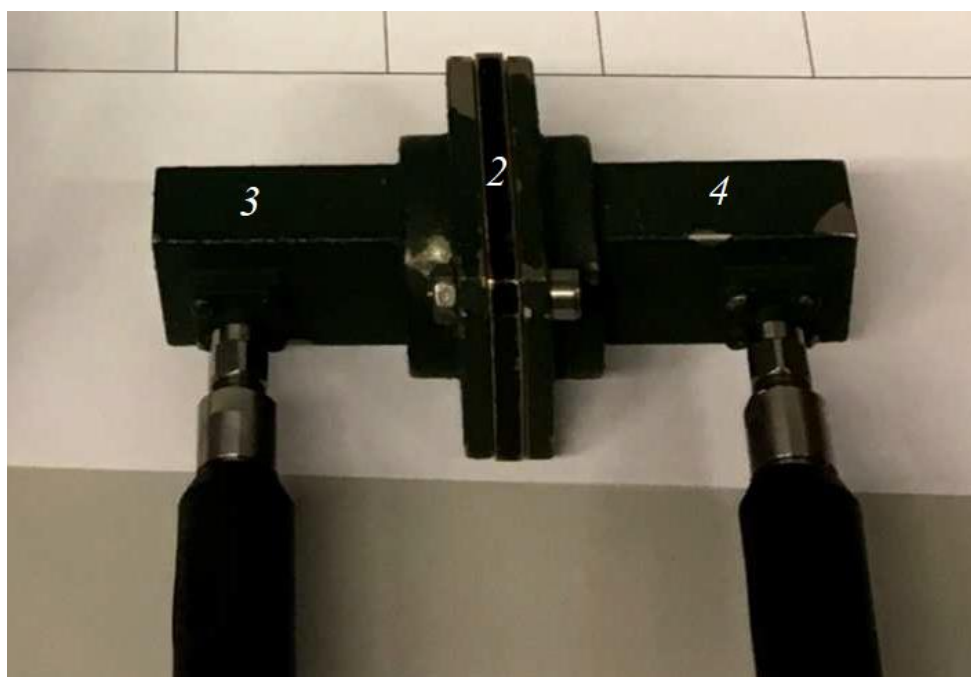
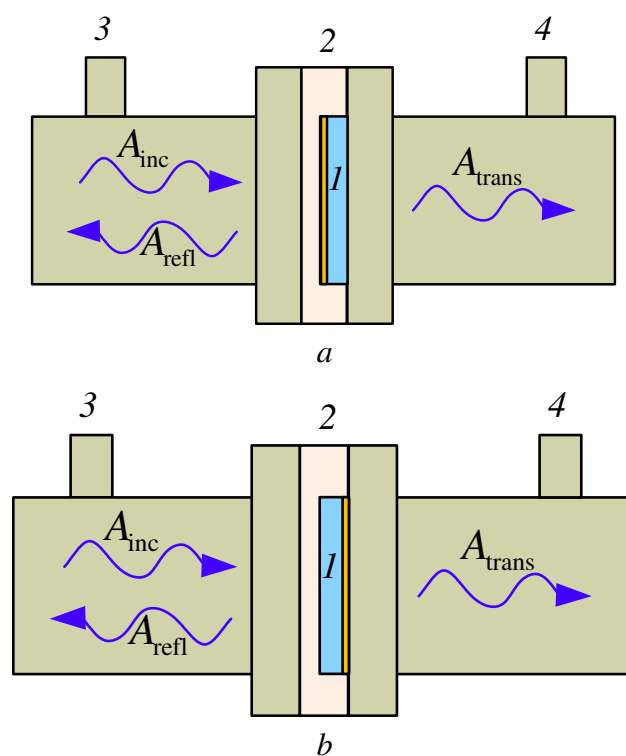


Рис. 4.3 Схема эксперимента, использовавшаяся в работе [A5]: *a* – схема с ориентацией f_s , *b* – схема с ориентацией f_s , *c* – фото экспериментальной установки. 1 – подложка с напыленной металлической пленкой; 2 – волноводная вставка-держатель подложки; 3, 4 – коаксиально волноводные переходы (КВП).

4.2 Апробация предлагаемого в главах 2-3 теоретического подхода

К моменту написания статьи [A2] автором данной диссертации еще не был разработан подход, описанный в главах 2-3. Поэтому первоначально в работе [A2] для расчета оптических коэффициентов использовался стандартный подход, в котором и подложка и пленка представляются в виде однородных слоев конечной толщины (см. рис. 4.4).

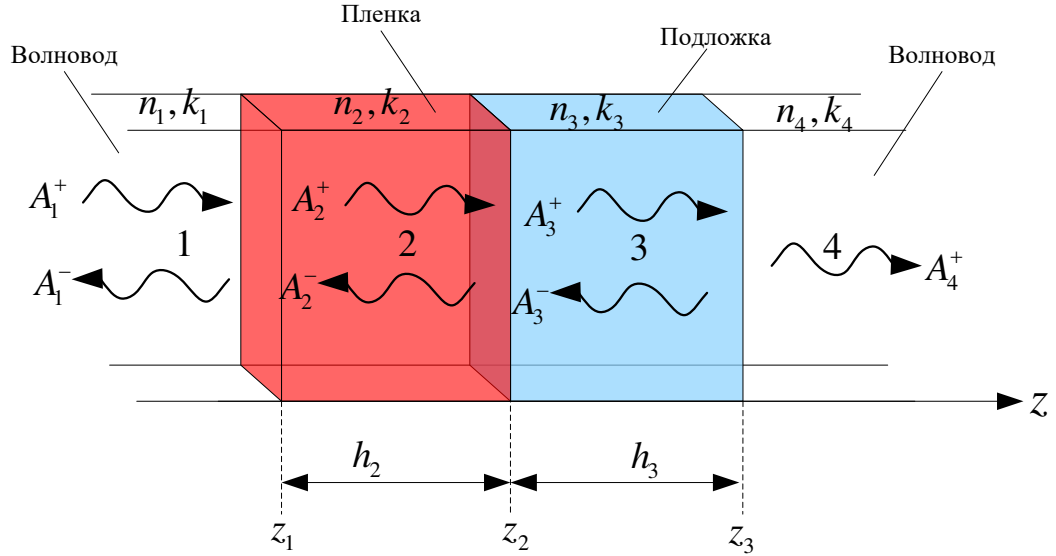


Рис. 4.4 Модель однородных слоев конечной толщины, используемая для расчетов оптических коэффициентов в работе [A2]. 1, 4 — волновод, 2 — пленка меди толщиной h_2 , 3 — кварцевая подложка толщиной h_3 .

Амплитуда падающей волны A_1^+ считается заданной, требуется найти амплитуды A_1^- , A_4^+ . Данная система содержит три границы раздела сред. На каждой границе ставятся два граничных условия:

$$E_1(z_1) = E_2(z_1), \quad E_1'(z_1) = E_2'(z_1), \quad (4.1)$$

$$E_2(z_2) = E_3(z_2), \quad E_2'(z_2) = E_3'(z_2), \quad (4.2)$$

$$E_3(z_3) = E_4(z_3), \quad E_3'(z_3) = E_4'(z_3). \quad (4.3)$$

Поскольку все среды считаются однородными, поле в i -ой среде ищется в виде:

$$E_i(z) = A_i^+ e^{jk_{iz}} + A_i^- e^{-jk_{iz}}. \quad (4.4)$$

Здесь

$$k_{\perp i} = \sqrt{(k_i)^2 - (\pi/a)^2}, k_i = \omega^2 \varepsilon_i \mu_0, \quad (4.5)$$

где $k_{\perp i}$ – поперечное волновое число в i -ой среде (более подробно см. параграф 3.9, а также приложение L), k_i – волновое число в i -ой среде, μ_0 – магнитная постоянная, ε – абсолютная диэлектрическая проницаемость i -ой среды. Мы считаем, что для металлической пленки $\varepsilon = j\langle\sigma\rangle/\omega$, где $\langle\sigma\rangle$ – средняя (по толщине) проводимость металла пленки. После подстановки (4.4) в (4.1)-(4.3) для определения A_1^- , A_4^+ необходимо решать систему из шести линейных алгебраических уравнений. По этой причине формулы для оптических коэффициентов r , t получаются достаточно громоздкими и сложны для анализа:

$$r = \frac{(A_+ C_+ + A_- C_-) \left(1 - \frac{k_{\perp 2}}{k_{\perp 1}}\right) + (B_+ C_+ + B_- C_-) \left(1 + \frac{k_{\perp 2}}{k_{\perp 1}}\right)}{(A_+ C_+ + A_- C_-) \left(1 + \frac{k_{\perp 2}}{k_{\perp 1}}\right) + (B_+ C_+ + B_- C_-) \left(1 - \frac{k_{\perp 2}}{k_{\perp 1}}\right)},$$

$$t = \frac{2e^{ik_{\perp 4}(h_3+h_2)}}{(A_+ C_+ + A_- C_-) \left(1 + \frac{k_{\perp 2}}{k_{\perp 1}}\right) + (B_+ C_+ + B_- C_-) \left(1 - \frac{k_{\perp 2}}{k_{\perp 1}}\right)}, \quad (4.5)$$

где

$$A_{\pm} = 0.5e^{\pm j(k_{\perp 3} \mp k_{\perp 2})h_2} (1 \pm k_{\perp 3} / k_{\perp 2}), \quad B_{\pm} = 0.5e^{\pm j(k_{\perp 3} \pm k_{\perp 2})h_2} (1 \mp k_{\perp 3} / k_{\perp 2}),$$

$$C_{\pm} = 0.5e^{j(k_{\perp 4} \mp k_{\perp 2})(h_2+h_3)} (1 \pm k_{\perp 4} / k_{\perp 3}). \quad (4.6)$$

Применение предлагаемого в главах 2-3 подхода, основанного на приближенном выражении для матрицы рассеяния S_{nm} , полученном при помощи метода Пикара, позволяет значительно упростить формулы (4.5). Согласно (3.67)-(3.68), оптические коэффициенты подложки с двумя напыленными на нее пленками рассчитываются по формулам

$$t = \frac{4n_1 n_3}{e^{jk_{\perp 3} h_3} (n_4^+ - n_3)(n_3^- - n_1) + e^{-jk_{\perp 3} h_3} (n_4^+ + n_3)(n_3^+ + n_1)}, \quad (4.7)$$

$$r = -\frac{e^{+jk_{\perp 3} h_3} (n_4^+ - n_3)(n_3^- + n_1) + e^{-jk_{\perp 3} h_3} (n_4^+ + n_3)(n_3^+ - n_1)}{e^{+jk_{\perp 3} h_3} (n_4^+ - n_3)(n_3^- - n_1) + e^{-jk_{\perp 3} h_3} (n_4^+ + n_3)(n_3^+ + n_1)}, \quad (4.8)$$

где

$$n_i = k_{\perp i} / k_0, k_0 = \omega \sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}, n_4^{\pm} = n_4 \pm \eta_{\text{right}}, n_3^{\pm} = n_3 \pm \eta_{\text{left}}, \quad (4.9)$$

$$\eta_{\text{right}} = Z_0 h_{\text{right}} \langle \sigma_{\text{right}} \rangle, \eta_{\text{left}} = Z_0 h_{\text{left}} \langle \sigma_{\text{left}} \rangle. \quad (4.10)$$

Здесь k_0 – волновое число в вакууме, Z_0 – волновое сопротивление вакуума, $h_{\text{right/left}}$ – толщины пленок, $\langle \sigma_{\text{right/left}} \rangle$ – средние проводимости пленок, а индексы «right» и «left» обозначают пленку, находящуюся на левой или на правой стороне подложки (справа или слева относительно ориентации подложки, изображенной на рис. 4.4). В формулах (4.10) было использовано свойство (3.124), согласно которому можно считать, что коэффициент η в свободном пространстве почти не отличается от коэффициента η в волноводе.

Выражения (4.7)-(4.8) намного проще, чем (4.5). Действительно, например если положить $n_4^{\pm} = n_4$ и $n_3^{\pm} = n_3$, то (4.7)-(4.8) совпадают с формулами Френеля для случая нормального падения электромагнитной волны на диэлектрическую пластину. Такое упрощение позволяет явно выразить проводимость пленки $\langle \sigma \rangle$ через оптические коэффициенты r, t (см. параграф 3.6). В формулах же (4.5)-(4.6) проводимость $\langle \sigma \rangle$ входит в волновое число $k_2 = (1+j) \times (\omega \mu_0 \langle \sigma \rangle / 2)^{1/2}$, которое содержится в выражениях (4.6) в экспонентах. По этой причине явно выразить среднюю проводимость пленки $\langle \sigma \rangle$ через ее оптические коэффициенты r, t из формул (4.5)-(4.6) не представляется возможным. Поэтому вместо расчета проводимости по измеренным оптическим коэффициентам в работе [A2] мы теоретически рассчитывали оптические коэффициенты r, t по формулам (4.5)-(4.6), где для расчета $\langle \sigma \rangle$ использовали формулу Фукса (1.15). Затем мы сравнивали эти рассчитанные оптические коэффициенты с экспериментально измеренными коэффициентами r, t . В модели Фукса мы принимали коэффициенты зеркальности равными нулю (т.е. $\beta_1 = \beta_2 = 0$), проводимость макроскопически большого объема металла (меди) $\sigma_{\text{bulk}} = 60 \cdot 10^6$ См/м, длину свободного пробега электрона в меди $l_0 = 42$ нм (более подробно см. параграф 1.6 о моделях проводимости, также приложения D, E, F, G).

4.3 Экспериментальные результаты

Результаты сравнения на частоте 10 ГГц изображены на рис. 4.5. На графике нулевая толщина пленки соответствует чистой подложке без пленки. По результатам измерений перколяционный переход металла пленки начинается при толщине пленки 5 нм (т.е. сплошная проводящая поверхность, способная отражать электромагнитное излучение, формируется у пленок, толщина которых превышает 5 нм). Поэтому для сравнения с измеренными значениями расчетные кривые смещены на толщину 5 нм.

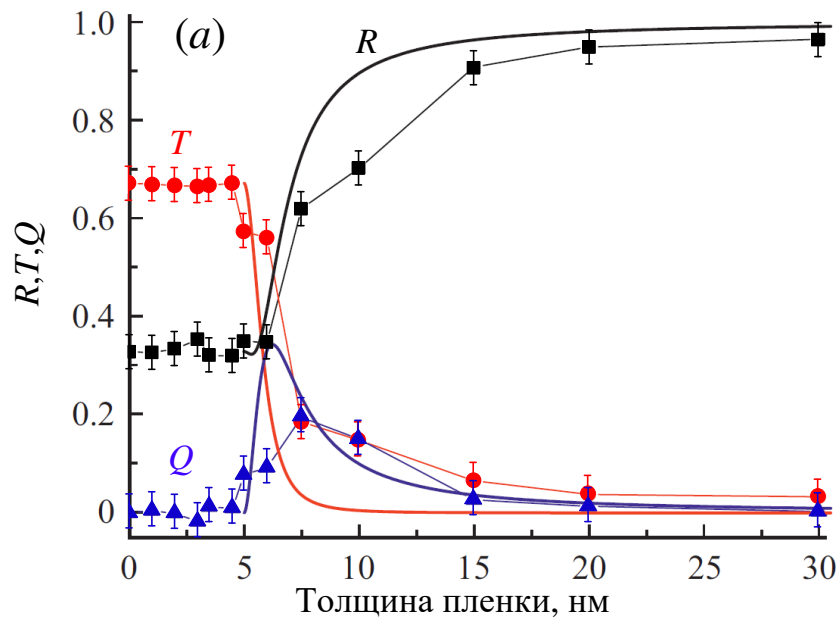


Рис. 4.5 Сравнение оптических коэффициентов (по интенсивности электромагнитного излучения), измеренных в волноводе на частоте 10 ГГц (символы ■, ●, ▲), с оптическими коэффициентами (сплошные линии), рассчитанными согласно модели проводимости Фукса. Расчетные кривые смещены на 5 нм – толщину пленки меди, при которой начинает формироваться сплошной проводящий слой. Рисунок взят из работы [A2].

Отметим, что измеренные коэффициенты отражения и пропускания чистой подложки совпадают с расчетными на всех частотах с погрешностью, не превышающей 2%. При толщине пленки 30 нм измеренные значения коэффициента отражения (0.96) и пропускания (0.03) соответствуют расчетным также в пределах 2%. Однако рост измеренных значений коэффициента отражения $R=|r|^2$ в диапазоне 5–15 нм происходит медленнее, чем это следует из расчетов, выполненных по модели Фукса (при $\beta_1 = \beta_2 = 0$, $\sigma_{\text{bulk}} = 60 \cdot 10^6$ См/м, $l_0 = 42$ нм). Измеренный коэффициент пропускания $T = |t|^2$ в этом диапазоне толщин также не соответствует расчетным значениям. Также наблюдается более плавный рост коэффициента поглощения $Q=1-R-T$ и смещение его максимума на 2 нм в сторону увеличения толщины.

В следующей работе [A2] автором данной диссертации были разработаны приближенные граничные условия, которые по своей сути аналогичны первому приближению матрицы рассеяния $S_{nm}^{[1]}$. В таком случае пленка считается бесконечно тонкой и моделируется при помощи двух граничных условий, связывающих поле $E(z)$ и его производную $E'(z)$ по обе стороны пленки. Поэтому количество уравнений в системе (4.1)-(4.3) уменьшается до четырех. Это значительно упрощает расчеты и в итоге приводит к более простым формулам (4.7)-(4.8), что упрощает анализ зависимостей

оптических коэффициентов. В работе [A2] было показано, что максимальные погрешности вычисления оптических коэффициентов при помощи формул (4.7)-(4.8) на частотах 1, 10, 100 ГГц и 1 ТГц не превышают значений 0.0105, 0.105, 1.05 и 10.7% соответственно. Формулы (4.7)-(4.8) позволили рассчитать среднюю по толщине проводимость пленки через измеренный коэффициент R (см. формулу (3.73) и параграф 3.6). График зависимости проводимости от толщины пленки изображен на рис. 4.6. Для расчетов использовались экспериментальные данные из работы [A2] (рис. 4.5).

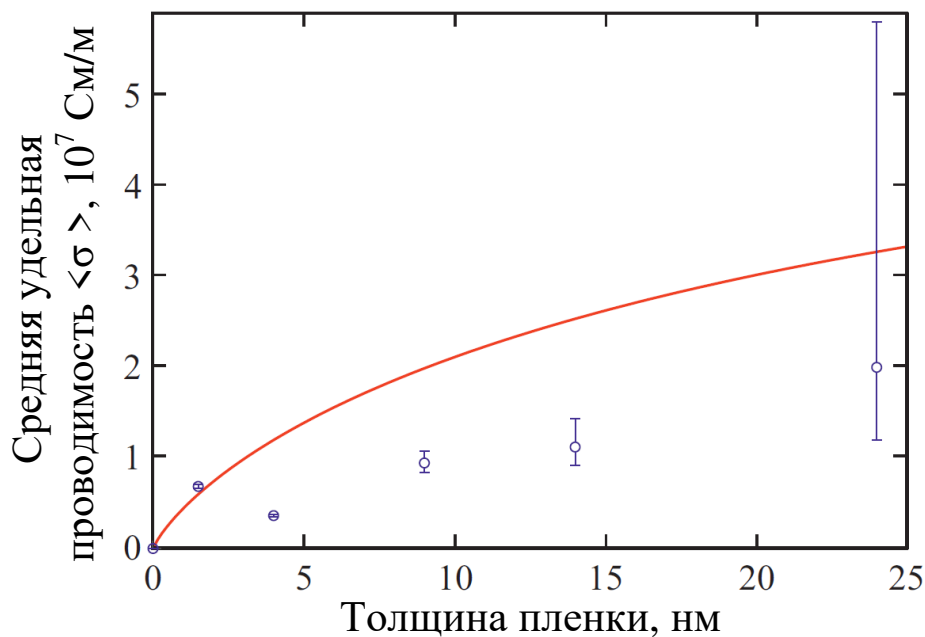


Рис. 4.6 Зависимость средней удельной проводимости пленки меди $\langle \sigma \rangle$ от ее толщины, рассчитанная по измеренным в работе [A2] значениям коэффициента отражения R на частоте 9 ГГц (символы \circ) и зависимость проводимости пленки меди, построенная по формуле Фукса (сплошная линия). Рисунок взят из работы [A2].

В следующей статье [A4] аналогичным образом были измерены оптические коэффициенты пленок платины, а затем по формуле (3.73) рассчитана их удельная проводимость. На рис. 4.7 символами показаны измеренные оптические коэффициенты пленок Pt на частоте 10 ГГц при падении волны со стороны пленки (ориентация fs – рис. 4.7a) и со стороны кварцевой подложки (ориентация sf – рис. 4.7b). Чистая кварцевая подложка отражает 0.33 и пропускает 0.67 энергии падающего излучения. Рассчитанные зависимости оптических коэффициентов от толщины пленки Pt показаны на рис. 4.7 сплошными линиями. Для учета непроводящего слоя с островковой структурой расчетные кривые сдвинуты на толщину 1 нм (пленка Pt толщиной менее 1 нм практически не влияет

на оптические коэффициенты). При таком сдвиге достигается довольно хорошее соответствие расчетных и экспериментальных значений для пленок толщиной менее 10 нм. При превышении толщины 10 нм наблюдается явное расхождение теоретических и измеренных значений. В соответствии с численными расчетами, выполненными по модели Фукса (при $\sigma_{\text{bulk}} = 9.43 \text{ МСм/м}$, $l_0 = 22.4 \text{ нм}$, $\beta_1 = \beta_2 = 0$), коэффициент отражения при $h > 10 \text{ нм}$ должен плавно расти, в пределе достигая единицы, а коэффициент пропускания при толщине 25 нм должен становиться равным 10^{-4} , т.е. практически равным нулю.

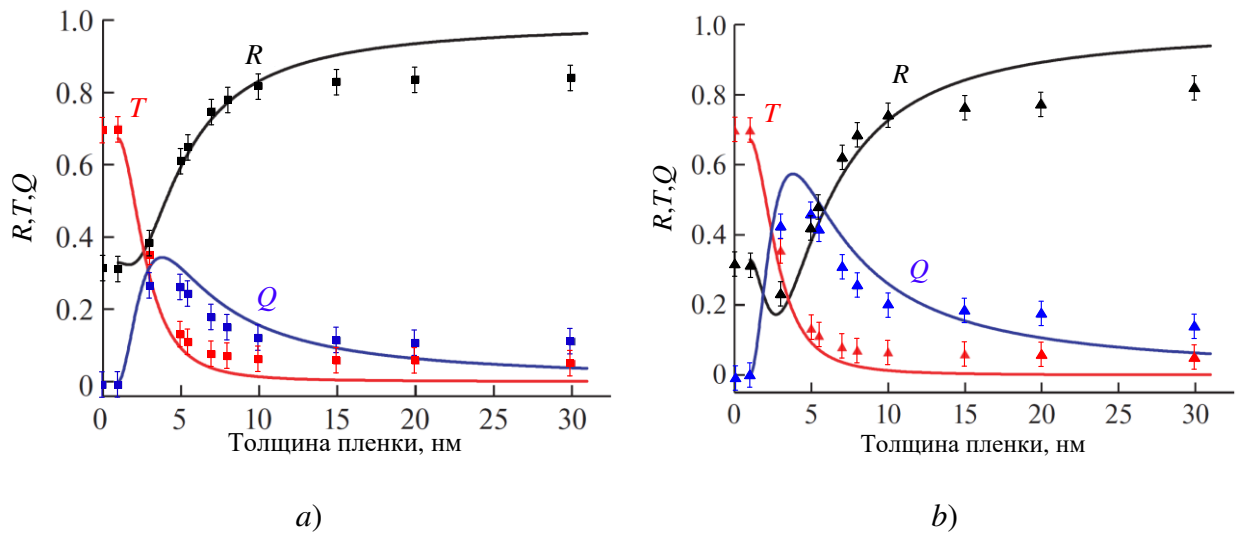


Рис. 4.7 Коэффициенты R , T , Q , измеренные на частоте 10 ГГц при *a)* fs-ориентации подложки (квадраты ■, ■, ■) и при *b)* sf-ориентации подложки (треугольники ▲, ▲, ▲). Для учета эффекта перколяционного перехода расчетные кривые сдвинуты на толщину 1.0 нм по отношению к экспериментальным значениям. Рисунки взяты из работы [A4].

В статье [A4] впервые был экспериментально обнаружен эффект антибликовости ультратонких металлических пленок. Теория данного эффекта была детально описана в параграфе 3.5 настоящей диссертации. Рассчитанный коэффициент отражения R для sf-ориентации имеет явно выраженный минимум. Расчеты, выполненные по формуле (3.67), дают значение $R_{\text{min}} = 0.172$ при толщине пленки 1.7 нм. Для fs-ориентации минимум $R_{\text{min}} = 0.323$ достигается при толщине пленки 0.176 нм. Согласно расчетам, коэффициент поглощения для sf-ориентации имеет максимум $Q_{\text{max}} = 0.57$ при толщине 2.78 нм, а для fs-ориентации $Q_{\text{max}} = 0.34$ при таком же значении толщины пленки. Как можно видеть из рис. 4.7, теоретически предсказываемый минимум коэффициента отражения наблюдается также и в эксперименте.

На рис. 4.8 изображен график зависимости удельной проводимости пленок Pt от толщины. В диапазоне толщин 1–10 нм измеренные значения хорошо соответствуют модельной зависимости удельной проводимости от толщины, построенной по формуле

Фукса. Это соответствие указывает на то, что пленки Pt толщиной менее 10 нм формируются достаточно однородными как по поверхности, так и по толщине. Островковая доперколяционная структура, возникающая на первом этапе роста пленки, заменяется однородным слоем уже при толщине, превышающей 1 нм.

Для пленок с толщиной, превышающей 10 нм, наблюдается уменьшение средней удельной проводимости, что находится в противоречии с модельной зависимостью Фукса. Для пленок Pt, толщина которых превышает 10 нм, удельная проводимость перестает увеличиваться, хотя толщина этих пленок и масса осажденного металла растет. Можно предположить, что такое поведение удельной проводимости объясняется особенностями роста пленок Pt. Вероятно, что пленки толщиной более 10 нм растут сложным образом – с образованием либо столбчатых, либо конических кристаллитов. Между соседними столбиками возникают промежутки, что приводит к уменьшению средней удельной проводимости.

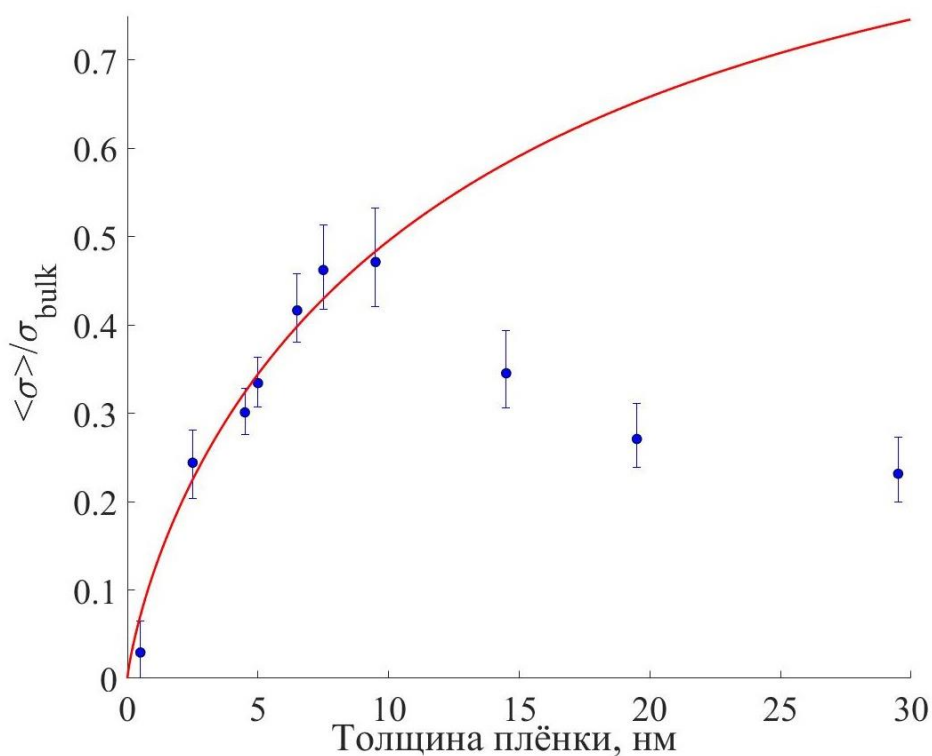


Рис. 4.8 Зависимость нормированной на σ_{bulk} средней удельной проводимости пленки Pt $\langle \sigma \rangle$ от ее толщины, рассчитанная по формуле Фукса (сплошная линия) и рассчитанная по зависимостям $R(h)$, измеренным для различных ориентаций пленки по отношению к падающей волне: fs – квадраты ■, sf – треугольники ▲. Рисунок взят из работы [A4].

В новой статье [A5] мы решили более детально исследовать область минимума коэффициента R (поскольку на графиках, полученных в работе [A4], изображенных на рис. 4.7, минимуму коэффициента отражения R соответствует лишь одна

экспериментальная точка). На рис. 4.9 приведены графики зависимости коэффициентов R , T , Q от толщины пленок меди. Измерения проводились для разных толщин кварцевой подложки, но в измерениях использовались одни и те же пленки. Толщина подложки варьировалась путем плотного прижатия к подложке с напыленной пленкой толщиной 4 мм чистой подложки толщиной 2 мм. Прижимались те поверхности, на которых пленка отсутствовала. Для подтверждения корректности использования такой экспериментальной методики были проведены измерения коэффициентов отражения и пропускания чистой подложки толщиной 4 мм и комбинации из двух подложек толщиной 2 мм. Результаты совпали в пределах 2%.

На экспериментальных графиках, изображенных на рис. 4.9, четко наблюдаются минимумы коэффициента отражения. Минимальное значение R на рис. 4.9a (частота 11.5 ГГц, толщина подложки 4 мм) составляет $6.8 \cdot 10^{-4}$ при толщине пленки $h = 7.9$ нм, а на рис. 4.9b (частота 8.5 ГГц, толщина подложки 6 мм) составляет $6.4 \cdot 10^{-3}$ при толщине пленки $h = 8.6$ нм. Таким образом, еще раз экспериментально был подтвержден эффект антибликовости тонких металлических пленок.

На рис. 4.10 приведены спектральные характеристики оптических коэффициентов. Рис. 4.10a соответствует пленке 7.9 нм на подложке 4 мм, рис. 4.10b соответствует пленке 8.6 нм на подложке 6 мм. Графики построены для двух ориентаций подложки.

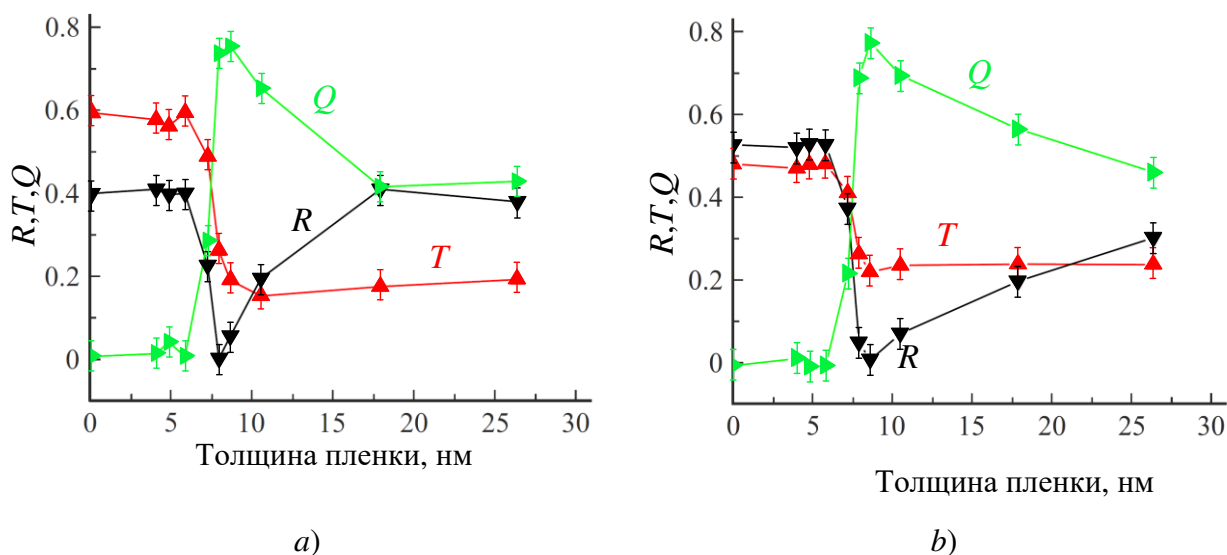


Рис. 4.9 Экспериментальные зависимости коэффициентов R , T , Q от толщины пленок меди для sf-ориентации подложки. Графики *a*) соответствуют частоте 11.5 ГГц и подложке толщиной 4 мм, графики *b*) соответствуют частоте 8.5 ГГц и подложке толщиной 6 мм. Рисунки взяты из работы [A5].

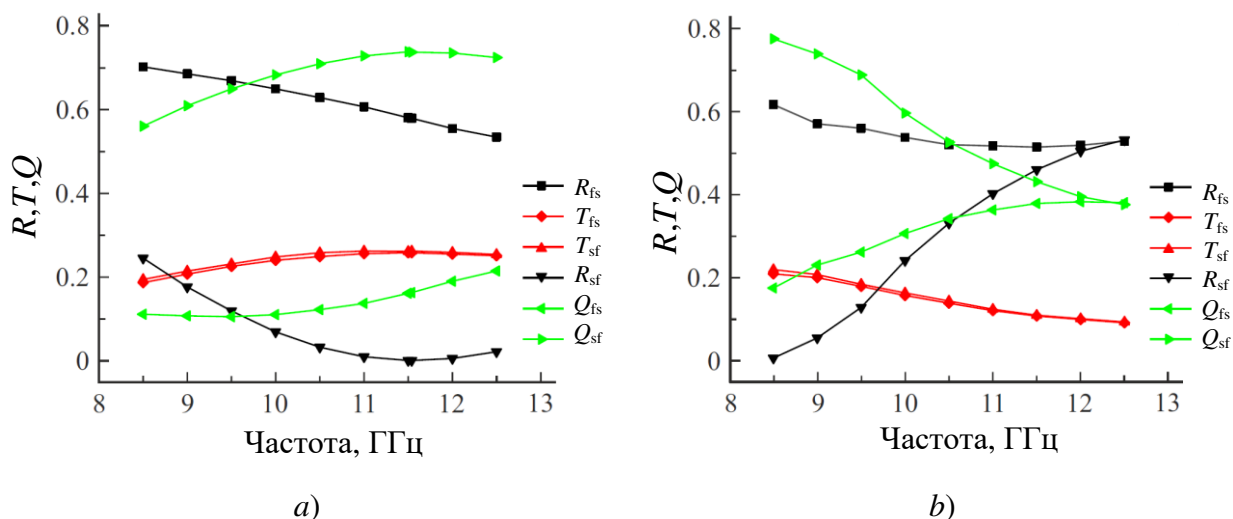


Рис. 4.10 Спектральные зависимости коэффициентов R , T , Q для двух образцов: *a*) пленка 7.9 нм на подложке 4 мм и *b*) пленка 8.6 нм на подложке 6 мм для двух ориентаций подложки. Рисунки взяты из работы [A5].

В конце главы обсудим вопрос об идентичности получаемых пленок. Для проведения измерений были выбраны пленки золота, поскольку процесс окисления золота при атмосферных условиях происходит достаточно медленно. На рис. 4.11 приведены зависимости коэффициентов R , T от толщины пленок золота с толщинами 6.6, 7.3, 8.0 и 10.0 нм. В эксперименте участвовало 12 различных пленок. Каждая из пленок напылялась на чистую подложку толщиной 4 мм. Измерения проводились на частоте 10 ГГц, причем электромагнитная волна падала на подложку со стороны напыленного слоя металла (fs-ориентация). Напыление проводилось методом термического испарения. Условия эксперимента были такие же, как в работе [A5], см. табл. 4.1.

Максимальный разброс коэффициента R составляет 5.0%, 3.2%, 1.8%, 0.2% для толщин 6.6, 7.3, 8.0, 10.0 нм соответственно, а максимальный разброс коэффициента T составляет 10.1%, 2.7%, 1.2%, 0.2% для толщин 6.6, 7.3, 8.0, 10.0 нм соответственно. Для тонких пленок разброс коэффициентов R и T получается больше, вероятно, в силу того, что слой металла в таких пленках представляет собой агломерации большого числа металлических островков, между которыми возможно наличие пустот. Формирование такой структуры имеет случайный характер. При увеличении толщины пленки слой металла становится более однородным по структуре: островки срачиваются между собой, образуются кристаллиты, пустоты заполняются. По этой причине с увеличением толщины пленок разброс коэффициентов R и T уменьшается.

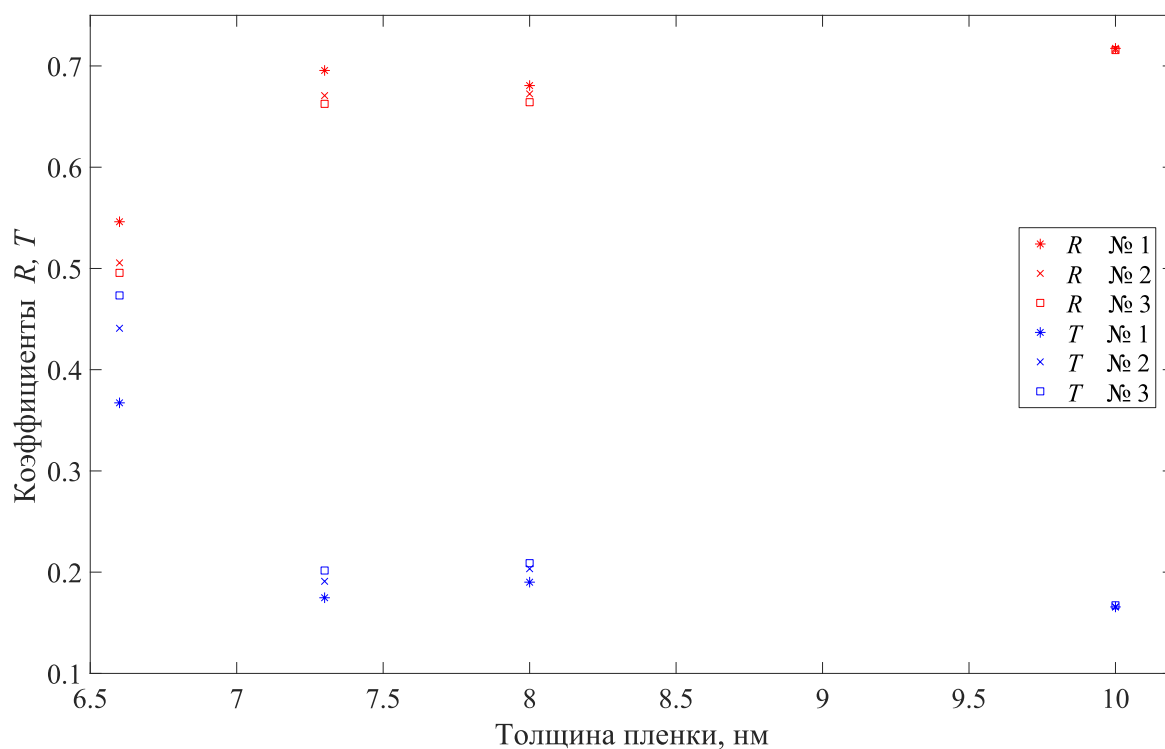


Рис. 4.11 Экспериментальные зависимости коэффициентов R , T от толщины пленок меди для fs-ориентации подложки.

4.4 Итоги главы 4

Использование нулевого приближения матрицы рассеяния $S_{mm}^{\text{exp}[0]}$ значительно упрощает задачу расчета оптических коэффициентов для плоскостойких структур. В частности, для системы «диэлектрическая подложка с двумя напыленными пленками», из формул для оптических коэффициентов возможно однозначным образом выразить среднюю проводимость пленки. Таким образом, по экспериментально измеренным оптическим коэффициентам системы «диэлектрическая подложка с напыленной пленкой» возможно по аналитическим формулам рассчитывать проводимость пленки. В том числе можно проводить расчет проводимости из коэффициента отражения в случае, когда электромагнитная волна падает на подложку с чистой стороны. В таком случае можно выполнять бесконтактные измерения проводимости пленки прямо в процессе ее напыления.

Кроме того, экспериментальные данные подтвердили, что в зависимости коэффициента отражения от толщины пленки наблюдается минимум, причем данный минимум более выражен в случае, когда электромагнитная волна падает на подложку с чистой стороны. Данный эффект может быть использован для уменьшения бликов в различных оптических приборах. Из измеренных спектральных зависимостей

коэффициентов R , T , Q можно сделать вывод о том, что эффект антибликовости сохраняется в пределах полосы 9-12 ГГц.

Глава 5

Нелинейные эффекты в плоскостойких слабопроводящих материальных средах с температурной зависимостью диэлектрической проницаемости.

В данной главе используются материалы, опубликованные в статьях [А6-А7].

В предыдущих главах изучались только линейные процессы распространения волн в плоскостойкой среде. Однако если в такой среде присутствуют тонкие металлические слои, неизбежен процесс выделения тепла. Действительно, как было показано в параграфе 1.1, коэффициент поглощения отдельно отстоящих тонких металлических пленок может достигать до 50%. Увеличение температуры среды приводит к изменению ее электромагнитных характеристик: проводимости и диэлектрической проницаемости. Таким образом, при достаточно высоких мощностях распространение электромагнитного импульса в подобной среде становится нелинейным.

В данной главе излагается содержание работ [А6-А7], в которых была предложена консервативная модель распространения видеоимпульсов в вышеописанных материальных средах. Немаловажным фактором является то, что в предлагаемой модели выполняются начала термодинамики.

В параграфе 5.1 проведен вывод системы уравнений в частных производных, описывающих изменение профиля электромагнитного видеоимпульса. В разделе 5.5 рассмотрено приближение, в котором эту систему возможно решить при помощи метода характеристик, и показано, что при распространении импульса возникают два конкурирующих нелинейных эффекта: рост пиковой мощности импульса и формирование ударной электромагнитной волны. В параграфе 5.6 рассмотрена реализация численной схемы, основанной на дивергентном подходе, которая позволяет проводить моделирование распространения видеоимпульса в общем случае.

С практической точки зрения, вышеописанная теория крайне важна для моделирования нелинейных длинных линий. Мы покажем, что распространение видеоимпульса, как в материальной среде, так и в длинной линии, описывается одной и той же системой уравнений в частных производных, различия заключаются лишь в постоянных коэффициентах, входящих в эту систему. Основное внимание будет уделено моделированию длинных линий. Данный случай наиболее интересен с практической точки зрения, поскольку нелинейные длинные линии используются как составные части конструкций высоковольтных генераторов наносекундных видеоимпульсов. Подобные генераторы занимают важную нишу в технических областях, где требуется подача на

нагрузку высокой мощности в течение очень короткого промежутка времени [126-127]. В современных исследованиях появляются новые требования к высоковольтным генераторам, в частности, возможность настраивания параметров генерируемых импульсов [128-132]. В вышеописанных приложениях нелинейные длинные линии являются незаменимым элементом, поскольку они позволяют изменять форму, проходящих через них импульсов. В пионерских работах [133-135] было показано, что на основе нелинейных линий возможно получать ударные электромагнитные волны с длительностью переднего фронта до одной наносекунды [136]. Во многих современных работах классические высоковольтные генераторы нагружаются на нелинейные линии, что позволяет получать импульсные установки с уникальными параметрами [137-144].

Возможность варьирования характеристик генерируемого импульса необходима, например, при изучении стримерных разрядов. Некоторые эффекты, такие как филаментация поверхностного разряда, зависят преимущественно от амплитуды импульса [145]. Однако, например, тип объемного разряда (искровой, тлеющий или коронный) в воздухе определяется не только амплитудой, но также длительностью и частотой повторения импульса [146-148]. При разряде в жидкостях и газах большую роль играет время нарастания фронта импульса. При разряде в воде это время определяет возможность газофазного образования плазмы [149], а при разряде в газах – скорость распространения разряда в межэлектродном промежутке [150-151]. Такие исследования важны для моделирования атмосферных явлений [152], проектирования газоразрядных ключей с минимальным джиттером [153, 154], а также для технологий плазменного горения [155-156].

Кроме того, возможность настраивания характеристик импульсов необходима для новых направлений биомедицины, таких как наносекундная электропорация [130], супра-электропорация [157-158], исследования биполярной компенсации [131] и биоконверсии [159], противораковая терапия [160-161].

Однако, теория нелинейных линий, используемая в работах [133-144], ограничивается случаем, в котором электромагнитные волны, проходя через материальную среду, не изменяют ее термодинамического состояния. Это предположение сужает класс нелинейных эффектов, которые можно предсказать теоретически. По этой причине становится очевидной необходимость изучения новых нелинейных эффектов, возникающих непосредственно из-за изменения температуры линии передачи.

Стоит отметить, что похожие модели исследовались ранее, однако вне контекста генераторов наносекундных видеоимпульсов. Например, в [162-163] предлагается модель микроволнового нагрева диэлектрической среды с потерями, в которой учитывается

изменение характеристик среды при увеличении температуры. Изучались ранее и такие процессы, как изменение формы волновых пакетов из-за тепловых потерь в капиллярных световодах [164], металлических волноводах [165], а также в диэлектрической среде с потерями [166]. В работе [167] предлагается модель распространения видеоимпульсов в плазме, учитывающая изменение температуры как электронного газа, так и ионной решетки.

Отметим, что в каждой из работ [162-167], используется понятие температуры, которая является термодинамической величиной. Но, несмотря на это, в данных работах опускается вопрос о том, являются ли рассматриваемые модели материальных сред термодинамическими (для этого необходима проверка выполнения начал термодинамики). В работах [А6-А7] впервые предлагается модель нелинейной материальной среды, для которой выполняются начала термодинамики, а также закон сохранения энергии.

5.1 Вывод уравнений, описывающих нелинейное распространение видеоимпульса

Рассмотрим слабопроводящие среды, обладающие постоянной удельной проводимостью $\sigma = \text{const}$ и относительной диэлектрической проницаемостью ϵ , зависящей от температуры среды T . Под слабопроводящими средами будем понимать такие среды, для которых толщина скин-слоя δ много больше, чем длина волны λ . Поэтому электромагнитный импульс в таких средах может распространяться на значительные расстояния в масштабах длины λ . Также будем считать, что ϵ и σ не зависят от частоты излучения. Материальные среды с такими характеристиками могут быть сконструированы на основе последовательно расположенных друг за другом одинаковых диэлектрических слоев, на которые напылены идентичные тонкие металлические пленки с $h \ll h_{\text{pk}}$. Действительно, в случае металлов σ почти не зависит от частоты, а условие $h \ll h_{\text{pk}}$ означает, что коэффициент поглощения и отражения от каждой из пленок крайне мал. Для микроволновой керамики ϵ также слабо зависит от частоты. Если период чередования диэлектрических слоев $\Lambda \ll \lambda$, такая система может быть рассмотрена в рамках теории эффективной среды. Эффективная проводимость такой среды будет составлять $\sigma_{\text{eff}} = \langle \sigma \rangle h_{\text{film}} / \Lambda$, где $\langle \sigma \rangle$ и h_{film} средняя удельная проводимость и толщина металлической пленки, а эффективная диэлектрическая проницаемость будет с хорошей степенью точности равна диэлектрической проницаемости диэлектрических слоев в силу условия $\Lambda \ll h_{\text{film}}$.

Будем предполагать, что явление дифракции слабо проявляется на фоне возникающих нелинейных эффектов, поэтому можно считать, что пучок электромагнитных волн распространяется в одном направлении (вдоль оси Oz , см. рис. 5.1). Пусть справедливы материальные уравнения

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon(T) \mathbf{E} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}, \quad \mathbf{P} = \varepsilon_0 \chi(T) \mathbf{E}, \quad \mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}, \quad \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}. \quad (5.1)$$

Здесь T – температура среды (в Кельвинах), \mathbf{B} , \mathbf{D} – векторы магнитной и электрической индукции; \mathbf{H} , \mathbf{E} – векторы напряженности электрического и магнитного поля; \mathbf{j} – вектор плотности тока электронов проводимости; \mathbf{P} – вектор поляризации среды; ε_0 и μ_0 – электрическая и магнитная постоянные; $\chi(T)$ – относительная диэлектрическая восприимчивость среды, зависящая от температуры.

Пусть $\mathbf{E} = E(z,t)\mathbf{e}_x$, $\mathbf{H} = H(z,t)\mathbf{e}_y$ (\mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y – орты, направленные вдоль координатных осей). Тогда из уравнений (5.1) следует: $\mathbf{D} = D(z,t)\mathbf{e}_x$, $\mathbf{B} = B(z,t)\mathbf{e}_y$, $\mathbf{j} = j(z,t)\mathbf{e}_x$, $\mathbf{P} = P(z,t)\mathbf{e}_x$. В таком случае уравнения Максвелла принимают вид системы (операция взятия частной производной по какой-либо переменной ξ обозначается в данной статье символом ∂_ξ):

$$\partial_z E = -\mu_0 \partial_t H, \quad -\partial_z H = \varepsilon_0 \partial_t E + \partial_t \{ \varepsilon_0 \chi(T) E \} + j. \quad (5.2)$$

Чтобы система (5.1)-(5.2) была замкнутой, ее нужно дополнить уравнением для T . Это уравнение может быть выведено из первого начала термодинамики.

Для применения первого начала необходимо предположить, что при прохождении импульса термодинамическое состояние материальной среды успевает достичь локального термодинамического равновесия. Это предположение верно, если продолжительность видеоимпульса Δt много больше времен релаксационных процессов τ_e и τ_p , происходящих в среде. Время τ_e связано с движением электронов проводимости, а время τ_p – со смещением связанных зарядов. Время τ_e можно оценить как среднее время пробега электрона в твердом теле (примерно 10^{-14} с). Время τ_p варьируется в широких пределах в зависимости от типа поляризации диэлектрика. Поскольку мы рассматриваем наносекундные импульсы $\Delta t \sim 10^{-10}$ с. Следовательно, необходимо выполнение неравенства $\tau_p \ll 10^{-10}$ с. Столь быстрые процессы поляризации возможны в диэлектриках с ионным или атомным типом поляризации, для которых $\tau_p \sim 10^{-12} \dots 10^{-13}$ с [168]. В таком случае условия $\Delta t \gg \tau_e, \tau_p$ выполняются.

Запишем первое начало термодинамики для единицы объема среды: $\delta Q = dU + dA$ (см. рис. 5.1). Здесь δQ – количество тепла, поглощаемое единицей объема среды; U – сумма внутренней энергии среды U' и энергии электромагнитного поля $U'' = (\varepsilon_0 E^2 + \mu_0 H^2)/2$ в единице объема среды; $dA = -EdD - HdB$ – работа, совершаемая единицей объема среды. Используя эти формулы, первое начало термодинамики можно записать относительно U' :

$$\delta Q = dU' - EdP \quad (5.3)$$

Согласно стандартной процедуре расчета [169], для определения U' необходимо решить систему уравнений в частных производных

$$\partial_T U'(P,T) = C_P(P,T), \quad (5.4)$$

$$\partial_P U'(P,T) = E(P,T) - T \partial_T E(P,T) \quad (5.5)$$

при заданных $C_P(P,T)$ и $E(P,T)$. Здесь $C_P(P,T)$ – удельная (на единицу объема) теплоемкость материальной среды при постоянной поляризации. С учетом

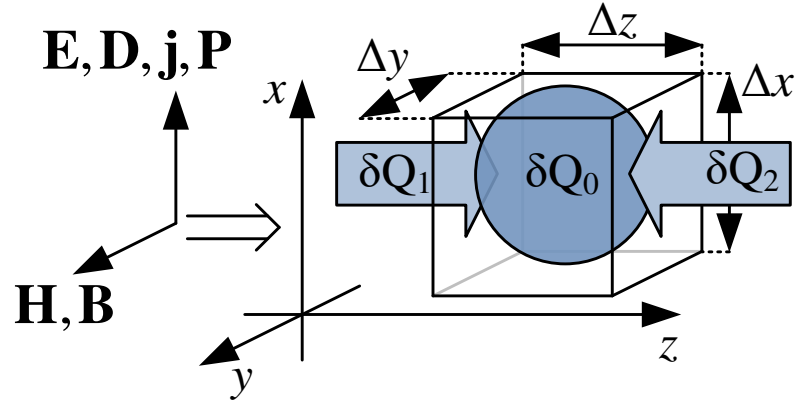


Рис. 5.1 Схема, поясняющая вывод уравнений.

того, что $E(P,T) = P/(\epsilon_0 \chi(T))$, проинтегрировав уравнение (5.5), получим:

$$U'(P,T) = f(T) + P^2 \{ \chi^{-1}(T) - T \partial_T \chi^{-1}(T) \} / (2\epsilon_0), \quad (5.6)$$

где $f(T)$ – некоторая функция температуры. Подставляя (5.6) в (5.4), найдем, что

$$C_P(P,T) = C_0(T) + C_1(P,T), \quad C_0(T) = \partial_T f(T), \quad C_1(P,T) = -P^2 T \partial_{TT} \chi^{-1}(T) / (2\epsilon_0). \quad (5.7)$$

Поскольку $C_1 = 0$ при $\chi = \text{const}$, очевидно, что C_1 является составляющей теплоемкости, возникающей из-за температурной зависимости $\chi(T)$. Постоянная C_0 же, как видно из формулы (5.7), может зависеть только от температуры, поэтому C_0 является составляющей теплоемкости, связанной с тепловыми колебаниями атомов кристаллической решетки. Поэтому $C_0 = c\rho$, где c – удельная на единицу массы теплоемкость, ρ – плотность материальной среды. Пусть $c, \rho = \text{const}$. В таком случае с точностью до постоянного слагаемого

$$U'(P,T) = c\rho T + P^2 \{ \chi^{-1}(T) - T \partial_T \chi^{-1}(T) \} / (2\epsilon_0). \quad (5.8)$$

Существование решения системы уравнений (5.4)-(5.5) гарантирует, что для исследуемой модели материальной среды локально выполняется второе начало термодинамики [169] (возможно введение энтропии как непрерывной и дважды дифференцируемой функции аргументов P, T). Выполнение третьего начала (стремление энтропии системы к нулю при $T \rightarrow 0$) возможно достичь при учете температурной зависимости $C_0(T)$.

Далее, найдем δQ . Для этого рассмотрим малый объем среды $\Delta U = \Delta x \Delta y \Delta z$ (рис. 5.1). В этом объеме за счет джоулева нагрева за время Δt выделится тепло $\delta Q_0 = Ej \Delta U \Delta t$. Помимо этого через границы объема ΔU будет происходить теплообмен с окружающей его средой. Поскольку мы предполагаем, что физические величины не зависят от координат x и y , тепловой поток будет направлен вдоль оси Oz . Согласно закону Фурье (см. выбранные направления тепловых потоков на рис. 5.1), через левую стенку ΔU за Δt проходит количество тепла равное $\delta Q_1 = -\kappa \partial_z T(z) \Delta x \Delta y \Delta t$, а через правую $\delta Q_2 = \kappa \partial_z T(z + \Delta z) \Delta x \Delta y \Delta t$. Здесь $\kappa = \text{const}$ – коэффициент теплопроводности. Тогда $\delta Q = (\delta Q_2 + \delta Q_1 + \delta Q_0) / \Delta U$. При $\Delta U, \Delta t \rightarrow 0$, получим

$$\delta Q / dt = Ej + \kappa \partial_{zz} T. \quad (5.9)$$

Разделим (5.3) на dt . Подставим (5.9) в (5.3). Учтем (5.8), а также то, что $d\chi/dt = \partial_T \chi \times \partial_t T$. В получившемся выражении сгруппируем слагаемые с $\partial_t T$, получим:

$$\partial_t T = \frac{jE + \kappa \partial_{zz} T - T \partial_T \chi \partial_t (\epsilon_0 E^2 / 2)}{c\rho + (\epsilon_0 E^2 / 2) T \partial_T \chi}. \quad (5.10)$$

Система уравнений (5.1), (5.2), (5.10) является искомой, замкнутой относительно $E(z,t)$, $T(z,t)$, $H(z,t)$ системой. Для нее справедлив закон сохранения энергии. Используя формулы (5.3) и (5.9), нетрудно показать, что $E \partial_t P + Ej \equiv \partial_t U' - \kappa \partial_{zz} T$. Используя теорему Пойнтинга $\partial_z (EH) + \partial_t (\epsilon_0 E^2 + \mu_0 H^2) / 2 = -E \partial_t P - Ej$, придем к равенству $\partial_z (EH - \partial_z (\kappa T)) + \partial_t (\epsilon_0 E^2 / 2 + \mu_0 H^2 / 2 + U') = 0$. Интегрируя это равенство по переменной z , получим закон сохранения энергии

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (\epsilon_0 E^2 / 2 + \mu_0 H^2 / 2 + U') dz \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} U dz = \text{const}. \quad (5.11)$$

Приведем вывод аналогичных уравнений для длинной линии (см. рис. 5.2). Пусть распределенная емкость состоит из конденсатора, заполненного проводящим диэлектриком, поляризуемость которого зависит от температуры. В таком случае этот конденсатор можно представить в виде параллельно соединенных резистора с проводимостью $G = g \Delta z$ и вакуумного конденсатора с емкостью $\Theta(T) = C(T) \Delta z$, здесь g , C – соответственно значения погонной проводимости (за счет которой появляется ток утечки I_g) и погонной емкости длинной линии.

Записывая законы Кирхгофа для цепи, изображенной на рис. 5.2b, и устремляя Δz к нулю, получим:

$$\partial_z V(z,t) = -L \partial_t I(z,t), \quad (5.12)$$

$$\partial_z I(z,t) = -\partial_t \{C(T)V(z,t)\} - gV(z,t). \quad (5.13)$$

Здесь $V(z,t)$, $I(z,t)$ – значения напряжения и тока в длинной линии, а L – погонная индуктивность. Видно, что при помощи замен $V \rightarrow E$, $I \rightarrow H$, $L \rightarrow \mu_0$, $C(T) \rightarrow \epsilon_0 \epsilon(T) =$

$\epsilon_0(1+\chi(T))$, $g \rightarrow \sigma$ мы перейдем к системе уравнений Максвелла (5.2). Аналогичные замены следует сделать при использовании первого начала

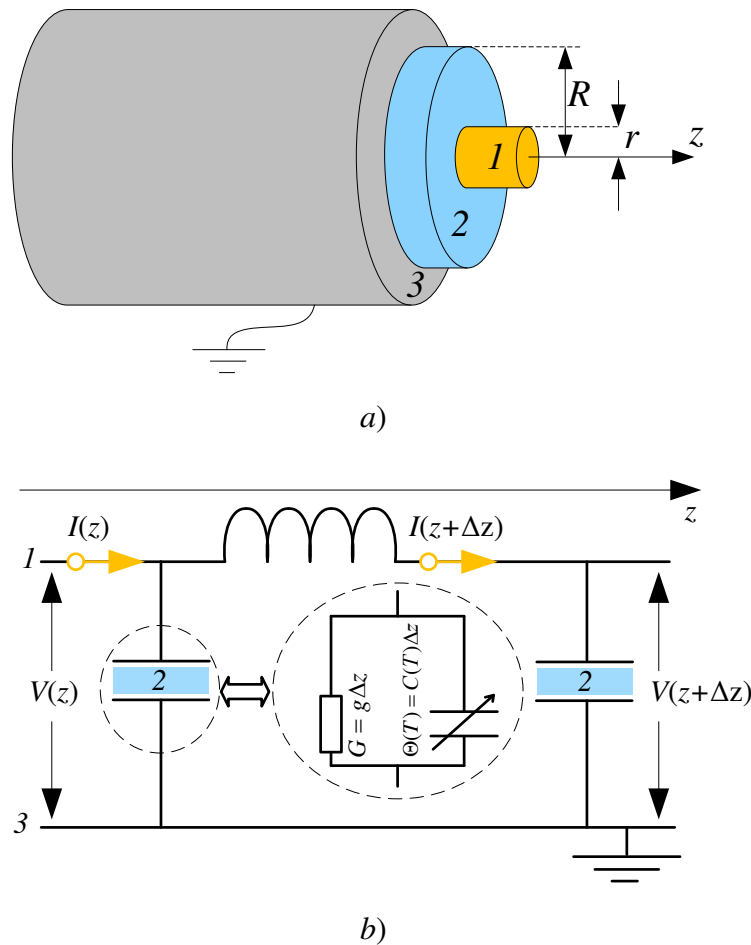


Рис. 5.2. Схема коаксиальной длинной линии а) и ее эквивалентная схема б). 1 – центральная жила, 2 – нелинейная материальная среда, 3 – экранирующий слой. V , I – значения напряжения и тока в длинной линии соответственно.

термодинамики: $HdB = Hd(\mu_0 H) \rightarrow Id(LI)$, $EdD = Ed(\epsilon_0 \epsilon(T)E) \rightarrow Vd(C(T)V)$. Нас интересует изменение термодинамического состояния проводящего диэлектрика, поэтому первое начало термодинамики мы запишем для единицы его длины: $\delta Q = dU + dA = dU - Vd(C(T)V) - Id(LI)$. Здесь δQ и dU погонное количество тепла и погонная внутренняя энергия диэлектрика. По аналогии с предыдущим случаем распишем U в виде суммы погонной внутренней энергии среды U' и погонной энергии электромагнитного поля U'' . Погонная емкость C совпадает по размерности с ϵ_0 , поэтому должна быть справедлива формула $C = \epsilon_0 \epsilon(T) \psi$, где ψ – некоторый безразмерный коэффициент. Тогда $C = \epsilon_0 \psi + \epsilon_0 \chi(T) \psi$ и, проводя аналогию с предыдущим случаем, мы введем $U'' = (\epsilon_0 \psi V^2 + LI^2)/2$.

Замены $\varepsilon_0\psi \rightarrow \varepsilon_0$, $V \rightarrow E$, $I \rightarrow H$, $L \rightarrow \mu_0$ переводят это выражение в формулу для плотности энергии электромагнитного поля в вакууме.

Далее, запишем первое начало термодинамики относительно U' :

$$\delta Q = dU' - Vd\wp, \wp = \varepsilon_0\psi\chi(T)V. \quad (5.14)$$

Здесь символ \wp введен исключительно для проведения аналогии: заменами $\wp \rightarrow P$, $\varepsilon_0\psi \rightarrow \varepsilon_0$, $V \rightarrow E$ уравнения (5.14) сводятся к уравнению (5.3) и второму из уравнений (5.1). Решая систему уравнений в частных производных, аналогичную (5.4)-(5.5), получим:

$$U'(\wp, T) = \zeta T + \wp^2 \{ \chi^{-1}(T) - T\partial_T \chi^{-1}(T) \} / (2\varepsilon_0\psi). \quad (5.15)$$

Здесь ζ – погонная теплоемкость проводящего диэлектрика.

Для нахождения погонного тепла δQ рассмотрим объем проводящего диэлектрика $\Delta U = S\Delta z$, где S – площадь поперечного сечения диэлектрика в длинной линии. Тогда за время Δt в диэлектрике длиной Δz за счет тока утечки выделится тепло $\delta Q_0 = gU^2\Delta z\Delta t$, а через левую и правую стенки ΔU пройдут количества тепла $\delta Q_1 = -\kappa S\partial_z T(z)\Delta t$ и $\delta Q_2 = \kappa S\partial_z T(z+\Delta z)\Delta t$ соответственно. Тогда $\delta Q = (\delta Q_2 + \delta Q_1 + \delta Q_0)/\Delta z$. При $\Delta z, \Delta t \rightarrow 0$, получим

$$\delta Q/dt = gU^2 + \kappa S\partial_{zz}T. \quad (5.16)$$

В итоге приходим к следующему уравнению для температуры:

$$\partial_t T = \frac{gV^2 + S\kappa\partial_{zz}T - T\partial_T\chi\partial_t(\varepsilon_0\psi V^2/2)}{\zeta + (\varepsilon_0\psi V^2/2)T\partial_{TT}\chi}. \quad (5.17)$$

Заменами $\kappa S \rightarrow \kappa$, $g \rightarrow \sigma$, $\varepsilon_0\psi \rightarrow \varepsilon_0$, $V \rightarrow E$, $\zeta \rightarrow c\rho$ данное уравнение сводится к уравнению (5.10).

5.2 Применение метода Хохлова для упрощения уравнений

Сделаем еще ряд упрощений. Во-первых, решение системы (5.1), (5.2), (5.10) мы будем искать при заданных начальных условиях. Будем считать, что сам импульс генерируется в линейной среде, а затем, преодолевая границу раздела, к моменту времени t_0 (который мы примем за начальный) оказывается полностью локализован в нелинейной среде. Пусть температура материальной среды при $t = t_0$ постоянна и равна T_0 . Также предположим, что к моменту времени t_0 нелинейные эффекты не успевают существенно повлиять на динамику распространения импульса. Поэтому импульс, распространяющийся в нелинейной среде, при $t \leq t_0$ можно представить в виде плоской электромагнитной волны, бегущей вдоль оси Oz с постоянной фазовой скоростью $v_0 = \{\varepsilon(T_0)\mu_0\}^{-1/2}$: $E(z,t) = E_0 f(z/L - v_0(t-t_0)/L)$, $H(z,t) = H_0 f(z/L - v_0(t-t_0)/L)$. Здесь E_0 , H_0 – амплитуды электромагнитных полей начального импульса; L – некоторая константа; f –

функция, которая задает форму профиля начального импульса. Будем считать, что $f(\xi) \neq 0$ только при $|\xi| \leq 1/2$, а $\max|f|=1$. В качестве такой функции для определенности выберем

$$f(\xi) = \begin{cases} \{1 + \cos(2\pi\xi)\} / 2, & |\xi| < 1/2, \\ 0, & |\xi| \geq 1/2. \end{cases} \quad (5.18)$$

В таком случае константа L представляет собой длину начального импульса в среде, а продолжительность начального импульса в среде $\Delta t = Lv_0$. Подставляя решения $E(z,t)$, $H(z,t)$, имеющие вид бегущих волн, в первое уравнение системы (5.2), получим $H_0 = E_0/(\mu_0 v_0)$. Пусть для определенности $t_0 = 0$, тогда начальные условия примут вид

$$E(z,0) = E_0 f(z/L), \quad H(z,0) = \{E_0/(\mu_0 v_0)\} f(z/L), \quad T(z,0) = T_0. \quad (5.19)$$

Во-вторых, пусть зависимость $\chi = \chi(T)$ имеет линейный вид

$$\chi(T) = \chi_0 \{1 + \gamma(T - T_0)\}, \quad (5.20)$$

где γ – некоторый коэффициент пропорциональности, $\chi_0 = \text{const}$ – относительная диэлектрическая восприимчивость среды при $T = T_0$.

В-третьих, будем предполагать, что $\kappa \partial_{zz} T \ll c \rho \partial_t T$. Это условие можно сформулировать в виде условия малости безразмерного параметра $s = \kappa \Delta t / (c \rho L^2)$. Действительно, пусть после прохождения импульса температура среды увеличивается на ΔT . Очевидно, этот процесс нагрева будет занимать характерное время Δt , а распределение температуры в пространстве будет характеризоваться масштабом длины L . Поэтому $\kappa \partial_{zz} T \approx \kappa \Delta T / L^2$, $c \rho \partial_t T \approx c \rho \Delta T / \Delta t$. При $s \ll 1$, следовательно, $\kappa \partial_{zz} T \ll c \rho \partial_t T$. Для оценки s возьмем характерные для твердых тел значения $\rho = 10^3 \text{ кг/м}^3$, $c = 10^3 \text{ Дж/(кг} \times \text{К)}$, $\kappa = 10^3 \text{ Вт/(м} \times \text{К)}$. Пусть $\Delta t = 1 \text{ нс}$, тогда $s \approx (1 + \gamma) \times 10^{-11}$.

При зависимости (5.20) и условии $s \ll 1$ уравнение (5.10) примет вид

$$c \rho \partial_t T = jE - \gamma \chi_0 T \partial_t (\epsilon_0 E^2 / 2). \quad (5.21)$$

Далее введем безразмерные величины: $\tau = t / \Delta t$; $\xi = z / L$; $\mathcal{E}(\xi, \tau) = E / E_0$, $\mathcal{H}(\xi, \tau) = H / H_0$; $\theta(\xi, \tau) = T / \Delta T$, $\theta_0 = T_0 / \Delta T$. Здесь $\Delta T = (E_0)^2 \sigma \Delta t / (c \rho)$ – характерное увеличение температуры среды после прохождения импульса (эта оценка ΔT выполнена для линейного случая, в котором $\epsilon = \text{const}$ и $\rho c \partial_t T = \sigma E^2$). В случае длинной линии $\mathcal{E}(\xi, \tau) = V / V_0$, $\mathcal{H}(\xi, \tau) = I / I_0$, $\Delta T = (V_0)^2 g \Delta t / \zeta$. Тогда, подставляя равенство $\partial_t P = \partial_t (\chi(T) E) = \chi(T) \partial_t E + E \partial_t \chi \partial_t T$ в (5.2), а затем при помощи (5.21) исключая из (5.2) $\partial_t T$, сведем уравнения (5.1), (5.2), (5.21) к системе

$$\partial_\xi \mathcal{E} + \partial_\tau \mathcal{H} = 0, \quad (5.22)$$

$$\partial_\xi \mathcal{H} + \{1 + \beta(\theta - \theta_0) - \alpha \beta \theta \mathcal{E}^2\} \partial_\tau \mathcal{E} = -(\beta/\alpha) \mathcal{E} (1 + \alpha \mathcal{E}^2), \quad (5.23)$$

$$\partial_\tau \theta = \mathcal{E}^2 - \alpha \theta \partial_\tau (\mathcal{E}^2 / 2), \quad (5.24)$$

$$\mathcal{E}(\xi, 0) = \mathcal{H}(\xi, 0) = f(\xi), \quad \theta(\xi, 0) = \theta_0. \quad (5.25)$$

Здесь введены два безразмерных постоянных коэффициента:

$$\alpha = \gamma \varepsilon_0 \chi_0 (E_0)^2 / (c\rho), \beta = \alpha \sigma \Delta t / (\varepsilon_0 (1 + \chi_0)) = \sigma \Delta t (E_0)^2 \gamma \chi_0 / (c\rho (1 + \chi_0)). \quad (5.26)$$

В случае длинной линии

$$\alpha = \partial_T C \times (U_0)^2 / \zeta, \beta = \alpha g \Delta t / C(T_0). \quad (5.27)$$

Используя метод Хохлова, систему (5.22)-(5.23) можно свести к одному уравнению. Исключая из (5.23) \mathcal{H} , приходим к уравнению $\partial_{\xi\xi} \mathcal{E} - \partial_{\tau\tau} \mathcal{E} = \partial_\tau F$, где $F = [\beta(\theta - \theta_0) - \alpha\beta\theta \mathcal{E}^2] \partial_\tau \mathcal{E} + \beta \mathcal{E} (1 + \alpha \mathcal{E}^2) / \alpha$. Согласно методу Хохлова [170], редуцированное уравнение имеет вид $\partial_\xi \mathcal{E} + \partial_\tau \mathcal{E} = -F/2$. Далее, сделав замену $W = \mathcal{E}^2/2$, приходим к системе:

$$\partial_\xi W + \{1 + \beta(\theta - \theta_0)/2 - \alpha\beta W\theta\} \partial_\tau W = -\beta W (1 + 2\alpha W) / \alpha, \quad (5.28)$$

$$\partial_\tau \theta = 2W - \alpha\theta \partial_\tau W, \quad (5.29)$$

$$W(\xi, 0) = f^2(\xi)/2, \theta(\xi, 0) = \theta_0. \quad (5.30)$$

Для системы (5.28)-(5.29) справедлив некоторый аналог закона сохранения энергии (5.11). Если скомбинировать уравнения (5.28) и (5.29), можно показать справедливость равенства $\partial_\xi W + \partial_\tau \{W[1 + \beta(\theta - \theta_0)/2] + \beta W\theta/2 + \beta\theta/(2\alpha)\} = 0$. Интегрируя это равенство по переменной ξ , получим закон сохранения

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \{W[1 + \beta(\theta - \theta_0)/2] + \beta W\theta/2 + \beta(\theta - \theta_0)/(2\alpha)\} d\xi = \text{const}. \quad (5.31)$$

5.3 Нелинейный эффект роста пиковой мощности импульса

Уравнение (5.28) гораздо проще исходных уравнений Максвелла (5.2), из которых оно выводится. Действительно, данное уравнение представляет собой нелинейное уравнение переноса, что позволяет провести интерпретацию некоторых входящих в него сомножителей. Если записать уравнение в виде $\partial_\xi W + (1/u(W, \theta)) \partial_\tau W = -W\sigma'$, где $u(W, \theta) = [1 + \beta(\theta - \theta_0)/2 - \alpha\beta W\theta]^{-1}$ и $\sigma'(W) = (1 + 2\alpha W)\beta/\alpha$, а затем вернуться обратно к переменным t и z , получим: $\partial_z W + (1/(v_0 u(W, \theta))) \partial_t W = -W\sigma'/l$. Отсюда становится очевидным, что фазовая скорость распространения импульса в нелинейном случае $v(W, \theta) = v_0 u(W, \theta)$. Поэтому $u(W, \theta) = v/v_0$ есть безразмерная фазовая скорость распространения импульса. При этом $\sigma'(W)$ можно интерпретировать как некоторую безразмерную проводимость (поскольку в отсутствие нелинейности $\gamma \rightarrow 0$, при этом $\sigma' \rightarrow \sigma \Delta t / (\varepsilon_0 (1 + \chi_0)) = \sigma \times \text{const}$). При $\alpha < -1$ в тех точках профиля импульса, для которых выполняется условие $W > 1/|2\alpha|$, проводимость $\sigma'(W)$ принимает отрицательное значение. Это означает, что амплитуда импульса в этих точках должна возрастать с течением времени, иными словами, должен наблюдаться нелинейный эффект роста пиковой мощности видеоимпульса. При $\chi > 0$ отрицательные значения α соответствуют средам с $\gamma < 0$ (см. формулу (5.20)), при этом знак β также будет отрицательным. Из (5.27) следует, что $\alpha \sim (U_0)^2$. Поэтому для фиксированных параметров

длинной линии и материальной среды 2 нелинейный эффект роста пиковой мощности будет наблюдаться только в том случае, когда амплитуда начального видеопульса U_0 превышает некоторое пороговое значение $U_0^* = \zeta^{1/2}/(|\partial_T C(T)|)^{1/2} = \zeta^{1/2}/(\varepsilon_0 \chi_0 \psi |\gamma|)^{1/2}$.

Для расчетов характерного значения U_0^* проведем некоторую конкретизацию. Рассмотрим кабель, состоящий из центральной жилы, которую окружает слой изолятора, а затем слой металла (экранирующий слой), см. рис 5.2а. Погонную теплоемкость диэлектрика ζ рассчитаем по формуле $\zeta = c\rho\pi(R^2 - r^2)$, где c – удельная (на единицу массы) теплоемкость диэлектрика, ρ – плотность диэлектрика.

Для расчета погонной емкости и индуктивности воспользуемся формулами статики [171-172]: $C(T) = \varepsilon_0 \varepsilon(T) \psi$, $\psi = 2\pi/\ln(R/r)$, $L = \mu_0 \ln(R/r)/(2\pi)$. В таком случае $\partial_T C(T) = \tau_\varepsilon \varepsilon_0 \varepsilon(T_0) \psi$, где $\tau_\varepsilon = \partial_T \varepsilon(T)/\varepsilon(T_0)$ – так называемый температурный коэффициент диэлектрической проницаемости. Фазовую скорость распространения импульса в длинной линии в отсутствие нелинейности можно рассчитать по формуле $v_0 = (LC)^{-1/2}$.

Для нахождения погонной проводимости g проинтегрируем уравнение $\text{div}(\varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{E}) = \rho$ по цилиндрическому объему коаксиального кабеля. Используя теорему Остроградского-Гаусса, получим: $|\mathbf{E}(R)| = \rho_l / (2\pi R \varepsilon_0 \varepsilon)$, где $\rho_l = CU$ – линейная плотность заряда центральной жилы, поэтому $|\mathbf{E}(R)| = U(R)/R \ln(R/r)$. Максимальная напряженность электрического поля достигается на поверхности центральной металлической жилы и составляет $E_{\max} = U(R)/r \ln(R/r)$. Погонный ток утечки I_g можно представить в виде $I_g = gU = 2\pi R j = 2\pi R E \sigma$. Подставляя в последнюю формулу $|\mathbf{E}(R)|$, получим $g = 2\pi \sigma / \ln(R/r) = \psi \sigma$.

С учетом проведенных выше выкладок формулу для U_0^* можно записать в виде

$$U_0^* = \{c\rho(R^2 - r^2) \ln(R/r)\}^{1/2} / (2\varepsilon_0 \varepsilon |\tau_\varepsilon|)^{1/2}. \quad (5.32)$$

Учитывая, что волновое сопротивление линии можно оценить по формуле $Z = (L/C)^{1/2} = (\mu_0/\varepsilon_0)^{1/2} \psi^{-1} \varepsilon^{-1/2}$, для пороговой пиковой мощности начального импульса P_0^* справедлива оценка:

$$P_0^* = (U_0^*)^2 / Z = \psi \varepsilon^{1/2} (U_0^*)^2 / Z_0, \quad (5.33)$$

где $Z_0 = 376.7$ Ом – волновое сопротивление вакуума.

Отметим, что в реальности существуют такие материальные среды, для которых $\gamma < 0$ (что соответствует $\tau_\varepsilon < 0$), а ε слабо зависит от частоты в достаточно широком диапазоне длин волн, включающем микроволновый. Из формулы (5.32) видно, что, чем больше произведение $\varepsilon |\tau_\varepsilon| \equiv |\partial_T \varepsilon|$, тем меньше величина U_0^* . Поэтому для уменьшения пороговой мощности P_0^* , следует выбирать материальные среды, диэлектрическая проницаемость которых сильно зависит от температуры среды. Мы провели обзор статей и ниже в таблице 5. 1 представляем значения P_0^* , U_0^* , c , ρ , ε , τ_ε и $\varepsilon |\tau_\varepsilon|$, а также диапазон температур ΔT , при которых проводились измерения, для некоторых из подобных сред.

При выполнении расчетов мы считали, что $r = 0.92$ мм, а $R = 2.93$ мм. Такие значения соответствуют техническим характеристикам коммерческих коаксиальных СВЧ кабелей (см. лист технических характеристик «DATA SHEET Coaxial Cable: MULTIFLEX_141»).

Отметим, что измерения τ_ε , как правило, проводятся резонансным методом. Интерферометр заполняется исследуемой диэлектрической средой и при разных температурах измеряется резонансная частота f . При выполнении условия резонанса $\lambda/2$ справедлива формула $f = \{2h(T)[\mu_0\varepsilon_0\varepsilon(T)]^{1/2}\}^{-1}$, где $h(T) = \lambda/2$ – расстояние между зеркалами интерферометра. Дифференцируя эту формулу по T несложно получить равенство $\tau_f = -\alpha_l - \tau_\varepsilon/2$, где $\alpha_l = (\partial_T h)/h$ – коэффициент линейного теплового расширения, а $\tau_f = (\partial_T f)/f$ – температурный коэффициент резонансной частоты. В статьях чаще приводится коэффициент τ_f . При выполнении расчетов мы предполагали, что $\alpha_l \ll \tau_\varepsilon$, поэтому $\tau_f \approx -\tau_\varepsilon/2$.

Как видно из таблицы 5.1, значение U_0^* по порядку величины составляет МВ, значение P_0^* – ТВт, а значение E_{\max} – десятки МВ/см. Отметим, что современные генераторы видеоимпульсов наносекундной длительности позволяют достигать подобных пиковых мощностей. В таблице 5.2 приведены ссылки на конкретные установки, указаны достигаемые на этих установках пиковые мощности P_0 , значения тока I_0 и напряжения U_0 , а также характерная продолжительность генерируемых видеоимпульсов Δt .

Также отметим, что значения E_{\max} , приведенные в таблице 5.1 по порядку величины совпадают со статической электрической прочностью твердых диэлектриков $E_{BD} \sim 1...10$ МВ/см [186]. Однако, значение электрической прочности в наносекундном временном диапазоне, как правило, на порядок больше, чем в случае статики. Дело в том, что при наносекундных временах воздействия импульса в диэлектрике не успевают образоваться лавинный пробой, возможен только внутренний пробой, который возникает при характерных напряженностях 10...100 МВ/см [187]. Например, для SrTiO_3 в случае частоты 1 кГц $E_{BD} = 6.5$ МВ/см [188], а для случая импульсов продолжительностью 45 нс $E_{BD} = 305$ МВ/см [189]. Поэтому титанат стронция является идеальным кандидатом для наблюдения рассматриваемых нелинейных эффектов.

Материальная среда	Al (порошок)	SrTiO ₃	ПТФЭ	CaCu ₃ Ti ₄ O ₁₂	TiO ₂
c , [Дж/(г×К)]	0.89	0.54	1.00	0.62	0.69
ρ , [г/см ³]	1.36	5.11	2.20	4.7	3.7
Частоты, [ГГц]	2.45	2.4	7...13	3.4...9.5	300...700
ϵ	18	264	2.1	88	95
τ_ϵ , [$10^{-3} \times K^{-1}$]	-2.13	-2.6	-0.4	-0.85	-1
$\epsilon \tau_\epsilon $, [$10^{-3} \times K^{-1}$]	38	676	0.84	75	95
U_0^* , [МВ]	4.02	1.43	36.4	4.43	3.69
E_{max} , [МВ/см]	37.7	13.4	341.6	41.6	34.6
P_0^* , [ТВТ]	0.99	0.48	27.6	2.65	1.91
ΔT , °С	30...50	25...85	20...150	-60...0	-100...30
Ссылки	[173-174]	[175-176]	[177-179]	[180-182]	[183-185]

Табл. 5.1 Примеры материальных сред, обладающих отрицательным температурным коэффициентом диэлектрической проницаемости в гигагерцовом диапазоне частот.

Название установки	МИГ	Ангара-5-1	Zebra	HPPG	GIT-4	Hawk eye-I	PBFA Z
P_0 , [ТВт]	2.5	2	3	2.5	2.5	0.4	50...60
U_0 , [МВ]	1	1	2	6	2.15	4.1	2.5...4
I_0 , [МА]	2.5	2	1.5	2.5	1.2	0.1	16...20
Δt , нс	100...150	100...150	100	20...200	100	50	100
Ссылки	[190]	[191]	[192]	[193]	[194]	[195]	[196]

Название установки	Z stack-MITL system	KALIF-HELIA	Gamma-1	SABRE	Saturn	Hermes-III	Z machine
P_0 , [ТВт]	55	1.5	1.5	1.8	25	16	100
U_0 , [МВ]	3	5.5	2	6	2.5	20	5
I_0 , [МА]	20	0.4	0.75	0.3	10	0.8	20...25
Δt , нс	100	50	200	50	35...50	25...50	200
Ссылки	[197]	[198]	[199-200]	[201]	[202]	[203]	[204]

Табл. 5.2 Примеры высоковольтных генераторов тераваттной мощности.

5.4 Аналитическое решение в приближении постоянной фазовой скорости

Как было сказано выше, уравнение (5.28) является уравнением переноса, поэтому $u=v(T)/v_0 = \{1+\beta(\theta-\theta_0)/2-\alpha\beta W\theta\}^{-1}$ есть безразмерная фазовая скорость распространения импульса. Из-за зависимости $u=u(W,\theta)$ в общем случае получить аналитическое решение уравнения (5.28) не представляется возможным. Поэтому в данном параграфе мы ограничимся приближением $u=1$, $\theta_0=T_0/\Delta T \ll 1$, в котором можно получить аналитическое решение.

Покажем, что приближение $u=1$ эквивалентно условию $0.5\tau_{\max}|\beta|(|\alpha|+1)\exp(|\alpha|/2) \ll 1$, где τ_{\max} – время (в относительных единицах), в течение которого распространяется видеоимпульс. Отметим для начала, что решение уравнения (5.29) можно получить в аналитическом виде:

$$\theta(\xi, \tau) = \theta_0 \exp\{-\alpha[W(\xi, \tau) - W(\xi, 0)]\} + 2 \exp\{-\alpha W(\xi, \tau)\} \int_0^\tau W(\xi, \tau') \exp\{\alpha W(\xi, \tau')\} d\tau'. \quad (5.34)$$

Из (5.18), (5.30) следует, что $\max|W(\xi, 0)|=1/2$. Если считать, что $\max|W(\xi, \tau)| \approx \max|W(\xi, 0)|$, то $|2\exp\{-\alpha W(\xi, \tau)\} \int_0^\tau W(\xi, \tau') \exp\{\alpha W(\xi, \tau')\} d\tau'| \leq \exp(|\alpha|/2)$ и $|\exp\{-\alpha[W(\xi, \tau) - W(\xi, 0)]\}| \leq \exp(|\alpha|/2)$. В таком случае, используя формулу (5.34), можно выполнить следующие оценки $|\theta - \theta_0| \leq \theta_0(\exp(|\alpha|/2) + 1) + \exp(|\alpha|/2)$, $|\theta| \leq \{\theta_0 + 1\}\exp(|\alpha|/2)$. Пусть $\beta \ll 1$, тогда $u \approx 1 - \beta(\theta - \theta_0)/2 + \alpha\beta W\theta$, следовательно, $|u - 1| \leq 0.5|\beta| \times |\theta - \theta_0| + |\alpha\beta| \times \max|W| \times \max|\theta| \leq 0.5|\beta|\{\theta_0[|\alpha|+1]\exp(|\alpha|/2) + 1\} + (|\alpha|+1)\exp(|\alpha|/2)$. При $\theta_0 \ll 1$ в таком случае $|u-1| \leq 0.5|\beta|(|\alpha|+1)\exp(|\alpha|/2)$. Зависимость $u = u(W, \theta)$ приводит к тому, что разные точки профиля импульса движутся с разными скоростями. Однако, если относительное смещение этих точек $\Delta\xi$ за время наблюдения τ_{\max} мало по сравнению с линейными размерами самого импульса (линейные размеры импульса в относительных единицах ξ равны 1), то этим смещением, а значит и зависимостью $u = u(W, \theta)$ можно пренебречь. Поскольку $|u-1|$ и есть относительная скорость движения точек профиля импульса, следовательно, их относительное смещение $\Delta\xi = \int |u(\tau)-1| d\tau < \tau_{\max} \max|u-1| < 0.5\tau_{\max}|\beta|(|\alpha|+1)\exp(|\alpha|/2)$. Отсюда приходим к условию $0.5\tau_{\max}|\beta|(|\alpha|+1)\exp(|\alpha|/2) \ll 1$.

Итак, рассматриваемое приближение можно сформулировать в виде двух неравенств: $0.5\tau_{\max}|\beta|(|\alpha|+1)\exp(|\alpha|/2) \ll 1$ и $\theta_0 \ll 1$. В этом приближении система (5.28)-(5.29) сводится всего к одному уравнению для W :

$$\partial_\xi W + \partial_\tau W = -(\beta/\alpha)W(1+2\alpha W). \quad (5.35)$$

Сделаем замену переменной $\zeta = \xi - \tau$ и перейдем к движущейся со скоростью $u = 1$ системе координат, получим:

$$\partial_\tau W(\zeta, \tau) = -(\beta/\alpha)W(1+2\alpha W). \quad (5.36)$$

Уравнение (5.36) можно рассматривать как дифференциальное (относительно переменной τ) уравнение. Проинтегрировав его, получим:

$$W(\zeta, \tau) = \frac{W(\zeta, 0) \exp(-\beta\tau/\alpha)}{1 + 2\alpha W(\zeta, 0) \{1 - \exp(-\beta\tau/\alpha)\}}. \quad (5.37)$$

Заметим, что в отсутствие нелинейности $\alpha, \beta \rightarrow 0$, но $\alpha/\beta \rightarrow \text{const} = \sigma\Delta t / (\epsilon_0(1+\chi_0))$, а для длинной линии $\alpha/\beta \rightarrow g\Delta t / C(T_0)$. При этом уравнение (5.36) становится линейным и его решение принимает вид затухающей бегущей волны. Для линейного случая мы введем обозначение W' :

$$W'(\zeta, \tau) = W(\zeta, 0) \exp(-\tau\beta/\alpha). \quad (5.38)$$

Отношение $W'/W = 1 + 2\alpha W(\zeta, 0) \{1 - \exp(-\tau\beta/\alpha)\}$ описывает искажения формы профиля импульса, вызванные непосредственно нелинейными эффектами. Будем считать, $\chi_0 > 0$, что соответствует $\beta/\alpha > 0$. Рассмотрим три случая.

Во-первых, случай $\alpha > 0$. В таком случае $W'(\zeta, \tau)/W(\zeta, \tau) > 1$ при $\tau > 0$. Следовательно, при $\alpha > 0$ нелинейные эффекты приводят к увеличению затухания импульса.

Во-вторых, случай $-1 < \alpha < 0$. В таком случае, используя метод фазовой плоскости для (5.36), учитывая, что $\max W(\zeta, 0) = 0.5$, можно показать, что $\partial_\tau W(\zeta, \tau) < 0$ при любых τ и ζ . Значит, $W(\zeta, \tau)$ монотонно уменьшается с ростом τ , однако теперь $0 < W'(\zeta, \tau)/W(\zeta, \tau) < 1$. Это означает, что уменьшение амплитуды в нелинейном случае происходит медленнее, чем в линейном.

В-третьих, случай $\alpha < -1$. Аналогично, используя метод фазовой плоскости, можно показать, что $\partial_\tau W(\zeta, \tau) < 0$ для точек ζ , удовлетворяющих неравенству $1 + 2\alpha W(\zeta, 0) > 0$, и $\partial_\tau W(\zeta, \tau) > 0$ для точек ζ , удовлетворяющих неравенству $1 + 2\alpha W(\zeta, 0) < 0$. При этом в любом случае $0 < W'/W < 1$. Таким образом, в области, где $1 + 2\alpha W(\zeta, 0) > 0$, нелинейные эффекты приводят к уменьшению затухания. В области, где $1 + 2\alpha W(\zeta, 0) < 0$, происходит рост $W(\zeta, \tau)$ с течением времени. Причем, как следует из (5.37), $W(\zeta, \tau) \rightarrow \infty$ при $\tau \rightarrow (\alpha/\beta) \ln\{2\alpha W(\zeta, 0) / [1 + 2\alpha W(\zeta, 0)]\}$. В действительности, как будет показано далее, рост W будет ограничиваться нелинейными эффектами, связанными с формированием ударной волны из-за зависимости $u = u(W, \theta)$.

5.5 Нелинейный процесс формирования ударной электромагнитной ударной волны в приближении $\theta_0 \gg 1$, решение методом характеристик

Как уже было отмечено, зависимость безразмерной фазовой скорости распространения импульса u от W и θ приводит к тому, что разные точки профиля

видеоимпульса движутся с разными скоростями, что приводит к постепенному искажению первоначальной формы профиля импульса.

Этот нелинейный эффект удобно исследовать в приближении $\theta_0 \gg 1$, поскольку в таком случае вообще $u = u(W, \xi)$. Условие $\theta_0 \gg 1$ означает, что после прохождения импульса изменение температуры нелинейной среды ΔT мало по сравнению с ее начальным значением T_0 (по шкале Кельвина). В данном приближении систему (5.28)-(5.30) можно решить классическим методом характеристик.

Подставкой (5.34) в (5.28), система (5.28)-(5.29) сведется к одному уравнению, которое, однако, будет интегро-дифференциальным, из-за чего метод характеристик к нему не может быть применен. Но при условии $\theta_0 \gg 1$ интегральным слагаемым в (5.34) можно пренебречь. Действительно, если считать, что амплитуда первоначально импульса U_0 вследствие нелинейных эффектов увеличивается незначительно (при $\theta_0 \gg 1$ это действительно так, что будет видно далее и из численных расчетов, выполненных по схеме метода конечных разностей), то $\max W(\xi, \tau) \approx \max W(\xi, 0) = 1/2$ (см. начальные условия (5.18), (5.30)). Также предположим, что абсолютное значение α по порядку своей величины не превышает нескольких единиц, тогда $\exp(\alpha W) \sim 1$. Учитывая, что длительность импульса в безразмерных единицах τ равна единице, можно показать, что для любого знака α при $\theta_0 \gg 1$

$$\max \left\{ 2 \int_0^{\tau} W(\xi, \tau') e^{\alpha W(\xi, \tau')} d\tau' \right\} \ll \min \left\{ \theta_0 e^{\alpha W(\xi, 0)} \right\}.$$

Таким образом, при $\theta_0 \gg 1$ выражение (5.34) упрощается: $\theta(\xi, \tau) = \theta_0 \exp\{-\alpha(W(\xi, \tau) - W(\xi, 0))\}$. Тогда относительная фазовая скорость распространения импульса рассчитывается по формуле:

$$u(W, \xi) = \{(1 - \beta\theta_0/2) + \beta\theta_0 e^{-\alpha\{W(\xi, \tau) - W(\xi, 0)\}}(1 - 2\alpha W/2)\}^{-1}, \quad (5.39)$$

тогда уравнение (5.28) принимает вид:

$$\partial_{\xi} W + (1/u(W, \xi)) \partial_{\tau} W = \beta W (1 + 2\alpha W)/\alpha. \quad (5.40)$$

Уравнение (5.40) уже может быть решено методом характеристик, согласно которому, движение точек профиля импульса описывается в пространстве (ξ, W) следующей системой обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$d\xi(\tau)/d\tau = u(W, \xi), \quad (5.41)$$

$$dW(\tau)/d\tau = -u(W, \xi) \times \beta W (1 + 2\alpha W)/\alpha. \quad (5.42)$$

Систему (5.41)-(5.42) мы решаем численно при помощи метода Рунге-Кутты 4-ого порядка.

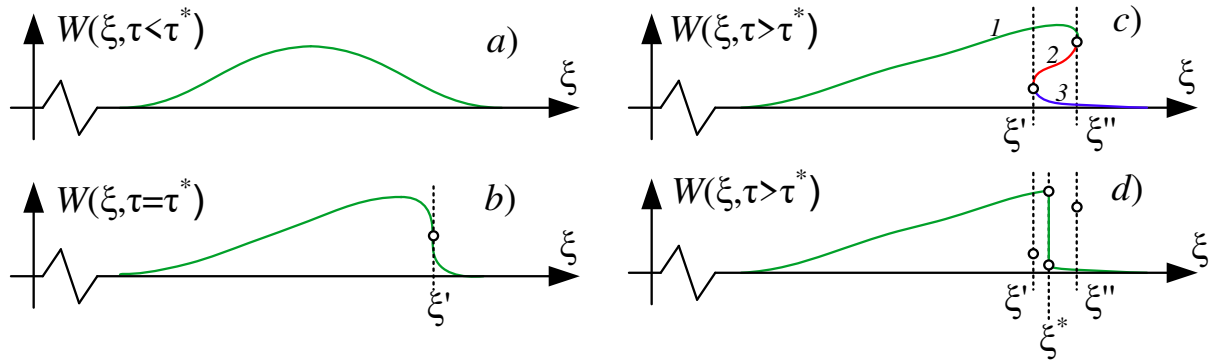


Рис. 5.3 Схематическое изображение явления опрокидывания волнового фронта и образование ударной электромагнитной волны при $\partial_{Wu} > 0$.

Проведем анализ зависимости $u(W, \xi)$. Функция $W(\xi, 0)$ отлична от нуля только при $|\xi| < 1/2$. Уже при времени $\tau=1$, импульс пройдет расстояние равное собственной длине, поэтому в выражении (5.39) при $\tau > 1$ можно считать, что $W(\xi, 0) = 0$. Тогда $u = u(W)$ и, дифференцируя выражение (5.39) по W , получим $\partial_{Wu}(W) = 0.5\theta_0\alpha\beta u^2 \{3 - 2\alpha W\} \exp(-\alpha W)$. Так как $\alpha \times \beta > 0$ (см. выражения (5.25)-(5.26)), то из последней формулы следует, что при $\alpha < 3$ всегда $\partial_{Wu} > 0$. При $\alpha > 3$ одновременно (т.е. при фиксированном τ) могут существовать области на прямой ξ , для которых $\partial_{Wu} > 0$ и $\partial_{Wu} < 0$. В данной работе мы ограничимся случаем $\alpha < 3$, $\partial_{Wu} > 0$. При ограничении $\alpha < 3$ точки профиля импульса, в которых значение W больше, будут двигаться с большими скоростями. Например, точки, находящиеся вблизи максимума импульса, будут двигаться быстрее, чем точки, расположенные у его основания. Этот процесс в некоторый момент времени τ^* приведет к явлению, известному как, опрокидывание фронта волны (см. рис. 5.3a-d). При $\tau \leq \tau^*$, функция $W(\xi, \tau)$ является однозначной функцией аргумента ξ (рис. 5.3a-b), однако при $\tau = \tau^*$ в некоторой точке ξ' производная $\partial_{\xi} W(\xi, \tau^*)$ стремится к бесконечности (рис. 5.3b). При $\tau > \tau^*$ существуют уже две точки ξ' и ξ'' , в которых производная $\partial_{\xi} W(\xi, \tau)$ стремится к бесконечности. При этом $W(\xi, \tau)$ перестает быть однозначной функцией аргумента ξ и на отрезке $[\xi', \xi'']$ обладает тремя ветвями 1, 2, 3 (см. рис. 5.3c). Для построения однозначного решения в таком случае на отрезке $[\xi', \xi'']$ проводится вертикальная граница, соединяющая 1 и 3 ветви (см. рис. 5.3d). Для определения координаты границы $\xi^* = \xi^*(\tau)$ мы используем закон сохранения энергии (5.31), который в дивергентной форме можно записать в виде

$$\partial_{\xi} W + \partial_{\tau} D(W, \theta) = 0, \quad (5.43)$$

$$D(W, \theta) = W[1 + \beta(\theta - \theta_0)/2] + \beta W \theta / 2 + \beta \theta / (2\alpha). \quad (5.44)$$

Интегрируя (5.43) по переменной ξ от $-\infty$ до $+\infty$, получим закон сохранения:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} D d\xi = \text{const} . \quad (5.45)$$

В случае разрывного решения при фиксированном τ мы соединяем 1 и 3 ветви $W(\xi, \tau)$ таким образом, чтобы интеграл (5.45), сохранял свое первоначальное значение, рассчитанное при $\tau = 0$.

5.6 Метод конечных разностей, основанный на схеме Годунова

Для решения системы (5.28)-(5.29) можно использовать также метод конечных разностей. Это позволит рассмотреть случаи вне приближения $\theta_0 \gg 1$. Из-за наличия разрывных решений, однако, необходимо применение специальных численных схем. Мы использовали схему, описанную в работах [205-206]. Данная схема основана на интегро-интерполяционном методе построения разностных уравнений, который применяется непосредственно к закону сохранения энергии в дивергентной форме (то есть к уравнению (5.43)). По этой причине схема является консервативной.

На рис. 5.4 изображена сетка, которая используется для построения разностных уравнений. Шаги дискретизации по пространственной и временной переменной обозначаются символами Δ_ξ и Δ_τ соответственно. Индекс n используется для обозначения номера узла по пространственной переменной, а индекс m – по временной. При этом n может принимать полуцелые значения, что соответствует промежуточным узлам на оси $O\xi$.

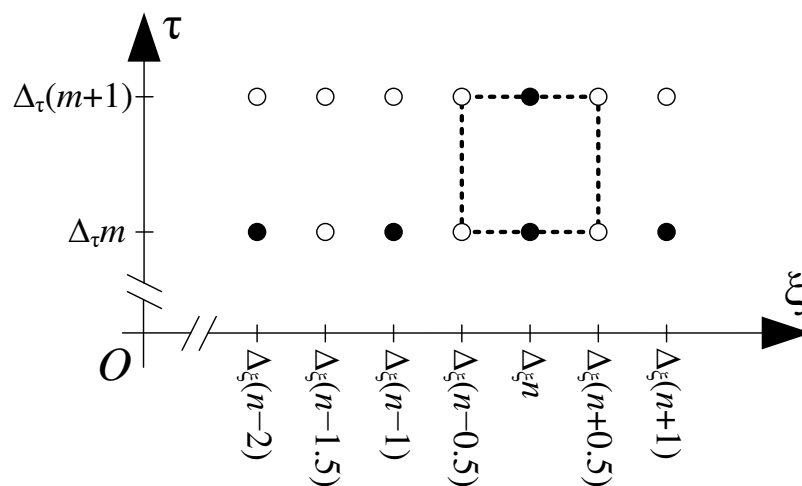


Рис. 5.4 Участок сетки, используемой для вывода разностного уравнения. Пунктиром выделена элементарная ячейка. Полученная схема является пятиточечной. Закрашенные круги представляют собой шаблон схемы.

Проинтегрируем уравнение (5.43) по площади элементарной ячейки, изображенной пунктирной линией на рис. 5.4, получим точное равенство

$$\int_{m\Delta_\tau}^{(m+1)\Delta_\tau} \{W(\Delta_\xi(n+1/2), \tau) - W(\Delta_\xi(n-1/2), \tau)\} d\tau + \int_{(n-1/2)\Delta_\xi}^{(n+1/2)\Delta_\xi} \{D(\xi, (m+1)\Delta_\tau) - D(\xi, m\Delta_\tau)\} d\xi = 0. \quad (5.46)$$

Первый интеграл в равенстве (5.46) приближенно вычислим методом левых прямоугольников, а второй интеграл – методом средних прямоугольников. После алгебраических преобразований получим

$$D_n^{m+1} = D_n^m - \frac{\Delta_\tau}{\Delta_\xi} \{W_{n+1/2}^m - W_{n-1/2}^m\}. \quad (5.47)$$

Здесь $D_n^m = D(\Delta_\xi n, \Delta_\tau m)$, $W_n^m = W(\Delta_\xi n, \Delta_\tau m)$. Согласно [205], для вычисления функции W в промежуточных узлах необходимо использовать линейную аппроксимацию:

$$W_{n+1/2}^m = W_n^m + 0.5k_n^m \Delta_\xi, \quad W_{n-1/2}^m = W_{n-1}^m + 0.5k_{n-1}^m \Delta_\xi, \quad (5.48)$$

здесь k_n^m – тангенс угла наклона. По своей сути k_n^m является частной производной $\partial_\xi W(\xi, \tau)$ взятой в точке $\xi = n\Delta_\xi$ в момент времени $\tau = m\Delta_\tau$. Поэтому k_n^m и k_{n-1}^m можно определить двумя способами: через левое предельное значение $k_n^m = (W_n^m - W_{n-1}^m) / \Delta_\xi$, $k_{n-1}^m = (W_{n-1}^m - W_{n-2}^m) / \Delta_\xi$ и через правое $k_n^m = (W_{n+1}^m - W_n^m) / \Delta_\xi$, $k_{n-1}^m = (W_n^m - W_{n-1}^m) / \Delta_\xi$. Для краткости далее введем обозначение $\Delta_{n-1}^m = W_n^m - W_{n-1}^m$. Согласно принципу наименьшего значения производной [205-206], для расчета k_n^m и k_{n-1}^m всегда следует выбирать меньшее по модулю предельное значение, таким образом:

$$k_n^m \Delta_\xi = \begin{cases} \Delta_n^m, & |\Delta_n^m| \leq |\Delta_{n-1}^m| \\ \Delta_{n-1}^m, & |\Delta_{n-1}^m| < |\Delta_n^m| \end{cases}, \quad k_{n-1}^m \Delta_\xi = \begin{cases} \Delta_{n-1}^m, & |\Delta_{n-1}^m| \leq |\Delta_{n-2}^m| \\ \Delta_{n-2}^m, & |\Delta_{n-2}^m| < |\Delta_{n-1}^m| \end{cases}. \quad (5.49)$$

Используя соотношения (5.47)-(5.49), получим схему с переменными весами, значения которых определяются из следующих четырех вариантов:

$$D_n^{m+1} - D_n^m = -\frac{\Delta_\tau}{\Delta_\xi} \Delta D_n^m, \quad \Delta D_n^m = \frac{1}{2} \times \begin{cases} \Delta_{n-1}^m + \Delta_n^m, & |\Delta_{n-2}^m| \geq |\Delta_{n-1}^m| \geq |\Delta_n^m| \\ 2\Delta_{n-1}^m + \Delta_n^m - \Delta_{n-2}^m, & |\Delta_{n-2}^m| < |\Delta_{n-1}^m| \geq |\Delta_n^m| \\ 2\Delta_{n-1}^m, & |\Delta_{n-2}^m| \geq |\Delta_{n-1}^m| < |\Delta_n^m| \\ 3\Delta_{n-1}^m - \Delta_{n-2}^m, & |\Delta_{n-2}^m| < |\Delta_{n-1}^m| < |\Delta_n^m| \end{cases}. \quad (5.50)$$

Согласно формуле (5.44),

$$D_n^m = W_n^m [1 + \beta(\theta_n^m - \theta_0) / 2] + \beta W_n^m \theta_n^m / 2 + \beta \theta_n^m / (2\alpha), \\ D_n^{m+1} = W_n^{m+1} [1 + \beta(\theta_n^{m+1} - \theta_0) / 2] + \beta W_n^{m+1} \theta_n^{m+1} / 2 + \beta \theta_n^{m+1} / (2\alpha),$$

поэтому левую часть первое равенство в (5.50) можно записать в виде

$$W_n^{m+1}[1 + \beta(\theta_n^{m+1} - \theta_0)/2] - W_n^m[1 + \beta(\theta_n^m - \theta_0)/2] + (\beta/2)(W_n^{m+1}\theta_n^{m+1} - W_n^m\theta_n^m) + \beta(\theta_n^{m+1} - \theta_n^m)/(2\alpha) = -(\Delta_\tau / \Delta_\xi)\Delta D_n^m. \quad (5.51)$$

В выражении (5.51) величины W_n^{m+1} и θ_n^{m+1} являются неизвестными. Для их определения необходимо еще одно разностное уравнение, которое мы получим, записывая явную схему для уравнения (5.29):

$$\theta_n^{m+1} - \theta_n^m = 2W_n^m\Delta_\tau - \alpha\theta_n^m(W_n^{m+1} - W_n^m). \quad (5.52)$$

Исключая из системы (5.51)-(5.52) неизвестную θ_n^{m+1} , приходим к квадратному относительно W_n^{m+1} уравнению, решение которого записывается в виде:

$$W_n^{m+1} = \frac{-B_n^m \pm \sqrt{(B_n^m)^2 - 4A_n^m C_n^m}}{2A_n^m}, \quad (5.53)$$

$$A_n^m = -\alpha\beta\theta_n^m, \quad B_n^m = 1 + \frac{\beta}{2}(\theta_n^m - \theta_0) + 2\beta W_n^m\Delta_\tau + \alpha\beta\theta_n^m W_n^m,$$

$$C_n^m = \frac{\beta}{2\alpha} \{ \theta_n^m + 2W_n^m\Delta_\tau + \alpha\theta_n^m W_n^m \} - D_n^m + (\Delta_\tau / \Delta_\xi)\Delta D_n^m.$$

В выражении (5.53) следует выбирать знак «+». По найденному значению W_n^{m+1} из (5.52) находится значение θ_n^{m+1} .

Можно строго показать, что для уравнения переноса $\partial_\xi W + \partial_\tau W = 0$ (т.е. для случая, когда $D \equiv W$) при условии $\Delta_\tau/\Delta_\xi \leq 0.5$ схема устойчива и обладает свойством сохранения монотонности функции W [205].

В случае же, когда функция D определяется формулой (5.44), возможно качественное исследование устойчивости при помощи метода замороженных коэффициентов. После взятия вариаций от выражений (5.51)-(5.52), коэффициенты «замораживаются» и полагается $W_{n+1}^m = W_n^m = W_{n-1}^m = W_{n-2}^m$. Однако это равенство заведомо неверно в области, где локализована ударная волна. Поэтому вместо условий устойчивости мы сформулируем условия ограниченности решения при сколь угодно малых Δ_τ и Δ_ξ . Если ввести обозначения

$$u_n^m = u(W_n^m, \theta_n^m), \quad \sigma_n^m = \sigma'(W_n^m), \quad (5.54)$$

то эти условия можно сформулировать в виде трех неравенств:

$$\max_{n,m} u_n^m < \infty, \quad \max_{n,m} \sigma_n^m < \infty, \quad \Delta_\tau/\Delta_\xi \leq 1 / (2 \max_{n,m} u_n^m). \quad (5.55)$$

Первые два условия по своей сути представляют физические условия ограниченности фазовой скорости и проводимости. Третье условие является аналогом условия Куранта-

Гильберта. Отметим, что ограниченность численного решения для нелинейных схем является необходимым (но не достаточным) условием его сходимости. Доказательство вышеизложенных условий ограниченности (5.55) приведено в приложении М.

5.7 Результаты моделирования, полученные в приближении $\theta_0 \gg 1$

Сначала рассмотрим приближение $\theta_0 \gg 1$. Исходя из многочисленных результатов моделирований, мы сделали вывод о том, что при $\theta_0 \gg 1$ в случае $\alpha < -1$ возможно получить лишь совсем незначительное (порядка сотых долей процента) увеличение пиковой мощности импульса.

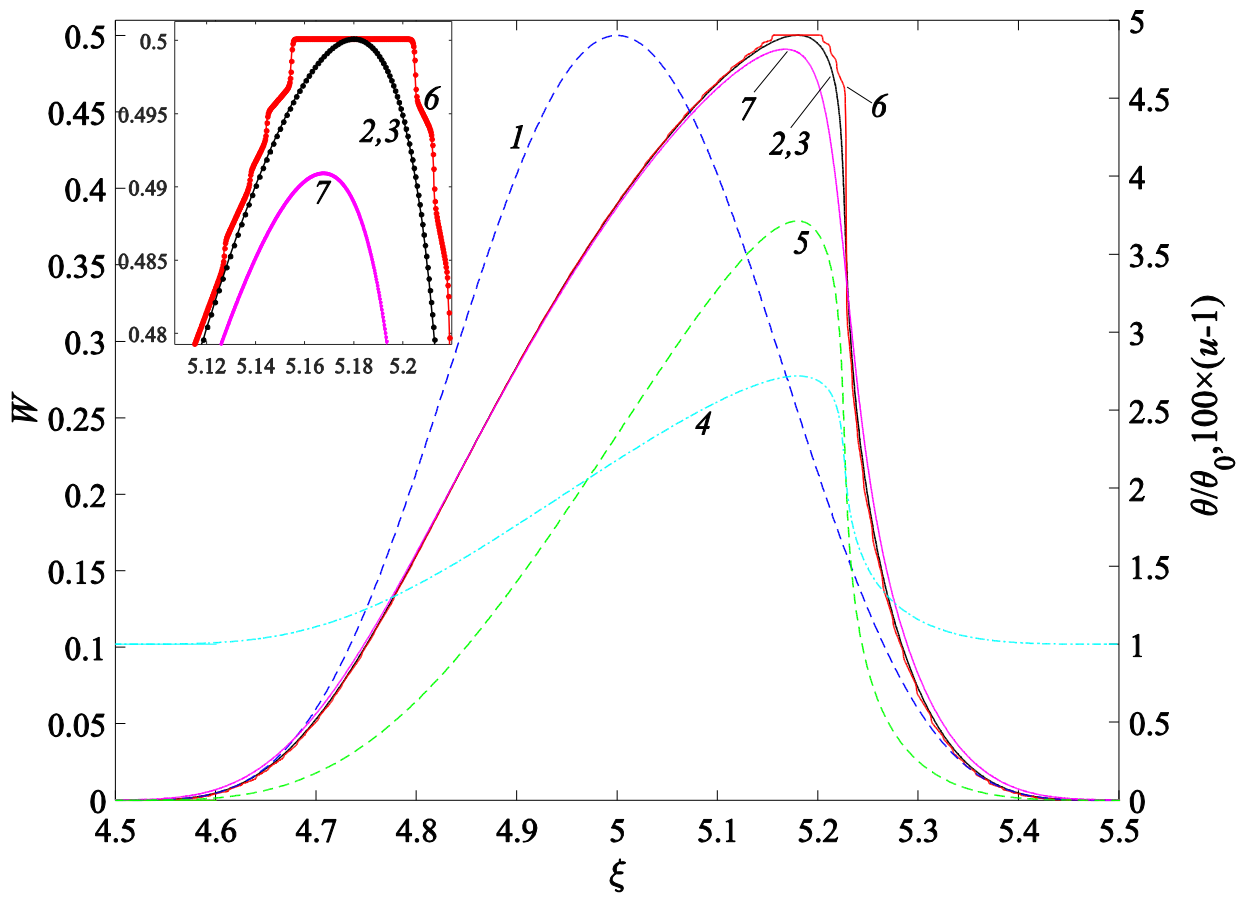
Приведем пример расчета, выполненного для $\alpha = -2$, $\beta = -0.0001$, $\theta_0 = 100$. Сравним результаты, полученные при помощи метода характеристик (который мы примем за «эталонный» метод) и метода конечных разностей. На рисунках 5.5а-с построены графики профилей видеоимпульса, температуры и фазовой скорости в моменты времени $\tau = 5, 7, 20$.

Кривые 1 соответствуют функции $W(\xi - \tau, 0)$ – профилю начального импульса, смещенного по оси ξ на τ единиц. Эти графики иллюстрируют то, каким образом распространялся бы импульс W в отсутствие нелинейности и проводимости (при $\sigma = \alpha = \beta = 0$). Остальные кривые 2-7 соответствуют нелинейному случаю. Кривые 2-5 соответствуют методу характеристик, а кривые 6-7 – методу конечных разностей. Кривые 2 соответствуют многозначному решению $W(\xi, \tau)$. Эти графики приведены для иллюстрации динамики опрокидывания волнового фронта. Кривые 3 соответствуют однозначному решению $W(\xi, \tau)$, выделенному из многозначного при помощи закона сохранения (5.45). На графиках 3 можно наблюдать фронт ударной волны, который формируется в момент времени $\tau = 6.02 \pm 0.01$. По этой причине на рис. 5.5а (который соответствует $\tau = 5$) кривые 2 и 3 совпадают. Кривые 4 соответствуют отношению $\theta(\xi, \tau)/\theta_0$ и иллюстрируют то, во сколько раз абсолютное значение температуры среды T изменилась по сравнению со своим первоначальным значением T_0 . Кривые 5 соответствуют зависимости $100 \times (u(\xi, \tau) - 1)$, которая отражает изменение фазовой скорости в процентах. Кривые 6-7 соответствуют профилю импульса W , рассчитанному по схеме (5.51)-(5.53) при $\Delta_\xi = 2.5 \times 10^{-4}$, $\Delta_\tau = \Delta_\xi/4$. Однако при расчете кривых 6 использовался принцип наименьшего значения производной (использовались формулы (5.50) для ΔD_n^m), а при расчете кривых 7 – нет: полагалось, что $\Delta D_n^m = \Delta_{n-1}^m \equiv W_n^m - W_{n-1}^m$.

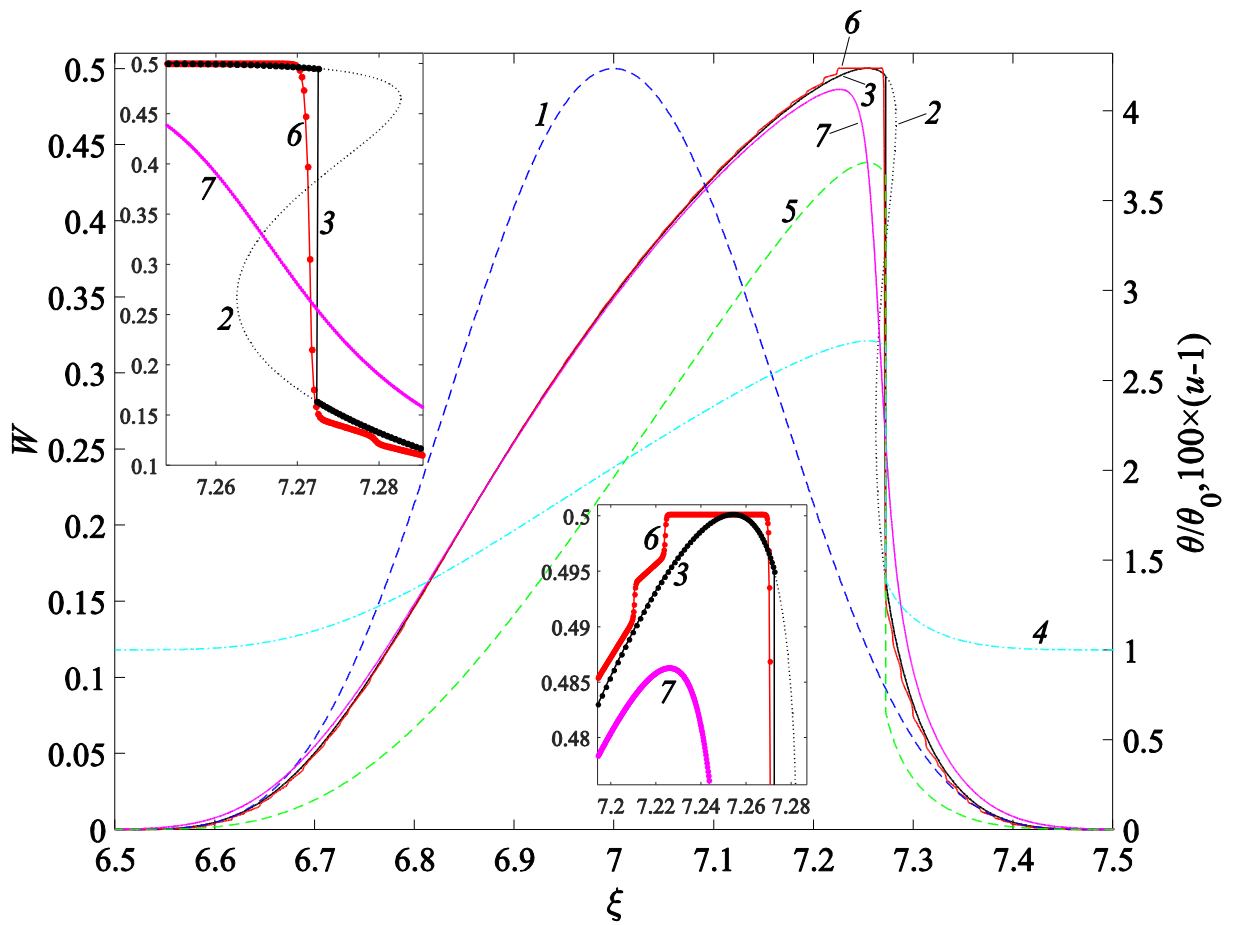
Видно, что применение принципа наименьшего значения производной обладает тем недостатком, что оно приводит к «нефизическому» деформированию профиля импульса W в области локализации максимума W с образованием плато. Этот эффект показан на увеличительной выноске рис. 5.5a, а также на правой увеличительной выноске рис. 5.5b, где в более крупном масштабе изображены кривые 2, 3, 6, 7 в области максимума W . Несмотря на это, само значение W в максимуме в случае применения принципа минимального значения производной рассчитывается более точно (см. выноску на рис. 5.5a и выноски, изображенные справа на рис. 5.5b-c). Также применение принципа минимального значения производной позволяет более корректно описывать фронт ударной волны, что можно видеть на выносках, изображенных слева на рис. 5.5b-c.

Из кривых 4 на рис.5.5 видно, что температура нелинейной среды увеличивается более чем в 2.5 раза. При этом из кривых 5 на рис. 5.5 видно, что относительная фазовая скорость распространения импульса увеличивается не более чем на 4%. Поскольку в приближении $\theta_0 \gg 1$, $\theta(\xi, \tau) = \theta_0 \exp\{-\alpha(W(\xi, \tau) - W(\xi, 0))\}$, а $\max W(\xi, \tau) < 1/2$, то максимальное значение температуры при $\alpha < 0$ можно оценить как $\theta_{\max} \approx \theta_0 \exp\{0.5|\alpha|\}$. Для $\alpha = -2$ получим $\theta_{\max} \approx 2.72\theta_0$. Таким образом, первоначальная температура среды T_0 увеличивается более чем в 2 раза. По этой причине приближение $\theta_0 \gg 1$ имеет смысл использовать либо при очень низких температурах (тогда увеличение абсолютной температуры в несколько раз не приводит к фазовым переходам, а зависимость (5.20) остается линейной), либо при малом значении α (тогда $\theta_{\max} \approx \theta_0 \exp\{0.5|\alpha|\} \approx \theta_0(1 + 0.5|\alpha|)$, а значит изменение температуры среды $\Delta T \approx 0.5|\alpha|T_0 \ll T_0$).

Для более детального изучения изменения формы импульса с течением времени на рис. 5.6 построены графики зависимостей $W_{\max}(\tau)/W_{\max}(0)$ (кривые 1, 4, 7); $S(\tau)/S(0)$ (кривые 2, 5, 8), $h(\tau)/h(0)$ (кривые 3, 6, 9). Здесь $S(\tau) = \int W(\xi, \tau) d\xi$ – площадь под графиком функции W (эта площадь пропорциональна энергии электрического поля, содержащейся в видеоимпульсе); $W_{\max}(\tau)$ – максимальное значение функции $W(\xi, \tau)$ при фиксированном τ ; $h(\tau)$ – ширина импульса $W(\xi, \tau = \text{fix})$ на половине высоты, соответствующей $W_{\max}(\tau)/2$. Отметим, что для начального импульса $S(0) = 3/16 = 0.1875$, $W_{\max}(0) = 0.5$, $h(0) = (\arccos(2^{1/2} - 1))/\pi \approx 0.364$. Для расчетов $W_{\max}(\tau)$, $S(\tau)$, $h(\tau)$ использовались результаты, полученные при помощи численной схемы (5.51)-(5.52) с применением принципа минимального значения производной (штриховые кривые 1-3) и без применения данного принципа (штрихпунктирные кривые 4-6), а также результаты, полученные из метода характеристик (сплошные кривые 7-9).



a)



b)

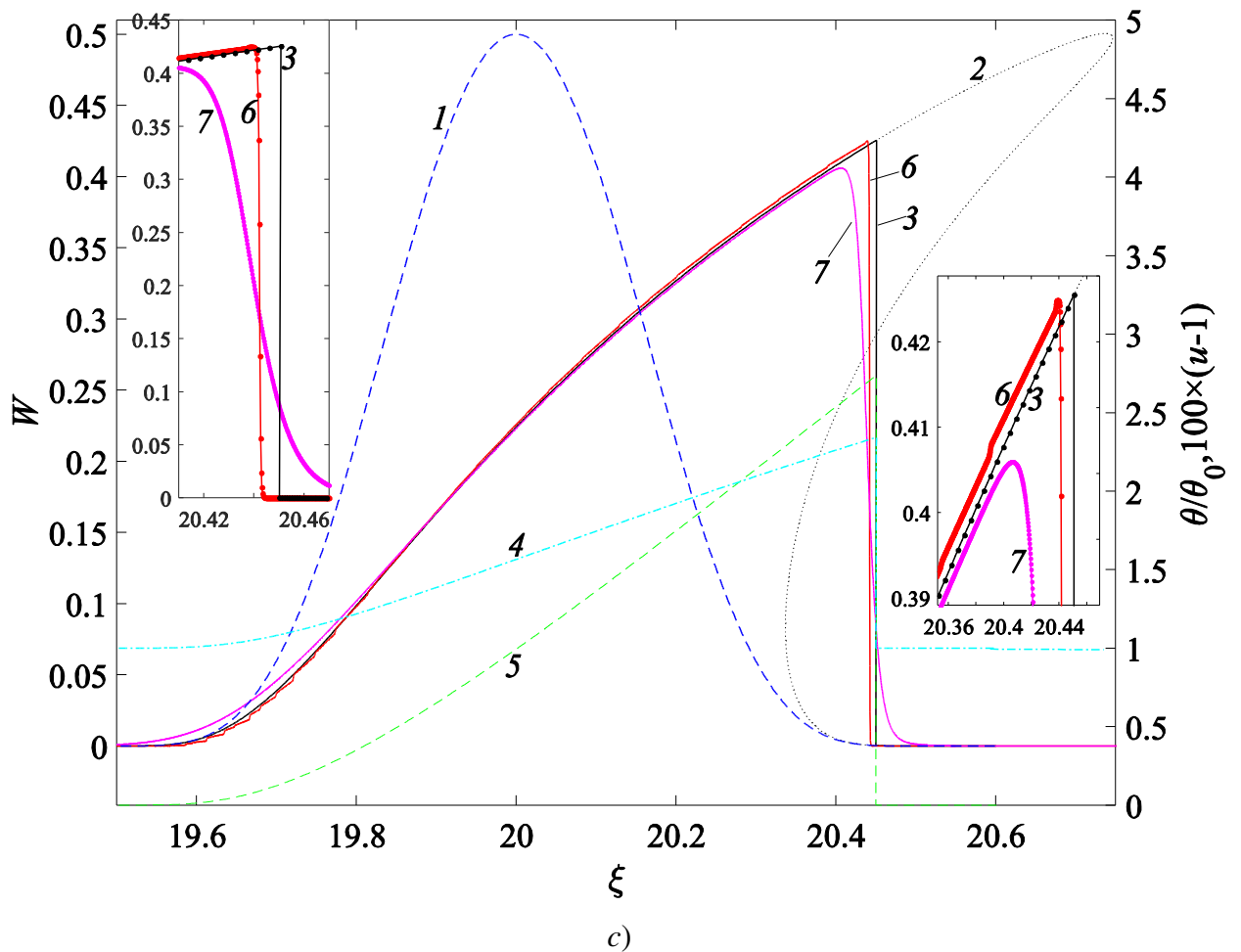


Рис. 5.5 Профили видеоимпульса W (кривые 1-3, 6-7), температурный профиль θ/θ_0 (кривые 4), а также распределение фазовой скорости (кривые 5), в различные моменты времени а) $\tau = 5$, б) $\tau = 7$, в) $\tau = 20$, при $\alpha = -2$, $\beta = -0.0001$, $\theta_0 = 100$.

Из рис. 5.6 можно заключить, что применение принципа минимального значения производной к численной схеме (5.51)-(5.52) позволяет достичь результатов более близких к результатам, полученным по методу характеристик. Но качественное поведение графиков на рис. 5.6 для всех трех методов одинаковое: площадь графиков $S(\tau)$ почти не изменяется с течением времени, амплитуда $W_{\max}(\tau)$ уменьшается с течением времени, а полуширина $h(\tau)$ – увеличивается. Стоит, однако, отметить, что при рассмотрении графика $W_{\max}(\tau)$ в более крупном масштабе (см. увеличительную выноску на рис.5.6) обнаруживается, что $W_{\max}(\tau)$ незначительно возрастет до значения 0.5002 к моменту времени $\tau = 9$. Кроме того, максимальное значение многозначного решения $W(\xi, \tau)$ вообще возрастает на всем промежутке времени моделирования по линейному закону $W_{\max}(\tau) = 0.5 + 2.6 \times 10^{-5} \tau$. Например, на рис. 5.5в значение W в максимуме кривой 2 составляет 0.50052, а в максимуме кривой 3 – 0.4255. Построение фронта ударной волны, таким образом, отсекает область, в которой локализован максимум многозначного решения W , что

приводит к уменьшению амплитуды реального импульса W . Отсюда следует вывод о том, что именно формирование ударной волны препятствует нелинейному росту пиковой мощности импульса.

Данное утверждение подтверждается также и рассмотренным в параграфе 5.4 случаем, в котором $u \equiv 1$. Действительно, в параграфе 5.4 было показано, что при $\tau \rightarrow (\alpha/\beta) \ln\{2\alpha W(\zeta,0)/[1+2\alpha W(\zeta,0)]\}$ решение (5.37) стремится к бесконечности. В частности, для точки $W(\zeta,0) = 0.5$, соответствующей максимуму начального импульса решение (5.37) стремится к бесконечности при $\tau = (\alpha/\beta) \times \ln\{|\alpha| / (|\alpha| - 1)\}$. Данное явление в литературе получило название взрывной неустойчивости решения. Отсюда можно заключить, что именно учет зависимости фазовой скорости u от W и θ ограничивает рост амплитуды и препятствует возникновению взрывной неустойчивости.

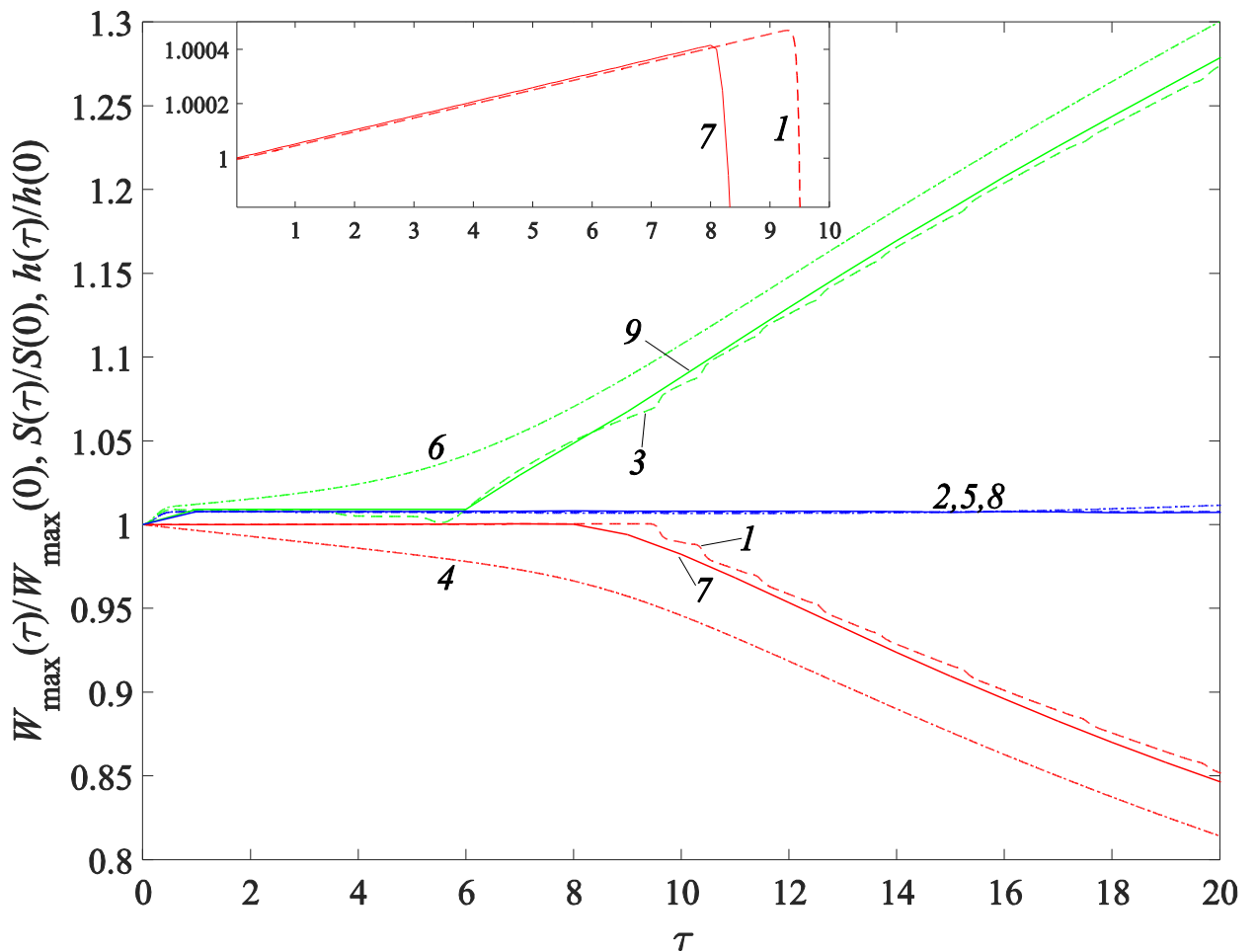


Рис. 5.6 Временная зависимость отношений амплитуды (кривые 1, 4, 7), площади (кривые 2, 5, 8) и полуширины импульса (кривые 3, 6, 9) к их начальным значениям при $\alpha = -2$, $\beta = -0.0001$, $\theta_0 = 100$.

5.8 Результаты моделирования, полученные при $\theta_0 < 1$

Наиболее интересная динамика изменения формы импульса наблюдается при $\theta_0 < 1$. В таком случае формирование фронта ударной волны происходит достаточно медленно, поэтому пиковая мощность импульса может увеличиться на десятки процентов. В данном случае мы будем использовать только схему (5.51)-(5.52) на основе принципа минимального значения производной. Проведем расчеты для набора параметров $\alpha = -2$, $\beta = -0.1$, $\theta_0 = 0.025$.

На рис. 5.7 приведены зависимости $W_{\max}(\tau)/W_{\max}(0)$ (кривые 1-4); $S(\tau)/S(0)$ (кривая 5); $h(\tau)/h(0)$ (кривая 6). Для построения кривых 1, 2, 3, 4 использовались шаги дискретизации $\Delta\xi$ соответственно 10^{-3} , 5×10^{-4} , 2.5×10^{-4} и 1.25×10^{-4} . При этом шаг $\Delta\tau$ всегда составлял $\Delta\xi/4$. Из увеличительной вкладки на рис. 5.7 видно, что при уменьшении шага $\Delta\xi$ зависимости $W_{\max}(\tau)/W_{\max}(0)$ сходятся к некоторому пределу. К моменту времени $\tau = 6$ амплитуда импульса достигает максимального значения, при этом пиковая мощность увеличивается примерно на 63%. Кривые 5-6 рассчитаны для $\Delta\xi = 1.25 \times 10^{-4}$. Видно, что площадь под графиком W уменьшается с течением времени, что соответствует уменьшению энергии импульса. Полуширина импульса также уменьшается с течением времени.

На рис. 5.8 приведен профиль начального импульса $W(\xi - \tau, 0)$ (кривая 1) и импульса $W(\xi, \tau)$ в момент времени $\tau = 6$ (кривая 2), а также отношение температур θ/θ_0 (кривая 3) и изменение фазовой скорости в процентах $100 \times (u(\xi, \tau) - 1)$ (кривая 4). Температура увеличивается примерно в 7 раз. Подобно предыдущему случаю это также подразумевает, что данный эффект экспериментально возможно наблюдать лишь при очень низких температурах. Изменение фазовой скорости не превышает 6%.

На выноске, изображенной на рис. 5.8, приведены пространственные спектры безразмерной напряженности электрического поля $|E(\Lambda, \tau)|/E_0 = |\int (W(\xi, \tau))^{1/2} \exp(i\Lambda\xi) d\xi|$ для начального импульса $W(\xi - \tau, 0)$ (кривая 5) и импульса $W(\xi, \tau)$ в момент времени $\tau = 6$ (кривая 6). Спектр начального импульса имеет минимумы при $\Lambda = \pm 4\pi, \pm 6\pi, \pm 8\pi \dots$, при этом между минимумами $\Lambda = \pm 4\pi$ содержится 99.95% всей энергии начального импульса. К моменту времени $\tau = 6$ спектр импульса уширяется: в отрезке $-4\pi \leq \Lambda \leq 4\pi$ содержится уже 90.36% энергии импульса. Уширение спектра происходит, очевидно, из-за образования ударной волны, которой соответствуют более высокие частоты пространственного спектра.

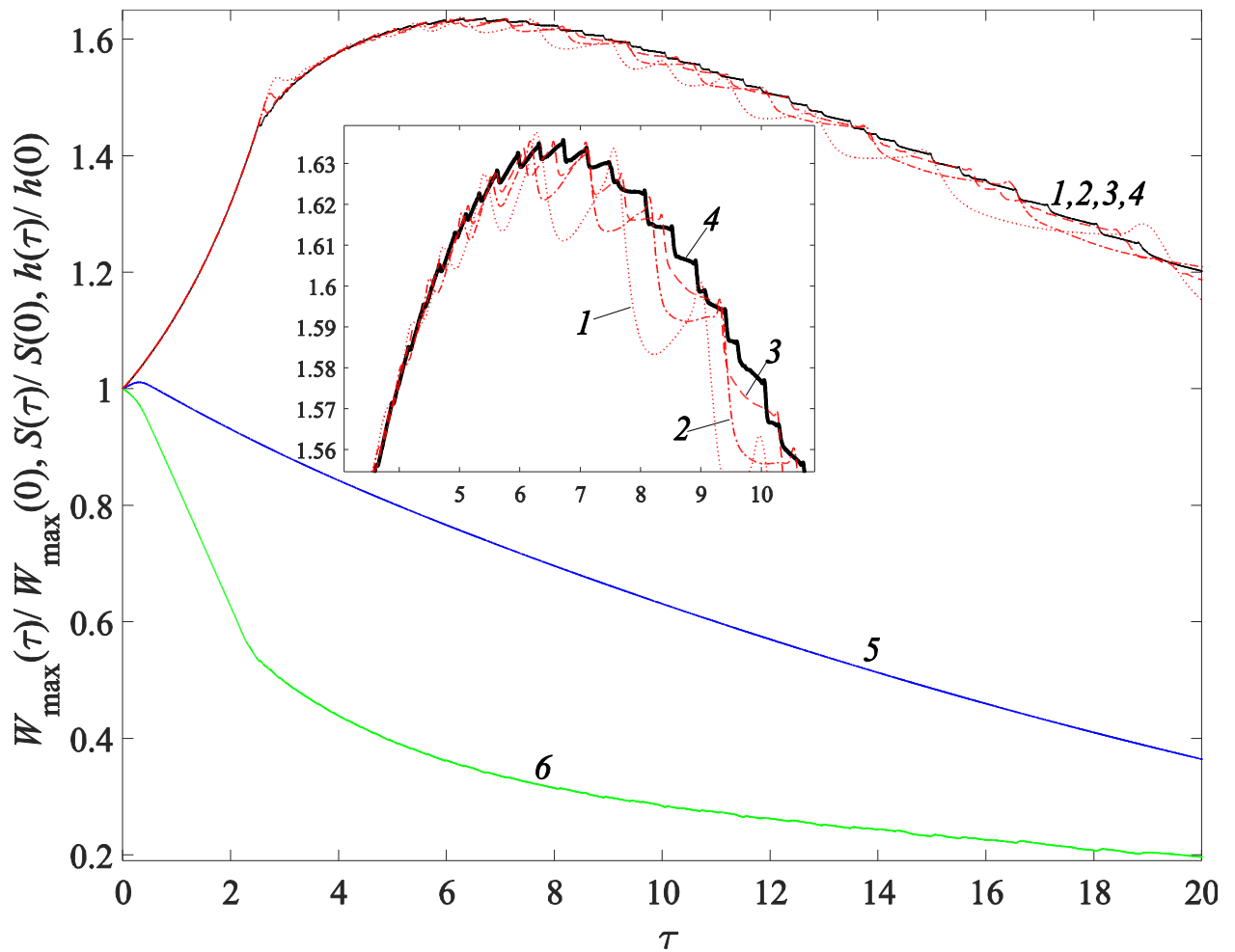


Рис. 5.7 Временная зависимость отношений амплитуды (кривые 1-4), площади (кривая 5) и полуширины импульса (кривая 6) к их начальным значениям при $\alpha = -2$, $\beta = -0.1$, $\theta_0 = 0.025$.

Стоит отметить, что для значений параметра θ_0 более близких к нулю возможно более значительное увеличение пиковой мощности импульса. Мы варьировали значения параметров α и β при $\theta_0 = 0$. Было обнаружено, что в таком случае максимальное увеличение пиковой мощности импульса составляет примерно 240% и достигается вблизи значений $\alpha = -2$, $\beta = -0.5$. Таким образом, теория предсказывает, что максимально возможное увеличение пиковой мощности импульса в рассматриваемых нелинейных линиях составляет 240%.

Стоит отметить, что все результаты моделирования были получены в предположении о том, что зависимость $\chi = \chi(T)$ линейна, а теплоемкость материальной среды 2 является постоянной величиной. Возможно, учет зависимости теплоемкости от температуры, а также учет нелинейных слагаемых в зависимости $\chi = \chi(T)$, позволит найти режимы, в которых достигается большее увеличение пиковой мощности импульса.

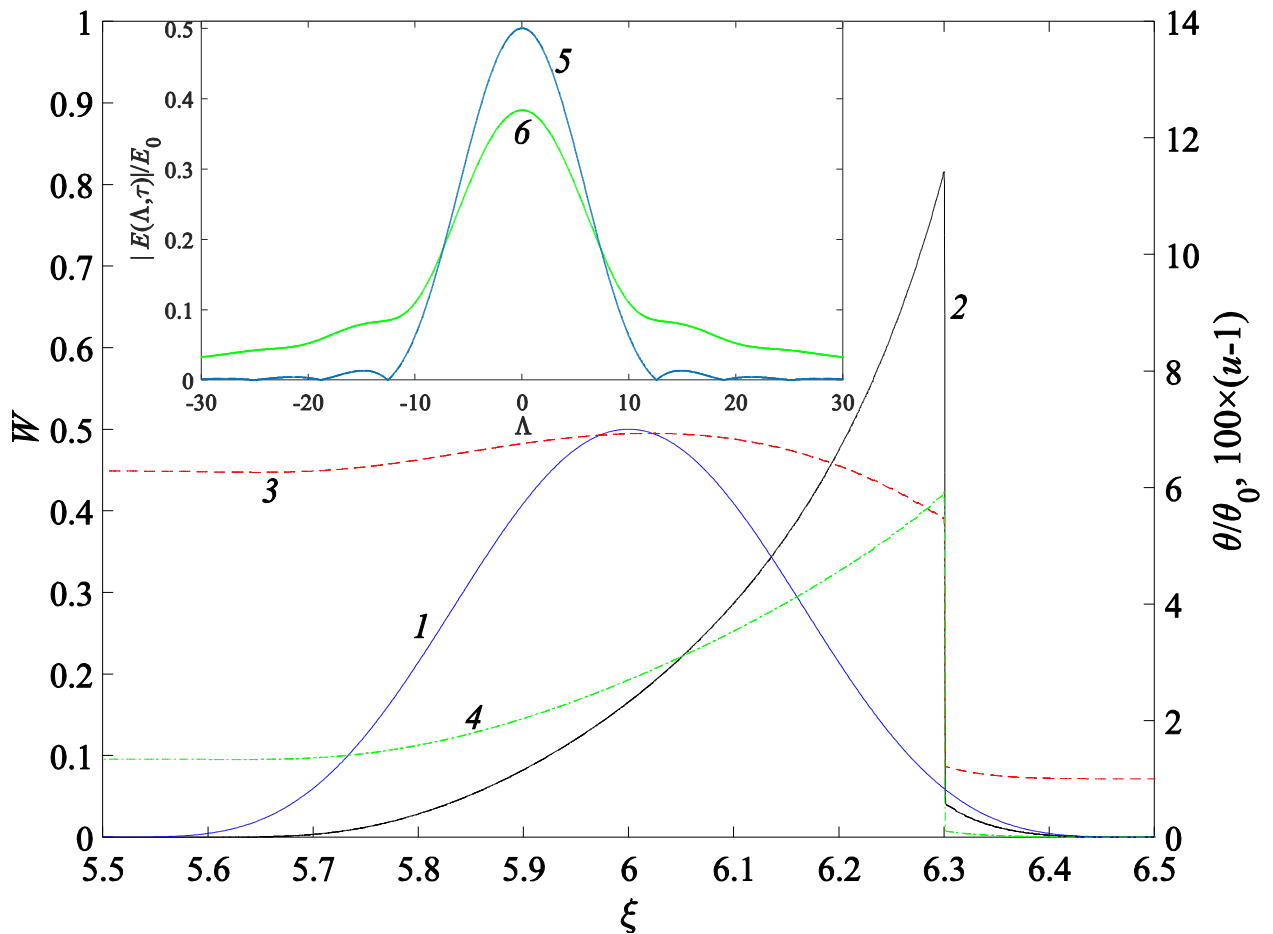


Рис. 5.8 Профиль видеоимпульса W (кривые 1-2), температурный профиль θ/θ_0 (кривая 3), а также распределение фазовой скорости (кривые 4), в моменты времени $\tau = 6$ при $\alpha = -2$, $\beta = -0.1$, $\theta_0 = 0.025$. На выноске изображены пространственные спектры безразмерной напряженности электрического поля $|E(\Lambda, \tau)|/E_0$, кривая 5 соответствует начальному импульсу, а кривая 6 – импульсу в момент времени $\tau = 6$.

5.9 Итоги главы 5

Разработанные численные модели обладают большой практической ценностью, поскольку они консервативны и пригодны для моделирования процесса образования ударной волны в нелинейных длинных линиях.

Была продемонстрирована эффективность применения принципа минимального значения производной для схемы метода конечных разностей. В частности, было выведено условие ограниченности численного решения, что является крайне важным в силу того, что при определенных параметрах задачи (при $\alpha < -1$), пиковая мощность импульса возрастает с течением времени.

Было показано, что нелинейный рост пиковой мощности импульса конкурирует с другим нелинейным эффектом – формированием ударной электромагнитной волны. При

$\theta_0 \gg 1$ из-за быстрого формирования фронта ударной волны рост пиковой мощности импульса крайне незначителен. Однако при $\theta_0 < 1$ рост пиковой мощности импульса может достигать десятков процентов. Вместе с ростом амплитуды импульса происходят уменьшение его полуширины и уширение его спектра. Мы показали, что современное состояние развития высоковольтных импульсных генераторов в принципе позволяет исследовать все эти нелинейные эффекты на существующих установках.

Теоретически предсказано, что максимально возможное увеличение пиковой мощности импульса составляет 240%. Однако, эта оценка получена в приближении линейного закона температурной зависимости диэлектрической проницаемости. Для более точного описания процесса роста пиковой мощности необходимо учитывать нелинейные слагаемые, а также зависимость теплоемкости материальной среды от температуры.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Был разработан приближенный метод расчета матрицы рассеяния произвольной плоскострой среды. Показано, что такой подход можно использовать в случаях, когда метод ВКБ, приближение геометрической оптики и метод характеристической матрицы оказываются неприменимы.

2. Получены формулы для погрешностей оптических коэффициентов, позволяющие оценить применимость N -ого приближения предлагаемого подхода для конкретного металла, его толщины и значений частоты. Для $N = 0$ до частоты 100 ГГц для медных пленок толщиной 10 нм погрешность расчета оптических коэффициентов (по интенсивности излучения) составляет менее 1%.

3. На основе предлагаемого приближенного подхода был проведен анализ оптических систем, в состав которых входят тонкие металлические пленки. Во-первых, были теоретически (а затем и экспериментально) обнаружены антибликовые свойства ультратонких металлических пленок. Во-вторых, был разработан бесконтактный способ измерения проводимости тонких пленок. В-третьих, были проанализированы конструкции сверхширокополосного 50%-ого и узкополосного 100%-ого поглотителя.

4. Предложена консервативная модель распространения видеоимпульсов в материальных средах с температурной зависимостью диэлектрической проницаемости. Показано, что в модели локально выполняются начала термодинамики. Показано, что при распространении импульса происходят два конкурирующих нелинейных эффекта: рост пиковой мощности импульса, который тушится формированием ударной электромагнитной волны. Модель предсказывает, что максимально возможное увеличение пиковой мощности составляет 240%.

**Список работ в рецензируемых журналах,
опубликованных автором по теме диссертации,
удовлетворяющих Положению о присуждении ученых степеней**

[A1] Глазунов П.С., Вдовин В.А., Слепков А.И. *Импеданс длинноволновой вибраторной антенны, находящейся в проводящей среде* // Журнал радиоэлектроники. – 2019. – № 2. **IF = 0,461 (РИНЦ)**. DOI: [10.30898/1684-1719.2019.2.1](https://doi.org/10.30898/1684-1719.2019.2.1). Общий объём статьи = 2,38 п.л., личный вклад = 2,12 п.л.

[A2] Вдовин В.А., Андреев В.Г., Глазунов П.С., Хорин И.А., Пинаев Ю.В. *Оптические коэффициенты пленок меди нанометровой толщины в диапазоне 9–11 ГГц* // Оптика и спектроскопия. – 2019. – Т. 127. – № 5. – С. 834-840.

Переводная версия статьи:

Vdovin V.A., Andreev V.G., **Glazunov P.S.**, Khorin I.A., Pinaev Y.V. *Optical coefficients of nanoscale copper films in the range of 9–11 GHz* // Optics and Spectroscopy. – 2019. – Vol. 127. – No. 5. – P. 907-913. **JIF = 0,6; JCI = 0,29 (WoS)**. Общий объём статьи = 0,75 п.л., личный вклад = 0,38 п.л.

[A3] Глазунов П.С., Вдовин В.А., Андреев В.Г. *Приближенные граничные условия для задачи нахождения оптических коэффициентов ультратонких металлических пленок в СВЧ и ТГц диапазонах* // Оптика и спектроскопия. – 2020. – Т. 128. – № 9. – С. 1327-1336.

Переводная версия статьи

Glazunov P.S., Vdovin V.A., Andreev V.G. *Approximate boundary conditions for the problem of calculating optical coefficients of ultrathin metallic films in the microwave and terahertz ranges* // Optics and Spectroscopy. – 2020. – Vol. 128. – No. 9. – P. 1439-1448. **JIF = 0,6; JCI = 0,29 (WoS)**. Общий объём статьи = 1,25 п.л., личный вклад = 1,06 п.л.

[A4] Андреев В.Г., Вдовин В.А., Глазунов П.С., Васильев А.Б., Пинаев Ю.В., Хорин И.А., Черепенин В.А. *Измерение проводимости ультратонких пленок платины в СВЧ диапазоне* // Доклады Российской академии наук. Физика, технические науки. – 2020. – Т. 495. – № 6. – С. 78-83.

Переводная версия статьи:

Andreev V.G., Vdovin V.A., **Glazunov P.S.**, Vasil'ev A.B., Pinaev Yu.V., Khorin I.A., Cherepenin V.A. *Measuring the microwave conductivity of platinum ultrathin films* // Doklady Physics. – 2020. – Vol. 65. – No. 12. – P. 447-451. **JIF = 0,8; JCI = 0,18** ([WoS](#)). Общий объём статьи = 0,56 п.л., личный вклад = 0,29 п.л.

- [A5] Андреев В.Г., Вдовин В.А., **Глазунов П.С.**, Пятайкин И.И., Пинаев Ю.В. *Влияние толщины диэлектрической подложки на поглощающие и просветляющие свойства ультратонких пленок меди* // Оптика и спектроскопия. – 2022. – Т. 130. – № 9. – С. 1410-1416.

Переводная версия статьи

Andreev V.G., Vdovin V.A., **Glazunov P.S.**, Pyataikin I.I., Pinaev Y.V. *Effect of thickness of the dielectric substrate on absorbing and antireflective properties of ultrathin copper films* // Optics and Spectroscopy. – 2022. – Vol. 130 – No. 9. – P. 1134-1140. **JIF = 0,6; JCI = 0,29** ([WoS](#)). Общий объём статьи = 0,53 п.л., личный вклад = 0,32 п.л.

- [A6] **Глазунов П.С.**, Вдовин В.А., Салецкий А.М. *Распространение мощных нано- и субнаносекундных видеоимпульсов в среде с меняющимися термодинамическими характеристиками* // Радиотехника и электроника. – 2023. – Т. 68. – № 8. – С. 817-826.

Переводная версия статьи

Glazunov P.S., Vdovin V.A., Saletskii A.M. *Propagation of powerful nano-and subnanosecond video pulses in a medium with various thermodynamic characteristics* // Journal of Communications Technology and Electronics. – 2023. – Vol. 68. – No. 8. – P. 910-919. **JIF = 0,5; JCI = 0,13** ([WoS](#)). Общий объём статьи = 1,87 п.л., личный вклад = 1,68 п.л.

- [A7] **Глазунов П.С.**, Салецкий А.М., Вдовин В.А. *Формирование фронта ударной волны при распространении наносекундных видеоимпульсов в слабопроводящих средах с температурной зависимостью диэлектрической проницаемости* // Журнал радиоэлектроники. – 2023. – № 10. **IF = 0,461** ([РИНЦ](#)). DOI:

[10.30898/1684-1719.2023.10.2](#). Общий объём статьи = 1,56 п.л., личный вклад = 1,39 п.л.

Тезисы и доклады на конференциях по теме диссертации

- [A8] Глазунов П.С. *Приближенные граничные условия для описания неоднородных тонких металлических пленок в микроволновом диапазоне длин волн. Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2020». Секция «Физика»* (Москва, Россия, 10-27 ноября 2020)
- [A9] Глазунов П.С., Воробьева Е.А., Вдовин В.А., Слепков А.И. *Исследование воздействия импульсных электромагнитных помех на устойчивость работы электронных автоколебательных систем. XVII Всероссийская школа-семинар «Волновые явления в неоднородных средах» имени А.П. Сухорукова* (Москва, Россия, 23-28 августа 2020)
- [A10] Глазунов П.С., Андреев В.Г., Вдовин В.А. *Перспективы использования ультратонких металлических пленок в задачах микроволновой электроники и оптики ТГц диапазона XVII Всероссийская школа-семинар «Волновые явления в неоднородных средах» имени А.П. Сухорукова* (Москва, Россия, 23-28 августа 2020)
- [A11] Глазунов П.С., Слепков А.И., Вдовин В.А. *Нелинейные эффекты при распространении мощных наносекундных видеоимпульсов в слабопроводящих средах (Устный). XVII Всероссийская школа-семинар «Физика и применение микроволн» имени профессора А.П. Сухорукова* (Красновидово, Московская область, Россия, 26-31 мая 2019)
- [A12] Глазунов П.С., Слепков А.И., Вдовин В.А., Воробьева Е.А. *Теоретическое исследование воздействия микроволновых импульсов на работу генераторов тактовой частоты. XVII Всероссийская школа-семинар «Физика и применение микроволн» имени профессора А.П. Сухорукова* (Красновидово, Московская область, Россия, 26-31 мая 2019)
- [A13] Глазунов П.С. *Нелинейные эффекты при распространении мощных наносекундных СВЧ импульсов в слабопроводящих средах. XXVI Международная*

научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых "Ломоносов-2019", МГУ имени М.В.Ломоносова (Москва, Россия, 8-12 апреля 2019)

Список литературы

- [1] Morales Masis M. et al. *Transparent electrodes for efficient optoelectronics* //Advanced Electronic Materials. – 2017. – Т. 3. – №. 5. – С. 1600529. DOI: 10.1002/aelm.201600529
- [2] Transparent Conductive Films Market Size & Share Analysis – Growth Trends & Forecasts (2024 - 2029). URL: <https://www.mordorintelligence.com/industry-reports/transparent-conductive-films-market>
- [3] URL: <https://www.dailymetalprice.com/metalpricecharts.php?c=in&u=kg&d=0>
- [4] Moyer M., Storrs C. *How Much Is Left? The Limits of Earth's Resources: A graphical accounting of the limits to what one planet can provide.* – 2010. CIMMYT. URL: <https://www.scientificamerican.com/article/how-much-is-left/>
- [5] Gonçalves G. et al. *Influence of post-annealing temperature on the properties exhibited by ITO, IZO and GZO thin films* // Thin solid films. – 2007. – Т. 515. – №. 24. – С. 8562-8566. DOI: [10.1016/j.tsf.2007.03.126](https://doi.org/10.1016/j.tsf.2007.03.126)
- [6] Zhang W. et al. *Graphene: silver nanowire composite transparent electrode based flexible organic solar cells with 13.4% efficiency* // Journal of Materials Chemistry A. – 2019. – Т. 7. – №. 38. – С. 22021-22028. DOI: [10.1039/C9TA07493G](https://doi.org/10.1039/C9TA07493G)
- [7] Wang T. et al. *Recent Developments in Flexible Transparent Electrode* // Crystals. – 2021. – Т. 11. – №. 5. – С. 511. DOI: [10.3390/cryst11050511](https://doi.org/10.3390/cryst11050511)
- [8] Hofmann A. I., Cloutet E., Hadziioannou G. *Materials for transparent electrodes: from metal oxides to organic alternatives* //Advanced Electronic Materials. – 2018. – Т. 4. – №. 10. – С. 1700412. DOI: 10.1002/aelm.201700412
- [9] Paddubskaya A. et al. *Tunable perfect THz absorber based on a stretchable ultrathin carbon-polymer bilayer* // Materials. – 2019. – Т. 12. – №. 1. – С. 143. DOI: [10.3390/ma12010143](https://doi.org/10.3390/ma12010143)
- [10] Yu L. et al. *Low-Cost microbolometer type infrared detectors* // Micromachines. – 2020. – Т. 11. – №. 9. – С. 800. DOI: [10.3390/mi11090800](https://doi.org/10.3390/mi11090800)
- [11] Kaplan A. E. *Metallic nanolayers: a sub-visible wonderland of optical properties* // JOSA B. – 2018. – Т. 35. – №. 6. – С. 1328-1340. DOI: [10.1364/josab.35.001328](https://doi.org/10.1364/josab.35.001328)
- [12] Li T., et al. *Chiplet Heterogeneous Integration Technology – Status and Challenges* // Electronics. – 2020. – Т.9– №. 4 – С. 670. DOI: [10.3390/electronics9040670](https://doi.org/10.3390/electronics9040670)
- [13] Денисенко В. В. *Компактные модели МОП-транзисторов для SPICE в микро- и наноэлектронике.* – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. – 408 с.

- [14] Croes K. et al. *Interconnect metals beyond copper: reliability challenges and opportunities* // 2018 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM). – IEEE, 2018. – C. 531-534. DOI: 10.1109/IEDM.2018.8614695
- [15] Ciofi I. et al. *Impact of wire geometry on interconnect RC and circuit delay* // IEEE Transactions on Electron Devices. – 2016. – T. 63. – №. 6. – C. 2488-2496. DOI: 10.1109/TED.2016.2554561
- [16] Vyas A. A., Zhou C., Yang C. Y. *On-chip interconnect conductor materials for end-of-roadmap technology nodes* // IEEE Transactions on Nanotechnology. – 2016. – T. 17. – №. 1. – C. 4-10. DOI: 10.1109/TNANO.2016.2635583
- [17] Rigsby M. A., Spurlin T. A., Reid J. D. *Alternative Metals for Advanced Interconnects: Cobalt and Beyond* // ECS Meeting Abstracts. – IOP Publishing, 2021. – №. 24. – C. 936. DOI: 10.1149/MA2021-0124936mtgabs
- [18] Adelman C. et al. *Alternative metals for advanced interconnects* // IEEE International Interconnect Technology Conference. – IEEE, 2014. – C. 173-176. DOI: 10.1109/IITC.2014.6831863
- [19] Pedreira O. V. et al. *Reliability study on cobalt and ruthenium as alternative metals for advanced interconnects* // 2017 IEEE International Reliability Physics Symposium (IRPS). – IEEE, 2017. – C. 6B-2.1-6B-2.8. DOI: 10.1109/IRPS.2017.7936340
- [20] Naik M. *Interconnect trend for single digit nodes* // 2018 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM). – IEEE, 2018. – C. 561-564. DOI: 10.1109/IEDM.2018.8614541
- [21] Beyne S. et al. *Electromigration activation energies in alternative metal interconnects* // IEEE Transactions on Electron Devices. – 2019. – T. 66. – №. 12. – C. 5278-5283. DOI: 10.1109/TED.2019.2949196
- [22] Ciofi I., et al. *Modeling of via resistance for advanced technology nodes* // IEEE transactions on Electron Devices. – 2017. – T. 64. – №. 5. – C. 2306-2313. DOI: 10.1109/TED.2017.2687524
- [23] Tierno D. et al. *Cobalt and Ruthenium drift in ultra-thin oxides* // Microelectronics Reliability. – 2019. – T. 100. – C. 113407. DOI: [10.1016/j.microrel.2019.113407](https://doi.org/10.1016/j.microrel.2019.113407)
- [24] Hagen E., Rubens H. *Über Beziehungen des Reflexions-und Emissionsvermögens der Metalle zu ihrem elektrischen Leitvermögen* // Annalen der Physik. – 1903. – T. 316. – №. 8. – C. 873-901. DOI: 10.1002/andp.19033160811
- [25] Drude P. *Zur elektronentheorie der metalle* // Annalen der physik. – 1900. – T. 306. – №. 3. – C. 566-613. DOI: 10.1002/andp.19003060312

- [26] Hall E. H. *Sommerfeld's electron-theory of metals* // Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America. – 1928. – Т. 14. – №. 5. – С. 370. DOI: 10.1073/pnas.14.5.370
- [27] Sommerfeld A. *Zur elektronentheorie der metalle* // Naturwissenschaften. – 1927. – Т. 15. – №. 41. – С. 825-832. DOI: [10.1007/bf01505083](https://doi.org/10.1007/bf01505083)
- [28] Каплан А. Е. *Об отражательной способности металлических пленок в СВЧ-и радиодиапазоне* // Радиотехника и электроника. – 1964. – Т. 9. – №. 10. – С. 1781-1787.
- [29] Greene J. E. *Tracing the recorded history of thin-film sputter deposition: From the 1800s to 2017* // Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films. – 2017. – Т. 35. – №. 5. – С. 05C204. DOI: [10.1116/1.4998940](https://doi.org/10.1116/1.4998940)
- [30] Борн М., Вольф Э. *Основы оптики*. – М.: Наука, 1973. – 720 с.
- [31] А. Н. Матвеев. *Оптика*. – 1-ое издание. – М.: Высшая школа, 1985. – 351 с.
- [32] Faraj M. G. et al. *PET as a plastic substrate for the flexible optoelectronic applications* // Optoelectron. Adv. Mater. Rapid Commun. – 2011. – Т. 5. – С. 879-882. Corpus ID: 138861004
- [33] De A. Freire M. T. et al. *Thermal stability of polyethylene terephthalate (PET): oligomer distribution and formation of volatiles* // Packaging Technology and Science. – 1999. – Т. 12. – №. 1. – С. 29-36. DOI: 10.1002/(SICI)1099-1522(199901/02)12:13.3.CO;2-4
- [34] Rasoga O. et al. *Optical and electrical properties of arylenevinylene compounds thin films prepared by vacuum evaporation* // Synthetic metals. – 2012. – Т. 161. – №. 23-24. – С. 2612-2617. DOI: [10.1016/j.synthmet.2011.10.001](https://doi.org/10.1016/j.synthmet.2011.10.001)
- [35] Rajendran S., Qin J., Gracia F., Lichtfouse. *Metal and Metal Oxides for Energy and Electronics*. – Springer, 2021. – 402 с. DOI: [10.1007/978-3-030-53065-5_5](https://doi.org/10.1007/978-3-030-53065-5_5)
- [36] Inamuddin, Tauseef A. R., Mohd I. A. *Materials for Solar Cell Technologies II*. – Materials Research Forum LLC Millersville, 2021. – 178 с.
- [37] Yun J. *Ultrathin metal films for transparent electrodes of flexible optoelectronic devices* // Advanced Functional Materials. – 2017. – Т. 27. – №. 18. – С. 1606641. DOI: 10.1002/adfm.201606641
- [38] Shi L. et al. *High performance flexible organic photomultiplication photodetector based on an ultra-thin silver film transparent electrode* // Nanotechnology. – 2020. – Т. 31. – №. 31. – С. 314001. DOI: [10.1088/1361-6528/ab87ca](https://doi.org/10.1088/1361-6528/ab87ca)
- [39] Ji C. et al. *Ultrathin-metal-film-based transparent electrodes with relative transmittance surpassing 100%* // Nature communications. – 2020. – Т. 11. – №. 1. – С. 1-8. DOI: [10.1038/s41467-020-17107-6](https://doi.org/10.1038/s41467-020-17107-6)

- [40] Bauch M., Dimopoulos T. *Design of ultrathin metal-based transparent electrodes including the impact of interface roughness* // *Materials & Design*. – 2016. – T. 104. – C. 37-42. DOI: [10.1016/j.matdes.2016.04.082](https://doi.org/10.1016/j.matdes.2016.04.082)
- [41] Wan H. Y. et al. *Nanotwin-enhanced fatigue resistance of ultrathin Ag films for flexible electronics applications* // *Materials Science and Engineering: A*. – 2016. – T. 676. – C. 421-426. DOI: [10.1016/j.msea.2016.09.010](https://doi.org/10.1016/j.msea.2016.09.010)
- [42] Choudhary A., Pal S., Sarkhel G. *Broadband millimeter-wave absorbers: a review* // *International Journal of Microwave and Wireless Technologies*. – 2023. – T. 15. – №. 2. – C. 347-363. DOI: [10.1017/S1759078722000162](https://doi.org/10.1017/S1759078722000162)
- [43] Tirkey M. M., Gupta N. *The quest for perfect electromagnetic absorber: a review* // *International Journal of Microwave and Wireless Technologies*. – 2019. – T. 11. – №. 2. – C. 151-167. DOI: [10.1017/S1759078718001472](https://doi.org/10.1017/S1759078718001472)
- [44] Rozanov K. N. *Ultimate thickness to bandwidth ratio of radar absorbers* // *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*. – 2000. – T. 48. – №. 8. – C. 1230-1234. DOI: 10.1109/8.884491
- [45] Kazemzadeh A. *Nonmagnetic ultrawideband absorber with optimal thickness* // *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*. – 2010. – T. 59. – №. 1. – C. 135-140. DOI: 10.1109/TAP.2010.2090481
- [46] Hossain M. I. et al. *Equivalent circuit design method for wideband nonmagnetic absorbers at low microwave frequencies* // *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*. – 2020. – T. 68. – №. 12. – C. 8215-8220. DOI: 10.1109/TAP.2020.2983756
- [47] Lu X. et al. *Fast Semi-Analytical Design for Single-FSS-Layer Circuit-Analog Absorbers* // *IEEE Open Journal of Antennas and Propagation*. – 2020. – T. 1. – C. 483-492. DOI: 10.1109/OJAP.2020.3021717
- [48] Sohrab A. P., Atlasbaf Z. *A circuit analog absorber with optimum thickness and response in X-band* // *IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters*. – 2013. – T. 12. – C. 276-279. DOI: 10.1109/LAWP.2013.2248073
- [49] Shang Y., Shen Z., Xiao S. *On the design of single-layer circuit analog absorber using double-square-loop array* // *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*. – 2013. – T. 61. – №. 12. – C. 6022-6029. DOI: 10.1109/TAP.2013.2280836
- [50] Ye D. et al. *Ultrawideband dispersion control of a metamaterial surface for perfectly-matched-layer-like absorption* // *Physical review letters*. – 2013. – T. 111. – №. 11. – C. 187402. DOI: [10.1103/PhysRevLett.111.187402](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.187402)

- [51] Kundu D., Mohan A., Chakrabarty A. *Single-layer wideband microwave absorber using array of crossed dipoles* // IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters. – 2016. – Т. 15. – С. 1589-1592. DOI: [10.1109/LAWP.2016.2517663](https://doi.org/10.1109/LAWP.2016.2517663)
- [52] Chen J., Shang Y., Liao C. *Double-layer circuit analog absorbers based on resistor-loaded square-loop arrays* // IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters. – 2018. – Т. 17. – №. 4. – С. 591-595. DOI: [10.1109/LAWP.2018.2805333](https://doi.org/10.1109/LAWP.2018.2805333)
- [53] Zhang B., Jin C., Shen Z. *Low-profile broadband absorber based on multimode resistor-embedded metallic strips* // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – 2019. – Т. 68. – №. 3. – С. 835-843. DOI: [10.1109/TMTT.2019.2956933](https://doi.org/10.1109/TMTT.2019.2956933)
- [54] Yao Z. et al. *On the design of wideband absorber based on multilayer and multiresonant FSS array* // IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters. – 2020. – Т. 20. – №. 3. – С. 284-288. DOI: [10.1109/LAWP.2020.3046010](https://doi.org/10.1109/LAWP.2020.3046010)
- [55] Venkatachalam S. et al. *Carbon-based terahertz absorbers: Materials, applications, and perspectives* // Nano Select. – 2020. – Т. 1. – №. 5. – С. 471-490. DOI: [10.1002/nano.202000067](https://doi.org/10.1002/nano.202000067)
- [56] Rogalski A., Sizov F. *Terahertz detectors and focal plane arrays* // Opto-electronics review. – 2011. – Т. 19. – №. 3. – С. 346-404. DOI: [10.2478/s11772-011-0033-3](https://doi.org/10.2478/s11772-011-0033-3)
- [57] Демьяненко М. А. *Эффективные широкополосные приемники терагерцового излучения на основе болометров с тонким металлическим поглотителем* // Журнал технической физики. – 2018. – Т. 88. – №. 1. – С. 121-126. DOI: [10.21883/JTF.2018.01.45495.2165](https://doi.org/10.21883/JTF.2018.01.45495.2165)
- [58] Dem'yanenko M. A., Marchishin I. V., Startsev V. V. *Absorption of terahertz radiation by a thin metal absorber in conventional and inverted bolometers* // OSA Continuum. – 2019. – Т. 2. – №. 6. – С. 2085-2097. DOI: [10.1364/OSAC.2.002085](https://doi.org/10.1364/OSAC.2.002085)
- [59] Abedini Dereshgi S. et al. *Ultra-broadband, lithography-free, and large-scale compatible perfect absorbers: the optimum choice of metal layers in metal-insulator multilayer stacks* // Scientific Reports. – 2017. – Т. 7. – №. 1. – С. 1-8. DOI: [10.1038/s41598-017-13837-8](https://doi.org/10.1038/s41598-017-13837-8)
- [60] Андреев В.Г., Вдовин В.А., Карабутов А.А. *Возбуждение акустического сигнала мощным СВЧ импульсом наносекундной длительности* // Изв. РАН. Сер. Физ. – 2002. – Т. 66. – №. 12. – С. 1750-1753.
- [61] Andreev V. G., Vdovin V. A., Karabutov A. A. *Thermoacoustic method for detection of powerful microwave pulses* // Radiophysics and quantum electronics. – 2003. – Т. 46. – №. 8-9. – С. 707-712. DOI: [10.1023/B:RAQE.0000025001.91842.70](https://doi.org/10.1023/B:RAQE.0000025001.91842.70)

- [62] Andreev V. G., Vdovin V. A. *Generation of acoustic waves by power microwave pulses with the use of thin metal films* // Radiophysics and quantum electronics. – 2005. – Т. 48. – №. 10-11. – С. 896-900. DOI: [10.1007/s11141-006-0023-3](https://doi.org/10.1007/s11141-006-0023-3)
- [63] Andreev V.G., Vdovin V.A. *Acoustic Detector for Registration of Powerful Microwave Pulses* // Изв. ВУЗов. Физика. –2006. –Т. 49. –№ 11. –С. 443-445.
- [64] Andreev V. G., Vdovin V. A. *A thermoacoustic sensor for recording high-power nanosecond microwave pulses* // Instruments and Experimental Techniques. – 2009. – Т. 52. – С. 226-229. DOI: [10.1134/S0020441209020171](https://doi.org/10.1134/S0020441209020171)
- [65] Andreev V. G. et al. *Testing a thermoacoustic sensor of high-power microwave pulses* // Radiophysics and Quantum Electronics. – 2009. – Т. 52. – №. 8. – С. 587-592. DOI: [10.1007/s11141-010-9160-9](https://doi.org/10.1007/s11141-010-9160-9)
- [66] Andreev V.G., Kalynov Yu.K., Vdovin V.A. *Thermoacoustic Detector for Registration of Powerful Terahertz Pulses* // IEEE Sensor Journal. – 2014. –Т. 14. – №. 2. – С.578-583. DOI: 10.1109/JSEN.2013.2286101
- [67] Andreev V. G., Vdovin V. A., Voronov P. S. *An experimental study of millimeter wave absorption in thin metal films* // Technical Physics Letters. – 2003. – Т. 29. – С. 953-955. DOI: [10.1134/1.1631376](https://doi.org/10.1134/1.1631376)
- [68] Андреев В.Г., Вдовин В.А., Воронов П.С. *Исследование оптических коэффициентов тонких металлических пленок в миллиметровом диапазоне длин волн* // Изв. РАН. Сер. Физ. –2003. –Т. 67. –№ 12. –С. 1763-1766.
- [69] Козарь А.В. *Согласование высокоотражающих волноводных СВЧ-нагрузок диэлектрической структурой минимальной волновой толщины* // Всесоюзный научный семинар «Методы синтеза и применение многослойных интерференционных систем». – Москва. –1984. – С. 116-117.
- [70] Борщевский В.В., Карпов А.В., Козарь В.Н. и др. *Экспериментальное исследование однослойного диэлектрического согласователя высокоотражающих СВЧ- нагрузок в волноводе* // Всесоюзный научный семинар «Методы синтеза и применение многослойных интерференционных систем». – Москва, 1984. – С. 178-179.
- [71] Трофимов А. В. *Исследование процессов нестационарного отражения электромагнитных импульсов от слоистых структур*: дис. канд. физ.-мат. наук: 01.04.03/ Трофимов Алексей Викторович. –М. – 2016. –120 с.
- [72] Козарь А. В., Трофимов А. В. *Процесс нестационарного отражения электромагнитных импульсов в системе с сильной волноводной дисперсией* // Всероссийская научно-техническая конференция «Электроника и микроэлектроника СВЧ». – 2015. – С. 187-191.

- [73] Горохов П. Н., Козарь А. В. *Согласование электромагнитной волны с линейно изменяющейся амплитудой с поглощающей подложкой* // Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия. – 2019. – №. 4. – С. 36-39.
- [74] Li S. et al. *Broadband perfect absorption of ultrathin conductive films with coherent illumination: Superabsorption of microwave radiation* // Physical Review B. – 2015. – Т. 91. – №. 22. – С. 220301. DOI: [10.1103/PhysRevB.91.220301](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.220301)
- [75] Yan C. et al. *Coherent perfect absorption of electromagnetic wave in subwavelength structures* // Optics & Laser Technology. – 2018. – Т. 101. – С. 499-506. DOI: [10.1016/j.optlastec.2017.12.004](https://doi.org/10.1016/j.optlastec.2017.12.004)
- [76] Kouhalvandi L., Ceylan O., Ozoguz S. *Optimization techniques for analog and RF circuit designs: an overview* // Analog Integrated Circuits and Signal Processing. – 2021. – Т. 106. – №. 3. – С. 511-524. DOI: [10.1007/s10470-020-01733-7](https://doi.org/10.1007/s10470-020-01733-7)
- [77] Torun H. M. et al. *A global Bayesian optimization algorithm and its application to integrated system design* // IEEE Transactions on Very Large Scale Integration (VLSI) Systems. – 2018. – Т. 26. – №. 4. – С. 792-802. DOI: 10.1109/TVLSI.2017.2784783
- [78] Jihong Z. H. U. et al. *A review of topology optimization for additive manufacturing: Status and challenges* // Chinese Journal of Aeronautics. – 2021. – Т. 34. – №. 1. – С. 91-110. DOI: [10.1016/j.cja.2020.09.020](https://doi.org/10.1016/j.cja.2020.09.020)
- [79] Thompson S. E., Parthasarathy S. *Moore's law: the future of Si microelectronics* // Materials today. – 2006. – Т. 9. – №. 6. – С. 20-25. DOI: [10.1016/S1369-7021\(06\)71539-5](https://doi.org/10.1016/S1369-7021(06)71539-5)
- [80] Seshan K., Schepis D. *Handbook of thin film deposition*. – 2nd ed. – William Andrew, 2018. – 630 с.
- [81] Hruska J. *As Chip Design Costs Skyrocket, 3 nm Process Node Is in Jeopardy*. – 2018. URL: <https://www.extremetech.com/computing/272096-3nm-process-node>
- [82] Chen F., Gardner D. *Influence of line dimensions on the resistance of Cu interconnections* // IEEE Electron Device Letters. – 1998. – Т. 19. – №. 12. – С. 508-510. DOI: 10.1109/55.735762
- [83] Kapur P. et al. *Technology and reliability constrained future copper interconnects. II. Performance implications* // IEEE Transactions on Electron Devices. – 2002. – Т. 49. – №. 4. – С. 598-604. DOI: 10.1109/16.992868
- [84] Kapur P., McVittie J. P., Saraswat K. C. *Technology and reliability constrained future copper interconnects. I. Resistance modeling* // IEEE Transactions on Electron Devices. – 2002. – Т. 49. – №. 4. – С. 590-597. DOI: 10.1109/16.992867

- [85] Saini A. *Design of the Intel Pentium processor* // In Proceedings of 1993 IEEE International Conference on Computer Design ICCD'93. – IEEE, 1993. – C. 258-261. DOI: [10.1109/iccd.1993.393370](https://doi.org/10.1109/iccd.1993.393370)
- [86] *Pentium Processor User's Manual, Intel Corporation.* – Santa Clara, California. – 1993.
- [87] Baklanov M. R., Ho P. S., Zschech E. *Advanced Interconnects for ULSI Technology.* – John Wiley & Sons, Ltd, 2012. – 579 c. DOI: [10.1002/9781119963677](https://doi.org/10.1002/9781119963677)
- [88] Darmi M. et al. *Integrated Circuit Conception: A Wire Optimization Technic Reducing Interconnection Delay in Advanced Technology Nodes* // Electronics. – 2017. – T. 6. – №. 4. – C. 78. DOI: [10.3390/electronics6040078](https://doi.org/10.3390/electronics6040078)
- [89] Kaur J., Gill S. S., Kaur N. *Optimization of CMOS repeater driven interconnect RC line using genetic algorithm* // Journal of Shanghai Jiaotong University (Science). – 2017. – T. 22. – C. 167-172. DOI: [10.1007/s12204-017-1817-5](https://doi.org/10.1007/s12204-017-1817-5)
- [90] Fayneh E. et al. *4.1 14nm 6th-generation Core processor SoC with low power consumption and improved performance* // 2016 IEEE International Solid-State Circuits Conference (ISSCC). – IEEE, 2016. – C. 72-73. DOI: [10.1109/ISSCC.2016.7417912](https://doi.org/10.1109/ISSCC.2016.7417912)
- [91] Witt C. et al. *Testing the limits of TaN barrier scaling* // 2018 IEEE International Interconnect Technology Conference (IITC). – IEEE, 2018. – C. 54-56. DOI: [10.1109/IITC.2018.8430289](https://doi.org/10.1109/IITC.2018.8430289)
- [92] Li Z. et al. *Recent advances in barrier layer of Cu interconnects* // Materials. – 2020. – T.13. – №. 21. – C. 5049. DOI: [10.3390/ma13215049](https://doi.org/10.3390/ma13215049)
- [93] Lin Q., Wu H., Jia G. *Review of the global trend of interconnect reliability for integrated circuit* // Circuits and Systems. – 2018. – T. 9. – №. 2. – C. 9-21. DOI: [10.4236/cs.2018.92002](https://doi.org/10.4236/cs.2018.92002)
- [94] Etienne D. *45-year CPU evolution: one law and two equations* // arXiv preprint. – 2018. – C. 1-6. DOI: [10.48550/arXiv.1803.00254](https://doi.org/10.48550/arXiv.1803.00254)
- [95] Sundriyal V., Sosonkina M. *Modeling of the CPU frequency to minimize energy consumption in parallel applications* // Sustainable Computing: Informatics and Systems. – 2018. – T. 17. – C. 1-8. DOI: [10.1016/j.suscom.2017.12.002](https://doi.org/10.1016/j.suscom.2017.12.002)
- [96] Sengupta K. *Integrated circuits for terahertz communication beyond 100 GHz: Are we there yet?* // 2019 IEEE International Conference on Communications Workshops (ICC Workshops). – IEEE, 2019. – C. 1-6. DOI: [10.1109/ICCW.2019.8757165](https://doi.org/10.1109/ICCW.2019.8757165)
- [97] Ragonese E. *Design Techniques for Low-Voltage RF/mm-Wave Circuits in Nanometer CMOS Technologies* // Applied Sciences. – 2022. – T. 12. – №. 4. – C. 2103. DOI: [10.3390/app12042103](https://doi.org/10.3390/app12042103)

- [98] Fujishima M. *Key technologies for THz wireless link by silicon CMOS integrated circuits* // Photonics. – Multidisciplinary Digital Publishing Institute, 2018. – T. 5. – №. 4. – C. 50. DOI: [10.3390/photonics5040050](https://doi.org/10.3390/photonics5040050)
- [99] Thomson J. J. *On the theory of electric conduction through thin metallic films* // Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. –1901. –V. 11 –№.2. – p. 120. URL: <https://www.biodiversitylibrary.org/item/108210#page/140/mode/1up>
- [100] Ciofi I. et al. *RC benefits of advanced metallization options* // IEEE Transactions on Electron Devices. – 2019. – T. 66. – №. 5. – C. 2339-2345. DOI: 10.1109/TED.2019.2902031
- [101] Fuchs K. *The conductivity of thin metallic films according to the electron theory of metals* // Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. – Cambridge University Press, 1938. – T. 34. – №. 1. – C. 100-108. DOI: [10.1017/S0305004100019952](https://doi.org/10.1017/S0305004100019952)
- [102] Lucas M. S. P. *Electrical conductivity of thin metallic films with unlike surfaces* // Journal of Applied Physics. – 1965. – T. 36. – №. 5. – C. 1632-1635. DOI: [10.1063/1.1703100](https://doi.org/10.1063/1.1703100)
- [103] Sondheimer, E.H. *The mean free path of electrons in metals* // Advances in Physics. –1952. –T.1. – №.1. – C. 1–42. DOI: 10.1080/00018735200101151
- [104] Sandomirskii V. B. *Quantum size effect in a semimetal film* // Sov. Phys. JETP. – 1967. – T. 25. – №. 1. – C. 101-106.
- [105] Munoz R. C., Arenas C. *Size effects and charge transport in metals: Quantum theory of the resistivity of nanometric metallic structures arising from electron scattering by grain boundaries and by rough surfaces* // Applied Physics Reviews. – 2017. – T. 4. – №. 1. –C. 011102. DOI: [10.1063/1.4974032](https://doi.org/10.1063/1.4974032)
- [106] Calecki D. *Galvanomagnetic phenomena and surface roughness in thin metallic films* // Physical Review B. – 1990. – T. 42. – №. 11. – C. 6906. DOI: [10.1103/PhysRevB.42.6906](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.42.6906)
- [107] Sheng L., Xing D. Y., Wang Z. D. *Transport theory in metallic films: crossover from the classical to the quantum regime* // Physical Review B. – 1995. – T. 51. – №. 11. – C. 7325. DOI: [10.1103/PhysRevB.51.7325](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.51.7325)
- [108] Barmak K. et al. *Grain growth and the puzzle of its stagnation in thin films: The curious tale of a tail and an ear* // Progress in Materials Science. – 2013. – T. 58. – №. 7. – C. 987-1055. DOI: [10.1016/j.pmatsci.2013.03.004](https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2013.03.004)
- [109] Camacho J. M., Oliva A. I. *Surface and grain boundary contributions in the electrical resistivity of metallic nanofilms* // Thin solid films. – 2006. – T. 515. – №. 4. – C. 1881-1885. DOI: [10.1016/j.tsf.2006.07.024](https://doi.org/10.1016/j.tsf.2006.07.024)

- [110] Mori T. et al. *Fabrication of silver thin film for single-crystalline nanopillar: effects of thickness and grain size* // Applied Physics A. – 2015. – Т. 121. – С. 1359-1363. DOI: [10.1007/s00339-015-9497-1](https://doi.org/10.1007/s00339-015-9497-1)
- [111] Backofen R. et al. *Capturing the complex physics behind universal grain size distributions in thin metallic films* // Acta Materialia. – 2014. – Т. 64. – С. 72-77. DOI: [10.1016/j.actamat.2013.11.034](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2013.11.034)
- [112] Kim G. et al. *New approaches to produce large-area single crystal thin films* // Advanced Materials. – 2023. – Т. 35. – №. 4. – С. 2203373. DOI: [10.1002/adma.202203373](https://doi.org/10.1002/adma.202203373)
- [113] Mayadas A. F., Shatzkes M., Janak J. F. *Electrical resistivity model for polycrystalline films: the case of specular reflection at external surfaces* // Applied Physics Letters. – 1969. – Т. 14. – №. 11. – С. 345-347. DOI: [10.1063/1.1652680](https://doi.org/10.1063/1.1652680)
- [114] Mayadas A. F., Shatzkes M. *Electrical-resistivity model for polycrystalline films: the case of arbitrary reflection at external surfaces* // Physical review B. – 1970. – Т. 1. – №. 4. – С. 1382. DOI: [10.1103/PhysRevB.1.1382](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.1.1382)
- [115] Arenas C. et al. *The effect of electron scattering from disordered grain boundaries on the resistivity of metallic nanostructures* // Applied Surface Science. – 2015. – Т. 329. – С. 184-196. DOI: [10.1016/j.apsusc.2014.12.045](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2014.12.045)
- [116] Xin Z., Xiao-Hui S., Dian-Lin Z. *Thickness dependence of grain size and surface roughness for dc magnetron sputtered Au films* // Chinese Physics B. – 2010. – Т. 19. – №. 8. – С. 086802. DOI: [10.1088/1674-1056/19/8/086802](https://doi.org/10.1088/1674-1056/19/8/086802)
- [117] Dulmaa A. et al. *On the grain size-thickness correlation for thin films* // Acta Materialia. – 2021. – Т. 212. – С. 116896. DOI: [10.1016/j.actamat.2021.116896](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.116896)
- [118] Sambles J. R., Elsom K. C., Jarvis D. J. *The electrical resistivity of gold films* // Philosophical transactions of the Royal Society of London. Series A, mathematical and physical sciences. – 1982. – Т. 304. – №. 1486. – С. 365-396. DOI: [10.1098/rsta.1982.0016](https://doi.org/10.1098/rsta.1982.0016)
- [119] Пятайкин И. И. *Влияние внутреннего размерного эффекта в поликристаллических пленках металлов на коэффициенты отражения, прохождения и поглощения в них электромагнитных волн СВЧ диапазона* // Журнал радиоэлектроники. – 2020. – №. 10. – С. 1-29. DOI: [10.30898/1684-1719.2020.10.5](https://doi.org/10.30898/1684-1719.2020.10.5)
- [120] Васильева А. Б. и др. *Дифференциальные и интегральные уравнения, вариационное исчисление в примерах и задачах.* – 2-е изд., испр. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. – 432с.
- [121] Калиткин Н.Н. *Численные методы.* М.: Наука, 1978. –512 с.

- [122] Тихонравов А.В. *Синтез слоистых сред с заданными амплитудно-фазовыми свойствами* // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1985. – Т. 25, № 11. – С. 1647–1688. DOI: [10.1016/0041-5553\(85\)90009-6](https://doi.org/10.1016/0041-5553(85)90009-6)
- [123] Hiebel M. *Fundamentals of vector network analysis*. – Rohde & Schwarz, 2007. URL: <https://d-nb.info/981583180/04>
- [124] Eul H. J., Schiek B. *A generalized theory and new calibration procedures for network analyzer self-calibration* // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – 1991. – Т. 39. – №. 4. – С. 724-731. DOI: 10.1109/22.76439
- [125] R&S®ZVA / R&S®ZVB / R&S®ZVT *Vector Network Analyzers Operating Manual*. – Mühlendorf, 2020. –1182 с.
- [126] Rukin S. N. *Pulsed power technology based on semiconductor opening switches: A review* // Review of scientific instruments. – 2020. – Т. 91. – №. 1. DOI: [10.1063/1.5128297](https://doi.org/10.1063/1.5128297)
- [127] Gundersen M. et al. *A review of diverse academic research in nanosecond pulsed power and plasma science* // IEEE Transactions on Plasma Science. – 2020. – Т. 48. – №. 4. – С. 742-748. DOI: 10.1109/TPS.2020.2972934
- [128] Pang, L., et al. *A compact series-connected SiC MOSFETs module and its application in high voltage nanosecond pulse generator* // IEEE Transactions on Industrial Electronics. – 2019. – Т. 66. – №. 12. – С. 9238-9247. DOI: 10.1109/TIE.2019.2891441
- [129] Wang, Y., et al. *Heat management technology for solid-state high voltage and high repetitive pulse generators: Towards better effects and reliability* // High Voltage. – 2023. – Т. 9. – №. 1. – С. 2-21. DOI: 10.1049/hve2.12322
- [130] Butkus P. et al. *Concepts and capabilities of in-house built nanosecond pulsed electric field (nsPEF) generators for electroporation: State of art* // Applied Sciences. – 2020. – Т. 10. – №. 12. – С. 4244. DOI: 10.1049/hve2.12322
- [131] Orlacchio, R. et al. *High-voltage 10 ns delayed paired or bipolar pulses for in vitro bioelectric experiments* // Bioelectrochemistry. – 2021. – Т. 137. – С. 107648. DOI: [10.1016/j.bioelechem.2020.107648](https://doi.org/10.1016/j.bioelechem.2020.107648)
- [132] Kovalchuk B. M., et al. *Techniques for shaping of the output pulse in high current generators* // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 2019. – Т. 923. – С. 97-103. DOI: [10.1016/j.nima.2019.01.083](https://doi.org/10.1016/j.nima.2019.01.083)
- [133] Катаев. И.Г. *Ударные электромагнитные волны*. М.: Сов. радио, 1963. –152 с.
- [134] Островский Л. А. *Образование и развитие ударных электромагнитных волн в линиях передачи с ненасыщенным ферритом* // ЖТФ. – 1963. – Т. 33. – №. 9. – С. 1080.

- [135] Гапонов А. В., Островский Л. А., Фрейдман Г. И. *Ударные электромагнитные волны* // Изв. вузов. Радиофизика. – 1967. – Т. 10. – №. 9-10. – С. 1376-1413.
- [136] Месяц Г. А. *Импульсная энергетика и электроника*. –М.: Наука, 2004. –704 с.
- [137] Driessen A. et al. *Design and implementation of a compact 20-kHz nanosecond magnetic pulse compression generator* // IEEE Transactions on Plasma Science. – 2017. – Т. 45. – №. 12. – С. 3288-3299. DOI: [10.1109/TPS.2017.2771275](https://doi.org/10.1109/TPS.2017.2771275)
- [138] Gusev A. I. et al. *A 30 GW subnanosecond solid-state pulsed power system based on generator with semiconductor opening switch and gyromagnetic nonlinear transmission lines* // Review of Scientific Instruments. – 2018. – Т. 89. – №. 9. DOI: [10.1063/1.5048111](https://doi.org/10.1063/1.5048111)
- [139] Huang L. et al. *Field-line coupling method for the simulation of gyromagnetic nonlinear transmission line based on the Maxwell-LLG system* // IEEE Transactions on Plasma Science. – 2020. – Т. 48. – №. 11. – С. 3847-3853. DOI: [10.1109/TPS.2020.3029524](https://doi.org/10.1109/TPS.2020.3029524)
- [140] Gao J. et al. *A compact solid-state high voltage pulse generator* // Review of Scientific Instruments. – 2019. – Т. 90. – №. 1. DOI: [10.1063/1.5053780](https://doi.org/10.1063/1.5053780)
- [141] Karelin S. Y. et al. *Radio frequency oscillations in gyrotropic nonlinear transmission lines* // Plasma. – 2019. – Т. 2. – №. 2. – С. 258-271. DOI: [10.3390/plasma2020018](https://doi.org/10.3390/plasma2020018)
- [142] Priputnev P. et al. *2-D and 3-D numerical simulation of ferrite loaded coaxial transmission lines* // 2020 7th International Congress on Energy Fluxes and Radiation Effects (EFRE). – IEEE, 2020. – С. 434-438. DOI: [10.1109/EFRE47760.2020.9241904](https://doi.org/10.1109/EFRE47760.2020.9241904)
- [143] Ulmaskulov M. R. et al. *Multistage converter of high-voltage subnanosecond pulses based on nonlinear transmission lines* // Journal of Applied Physics. – 2019. – Т. 126. – №. 8. DOI: [10.1063/1.5110438](https://doi.org/10.1063/1.5110438)
- [144] Alichkin E. A. et al. *Picosecond solid-state generator with a peak power of 50 GW* // Review of Scientific Instruments. – 2020. – Т. 91. – №. 10. DOI: [10.1063/5.0017980](https://doi.org/10.1063/5.0017980)
- [145] Hamdan A., Diamond J., Herrmann A. *Dynamics of a pulsed negative nanosecond discharge on water surface and comparison with the positive discharge* // Journal of Physics Communications. – 2021. – Т. 5. – №. 3. – С. 035005. DOI: [10.1088/2399-6528/abe953](https://doi.org/10.1088/2399-6528/abe953)
- [146] Shcherbanev S. A., et al. *Jetting axial flow induced by nanosecond repetitively pulsed discharges in quiescent ambient air* // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2022. – Т. 55. – №. 38. – С. 385202. DOI: [10.1088/1361-6463/ac7dcd](https://doi.org/10.1088/1361-6463/ac7dcd)
- [147] Minesi N., et al. *Fully ionized nanosecond discharges in air: the thermal spark* // Plasma Sources Science and Technology. – 2020. – Т. 29. – №. 8. – С. 085003. DOI: [10.1088/1361-6595/ab94d3](https://doi.org/10.1088/1361-6595/ab94d3)

- [148] Pai D. Z., Lacoste D. A., Laux C. O. *Transitions between corona, glow, and spark regimes of nanosecond repetitively pulsed discharges in air at atmospheric pressure* // Journal of Applied Physics. – 2010. – T. 107. – №. 9. – C. 093303. DOI: [10.1063/1.3309758](https://doi.org/10.1063/1.3309758)
- [149] Grosse K., Falke M., von Keudell A. *Ignition and propagation of nanosecond pulsed plasmas in distilled water – Negative vs positive polarity applied to a pin electrode* // Journal of Applied Physics. – 2021. – T. 129. – №. 21. – C. 213302. DOI: [10.1063/5.0045697](https://doi.org/10.1063/5.0045697)
- [150] Bokhan, P. A et al. *Nanosecond pulse breakdown in noble gases* // Physics of Plasmas. – 2023. – T. 30. – №. 4. – C. 043504. DOI: [10.1063/5.0138062](https://doi.org/10.1063/5.0138062)
- [151] Zherlitsyn A. A., Kumpyak E. V. *Multichannel switching in a multigap gas switch at atmospheric pressure* // Physical Review Accelerators and Beams. – 2020. – T. 23. – №. 10. – C. 100402. DOI: [10.1103/PhysRevAccelBeams.23.100402](https://doi.org/10.1103/PhysRevAccelBeams.23.100402)
- [152] Gushchin M., et al. *Gigantic coaxial line for experimental studies of the interaction of nanosecond electromagnetic pulses with an ionized gas medium* // Applied Sciences. – 2022. – T. 12. – №. 1. – C. 59. DOI: [10.3390/app12010059](https://doi.org/10.3390/app12010059)
- [153] Zherlitsyn A. A., Kumpyak E. V., Smorudov G. V. *Study of the Stability of Triggering of a Controlled Multigap Spark Switch for Capacitive Energy Storage with Charging Voltage up to 100 kV and Energy Release Time on the Order of 100 ns* // Russian Physics Journal. – 2019. – T. 62. – C. 1154-1160. DOI: [10.1007/s11182-019-01830-9](https://doi.org/10.1007/s11182-019-01830-9)
- [154] Liu X. *Comparison of gas spark switch trigger methods through resistor and inductor for FLTD* // Journal of Fusion Energy. – 2019. – T. 38. – C. 213-218. DOI: [10.1007/s10894-019-00211-x](https://doi.org/10.1007/s10894-019-00211-x)
- [155] Chavda K. *Plasma Assisted Combustion: A Review* // IOSR Journal of Applied Physics, – 2021. – T.13. – №. 4. – C. 26-35. DOI: 10.9790/4861-1304022635
- [156] Pavan C. A., Guerra-Garcia C. *Nanosecond pulsed discharge dynamics during passage of a transient laminar flame* // Plasma Sources Science and Technology. – 2022. – T. 31. – №. 11. – C. 115016. DOI: [10.1088/1361-6595/aca0bc](https://doi.org/10.1088/1361-6595/aca0bc)
- [157] Beebe S. J., Sain N. M., Ren W. *Induction of cell death mechanisms and apoptosis by nanosecond pulsed electric fields (nsPEFs)* // Cells. – 2013. – T. 2. – №. 1. – C. 136-162. DOI: [10.3390/cells2010136](https://doi.org/10.3390/cells2010136)
- [158] Zaiter J. J. *An Overview of Pulsed Power System Design and Applications* // School of Engineering and Computational Sciences. Senior Honors Theses. – C. 1-32. URL: <https://digitalcommons.liberty.edu/honors/1051>

- [159] Haberkorn I., et al. *Enhancing single-cell bioconversion efficiency by harnessing nanosecond pulsed electric field processing* // *Biotechnology Advances*. – 2021. – Т. 53. – С. 107780. DOI: [10.1016/j.biotechadv.2021.107780](https://doi.org/10.1016/j.biotechadv.2021.107780)
- [160] Choromańska, A., et al. *Modifications of plasma membrane organization in cancer cells for targeted therapy* // *Molecules*. – 2021. – Т. 26. – №. 7. – С. 1850. DOI: [10.3390/molecules26071850](https://doi.org/10.3390/molecules26071850)
- [161] Carr, L., et al. *A nanosecond pulsed electric field (nsPEF) can affect membrane permeabilization and cellular viability in a 3D spheroids tumor model* // *Bioelectrochemistry*. – 2021. – Т. 141. – С. 107839. DOI: [10.1016/j.bioelechem.2021.107839](https://doi.org/10.1016/j.bioelechem.2021.107839)
- [162] Alpert Y., Jerby E. *Coupled thermal-electromagnetic model for microwave heating of temperature-dependent dielectric media* // *IEEE Transactions on plasma science*. – 1999. – Т. 27. – №. 2. – С. 555-562. DOI: [10.1109/27.772285](https://doi.org/10.1109/27.772285)
- [163] Zhong J. et al. *Coupled electromagnetic and heat transfer ODE model for microwave heating with temperature-dependent permittivity* // *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*. – 2016. – Т. 64. – №. 8. – С. 2467-2477. DOI: [10.1109/TMTT.2016.2584613](https://doi.org/10.1109/TMTT.2016.2584613)
- [164] Sid A., Debbache D., Bendib A. *Nonlinear propagation of ultraintense and ultrashort laser pulses in a plasma channel limited by metallic walls* // *Physics of plasmas*. – 2006. – Т. 13. – №. 8. DOI: [10.1063/1.2219431](https://doi.org/10.1063/1.2219431)
- [165] Andreev N. E. et al. *Nonlinear propagation of short intense laser pulses in a hollow metallic waveguide* // *Physical Review E*. – 2001. – Т. 64. – №. 1. – С. 016404. DOI: [10.1103/PhysRevE.64.016404](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.64.016404)
- [166] Peñano J. R. et al. *Transmission of intense femtosecond laser pulses into dielectrics* // *Physical Review E*. – 2005. – Т. 72. – №. 3. – С. 036412. DOI: [10.1103/PhysRevE.72.036412](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.72.036412)
- [167] Ovchinnikov K. N., Uryupin S. A. *Effect of heat transfer on the penetration of an electromagnetic pulse into a plasma layer and the inverse skin effect* // *Contributions to Plasma Physics*. – 2019. – Т. 59. – №. 7. – С. e201800119. DOI: [10.1002/ctpp.201800119](https://doi.org/10.1002/ctpp.201800119)
- [168] Рез И. С., Поплавко Ю. М. *Диэлектрики: основные свойства и применения в электронике*. – М.: «Радио и связь», 1989. – 287 с.
- [169] Квасников, И. А. *Термодинамика и статистическая физика. Т. 1: Теория равновесных систем: Термодинамика: Учебное пособие. Изд. 2-е, суц. перераб. и доп.* – М.: Едиториал УРСС, 2002. – 240 с.

- [170] Ахманов С. А. *Метод Хохлова в теории нелинейных волн* // Успехи физических наук. – 1986. – Т. 149. – №. 3. – С. 361-390. DOI: [10.3367/UFNr.0149.198607a.0361](https://doi.org/10.3367/UFNr.0149.198607a.0361)
- [171] Иоссель Ю. Я., Кочанов Э. С., Струнский М. Г. *Расчет электрической емкости. 2-е изд., перераб. и доп.* –Л.: Энергоатомиздат. Ленингр. отд-ние, 1981. – 288 с.
- [172] Калантаров П. Л., Цейтлин Л. А. *Расчет индуктивностей: Справочная книга. 3-е изд., перераб. и доп.* –Л.: Энергоатомиздат. Ленингр. отд-ние, 1986. –488 с.
- [173] Fayos-Fernández J. et al. *Temperature-dependent complex permittivity of several electromagnetic susceptors at 2.45 GHz* // Delft: AMPERE Newsletter Editor. – 2018. – Т. 95. – С. 2-8. URL: <https://www.researchgate.net/publication/376199651>
- [174] URL: <https://gchem.cm.utexas.edu/data/section2.php?target=heat-capacities.php>
- [175] Luo T. et al. *Improvement of quality factor of SrTiO₃ dielectric ceramics with high dielectric constant using Sm₂O₃* // Journal of the American Ceramic Society. – 2019. – Т. 102. – №. 7. – С. 3849-3853. DOI: 10.1111/jace.16415
- [176] de Ligny D., Richet P. *High-temperature heat capacity and thermal expansion of SrTiO₃ and SrZrO₃ perovskites* // Physical Review B. – 1996. – Т. 53. – №. 6. – С. 3013. DOI: [10.1103/PhysRevB.53.3013](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.53.3013)
- [177] Yuan Y. et al. *Effects of compound coupling agents on the properties of PTFE/SiO₂ microwave composites* // Journal of Materials Science: Materials in Electronics. – 2017. – Т. 28. – С. 3356-3363. DOI: [10.1007/s10854-016-5929-8](https://doi.org/10.1007/s10854-016-5929-8)
- [178] Krupka J. et al. *A dielectric resonator for measurements of complex permittivity of low loss dielectric materials as a function of temperature* // Measurement Science and Technology. – 1998. – Т. 9. – №. 10. – С. 1751. DOI: [10.1088/0957-0233/9/10/015](https://doi.org/10.1088/0957-0233/9/10/015)
- [179] URL: <https://www.edplastics.co.uk/PTFE.htm>
- [180] Li L. et al. *Dielectric properties of CaCu₃Ti₄O₁₂, Ba (Fe_{1/2}Nb_{1/2})O₃, and Sr (Fe_{1/2}Nb_{1/2})O₃ giant permittivity ceramics at microwave frequencies* // Journal of Applied Physics. – 2012. – Т. 111. – №. 6. DOI: [10.1063/1.3698627](https://doi.org/10.1063/1.3698627)
- [181] Jacob K. T. et al. *High-temperature heat capacity and heat content of CaCu₃Ti₄O₁₂ (CCTO)* // Journal of alloys and compounds. – 2009. – Т. 488. – №. 1. – С. 35-38. DOI: [10.1016/j.jallcom.2009.09.010](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2009.09.010)
- [182] URL: <https://loradchemical.com/products/calcium-copper-titanium-oxide>
- [183] Berdel K. et al. *Temperature dependence of the permittivity and loss tangent of high-permittivity materials at terahertz frequencies* // IEEE transactions on microwave theory and techniques. – 2005. – Т. 53. – №. 4. – С. 1266-1271. DOI: 10.1109/TMTT.2005.845752

- [184] Mohapatra S. et al. *A study on sintered TiO₂ and TiO₂/SiC composites synthesized through chemical reaction based solution method* // Journal of composite materials. – 2013. – Т. 47. – №. 24. – С. 3081-3089. DOI: [10.1177/0021998312462430](https://doi.org/10.1177/0021998312462430)
- [185] Smith S. J. et al. *Heat capacities and thermodynamic functions of TiO₂ anatase and rutile: Analysis of phase stability* // American Mineralogist. – 2009. – Т. 94. – №. 2-3. – С. 236-243. DOI: [10.2138/am.2009.3050](https://doi.org/10.2138/am.2009.3050)
- [186] Воробьев Г. А., Похолков Ю. П., Королев Ю. Д., Меркулов В. И. *Физика диэлектриков (область сильных полей): Учебное пособие. 2-е изд.* – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2011. – 245 с.
- [187] Zhao L., Su J. C., Liu C. L. *Review of developments on polymers' breakdown characteristics and mechanisms on a nanosecond time scale* // AIP advances. – 2020. – Т. 10. – №. 3. DOI: [10.1063/1.5110273](https://doi.org/10.1063/1.5110273)
- [188] Liu J. et al. *Energy Storage Properties of Sol–Gel-Processed SrTiO₃ Films* // Materials. – 2022. – Т. 16. – №. 1. – С. 31. DOI: [10.3390/ma16010031](https://doi.org/10.3390/ma16010031)
- [189] Jue W., Ping Y., Bin L. *High energy density dielectrics for Transmission Line* // 2007 16th IEEE International Pulsed Power Conference. – IEEE, 2008. – Т. 1. – С. 514-518. DOI: 10.1109/PPPS.2007.4345694
- [190] Chaikovskiy S. A., Chuvatin A. S., Oreshkin V. I. *A load current multiplier of the МИГ terawatt generator* // Instruments and experimental techniques. – 2012. – Т. 55. – С. 209-217. DOI: [10.1134/S0020441212010150](https://doi.org/10.1134/S0020441212010150)
- [191] Al'bikov Z. A. et al. *Angara-5-1 experimental complex* // Soviet Atomic Energy. – 1990. – Т. 68. – №. 1. – С. 34-45. DOI: [10.1007/BF02069720](https://doi.org/10.1007/BF02069720)
- [192] Artyomov A. P. et al. *A synchronized X-pinch driver* // Instruments and Experimental Techniques. – 2014. – Т. 57. – С. 461-474. DOI: [10.1134/S0020441214040010](https://doi.org/10.1134/S0020441214040010)
- [193] Luchinskii A. V. et al. *Multipurpose transformer-type pulse generator* // Russian physics journal. – 1997. – Т. 40. – №. 12. – С. 1178-1184. DOI: [10.1007/BF02524306](https://doi.org/10.1007/BF02524306)
- [194] Bugaev S. P. et al. *A terawatt pulse-power generator with a microsecond plasma-opening switch* // IEEE transactions on plasma science. – 1990. – Т. 18. – №. 1. – С. 115-118. DOI: 10.1109/27.45513
- [195] Weiping X. et al. *Design and performance of a pulsed power-driven X-ray source for flash radiography* // Physical Review Accelerators and Beams. – 2021. – Т. 24. – №. 11. – С. 110401. DOI: [10.1103/PhysRevAccelBeams.24.110401](https://doi.org/10.1103/PhysRevAccelBeams.24.110401)
- [196] Spielman R. B. et al. *Pulsed power performance of PBFA Z* // Digest of Technical Papers. 11th IEEE International Pulsed Power Conference (Cat. No. 97CH36127). – IEEE, 1997. – Т. 1. – С. 709-714. DOI: 10.1109/PPC.1997.679426

- [197] Stygar W. A. et al. *55-TW magnetically insulated transmission-line system: Design, simulations, and performance* // Physical Review Special Topics-Accelerators and Beams. – 2009. – T. 12. – №. 12. – C. 120401. DOI: [10.1103/PhysRevSTAB.12.120401](https://doi.org/10.1103/PhysRevSTAB.12.120401)
- [198] Hoppe P. et al. *Energy balance of the TW pulsed power generator KALIF-HELIA* // PPS-2001 Pulsed Power Plasma Science 2001. 28th IEEE International Conference on Plasma Science and 13th IEEE International Pulsed Power Conference. Digest of Papers (Cat. No. 01CH37251). – IEEE, 2001. – T. 1. – C. 596-599. DOI: 10.1109/PPS.2001.1002165
- [199] Zavyalov N. V. et al. *High-current pulsed electron accelerator “Gamma-1” with output power up to 1.5 TW* // International Journal of Modern Physics: Conference Series. – The Authors, 2014. – T. 32. – C. 1460330. DOI: 10.1142/S2010194514603305
- [200] Zavyalov N. V. et al. *Calculations and experimental investigation of pulse transmission system in the typical module of the facility “Gamma”* // International Journal of Modern Physics: Conference Series. – The Authors, 2014. – T. 32. – C. 1460336. DOI: 10.1142/S2010194514603366
- [201] Cuneo M. E. et al. *Observation of reflected waves on the SABRE positive polarity inductive adder MITL* // Ninth IEEE International Pulsed Power Conference – IEEE, Sandia National Labs., Albuquerque, NM (United States), 1993. DOI: 10.1109/PPC.1993.513365
- [202] Savage M. E. et al. *Considerations for improvements to the 25 TW Saturn high-current driver* // 2019 IEEE Pulsed Power & Plasma Science (PPPS). – IEEE, Orlando, FL, USA, 2019. – C. 1-5. DOI: 10.1109/PPPS34859.2019.9009671
- [203] Ramirez J. J., Prestwich K. R., Smith I. D. *High-power, short-pulse generators based on induction voltage adders* // Proceedings of the IEEE. – 1992. – T. 80. – №. 6. – C. 946-957. DOI: 10.1109/5.149457
- [204] Savage M. E. et al. *An overview of pulse compression and power flow in the upgraded Z pulsed power driver* // 2007 16th IEEE international pulsed power conference. – IEEE, Albuquerque, NM, USA, 2008. – T. 2. – C. 979-984. DOI: 10.1109/PPPS.2007.4652354
- [205] Kolgan V. P. *Application of the principle of minimizing the derivative to the construction of finite-difference schemes for computing discontinuous solutions of gas dynamics* // Journal of Computational Physics. – 2011. – T. 230. – №. 7. – C. 2384-2390. DOI: [10.1016/j.jcp.2010.12.033](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2010.12.033)
- [206] Godunov S. K., Bohachevsky I. *Finite difference method for numerical computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics* // Matematičeskij sbornik. – 1959. – T. 47. – №. 3. – C. 271-306. URL: <https://hal.science/hal-01620642>
- [207] Haacke G. *New figure of merit for transparent conductors* // Journal of Applied Physics. – 1976. – T. 47. – №. 9. – C. 4086-4089. DOI: [10.1063/1.323240](https://doi.org/10.1063/1.323240)

- [208] Gordon R. G. *Criteria for choosing transparent conductors* // MRS bulletin. – 2000. – T. 25. – №. 8. – C. 52-57. DOI: [10.1557/mrs2000.151](https://doi.org/10.1557/mrs2000.151)
- [209] Reyes D. C. et al. *Room-temperature ITO electrodes evaluated for organic solar cells using a photonic flux density figure of merit* // Journal of Materials Science: Materials in Electronics. – 2018. – T. 29. – №. 13. – C. 11059-11064. DOI: [10.1007/s10854-018-9188-8](https://doi.org/10.1007/s10854-018-9188-8)
- [210] URL: https://www.visionteksystems.co.uk/ito_conductive_film.htm
- [211] Chauhan R. N. et al. *Effect of sheet resistance and morphology of ITO thin films on polymer solar cell characteristics* // International Journal of Photoenergy. – 2012. – T. 2012. DOI: [10.1155/2012/879261](https://doi.org/10.1155/2012/879261)
- [212] Yang Y. et al. *High-Performance Organic Light-Emitting Diodes Using ITO Anodes Grown on Plastic by Room-Temperature Ion-Assisted Deposition* // Advanced Materials. – 2004. – T. 16. – №. 4. – C. 321-324. DOI: [10.1002/adma.200305727](https://doi.org/10.1002/adma.200305727)
- [213] Mazur M. et al. *Influence of thickness on transparency and sheet resistance of ITO thin films* // The Eighth International Conference on Advanced Semiconductor Devices and Microsystems. – IEEE, Smolenice, Slovakia, 2010. – C. 65-68. DOI: [10.1109/ASDAM.2010.5666348](https://doi.org/10.1109/ASDAM.2010.5666348)
- [214] Sibin K. P. et al. *Highly transparent and conducting ITO/Ag/ITO multilayer thin films on FEP substrates for flexible electronics applications* // Solar Energy Materials and Solar Cells. – 2017. – T. 172. – C. 277-284. DOI: [10.1016/j.solmat.2017.08.001](https://doi.org/10.1016/j.solmat.2017.08.001)
- [215] Li H. et al. *Improvement in the Figure of Merit of ITO-Metal-ITO Sandwiched Films on Poly Substrate by High-Power Impulse Magnetron Sputtering* // Coatings. – 2021. – T. 11. – №. 2. – C. 144. DOI: [10.3390/coatings11020144](https://doi.org/10.3390/coatings11020144)
- [216] Spinelli P. et al. *Transparent conductive electrodes based on co-sputtered ultra-thin metal layers for semi-transparent perovskites solar cells* // Applied Physics Letters. – 2021. – T. 118. – №. 24. – C. 241110. DOI: [10.1063/5.0052209](https://doi.org/10.1063/5.0052209)
- [217] Bae S. K. et al. *Transparent ultra-thin silver electrodes formed via a maskless evaporation process for applications in flexible organic light-emitting devices* // Nano Energy. – 2020. – T. 71. – C. 104649. DOI: [10.1016/j.nanoen.2020.104649](https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2020.104649)
- [218] Huang J. et al. *Seed-layer-free growth of ultra-thin Ag transparent conductive films imparts flexibility to polymer solar cells* // Solar Energy Materials and Solar Cells. – 2018. – T. 184. – C. 73-81. DOI: [10.1016/j.solmat.2018.04.002](https://doi.org/10.1016/j.solmat.2018.04.002)
- [219] Tuo S. et al. *Stabilisation of the electrical and optical properties of dielectric/Cu/dielectric structures through the use of efficient dielectric and Cu: Ni alloy* // Journal of Alloys and Compounds. – 2017. – T. 729. – C. 109-116. DOI: [10.1016/j.jallcom.2017.09.087](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.09.087)

- [220] Lee D. et al. *Highly flexible, transparent and conductive ultrathin silver film heaters for wearable electronics applications* // Thin Solid Films. – 2020. – T. 697. – C. 137835. DOI: [10.1016/j.tsf.2020.137835](https://doi.org/10.1016/j.tsf.2020.137835)
- [221] Kim B. K. et al. *Simulation and optimization of layer thickness of amorphous oxide SIZO/Ag/SIZO multilayer to enhance transmittance of transparent electrodes without sacrificing sheet resistance* // Journal of Alloys and Compounds. – 2019. – T. 798. – C. 622-627. DOI: [10.1016/j.jallcom.2019.05.254](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.05.254)
- [222] Park J. et al. *Optimization of laser-patterning process and module design for transparent amorphous silicon thin-film module using thin OMO back electrode* // Solar Energy. – 2020. – T. 201. – C. 75-83. DOI: [10.1016/j.solener.2020.02.092](https://doi.org/10.1016/j.solener.2020.02.092)
- [223] Zhang Y. et al. *Low-Temperature Oxide/Metal/Oxide Multilayer Films as Highly Transparent Conductive Electrodes for Optoelectronic Devices* // ACS Applied Energy Materials. – 2021. – T. 4. – №. 7. – C. 6553-6561. DOI: [10.1021/acsaem.1c00586](https://doi.org/10.1021/acsaem.1c00586)
- [224] Prakasarao C. S. et al. *Investigation of ultra-thin and flexible Au–Ag–Au transparent conducting electrode* // Current Applied Physics. – 2020. – T. 20. – №. 10. – C. 1118-1124. DOI: [10.1016/j.cap.2020.06.016](https://doi.org/10.1016/j.cap.2020.06.016)
- [225] Stec H. M., Hatton R. A. *Widely applicable coinage metal window electrodes on flexible polyester substrates applied to organic photovoltaics* // ACS Applied Materials & Interfaces. – 2012. – T. 4. – №. 11. – C. 6013-6020. DOI: [10.1021/am3016763](https://doi.org/10.1021/am3016763)
- [226] Mouchaal Y. et al. *Broadening of the transmission range of dielectric/metal multilayer structures by using different metals* // Vacuum. – 2015. – T. 111. – C. 32-41. DOI: [10.1016/j.vacuum.2014.09.013](https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2014.09.013)
- [227] Schubert S. et al. *Improvement of transparent metal top electrodes for organic solar cells by introducing a high surface energy seed layer* // Advanced Energy Materials. – 2013. – T. 3. – №. 4. – C. 438-443. DOI: [10.1002/aenm.201200903](https://doi.org/10.1002/aenm.201200903)
- [228] Dimitrov D. et al. *Atomic layer-deposited Al-doped ZnO thin films for display applications* // Coatings. – 2020. – T. 10. – №. 6. – C. 539. DOI: [10.3390/coatings10060539](https://doi.org/10.3390/coatings10060539)
- [229] Kumar K. et al. *Evaluation of the physical, optical, and electrical properties of SnO₂: F thin films prepared by nebulized spray pyrolysis for optoelectronics* // Journal of Materials Science: Materials in Electronics. – 2018. – T. 29. – №. 5. – C. 3648-3656. DOI: [10.1007/s10854-017-8295-2](https://doi.org/10.1007/s10854-017-8295-2)
- [230] Sivakumar P. et al. *Effect of Ti doping on structural, optical and electrical properties of SnO₂ transparent conducting thin films deposited by sol-gel spin coating* // Optical Materials. – 2021. – T. 113. – C. 110845. DOI: [10.1016/j.optmat.2021.110845](https://doi.org/10.1016/j.optmat.2021.110845)

- [231] Hu L. et al. *La_{2/3}Sr_{1/3}VO₃ Thin Films: A New p-Type Transparent Conducting Oxide with Very High Figure of Merit* // *Advanced Electronic Materials*. – 2018. – T. 4. – №. 3. – C. 1700476. DOI: [10.1002/aelm.201700476](https://doi.org/10.1002/aelm.201700476)
- [232] Lee C. J. et al. *Characteristic difference between ITO/ZrCu and ITO/Ag bi-layer films as transparent electrodes deposited on PET substrate* // *Applied surface science*. – 2010. – T. 257. – №. 1. – C. 239-243. DOI: [10.1016/j.apsusc.2010.06.074](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2010.06.074)
- [233] Lin H. K., Hong S. Z. *Effects of Mg content and annealing treatment on optical and electrical properties of CuMg and ITO/CuMg metallic glass films* // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2018. – T. 731. – C. 248-252. DOI: [10.1016/j.jallcom.2017.09.273](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.09.273)
- [234] Chang C. M. et al. *Effects of different annealing processes on optoelectronic and bending fatigue properties of AgZr and ITO/AgZr thin film metallic glass* // *Optics and Lasers in Engineering*. – 2019. – T. 115. – C. 100-106. DOI: [10.1016/j.optlaseng.2018.11.009](https://doi.org/10.1016/j.optlaseng.2018.11.009)
- [235] Lin H. K. et al. *Effects of Mg content and thermal treatments on optoelectronic and bending properties of transparent conductive indium tin oxide/AgMg bi-layer film* // *Thin Solid Films*. – 2020. – T. 697. – C. 137842. DOI: [10.1016/j.tsf.2020.137842](https://doi.org/10.1016/j.tsf.2020.137842)
- [236] Zhang B. Q. et al. *Influence of Zr₅₀Cu₅₀ thin film metallic glass as buffer layer on the structural and optoelectrical properties of AZO films* // *Chinese Physics B*. – 2020. – T. 29. – №. 3. – C. 037303. DOI: [10.1088/1674-1056/ab6c50](https://doi.org/10.1088/1674-1056/ab6c50)
- [237] Salisbury W. W. *Absorbent body for electromagnetic waves*: пат. US2599944A CIIA. – 1952.
- [238] Knott E. F., Lunden C. D. *The two-sheet capacitive Jaumann absorber* // *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*. – 1995. – T. 43. – №. 11. – C. 1339-1343. DOI: [10.1109/8.475112](https://doi.org/10.1109/8.475112)
- [239] Dallenbach W., Kleinstaub W. *Reflection and absorption of decimeter-waves by plane dielectric layers* // *Hochfrequenztechnik und Elektroakustik*. – 1938. – T. 51. – C. 152-156.
- [240] Pozar D. M. *Microwave engineering*. 4th ad.– John Wiley & sons: USA, University of Massachusetts at Amherst, 2011. –736 c.
- [241] Emerson W. *Electromagnetic wave absorbers and anechoic chambers through the years* // *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*. – 1973. – T. 21. – №. 4. – C. 484-490. DOI: [10.1109/TAP.1973.1140517](https://doi.org/10.1109/TAP.1973.1140517)
- [242] Machmerieen N. V. French Patent: 802 728, Feb., 19. –1936.
- [243] Demotte. F. E. *Electromagnetic radiation absorbing means*. U.S. Patent Application: 769 710, Aug., 20. –1947.
- [244] Tiley J. W. *Radio wave absorption device*. US Patent No. 2464006 USA, –1949.

- [245] Anwar R. S., Mao L., Ning H. *Frequency selective surfaces: a review* // Applied Sciences. – 2018. – Т. 8. – №. 9. – С. 1689. DOI: [10.3390/app8091689](https://doi.org/10.3390/app8091689)
- [246] Munk B. A. *Frequency selective surfaces: theory and design*. –USA, New York: John Wiley & Sons, 2005. – 410 с.
- [247] Hopkinson F., Rittenhouse D. *An optical problem, proposed by Mr. Hopkinson, and solved by Mr. Rittenhouse* // Transactions of the American Philosophical Society. – 1786. – Т. 2. – С. 201-206. DOI: [10.2307/1005186](https://doi.org/10.2307/1005186)
- [248] Marconi G. *Reflector for use in wireless telegraphy and telephon*. US Patent 1,301,473. – 1919.
- [249] Lleshi X. *Metamaterial absorbers with transverse gradients*: Doctoral dissertation – France, Université de Lille, 2021.
- [250] Stone I. *On the electrical resistance of thin films* // Physical Review (Series I). – 1898. – Т. 6. – №. 1. – С. 1. DOI: [10.1103/PhysRevSeriesI.6.1](https://doi.org/10.1103/PhysRevSeriesI.6.1)
- [251] Квасников И. А. *Термодинамика и статистическая физика. Т.2: Теория равновесных систем: Статистическая физика: Учебное пособие. Изд. 2-е, суц. перераб. и доп.* –М.: Едиториал УРСС, 2002.– С. 432.
- [252] Ферцигер Д., Капер Г. *Математическая теория процессов переноса в газах*. –М.: Изд. «Мир», 1976. –554 с.
- [253] Квасников И. А. *Введение в теорию электропроводности и сверхпроводимости*. – М.: Книжный дом «Либроком», 2010. –216 с.
- [254] Ашкрофт Н., Мермин Н. *Физика твердого тела: в 2 т. том 1*. М.: Мир, 1979. –400 с.
- [255] Авакянц Л. П., Колесников С.В., Салецкий А.М. *Введение в квантовую физику. Методика решения задач: Учебное пособие*. М.: Физический факультет МГУ, 2018. –400 с.
- [256] An Z. et al. *Kinetic equation of the effect of thickness on grain growth in nanocrystalline films* // Scripta Materialia. – 2009. – Т. 61. – №. 11. – С. 1012-1015. DOI: [10.1016/j.scriptamat.2009.08.014](https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2009.08.014)
- [257] Vopsaroiu M. et al. *Deposition of polycrystalline thin films with controlled grain size* // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2005. – Т. 38. – №. 3. – С. 490. DOI: [10.1088/0022-3727/38/3/022](https://doi.org/10.1088/0022-3727/38/3/022)
- [258] Glushko O., Kiener D. *Initiation of fatigue damage in ultrafine grained metal films* // Acta Materialia. – 2021. – Т. 206. – С. 116599. DOI: [10.1016/j.actamat.2020.116599](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2020.116599)
- [259] Estrine E. et al. *Transmission Electron Backscatter Diffraction (tEBSD) analysis of Au Thin Films* // Microscopy and microanalysis. – 2015. – Т. 21. – №. S3. – С. 1671-1672. DOI: [10.1017/S1431927615009137](https://doi.org/10.1017/S1431927615009137)

- [260] Darbal A. D. et al. *Grain boundary character distribution of nanocrystalline Cu thin films using stereological analysis of transmission electron microscope orientation maps* // Microscopy and Microanalysis. – 2013. – T. 19. – №. 1. – C. 111-119. DOI: [10.1017/S1431927612014055](https://doi.org/10.1017/S1431927612014055)
- [261] Monshi A. et al. *Modified Scherrer equation to estimate more accurately nano-crystallite size using XRD* // World journal of nano science and engineering. – 2012. – T. 2. – №. 3. – C. 154-160. DOI: [10.4236/wjnse.2012.23020](https://doi.org/10.4236/wjnse.2012.23020)
- [262] Schneider M. A. et al. *Current transport through single grain boundaries: A scanning tunneling potentiometry study* // Applied physics letters. – 1996. – T. 69. – №. 9. – C. 1327-1329. DOI: [10.1063/1.117583](https://doi.org/10.1063/1.117583)
- [263] Schneider M. A. et al. *Scanning tunneling potentiometry study of electron reflectivity of a single grain boundary in thin gold films* // Journal of electronic materials. – 1997. – T. 26. – C. 383-386. DOI: [10.1007/s11664-997-0106-8](https://doi.org/10.1007/s11664-997-0106-8)
- [264] Bietsch A., Michel B. *Size and grain-boundary effects of a gold nanowire measured by conducting atomic force microscopy* // Applied physics letters. – 2002. – T. 80. – №. 18. – C. 3346-3348. DOI: [10.1063/1.1473868](https://doi.org/10.1063/1.1473868)
- [265] Ramaswamy G. et al. *A study of the spatial variation of electric field in highly resistive metal films by scanning tunneling potentiometry* // Applied Physics A: Materials Science & Processing. – 1998. – T. 66. – №. 7. DOI: [10.1007/s003390051178](https://doi.org/10.1007/s003390051178)
- [266] Zhu Y. F. et al. *Electron scattering and electrical conductance in polycrystalline metallic films and wires: impact of grain boundary scattering related to melting point* // ACS nano. – 2010. – T. 4. – №. 7. – C. 3781-3788. DOI: [10.1021/nn101014k](https://doi.org/10.1021/nn101014k)
- [267] Hövel M., Gompf B., Dressel M. *Dielectric properties of ultrathin metal films around the percolation threshold* // Physical Review B. – 2010. – T. 81. – №. 3. – C. 035402. DOI: [10.1103/PhysRevB.81.035402](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.035402)
- [268] Marín F. et al. *Electrical transport during growth, aging and oxidation of copper ultrathin films before percolation* // Results in Physics. – 2020. – T. 19. – C. 103691. DOI: [10.1016/j.rinp.2020.103691](https://doi.org/10.1016/j.rinp.2020.103691)
- [269] Voss R. F., Laibowitz R. B., Alessandrini E. I. *Fractal (scaling) clusters in thin gold films near the percolation threshold* // Physical Review Letters. – 1982. – T. 49. – №. 19. – C. 1441. DOI: [10.1103/PhysRevLett.49.1441](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.49.1441)
- [270] Liang N. T., Shan Y., Wang S. *Electronic conductivity and percolation theory in aggregated films* // Physical Review Letters. – 1976. – T. 37. – №. 9. – C. 526. DOI: [10.1103/PhysRevLett.37.526](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.37.526)

- [271] Platzman I. et al. *Oxidation of polycrystalline copper thin films at ambient conditions* // The Journal of Physical Chemistry C. – 2008. – T. 112. – №. 4. – С. 1101-1108. DOI: 10.1021/jp076981k
- [272] Pinnel M. R., Tompkins H. G., Heath D. E. *Oxidation of copper in controlled clean air and standard laboratory air at 50 C to 150 C* // Applications of Surface Science. – 1979. – Т. 2. – №. 4. – С. 558-577. DOI: [10.1016/0378-5963\(79\)90047-3](https://doi.org/10.1016/0378-5963(79)90047-3)
- [273] Semenov V. A. et al. *Natural Oxidation of Ultra-Thin Copper Films* // Russian Physics Journal. – 2018. – Т. 60. – С. 1559-1564. DOI: [10.1007/s11182-018-1251-7](https://doi.org/10.1007/s11182-018-1251-7)
- [274] Thomas P. V., Vaidyan V. K., Abraham J. T. *Surface oxidation studies of AlCu thin films* // Vacuum. – 1996. – Т. 47. – №. 1. – С. 83-85. DOI: [10.1016/0042-207X\(95\)00157-3](https://doi.org/10.1016/0042-207X(95)00157-3)
- [275] Mott N. F. *Oxidation of metals and the formation of protective films* // Nature. – 1940. – Т. 145. – №. 3687. – С. 996-1000. DOI: [10.1038/145996a0](https://doi.org/10.1038/145996a0)
- [276] Zhong C. et al. *Kinetics characterization of the oxidation of Cu thin films at low temperature by using sheet resistance measurement* // Applied physics A. – 2008. – Т. 90. – С. 263-266. DOI: [10.1007/s00339-007-4259-3](https://doi.org/10.1007/s00339-007-4259-3)
- [277] Lai G. et al. *Optical properties of the oxidation of Cu thin films prepared by thermal evaporation* // Surface Review and Letters. – 2013. – Т. 20. – №. 01. – С. 1350011. DOI: 10.1142/S0218625X1350011X
- [278] Ma W., Zhang X., Takahashi K. *Electrical properties and reduced Debye temperature of polycrystalline thin gold films* // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2010. – Т. 43. – №. 46. – С. 465301 DOI: [10.1088/0022-3727/43/46/465301](https://doi.org/10.1088/0022-3727/43/46/465301)
- [279] Robles M. E. et al. *Resistivity of thin gold films on mica induced by electron-surface scattering: application of quantitative scanning tunneling microscopy* // Applied Surface Science. – 2012. – Т. 258. – №. 8. – С. 3393-3404. DOI: [10.1016/j.apsusc.2011.11.035](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2011.11.035)
- [280] Mizutani U. *Introduction to the electron theory of metals*. – Cambridge university press, 2001. – 590 c. URL: <http://ndl.ethernet.edu.et/bitstream/123456789/76620/1/52.pdf>
- [281] Jacobsson R. *V light reflection from films of continuously varying refractive index* // Progress in optics. – Elsevier, 1966. – Т. 5. – С. 247-286. DOI: [10.1016/S0079-6638\(08\)70454-2](https://doi.org/10.1016/S0079-6638(08)70454-2)
- [282] Antonets I. V. et al. *Application of the averaging method to calculation of propagation of electromagnetic radiation through thin films with different conductivities* // Journal of Communications Technology and Electronics. – 2007. – Т. 52. – С. 379-389. DOI: [10.1134/S106422690704002X](https://doi.org/10.1134/S106422690704002X)

- [283] Конторович М.И., Черепанов А.С. *Метод усреднения для анализа процессов в волноводе с гиромагнитным заполнением* // Радиотехн. и электрон. –1985. –Т. 30. – № 8. –С. 1543.
- [284] Конторович М.И., Третьяков С.А. *Приближенные граничные условия в теории электромагнитных волн в ферритовом слое* // Радиотехн. и электрон. –1986. –Т. 31. –№ 6. –С. 1110.
- [285] Щукин А.Н. *Распространение радиоволн*. –М.: Связьиздат, 1940. –399 с.
- [286] Леонтович М.А. *Теоретическая физика: избранные труды*. –М.: Наука, 1985. –351 с.
- [287] Никольский В. В., Никольская Т. И. *Электродинамика и распространение радиоволн: Учеб. пособие для радиотехн. спец. вузов. –3-е изд. перераб. и доп.* – М.: Наука, 1989. –544 с.
- [288] Карлинер М. М. *Электродинамика СВЧ: Курс лекций*. –Новосибирск.: Изд-во Новосиб. гос. ун-та, 2013. –230 с.
- [289] Свешников А. Г., Могилевский И. Е. *Математические задачи теории дифракции: Учебное пособие*. –М: Физический факультет МГУ, 2010. –200 с.

Приложение А (справочное)

Вывод формул для коэффициентов отражения r и прохождения t для однородного слоя металла

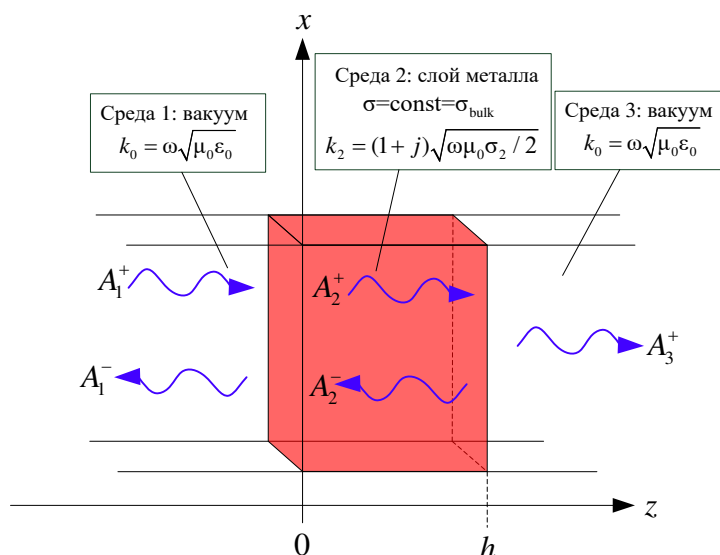


Рис. А.1 Схема к расчету оптических коэффициентов металлического слоя

Рассмотрим схему, изображенную на рис. А.1. Пусть из вакуума (среды 1), на слой металла толщиной h (среду 2) по нормали падает плоская гармоническая электромагнитная волна, имеющая некоторую заданную амплитуду A_1^+ . Амплитуду волны, прошедшей через металлический слой в среду 3, обозначим A_3^+ (среду 3 также будем считать вакуумом). Амплитуды электромагнитных волн в металле обозначим A_2^+ и A_2^- . Здесь амплитуды волн, распространяющихся вдоль оси Oz снабжаются индексом «+», а амплитуды волн, распространяющихся против – индексом «-».

Коэффициенты отражения R и прохождения T по интенсивности электромагнитного поля рассчитываются по следующим формулам:

$$T = |t|^2, \quad R = |r|^2, \quad t = e^{jk_0h} A_3^+ / A_1^+, \quad r = A_1^- / A_1^+ . \quad (\text{A.1})$$

Здесь r, t – коэффициенты отражения и прохождения по амплитуде электрического поля соответственно, j – мнимая единица, а $k_0 = \omega(\epsilon_0\mu_0)^{1/2}$ – волновое число вакуума, где μ_0 и ϵ_0 – магнитная и электрическая постоянные.

Пусть все три среды однородны и изотропны. Тогда можно ввести систему координат таким образом, что вектор напряженности электрического поля \mathbf{E} будет иметь только одну ненулевую компоненту. Для определенности будем считать, что только x -компонента \mathbf{E} не равна нулю и обозначим ее комплексную амплитуду как E . Будем использовать гармоническую зависимость $e^{-j\omega t}$, тогда

$$E_1(z) = A_1^+ e^{jk_0 z} + A_1^- e^{-jk_0 z}, \quad E_2(z) = A_2^+ e^{jk_2 z} + A_2^- e^{-jk_2 z}, \quad E_3(z) = A_3^+ e^{jk_0 z}, \quad (\text{A.2})$$

где E_1, E_2, E_3 – x -компоненты вектора напряженности электрического поля в первой, второй и третьей средах соответственно. Здесь $k_2 = (1+j)(\omega\mu_0\sigma_{\text{bulk}}/2)^{1/2}$ – волновое число металла (см. параграф 19 в [31]).

Будем рассматривать немагнитные металлы, тогда на поверхностях металлического слоя x -компоненты вектора напряженности электрического поля должны удовлетворять следующим граничным условиям

$$E_1(0) = E_2(0), \quad E_1'(0) = E_2'(0), \quad E_2(h) = E_3(h), \quad E_2'(h) = E_3'(h). \quad (\text{A.3})$$

Штрихами здесь обозначается частная производная по переменной z . При подстановке выражений (A.2) в граничные условия (A.3) получается система четырех линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных амплитуд $A_1^-, A_2^+, A_2^-, A_3^+$ (амплитуда A_1^+ , как было сказано выше, считается заданной):

$$\begin{aligned} A_1^+ + A_1^- &= A_2^+ + A_2^-, \quad jk_0(A_1^+ - A_1^-) = jk_2(A_2^+ - A_2^-), \\ A_2^+ e^{jk_2 h} + A_2^- e^{-jk_2 h} &= A_3^+ e^{jk_0 h}, \quad jk_2(A_2^+ e^{jk_2 h} - A_2^- e^{-jk_2 h}) = jk_0 A_3^+ e^{jk_0 h}. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Последовательно исключая из уравнений (A.4) неизвестные величины, выразим амплитуды A_1^-, A_3^+ через амплитуду A_1^+ :

$$A_1^+ = \frac{e^{jk_0 h}}{4k_0 k_2} \left(e^{-jk_2 h} (k_2 + k_0)^2 - e^{jk_2 h} (k_2 - k_0)^2 \right) A_3^+, \quad (\text{A.5})$$

$$A_1^- = \frac{e^{jk_0 h}}{4k_0 k_2} (k_2 + k_0)(k_0 - k_2) \left(e^{-jk_2 h} - e^{jk_2 h} \right) A_3^+. \quad (\text{A.6})$$

Подставляя формулы (A.5)-(A.6) в (A.1), получим:

$$t = \frac{4k_0 k_2}{e^{-jk_2 h} (k_2 + k_0)^2 - e^{jk_2 h} (k_2 - k_0)^2}, \quad r = \frac{(k_2 + k_0)(k_0 - k_2) \left(e^{-jk_2 h} - e^{jk_2 h} \right)}{e^{-jk_2 h} (k_2 + k_0)^2 - e^{jk_2 h} (k_2 - k_0)^2}. \quad (\text{A.7})$$

Деля числитель и знаменатель дробей в (A.7) на $(k_0)^2$, получим

$$t = \frac{4n_2}{e^{-jk_0 n_2 h} (n_2 + 1)^2 - e^{jk_0 n_2 h} (n_2 - 1)^2}, \quad r = \frac{(n_2 + 1)(1 - n_2) \left(e^{-jk_0 n_2 h} - e^{jk_0 n_2 h} \right)}{e^{-jk_0 n_2 h} (n_2 + 1)^2 - e^{jk_0 n_2 h} (n_2 - 1)^2}. \quad (\text{A.8})$$

Здесь $n_2 = k_2/k_0$ – показатель преломления второй среды. Формулы (A.8) совпадают с формулами (1.2) из параграфа 1.1.

Приложение В (справочное)

Обзор тонкопленочных структур использующихся в технологии прозрачных электродов в качестве альтернатив оксиду индия-олова

В данном приложении проведен обзор различных нанометровых слоистых структур, которые, способны заменить оксид индия-олова. При анализе степени пригодности различных материалов для технологии прозрачных электродов обычно используют две характеристики. Первая это значение коэффициента пропускания (по интенсивности электромагнитной волны) при длине волны 550 нм T_{550} (именно 550 нм, т.к. синие светодиоды, используемые в большинстве жидкокристаллических дисплеев, излучают фотоны такой длиной волны). Вторая это поверхностное сопротивление на постоянном токе (sheet resistance) R_s .

Поверхностное сопротивление R_s определяется как сопротивление тока, текущего вдоль поверхности тонкопленочного покрытия квадратной формы. При этом предполагается, что справедлива формула $R = \rho/lS$, где ρ – удельное сопротивление проводника, l – длина проводника, S – площадь поперечного сечения. В случае тонкопленочного покрытия квадратной формы с длиной стороны квадрата a и толщиной h (см. рис. В.1) $S = a \cdot h$, $l = a$, следовательно, $R_s = \rho/h$. Поэтому R_s имеет размерность Ом и не зависит от длины стороны квадрата a . По сути R_s является поверхностным импедансом пленки Z_f , который был введен в параграфе 1.1. Иногда, для того чтобы подчеркнуть, что речь идет именно о поверхностном сопротивлении вместо Ом указывается размерность Ом/sq или Ом/□.

Идеальными для прозрачных электродов материалами являются материалы, сочетающие в себе наибольшее значение коэффициента T_{550} с наименьшим значением R_s . Основная проблема заключается в том, что данные величины коррелируют между собой: уменьшение R_s в общем случае приводит к уменьшению T_{550} и наоборот. Поэтому для сравнения различных материалов Хааке [207] был предложен эмпирический коэффициент – т.н. коэффициент качества Φ (англ. figure of merit, иногда переводится также как критерий качества), определяемый формулой $\Phi = (T_{550})^{10}/R_s$. Считается, что чем больше Φ , тем тонкопленочный материал лучше удовлетворяет технологическим требованиям, предъявляемым к прозрачным электродам. Формально коэффициент Φ обладает размерностью 1/Ом. Отметим, что используются также и другие коэффициенты качества [208-209] для оценки степени пригодности тонкопленочных материалов. Но в современных работах чаще применяется коэффициент Хааке. Нередко также

интересуются и степенью пригодности различных материалов для их использования в гибких прозрачных электродах. В таком случае изучается зависимость R_s от количества циклов изгиба, которое претерпевает прозрачный электрод.

Для проведения сравнительного анализа в табл. В.1 приведены характеристики коммерческих пленок ИТО для различных R_s [210]. Отметим, что в некоторых отдельных работах технологам при помощи особых способов напыления удалось достичь лучших характеристик: $R_s \approx 103 \text{ Ом}/\square$, $T_{550} \approx 0.95$, $\Phi \approx 5.8 \cdot 10^{-3} \text{ Ом}^{-1}$ [211]; $R_s \approx 22.2 \text{ Ом}/\square$, $T_{550} \approx 0.85$, $\Phi \approx 8.8 \cdot 10^{-3} \text{ Ом}^{-1}$ [212]. Для справки приведем также зависимости характеристик пленки ИТО от ее толщины [213] (см. табл. В.2).

Среди технологических подходов (в которых применяются нанометровые проводящие пленки), позволяющих сократить использование оксида индия олова в прозрачных электродах, выделяются шесть основных направлений (см. рис. В.2 *a-f*).

Первый подход (см. рис. В.2*a*) состоит в том, что лишь часть слоя ИТО заменяется слоем металла (чаще всего используются Ag, Au, Cu, Al). Чтобы не возникало проблем с диффузией атомов металла в соседние слои диэлектрика, изготавливаются трехслойные структуры ИТО-металл-ИТО (или кратко IMI). Помимо уменьшения общей стоимости изделия, пластичный слой металла улучшает гибкость пленки ИТО. Например, в работе [214] часть слоя оксида индия-олова заменялась слоем серебра. Исследовались структуры ИТО/Ag/ИТО, которые наносились методом реактивного магнетронного распыления на гибкие подложки из фторированного этиленпропилена. Было показано, что оптимальное значение $\Phi = 5.2 \cdot 10^{-2} \text{ Ом}^{-1}$ достигается при толщине слоя Ag 13 нм. При этом коэффициент пропускания такой структуры составлял 90.2% при 550 нм, а поверхностное сопротивление составляло 6.9 Ом/□. Испытание на изгиб (5000 циклов изгиба) изготовленных пленок подтвердило возможность их применения для технологии гибких прозрачных электродов. В работе [215] продемонстрированы возможности мощного импульсного магнетронного распыления (High Power Impulse Magnetron Sputtering) для осаждения многослойных пленок ИТО/Ag/ИТО (IAgI) и ИТО/Cu/ИТО (ICuI) на гибкую подложку из полиэтиленафталата при комнатной температуре. Трехслойные структуры были сконструированы с нижним и верхним слоями ИТО толщиной 40 нм и промежуточным слоем Ag или Cu толщиной 5-20 нм. Данные структуры продемонстрировали высокоупорядоченную кристалличность и гладкие поверхности. Для пленки IAgI (для 10 нм слоя Ag) коэффициент прохождения составлял 96.61%, а поверхностное сопротивление 7.29 Ом/□, при этом $\Phi = 9.7 \cdot 10^{-2} \text{ Ом}^{-1}$. Для пленок ICuI (для 5 нм слоя Cu) коэффициент прохождения составлял 80.16%, а поверхностное сопротивление 23.48 Ом/□, при этом $\Phi = 4.7 \cdot 10^{-3} \text{ Ом}^{-1}$.

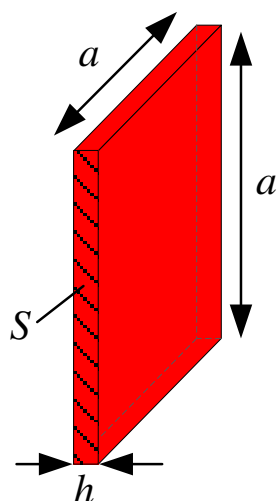


Рис. В.1 Пояснения к понятию поверхностной проводимости R_s .

Название продукта	R_s , Ом/□	T_{550}	Φ , Ом ⁻¹
ИТОРЕТ 15	15	0.80	7.16×10^{-3}
ИТОРЕТ 50	50	0.85	3.94×10^{-3}
ИТОРЕТ 70	70	0.80	1.53×10^{-3}
ИТОРЕТ 80	80	0.80	1.34×10^{-3}
ИТОРЕТ 200	200	0.85	9.84×10^{-4}
ИТОРЕТ 250	250	0.86	7.87×10^{-4}
ИТОРЕТ 300	300	0.87	2.28×10^{-4}

Табл.В.1. Характеристики коммерческих пленок ИТО для различных значений поверхностного сопротивления R_s , производимых компанией Visiontek Systems Ltd. [210].

Толщина пленки, нм	50	100	200	280
R_s , Ом/□	790.6	196.62	88.34	59.85
T_{550}	0.774	0.822	0.804	0.802
Φ , Ом ⁻¹	$9.76 \cdot 10^{-5}$	$7.16 \cdot 10^{-4}$	$1.28 \cdot 10^{-3}$	$1.84 \cdot 10^{-3}$

Табл. В.2. Зависимость характеристик пленок ИТО от толщины пленки по данным работы [213].

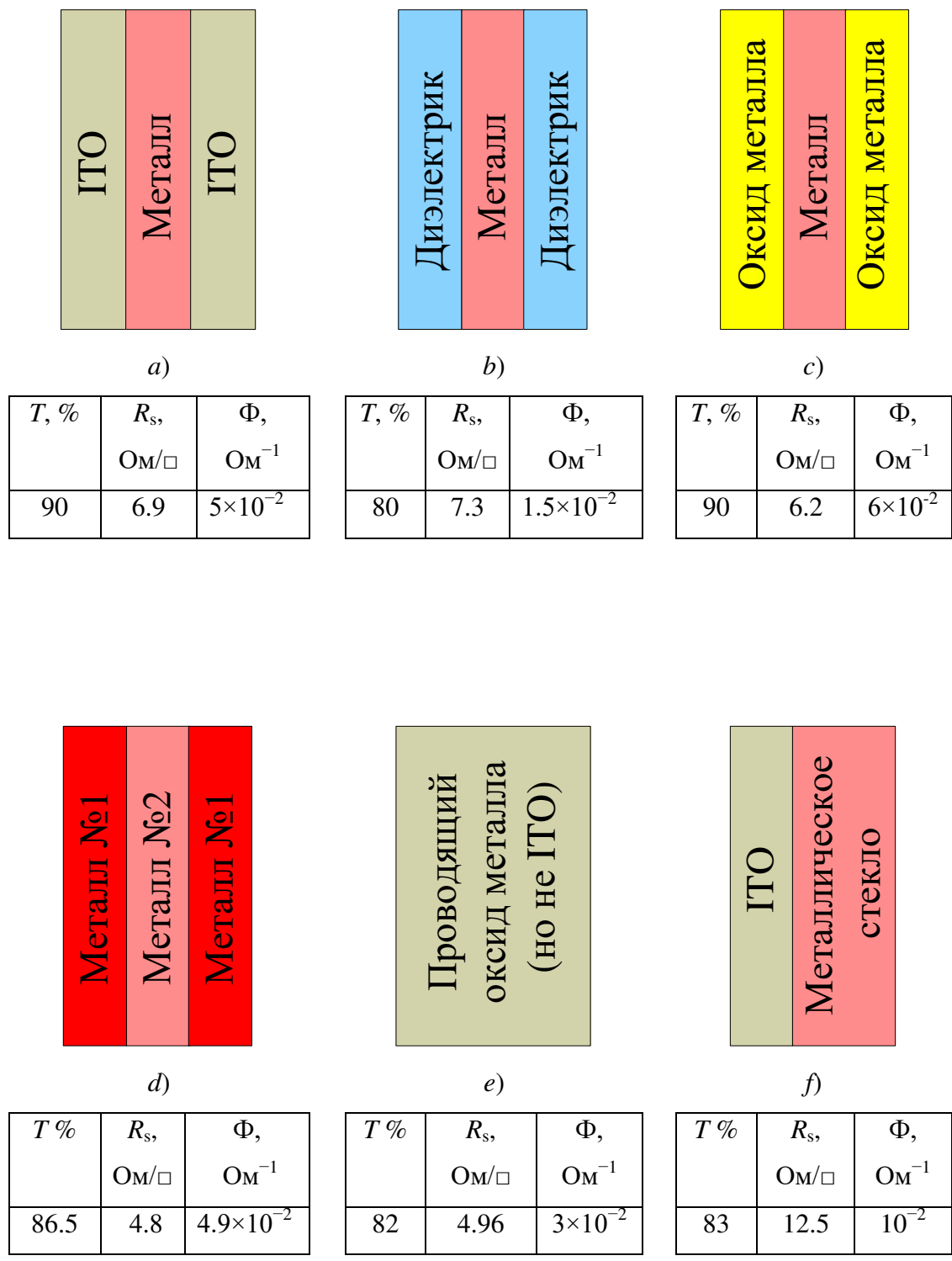


Рис. В.2. Основные технологические решения, позволяющие сократить использование оксида индия олова. Снизу приведены наилучшие значения коэффициента Φ достигнутые в каждом из подходов и соответствующие данному коэффициенту значения T и R_s .

В работе [216] представлен способ изготовления трехслойных структур IMI, которые сочетают в себе высокий коэффициент пропускания инфракрасного излучения $T_{700-1000} \approx 78.5\%$ и достаточно большую электрическую проводимость $R_s = 16.0 \text{ Ом}/\square$, что соответствует $\Phi = (T_{700-1000})^{10}/R_s \approx 5.6 \cdot 10^{-3} \text{ Ом}^{-1}$. Методом совместного напыления были получены гладкие металлические пленки из сплава Cu-Ag толщиной 5 нм. Вышеописанные структуры были использованы в гибких перовскитных солнечных элементах. Продемонстрировано, что солнечные батареи на разработанных электродах обладают почти таким же коэффициентом пропускания (67.6%), что и стандартные солнечные батареи с ITO электродами (73.4%). Однако авторы показали, что характеристики IMI электродов значительно медленнее деградируют при 1000 циклах изгиба, чем характеристики стандартных ITO электродов. Таким образом, IMI электроды больше подходят для гибких солнечных элементов.

Второй подход (см. рис. В.2b) состоит в том, чтобы оксид индия-олова полностью заменять тонкопленочной структурой типа «диэлектрик-металл-диэлектрик» или кратко DMD. В качестве металла опять же часто используются Ag, Au, Cu, Al, а в качестве диэлектрика используются оксиды переходных металлов. В работе [217] были изготовлены гибкие прозрачные ультратонкие серебряные электроды толщиной 9 нм при помощи процесса безмасочного осаждения в вакуумной камере. Пленки Ag обладали не слишком хорошими характеристиками: $R_s = 18.2 \text{ Ом}/\square$, $T_{550} = 55\%$, $\Phi = 1.4 \cdot 10^{-4} \text{ Ом}^{-1}$. Однако поверхностное сопротивление листа сверхтонкого Ag-электрода, перенесенного на гибкую эпоксидную подложку, возросло только на 5% после 3000 циклов изгиба, в то время как поверхностное сопротивление пленки ITO возросло в 80 раз. По заверениям авторов [217], плотность тока и яркость OLED с гибким прозрачным ультратонким Ag-электродом, были больше, чем у OLED с электродом из ITO. Таким образом, авторы показали, что ультратонкие электроды из серебра эффективны для использования в производстве гибких органических светодиодов. В статье [218] гибкие прозрачные электроды были получены путем легирования медью ультратонких пленок Ag на гибких подложках из полиэтилентерафталата путем совместного напыления. Пленки обладали следующими характеристиками: $R_s = 14.1 \text{ Ом}/\square$, $T_{550} = 80\%$, $\Phi = 7.6 \cdot 10^{-3} \text{ Ом}^{-1}$. Поверхностное сопротивление тонких пленок Ag после 1000 циклов изгиба увеличилось всего лишь на несколько процентов. Поверхностное сопротивление коммерческого ITO увеличилось примерно в 100 раз всего после 50 циклов изгиба. В статье [219] авторы предложили заменить Ag в структурах DMD на Cu, при этом возникла проблема диффузии атомов меди в слой диэлектрика (в качестве диэлектрика использовался слой MoO_{3-x}). Однако в [219] было показано, что добавление даже небольшого количества (5%)

Ni к Cu подавляет диффузию атомов Cu. Структуры DMD были нанесены на подложки из натриево-известкового стекла методом термического испарения. Оптимальная толщина слоя Cu составила 12 нм, при этом были достигнуты следующие характеристики: $R_s = 7.3$ Ом/□, $T_{550} = 80\%$, $\Phi = 1.5 \cdot 10^{-2}$ Ом⁻¹. После 50 циклов изгиба поверхностное сопротивление структуры DMD увеличилось на 1%, в то время как сопротивление коммерческого слоя ИТО с $R_s = 100$ Ом/□ увеличилось на 11%.

Третий подход (см. рис. В.2с) состоит в полной замене слоя оксида индия на трехслойную структуру «оксид металла-металл-оксид металла» (англ. Oxide-metal-oxide или кратко ОМО). В данной технологии также возникает проблема диффузионной стабильности металлического слоя. В работе [220] было показано, что добавление 5% Ni к Ag в структуре ZnO-Ag-ZnO подавляет диффузию атомов серебра и увеличивает стабильность серебряных пленок при нагреве. Ультратонкие мультислой ZnO-Ag-ZnO были нанесены на прозрачные гибкие полиимидные подложки путем распыления мишеней Ag и ZnO в системе магнетронного распыления со многими мишенями. Изготовленные структуры обладали $R_s = 6.2$ Ом/□, $T_{550} = 90.2\%$, $\Phi = 5.7 \cdot 10^{-2}$ Ом⁻¹. После 200 циклов изгибов поверхностное сопротивление структуры ZnO-Ag-ZnO увеличилось на 2%. В работе [221] исследовались структуры SiInZnO/Ag/SiInZnO, осажденные на стеклянные подложки. Слой аморфного оксида осаждали магнетронным высокочастотным распылением, а слой металлического серебра – магнетронным распылением на постоянном токе при комнатной температуре. Толщина слоя Ag составляла 11 нм, а толщина верхнего и нижнего слоев оксида металла составляла 50 нм. При таких толщина коэффициент пропускания достиг 96.67% (при 550 нм), поверхностное сопротивление – 6.41 Ом/□, а коэффициент качества – 1.11×10^{-1} Ом⁻¹. В работе [222] исследовались ОМО структуры, в которых в качестве оксида металла был выбран оксид цинка легированный алюминием ZnO(Al), а в качестве металла – серебро. Слои оксида металла составляли 50 нм, а слой Ag – 8 нм. Оксидный и металлический слой наносились на коммерческие стеклянные подложки с помощью магнетронного напыления на постоянном токе. Процесс напыления проводился при комнатной температуре в высоком вакууме (2×10^{-6} Торр). Полученные ОМО структуры обладали поверхностным сопротивлением 6.8 Ом/□ и коэффициентом пропускания 88% , что соответствует $\Phi = 4.1 \times 10^{-2}$ Ом⁻¹. В работе [223] в качестве оксида металла был рассмотрен оксид ZnO содопированный Mg и Ga (MGZO), а в качестве металла – Ag. Пленки ZnO наносились методом реактивного плазменного осаждения (reactive plasma deposition) с мягким процессом роста при комнатной температуре (без предварительного нагрева) на стеклянные подложки марки «Corning Eagle XG», а ультратонкие пленки чистого Ag

наносились методом магнетронного напыления при комнатной температуре. Коэффициент пропускания таких структур составил 94.7%, а поверхностное сопротивление 10 Ом/□, что соответствует $\Phi = 5.8 \cdot 10^{-2} \text{ Ом}^{-1}$.

В четвертом подходе (см. рис. В.2*d*) предлагаются альтернативы в виде структур, состоящих из нескольких слоев металла. Например, в работе [224] изучаются характеристики ультратонкой трехслойной пленки Au-Ag-Au, нанесенной при помощи термического испарения на гибкую подложку полиэтилентерефталата. Пленка серебра находится между пленками золота во избежание диффузии атомов серебра. Оптимальная общая толщина трехслойной пленки, обеспечивающая одновременно высокую прозрачность 62% и поверхностную проводимость 10.4 Ом/□ составляет около 8 нм (это соответствует $\Phi = 8 \cdot 10^{-4} \text{ Ом}^{-1}$). Проведенные испытания подтверждают хорошую адгезию пленки к подложке. После 50000 циклов сгибания поверхностная проводимость вышеописанной структуры увеличилась всего на 3-4 Ом/□. В работе [225] изучаются характеристики двойного слоя Cu-Ag толщиной 8 нм на гибких подложках из полиэтилентерефталата и полиэтиленнафталата, проводится сравнение с однослойными пленками Cu, Ag, Au. Все пленки осаждались методом термического испарения, затем производился их отжиг при температуре 200 °С. Измерения показали, что пленки Ag и Cu наиболее прозрачны в противоположных концах видимого спектра. Для создания электрода с широкой полосой прозрачности и более низкой (по сравнению с электродом из Au) стоимостью, был изготовлен двухслойный электрод Ag-Cu. Слой Cu был скрыт под слоем Ag для защиты меди от окисления. Такой подход лучше всего работает, когда слои Ag и Cu имеют одинаковую толщину (4 нм Cu и 4 нм Ag). Средний коэффициент прозрачности таких пленок Cu-Ag равен 65%, что на 7% ниже, чем у пленок Au той же толщины, но выше чем у чистых пленок Ag (61%) или чистых пленок Cu (62%) той же толщины. При этом пленки Cu-Ag обладали следующими характеристиками: $R_s = 11 \text{ Ом/□}$, $T_{550} = 67.5\%$, $\Phi = 1.8 \cdot 10^{-3} \text{ Ом}^{-1}$. В работе [226] изучаются двухслойные пленки Ag-Cu в структуре ZnS-Ag-Cu-ZnS. Напыление пленок на стеклянные подложки проводилось в вакууме при помощи термического испарения при комнатной температуре. Экспериментально были определены оптимальные толщины различных слоев: 50 и 45 нм для ZnS; 3 нм и 9 нм для Cu и Ag. Показано, что наличие двойного металлического слоя Cu-Ag приводит к значительному уширению спектра оптического пропускания. Пленки ZnS-Ag-Cu-ZnS обладали следующими характеристиками: $R_s = 4.8 \text{ Ом/□}$, $T_{550} = 86.5\%$, $\Phi = 4.9 \cdot 10^{-2} \text{ Ом}^{-1}$. В работе [227] исследуются структуры MoO₃-Ag-SL-MoO₃, нанесенные на стеклянные подложки методом термического испарения. Здесь SL (Seed Layer) – затравочный слой металла толщиной 1 нм (Al или Au). Показано, что осаждение

затравочного слоя на внутреннем слое оксида MoO_3 перед испарением слоя серебра позволяет влиять на условия роста серебряной пленки. При толщине серебра 7 нм и затравочном слое Au прозрачный электрод демонстрирует поверхностное сопротивление $19 \text{ Ом}/\square$ и пропускание 83% при длине волны 580 нм, что соответствует $\Phi = 8.2 \cdot 10^{-3} \text{ Ом}^{-1}$.

В пятом подходе (см. рис. В.2e) ИТО заменяется проводящими оксидами других металлов. Чаще всего используются легированные алюминием пленки оксида цинка (Al)ZnO (AZO) или пленки оксида олова, легированного фтором (F)SnO₂ (FTO). Например, в статье [228] демонстрируется функциональность тонких пленок AZO, нанесенных на кварцевое стекло, а также на гибкие подложки из полиэтилентерефталата с помощью метода атомно-слоистого осаждения. В статье показано, что тонкие пленки AZO обладают высоким оптическим пропусканием $T_{550} \approx 90\%$ и низким поверхностным сопротивлением $110 \text{ Ом}/\square$, при этом $\Phi = 3.2 \cdot 10^{-3} \text{ Ом}^{-1}$. Слои AZO, нанесенные на гибкие подложки, выдерживают более 1000 циклов изгиба (поверхностное сопротивление при этом увеличивается примерно на $20 \text{ Ом}/\square$). В работе [229] изучались тонкие пленки FTO, приготовленные методом пиролиза на стеклянных подложках. При приготовлении раствора для опрыскивания использовали различные объемы растворителя и исследовали их влияние на структурные, оптические, морфологические и электрические свойства пленок FTO. Оптимальные характеристики ($T_{550} = 82\%$, $R_s = 4.96 \text{ Ом}/\square$, $\Phi = 2.77 \cdot 10^{-2} \text{ Ом}^{-1}$) были получены при 10 мл растворителя для пленок FTO толщиной 383 нм. Ряд статей посвящен подбору металлов для легирования. В работе [230] изучались тонкие пленки SnO₂ легированные Ti. Пленки толщиной 420 нм выращивались на стеклянной подложке методом золь-гель центрифугирования. Исследовалось влияние концентрации Ti на оптические характеристики пленки. Наибольший коэффициент качества равный $\Phi = 3.6 \cdot 10^{-3} \text{ Ом}^{-1}$ получился при 2%-ной концентрации Ti. При этом у таких пленок $T_{550} = 83\%$, $R_s = 42.5 \text{ Ом}/\square$. Все рассмотренные выше пленки состояли из проводящих оксидов с n-типом проводимости. Однако рассматриваются и иные варианты. Например, в работе [231] исследуются пленки из оксида $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{VO}_3$ (LVSO) с проводимостью p-типа. Тонкие пленки LVSO были нанесены на подложки из $(\text{La}_{0.3}\text{Sr}_{0.7})(\text{Al}_{0.65}\text{Ta}_{0.35})\text{O}_3$ методом импульсного лазерного осаждения. Оптимальная толщина пленки LVSO составила 12 нм, при этом данная пленка обладала следующими характеристиками: $T_{550} \approx 70\%$, $R_s \approx 6.2 \text{ Ом}/\square$, $\Phi \approx 2.6 \cdot 10^{-5} \text{ Ом}^{-1}$.

В шестом подходе (см. рис. В.2f) используются двухслойные структуры ИТО-металл с аморфной структурой. Металлы с аморфной структурой также называются металлическими стеклами (metallic glass), поэтому такая структура кратко называется ИТО-MG. Нанесение на подложку слоя металлического стекла отчасти решает проблему

плохой адгезии слоя ИТО к гибким подложкам. Например, в работе [232] изучается двухслойная пленка ИТО-CuZr, нанесенная на подложку полиэтилентерефталата методом совместного магнетронного распыления при комнатной температуре. Для 3 нм слоя CuZr и 30 нм слоя ИТО $R_s = 623 \text{ Ом}/\square$, $T_{550} = 73\%$, $\Phi = 6.9 \cdot 10^{-5} \text{ Ом}^{-1}$. В работе [233] изучаются двухслойные пленки ИТО/CuMg (ICM) с содержанием Mg в диапазоне от 30 до 65%. Сплав CuMg после осаждения методом магнетронного напыления на стеклянные подложки (а также на гибкие подложки из полиэтилентерефталата) приобретал структуру металлического стекла. После осаждения пленки обрабатывались печным и лазерным отжигом. Толщина пленки ИТО составляла 30 нм, а толщина пленки CuMg – 10 нм. Показано, что с увеличением содержания Mg поверхностное сопротивление пленки ICM увеличивается, а коэффициент пропускания уменьшается. При содержании Mg 49% после отжига в печи при 200°C двухслойная структура ICM обладает наибольшим коэффициентом качества $\Phi = 2.94 \cdot 10^{-3} \text{ Ом}^{-1}$ при коэффициенте пропускания 78.5% и поверхностном сопротивлении 32.4 Ом/□. В случае гибких подложек после 10000 циклов изгиба сопротивление ICM пленки увеличилось на 40%, сопротивление же 30 нм слоя ИТО увеличилось на 80%. В исследовании [234] изучаются оптоэлектронные характеристики тонкопленочных металлических стекол AgZr (AZ) и двухслойной структуры ИТО/AgZr (IAZ) с различным составом Ag и Zr. Пленки наносились методом магнетронного напыления на стеклянные подложки (марка стекла: Nippon Electric Glass Co. OA- 10 G type) и обрабатывались двумя разными методами отжига, а именно печным и лазерным отжигом. Слой ИТО составлял 30 нм, слой AgZr – 10 нм. Среди различных пленок AZ и IAZ непосредственно после осаждения пленка ИТО/Ag_{66%}Zr_{34%} имела самый высокий оптический коэффициент пропускания 55.7% и самое низкое поверхностное сопротивление 145.8 Ом/□, что соответствует $\Phi = 2 \cdot 10^{-5} \text{ Ом}^{-1}$. Отжиг при температуре 300°C привел к улучшению оптоэлектронных свойств данной пленки: $R_s = 47.2 \text{ Ом}/\square$, $T_{550} = 68.4\%$, $\Phi = 4.7 \cdot 10^{-4} \text{ Ом}^{-1}$. В работе [235] исследовались структуры ИТО-AgMg (IAM) нанесенные на стеклянные подложки и на гибкие подложки полиэтилентерефталата совместным магнетронным высокочастотным напылением, а также напылением на постоянном токе при комнатной температуре. Изучалось то, как процентное соотношение Ag и Mg в аморфном сплаве Ag-Mg влияет на оптические характеристики пленки. В данной работе также слой ИТО составлял 30 нм, а слой металлического стекла – 10 нм. После термической обработки в печи пленки ИТО-Ag_{75%}Mg_{25%} достигли наивысшего коэффициента качества $1.24 \cdot 10^{-2} \text{ Ом}^{-1}$ с коэффициентом пропускания 83.0% и поверхностным сопротивлением 12,5 Ом/□. После 10000 циклов изгиба относительное изменение сопротивления пленки IAM составило 42%, что значительно ниже, чем у

пленки ИТО толщиной 30 нм (93%). Иногда используются альтернативные ИТО оксиды металлов. Так, в работе [236] исследовались двуслойные пленки $\text{ZnO-Zr}_{50\%}\text{Cu}_{50\%}$, которые были приготовлены на стеклянной подложке методом импульсного лазерного осаждения. Исследовано влияние толщины слоя $\text{Zr}_{50\%}\text{Cu}_{50\%}$ и температуры подложки на оптические и электрические свойства пленок $\text{ZnO-Zr}_{50\%}\text{Cu}_{50\%}$. Показано, что пленка $\text{AZO}(100 \text{ нм})\text{-Zr}_{50\%}\text{Cu}_{50\%}(4 \text{ нм})$, нанесенная при температуре подложки 360°C , имеет самое низкое поверхностное сопротивление $26.7 \text{ Ом}/\square$ и высокий коэффициент пропускания 82.1%, что соответствует $\Phi = 5.2 \cdot 10^{-3} \text{ Ом}^{-1}$.

В итоге, сравнивая наибольшие значения коэффициентов качества пленок, изготовленных по разным технологиям (см. рис. В.2а-ф), можно заключить, что все шесть способов конкурентоспособны. Причем ультратонкие металлические пленки (толщиной 2-10 нм) в пяти из шести способах играют определяющую роль.

Приложение С

(справочное)

Основные конструкции плоскостойких поглотителей электромагнитного излучения и сравнение их эффективности

При изложении типов конструкций плоскостойких поглотителей уместно упорядочить их по списку «от простого к сложному».

Самая простая конструкция поглотителя – резонансный четвертьволновый поглотитель – экран Солсбери [237] (рис. С.1а), поглощающий 100% падающего на него по нормали излучения только при выполнении условия четвертьволнового резонанса. Экран Солсбери состоит всего лишь из трех элементов. Первый элемент – резистивная пластина, толщина которой h много меньше длины волны электромагнитного излучения в вакууме λ_0 . Резистивная пластина представляет собой однородный проводящий слой, характеризующийся лишь одним параметром – поверхностным импедансом $Z_f = 1/(\sigma h)$, здесь σ – удельная проводимость материала резистивного слоя. В схеме экрана Солсбери Z_f должно быть равно волновому сопротивлению вакуума $Z_0 = (\mu_0/\epsilon_0)^{1/2} = 376.73$ Ом. Второй элемент – четвертьволновый резонатор, выполненный в виде воздушного зазора. Третий элемент – толстая металлическая пластина, которая играет роль идеального зеркала. Поглощаемая электромагнитная волна падает со стороны резистивной пластины. Условие резонанса $\lambda/4$ необходимо для того, чтобы разность фаз между волной, отраженной от резистивной пластины, и волной, отраженной от металлического зеркала, составляла π (для появления деструктивной интерференции этих двух волн).

Конструкция поглотителя значительно усложняется в случае, когда требуется сочетание широкополосного близкого к 100% поглощения и минимальной толщины поглотителя [43]. Для увеличения ширины полосы поглощения часто несколько резонансных структур объединяют в одну, получая тем самым многослойную структуру с несколькими пиками поглощения. Действительно, естественным обобщением экрана Солсбери является поглотитель Яумана [238] (рис. С.1б), состоящий из двух резонаторов равной толщины H . При этом в схеме присутствуют две резистивные пластины: входная и промежуточная с разными поверхностными импедансами Z_{f1} и Z_{f2} . Значение H в общем случае не равно $\lambda/4$, но выбирается близким к $\lambda/4$. Поглощаемая электромагнитная волна падает со стороны входной резистивной пластины. Путем

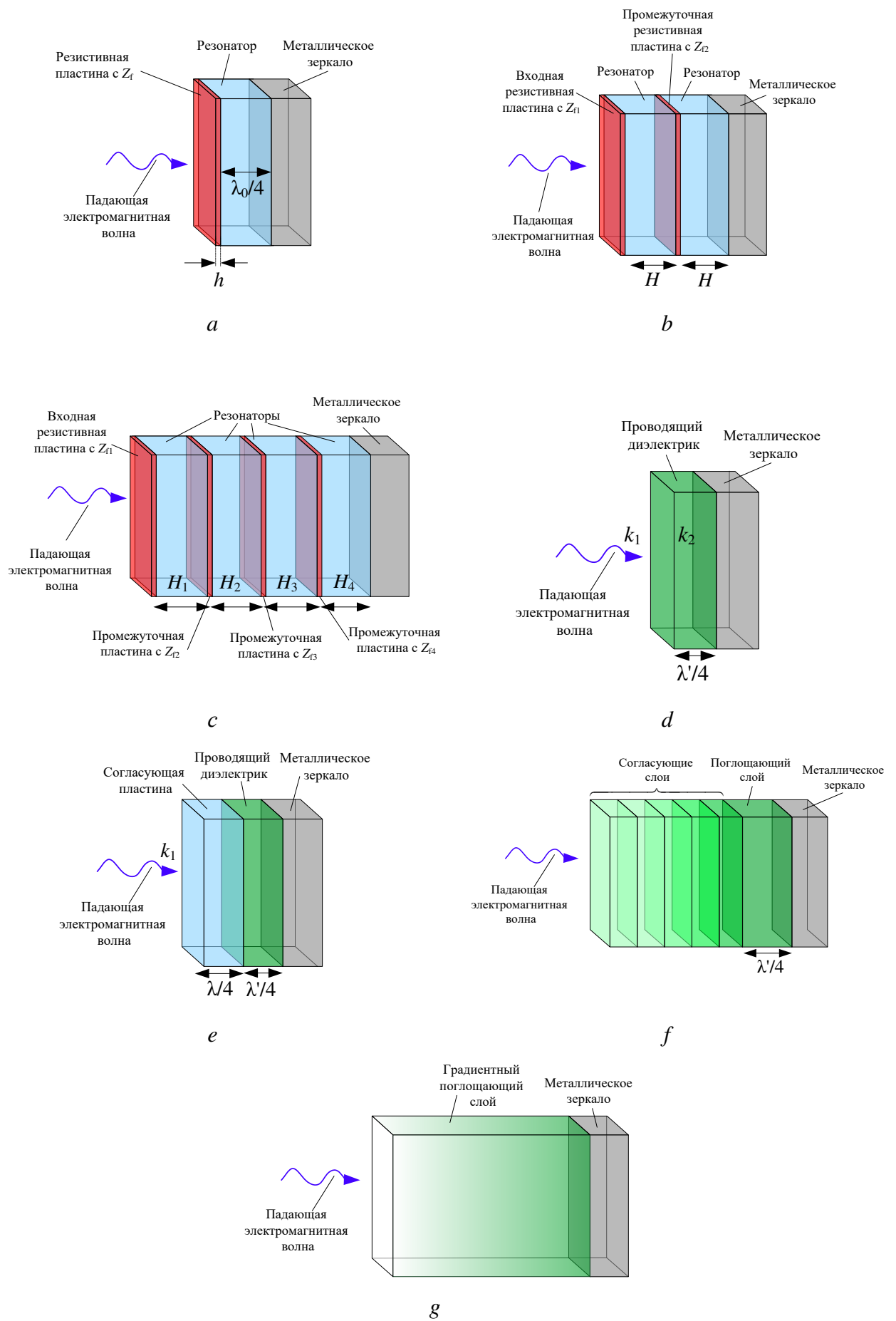


Рис. С.1. Схемы поглотителей различных типов.

подбора Z_{f1} и Z_{f2} осуществляется настройка резонансных частот и ширины полосы поглощения.

Для еще большего увеличения ширины полосы поглощения в конструкцию поглотителя Яумана добавляются дополнительные резонаторы и резистивные пластины (рис. С.1с) с различными значениями Z_{f1} , Z_{f2} , $Z_{f3}...$ и H_1 , H_2 , $H_3...$ [45]. Из этого примера видно, что для увеличения ширины полосы поглощения необходимо увеличивать толщину поглотителя. Данное утверждение можно переформулировать и в другом виде: при фиксированной толщине поглотителя невозможно достичь сколь угодно широкой полосы поглощения [43]. Данное ограничение для N -слойной структуры, состоящей из неактивных материальных сред, было сформулировано в 2000 г. Розановым в виде неравенства [44]:

$$\left| \int_0^{\infty} \ln |r(\lambda)| d\lambda \right| \leq 2\pi^2 \sum_{i=1}^N h_i \mu_{st,i}.$$

Здесь r – коэффициент отражения (по амплитуде электромагнитной волны) от плоскостойкой структуры при нормальном падении, λ – длина волны излучения, N – количество слоев, h_i – толщина i -ого слоя, $\mu_{st,i}$ – статическая относительная магнитная проницаемость i -ого слоя. Для случая немагнитных сред $\mu_{st,i} \equiv 1$, поэтому:

$$\left| \int_0^{\infty} \ln |r(\lambda)| d\lambda \right| \leq 2\pi^2 h_{\min}, \quad (C.1)$$

где h_{\min} – суммарная минимально возможная толщина немагнитной слоистой структуры. Неравенство (C.1) получило название предела Розанова.

В вышеописанных поглотителях Солсбери и Яумана поглощение происходит в резистивных пластинах, которые, по сути, представляют собой сосредоточенные элементы, поскольку их толщина много меньше длины волны излучения. Параллельно развивалась и другая концепция. Еще в 1938 году Далленбах [239] в качестве поглотителя предложил использовать слой проводящего диэлектрика толщиной $\lambda'/4$, где λ' – длина волны электромагнитного излучения в этом проводящем диэлектрике (рис. С.1d). Здесь условие резонанса $\lambda'/4$ также необходимо для появления деструктивной интерференции. У такой конструкции, однако, имеется очевидный недостаток. В случае, когда волновое число проводящего диэлектрика k_2 сильно отличается от волнового числа воздушного пространства k_1 , достаточно большая часть энергии падающей электромагнитной волны отражается сразу же от границы раздела воздух-проводящий диэлектрик. Поэтому вскоре было предложено добавлять промежуточный слой (рис. С.1e) для согласования импедансов воздуха и проводящего диэлектрика, чтобы уменьшить отражение.

Изображенная на рис. С.1e схема содержит дополнительный четвертьволновый резонатор на входе, что позволяет расширить полосу поглощения. Поглотители, в которых используется явление резонанса, получили название резонансные поглотители.

Следующей удачной идеей на пути увеличения ширины полосы поглощения было предложение использовать несколько промежуточных слоев для согласования (рис. С.1f). При этом характеристики первого (входного) слоя выбираются максимально приближенными к характеристикам свободного пространства, а характеристики каждого последующего слоя все более и более приближаются к характеристикам поглотителя, находящегося непосредственно перед металлическим зеркалом (о теории согласования импедансов при помощи одного резонатора и цепочки резонаторов см. главу 5.5 книги [240]). Естественным обобщением такой концепции является создание материальных сред, характеристики которых плавно изменяются от характеристик свободного пространства до характеристик поглощающей среды (рис. С.1g). Подобные поглотители получили название градиентные.

Согласно историческому обзору [241], простейшие резонансные поглотители Яумана и Солсбери начали создаваться с середины 1930-х годов (считается, что первый патент резонансного поглотителя [242] был сделан в 1936 г.). Градиентные поглотители начали создаваться с середины 1940-х (первые патенты [243, 244] были сделаны в 1944 и 1947 соответственно).

Следующая удачная идея в технологии проектирования поглотителей состояла в предложении использовать так называемые частотно-избирательные поверхности (англ. frequency selective surface, далее FSS). FSS представляют собой двумерные метаматериалы: набор одинаковых элементов (метаатомов), периодически расположенных в двумерном массиве (рис. С.2a, С.3a, С.4a). Как и в случае резистивных пластин, считается, что толщина слоя FSS h много меньше длины волны электромагнитного излучения λ . Поглотители, в которых используются FSS, получили название аналоговых поглотителей (англ. circuit analog absorber).

Чтобы наглядно показать принцип действия FSS, рассмотрим два частных случая. Первый случай – high-pass фильтр (рис. С.2a) – представляет собой массив отверстий прямоугольной формы изготовленных на тонком металлическом экране. Металлические части на рис. С.2-С.4 закрашены серым цветом. FSS, изображенная на рис. С.2a, пропускает электромагнитные волны только с частотами выше некоторой частоты ω_0 (см. характерный график зависимости коэффициента пропускания T от частоты ω , изображенный на рис. С.2b).

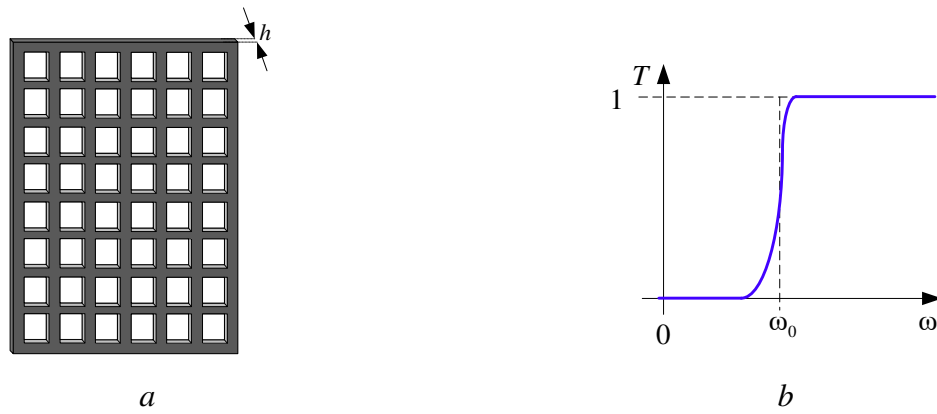


Рис. С.2. Схема, иллюстрирующая принцип действия частотно избирательных поверхностей, состоящих из массива отверстий (метаатомов) в металлическом экране (high-pass фильтр).

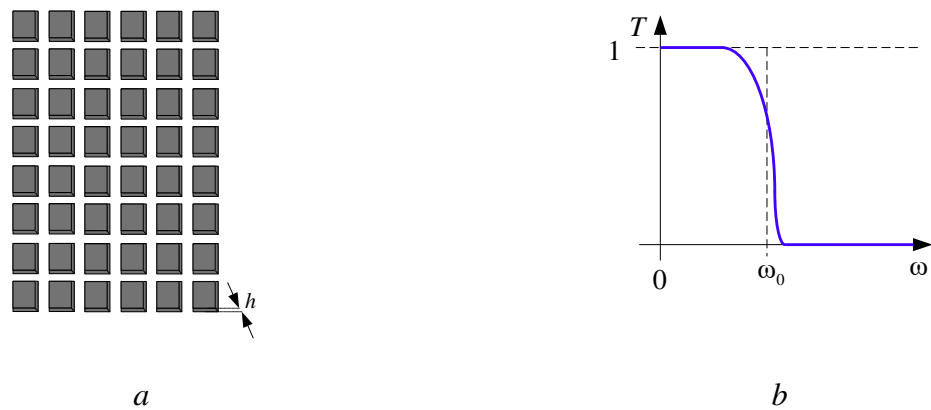


Рис. С.3. Схема, иллюстрирующая принцип действия частотно избирательных поверхностей, состоящих из массива металлических элементов (метаатомов) на диэлектрической матрице (low-pass фильтр).

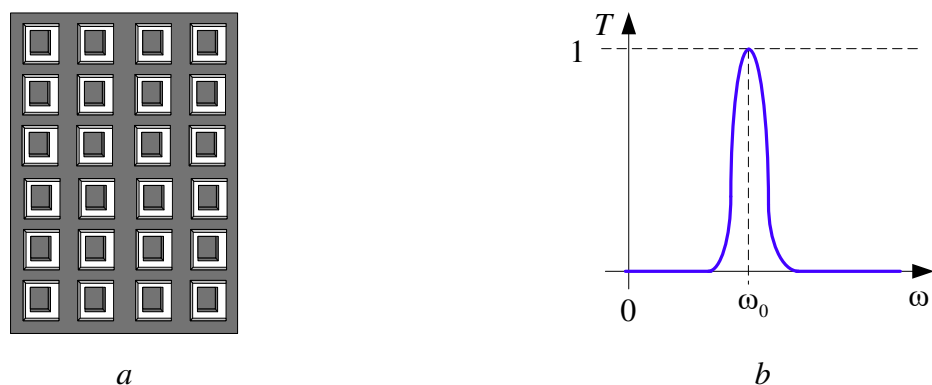


Рис. С.4. Схема, иллюстрирующая принцип действия частотно избирательных поверхностей, состоящих из массива металлических элементов (метаатомов) на диэлектрической матрице (объединение high-pass и low-pass фильтров).

Второй случай – low-pass фильтр (изображен на рис. С.3а) – представляет собой массив металлических элементов прямоугольной формы изготовленных на тонком прозрачном слое диэлектрика. FSS, изображенная на рис. С.3а, напротив пропускает только электромагнитные волны, частота которых не превышает значение некоторой частоты ω_0 (см. характерный график зависимости коэффициента пропускания T от частоты ω , изображенный на рис. С.3b).

Использование массивов металлических элементов (метаатомов) более сложной формы позволяет получать разнообразные зависимости коэффициента пропускания T от частоты ω [245]. Например, массив отверстий, изображенный на рис. С.4а, представляющий объединение high-pass и low-pass фильтров, пропускает лишь электромагнитные волны, частоты которых находятся вблизи некоторой резонансной частоты ω_0 (см. параграф 1.6 монографии [246]).

Первое задокументированное наблюдение явления дифракции световых волн на двумерных периодических решетках было описано в работе [247] еще в 1786 г. Первый патент (см. параграф 1.5 монографии [246]) – параболический отражатель, состоящий из множества идентичных отрезков проволоки – был подан Маркони и Франклином еще в 1919 г. [248]. В то время, однако, работа Маркони и Франклина не получила должного внимания, а подлинный интерес к FSS появился только в 1960-х годах (см. предисловие I в монографии [246]).

Для случая нормального падения электромагнитной волны на слоистую структуру принцип действия как FSS, так и резистивных пластин можно описать при помощи теории длинных линий [245]. Например, рассмотрим плоскостойкую структуру, состоящую из FSS поверхности (или резистивной пластины), расположенной на диэлектрической подложке толщиной H (рис. С.5а). Эквивалентная схема такой слоистой структуры изображена на рис. С.5b. Свободное пространство в эквивалентной схеме замещается бесконечно протяженной длинной линией с волновым сопротивлением вакуума $Z_0 = (\mu_0/\epsilon_0)^{1/2}$. Подложка замещается отрезком длинной линией длиной H с волновым сопротивлением $Z_1 = (\mu_0/\epsilon_a)^{1/2}$, где ϵ_a – абсолютная диэлектрическая проницаемость материала подложки. FSS поверхность (или резистивная пластина) с поверхностным импедансом Z_f замещается сосредоточенным элементом, обладающим в общем случае комплексным импедансом $\hat{Z} \equiv Z_f$. Приведем конкретные примеры.

В случае резистивной пластины $\text{Im}(Z_f)=0$ и, как это было уже сказано выше, $Z_f = 1/(h\sigma)$, где h – толщина резистивной пластины, а σ – удельное сопротивление материала, из которого изготовлена пластина (отметим, что формула $Z_f = 1/(h\sigma)$ выполняется точно

лишь для случая, когда распределение проводимости σ по объему резистивного слоя равномерно).

В случае FSS поверхности поверхностный импеданс Z_f может содержать как реальную, так и мнимую часть. В своем простейшем варианте схема замещения high-pass фильтра может быть представлена в виде последовательно соединенных резистора и конденсатора. Поэтому $\hat{Z} = Z_f = R + 1/(i\omega C)$ для high-pass FSS. В простейшем же варианте low-pass FSS фильтра схема его замещения представляет собой последовательно соединенные резистор и индуктивность. Поэтому $\hat{Z} = Z_f = R + i\omega L$ для low-pass FSS. Здесь R, L, C – значения эквивалентных сопротивления, емкости и индуктивности.

В случае более сложных фильтров импеданс \hat{Z} может состоять из множества последовательно (а также параллельно) соединенных резисторов сопротивлений и индуктивностей.

FSS поверхности, как правило, изготавливаются из металлических пленок. Пусть σ и h – удельное сопротивление металла и толщина подобной пленки. Тогда в общем случае значение эквивалентного сопротивления FSS поверхности $R \approx 1/(h\sigma)$, хотя выполняется закон пропорциональности $R \sim 1/(h\sigma)$ (см. параграф 9.5.3 монографии [246]).

В случае, когда поглотитель состоит только из резистивных пластин и слоев диэлектрика, зависимость коэффициента его поглощения Q от частоты ω обусловлена только интерференцией волн в диэлектрических резонаторах поглотителя. Например, если интерференционная картина соответствует тому, что узлы электромагнитного поля приходятся на места расположения резистивных пластин, то наблюдается минимум Q . И наоборот, если интерференционная картина соответствует тому, что пучности электромагнитного поля приходятся на места расположения резистивных пластин, то наблюдается максимум Q . При использовании же FSS, электромагнитные волны взаимодействуют также и с периодически повторяющимися элементами FSS. Таким образом, использование FSS «включает» еще один механизм управления зависимостью $Q(\omega)$ (помимо механизма, связанного с интерференцией волн). Поэтому неудивительно, что применение в поглотителях FSS позволило весьма близко подойти к пределу Розанова h_{\min} .

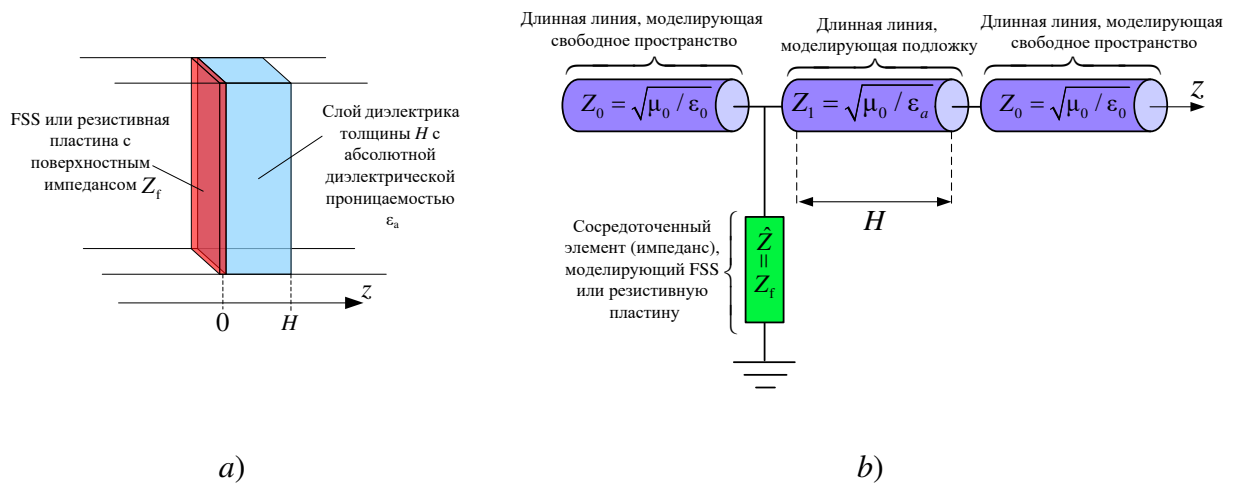


Рис. С.5. *a)* FSS поверхность (или тонкая резистивная пластина) на диэлектрической подложке толщиной H и *b)* ее эквивалентная схема замещения.

Как правило, при сравнении эффективностей FSS поглотителей пользуются следующими характеристиками:

- 1) количество слоев диэлектрика и количество FSS, используемых в поглотителе;
- 2) интервал частот $[f_L, f_H]$, в котором происходит уменьшение мощности падающей на поглотитель волны в заданное количество раз (здесь f_L и f_H – самая низкая и самая высокая частоты этого интервала соответственно);
- 3) ширина полосы поглощения: $BW = 2(f_H - f_L) / (f_H + f_L)$ (от англ. band width) ;
- 4) относительная ширина полосы поглощения: $BWR = f_H / f_L$ (от англ. band width ratio);
- 5) минимально возможная, согласно формуле (С.1), толщина поглотителя h_{min} ;
- 6) действительная толщина поглотителя h_{real} ;
- 7) показатель качества поглотителя $\Phi = h_{min} / h_{real}$.

Ниже в таблице С.1 проведено сравнение поглотителей из работ [45-54].

Ссылка	Кол-во диэл. слоев	Кол-во FSS	Год	Уменьшение мощности	Частоты, ГГц	BW	BWR	h_{\min} , мм	h_{real} , мм	Φ
[45]	6	4	2011	20 дБ	3.26-34.65	166 %	10.62	14.4	14.5	99%
[48]	3	3	2013	20 дБ	8-12	40%	1.50	2.5	3	83%
[49]	2	1	2013	20 дБ	2-9	127%	4.50	10.68	13.21	81%
[50]	1	1	2013	20 дБ	1.15-1.85	47%	1.60	2.8	4	70%
				30 дБ	1.27-1.75	32%	1.38			
[51]	1	1	2015	10 дБ	5.3-11.2	72%	2.11	3.94	4.47	88%
[52]	4	2	2018	10 дБ	2-17.07	158%	8.54	13.6	15	91%
[53]	2	1	2019	20 дБ	2.77-12.17	126%	4.39	10.69	13.2	81%
[47]	2	1	2020	10 дБ	3.07-18.95	144%	6.17	8.38	9.37	89%
[46]	4	2	2020	20 дБ	1-7	150%	7.00	24.07	25.07	96%
[54]	4	2	2021	20 дБ	0.88-15	178%	17.04	23.78	26	91%

Табл. С.1 сравнение эффективностей поглотителей из различных работ.

Рассмотрим работу [45], интересную тем, что в ней проводится сравнение восьмислойного поглотителя Яумана, в котором используется только резистивные пластины, и шестислойного поглотителя Яумана, в котором вместо восьми резистивных пластин используются лишь четыре high-pass FSS. В обоих случаях частотный диапазон, в котором требовалось достичь максимального поглощения, составлял 3.26-34.65 ГГц. При этом расчеты h_{\min} , проведенные согласно формуле (С.1), дали значение 14.4 мм. Толщина поглотителя, в котором использовались только резистивные пластины, составляла 31.4 мм, что больше h_{\min} в 2.18 раза ($\Phi = 46\%$). Толщина же поглотителя, в котором использовались FSS, составляла 14.5 мм, что всего на 0.7% превышает h_{\min} ($\Phi = 99\%$).

Из вышеприведенного примера, а также из табл. С.1, можно заключить, что технология FSS позволяет очень близко подойти к пределу Розанова h_{\min} , другими словами, позволяет изготавливать поглотители со значением Φ близким к 100%. Из обзора, приведенного в диссертации [249] (см. параграф 3.3 в [249]), следует, что в общем случае толщина градиентных поглотителей всегда оказывается больше, чем толщина FSS поглотителей при равной ширине полосы поглощения (градиентные поглотители дают выигрыш, когда требуется поглощение электромагнитных волн, падающих под углом к их

поверхности [249]). Поэтому в случае неактивных сред технология FSS наилучшим образом позволяет оптимизировать такие параметры поглотителя, как его толщина и ширина полосы поглощения. В то же время, задача оптимизации FSS поверхности требует подбора оптимального значения толщины h и удельной проводимости σ металлической пленки, из которой выполнена FSS, поскольку, как это было сказано выше, $R \sim 1/(h\sigma)$ (по поводу задач оптимизации h и σ см., например, статьи [45-47]). Характерные значения R составляют 50-500 Ом [45-47], что сравнимо с волновым сопротивлением вакуума $Z_0 = 376.73$ Ом. Последнее означает, что для металлов, обладающих высоким значением $\sigma \sim 10^6$ См/м (Cu, Al, Au, Ag) толщина h таких FSS поверхностей не должна превышать десятков нанометров.

Кроме того, при высоких частотах резистивные слои и FSS слои могут создаваться только на основе тонких нанометровых металлических пленок. Действительно для того, чтобы резистивный слой (FSS слой) играл роль сосредоточенного элемента, необходимо, чтобы толщина резистивного слоя (FSS слоя) h была много меньше толщины скин-слоя материала δ , из которого изготовлен резистивный слой (FSS слой). Если считать, что $\delta = (2/\omega\sigma\mu_0)^{1/2}$, $Z_f = 1/(\sigma h)$, то условие $h \ll \delta$ можно переписать в виде $h \ll 1.6 \cdot 10^6 R_s / \omega$. Поэтому при $Z_f = 50$ Ом, например, уже в терагерцовом (10^{12} Гц) диапазоне длин волн $h \ll 10$ мкм, то есть $h \sim 100$ нм, а в инфракрасном диапазоне (10^{13} Гц) $h \ll 1$ мкм, то есть $h \sim 10$ нм.

Приложение D

(справочное)

Модель Томсона проводимости тонких пленок

По-видимому, впервые явление уменьшения удельной проводимости слоя металла по мере уменьшения его толщины было обнаружено экспериментально в 1897 году в работе [250]. Это явление получило объяснение только после создания классической теории Друде в 1900 [25] году. Согласно теории Друде, удельная проводимость σ_{bulk} монокристаллического макроскопически большого (в котором не наблюдаются размерные эффекты) объема металла рассчитывается по формуле:

$$\sigma_{\text{bulk}} = n_e e^2 l_0 / (\langle v \rangle m^*), \quad (\text{D.1})$$

где n_e и $\langle v \rangle$ – концентрация и средняя скорость свободных электронов, а e , m^* , l_0 – заряд, эффективная масса и средняя длина свободного пробега электрона. В английском языке для σ_{bulk} используется термин «bulk conductivity».

Исходя из формулы (D.1), Томсон предположил ([99] 1901 год), что уменьшение проводимости пленок связано с тем, что поверхности пленки диффузно рассеивают электроны, из-за чего среднее (по всей толщине пленки) значение $\langle l_0 \rangle$ уменьшается (см. рис. D.1). Диффузное отражение означает, что направление скорости электрона после столкновения со стенками при $z=0$ и $z=h$ (ось Oz направлена перпендикулярно поверхности пленки) случайно и не зависит от направления скорости электрона до столкновения. При этом модуль скорости электрона сохраняется в силу закона сохранения энергии.

В таком подходе считается, что в случае макроскопически большого объема металла электроны между актами рассеяния проходят расстояние l_0 и движутся равномерно и прямолинейно. Поэтому в случае пленки длина свободного пробега конкретного электрона l равна либо l_0 (если траектория электрона не пересекает поверхностей пленки), либо равна длине траектории электрона до столкновения с поверхностью пленки. Таким образом, l становится локальной характеристикой и начинает зависеть от координаты z и от угла θ между направлением скорости электрона \mathbf{v} и осью Oz : $l = l(z, \theta)$.

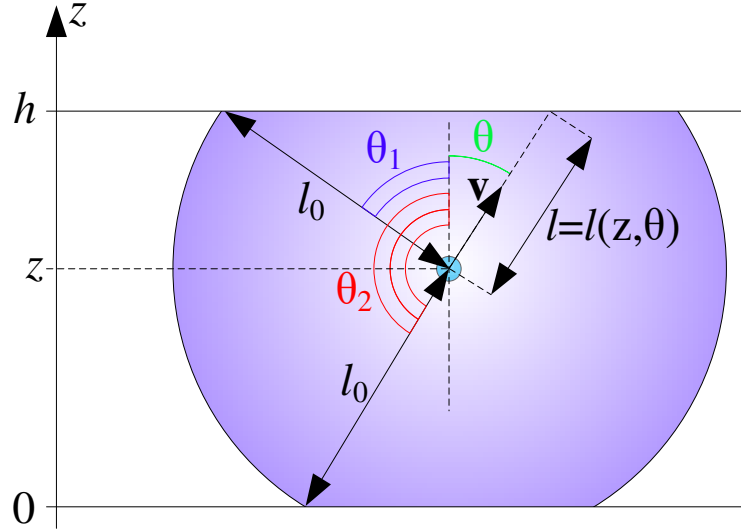


Рис. D.1. Рисунок, поясняющий подход Томсона для расчета длины свободного пробега электрона в пленке.

Рассмотрим наиболее интересный случай – случай достаточно тонких пленок, для которых толщина слоя металла $h < l_0$. Тогда независимо от координаты z имеется ненулевая вероятность столкновения электрона, как с верхней, так и с нижней поверхностью. В таком случае:

$$l(z, \theta, h) = \begin{cases} \frac{h-z}{\cos \theta}, \theta \in [0, \theta_1] \\ l_0, \theta \in [\theta_1, \theta_2] \\ -\frac{z}{\cos \theta}, \theta \in [\theta_2, \pi] \end{cases}, \quad (D.2)$$

где $\theta_1 = \arccos\{(h-z)/l_0\}$, $\theta_2 = \pi - \arccos(z/l_0)$.

Проведя в формуле (D.2) усреднение по всевозможным направлениям скорости электрона (считается, что все направления равновероятны), можно получить следующее выражение:

$$\frac{l(z, h)}{l_0} = \frac{1}{2} \frac{h}{l_0} \left\{ \left(1 - \frac{z}{h}\right) \ln\left(\frac{l_0}{h-z}\right) + \frac{z}{h} \ln\left(\frac{l_0}{z}\right) + 1 \right\}. \quad (D.3)$$

По предположению Томсона $\sigma(z, h) \sim l(z, h)$, поэтому для локальной проводимости получаем: $\sigma(z, h)/\sigma_{\text{bulk}} = l(z, h)/l_0$. После проведения усреднения по толщине слоя металла

$$\langle \sigma(h) \rangle = \frac{1}{h} \int_0^h \sigma(z, h) dz, \quad (D.4)$$

получим следующую формулу:

$$\frac{\langle \sigma(h) \rangle}{\sigma_{\text{bulk}}} = \frac{h}{2l_0} \left(\frac{3}{2} - \ln \left(\frac{h}{l_0} \right) \right). \quad (\text{D.5})$$

Несмотря на то, что модель Томсона является самой примитивной моделью размерного эффекта проводимости, она часто используется в современных работах для расчета сопротивления наноразмерных проводов и контактов [15, 22, 100]. Ее преимущества состоят в том, что численные алгоритмы расчета проводимости по данной модели достаточно просты. Локальная проводимость $\sigma(x,y,z)$ в каждой точке проводника рассчитывается независимо, поэтому для численного расчета могут быть использованы параллельные вычисления. По этой причине не требуется больших вычислительных мощностей. Входными параметрами модели служат только форма поперечного сечения провода и длина свободного пробега электрона в металле провода l_0 .

Конечно, данная модель не лишена недостатков. Очевидно, что она не может корректным образом описывать проводимость очень тонких образцов. Дело в том, что с уменьшением толщины пленки h , увеличивается доля электронов, траектория которых начинается с одной из поверхностей пленки. Это абсолютно не учитывается в модели Томсона. Действительно, рассмотрим электрон, траектория которого начинается из толщи металла пленки при $h \ll l_0$ (рис.D.2). Тогда, поскольку все направления скорости электрона считаются равновероятными, с очень большой вероятностью электрон рассеется на одной из поверхностей пленки. После рассеяния на этой поверхности опять же с очень большой вероятностью электрон рассеется на противоположной поверхности пленки (см. рис. D.2). Таким образом, при $h \ll l_0$ большинство траекторий между актами рассеяния электрона будут начинаться с металлических поверхностей.

Кроме того, теория Томсона не учитывает, что рассеяние электронов на поверхности металла может быть частично диффузным.

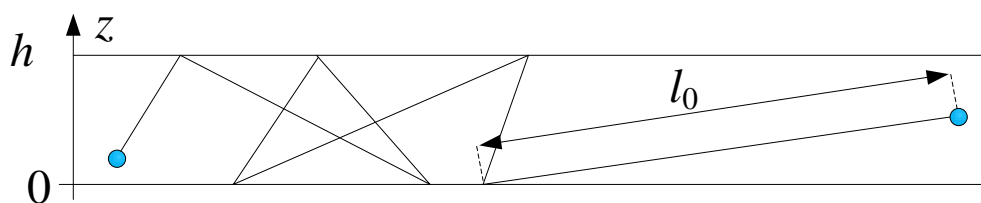


Рис. D.2. Характерная траектория электрона в пленке толщиной $h \ll l_0$.

Приложение Е

(справочное)

Модель Фукса-Зондхаймера проводимости тонких пленок

Возможно преодолеть трудности, возникающие в подходе Томсона, если проводить усреднение по ансамблю частиц, а не по отдельно взятому электрону. Этот подход был разработан Фуксом в 1937 [101] примерно через 10 лет после создания зонной теории металлов ([27] 1927 г.) и дополнен Зондхаймером ([103] 1951 г.), который впервые рассмотрел эффект Холла, возникающий в тонких пленках.

В подходе Фукса-Зондхаймера считается, что вероятность того, что за интервал времени dt электрон с энергией W рассеется на внутренних неоднородностях (дефектах или примесных атомах) кристаллической решетки одинакова как для макроскопического образца металла, так и для тонкой пленки. Данная вероятность равна $dt/\tau(W)$, где $\tau(W)$ – среднее время между столкновениями (время релаксации).

В теории Фукса-Зондхаймера поверхность Ферми считается сферической или близкой к сферической, что верно для щелочных (Li, K, Na, Rb, Cs) и благородных (Cu, Ag, Au) металлов. Тогда на сфере Ферми $\tau(W_F) = l_0/v_F$, где v_F – скорость электрона на сфере Ферми, l_0 – средняя длина свободного пробега электрона.

Считается, что при столкновении с поверхностью пленки $\beta \times 100\%$ электронов отражаются зеркально (β – коэффициент зеркальности, вводимый эмпирически), а оставшаяся часть электронов $(1-\beta) \times 100\%$ отражается диффузно. При зеркальном отражении сохраняется модуль импульса электрона и составляющая импульса, лежащая в плоскости поверхности пленки. Составляющая импульса, перпендикулярная поверхности пленки, меняет знак на противоположный.

Считается, что пленка находится во внешнем однородном электрическом поле \mathbf{E} , при этом вектор \mathbf{E} лежит в плоскости пленки. Для определенности будем считать, что амплитуда вектора \mathbf{E} равна E_0 , а сам вектор направлен вдоль оси Ox , см. рис. Е.1.

Используется классическое кинетическое уравнение Больцмана для одночастичной функции распределения $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, рассматривается стационарный случай $\partial f / \partial t = 0$:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial z} v_z - \frac{\partial f}{\partial v_x} \frac{|e| E_0}{m} = \text{Coll}[f]. \quad (\text{E.1})$$

Здесь, e и m – заряд и масса электрона, а $\text{Coll}[f]$ – интеграл столкновений, для которого Зондхаймер использует приближение времени релаксации:

$$\text{Coll}[f] = -\frac{f - f_0}{\tau(W)}, \quad (\text{E.2})$$

где f_0 – одночастичная функция распределения, соответствующая состоянию термодинамического равновесия, которая считается известной. Фукс использует несколько другое выражение для $\text{Coll}[f]$, однако, поскольку это не влияет на результат расчета проводимости, мы будем использовать приближение времени релаксации (Е.2).

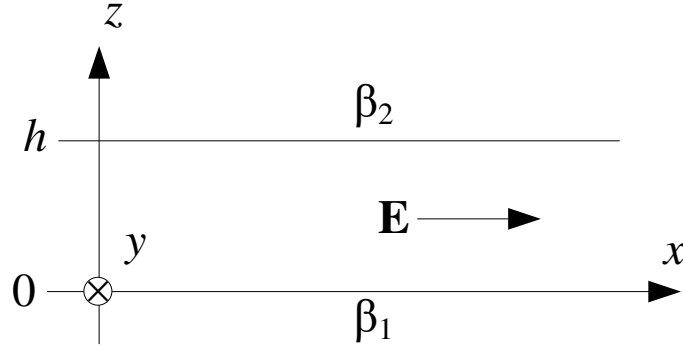


Рис. Е.1. Рисунок, поясняющий подход Фукса к расчету проводимости тонкой металлической пленки. β_1 и β_2 – коэффициенты зеркальности нижней и верхней поверхности пленки соответственно.

В уравнении (Е.1) считается, что $f = f(z, v_x, v_y, v_z)$. Зависимости от координат x и y нет, поскольку ни одна точка вдоль направления оси Ox (оси Oy) не является выделенной. Зависимость же от координаты z обусловлена поверхностями пленки при $z = 0$ и $z = h$.

Решение уравнения (Е.1) ищется в виде $f = f_0 + \delta f$, где δf – малое возмущение. Если пренебрегать вторым порядком малости по δf , а амплитуду E_0 также считать достаточно малой величиной, то для δf справедливо уравнение

$$v_z \frac{\partial \delta f(z, v_x, v_y, v_z)}{\partial z} + \frac{1}{\tau} \delta f(z, v_x, v_y, v_z) = \frac{|e| E_0}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x}. \quad (\text{Е.3})$$

Уравнение (Е.3) гораздо проще исходного уравнения (Е.1), поскольку (Е.3) является обыкновенным дифференциальным линейным уравнением относительно переменной z (проекции скорости v_x, v_y, v_z здесь выступают в качестве параметров). Общее решение уравнения (Е.3) записывается в виде:

$$\delta f(z, v_x, v_y, v_z) = g(v_x, v_y, v_z) e^{-\frac{z}{v_z \tau}} + \frac{|e| E_0}{m} \frac{e^{-\frac{z}{v_z \tau}}}{v_z} \int_0^z \frac{\partial f_0(x, y, z', v_x, v_y, v_z)}{\partial v_x} \times e^{\frac{z'}{v_z \tau}} dz'. \quad (\text{Е.4})$$

Здесь $g(v_x, v_y, v_z)$ – произвольная функция v_x, v_y, v_z , а z' – переменная интегрирования. Равновесная функция распределения f_0 составляется на основе распределения Ферми и выбирается в одном из двух видов:

$$f_0(\mathbf{v}) = f_0(v) = \frac{2m^3}{(2\pi\hbar)^3} f_F(v), \quad (\text{E.5})$$

$$f_0(\mathbf{v}) = f_0(v, v_z) = \frac{m^2}{h(2\pi\hbar)^2} f_F(v) \sum_{n_z=1}^{\infty} \delta\left(|v_z| - \frac{\pi\hbar n_z}{mh}\right), \quad (\text{E.6})$$

где

$$f_F(v) = \frac{1}{e^{(mv^2/2 - \mu)/\theta} + 1}. \quad (\text{E.7})$$

Здесь \hbar – приведенная постоянная Планка, $\theta = k_B T$ – термодинамическая температура (k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура), а μ – химический потенциал, который находится из условия нормировки функции распределения:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f_0(\mathbf{v}) dv_x dv_y dv_z = n_e, \quad (\text{E.8})$$

где n_e – концентрация свободных электронов в металле пленки. В формулах (E.5)-(E.6) путем добавления множителя 2 учтено, что возможны две проекции спина электрона на выделенную ось.

В случае использования распределения (E.5) для μ справедлива известная формула ([251], с. 213):

$$\mu(\theta) \cong \mu_0 \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{\theta}{\mu_0} \right)^2 + \dots \right), \quad \mu(\theta=0) = \mu_0 = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}. \quad (\text{E.9})$$

В случае использования распределения (E.6) μ находится численно из трансцендентного уравнения (см. приложение G к диссертации)

$$n_e = \frac{4\pi m \theta}{h(2\pi\hbar)^2} \sum_{n=1}^{\infty} \ln \left\{ 1 + e^{\frac{\mu}{\theta} - \frac{1}{2m\theta} \left(\frac{\pi\hbar}{h} \right)^2 n^2} \right\}. \quad (\text{E.10})$$

Можно показать (см. приложение G), что для $\mu_0 = \mu(\theta=0)$, выражение (E.10) несколько упрощается и приобретает вид системы

$$\frac{4\pi m n_{\max}}{h(2\pi\hbar)^2} \left\{ \mu_0 - \frac{1}{12m} \left(\frac{\pi\hbar}{h} \right)^2 (n_{\max} + 1)(2n_{\max} + 1) \right\} = n_e, \quad n_{\max} = \text{floor} \left(\sqrt{2m\mu_0} \frac{h}{\pi\hbar} \right). \quad (\text{E.11})$$

Здесь функцией $\text{floor}(x)$ обозначается операция округления x до наименьшего целого числа (например, $\text{floor}(5.1) = \text{floor}(5.9) = 5$). Систему (E.11) удобно решать методом итераций. Нулевое приближение $\mu_0^{[0]}$ можно рассчитывать по второй из формул (E.9). Стоит отметить, что систему (E.11) необходимо решать, не только для определения μ_0 , но также и для нахождения n_{\max} (числа подзон), поскольку сумма в (E.6) при $\theta \rightarrow 0$ будет включать в себя только слагаемые с $n_z = 1, 2, 3, \dots, n_{\max}$. Следовательно, n_{\max} будет входить в формулу для расчета проводимости.

Выполним оценки μ и n_{\max} для меди, для которой $n_e = 8.47 \times 10^{28} \text{ м}^{-3}$. Расчет μ , выполненный по второй из формул (Е.9) (т.е. для случая макроскопически большого объема металла при $\theta=0$) дает значение 7.04 эВ. Зависимость μ от температуры можно не учитывать, поскольку при $T = 300 \text{ К}$, $\theta = 0.026 \text{ эВ}$ в первой из формул (Е.9)

$$\frac{\pi^2}{12} \left(\frac{\theta}{\mu_0} \right)^2 \sim 10^{-5}.$$

Зависимость μ от толщины играет более важную роль, особенно для пленок толщиной несколько нанометров. На рис. Е.2 приведены графики зависимости μ и n_{\max} от толщины медной пленки h . Например, для $h = 1 \text{ нм}$, $\mu = 7.9 \text{ эВ}$, что на 12% больше значения 7.04 эВ.

Выражение (Е.6) используется в том случае, когда необходимо учесть квантование импульса электронов вдоль оси Oz . Как правило, если n_{\max} по порядку величины составляет сотни, квантование импульса не учитывается и используется формула (Е.5).

Как видно из формул (Е.5)-(Е.7), f_0 не зависит от пространственных координат. Поэтому в равенстве (Е.4) можно вынести $\partial f_0 / \partial v_x$ из-под знака интеграла. После взятия интеграла от оставшегося выражения, получим:

$$\delta f(z, \mathbf{v}) = \frac{\tau |e| E_0}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \left(1 + g_1(\mathbf{v}) e^{-\frac{z}{v_z \tau}} \right). \quad (\text{Е.12})$$

Здесь $g_1(\mathbf{v}) = g(\mathbf{v}) - 1$. Однако, поскольку $g(\mathbf{v})$ – произвольная функция, то $g_1(\mathbf{v})$ – также произвольна. В связи с этим формуле (Е.12) оставим обозначение « $g(\mathbf{v})$ ».

Для составления граничных условий, описывающих частично диффузное отражение, удобно ввести функции $f^+(z, \mathbf{v}) = f(z, \mathbf{v}) \Theta(v_z)$, $f^-(z, \mathbf{v}) = f(z, \mathbf{v}) \Theta(-v_z)$. Здесь $\Theta(x)$ – функция Хэвисайда, определяемая равенствами:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 1/2, & x = 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}. \quad (\text{Е.13})$$

Тогда $f^+(z, \mathbf{v})$ – функция распределения электронов, движущихся вдоль оси Oz , а $f^-(z, \mathbf{v})$ – против оси Oz . Аналогично введем δf^\pm и g^\pm , такие что

$$f^\pm(z, \mathbf{v}) = f_0(\mathbf{v}) \Theta(\pm v_z) + \delta f^\pm(z, \mathbf{v}), \quad \delta f^\pm(z, \mathbf{v}) = \frac{\tau |e| E_0}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \left(1 + g^\pm(\mathbf{v}) e^{-\frac{z}{|v_z| \tau}} \right) \Theta(\pm v_z),$$

$$g^\pm(\mathbf{v}) = g(\mathbf{v}) \Theta(\pm v_z). \quad (\text{Е.14})$$

Тогда на границе $z = 0$ должно выполняться следующее условие:

$$f^+ = \beta f^- + (1 - \beta) f_0. \quad (\text{Е.15})$$

Равенство (Е.15) отражает тот факт, что функция распределения отраженных от границы $z = 0$ электронов f^+ состоит из двух частей. Первое слагаемое в правой части (Е.15) ассоциируется с потоком электронов, которые отражаются зеркально от поверхности $z = 0$. Поток зеркально отраженных от границы $z = 0$ электронов равен потоку падающих на границу $z = 0$ электронов f^- , умноженному на коэффициент зеркальности β . Второе слагаемое в правой части (Е.15) ассоциируется с электронами, которые отражаются диффузно. После соударения со стенкой $z = 0$ поток таких электронов представляет собой равновесное распределение по скоростям f_0 , умноженное на $(1-\beta)$ – оставшуюся часть электронов. Подставляя сюда $f^\pm(z, \mathbf{v}) = f_0(\mathbf{v})\Theta(\pm v_z) + \delta f^\pm(z, \mathbf{v})$, пользуясь тем, что, согласно (Е.5)-(Е.7), $f_0(v_z) = f_0(-v_z)$, получим: $\delta f^+(z=0) = \beta \delta f^-(z=0)$. Более подробно о граничных условиях, используемых при диффузном отражении, можно прочитать в монографии [252] (§ 4.4 и §15.1).

Фукс и Зондхаймер вводили всего один коэффициент β . Мы, однако, рассмотрим более общий случай, впервые исследованный Лукасом ([102] 1965 г.), в котором поверхности пленки обладают разными коэффициентами зеркальности: β_1 при $z = 0$ и β_2 при $z = h$. Это больше соответствует условиям реального эксперимента (поскольку пленки обычно напыляются на подложки, то коэффициенты β_1 и β_2 не равны друг другу). В итоге граничные условия для δf выглядят следующим образом:

$$\delta f^+(z=0, v_x, v_y, v_z) = \beta_1 \delta f^-(z=0, v_x, v_y, -v_z); \quad \delta f^-(z=h, v_x, v_y, v_z) = \beta_2 \delta f^+(z=h, v_x, v_y, -v_z). \quad (\text{Е.16})$$

Подставляя общее решение (Е.14) в граничные условия (Е.16), получим систему двух линейных алгебраических уравнений относительно g^\pm . Решая эту систему, получим:

$$g^+(v_z, \tau(v)) = \frac{\beta_1(\beta_2 - 1) + e^{\frac{h}{|v_z|\tau}}(\beta_1 - 1)}{e^{\frac{|v_z|\tau}{h}} - \beta_1\beta_2 e^{-\frac{h}{|v_z|\tau}}}, \quad g^-(v_z, \tau(v)) = \frac{(\beta_2 - 1) + e^{-\frac{h}{|v_z|\tau}}\beta_2(\beta_1 - 1)}{e^{\frac{|v_z|\tau}{h}} - \beta_1\beta_2 e^{-\frac{h}{|v_z|\tau}}}. \quad (\text{Е.17})$$

Подставляя формулы (Е.17) в общее решение (Е.14), получим:

$$\delta f(z, \mathbf{v}) = \frac{\tau |e| E_0}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \times \left\{ 1 + g^+(v_z, \tau(v)) \times e^{-\frac{z}{\tau v_z}} \times \Theta(v_z) + g^-(v_z, \tau(v)) \times e^{-\frac{z}{\tau v_z}} \times \Theta(-v_z) \right\} =$$

$$= \frac{\tau |e| E_0}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \times \begin{cases} 1 + g^+(v_z, \tau(v)) \times e^{-\frac{z}{\tau v_z}}, & v_z \geq 0 \\ 1 + g^-(v_z, \tau(v)) \times e^{-\frac{z}{\tau v_z}}, & v_z < 0 \end{cases}. \quad (\text{Е.18})$$

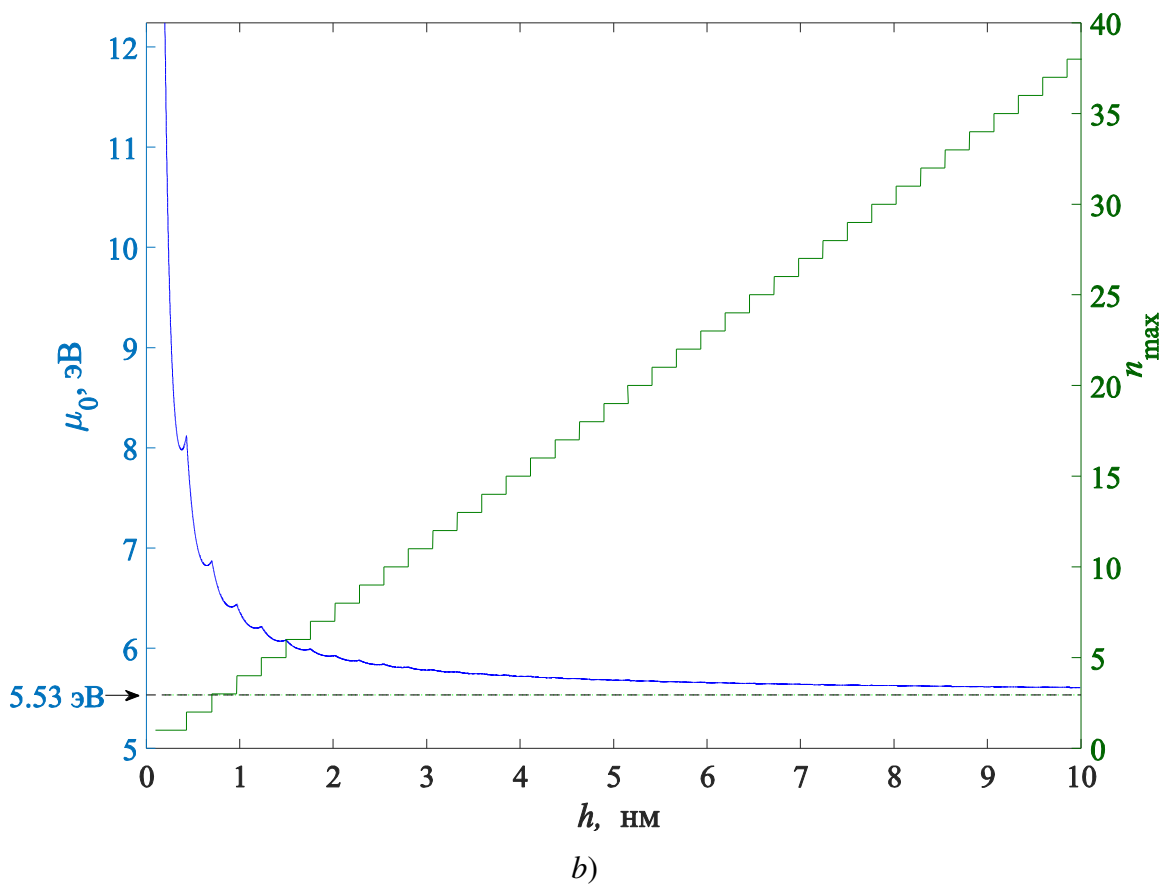
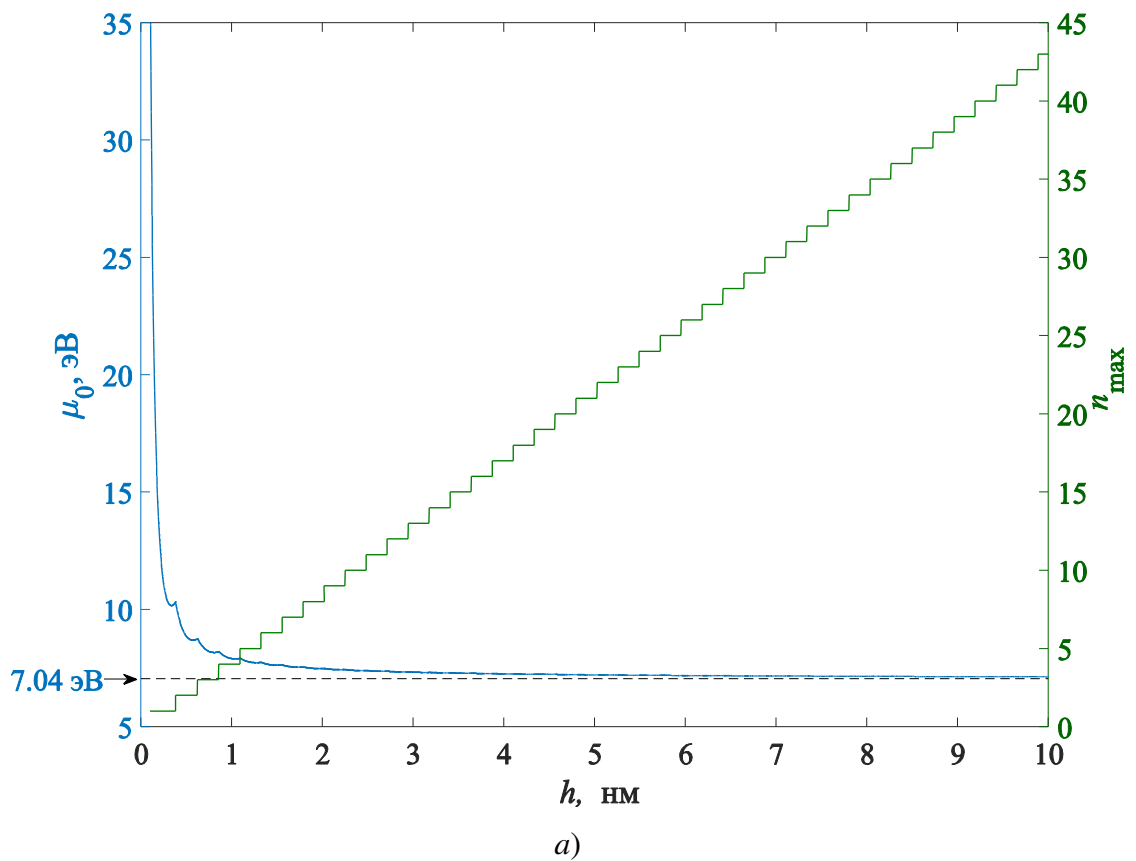


Рис. Е.2. Зависимость химического потенциала μ и числа подзон n_{\max} при нулевой температуре от толщины h пленок меди а) ($n_e = 8.47 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$) и пленок золота б) ($n_e = 5.9 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$).

Заметим, что при $h \rightarrow \infty$ выражение (E.18) сводится к формуле

$$\delta f(z, \mathbf{v}) = \frac{\tau |e| E_0}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x},$$

которая описывает решение уравнения Больцмана в случае макроскопически большого объема металла. Поэтому формула (E.18) приводит к следующей интерпретации теории Фукса: граничные условия (E.16) эквивалентны замене

$$\tau \rightarrow \tau + \tau_{\text{surf}},$$

где τ – время релаксации, ассоциирующееся с рассеянием электронов проводимости на неоднородностях кристаллической решетки, а τ_{surf} – время релаксации, ассоциирующееся с рассеянием электронов на неоднородностях поверхностей металла пленки, рассчитываемое по формуле

$$\tau_{\text{surf}} = \tau \left\{ g^+(v_z, \tau(v)) \times e^{-\frac{z}{\tau v_z}} \times \Theta(v_z) + g^-(v_z, \tau(v)) \times e^{-\frac{z}{\tau v_z}} \times \Theta(-v_z) \right\}.$$

Плотность протекающего по пленке тока вычисляется по формуле

$$j_x(z) = -|e| \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} v_x \delta f(z, \mathbf{v}) dv_x dv_y dv_z. \quad (\text{E.19})$$

Локальная удельная проводимость находится из (E.19), как отношение $\sigma(z, h) = j_x(z)/E_0$.

Если для f_0 использовать распределение (E.5), то после подстановки δf в (E.19) получится выражение:

$$\sigma(z, h) = \frac{2\pi\tau e^2 m^2 v_F^3}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^1 (1-\xi^2) \left\{ 2 + \frac{(\beta_1 - 1)(e^{-\frac{z}{\xi l_0}} + \beta_2 e^{-\frac{2h-z}{\xi l_0}}) + (\beta_2 - 1)(e^{-\frac{z-h}{\xi l_0}} + \beta_1 e^{-\frac{z+h}{\xi l_0}})}{1 - \beta_1 \beta_2 e^{-\frac{2h}{\xi l_0}}} \right\} d\xi \quad (\text{E.20})$$

Здесь $v_F = (2\mu/m)^{1/2}$, $l_0 = \tau v_F$. При выводе выражения (E.20) считалось, что $\partial f_F / \partial v = -mv \times \delta(mv^2/2 - \mu)$. Это равенство отражает тот факт, что электронный газ при комнатной температуре можно считать вырожденным. Подынтегральное выражение формулы (E.20) приведено к виду, удобному для численного интегрирования: ни в числителе, ни в знаменателе дроби нет возрастающих при $\xi \rightarrow 0$ экспонент. Для расчета μ в выражении (E.20) используется вторая из формул (E.9). Проводя усреднение $\sigma(z, h)$ по толщине пленки, получим формулу для средней проводимости $\langle \sigma(h) \rangle$, впервые выведенную Лукасом [102]:

$$\langle \sigma(h) \rangle = \frac{1}{h} \int_0^h \sigma(z, h) dz =$$

$$\frac{2\pi\tau e^2 m^2 v_F^3}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^1 (1-\xi^2) \left\{ 2 + \xi \frac{l_0}{h} \left(1 - e^{-\frac{h}{\xi l_0}} \right) \frac{(\beta_1 - 1)(1 + \beta_2 e^{\frac{h}{\xi l_0}}) + (\beta_2 - 1)(1 + \beta_1 e^{\frac{h}{\xi l_0}})}{1 - \beta_1 \beta_2 e^{-\frac{2h}{\xi l_0}}} \right\} d\xi \quad (\text{E.21})$$

Если же для f_0 использовать распределение (E.6) (при этом тройной интеграл в (E.19) можно вычислить точно) получится выражение:

$$\sigma(z, h) = \frac{2\pi e^2 \theta}{h(2\pi\hbar)^2} \sum_{n=1}^{\infty} \left(2 + g^+(v_{z,n}) e^{\frac{-z}{\tau v_{z,n}}} + g^-(v_{z,n}) e^{\frac{z}{\tau v_{z,n}}} \right) \ln \left(1 + e^{\frac{1}{\theta} \left(\frac{mv_{z,n}^2}{2} - \mu(\theta) \right)} \right). \quad (\text{E.22})$$

Здесь $v_{z,n} = \pi\hbar n / (mh)$, а химический потенциал μ рассчитывается по формуле (E.10). При $\theta \rightarrow 0$ выражение (E.22) несколько упрощается:

$$\sigma(z, h) = \frac{\pi m e^2}{h(2\pi\hbar)^2} \sum_{n=1}^{n_{\max}} \left(2 + g^+(v_{z,n}) e^{\frac{-z}{\tau v_{z,n}}} + g^-(v_{z,n}) e^{\frac{z}{\tau v_{z,n}}} \right) \left(\frac{2\mu_0}{m} - v_{z,n}^2 \right), \quad (\text{E.23})$$

а химический потенциал μ рассчитывается по формулам (E.11). Усредняя $\sigma(z, h)$ в (E.23) по толщине пленки, получим

$$\langle \sigma(h) \rangle = \frac{\pi m e^2}{h(2\pi\hbar)^2} \sum_{n=1}^{n_{\max}} \left(2 + g^+(v_{z,n}) \frac{\tau v_{z,n}}{h} \left(1 - e^{\frac{-h}{\tau v_{z,n}}} \right) + g^-(v_{z,n}) \frac{\tau v_{z,n}}{h} \left(e^{\frac{h}{\tau v_{z,n}}} - 1 \right) \right) \left(\frac{2\mu_0}{m} - v_{z,n}^2 \right). \quad (\text{E.24})$$

В конце данного приложения обсудим область применимости уравнения Больцмана, а также справедливость приближения времени релаксации.

Уравнение Больцмана выводится непосредственно из кинетического уравнения Паули (англ. master equation), которое в свою очередь можно вывести из уравнения для матрицы плотности (или из уравнения Шредингера) при следующих предположениях [253]. Пусть гамильтониан N-частичной квантовой системы можно представить в виде $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{\mathcal{U}}$, где \hat{H}_0 – гамильтониан идеальной N-частичной системы (системы без взаимодействия), а $\hat{\mathcal{U}}$ – N-частичный оператор потенциальной энергии, содержащий все взаимодействие частиц друг с другом и с внешними полями. Предполагается, что $\hat{\mathcal{U}} \ll \hat{H}_0$ в том смысле, что для расчета поправок к матрице плотности, учитывающей взаимодействие $\hat{\mathcal{U}}$, возможно использование метода последовательных приближений. Пусть в начальный момент времени матрица плотности в базисе собственных векторов оператора \hat{H}_0 имеет диагональный вид. Пусть W_n – собственные значения оператора \hat{H}_0 , здесь индекс «n» соответствует набору квантовых чисел, задающему N-частичное состояние. Тогда уравнение Паули справедливо в том случае, когда динамика

исследуемой системы рассматривается в течение характерного интервала времени Δt , удовлетворяющего неравенствам:

$$\frac{\hbar}{W_n} \ll \Delta t \ll \frac{\hbar}{U_{mk}}, \text{ для } \forall n, m, k,$$

где U_{mk} – матричные элементы оператора \hat{U} в базисе из собственных векторов оператора \hat{H}_0 , причем каждый из индексов « m » и « k » задает N -частичное состояние. В случае, когда \hat{U} описывает взаимодействие электронов с внешними полями, \hat{U} может быть представлено в виде суммы одночастичных операторов потенциальной энергии:

$$\hat{U} = \sum_{i=1}^N \hat{U}_i.$$

Тогда непосредственно из уравнения Паули может быть выведено уравнение Больцмана, которое для случая частиц со спином $1/2$ имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{df(\mathbf{p}, s, t)}{dt} &= \text{Coll}[f] = \\ &= \sum_{\mathbf{p}', s'} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{p}, s | \hat{U} | \mathbf{p}', s' \rangle|^2 \delta(W_{\mathbf{p}, s} - W_{\mathbf{p}', s'}) \{ f(\mathbf{p}', s', t)(1 - f(\mathbf{p}, s, t)) - f(\mathbf{p}, s, t)(1 - f(\mathbf{p}', s', t)) \}. \end{aligned} \quad (\text{E.25})$$

Здесь $\langle \mathbf{p}, s | \hat{U} | \mathbf{p}', s' \rangle$ – матричный элемент одночастичного оператора потенциальной энергии \hat{U} , описывающей взаимодействие электронов с внешними полями; $|\mathbf{p}', s'\rangle$ – одночастичный волновой вектор (являющийся собственным вектором оператора \hat{H}_0), описывающий электрон с импульсом \mathbf{p}' и проекцией спина s' в системе без взаимодействия; $W_{\mathbf{p}', s'}$ – собственное значение оператора \hat{H}_0 такое, что $\hat{H}_0 |\mathbf{p}', s'\rangle = W_{\mathbf{p}', s'} |\mathbf{p}', s'\rangle$; $\delta(W_{\mathbf{p}, s} - W_{\mathbf{p}', s'})$ – дельта функция Дирака. В фигурных скобках (E.25) множители $(1 - f(\mathbf{p}, s, t))$ и $(1 - f(\mathbf{p}', s', t))$ появляются вследствие учета статистики Ферми-Дирака. Однако если решение уравнения (E.26) (по аналогии с решением уравнения (E.1)) искать в виде $f(\mathbf{p}, s, t) = f_0(\mathbf{p}, s) + \delta f(\mathbf{p}, s, t)$, где $f_0(\mathbf{p}, s)$ – равновесное распределение (для которого $\text{Coll}[f_0(\mathbf{p}, s)] \equiv 0$), а $\delta f(\mathbf{p}, s, t)$ – малое возмущение (такое что $\delta f(\mathbf{p}, s, t) \ll f_0(\mathbf{p}, s)$), то множители $(1 - f(\mathbf{p}, s, t))$ и $(1 - f(\mathbf{p}', s', t))$ будут давать слагаемые второго порядка малости по $\delta f(\mathbf{p}, s, t)$. По этой причине их не следует учитывать. Если еще к тому же считать, что потенциальная энергия электрона не зависит от проекции его спина, тогда $\langle \mathbf{p}, s | \hat{U} | \mathbf{p}', s' \rangle = \delta_{ss'} \langle \mathbf{p} | \hat{U} | \mathbf{p}' \rangle$ и уравнение (E.25) сводится к виду

$$\frac{df(\mathbf{p}, s, t)}{dt} = \text{Coll}[f] = \sum_{\mathbf{p}'} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{p} | \hat{U} | \mathbf{p}' \rangle|^2 \delta(W_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}'}) \{ f(\mathbf{p}', s, t) - f(\mathbf{p}, s, t) \}. \quad (\text{E.26})$$

Плотность электрического тока находится по формуле

$$\mathbf{j} = -|e| \sum_{\mathbf{p}, s} \frac{\mathbf{p}}{m} f(\mathbf{p}, s, t) = -2|e| \sum_{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{p}}{m} f(\mathbf{p}, s, t), \quad (\text{E.27})$$

однако множитель 2 уже учтен в формулах (E.5)-(E.7) для f_0 , поэтому можно переписать уравнения (E.26)-(E.27) в виде, где вообще отсутствует спиновый индекс:

$$\frac{df(\mathbf{p}, t)}{dt} = \text{Coll}[f] = \sum_{\mathbf{p}'} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{p} | \hat{U} | \mathbf{p}' \rangle|^2 \delta(W_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}'}) \{f(\mathbf{p}', t) - f(\mathbf{p}, t)\}, \quad (\text{E.28})$$

$$\mathbf{j} = -|e| \sum_{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{p}}{m} f(\mathbf{p}, t). \quad (\text{E.29})$$

Перейдем теперь к обсуждению приближения времени релаксации. Суть этого приближения заключается в том, что полное выражение для интеграла столкновений $\text{Coll}[f]$ в (E.28) заменяется выражением

$$\frac{df(\mathbf{p}, t)}{dt} = \text{Coll}[f] = -\frac{f(\mathbf{p}, t) - f_0(\mathbf{p})}{\tau(p)} = -\frac{\delta f(\mathbf{p}, t)}{\tau(p)}. \quad (\text{E.30})$$

Справедливость использования приближения времени релаксации обычно доказывается апостериорно (см. главу 16 в [254]). Другими словами, доказательство проводится следующим образом. Сначала решается уравнение (E.30). Затем полученное решение подставляется в полное выражение для интеграла столкновений $\text{Coll}[f]$ в (E.28). Затем совершается попытка доказать, что формула для $\text{Coll}[f]$ из (E.28) сводится к формуле для $\text{Coll}[f]$ из (E.30).

Для решения Фукса-Зондхаймера (E.18) вышеописанную схему доказательства удастся выполнить только для случая, когда n_{\max} велико и сумма в (E.28) хорошо может быть аппроксимирована тройным интегралом. Сумма в (E.28) берется по всем возможным значениям импульса \mathbf{p}' . Эти значения определяются путем решения одночастичного уравнения Шредингера для системы без взаимодействия, для которой одночастичные волновые функции могут быть легко найдены. Тонкая пленка в таком подходе заменяется системой типа «потенциальный ящик с бесконечно высокими стенками». Пусть этот «ящик» занимает объем $V=L_x L_y L_z$ в пространственной области $x \in [0, L_x]$, $y \in [0, L_y]$, $z \in [0, L_z]$. Если для волновой функции использовать периодические граничные условия, то в координатном представлении

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p}' \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}'\right), \quad \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}\right), \quad \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle = \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} = \delta_{n_x n'_x} \delta_{n_y n'_y} \delta_{n_z n'_z}, \quad (\text{E.31})$$

здесь $\mathbf{r} = \{x, y, z\}$ – радиус-вектор, а проекции вектора импульса $\mathbf{p} = \{p_x, p_y, p_z\}$ принимают дискретные значения

$$p_x(n_x) = \frac{2\pi\hbar n_x}{L_x}, \quad p_y(n_y) = \frac{2\pi\hbar n_y}{L_y}, \quad p_z(n_z) = \frac{2\pi\hbar n_z}{L_z}, \quad n_{x,y,z} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (\text{E.32})$$

Конкретизируем вид потенциала \hat{U} . Пусть в тонкой пленке находится N_d точечных (нульмерных) дефектов, центры которых расположены в точках с радиус-векторами \mathbf{a}_j , $j=1, 2, 3, \dots, N_d$. Пусть потенциальная энергия взаимодействия любого точечного дефекта и электрона проводимости одинакова и равна $u(\mathbf{r}, \mathbf{a}_j) = u(|\mathbf{r} - \mathbf{a}_j|)$. В таком случае

$$\hat{U} = \sum_{j=1}^{N_d} u(|\mathbf{r} - \mathbf{a}_j|). \quad (\text{E.33})$$

Рассчитаем теперь матричный элемент оператора \hat{U} :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} | \hat{U} | \mathbf{p}' \rangle &= \langle \mathbf{p} | \sum_{j=1}^{N_d} u(|\mathbf{r} - \mathbf{a}_j|) | \mathbf{p}' \rangle = \sum_{j=1}^{N_d} \langle \mathbf{p} | u(|\mathbf{r} - \mathbf{a}_j|) | \mathbf{p}' \rangle = \\ &= \frac{1}{V} \sum_{j=1}^{N_d} \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} dx dy dz e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} u(|\mathbf{r} - \mathbf{a}_j|) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}} = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^{N_d} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy dz e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} u(|\mathbf{r} - \mathbf{a}_j|) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}} \quad (\text{E.34}) \end{aligned}$$

Последнее равенство в цепочке равенств (E.34) справедливо только в случае следующих предположений. Во-первых, потенциал $u(|\mathbf{r} - \mathbf{a}_j|)$ должен быть короткодействующим, то есть при характерном расстоянии $\Delta R > 0$, $[du(R)/dR]_{R=\Delta R} = 0$. Во-вторых, необходимо, чтобы $\Delta R \ll L_z$. Тогда рассеяние электронов проводимости на внутренних дефектах кристаллической решетки можно рассматривать по аналогии со случаем макроскопически большого объема металла. Действительно, при $\Delta R \ll L_z$ интегрирование по объему пленки V в выражении (E.34) можно заменить интегрированием по бесконечной области. Относительную погрешность, возникающую при такой замене, можно оценить как отношение числа дефектов N_s , расположенных на расстоянии меньшем ΔR от границы металла (в приповерхностном объеме V_s , см. рис. E.3), к общему числу дефектов N_d . Если считать, что распределение дефектов по толщине пленки близко к равномерному, то

$$\frac{N_s}{N_d} = \frac{V_s}{V} = \frac{2\Delta R L_x L_y}{L_x L_y L_z} = 2 \frac{\Delta R}{L_z} \ll 1. \quad (\text{E.35})$$

Далее, выполним в интеграле (E.34) замену $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{a}_j$, получим,

$$\langle \mathbf{p} | \hat{U} | \mathbf{p}' \rangle = \frac{1}{V} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} u(R) e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{R}} d^3 R \right\} \times \left(\sum_{j=1}^{N_d} e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{a}_j} \right). \quad (\text{E.36})$$

Выражение для матричного элемента оператора U распалось на два множителя. Подынтегральное выражение больше не зависит от радиус-векторов дефектов \mathbf{a}_j . Это позволяет провести дальнейшее упрощение тройного интеграла в (E.36). Заметим, что

поскольку интегрирование проводится по бесконечной области, мы вправе выбрать любую систему координат для вычисления данного интеграла.

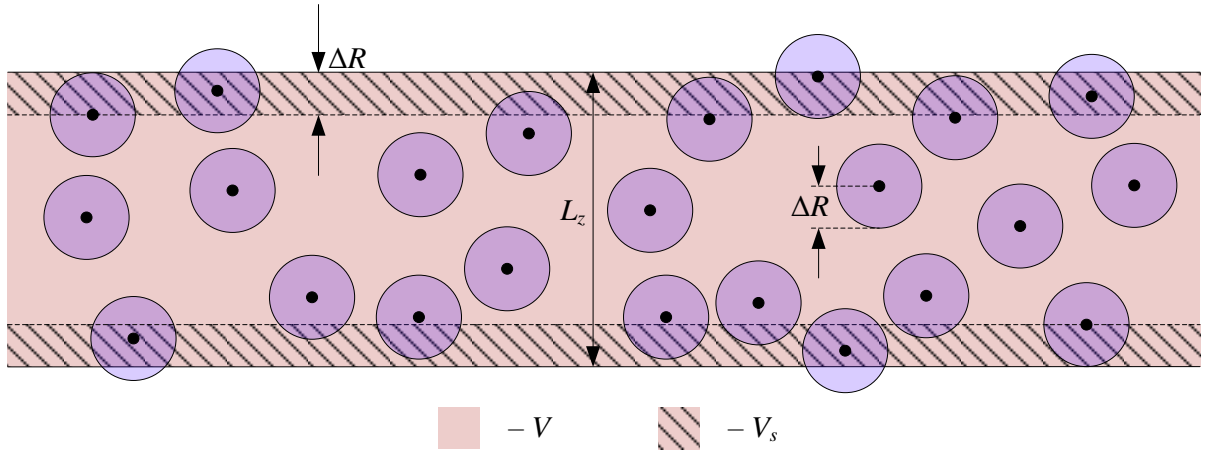


Рис. Е.3. Приповерхностный объем V_s в тонкой пленке.

Удобнее всего выбрать систему координат, ось Oz которой сонаправлена с вектором $\mathbf{p}' - \mathbf{p}$, а затем перейти к сферическим координатам. В таком случае $d^3R = R^2 \sin\theta dR d\varphi d\theta$, при этом $(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{R} = R|\mathbf{p}' - \mathbf{p}| \cos\theta$. Тогда выражение в фигурных скобках (Е.36) преобразуется следующим образом:

$$\begin{aligned}
 & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} u(R) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{R}} d^3R = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{\infty} dR R^2 \sin\theta u(R) e^{\frac{i}{\hbar}|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|R \cos\theta} = \\
 & = 2\pi \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{\infty} dR R^2 \sin\theta u(R) e^{\frac{i}{\hbar}|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|R \cos\theta} = -2\pi \int_0^{\infty} u(R) R^2 \left(\int_1^{-1} d(\cos\theta) e^{\frac{i}{\hbar}|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|R \cos\theta} \right) dR = \\
 & = 2\pi \int_0^{\infty} u(R) R^2 \left(\int_{-1}^1 e^{\frac{i}{\hbar}|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|R \xi} d\xi \right) dR = 2\pi \int_0^{\infty} u(R) R^2 \left(\frac{e^{\frac{i}{\hbar}|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|R} - e^{-\frac{i}{\hbar}|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|R}}{\frac{i}{\hbar}|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|R} \right) dR = \\
 & = 4\pi \int_0^{\infty} u(R) R^2 \frac{1}{\frac{1}{\hbar}|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|R} \left(\frac{e^{\frac{i}{\hbar}|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|R} - e^{-\frac{i}{\hbar}|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|R}}{2i} \right) dR = 4\pi \int_0^{\infty} u(R) R \frac{\sin\left(\frac{1}{\hbar}|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|R\right)}{\frac{1}{\hbar}|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|} dR.
 \end{aligned}$$

В итоге (Е.36) можно переписать в виде

$$\langle \mathbf{p} | \hat{U} | \mathbf{p}' \rangle = \frac{\tilde{u}(|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|)}{V} \times \left(\sum_{j=1}^{N_d} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{a}_j} \right), \quad \tilde{u}(|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|) = 4\pi \int_0^{\infty} u(R) R \frac{\sin\left(\frac{1}{\hbar}|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|R\right)}{\frac{1}{\hbar}|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|} dR. \quad (\text{Е.37})$$

Заметим, что область значений функции \tilde{u} представляет собой множество вещественных чисел. Следовательно,

$$\left| \langle \mathbf{p} | \hat{U}(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_{N_d}) | \mathbf{p}' \rangle \right|^2 = \langle \mathbf{p} | \hat{U} | \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p} | \hat{U} | \mathbf{p}' \rangle^* = \frac{\tilde{u}^2(|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|)}{V^2} \times \left(\sum_{\substack{j=1,2,\dots,N_d \\ k=1,2,\dots,N_d}} e^{\frac{i}{\hbar} m(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot (\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_k)} \right). \quad (\text{E.38})$$

Для расчета выражения (E.38) необходимо задавать положения каждого точечного дефекта кристаллической решетки, т.е. задавать все радиус-вектора $\mathbf{a}_j, j=1,2,\dots,N_d$. Такое подробное описание явно излишне. По этой причине удобно, считая вектора \mathbf{a}_j случайными величинами, провести усреднение равенства (E.38) по некоторой функции распределения $s(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_{N_d})$. Обозначим операцию усреднения по распределению $s(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_{N_d})$ удвоенными квадратными скобками:

$$\left[\left[F(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_{N_d}) \right] \right] = \int_V d^3 a_1 \dots \int_V d^3 a_{N_d} F(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_{N_d}) s(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_{N_d}). \quad (\text{E.39})$$

Будем предполагать, что распределение дефектов по толще металла равномерно, таким образом, $s(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_{N_d}) = 1/V^{N_d}$, поэтому

$$\left[\left[\langle \mathbf{p} | \hat{U}(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_{N_d}) | \mathbf{p}' \rangle \right]^2 \right] = \frac{\tilde{u}^2(|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|)}{V^2} \times \left(\sum_{\substack{j=1,2,\dots,N_d \\ k=1,2,\dots,N_d}} \left[\left[e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot (\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_k)} \right] \right] \right). \quad (\text{E.40})$$

Сумму в (E.40) удобно разбить на три:

$$\sum_{\substack{j=1,2,\dots,N_d \\ k=1,2,\dots,N_d}} \left[\left[e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot (\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_k)} \right] \right] = \sum_{j=k} \left[\left[e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot (\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_k)} \right] \right] + \sum_{j < k} \left[\left[e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot (\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_k)} \right] \right] + \sum_{j > k} \left[\left[e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot (\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_k)} \right] \right]. \quad (\text{E.41})$$

Первая сумма в правой части (E.41) равна N_d , вторая и третья суммы, как можно заметить, являются комплексно сопряженными слагаемыми. Рассмотрим более подробно вторую сумму, вспоминая про дискретность значений импульса (E.32), получим

$$\begin{aligned} \left[\left[e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot (\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_k)} \right] \right] &= \frac{1}{V^{N_d}} \int_V d^3 a_1 \dots \int_V d^3 a_{N_d} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot (\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_k)} = \frac{1}{V^2} \int_V d^3 a_j \int_V d^3 a_k e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot (\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_k)} = \\ &= \frac{1}{V^2} \int_V d^3 a_j e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{a}_j} \int_V d^3 a_k e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{a}_k} = \frac{1}{V^2} \int_V e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} d^3 r \times \int_V e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} d^3 r = \\ &= \int_V \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{V}} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} d^3 r \times \int_V \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{V}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} d^3 r = \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle \times \langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle \equiv \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle \equiv \delta_{n_x n'_x} \delta_{n_y n'_y} \delta_{n_z n'_z} \equiv \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}. \end{aligned}$$

Поэтому в итоге из формул (E.40)-(E.41) следует:

$$\left[\left[\langle \mathbf{p} | \hat{U}(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_{N_d}) | \mathbf{p}' \rangle \right]^2 \right] = \frac{\tilde{u}^2(|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|)}{V^2} \times \{ N_d + N_d(N_d - 1) \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \}. \quad (\text{E.42})$$

Подставим (E.42) в уравнение Больцмана (E.28) вместо $\left| \langle \mathbf{p} | \hat{U} | \mathbf{p}' \rangle \right|^2$, учтем, что слагаемое с $\delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}$ даст ноль, поскольку $\delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \{ f(\mathbf{p}', t) - f(\mathbf{p}, t) \} = \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \{ f(\mathbf{p}, t) - f(\mathbf{p}, t) \} \equiv 0$, получим

$$\frac{df(\mathbf{p}, t)}{dt} = \text{Coll}[f] = \sum_{\mathbf{p}'} \frac{2\pi n_d}{\hbar V} \tilde{u}^2(|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|) \delta(W_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}'}) \{f(\mathbf{p}', t) - f(\mathbf{p}, t)\}. \quad (\text{E.43})$$

Здесь $n_d = N_d/V$ – концентрация точечных дефектов в металле пленки. Стоит отметить, что проведенное подобным образом усреднение является полуфеноменологической процедурой. Операцию корректно применять только напрямую к уравнению Больцмана (E.28). При таком подходе, однако, одночастичная функция распределения $f = f(\mathbf{p}, t, \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_{N_d})$, поэтому

$$\begin{aligned} \frac{d f(\mathbf{p}, t)}{dt} &= \sum_{\mathbf{p}'} \frac{2\pi}{\hbar} \delta(W_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}'}) \left[\left| \langle \mathbf{p} | \hat{U} | \mathbf{p}' \rangle \right|^2 \{f(\mathbf{p}', t) - f(\mathbf{p}, t)\} \right] = \\ &= \sum_{\mathbf{p}'} \frac{2\pi}{\hbar} \delta(W_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}'}) \frac{\tilde{u}^2(|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|)}{V^2} \times \left[\{f(\mathbf{p}', t) - f(\mathbf{p}, t)\} \sum_{j,k=1,2,\dots,N_d} e^{\frac{i}{\hbar} m(\mathbf{v}' - \mathbf{v}) \cdot (\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_k)} \right] \end{aligned}$$

Только если считать, что

$$\left[\{f(\mathbf{v}', t) - f(\mathbf{v}, t)\} \sum_{j,k=1,2,\dots,N_d} e^{\frac{i}{\hbar} m(\mathbf{v}' - \mathbf{v}) \cdot (\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_k)} \right] = \{f(\mathbf{v}', t) - f(\mathbf{v}, t)\} \left[\sum_{j,k=1,2,\dots,N_d} e^{\frac{i}{\hbar} m(\mathbf{v}' - \mathbf{v}) \cdot (\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_k)} \right]$$

мы приходим к результату (E.43).

Докажем, наконец, справедливость использования приближения времени релаксации, а также выведем формулу для $\tau(\mathbf{v})$. Для этого, как уже было упомянуто выше, необходимо предположить, что n_{\max} достаточно велико и сумма в (E.28) хорошо аппроксимируется тройным интегралом. Из формул (E.32) следует, что «шаг дискретизации» в объеме импульсного пространства $\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = (2\pi\hbar)^3/V$, поэтому выражение (E.43) можно представить в виде

$$\begin{aligned} \frac{df(\mathbf{p}, t)}{dt} &= \frac{1}{m^3} \frac{df(\mathbf{v}, t)}{dt} = \text{Coll}[f] = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp'_x dp'_y dp'_z \frac{2\pi n_d}{\hbar V} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{u}^2(|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|) \delta(W_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}'}) \{f(\mathbf{p}', t) - f(\mathbf{p}, t)\} = \\ &= \frac{n_d}{(2\pi)^2 \hbar^4} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dv'_x dv'_y dv'_z \tilde{u}^2(m|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|) \delta\left(m \frac{v^2 - v'^2}{2}\right) \{f(\mathbf{v}', t) - f(\mathbf{v}, t)\}. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\frac{df(\mathbf{v}, t)}{dt} = \frac{n_d m^3}{(2\pi)^2 \hbar^4} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dv'_x dv'_y dv'_z \tilde{u}^2(m|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|) \delta\left(m \frac{v^2 - v'^2}{2}\right) \{f(\mathbf{v}', t) - f(\mathbf{v}, t)\}. \quad (\text{E.44})$$

При получении (E.44) использовался тот факт, что $m^3 f(\mathbf{p}, t) = f(\mathbf{v}, t)$, что следует из условия нормировки (E.8).

Далее, заметим, что решение (E.18) может быть записано в виде:

$$\delta f(z, v_x, v_y, v_z) = C v_x F(v) G(z, v_z, \tau(v)), \quad (\text{E.45})$$

где

$$G(z, v_z, \tau(v)) = \left\{ 1 + \left[1 + g^+(v_z, \tau(v)) \Theta(v_z) + g^-(v_z, \tau(v)) \Theta(-v_z) \right] e^{\frac{-z}{v_z \tau(v)}} \right\} \times \left[\sum_{n_z=1}^{\infty} \delta \left(|v_z| - \frac{\pi \hbar n_z}{m h} \right) \right],$$

$$C = \text{const} = \begin{cases} \frac{2\tau |e| E_0 m^2}{(2\pi \hbar)^3} \\ \frac{\tau |e| E_0 m}{(2\pi \hbar)^2 h} \end{cases}, \quad F(v) = \frac{1}{v} \frac{\partial f_F(v)}{\partial v}.$$

Здесь верхний ряд формул соответствует распределению (E.5), а нижний ряд – (E.6). Подставим решение в виде $f = f_0 + \delta f$, где δf определяется формулой (E.45), в (E.44), получим:

$$\begin{aligned} \text{Coll}[f] &= \underbrace{\text{Coll}[f_0]}_0 + \text{Coll}[\delta f] = \\ &= \frac{n_d m^3}{(2\pi)^2 \hbar^4} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{u}^2(m|\mathbf{v}-\mathbf{v}'|) \delta \left(m \frac{v^2 - v'^2}{2} \right) \delta f(\mathbf{v}', t) dv'_x dv'_y dv'_z - \right. \\ &\quad \left. - \delta f(\mathbf{v}, t) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{u}^2(m|\mathbf{v}-\mathbf{v}'|) \delta \left(m \frac{v^2 - v'^2}{2} \right) dv'_x dv'_y dv'_z \right\} = \\ &= \frac{n_d m^3}{(2\pi)^2 \hbar^4} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{u}^2(m|\mathbf{v}-\mathbf{v}'|) \delta \left(m \frac{v^2 - v'^2}{2} \right) C v'_x F(v') G(z, v'_z, \tau(v')) dv'_x dv'_y dv'_z - \right. \\ &\quad \left. - \delta f(\mathbf{v}, t) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{u}^2(m|\mathbf{v}-\mathbf{v}'|) \delta \left(m \frac{v^2 - v'^2}{2} \right) dv'_x dv'_y dv'_z \right\}. \quad (\text{E.46}) \end{aligned}$$

Докажем теперь, что первое слагаемое в фигурных скобках (E.46) равно нулю. Для этого снова воспользуемся произвольностью выбора системы координат, в которой рассчитывается интеграл. Выберем систему отсчета так, чтобы ее ось Oz была сонаправлена с вектором \mathbf{v} , а затем перейдем к сферическим координатам, в которых $dv'_x dv'_y dv'_z = v'^2 \sin\theta dv' d\varphi d\theta$. При этом

$$|\mathbf{v} - \mathbf{v}'| = \sqrt{v^2 + v'^2 - 2vv' \cos\theta} = v\sqrt{2} \sqrt{1 - \cos\theta}. \quad (\text{E.47})$$

В (E.47) учтено, что в подынтегральном выражении можно производить замену $v' \rightarrow v$ вследствие того, что там присутствует дельта функция. Учитывая также то, что $v'_x = v' \cos\varphi \sin\theta$, $v'_z = v' \cos\theta$ получим

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{u}^2(m|\mathbf{v}-\mathbf{v}'|) \delta \left(m \frac{v^2 - v'^2}{2} \right) v'_x F(v') G(z, v'_z, \tau(v')) dv'_x dv'_y dv'_z =$$

$$\begin{aligned}
&= v^3 \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} \tilde{u}^2(m\sqrt{2}v\sqrt{1-\cos\theta}) \delta\left(m\frac{v^2-v'^2}{2}\right) \sin\theta F(v')G(z, v'\cos\theta, \tau(v')) \sin\theta \cos\varphi dv'd\theta d\varphi = \\
&v^3 \underbrace{\int_0^{2\pi} \cos\varphi d\varphi}_0 \times \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} \tilde{u}^2(m\sqrt{2}v\sqrt{1-\cos\theta}) \delta\left(m\frac{v^2-v'^2}{2}\right) \sin\theta F(v')G(z, v'\cos\theta, \tau(v')) \sin\theta dv'd\theta \equiv 0.
\end{aligned}$$

На этом доказательство заканчивается: мы показали, что в частном случае решения Фукса-Зондхаймера (E.45) верно равенство

$$\text{Coll}[f] = -\delta f / \tau(v), \quad (\text{E.48})$$

где

$$1/\tau(v) = \frac{n_d m^3}{(2\pi)^2 \hbar^4} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{u}^2(m|\mathbf{v}-\mathbf{v}'|) \delta\left(m\frac{v^2-v'^2}{2}\right) dv'_x dv'_y dv'_z. \quad (\text{E.49})$$

Интеграл в (E.49) можно несколько упростить:

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{u}^2(m|\mathbf{v}-\mathbf{v}'|) \delta\left(m\frac{v^2-v'^2}{2}\right) dv'_x dv'_y dv'_z = \\
&= \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \tilde{u}^2(mv\sqrt{2}\sqrt{1-\cos\theta}) \frac{2}{m} \delta(v^2-v'^2) v'^2 \sin\theta dv'd\varphi d\theta = \\
&= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{\infty} d\left(\frac{v'^2}{2}\right) v' \tilde{u}^2(mv\sqrt{2}\sqrt{1-\cos\theta}) \frac{2}{m} \delta(v^2-v'^2) \sin\theta = \\
&= \frac{2\pi v}{m} \int_0^{\pi} \tilde{u}^2(mv\sqrt{2}\sqrt{1-\cos\theta}) \sin\theta d\theta = \frac{2\pi v}{m} \int_{-1}^1 \tilde{u}^2(mv\sqrt{2}\sqrt{1-\xi}) d\xi
\end{aligned}$$

В итоге для времени релаксации $\tau(v)$ получаем следующую формулу:

$$1/\tau(v) = \frac{n_d v m^2}{2\pi \hbar^4} \int_{-1}^1 \tilde{u}^2(mv\sqrt{2}\sqrt{1-\xi}) d\xi, \quad \tilde{u}(\zeta) = 4\pi \int_0^{\infty} u(R) R \frac{\sin(\zeta R/\hbar)}{\zeta/\hbar} dR, \quad (\text{E.50})$$

где $u(R)$ – потенциальная энергия взаимодействия электрона и точечного дефекта кристаллической решетки, R – расстояние между электроном и точечным дефектом, n_d – концентрация точечных дефектов в металле тонкой пленки.

Модель Фукса-Зондхаймера более 30 лет использовалась для расчета проводимости тонких пленок для сравнения экспериментальных и теоретических кривых. В формулах проводимости (E.20)-(E.24), по сути, присутствуют три подгоночных параметра: длина свободного пробега электрона l_0 и коэффициенты зеркальности β_1 и β_2 . Длина свободного пробега электрона является подгоночным параметром в силу того, что она зависит от концентрации дефектов кристаллической решетки n_d , что в свою очередь определяется условиями напыления металла.

Из результатов многочисленных экспериментальных работ, в которых проводилась подгонка параметров l_0 , β_1 , β_2 для сопоставления теоретических и экспериментальных зависимостей проводимости, стало очевидным следующее. Какие бы значения β_1 и β_2 не выбирались бы, значение параметра l_0 , как правило, на несколько порядков меньше, чем табличное значение длины пробега электрона в металле пленки. Такое сильное расхождение возникает из-за того, что в реальности пленки чаще всего представляют собой поликристаллические металлические структуры, что абсолютно не учитывается в модели Фукса-Зондхаймера. Включение в модель проводимости дополнительного механизма рассеяния – рассеяния электронов на межкристаллитных границах – было сделано в 1969 году в модели Маядаса-Шаткеса-Дженека.

Приложение F
(справочное)

Модель Маядаса-Шаткеса-Дженека проводимости тонких металлических пленок

Основной проблемой модели проводимости Фукса-Зондхаймера является то, что она описывает проводимость лишь монокристаллических пленок, поскольку в ней учтено всего два механизма рассеяния электронов: рассеяние на дефектах кристаллической решетки и рассеяние на поверхностях металла пленки. В 1969 году в работах Маядаса, Шаткеса и Дженека [113-114] впервые была создана модель проводимости тонких пленок, в которой был учтен еще один механизм рассеяния: рассеяние электронов на межкуристаллитных границах. По этой причине модель Маядаса-Шаткеса-Дженека (далее модель МШД) включает в себя модель Фукса-Зондхаймера как частный случай и подходит для расчета проводимости поликристаллических пленок.

Главное предположение, сделанное в модели МШД, состоит в том, что три вышеописанных механизма рассеяния не влияют друг на друга, поэтому их можно рассматривать по отдельности. Это предположение, с одной стороны существенно упрощает выкладки, но с другой стороны является слабым местом модели.

С математической точки зрения, данное предположение означает, что при включении в модель Фукса-Зондхаймера еще одного механизма рассеяния электронов, интеграл столкновений $\text{Coll}[f]$ может быть представлен в виде суммы

$$\text{Coll}[f] = \text{Coll}_{\text{FS}}[f] + \text{Coll}_{\text{Cr}}[f], \quad (\text{F.1})$$

где $\text{Coll}_{\text{FS}}[f] = -(f-f_0)/\tau$ – интеграл столкновений, используемый в модели Фукса-Зондхаймера (здесь f_0 – равновесная функция распределения), а $\text{Coll}_{\text{Cr}}[f]$ – интеграл столкновений, описывающий рассеяние электронов на межкуристаллитных границах. Причем вид $\text{Coll}_{\text{Cr}}[f]$ не зависит от вида $\text{Coll}_{\text{FS}}[f]$.

Найдем выражение для $\text{Coll}_{\text{Cr}}[f]$. Согласно теории полуклассического уравнения Больцмана, изложенной в приложении E (см. формулу (E.28))

$$\text{Coll}_{\text{Cr}}[f] = \sum_{\mathbf{p}'} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{p} | \hat{U}_{\text{Cr}} | \mathbf{p}' \rangle|^2 \delta(W_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}'}) \{f(\mathbf{p}', t) - f(\mathbf{p}, t)\}, \quad (\text{F.2})$$

здесь \hat{U}_{Cr} – оператор потенциальной энергии, соответствующей потенциальной энергии взаимодействия электрона проводимости и межкуристаллитных границ, а $\langle \mathbf{p} | \hat{U}_{\text{Cr}} | \mathbf{p}' \rangle$ – матричный элемент данного оператора в базисе из плоских волн (решений уравнения Шредингера) с импульсами \mathbf{p} и \mathbf{p}' .

Здесь наиболее наглядно видны следствия предположения о независимости механизмов рассеяния. Данное предположение неявно было сделано и в теории Фукса-Зондхаймера, поскольку в ней процесс рассеяния электронов на поверхностях металлической пленки учитывается как граничное условие, которое не зависит от вида интеграла столкновений $\text{Coll}_{\text{FS}}[f]$. В общем же случае вклады трех описанных выше механизмов рассеяния неотделимы друг от друга и их, вообще говоря, следует учитывать в одном интеграле столкновений $\text{Coll}[f]$. Сделать это можно следующим образом.

Пусть \hat{U}_d – потенциальная энергия взаимодействия электрона проводимости с дефектами кристаллической решетки, а \hat{U}_s – потенциальная энергия взаимодействия электрона проводимости с неоднородностями поверхностей металла пленки. Тогда при строгом выводе формулы для интеграла столкновений $\text{Coll}[f]$, одновременно учитывающего вклад этих трех механизмов рассеяния, необходимо сделать следующие расчеты:

$$\begin{aligned} \left| \langle \mathbf{p} | \hat{U}_{\text{Cr}} + \hat{U}_d + \hat{U}_s | \mathbf{p}' \rangle \right|^2 &= \left| \langle \mathbf{p} | \hat{U}_{\text{Cr}} | \mathbf{p}' \rangle \right|^2 + \left| \langle \mathbf{p} | \hat{U}_d | \mathbf{p}' \rangle \right|^2 + \left| \langle \mathbf{p} | \hat{U}_s | \mathbf{p}' \rangle \right|^2 + \\ &+ 2\text{Re} \left\{ \langle \mathbf{p} | \hat{U}_{\text{Cr}} | \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p} | \hat{U}_d | \mathbf{p}' \rangle \right\} + 2\text{Re} \left\{ \langle \mathbf{p} | \hat{U}_d | \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p} | \hat{U}_s | \mathbf{p}' \rangle \right\} + 2\text{Re} \left\{ \langle \mathbf{p} | \hat{U}_{\text{Cr}} | \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p} | \hat{U}_s | \mathbf{p}' \rangle \right\}. \end{aligned}$$

Поэтому

$$\begin{aligned} \text{Coll}[f] &= \sum_{\mathbf{p}'} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \mathbf{p} | \hat{U}_{\text{Cr}} + \hat{U}_d + \hat{U}_s | \mathbf{p}' \rangle \right|^2 \delta(W_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}'}) \{ f(\mathbf{p}', t) - f(\mathbf{p}, t) \} = \\ &= \text{Coll}_{\text{Cr}}[f] + \text{Coll}_d[f] + \text{Coll}_s[f] + \text{Coll}_{\text{Cr-d}}[f] + \text{Coll}_{\text{Cr-s}}[f] + \text{Coll}_{\text{s-d}}[f], \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \text{Coll}_{\text{Cr}}[f] &= \sum_{\mathbf{p}'} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \mathbf{p} | \hat{U}_{\text{Cr}} | \mathbf{p}' \rangle \right|^2 \delta(W_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}'}) \{ f(\mathbf{p}', t) - f(\mathbf{p}, t) \}, \\ \text{Coll}_d[f] &= \sum_{\mathbf{p}'} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \mathbf{p} | \hat{U}_d | \mathbf{p}' \rangle \right|^2 \delta(W_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}'}) \{ f(\mathbf{p}', t) - f(\mathbf{p}, t) \}, \\ \text{Coll}_s[f] &= \sum_{\mathbf{p}'} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \mathbf{p} | \hat{U}_s | \mathbf{p}' \rangle \right|^2 \delta(W_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}'}) \{ f(\mathbf{p}', t) - f(\mathbf{p}, t) \}, \\ \text{Coll}_{\text{Cr-s}}[f] &= \sum_{\mathbf{p}'} \frac{2\pi}{\hbar} 2\text{Re} \left\{ \langle \mathbf{p} | \hat{U}_{\text{Cr}} | \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p} | \hat{U}_s | \mathbf{p}' \rangle \right\} \delta(W_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}'}) \{ f(\mathbf{p}', t) - f(\mathbf{p}, t) \}, \\ \text{Coll}_{\text{d-s}}[f] &= \sum_{\mathbf{p}'} \frac{2\pi}{\hbar} 2\text{Re} \left\{ \langle \mathbf{p} | \hat{U}_d | \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p} | \hat{U}_s | \mathbf{p}' \rangle \right\} \delta(W_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}'}) \{ f(\mathbf{p}', t) - f(\mathbf{p}, t) \}, \\ \text{Coll}_{\text{Cr-d}}[f] &= \sum_{\mathbf{p}'} \frac{2\pi}{\hbar} 2\text{Re} \left\{ \langle \mathbf{p} | \hat{U}_{\text{Cr}} | \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p} | \hat{U}_d | \mathbf{p}' \rangle \right\} \delta(W_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}'}) \{ f(\mathbf{p}', t) - f(\mathbf{p}, t) \}. \end{aligned}$$

Как видно, $\text{Coll}[f]$ не распадается на прямую сумму $\text{Coll}_{\text{Cr}}[f] + \text{Coll}_s[f] + \text{Coll}_d[f]$. Далее, однако, мы будем следовать статьям [113-114] и будем работать в предположении

о независимости механизмов рассеяния. Формулы для удельной проводимости σ , полученные в таком предположении, будут иметь характер оценок σ сверху.

Вернемся к расчету интеграла столкновений (F.2). При выводе выражения для $\text{Coll}_{\text{Cr}}[f]$ для удобства мы будем считать, что металлическая пленка занимает область пространства $x \in [-L_x/2, L_x/2]$, $y \in [-L_y/2, L_y/2]$, $z \in [-L_z/2, L_z/2]$, толщина пленки $h = L_z$, объем пленки $V = L_x L_y L_z$, а плоскости поверхностей металла пленки параллельны плоскости Oxy .

Конкретизируем вид потенциала \hat{U}_{Cr} . В модели МШД используется потенциал, представляющий собой набор «стенок» из δ -функций с одинаковым весом U_0 , расположенных перпендикулярно оси Ox (поскольку электрическое поле направлено вдоль оси Ox) на различных расстояниях $x_{n+1} - x_n$ друг от друга:

$$\hat{U}_{\text{Cr}} = U_0 \sum_{n=1}^{N_{\text{Cr}}} \delta(x - x_n). \quad (\text{F.3})$$

Здесь N_{Cr} – число межкусталлитных границ, а x_n – x -координата n -ой межкусталлитной границы. Такой вид потенциала предполагает, что все межкусталлитные границы эквивалентны между собой.

Стоит сказать несколько слов об эквивалентности межкусталлитных границ. Межкусталлитная граница отделяет друг от друга два монокристаллических участка металла. Кристаллографические ориентации этих участков могут «срастаться» на этой границе под разными углами. Для низкоугловых границ, как правило, энергетически выгодными являются только определенные значения этого «угла срастания». Межкусталлитные границы с разным углом срастания не могут являться эквивалентными. Поэтому для составления более строгой модели необходимо вводить разные виды стенок, которые соответствуют разным значениям углов срастания. Кроме того, для более точного описания, конечно, стоит учитывать то, что межкусталлитные границы представляют собой ломаные линии, которые могут быть ориентированы произвольным образом в плоскости пленки (плоскости Oxy).

Вернемся к расчету матричного элемента. Сначала мы будем предполагать, что оператор импульса обладает дискретным спектром, а собственные функции гамильтониана, определяются выражениями (E.31)-(E.32), тогда

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} | \hat{U}_{\text{Cr}} | \mathbf{p}' \rangle &= U_0 \langle \mathbf{p} | \sum_{n=1}^{N_{\text{Cr}}} \delta(x - x_n) | \mathbf{p}' \rangle = U_0 \langle p_x | \sum_{n=1}^{N_{\text{Cr}}} \delta(x - x_n) | p'_x \rangle \underbrace{\langle p_y | p'_y \rangle}_{\delta_{p_y p'_y}} \underbrace{\langle p_z | p'_z \rangle}_{\delta_{p_z p'_z}} = \\ &= U_0 \delta_{p_y p'_y} \delta_{p_z p'_z} \frac{1}{L_x} \sum_{n=1}^{N_{\text{Cr}}} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx e^{-\frac{i}{\hbar} p_x x} \delta(x - x_n) e^{\frac{i}{\hbar} p'_x x} = \frac{U_0}{L_x} \delta_{p_y p'_y} \delta_{p_z p'_z} \sum_{n=1}^{N_{\text{Cr}}} e^{\frac{i}{\hbar} (p'_x - p_x) x_n}, \end{aligned}$$

поэтому

$$\left| \langle \mathbf{p} | \hat{U}_{Cr}(x_1, x_2, \dots, x_{N_{Cr}}) | \mathbf{p}' \rangle \right|^2 = \frac{U_0^2}{L_x^2} \delta_{p_y p'_y} \delta_{p_z p'_z} \sum_{n,m=1,2,\dots,N_{Cr}} e^{\frac{i}{\hbar}(p'_x - p_x)(x_n - x_m)}. \quad (\text{F.4})$$

Здесь $\delta_{p_y p'_y} \delta_{p_z p'_z}$ – символы Кронекера.

Число N_{Cr} является макроскопически большим. Поэтому не имеет смысла задавать положение каждой «стенки». Вместо этого следует провести усреднение формулы (F.4) по некоторому распределению $s = s(x_1, x_2, \dots, x_{N_{Cr}})$. Эту операцию усреднения, так же как и в приложении E, мы будем обозначать двойными квадратными скобками $\mathcal{L} \dots$. Вместе с усреднением необходимо проводить операцию статического предельного перехода вида $N_{Cr} \rightarrow \infty, L_x \rightarrow \infty, N_{Cr} / L_x \equiv 1/d$. Обозначим применение этой операции символом \mathcal{L} . Поскольку оператор \mathcal{L} действует и на L_x , то прежде чем проводить усреднение выражения (F.4), необходимо перейти от суммирования по p'_x в (F.2) к интегрированию, поскольку при таком переходе как раз появляется множитель L_x :

$$\begin{aligned} \text{Coll}_{Cr}[f] &= \sum_{\mathbf{p}'} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \mathbf{p} | \hat{U}_{Cr} | \mathbf{p}' \rangle \right|^2 \delta(W_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}'}) \{f(\mathbf{p}', t) - f(\mathbf{p}, t)\} = \\ &= \sum_{p'_y, p'_z} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp'_x}{2\pi\hbar} \frac{2\pi}{\hbar} L_x \left| \langle \mathbf{p} | \hat{U}_{Cr} | \mathbf{p}' \rangle \right|^2 \delta(W_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}'}) \{f(\mathbf{p}', t) - f(\mathbf{p}, t)\}. \end{aligned} \quad (\text{F.5})$$

В итоге нам необходимо рассчитать

$$\mathcal{L} \left[\left\langle L_x \left| \langle \mathbf{p} | \hat{U}_{Cr} | \mathbf{p}' \rangle \right|^2 \right\rangle \right]. \quad (\text{F.6})$$

В качестве функции распределения $s = s(x_1, x_2, \dots, x_{N_{Cr}})$ Маядес, Шаткес и Дженек предлагают функцию, похожую на распределения Гаусса

$$s(x_1, x_2, \dots, x_{N_{Cr}}) = \frac{1}{L_x} \frac{\exp\left(-\sum_{n=1}^{N_{Cr}-1} (x_{n+1} - x_n - d_{Cr})^2 / 2D_{Cr}^2\right)}{(2\pi D_{Cr}^2)^{(N_{Cr}-1)/2}}. \quad (\text{F.7})$$

Здесь d_{Cr} – среднее расстояние между межкристаллитными стенками (иными словами, средний размер кристаллита), D_{Cr} – среднеквадратичное отклонение размера кристаллитов от его среднего значения d_{Cr} . Функция распределения (F.7) имеет смысл только при применении к ней оператора \mathcal{L} . Продемонстрируем, что в пределе \mathcal{L} функция распределения нормирована на единицу:

$$\mathcal{L} \left(\int_{-L_x/2}^{L_x/2} \dots \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx_1 dx_2 \dots dx_{N_{Cr}} s(x_1, x_2, \dots, x_{N_{Cr}}) \right) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{L} (dx_1 dx_2 \dots dx_{N_{Cr}} s(x_1, x_2, \dots, x_{N_{Cr}})) =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{L} \left\{ \exp \left(- \sum_{n=1}^{N_{Cr}-1} (x_{n+1} - x_n - d_{Cr})^2 / 2D_{Cr}^2 \right) \frac{1}{(2\pi D_{Cr}^2)^{(N_{Cr}-1)/2} L_x} dx_1 dx_2 \dots dx_{N_{Cr}} \right\} = \dots \quad (F.8)$$

Выражение (F.8) по своей сути является функциональным интегралом $[Dx \cdot s[x]]$ (называемым также интегралом по траекториям или интегралом Фейнмана). Для расчета этого интеграла введем новые переменные $w_1, w_2, \dots, w_{N_{Cr}}$ и сделаем следующую замену:

$$x_n = w_1 + \dots + w_n, \quad n = 1, 2, \dots, N_{Cr}. \quad (F.9)$$

Таким образом, $x_1 = w_1, x_2 = w_1 + w_2, x_3 = w_1 + w_2 + w_3$ и т.д, а $x_{n+1} - x_n = w_{n+1}$. Якобиан J такого преобразования оказывается равен единице. Действительно, поскольку

$$\partial x_n / \partial w_m = \partial (w_1 + \dots + w_n) / \partial w_m = \begin{cases} 1, & n \geq m \\ 0, & n < m \end{cases},$$

то J будет представлять собой детерминант от нижнетреугольной матрицы, содержащей лишь единицы

$$J = \det \left(\frac{\partial x_n}{\partial w_m} \right) = \begin{vmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial w_1} & \frac{\partial x_1}{\partial w_2} & \dots & \frac{\partial x_1}{\partial w_{N_{Cr}}} \\ \frac{\partial x_2}{\partial w_1} & \frac{\partial x_2}{\partial w_2} & \dots & \frac{\partial x_2}{\partial w_{N_{Cr}}} \\ \vdots & & & \vdots \\ \frac{\partial x_{N_{Cr}}}{\partial w_1} & \frac{\partial x_{N_{Cr}}}{\partial w_2} & \dots & \frac{\partial x_{N_{Cr}}}{\partial w_{N_{Cr}}} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & 1 \end{vmatrix} \equiv 1.$$

Продолжим равенство (F.8) применяя вышеуказанную замену переменных:

$$\begin{aligned} & \dots = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{L} \left(\frac{1}{(2\pi D_{Cr}^2)^{(N_{Cr}-1)/2} L_x} \exp \left(- \sum_{n=1}^{N_{Cr}-1} (x_{n+1} - x_n - d_{Cr})^2 / 2D_{Cr}^2 \right) dx_1 dx_2 \dots dx_{N_{Cr}} \right) = \\ & = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{L} \left(\frac{1}{(2\pi D_{Cr}^2)^{(N_{Cr}-1)/2} L_x} \exp \left(- \sum_{n=1}^{N_{Cr}-1} (w_{n+1} - d_{Cr})^2 / 2D_{Cr}^2 \right) dw_1 dw_2 \dots dw_{N_{Cr}} \right) = \\ & = \mathcal{L} \left(\underbrace{\int_{-L_x/2}^{L_x/2} \frac{dw_1}{L_x}}_1 \times \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-(w_2 - d_{Cr})^2 / 2D_{Cr}^2}}{\sqrt{2\pi D_{Cr}^2}} dw_2}_1 \times \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-(w_3 - d_{Cr})^2 / 2D_{Cr}^2}}{\sqrt{2\pi D_{Cr}^2}} dw_3}_1 \times \dots \times \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-(w_{N_{Cr}} - d_{Cr})^2 / 2D_{Cr}^2}}{\sqrt{2\pi D_{Cr}^2}} dw_{N_{Cr}}}_1 \right) = 1. \quad (F.10) \end{aligned}$$

Условие нормировки на единицу можно кратко записать как $\mathcal{L} 1 = 1$. Пользуясь вышепоказанными математическими приемами, проведем теперь расчет (F.6).

$$\mathcal{L} \left[L_x \left\langle \mathbf{p} \left| \hat{U}_{Cr}(x_1, x_2, \dots, x_{N_{Cr}}) \right| \mathbf{p}' \right\rangle^2 \right] = \mathcal{L} \left(\frac{U_0^2}{L_x} \delta_{p_y p_y'} \delta_{p_z p_z'} \sum_{n,m=1,2,\dots,N_{Cr}} \left[e^{i(p_x' - p_x)(x_n - x_m)} \right] \right) =$$

$$\mathcal{L} \left\{ U_0^2 \delta_{p_y p'_y} \delta_{p_z p'_z} \frac{1}{L_x} \left(\sum_{n=m} \left[e^{\frac{i}{\hbar}(p'_x - p_x)(x_n - x_m)} \right] + \sum_{1 \leq m < n \leq N_{Cr}} \left[e^{\frac{i}{\hbar}(p'_x - p_x)(x_n - x_m)} \right] + \sum_{1 \leq n < m \leq N_{Cr}} \left[e^{\frac{i}{\hbar}(p'_x - p_x)(x_n - x_m)} \right] \right) \right\} = \dots \quad (\text{F.11})$$

В первой сумме выражения (F.11), экспонента равна единице, так как $n=m$. Как было показано выше $\mathcal{L} 1 = 1$, поэтому

$$\mathcal{L} \left(\frac{1}{L_x} \sum_{n=m} \left[e^{\frac{i}{\hbar}(p'_x - p_x)(x_n - x_m)} \right] \right) = \mathcal{L} \left(\frac{1}{L_x} \sum_{n=1}^{N_{Cr}} 1 \right) = \frac{N_{Cr}}{L_x} \equiv \frac{1}{d_{Cr}}. \quad (\text{F.12})$$

Вторая и третья суммы в (F.11) являются комплексно сопряженными величинами, поэтому далее рассмотрим лишь вторую сумму:

$$\begin{aligned} & \mathcal{L} \left\{ \frac{1}{L_x} \sum_{1 \leq m < n \leq N_{Cr}} \left[e^{\frac{i}{\hbar}(p'_x - p_x)(x_n - x_m)} \right] \right\} = \\ & = \mathcal{L} \left(\sum_{1 \leq m < n \leq N_{Cr}} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \dots \int_{-L_x/2}^{L_x/2} e^{\frac{i}{\hbar}(p'_x - p_x)(x_n - x_m)} s(x_1, x_2, \dots, x_{N_{Cr}}) dx_1 dx_2 \dots dx_{N_{Cr}} \right) = \\ & = \sum_{1 \leq m < n \leq \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{L} \left\{ dx_1 dx_2 \dots dx_{N_{Cr}} e^{\frac{i}{\hbar}(p'_x - p_x)(x_n - x_m)} s(x_1, x_2, \dots, x_{N_{Cr}}) \frac{1}{L_x} \right\} = \\ & = \sum_{1 \leq m < n \leq \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{L} \left\{ dw_1 dw_2 \dots dw_{N_{Cr}} e^{\frac{i}{\hbar}(p'_x - p_x) \sum_{l=m+1}^n w_l} s(w_1, w_2, \dots, w_{N_{Cr}}) \frac{1}{L_x} \right\} = \\ & = \sum_{1 \leq m < n \leq \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{L} \left\{ dw_1 dw_2 \dots dw_{N_{Cr}} e^{\frac{i}{\hbar}(p'_x - p_x) \sum_{l=m+1}^{n-m} w_l} \frac{1}{(2\pi D_{Cr}^2)^{(N_{Cr}-1)/2} L_x^2} e^{-\sum_{l=1}^{N_{Cr}-1} (w_{l+1} - d_{Cr})^2 / 2D_{Cr}^2} \right\} = \\ & = \sum_{1 \leq m < n \leq \infty} \mathcal{L} \left\{ \frac{1}{L_x} \times \underbrace{\int_{-L_x/2}^{L_x/2} \frac{dw_1}{L_x}}_1 \times A^{n-m} \times C^{N_{Cr}-1-(n-m)} \right\} = \dots, \quad (\text{F.13}) \end{aligned}$$

где

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{(w-d_{Cr})^2}{2D^2} + \frac{i}{\hbar}(p'_x - p_x)w} \frac{dw}{\sqrt{2\pi D_{Cr}^2}}, \quad C = \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{(w-d_{Cr})^2}{2D^2}} \frac{dw}{\sqrt{2\pi D_{Cr}^2}}.$$

При этом $C \equiv 1$, поскольку это есть интеграл Гаусса. Подынтегральное выражение для A также сводится к интегралу Гаусса, если в экспоненте выделить полный квадрат. Поскольку

$$-\frac{(w-d_{Cr})^2}{2D_{Cr}^2} + \frac{i}{\hbar}(p'_x - p_x)w = -\frac{\{(w-d_{Cr}) - iD_{Cr}^2(p'_x - p_x)/\hbar\}^2}{2D_{Cr}^2} - \frac{D_{Cr}^2(p'_x - p_x)^2}{2\hbar^2} - \frac{id_{Cr}(p'_x - p_x)}{\hbar},$$

то

$$A = e^{-\frac{1}{2}D_{Cr}^2(p'_x - p_x)^2/\hbar^2 - id_{Cr}(p'_x - p_x)/\hbar} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{\{(w-d) - iD_{Cr}^2(p'_x - p_x)/\hbar\}^2}{2D^2}} \frac{dw}{\sqrt{2\pi D^2 D_{Cr}^2}}}_{1} = e^{-\frac{1}{2}D_{Cr}^2(p'_x - p_x)^2/\hbar^2 - id_{Cr}(p'_x - p_x)/\hbar}. \quad (F.14)$$

Тогда, продолжая цепочку равенств (F.13), получим:

$$\begin{aligned} \dots &= \mathcal{L} \left(\frac{1}{L_x} \sum_{1 \leq m < n \leq N_{Cr}} A^{n-m} \right) = \mathcal{L} \left(\frac{1}{L_x} \sum_{j=1}^{N_{Cr}-1} \underbrace{\sum_{\substack{\{n,m\}; n-m=j \\ N_{Cr}-j \text{ одинаковых} \\ \text{слагаемых}}} A^{n-m}} \right) = \mathcal{L} \left(\frac{1}{L_x} \sum_{j=1}^{N_{Cr}-1} (N_{Cr} - j) A^j \right) = \\ &= \mathcal{L} \left(\frac{1}{L_x} \sum_{j=1}^{N_{Cr}} (N_{Cr} - j) A^j \right) = -\mathcal{L} \left(\frac{1}{L_x} A^{N_{Cr}} \sum_{j=1}^{N_{Cr}} (j - N_{Cr}) A^{j-N_{Cr}} \right) = -\mathcal{L} \left(\frac{1}{L_x} A^{N_{Cr}+1} \frac{\partial}{\partial A} \sum_{j=1}^{N_{Cr}} A^{j-N_{Cr}} \right) = \\ &= -\mathcal{L} \left(\frac{1}{L_x} A^{N_{Cr}+1} \frac{\partial}{\partial A} A^{-N_{Cr}} \sum_{j=1}^{N_{Cr}} A^j \right) = \dots \end{aligned} \quad (F.15)$$

Поскольку, как это следует из (F.14), $|A| < 1$, то при вычислении суммы в (F.15) можно воспользоваться формулой суммы геометрической прогрессии, продолжая цепочку равенств (F.15), получим:

$$\begin{aligned} \dots &= -\mathcal{L} \left(\frac{1}{L_x} A^{N_{Cr}+1} \frac{\partial}{\partial A} A^{-N_{Cr}} \frac{A(1-A^{N_{Cr}})}{1-A} \right) = \mathcal{L} \left(\frac{1}{L_x} A^{N_{Cr}+1} \frac{\partial}{\partial A} \frac{A(A^{-N_{Cr}} - 1)}{1-A} \right) = \\ &= \lim_{\substack{N_{Cr}, L_x \rightarrow \infty \\ L_x/N_{Cr} = d}} \left(\frac{1}{L_x} \frac{AN_{Cr}(1-A) + A(A^{N_{Cr}} - 1)}{(1-A)^2} \right) = \frac{1}{d} \frac{A}{1-A}. \end{aligned} \quad (F.16)$$

Итак, вторая сумма в выражении (F.11) вычислена. Вспоминая о том, что A вычисляется по формуле (F.14), первая сумма в (F.11) вычисляется по формуле (F.12), а вторая и третья суммы в выражении (F.11) являются комплексно сопряженными величинами, продолжим цепочку равенств (F.11):

$$\dots = \frac{U_0^2}{d} \delta_{p_y p'_y} \delta_{p_z p'_z} \left(1 + \frac{A}{1-A} + \frac{A^*}{1-A^*} \right) = \frac{\frac{U_0^2}{d_{Cr}} \delta_{p_y p'_y} \delta_{p_z p'_z} (1 - e^{-D_{Cr}^2(p_x - p'_x)^2/\hbar^2})}{1 - 2 \cos(d_{Cr}(p_x - p'_x)/\hbar) e^{-\frac{1}{2}D_{Cr}^2(p_x - p'_x)^2/\hbar^2} + e^{-D_{Cr}^2(p_x - p'_x)^2/\hbar^2}}. \quad (F.17)$$

Итак, мы вычислили усредненное значение квадрата матричного элемента (F.6). Далее кратко мы будем его записывать в виде

$$\mathcal{L} \left[\left\langle L_x \left| \langle \mathbf{p} | \hat{U}_{Cr} | \mathbf{p}' \rangle \right|^2 \right\rangle \right] = \frac{U_0^2}{d_{Cr}} \delta_{p_y p'_y} \delta_{p_z p'_z} G(|p_x - p'_x|), \quad (F.18)$$

где

$$G(|p_x - p'_x|) = \frac{1 - e^{-D_{Cr}^2(p_x - p'_x)^2/\hbar^2}}{1 - 2\cos(d_{Cr}(p_x - p'_x)/\hbar)e^{-\frac{1}{2}D_{Cr}^2(p_x - p'_x)^2/\hbar^2} + e^{-D_{Cr}^2(p_x - p'_x)^2/\hbar^2}}. \quad (F.19)$$

Далее в изложении теории МШД необходимо сделать отступление по поводу того, каким образом происходит формирование непрерывного спектра. Рассмотрим, например, собственные функции оператора проекции импульса на ось Oy при стремлении $L_y \rightarrow \infty$. При конечном L_y значения y -проекции импульса дискретны $p_y = 2\pi\hbar n/L_y$, $n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$, поэтому

$$\langle p_y | p'_y \rangle = \int_{-L_y/2}^{L_y/2} \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}p_y y}}{\sqrt{L_y}} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}p'_y y}}{\sqrt{L_y}} dy \equiv \frac{\sin\left((p_y - p'_y)\frac{L_y}{2\hbar}\right)}{(p_y - p'_y)\frac{L_y}{2\hbar}} = \delta_{p_y, p'_y}, \quad (F.20)$$

где δ_{p_y, p'_y} – символ Кронекера. Однако, как известно, имеет место следующий предел (предел в т.н. слабом смысле): $\sin(L\xi)/\xi \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \pi\delta(\xi)$, где $\delta(\xi)$ – дельта функция Дирака.

Поэтому при $L_y \rightarrow \infty$ имеем:

$$\langle p_y | p'_y \rangle = \delta_{p_y, p'_y} \xrightarrow{L_y \rightarrow \infty} \frac{2\pi\hbar}{L_y} \delta(p_y - p'_y). \quad (F.21)$$

Аналогично

$$\langle p_z | p'_z \rangle = \delta_{p_z, p'_z} \xrightarrow{L_z \rightarrow \infty} \frac{2\pi\hbar}{L_z} \delta(p_z - p'_z). \quad (F.22)$$

Тогда подставляя выражения (F.18)-(F.19), (F.21)-(F.22) в формулу для интеграла столкновений (F.5), устремляя $L_{y,z} \rightarrow \infty$ и переходя от суммирования по p'_y, p'_z к интегрированию, получим

$$\begin{aligned} \text{Coll}_{Cr}[f] &= \sum_{p'_y, p'_z} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp'_x}{2\pi\hbar} \frac{2\pi}{\hbar} \mathcal{L} \left[\underbrace{L_x \left| \langle \mathbf{p} | \hat{U}_{Cr} | \mathbf{p}' \rangle \right|^2}_{\delta_{p_y p'_y} \delta_{p_z p'_z}} \right] \delta(W_p - W_{p'}) \{f(\mathbf{p}', t) - f(\mathbf{p}, t)\} = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp'_x dp'_y dp'_z}{(2\pi\hbar)^3} \frac{2\pi}{\hbar} \overbrace{L_z L_y \frac{U_0^2}{d_{Cr}} \delta_{p_y p'_y} \delta_{p_z p'_z}}^{\frac{(2\pi\hbar)^2}{L_y L_z} \delta(p_y - p'_y) \delta(p_z - p'_z)} G(|p_x - p'_x|) \delta(W_p - W_{p'}) \{f(\mathbf{p}', t) - f(\mathbf{p}, t)\} = \\ &= \frac{U_0^2}{d_{Cr} \hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp'_x dp'_y dp'_z \delta(p_y - p'_y) \delta(p_z - p'_z) \delta(W_p - W_{p'}) G(|p_x - p'_x|) \{f(\mathbf{p}', t) - f(\mathbf{p}, t)\} = \dots \quad (F.23) \end{aligned}$$

Заметим, что

$$\delta(W_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}'}) = \delta\left(\frac{p'^2}{2m} - \frac{p^2}{2m}\right) = 2m\delta(p'^2 - p^2) = 2m\delta(p_x'^2 + p_y'^2 + p_z'^2 - p_x^2 - p_y^2 - p_z^2). \quad (\text{F.24})$$

С другой стороны, в силу наличия $\delta(p_y - p'_y)$ и $\delta(p_z - p'_z)$, в подынтегральном выражении (F.23) можно проводить замены $p'_y \leftrightarrow p_y$, $p'_z \leftrightarrow p_z$, по этой причине

$$\delta(W_{\mathbf{p}} - W_{\mathbf{p}'}) = 2m\delta(p_x'^2 + p_y^2 + p_z^2 - p_x^2 - p_y^2 - p_z^2) = \delta(p_x'^2 - p_x^2) = \frac{m\delta(p'_x - p_x)}{|p_x|} + \frac{m\delta(p'_x + p_x)}{|p_x|}. \quad (\text{F.25})$$

В выражении (F.25) было использовано свойство дельта функции

$$\delta(f(x)) = \sum_i \delta(x - x_i) \left/ \left| \frac{\partial f(x)}{\partial x} \right| \right.,$$

где x_i – простые нули функции $f(x)$. Подстановка первого слагаемого в правой части выражения (F.25) в формулу (F.23) даст ноль, поскольку из-за произведения $\delta(p_x - p'_x)\delta(p_y - p'_y)\delta(p_z - p'_z)$ выражение в фигурных скобках (F.23) обратится в ноль.

Подставив второе слагаемое правой части выражения (F.25) в (F.23), продолжим цепочку равенств (F.23):

$$\begin{aligned} \dots &= \frac{mU_0^2}{d_{\text{Cr}}\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp'_x dp'_y dp'_z \delta(p_y - p'_y) \delta(p_z - p'_z) \delta(p'_x + p_x) \frac{G(|p'_x - p_x|)}{|p_x|} \{f(\mathbf{p}', t) - f(\mathbf{p}, t)\} = \\ &= \frac{mU_0^2 G(2|p_x|)}{d_{\text{Cr}}\hbar^2 |p_x|} \{f(-p_x, p_y, p_z, t) - f(p_x, p_y, p_z, t)\}. \end{aligned} \quad (\text{F.26})$$

Формула (3.26) представляет собой выражение для интеграла столкновений $\text{Coll}_{\text{Cr}}[f]$, для краткости введем следующие обозначения:

$$\text{Coll}_{\text{Cr}}[f] = \Omega(|p_x|) \{f(-p_x, p_y, p_z, t) - f(p_x, p_y, p_z, t)\}, \quad (\text{F.27})$$

$$\Omega(|p_x|) = \frac{mU_0^2}{d_{\text{Cr}}\hbar^2 |p_x|} \times \frac{1 - e^{-4D_{\text{Cr}}^2 p_x^2 / \hbar^2}}{1 - 2\cos(2d_{\text{Cr}} p_x / \hbar) e^{-2D_{\text{Cr}}^2 p_x^2 / \hbar^2} + e^{-4D_{\text{Cr}}^2 p_x^2 / \hbar^2}}. \quad (\text{F.28})$$

Отметим, что поскольку в частном случае $df/dt = \text{Coll}_{\text{Cr}}[f]$, то из формулы (F.28) видно, что Ω имеет размерность с^{-1} .

Далее, следуя работам [113-114], мы заменим по своей сути эмпирический весовой коэффициент U_0 , входящий в выражение для Ω , более осмысленным (с физической точки зрения) параметром R_{Cr} – коэффициентом отражения электрона от межкуристаллитной границы. Пусть вдоль оси Ox на одну межкуристаллитную границу (которую мы задаем потенциалом $U_0\delta(x)$) падает электрон, обладающий энергией $W = mp_{\text{F}}^2/2$, где p_{F} – импульс электрона на поверхности Ферми. Тогда R_{Cr} в таком случае определяется как отношение $|j_{x,\text{отр}}/j_{x,\text{пад}}|$, где $j_{x,\text{отр}}$ и $j_{x,\text{пад}}$ x -проекции плотности потока отраженной и падающей частицы

на межкристаллитную границу соответственно. Величины R_{Cr} и U_0 оказываются связаны следующим соотношением (см. задачу 6.2.14 на с. 177 в задачнике [255])

$$U_0 = \frac{\hbar p_F}{m} \sqrt{\frac{R_{Cr}}{1-R_{Cr}}}. \quad (F.29)$$

Подставляя (F.29) в (F.28), и переходя в аргументе (F.28) от импульса к скорости, получим

$$\Omega(m|v_x|) = \frac{p_F^2}{m^2|v_x|d_{Cr}} \times \frac{R_{Cr}}{1-R_{Cr}} \times \frac{1 - e^{-4D_{Cr}^2 m^2 v_x^2 / \hbar^2}}{1 - 2 \cos(2mv_x d_{Cr} / \hbar) e^{-2D_{Cr}^2 m^2 v_x^2 / \hbar^2} + e^{-4D_{Cr}^2 m^2 v_x^2 / \hbar^2}}. \quad (F.30)$$

Стоит отметить, что в статьях Маядеса, Шаткеса и Дженека [113-114] используется несколько другое определение для R_{Cr} :

$$U_0 = \frac{\hbar p_F}{m\sqrt{2}} \sqrt{\frac{R_{MSJ}}{1-R_{MSJ}}}.$$

Таким образом,

$$\frac{R_{Cr}}{1-R_{Cr}} = \frac{1}{2} \times \frac{R_{MSJ}}{1-R_{MSJ}},$$

при этом

$$R_{Cr} / R_{MSJ} = \left(1 + 2 \frac{U_0^2}{v_F^2 \hbar^2} \right) / \left(1 + \frac{U_0^2}{v_F^2 \hbar^2} \right) \neq \text{const}.$$

Мы, однако, будем пользоваться формулами (F.29), (F.30), поскольку они более корректны с точки зрения физической интерпретации результатов. Теперь в качестве эмпирически задаваемого параметра мы будем использовать коэффициент отражения R_{Cr} . Для наглядности зависимость $R_{Cr} = R_{Cr}(R_{MSJ})$ изображена на рис. F.1.

Далее, рассмотрим интеграл столкновений (F.1). Вновь (как и в приложении E) будем работать в системе отсчета, где пленка занимает область пространства $x \in [0, L_x]$, $y \in [0, L_y]$, $z \in [0, L_z]$. Покажем, что при граничных условиях Фукса (E.16) интеграл столкновений (F.1) сводится к приближению времени релаксации. Иными словами, покажем, что можно ввести некоторое τ^* такое, что интеграл столкновений (F.1) представляется в виде $\text{Coll}[f] = -(f-f_0)/\tau^*$.

Для этого изучим свойства решения уравнения Больцмана

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt} &= \frac{\partial f(z, v_x, v_y, v_z)}{\partial z} v_z - \frac{\partial f(z, v_x, v_y, v_z)}{\partial v_x} \frac{|e| E_0}{m} = \text{Coll}_{FS}[f] + \text{Coll}_{Cr}[f] = \\ &= -\frac{f(z, v_x, v_y, v_z, t) - f_0(v, v_z)}{\tau(v)} + \Omega(m|v_x|) \{ f(z, -v_x, v_y, v_z, t) - f(z, v_x, v_y, v_z, t) \}. \end{aligned} \quad (F.31)$$

Как и в модели Фукса-Зондхаймера здесь предполагается, что электрическое поле постоянно, вектор его напряженности направлен вдоль оси Ox , а модуль вектора

напряженности равен E_0 . Как и ранее, здесь f_0 – равновесная функция распределения, которая выбирается либо в виде (E.5) и тогда $f_0=f_0(v)$, либо в виде (E.6) и тогда $f_0=f_0(v, v_z)$.

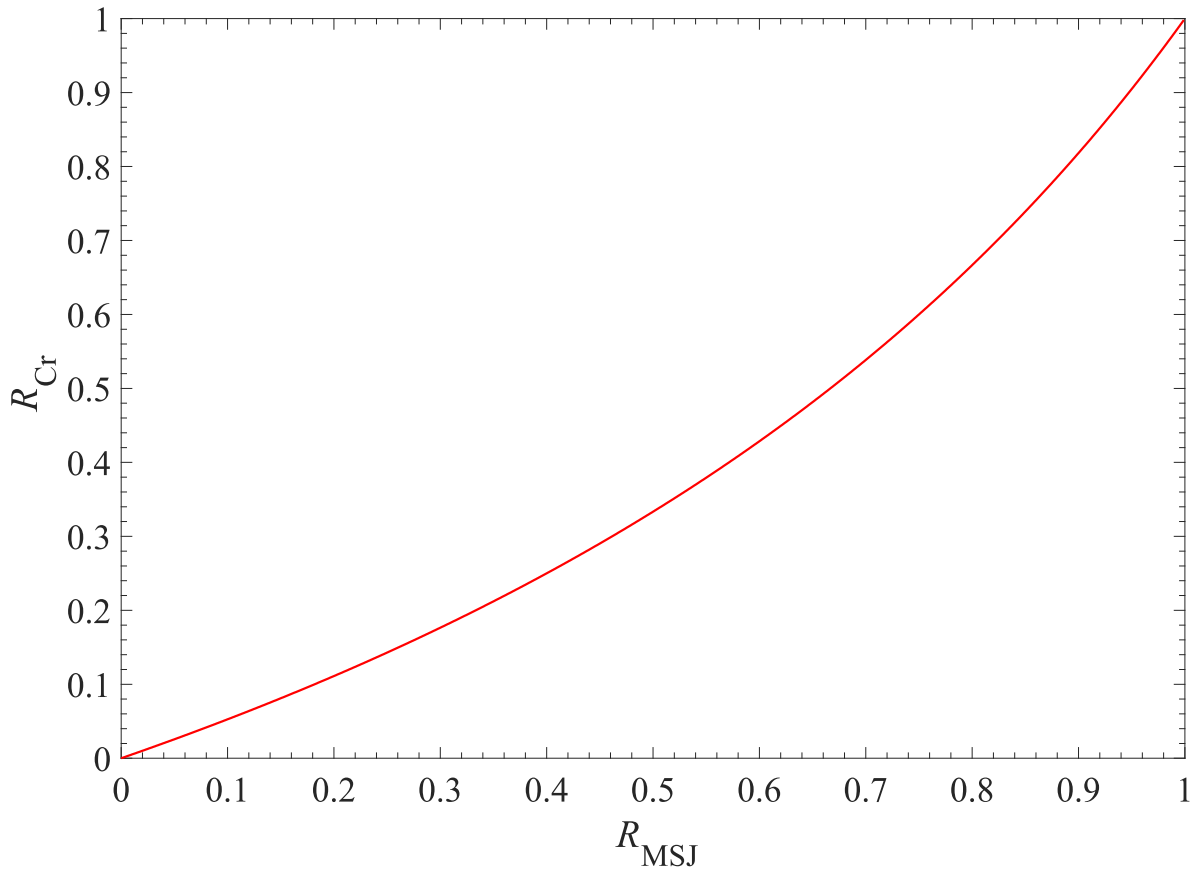


Рис. F.1. Зависимость $R_{Cr} = R_{Cr}(R_{MSJ})$.

Таким образом, вне зависимости от выбора формулы (E.5) или формулы (E.6) выполняется свойство четности: $f_0(v_x)=f_0(-v_x)$. Тогда можно показать, что f_0 является частным решением уравнения (F.31). Это значит, что также как и в случае теории Фукса-Зондхаймера решение можно искать в виде $f = f_0 + \delta f$, где δf – малое возмущение. Тогда, если пренебречь вторым порядком малости по δf , а амплитуду E_0 также считать достаточно малой величиной, то для δf справедливо обыкновенное линейное дифференциальное уравнение

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \delta f(z, v_x, v_y, v_z)}{\partial z} v_z - \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \frac{|e| E_0}{m} = \\ & = -\frac{\delta f(z, v_x, v_y, v_z)}{\tau(v)} + \Omega(m |v_x|) \{ \delta f(z, -v_x, v_y, v_z, t) - \delta f(z, v_x, v_y, v_z, t) \} \end{aligned} \quad (F.32)$$

с граничными условиями Фукса (более подробно см. приложение E)

$$\delta f^+(z=0, v_x, v_y, v_z) = \beta_1 \delta f^-(z=0, v_x, v_y, -v_z); \quad \delta f^-(z=h, v_x, v_y, v_z) = \beta_2 \delta f^+(z=h, v_x, v_y, -v_z). \quad (F.33)$$

Здесь $\delta f^\pm = \Theta(\pm v_z) \delta f(z, v_x, v_y, v_z)$, где Θ – функция Хэвисайда (E.13), β_1 и β_2 – коэффициенты зеркальности. Покажем, что решение δf уравнения (F.32) с граничными условиями (F.33) обладает свойством четности $\delta f(z, -v_x, v_y, v_z) = -\delta f(z, v_x, v_y, v_z)$. Для этого сделаем в уравнениях (F.32)-(F.33) замену $v_x \rightarrow -v_x$, получим

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \delta f(z, -v_x, v_y, v_z)}{\partial z} v_z + \frac{\partial f_0 |e| E_0}{\partial v_x m} = \\ & = -\frac{\delta f(z, -v_x, v_y, v_z)}{\tau(v)} - \Omega(m |v_x|) \{ \delta f(z, -v_x, v_y, v_z, t) - \delta f(z, v_x, v_y, v_z, t) \}, \end{aligned} \quad (\text{F.34})$$

$$\delta f^+(z=0, v_x, v_y, v_z) = \beta_1 \delta f^-(z=0, v_x, v_y, -v_z); \quad \delta f^-(z=h, v_x, v_y, v_z) = \beta_2 \delta f^+(z=h, v_x, v_y, -v_z). \quad (\text{F.35})$$

Сложим уравнение (F.32) с уравнением (F.34), а уравнение (F.33) с уравнением (F.35), введем новые обозначения $\phi(z, v_x, v_y, v_z) = \delta f(z, v_x, v_y, v_z, t) + \delta f(z, -v_x, v_y, v_z, t)$, $\phi^\pm(z, v_x, v_y, v_z) = \phi(z, v_x, v_y, v_z) \Theta(\pm v_z)$, получим уравнение

$$\frac{\partial \phi(z, v_x, v_y, v_z)}{\partial z} v_z = -\frac{\delta \phi(z, v_x, v_y, v_z)}{\tau(v)} \quad (\text{F.36})$$

с граничными условиями

$$\phi^+(z=0, v_x, v_y, v_z) = \beta_1 \phi^-(z=0, v_x, v_y, -v_z); \quad \phi^-(z=h, v_x, v_y, v_z) = \beta_2 \phi^+(z=h, v_x, v_y, -v_z). \quad (\text{F.37})$$

Общее решение уравнения (F.36) записывается в виде

$$\phi(z, v_x, v_y, v_z) = C(\mathbf{v}) e^{-\frac{z}{v_z \tau}}, \quad (\text{F.38})$$

где $C(\mathbf{v})$ – произвольная функция вектора скорости. Подставим решение (F.38) в граничные условия (F.37), получим систему линейных алгебраических уравнений относительно $C(v_x, v_y, v_z)$ и $C(v_x, v_y, -v_z)$:

$$C(v_x, v_y, v_z) = \beta_1 C(v_x, v_y, -v_z); \quad C(v_x, v_y, v_z) = e^{\frac{2h}{v_z \tau}} \beta_2 C(v_x, v_y, -v_z). \quad (\text{F.39})$$

Очевидно, что система (F.39) допускает лишь тривиальное решение $C \equiv 0$. Таким образом,

$$\phi(z, v_x, v_y, v_z) = \delta f(z, v_x, v_y, v_z, t) + \delta f(z, -v_x, v_y, v_z, t) \equiv 0, \text{ то есть } \delta f(z, -v_x, v_y, v_z, t) = -\delta f(z, v_x, v_y, v_z, t).$$

Учитывая это свойство четности, уравнение (F.32) можно переписать в виде

$$\frac{\partial \delta f(z, v_x, v_y, v_z)}{\partial z} v_z - \frac{\partial f_0 |e| E_0}{\partial v_x m} = -\frac{\delta f(z, v_x, v_y, v_z)}{\tau^*(v, |v_x|)}, \quad (\text{F.40})$$

где «новое» время релаксации τ^* определяется как

$$\tau^*(v, |v_x|) = \left(\frac{1}{\tau(v)} + 2\Omega(m |v_x|) \right)^{-1}. \quad (\text{F.41})$$

Напомним, что $\Omega(m|v_x|)$ в (F.41) рассчитывается по формуле (F.30), а уравнение (F.40) как и прежде решается при граничных условиях Фукса (F.33).

Фактически, мы доказали следующее утверждение: включение в теорию Фукса-Зондхаймера механизма рассеяния электронов на межкристаллитных границах (в предположении о независимости механизмов рассеяния) может быть учтено при помощи замены $\tau(v) \rightarrow \tau^*(v, |v_x|)$. Таким образом, решение уравнения (F.40) может быть получено из решения (E.17)-(E.18) элементарной заменой $\tau(v) \rightarrow \tau^*(v, |v_x|)$ и, следовательно, имеет вид

$$\delta f(z, \mathbf{v}) = \frac{\tau^*(v, |v_x|) |e| E_0}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \times \begin{cases} 1 + g^+(v, v_x, v_z) \times e^{-\frac{z}{\tau^*(v, |v_x|) v_z}}, v_z \geq 0 \\ 1 + g^-(v, v_x, v_z) \times e^{-\frac{z}{\tau^*(v, |v_x|) v_z}}, v_z < 0 \end{cases}, \quad (\text{F.42})$$

где

$$g^+(v, v_x, v_z) = \frac{\beta_1(\beta_2 - 1) + e^{\frac{h}{|v_z| \tau^*(v, |v_x|)}} (\beta_1 - 1)}{e^{\frac{h}{|v_z| \tau^*(v, |v_x|)}} - \beta_1 \beta_2 e^{-\frac{h}{|v_z| \tau^*(v, |v_x|)}}}, \quad g^-(v, v_x, v_z) = \frac{(\beta_2 - 1) + e^{-\frac{h}{|v_z| \tau^*(v, |v_x|)}} \beta_2 (\beta_1 - 1)}{e^{\frac{h}{|v_z| \tau^*(v, |v_x|)}} - \beta_1 \beta_2 e^{-\frac{h}{|v_z| \tau^*(v, |v_x|)}}}. \quad (\text{F.43})$$

Плотность протекающего по пленке тока, как и в теории Фукса-Зондхаймера, вычисляется по формуле (E.19). Однако теперь $\tau^* = \tau^*(v, |v_x|)$, что значительно усложняет расчет тройного интеграла в (E.19).

В случае выбора распределения f_0 в виде (E.5) (при этом электронный газ считается вырожденным, не учитывается квантование энергетических уровней, а химический потенциал вычисляется по формулам (E.9)), формула для удельной проводимости пленки σ сводится к виду

$$\sigma(z, h) = \frac{2e^2 m^2 v_F^3}{(2\pi\hbar)^3} \{J_1 + J_+(z, h) + J_-(z, h)\}, \quad (\text{F.44})$$

где

$$J_1 = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \tau^*(v_F, v_F |\cos \varphi \sin \theta|) \sin^3 \theta \cos^2 \varphi, \quad (\text{F.45})$$

$$J_+(z, h) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} d\theta \tau^*(v_F, v_F |\cos \varphi \sin \theta|) g^+(v_F, v_F \cos \varphi \sin \theta, v_F \cos \theta) \times \\ \times \exp\left(\frac{-z}{v_F \cos \theta \tau^*(v_F, v_F |\cos \varphi \sin \theta|)}\right) \sin^3 \theta \cos^2 \varphi, \quad (\text{F.46})$$

$$J_-(z, h) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{\pi/2}^{\pi} d\theta \tau^*(v_F, v_F |\cos \varphi \sin \theta|) g^-(v_F, v_F \cos \varphi \sin \theta, v_F \cos \theta) \times \\ \times \exp\left(\frac{-z}{v_F \cos \theta \tau^*(v_F, v_F |\cos \varphi \sin \theta|)}\right) \sin^3 \theta \cos^2 \varphi. \quad (\text{F.47})$$

Как и в теории Фукса-Зондхаймера, найдем выражение для усредненной по толщине металла пленки проводимости $\langle \sigma(h) \rangle$, применяя операцию усреднения

$$\langle \dots \rangle = \frac{1}{h} \int_0^h \dots dz \quad (\text{F.48})$$

к формуле (F.44), получим

$$\langle \sigma(h) \rangle = \frac{2e^2 m^2 v_F^3}{(2\pi\hbar)^3} \{J_1 + \langle J_+(h) \rangle + \langle J_-(h) \rangle\}, \quad (\text{F.49})$$

где

$$\langle J_+(h) \rangle = \frac{1}{h} \int_0^h J_+(z, h) dz = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} d\theta \tau^*(v_F, v_F |\cos \varphi \sin \theta|) g^+(v_F, v_F \cos \varphi \sin \theta, v_F \cos \theta) \times \\ \times \frac{v_F \cos \theta \tau^*(v_F, v_F |\cos \varphi \sin \theta|)}{h} \left\{ 1 - \exp\left(\frac{-h}{v_F \cos \theta \tau^*(v_F, v_F |\cos \varphi \sin \theta|)}\right) \right\} \sin^3 \theta \cos^2 \varphi, \quad (\text{F.50})$$

$$\langle J_-(h) \rangle = \frac{1}{h} \int_0^h J_-(z, h) dz = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{\pi/2}^{\pi} d\theta \tau^*(v_F, v_F |\cos \varphi \sin \theta|) g^-(v_F, v_F \cos \varphi \sin \theta, v_F \cos \theta) \times \\ \times \frac{v_F \cos \theta \tau^*(v_F, v_F |\cos \varphi \sin \theta|)}{h} \left\{ 1 - \exp\left(\frac{-h}{v_F \cos \theta \tau^*(v_F, v_F |\cos \varphi \sin \theta|)}\right) \right\} \sin^3 \theta \cos^2 \varphi. \quad (\text{F.51})$$

В случае выбора распределения f_0 в виде (E.6) (при этом электронный газ также считается вырожденным, но учитывается квантование энергетических уровней, а химический потенциал μ и число энергетических уровней n_{\max} вычисляются по формулам (E.11)), формула для удельной проводимости пленки σ сводится к виду

$$\sigma(z, h) = \frac{e^2 m}{h(2\pi\hbar)^2} \sum_{n=1}^{n_{\max}} (v_F^2 - v_{z,n}^2) \int_0^{2\pi} d\varphi \cos^2 \varphi \tau^*(v_F, \cos \varphi \sqrt{v_F^2 - v_{z,n}^2}) \times \\ \times \left\{ 2 + g^+(v_F, \cos \varphi \sqrt{v_F^2 - v_{z,n}^2}, v_{z,n}) \exp\left(\frac{-z}{v_{z,n} \tau^*(v_F, \cos \varphi \sqrt{v_F^2 - v_{z,n}^2})}\right) + \right. \\ \left. + g^-(v_F, \cos \varphi \sqrt{v_F^2 - v_{z,n}^2}, v_{z,n}) \exp\left(\frac{z}{v_{z,n} \tau^*(v_F, \cos \varphi \sqrt{v_F^2 - v_{z,n}^2})}\right) \right\}, \quad (\text{F.52})$$

где $v_{z,n} = \pi\hbar n_z / (mh)$. Применяя операцию усреднения (F.48) формуле (F.52), получим

$$\begin{aligned}
\langle \sigma(h) \rangle = & \frac{e^2 m}{h(2\pi\hbar)^2} \sum_{n=1}^{n_{\max}} (v_F^2 - v_{z,n}^2) \int_0^{2\pi} d\varphi \cos^2 \varphi \tau^*(v_F, \cos \varphi \sqrt{v_F^2 - v_{z,n}^2}) \times \\
& \times \left\{ 2 + g^+(v_F, \cos \varphi \sqrt{v_F^2 - v_{z,n}^2}, v_{z,n}) \frac{v_{z,n} \tau^*(v_F, \cos \varphi \sqrt{v_F^2 - v_{z,n}^2})}{h} \left[1 - \exp \left(\frac{-h}{v_{z,n} \tau^*(v_F, \cos \varphi \sqrt{v_F^2 - v_{z,n}^2})} \right) \right] + \right. \\
& \left. + g^-(v_F, \cos \varphi \sqrt{v_F^2 - v_{z,n}^2}, v_{z,n}) \frac{v_{z,n} \tau^*(v_F, \cos \varphi \sqrt{v_F^2 - v_{z,n}^2})}{h} \left[\exp \left(\frac{h}{v_{z,n} \tau^*(v_F, \cos \varphi \sqrt{v_F^2 - v_{z,n}^2})} \right) - 1 \right] \right\}. \quad (\text{F.53})
\end{aligned}$$

В конце приложения обсудим еще некоторые аспекты модели МШД.

Скажем несколько слов об обобщении для случая гармонически изменяющегося электрического поля. Все приведенные выше формулы для расчета проводимости справедливы только для случая статики. Однако они могут быть легко обобщены для случая, когда $E(t) = E_0 e^{-j\omega t}$. В таком случае, поскольку уравнение Больцмана (F.40) линейно, его решение можно искать в виде $\delta f(z, t) = \delta f(z) e^{-j\omega t}$, следовательно

$$\begin{aligned}
\frac{df}{dt} = & \frac{\partial \delta f(z, t)}{\partial t} + \frac{\partial \delta f(z, t)}{\partial z} v_z - \frac{\partial f_0 |e| e^{-j\omega t} E_0}{\partial v_x m} = -\frac{\delta f(z, t)}{\tau^*} \Rightarrow \\
\Rightarrow & -j\omega e^{-j\omega t} \delta f(z) + e^{-j\omega t} \frac{\partial \delta f(z, t)}{\partial z} v_z - e^{-j\omega t} \frac{\partial f_0 |e| E_0}{\partial v_x m} = -e^{-j\omega t} \frac{\delta f(z)}{\tau^*} \Rightarrow \\
\Rightarrow & \frac{\partial \delta f(z)}{\partial z} v_z - \frac{\partial \delta f |e| E_0}{\partial v_x m} = -\frac{\delta f}{\tilde{\tau}},
\end{aligned}$$

где

$$\frac{1}{\tilde{\tau}} = \frac{1}{\tau^*} - j\omega = \frac{1}{\tau} + 2\Omega(m |v_x|) - j\omega. \quad (\text{F.54})$$

Таким образом, для учета гармонически меняющегося электрического поля снова необходимо всего лишь сделать элементарную замену $\tau^* \rightarrow \tilde{\tau}$ во всех формулах (при этом вследствие такой замены проводимость σ становится комплексной величиной). Стоит, однако, отметить, что такой подход не учитывает возможности квантовых переходов электронов между подзонами. По этой причине он справедлив только в случае, когда энергия фотона $\hbar\omega$ много меньше характерной разности энергий подуровней $\Delta W \approx p_z \Delta p_z / m \approx (2\pi\hbar)^2 / (2mh^2)$. Для $h = 10$ нм, например, $\Delta W \approx 0.01$ эВ, поэтому $\hbar\omega / \Delta W \approx 3 \cdot 10^{-13} \cdot \nu$, где ν – частота в герцах. Для микроволнового ($\nu \approx 10^9$ Гц) диапазона $\hbar\omega / \Delta W \approx 3 \cdot 10^{-4}$, но уже для терагерцового ($\nu \approx 10^{12}$ Гц) диапазона $\hbar\omega / \Delta W \approx 0.3$.

Далее сделаем отступление по поводу размера кристаллитов в тонких металлических пленках. Отметим, что даже для конкретного типа металла и способа его напыления средний размер кристаллита d_{Cr} и среднеквадратичное отклонение размера

кристаллита от его среднего значения D_{Cr} в общем случае зависят от толщины пленки h . Вид зависимостей $d_{Cr}=d_{Cr}(h)$ и $D_{Cr} = D_{Cr}(h)$ подбирается, как правило, эмпирическим путем и определяется типом металла и способом его напыления. Например, Маядес, Шаткес и Дженек полагают, что для пленок алюминия при толщинах 100-1000 нм верно равенство $d_{Cr} = h$ [113]. При этом, поскольку $k_F \sim 10^{10} \text{ м}^{-1}$, авторы считают, что справедливо приближение $k_F D_{Cr} = m v_F D_{Cr} / \hbar \gg 1$ (данное приближение можно интерпретировать и как приближение $D_{Cr} \rightarrow \infty$), здесь k_F – волновое число на поверхности Ферми. В таком случае формула (F.30) приобретает более простой вид

$$\Omega(m | v_x |) = \frac{p_F^2}{m^2 | v_x | d_{Cr}} \times \frac{R_{Cr}}{1 - R_{Cr}}. \quad (F.55)$$

Но, например, в работах [116, 117] отмечается, что экспериментальным точкам более соответствуют степенные зависимости типа $d_{Cr} = Ah^\gamma$, где A и γ – эмпирические параметры. Данные параметры, взятые из работы [117], приведены в таблице F.1.

Металл	Скорость осаждения, нм/с	γ	A
Cu	0.97	0.41 ± 0.03	3.33 ± 0.54
	0.95	0.48 ± 0.07	2.30 ± 0.80
	0.94	0.15 ± 0.05	4.92 ± 1.28
	0.88	0.14 ± 0.06	6.29 ± 1.81
Al	0.88	0.38 ± 0.06	5.53 ± 1.89
	0.87	0.40 ± 0.06	3.94 ± 1.44
	0.82	0.41 ± 0.14	1.34 ± 1.16
	0.81	0.39 ± 0.09	2.34 ± 1.32
	0.75	0.37 ± 0.07	1.98 ± 0.80

Табл. F.1. Параметры A и γ , взятые из работы [117].

В работах [118, 119] отмечено что, если рост кристаллитов ограничен сверху (это происходит, например, при столбчатом росте пленок) и достигает некоторого максимального значения d_{max} , то больше подходит зависимость

$$d_{Cr}(h) = \left((Ch)^{-1} + d_{max}^{-1} \right)^{-1}. \quad (F.56)$$

Параметр C здесь характеризует скорость увеличения размера кристаллитов на начальных этапах формирования пленки (как правило, $C \sim 0.5 \dots 5$ [118]). В статье [256] исследуется вопрос о том, как время t_{an} , в течение которого проводится отжиг пленки, влияет на

средний размер кристаллита d_{Cr} для фиксированных толщин h . Предлагается зависимость $d_{Cr} = d_{Cr}(t_{an}, h)$.

Экспериментальное определение размеров кристаллитов проводится, как правило, по снимкам поверхности пленки, сделанным при помощи просвечивающего электронного микроскопа (фотографий в темном и светлом поле)[108, 257], сканирующего электронного микроскопа [110] или сканирующего атомно-силового микроскопа [109]. Однако наиболее достоверные данные, могут быть получены только при помощи метода дифракции обратно рассеянных электронов (electron backscatter diffraction или кратко EBSD) [110, 258]. Данный метод позволяет строить карты ориентаций кристаллической решетки, по этой причине данный метод позволяет также определять угол срастания межкристаллитных границ [259-260]. Стоит отметить, что авторы работ [108-110, 257] сходятся во мнении о том, что распределение зерен по их размеру более корректно описывается логнормальным распределением, чем распределением Гаусса.

Весьма интересный способ определения d_{Cr} – по результатам рентгеновского структурного анализа – рассматривается в работе [261]. Согласно [261], средний размер кристаллитов d_{Cr} может быть найден по формуле

$$d_{Cr} = \frac{K\lambda}{\alpha \cos \theta},$$

где λ – длина волны рентгеновского излучения в нанометрах, α – ширина рентгеновского дифракционного пика на половине высоты в радианах, K – константа, зависящая от формы кристаллитов, обычно принимаемая равной 0.9, θ – дифракционный угол, под которым наблюдается пик. Поскольку разные пики соответствуют разным кристаллографическим ориентациям, данная техника позволяет найти d_{Cr} кристаллитов, обладающих определенной ориентацией кристаллической решетки.

Наконец, сделаем некоторые замечания по поводу экспериментального определения коэффициента отражения R_{Cr} . Коэффициент R_{Cr} выступает в качестве подгоночного параметра в теории МШД. Поэтому наиболее часто R_{Cr} находят из задачи минимизации ошибки (как правило, по методу наименьших квадратов) между экспериментальными точками $\sigma_{exp}(h_i)$ и теоретическими кривыми $\sigma_{theo}(h, R_{Cr})$. Стоит, однако, заметить, что в принципе измерение R_{Cr} возможно напрямую с помощью метода сканирующей туннельной потенциометрии. К сожалению, работ, в которых используется этот метод, крайне мало, поскольку такие измерительные установки не производятся серийно, а создаются на основе сканирующих туннельных микроскопов за частные деньги отдельными исследовательскими лабораториями. Перечислим некоторые из таких работ.

В статьях [262-263] проводятся измерения R_{Cr} для пленок золота толщиной 100 нм, приготовленных путем напыления золота на подложку слюды при температуре 400 °С в высоковакуумной камере при давлении 10^{-26} мбар. Показано, что R_{Cr} варьируется в пределах от 0.7 до 0.9 и зависит от кристаллографической ориентации кристаллита. В статье [264] измерялись R_{Cr} шести межкристаллитных границ в нанопроводах золота с поперечным сечением примерно 500 нм². Для трех границ $R_{Cr} < 0.2$, для других трех границ соответственно $R_{Cr} = 0.8 \pm 0.1$, $R_{Cr} = 0.45 \pm 0.2$, $R_{Cr} = 0.3 \pm 0.3$. В работе [265] методами сканирующей туннельной микроскопии и сканирующей туннельной потенциометрии исследовался электронный транспорт в тонких пленках платины толщиной 10 нм, нанесенных электронно-лучевым испарением. Средний размер кристаллитов составлял также примерно 10 нм. По данным сканирующей туннельной потенциометрии коэффициент отражения от межкристаллитных границ в таких пленках имеет значения 0.5–0.7.

Отметим еще интересную работу [266], в которой для оценки R_{Cr} предлагается полуэмпирическая формула

$$R_{Cr} \approx 1 - \frac{4}{e^{\sqrt{T_m}/25} + 2},$$

здесь T_m – температура плавления металла (в градусах Кельвина), из которого сделана пленка.

Приложение G

(справочное)

Химический потенциал тонкой металлической пленки

Используя условие нормировки (E.12) и формулы (E.9)-(E.10), запишем:

$$\begin{aligned}
 n &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f_0(\mathbf{v}, \mu) dv_x dv_y dv_z = \frac{m^2}{h(2\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{e^{(mv^2/2-\mu)/\theta} + 1} \sum_{n_z=1}^{\infty} \delta\left(|v_z| - \frac{\pi\hbar n_z}{mh}\right) dv_x dv_y dv_z = \\
 &= \frac{m^2}{h(2\pi\hbar)^2} \sum_{n_z=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{e^{(mv_{\perp}^2/2+mv_z^2/2-\mu)/\theta} + 1} \delta\left(|v_z| - \frac{\pi\hbar n_z}{mh}\right) dv_x dv_y dv_z = \\
 &= \frac{2m^2}{h(2\pi\hbar)^2} \sum_{n_z=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{e^{(mv_{\perp}^2/2+mv_z^2/2-\mu)/\theta} + 1} dv_x dv_y =
 \end{aligned}$$

Здесь $v_{\perp}^2 = v_x^2 + v_y^2$, а $v_z = v_z(n_z) = \pi\hbar n_z / (mh)$. Перейдем к цилиндрической системе координат, тогда $dv_x dv_y = v_{\perp} dv_{\perp} d\phi$. Интеграл по переменной ϕ даст множитель 2π , продолжая равенство получим:

$$\begin{aligned}
 &= \frac{4\pi m^2}{h(2\pi\hbar)^2} \sum_{n_z=1}^{\infty} \int_0^{+\infty} \frac{v_{\perp} dv_{\perp}}{e^{(mv_{\perp}^2/2+mv_z^2/2-\mu)/\theta} + 1} = \frac{4\pi m\theta}{h(2\pi\hbar)^2} \sum_{n_z=1}^{\infty} \int_0^{+\infty} \frac{d\left(\frac{mv_{\perp}^2}{2\theta} + \frac{mv_z^2}{2\theta} - \frac{\mu}{\theta}\right)}{e^{(mv_{\perp}^2/2+mv_z^2/2-\mu)/\theta} + 1} = \\
 &= \frac{4\pi m\theta}{h(2\pi\hbar)^2} \sum_{n_z=1}^{\infty} \int_{\tilde{\eta}}^{+\infty} \frac{d\eta}{e^{\eta} + 1}, \quad \tilde{\eta} = (mv_z^2/2 - \mu)/\theta = \frac{1}{\theta} \left(\frac{1}{2m} \left(\frac{\pi\hbar}{h} \right)^2 n_z^2 - \mu \right).
 \end{aligned}$$

Последний интеграл берется при помощи замены $\xi = \exp(-\eta)$:

$$\int_{\tilde{\eta}}^{+\infty} \frac{d\eta}{e^{\eta} + 1} = \int_{\tilde{\eta}}^{+\infty} \frac{e^{-\eta}}{e^{-\eta} + 1} d\eta = - \int_{\tilde{\eta}}^{+\infty} \frac{de^{-\eta}}{1 + e^{-\eta}} = - \int_{e^{-\tilde{\eta}}}^0 \frac{d\xi}{1 + \xi} = -|1 + \xi|_{e^{-\tilde{\eta}}}^0 = \ln(1 + e^{-\tilde{\eta}})$$

Поэтому в итоге получаем формулу (E.14):

$$n = \frac{4\pi m\theta}{h(2\pi\hbar)^2} \sum_{n_z=1}^{\infty} \ln \left\{ 1 + e^{\frac{\mu}{\theta} - \frac{1}{2m\theta} \left(\frac{\pi\hbar}{h} \right)^2 n_z^2} \right\}.$$

Учитывая, что

$$\ln \left\{ 1 + e^{\frac{\mu}{\theta} - \frac{1}{2m\theta} \left(\frac{\pi\hbar}{h} \right)^2 n_z^2} \right\} \xrightarrow{\theta \rightarrow 0} \left(\mu - \frac{1}{2m} \left(\frac{\pi\hbar}{h} \right)^2 n_z^2 \right) \times \Theta \left(\mu - \frac{1}{2m} \left(\frac{\pi\hbar}{h} \right)^2 n_z^2 \right),$$

где $\Theta(x)$ – функция Хэвисайда

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

то для $\mu_0 = \mu(\theta=0)$, получаем:

$$n = \frac{4\pi m \theta}{h(2\pi\hbar)^2} \sum_{n_z=1}^{\infty} \left(\mu - \frac{1}{2m} \left(\frac{\pi\hbar}{h} \right)^2 n_z^2 \right) \times \Theta \left(\mu - \frac{1}{2m} \left(\frac{\pi\hbar}{h} \right)^2 n_z^2 \right) =$$

$$= \frac{4\pi m \theta}{h(2\pi\hbar)^2} \sum_{n_z=1}^{n_{\max}} \left(\mu - \frac{1}{2m} \left(\frac{\pi\hbar}{h} \right)^2 n_z^2 \right), \quad n_{\max} = \text{floor} \left(\sqrt{2m\mu_0} \frac{h}{\pi\hbar} \right).$$

Учитывая соотношение, известное из теории рядов

$$\sum_{n_z=1}^{n_{\max}} n_z^2 = \frac{1}{6} n_{\max} (n_{\max} + 1)(2n_{\max} + 1),$$

получаем формулу (E.15):

$$\frac{4\pi m n_{\max}}{h(2\pi\hbar)^2} \left\{ \mu_0 - \frac{1}{12m} \left(\frac{\pi\hbar}{h} \right)^2 (n_{\max} + 1)(2n_{\max} + 1) \right\} = n.$$

Приложение Н

(справочное)

Некоторые физические эффекты, влияющие на проводимость пленки (перколяционный переход, окисление металла, температурная зависимость проводимости)

В изложенных в параграфе 1.6 теориях проводимости неявно предполагалось, что пленка представляет собой сплошной слой металла. В реальности это может быть не так. Дело в том, что нанометровые металлические пленки обычно изготавливаются путем напыления металла на подложку. На начальном этапе напыления (примерно до толщины 3-5 нм) на поверхности подложки, как правило, не успевает сформироваться сплошной металлический слой. По этой причине для очень тонких (единицы нанометров) металлических пленок необходим учет эффекта перколяционного перехода.

До перколяционного перехода проводимость пленки на постоянном токе крайне мала и составляет примерно $10^{-4} \dots 10^{-5} \cdot \sigma_{\text{bulk}}$ [267], а структура пленки представляет собой совокупность отдельных металлических капель. Ненулевое значение проводимости обусловлено квантовым туннелированием электронов проводимости между отдельными металлическими каплями [268]. Капли по мере процесса напыления увеличиваются и приобретают вид островков металла. Этот процесс сопровождается ростом проводимости, поскольку расстояние между соседними островками (т.е. размеры потенциального барьера) уменьшается. По мере увеличения площади островков между отдельными из них начинают образовываться металлические «перемычки», островки соединяются в кластеры [269]. Когда более 2/3 площади поверхности пленки заполняется кластерами из островков металла, происходит перколяционный переход: пленка приобретает свойство сплошного проводящего слоя [270]. При этом проводимость пленки резко увеличивается и достигает примерно $10^{-2} \dots 10^{-1} \cdot \sigma_{\text{bulk}}$.

При выполнении измерений на постоянном токе перколяционный переход приводит к скачкообразному росту удельной проводимости пленки. При выполнении измерений на частоте при перколяционном переходе происходит постепенный рост удельной проводимости, который занимает характерный частотный интервал, соответствующий тому, что размеры островков (или их кластеров) становятся сравнимы с длиной электромагнитной волны [267]. Этот эффект необходимо учитывать при сопоставлении теоретических и экспериментальных зависимостей проводимости от толщины напыленного слоя металла.

Стоит также отметить, что для пленок, не обладающих сплошностью, под понятием «толщина пленки» имеется в виду некоторое эффективное (массовое) значение толщины слоя металла h_{eff} . Значение h_{eff} рассчитывается по известной массе напыленного слоя металла m по формуле $h_{\text{eff}} = m/(Sp)$, где S – площадь поверхности, на которую проводится напыление, ρ – табличное значение плотности металла пленки. Поэтому в англоязычных работах для h_{eff} иногда используется термин «weight thickness».

В данной диссертационной работе основное внимание уделено изучению зависимости проводимости пленок в СВЧ диапазоне. При этом характерная длина электромагнитной волны составляет единицы сантиметров. Поэтому в СВЧ диапазоне (как и в случае постоянного тока) перколяционный переход сопровождается скачкообразным ростом проводимости пленки. Стоит учитывать, что модели Томсона, Фукса-Зондхаймера и Маядеса-Шаткеса-Дженека справедливы только для сплошных пленок, которые образуются после перколяционного перехода. Поэтому сопоставление экспериментальных и теоретических зависимостей средней проводимости пленки $\langle\sigma_{\text{film}}\rangle$ от ее толщины h корректно проводить только после того, как в этой пленке происходит перколяционный переход.

Отметим, что в СВЧ диапазоне непосредственно измеряются оптические коэффициенты системы типа «подложка с напыленной на нее пленкой», а проводимость пленки рассчитывается из этих оптических коэффициентов. Из экспериментальных измерений мы получили следующий результат: до перколяционного перехода оптические коэффициенты подложки с напыленной на нее пленкой ничем не отличаются от оптических коэффициентов чистой подложки. Сам же перколяционный переход сопровождается скачкообразным изменением оптических коэффициентов и поэтому хорошо заметен. По этой причине для нахождения эмпирических параметров (таких как β_1 , β_2 , R_{Cr} , d_{Cr}) из сопоставления теоретических и экспериментальных зависимостей $\langle\sigma_{\text{film}}\rangle$ от h следует использовать только те оптические коэффициенты, которые были получены после перколяционного перехода.

Еще один из эффектов, которые не учитываются в моделях проводимости Томсона, Фукса-Зондхаймера и Маядеса-Шаткеса-Дженека, состоит в окислении поверхности металла пленок при их контакте с атмосферным кислородом. Стоит отметить, что напыление пленок, как правило, проводится в условиях высокого вакуума. Но измерения проводимости пленки обычно проводятся при атмосферных условиях. Процесс окисления начинается сразу же после контакта металла с атмосферным кислородом. Сам процесс происходит постепенно: с течением времени на поверхности металла пленки появляется слой окисла, толщина которого h_{ox} зависит от времени: $h_{\text{ox}} = h_{\text{ox}}(t)$. Следовательно,

толщина проводящего слоя металла пленки h_{eff} начинает уменьшаться с течением времени $h_{\text{eff}}(t) < h_{\text{eff}}(0)$ (здесь по аналогии с h_{eff} под h_{ox} понимается эффективная – массовая толщина). При этом в общем случае $h_{\text{eff}}(0) \neq h_{\text{ox}}(t) + h_{\text{eff}}(t)$, так как плотность оксида металла не совпадает с плотностью самого металла. Процесс окисления весьма сложен: он может состоять из нескольких стадий [271], скорость окисления зависит от температуры [272] и влажности окружающего воздуха [271], а также от способа напыления металла [273]. Поэтому в различных работах используются разные формулы для описания зависимости $h_{\text{ox}}(t)$ (см. таблицу Н.1).

Формулы для $h_{\text{ox}}(t)$	Ссылка
$-1/h_{\text{ox}}(t) = A \ln(Bt + 1)$	[274]
$1/h_{\text{ox}}(t) = A - B \ln(t)$	[271]
$h_{\text{ox}}(t) = At^{1/2}$	[275]
$h_{\text{ox}}(t) = (kt + C)^{1/2}$	[276]
$h_{\text{ox}}(t) = h_{\text{ox}}(0) + kt^{1/2}$	[277]
$h_{\text{ox}}(t) = (kt)^n, (h_{\text{ox}}(t) - h_{\text{ox}}(0))^2 = kt$	[272]

Табл.Н.1 Различные формулы для описания зависимости $h_{\text{ox}}(t)$, используемые в работах [271-272, 274-277], здесь A, B, C, k, n – эмпирические коэффициенты.

Характерное время, за которое происходит процесс окисления при комнатной температуре, варьируется от часов до месяцев. Например, для пленок меди, находящихся при комнатной температуре, заметное увеличение $h_{\text{ox}}(t)$ было экспериментально измерено уже через три часа после внесения пленки в воздушную среду [271]. В [271] было также показано, что процессы окисления медных пленок продолжают даже по прошествии 3 месяцев, причем окисление сопровождается изменением шероховатости поверхности пленки [273] (что может влиять на коэффициенты зеркальности β_1, β_2). За 20 дней с момента напыления поверхностное сопротивление медных пленок толщиной 10 нм, согласно работе [273], увеличивается с 32 до 35 Ом/□.

По этой причине крайне важно проводить измерения проводимости пленок сразу же после их напыления. Для пленок, которые уже подверглись процессу окисления, необходимо учитывать тот факт, что $h_{\text{eff}}(t) < h_{\text{eff}}(0)$. Элементарный учет этого обстоятельства может быть проведен путем добавления эмпирического параметра $\Delta h = h_{\text{eff}}(0) - h_{\text{eff}}(t)$, который подбирается так, чтобы теоретические кривые $\langle \sigma_{\text{film}}(h - \Delta h) \rangle$ наилучшим образом соответствовали экспериментальным точкам.

Стоит также сказать несколько слов об учете температурной зависимости сопротивления металла тонких пленок. На настоящий момент времени еще не создана модель проводимости, в которой эта температурная зависимость учитывалась бы на квантово-полевоом уровне, то есть на уровне взаимодействия фононов и электронов проводимости в тонкой пленке. Это связано с тем, что толщина, морфология поверхности пленки и наличие межкристаллитных границ в общем случае влияют на фоннный спектр, что значительно усложняет расчеты. Вместо квантово-полевого подхода в ряде работ [278-279] используется полуэмпирический подход, основанный на предположении о том, что фоннный вклад в проводимость пленки может быть включен путем введения некоторой эффективной длины свободного пробега электрона $l_{\text{eff}}=l_{\text{eff}}(T)$. В $l_{\text{eff}}(T)$ одновременно учитывается и рассеяние электронов проводимости на неоднородностях кристаллической решетки и рассеяние на колебаниях кристаллической решетки, поэтому $l_{\text{eff}}(T=0)=l_0$, $l_{\text{eff}}(T>0) < l_0$, где l_0 – длина свободного пробега электрона в металле, обусловленная только наличием дефектов кристаллической решетки. Учет температурной зависимости в моделях Томсона, Фукса-Зондхаймера и Маядеса-Шаткеса-Дженека проводится при помощи элементарной замены l_0 на $l_{\text{eff}}(T)$ во всех формулах для расчета проводимости.

Для приближенного расчета $l_{\text{eff}}(T)$ обычно используют формулу для удельного сопротивления макроскопически большого слоя металла ρ_{bulk} [278]

$$\rho_{\text{bulk}}(T) = \rho_{\text{res}} + \rho_{\text{e-ph}}(T), \quad \rho_{\text{res}} = \frac{v_{\text{F}} m^*}{n_{\text{e}} e^2 l_0}, \quad (\text{H.1})$$

(это формула справедлива для случая монокристаллического и немагнитного металла). Здесь v_{F} – скорость электрона проводимости на поверхности ферми, e и m^* – заряд и эффективная масса электрона проводимости, T – абсолютная температура (в градусах Кельвина); ρ_{res} – не зависящее от температуры остаточное сопротивление, которое обусловлено рассеянием электронов проводимости на неоднородностях и примесях кристаллической решетки; $\rho_{\text{e-ph}}(T)$ – зависящее от температуры сопротивление, обусловленное рассеянием электронов проводимости на фононах. С учетом сказанного выше, формулу (H.1) можно переписать в виде

$$\frac{v_{\text{F}} m^*}{n_{\text{e}} e^2 l_{\text{eff}}(T)} = \rho_{\text{bulk}}(T) = \frac{v_{\text{F}} m^*}{n_{\text{e}} e^2 l_0} + \rho_{\text{e-ph}}(T), \quad (\text{H.2})$$

откуда

$$l_{\text{eff}}(T) = \frac{l_0}{1 + \frac{\rho_{\text{e-ph}}(T)}{\rho_{\text{res}}}}. \quad (\text{H.3})$$

Часто авторы работают в приближении $\rho_{\text{res}} \ll \rho_{\text{e-ph}}(T)$, в таком случае

$$l_{\text{eff}}(T) = l_{\text{eff}}(T_{\text{ref}}) \frac{\rho_{\text{e-ph}}(T)}{\rho_{\text{e-ph}}(T_{\text{ref}})}. \quad (\text{H.4})$$

Здесь T_{ref} – некоторое референсное значение температуры, при которой l_{eff} считается известным. При построении теоретических зависимостей проводимости от температуры формула (H.4) позволяет использовать всего один подгоночный параметр $l_{\text{eff}}(T_{\text{ref}})$. Действительно, отношение $\rho_{\text{e-ph}}(T)/\rho_{\text{e-ph}}(T_{\text{ref}})$ может быть найдено по формуле Блоха-Грюнейзена [280]:

$$\frac{\rho_{\text{e-ph}}(T)}{\rho_{\text{e-ph}}(T_{\text{ref}})} = \frac{\int_0^{T_D/T} x^5 \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} dx}{\int_0^{T_D/T_{\text{ref}}} x^5 \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} dx}. \quad (\text{H.5})$$

Здесь $T_D = \hbar\omega_{\text{max}}/k_B$ – температура Дебая (где ω_{max} – максимальная частота фонона, k_B – постоянная Больцмана, \hbar – приведенная постоянная Планка).

Отметим, что даже при расчете $l_{\text{eff}}(T)$ по более общей формуле (H.3) все равно будет присутствовать хотя бы один подгоночный параметр – l_0 . Действительно, поскольку концентрация дефектов в металле пленки, вообще говоря, зависит от условий, в которых происходит напыление металла, табличное значение l_0 для макроскопически большого объема металла не обязано совпадать со значением l_0 для пленки, изготовленной из того же металла.

Как было упомянуто выше, спектр фононов зависит от толщины пленки, а также от морфологии ее поверхности и наличия межкристаллитных границ. Эту зависимость на качественном уровне учитывают при помощи подбора значения T_D в формуле (H.5). В общем случае T_D для пленок оказывается меньше, чем для макроскопически большого объема металла. Например, согласно работе [278], для золота $T_D = 165$ К, а для пленок золота разной толщины: T_D ($h=20$ нм) = 98.7 К, T_D ($h=23$ нм) = 84.4 К, T_D ($h=36$ нм) = 121.9 К, T_D ($h=54$ нм) = 103 нм.

Хотя подход, основанный на применении формул (H.4)-(H.5), является полуэмпирическим, в работах [278-279] было показано, что теоретические зависимости $\langle \sigma_{\text{film}}(h, T) \rangle$, полученные при помощи такого подхода, очень хорошо соответствуют экспериментальным данным.

В конце раздела приведем общую формулу для расчета $\rho_{\text{e-ph}}(T)$ [280]:

$$\rho_{\text{e-ph}}(T) = AT^5 \int_0^{T_D/T} x^5 \left| U^{(\text{F})}(xq_{\text{max}}T/T_D) \right|^2 \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} dx. \quad (\text{H.6})$$

Здесь A – некоторая константа, определяемая видом металла и типом его кристаллической решетки; q_{\max} – максимальное значение модуля импульса фонона; $U^{(F)}(\mathbf{k}) = n_{\text{ион}} \int e^{-j(\mathbf{k}, \mathbf{r})} U(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}$ – нормированный Фурье образ псевдо потенциала одного иона $U(r)$, где $n_{\text{ион}}$ – концентрация ионов кристаллической решетки. Псевдо потенциал $U(r)$ это эффективный потенциал иона вместе с окружающими его валентными электронами, в котором движутся электроны проводимости. В общем случае $U = U(\mathbf{r})$, однако здесь для простоты считается, что $U = U(|\mathbf{r}|)$, поэтому и $U^{(F)} = U^{(F)}(|\mathbf{k}|)$. Константа A рассчитывается по формуле

$$A = \frac{3\pi\Omega q_{\max}^6}{4e^2 \hbar v_F^2 k_F^4 M k_B T_D^6}. \quad (\text{H.7})$$

Здесь Ω – объем элементарной ячейки (объем, в среднем занимаемый одним атомом металла); k_F – модуль импульса электрона на поверхности Ферми; M – масса одного иона кристаллической решетки. При выводе соотношения (H.5) из формулы (H.6) предполагается, что $U^{(F)}(xq_{\max} T / T_D) \approx \text{const}$ при $T < T_D$.

Приложение J
(обязательное)

**Вывод формул для расчета оптических коэффициентов плоскостойсто-
неоднородной пластины при помощи различных приближенных методов (метода
ВКБ, метода характеристической матрицы, метода усреднения, импедансных
граничных условий)**

В данном приложении при помощи различных приближенных методов получены формулы расчета оптических коэффициентов (по амплитуде электромагнитного поля) r , t . Приближенные методы решения задачи о распространении волн в неоднородных средах мы будем рассматривать в контексте задачи приближенного расчета матрицы рассеяния S_{nm} . Если приближенное общее решение уравнения Гельмгольца во второй среде известно, то можно сразу же найти функции $g_{1,2}(z)$ (см. терминологию параграфа 2.1).

Сначала рассмотрим приближение ВКБ. В этом приближении общее решение уравнения Гельмгольца

$$\psi''(z) + k_2^2(z)\psi(z) = 0, \quad (\text{J.1})$$

записывается в виде

$$\psi(z) = C_1 \frac{\cos\left(\int_0^z k_2(z') dz'\right)}{\sqrt{k_2(z)}} + C_2 \frac{\sin\left(\int_0^z k_2(z') dz'\right)}{\sqrt{k_2(z)}}, \quad (\text{J.2})$$

где $C_{1,2}$ – произвольные постоянные. При граничных условиях $\psi(0)=1$, $\psi'(0)=0$

$$C_1 = \sqrt{k_2(0)}, C_2 = \frac{1}{2} \frac{k_2'(0)}{k_2^{3/2}(0)},$$

следовательно,

$$g_1(z) = \sqrt{\frac{k_2(0)}{k_2(z)}} \cos\left(\int_0^z k_2(z') dz'\right) + \frac{1}{2} \frac{k_2'(0)}{k_2^2(0)} \sqrt{\frac{k_2(0)}{k_2(z)}} \sin\left(\int_0^z k_2(z') dz'\right), \quad (\text{J.3})$$

$$g_1'(z) = \cos\left(\int_0^z k_2(z') dz'\right) \left(0.5 \frac{k_2'(0)}{k_2^{3/2}(0)} \sqrt{k_2(z)} - 0.5 \sqrt{k_2(0)} k_2^{-3/2}(z) k_2'(z)\right) + \\ + \sin\left(\int_0^z k_2(z') dz'\right) \left(-\sqrt{k_2(0)k_2(z)} - 0.25 \frac{k_2'(0)}{k_2^{3/2}(0)} k_2^{-3/2}(z) k_2'(z)\right). \quad (\text{J.4})$$

При граничных условиях $\psi(0)=0$, $\psi'(0)=1$

$$C_1 = 0, C_2 = 1/\sqrt{k_2(0)},$$

следовательно,

$$g_2(z) = \frac{\sin\left(\int_0^z k_2(z')dz'\right)}{\sqrt{k_2(z)k_2(0)}}, \quad g_2'(z) = \cos\left(\int_0^z k_2(z')dz'\right) \frac{\sqrt{k_2(z)}}{\sqrt{k_2(0)}} - 0.5 \sin\left(\int_0^z k_2(z')dz'\right) \frac{k_2'(z)}{k_2^{3/2}(z)\sqrt{k_2(0)}}. \quad (\text{J.5})$$

Подставляя выражения (J.3)-(J.5) при $z=h$ в (2.17), мы получим выражение для матрицы рассеяния S_{ij} в приближении ВКБ. В случае тонких пленок можно пользоваться формулами

$$k_2(z) = \frac{1+j}{\sqrt{2}} \sqrt{\omega\mu_0\sigma(z)} \Rightarrow k_2'(z) = \frac{1+j}{\sqrt{2}} \sqrt{\omega\mu_0} \frac{\sigma'(z)}{2\sqrt{\sigma(z)}}, \quad \int_0^h k_2(z) dz = \frac{1+j}{\sqrt{2}} \sqrt{\omega\mu_0} \int_0^h \sqrt{\sigma(z)} dz,$$

Приближение ВКБ применимо, однако, только тогда, когда волновое число $k_2(z)$ изменяется достаточно плавно в масштабе длины волны электромагнитного излучения. Действительно, подставляя общее решение (J.2) в уравнение (J.1) заключаем, что

$$\psi''(z) = -k_2^2(z)\psi(z) \left\{ 1 + \frac{1}{2} \frac{k_2''(z)}{k_2^3(z)} - \frac{3}{4} \left(\frac{k_2'(z)}{k_2^2(z)} \right)^2 \right\}. \quad (\text{J.6})$$

Отсюда видно, что условия применимости метода ВКБ можно сформулировать в виде неравенств

$$\frac{k_2''(z)}{k_2^3(z)} \ll 1, \quad \frac{k_2'(z)}{k_2^2(z)} \ll 1. \quad (\text{J.7})$$

Учитывая, что в металлах $k_2(z) = (1+j)\omega\mu_0\sigma_2(z)/2$, условия (J.7) можно переписать в виде

$$\frac{\sigma_2''(z)}{\sigma_2^2(z)\omega\mu_0} \ll 1, \quad \frac{\sigma_2'(z)}{\sigma_2^{3/2}(z)\sqrt{\omega\mu_0}} \ll 1. \quad (\text{J.8})$$

Если считать, что $\sigma_2'(z) \approx \sigma_{\text{bulk}}/h$, то первое и второе неравенства в (J.8) можно записать в виде

$$(1/p_1)^2 \ll 1, \quad 1/p_1 \ll 1. \quad (\text{J.9})$$

где p_1 – введенный в параграфе 2.1 безразмерный параметр. Параметр p_1 можно оценить как $p_1 \approx h/\delta$, где $\delta = \sqrt{\sigma_{\text{bulk}}\omega\mu_0}/2$ – характерная толщина скин-слоя в металле пленки. По этой причине метод ВКБ является в некотором смысле противоположностью предлагаемому методу последовательных приближений Пикара.

Рассмотрим еще один весьма общий подход – метод характеристической матрицы. Теория, лежащая в основе данного метода, детально изложена в книге [30], а также в статье [281]. Суть данного метода состоит в следующем. Плоскостойкая неоднородная среда 2 (см. рис. 2.2 в параграфе 2.1) разбивается на много слоев достаточно малой толщины, в пределах которой эти слои можно считать однородными. Матрица рассеяния

одного однородного слоя известна. Характеристическую матрицу совокупности слоев можно получить путем последовательного матричного произведения матриц каждого из однородных слоев. В оригинальной работе [281] характеристическая матрица M_{ij} (в случае нормального падения электромагнитной волны) задает связь между векторами напряженности электрического и магнитного поля типа

$$\begin{pmatrix} E(0) \\ H(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{12} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E(h) \\ H(h) \end{pmatrix},$$

где

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{12} & M_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -j\omega \int_0^h \mu_2(z') dz' \\ -j\omega \int_0^h \varepsilon_2(z') dz' & 1 \end{pmatrix}.$$

При этом коэффициенты отражения r и пропускания t рассчитываются по формулам [30]

$$r = \frac{(M_{11} + M_{12}\sqrt{\varepsilon_3/\mu_3})\sqrt{\varepsilon_1/\mu_1} - (M_{21} + M_{22}\sqrt{\varepsilon_3/\mu_3})}{(M_{11} + M_{12}\sqrt{\varepsilon_3/\mu_3})\sqrt{\varepsilon_1/\mu_1} + (M_{21} + M_{22}\sqrt{\varepsilon_3/\mu_3})}, \quad (\text{J.10})$$

$$t = \frac{2\sqrt{\varepsilon_1/\mu_1}}{(M_{11} + M_{12}\sqrt{\varepsilon_3/\mu_3})\sqrt{\varepsilon_1/\mu_1} + (M_{21} + M_{22}\sqrt{\varepsilon_3/\mu_3})}. \quad (\text{J.11})$$

Здесь ε_i , μ_i – абсолютная диэлектрическая и магнитная проницаемости i -ой среды. Поскольку мы рассматриваем немагнитные среды, а для металлов $\varepsilon_2(z) = j\sigma_2(z)/\omega$, при расчетах мы будем пользоваться соотношениями

$$\mu_i = \mu_0 \Rightarrow -j\omega\mu_0 \int_0^h \mu_2(z') dz' = -j\omega\mu_0 h, \quad -j\omega \int_0^h \varepsilon_2(z') dz' = \int_0^h \sigma(z') dz' = h \langle \sigma(h) \rangle,$$

где μ_0 – магнитная постоянная, а $\langle \sigma(h) \rangle$ – средняя (по толщине) проводимость металла пленки.

Интересный подход, основанный на методе усреднения, был развит в работе Антонеца И. В. [282]. Для исторической точности стоит отметить, что, по-видимому, впервые метод усреднения был применен в задачах расчета характеристик волноводов с гиромангнитным заполнением [283-284]. Суть этого метода заключается в следующем. Уравнение Гельмгольца в среде 2 можно записать также в виде системы $dE_2/dz = E_2'$, $dE_2'/dz = -k_2^2(z)E_2$. Интегрируя данную систему по толщине среды 2, получим интегральные соотношения, в которых для вычисления интегралов используем метод трапеций:

$$\begin{cases} E_2(h) - E_2(0) = \int_0^h E_2'(z') dz' \approx \frac{h}{2} (E_2'(0) + E_2'(h)) \\ E_2'(h) - E_2'(0) = -\int_0^h k_2^2(z') E_2(z') dz' \approx -\frac{h}{2} (k_2^2(0) E_2(0) + k_2^2(h) E_2(h)) \end{cases} \quad (J.12)$$

Формулы (J.12) можно также переписать в виде:

$$\begin{cases} E_2(h) = E_2(0) \frac{1 - h^2 k_2^2(0)/4}{1 + h^2 k_2^2(h)/4} + E_2'(0) \frac{h}{1 + h^2 k_2^2(h)/4} \\ E_2'(h) = E_2(0) \frac{-h(k_2^2(0) + k_2^2(h))}{2} + E_2'(0) \frac{1 - h^2 k_2^2(h)/4}{1 + h^2 k_2^2(h)/4} \end{cases} \quad (J.13)$$

Сравнивая соотношения (J.13) с формулами (J.9)-(J.10), приходим к выводу, что

$$g_1(h) = \frac{1 - h^2 k_2^2(0)/4}{1 + h^2 k_2^2(h)/4}, \quad g_2(h) = \frac{h}{1 + h^2 k_2^2(h)/4}, \quad (J.14)$$

$$g_1'(h) = \frac{-h(k_2^2(0) + k_2^2(h))}{2}, \quad g_2'(h) = \frac{1 - h^2 k_2^2(h)/4}{1 + h^2 k_2^2(h)/4}. \quad (J.15)$$

Подставляя (J.14)-(J.15) в (2.17) (в параграфе 2.1), получим выражение для матрицы рассеяния в приближении метода усреднения.

Рассмотрим также метод импедансных граничных условий. Идея возможности описания отражения электромагнитных волн от проводящих поверхностей с использованием приближенных граничных условий появилась примерно в 40-х годах прошлого столетия. Впервые такая идея была высказана А.Н. Щукиным, М.А. Леонтовичем и С.М. Рытовым [285-286]. Согласно такому подходу, связь векторов напряженности электрического \mathbf{E} и магнитного \mathbf{H} поля на поверхности металлической поверхности задается соотношением

$$[\mathbf{n}, \mathbf{E}] = Z[\mathbf{n}, [\mathbf{n}, \mathbf{H}]], \quad (J.16)$$

где $[\mathbf{A}, \mathbf{B}]$ – операция векторного произведения векторов \mathbf{A} и \mathbf{B} , \mathbf{n} – внешняя к поверхности металла нормаль, $Z = \sqrt{\mu_m / \epsilon_m}$, μ_m, ϵ_m – абсолютные магнитная и диэлектрическая проницаемости металла. Для расчетов мы будем считать, что $\mu_m = \mu_0$, $\epsilon_m = j \langle \sigma(h) \rangle / \omega$. Таким образом, $Z = (1 - j) \sqrt{\mu_0 \omega / (2 \langle \sigma(h) \rangle)}$. Для одномерного случая, рассмотренного в параграфе 2.2, граничное условие при $z=0$ (J.16) приводит к равенству:

$$A_1^+ + A_1^- = E(0) = -\frac{1 + j}{\sqrt{2\mu_0 \omega \langle \sigma(h) \rangle}}, \quad E'(0) = -\frac{1 + j}{\sqrt{2\mu_0 \omega \langle \sigma(h) \rangle}} j k_1 (A_1^+ - A_1^-) \quad (J.17)$$

откуда находим

$$r = (\gamma - 1) / (\gamma + 1), \quad \gamma = k_1 / \sqrt{\langle k_2^2(h) \rangle} = (1 - j) k_1 / \sqrt{2\mu_0 \omega \langle \sigma(h) \rangle}. \quad (J.18)$$

Приложение К
(обязательное)

Доказательства утверждений, использующихся для оценок ошибки приближенного метода Пикара

Для доказательства утверждений №1-4 (формулы (2.47)-(2.50) в параграфе 2.2) необходимо сначала доказать следующие неравенства (везде ниже $f(z)$ – произвольная функция аргумента z):

Неравенство №1: $|\hat{L}(f) - \hat{L}_N(f)| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} |\hat{J}^n(f)|.$

◀Для доказательства необходимо расписать операторы \hat{L} , \hat{L}_N согласно их определению (2.42), а также использовать свойство модуля суммы $|a+b| \leq |a|+|b|$.

$$|\hat{L}(f) - \hat{L}_N(f)| = \left| \sum_{n=0}^{\infty} \hat{J}^n(f) - \sum_{n=0}^N \hat{J}^n(f) \right| = \left| \sum_{n=N+1}^{\infty} \hat{J}^n(f) \right| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} |\hat{J}^n(f)|. \quad \blacksquare$$

Неравенство №2: $|\hat{L}'(f) - \hat{L}'_N(f)| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} |(\hat{J}^n(f))'|.$

◀Доказательство данного неравенства почти полностью аналогично доказательству предыдущего, однако в нем используется линейность оператора взятия частной производной:

$$\begin{aligned} |\hat{L}'(f) - \hat{L}'_N(f)| &\leq \left| \left(\sum_{n=0}^{\infty} \hat{J}^n(f) - \sum_{n=0}^N \hat{J}^n(f) \right)' \right| = \left| \left(\sum_{n=N+1}^{\infty} \hat{J}^n(f) \right)' \right| = \\ &= \left| \sum_{n=N+1}^{\infty} (\hat{J}^n(f))' \right| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} |(\hat{J}^n(f))'| \quad \blacksquare \end{aligned}$$

Неравенство №3: $|\hat{J}^n(1)| \leq (\max |k_2| \cdot z)^{2n} / (2n)!.$

◀Доказательство неравенства №3 основано на методе математической индукции. Поскольку $\hat{J}^0(1) \equiv \hat{1}(1) = 1$, $0! = 1$, $(\max |k_2| \cdot z)^0 = 1$, при $n = 0$ неравенство обращается в тождество $1 \equiv 1$. Далее, необходимо доказать, что если неравенство справедливо при $n=m$, то оно также будет справедливо и при $n=m+1$. Рассмотрим левую часть неравенства при $n=m+1$, для краткости обозначим $\hat{J}^m(1)$ как $g(z)$:

$$|\hat{J}^{m+1}(1)| = \left| \hat{J}(\hat{J}^m(1)) \right| = \left| \hat{J}(g) \right| = \left| \int_0^z \int_0^{z_1} k_2^2(z_2) g(z_2) dz_2 dz_1 \right|$$

Дважды используем свойство модуля $\left| \int f(z) dz \right| \leq \int |f(z)| dz$:

$$\left| \int_0^z \int_0^{z_1} k_2^2(z_2) g(z_2) dz_2 dz_1 \right| \leq \int_0^z \left| \int_0^{z_1} k_2^2(z_2) g(z_2) dz_2 \right| dz_1 \leq$$

$$\leq \int_0^z \int_0^{z_1} |k_2^2(z_2)| |g(z_2)| dz_2 dz_1 \leq (\max |k_2|)^2 \int_0^z \int_0^{z_1} |g(z_2)| dz_2 dz_1$$

Далее, по предположению $|g(z_2)| = |\hat{J}^m(1)| \leq (\max |k_2| \cdot z_2)^{2m} / (2m)!$, поэтому:

$$(\max |k_2|)^2 \int_0^z \int_0^{z_1} |g(z_2)| dz_2 dz_1 \leq \frac{(\max |k_2|)^{2+2m}}{(2m)!} \int_0^z \int_0^{z_1} z_2^{2m} dz_2 dz_1$$

Двойной интеграл в последнем выражении равен $z^{2m+2} / ((2m+1)(2m+2))$, поэтому в итоге получаем то, что требовалось доказать:

$$|\hat{J}^{m+1}(1)| \leq \frac{(\max |k_2| \cdot z)^{2(m+1)}}{(2(m+1))!} \quad \blacksquare$$

Доказательства неравенств №4-6 во многом будут аналогичны, поэтому часть выкладок будет опущена.

Неравенство №4: $|\hat{J}^n(z)| \leq (\max |k_2|)^{2n} z^{2n+1} / (2n+1)!$.

◀ При $n = 0$, неравенство обращается в тождество $z \equiv z$, так как $\hat{J}^0(z) \equiv \hat{1}(z) = z$, $0! = 1$, $(\max |k_2|)^0 = 1$, $z^{2n+1} = z$. Докажем, что если неравенство №4 верно при $n=m$, то оно также верно и при $n=m+1$. Рассмотрим левую часть неравенства при $n=m+1$, обозначим $\hat{J}^m(z)$ как $s(z)$:

$$|\hat{J}^{m+1}(z)| = \left| \hat{J}(\hat{J}^m(z)) \right| = |\hat{J}(s)| = \left| \int_0^z \int_0^{z_1} k_2^2(z_2) s(z_2) dz_2 dz_1 \right| \leq \int_0^z \left| \int_0^{z_1} k_2^2(z_2) s(z_2) dz_2 \right| dz_1 \leq$$

$$\leq \int_0^z \int_0^{z_1} |k_2^2(z_2) s(z_2)| dz_2 dz_1 = \int_0^z \int_0^{z_1} |k_2^2(z_2)| |s(z_2)| dz_2 dz_1 \leq (\max |k_2|)^2 \int_0^z \int_0^{z_1} |s(z_2)| dz_2 dz_1$$

По предположению $|s(z_2)| = |\hat{J}^m(1)| \leq (\max |k_2|)^{2m} z_2^{2m+1} / (2m+1)!$, поэтому:

$$(\max |k_2|)^2 \int_0^z \int_0^{z_1} |s(z_2)| dz_2 dz_1 \leq (\max |k_2|)^2 \int_0^z \int_0^{z_1} \frac{(\max |k_2|)^{2m} \cdot z_2^{2m+1}}{(2m+1)!} dz_2 dz_1 = \frac{(\max |k_2|)^{2+2m}}{(2m+1)!} \int_0^z \int_0^{z_1} z_2^{2m+1} dz_2 dz_1$$

Двойной интеграл в последнем выражении равен $z^{2m+3} / ((2m+2)(2m+3))$, поэтому в итоге:

$$|\hat{J}^{m+1}(z)| \leq \frac{(\max |k_2|)^{2+2m}}{(2m+1)!} \frac{z^{2m+3}}{(2m+2)(2m+3)} = \frac{(\max |k_2|)^{2(m+1)} \cdot z^{2(m+1)+1}}{(2(m+1)+1)!}. \quad \blacksquare$$

Неравенство №5: $\left| (\hat{J}^n(1))' \right| \leq (\max |k_2|)^{2n} z^{2n-1} / (2n-1)!.$

◀ При наименьшем значении $n=1$ данное неравенство выполняется:

$$\left| (\hat{J}^n(1))' \right| = \left| \left(\int_0^z \int_0^{z_1} k_2^2(z_2) dz_2 dz_1 \right)' \right| = \left| \int_0^z k_2^2(z_2) dz_2 \right| \leq \int_0^z |k_2^2(z_2)| dz_2 \leq (\max |k_2|)^2 \int_0^z dz_2 = (\max |k_2|)^2 z$$

Докажем, что если неравенство №5 верно при $n=m$, то оно верно также и при $n=m+1$.

Рассмотрим левую часть неравенства при $n=m+1$.

$$\left| (\hat{J}^{m+1}(1))' \right| = \left| (\hat{J}(\hat{J}^m(1)))' \right| = \left| \int_0^z k_2^2(z_2) \hat{J}^m(1) dz_2 \right| \leq (\max |k_2|)^2 \int_0^z |\hat{J}^m(1)| dz_2$$

Согласно неравенству №3, $|\hat{J}^m(1)| \leq (\max |k_2| \cdot z)^{2m} / (2m)!$, поэтому:

$$\begin{aligned} (\max |k_2|)^2 \int_0^z |\hat{J}^m(1)| dz_2 &\leq (\max |k_2|)^2 \int_0^z \frac{(\max |k_2| \cdot z_2)^{2m}}{(2m)!} dz_2 \leq \frac{(\max |k_2|)^{2(m+1)}}{(2m)!} \int_0^z z_2^{2m} dz_2 = \\ &= \frac{(\max |k_2|)^{2(m+1)}}{(2m)!} \frac{z^{2m+1}}{2m+1} = \frac{(\max |k_2|)^{2(m+1)} \cdot z^{2(m+1)+1}}{(2(m+1)+1)!}. \quad \blacksquare \end{aligned}$$

Неравенство №6: $\left| (\hat{J}^n(z))' \right| \leq (\max |k_2|)^{2n} z^{2n} / (2n)!.$

◀ При $n=0$ получается тождество $1 \equiv 1$, поскольку $(\hat{J}^0(z))' = (\hat{1}(z))' = (z)' = 1$. Покажем, что если неравенство верно при $n=m$, то оно также верно и при $n=m+1$.

$$\begin{aligned} \left| (\hat{J}^{m+1}(z))' \right| &= \left| (\hat{J}(\hat{J}^m(z)))' \right| = \left| \int_0^z k_2^2(z_2) \hat{J}^m(z_2) dz_2 \right| \leq \\ &\leq \int_0^z |k_2^2(z_2)| |\hat{J}^m(z_2)| dz_2 \leq (\max |k_2|)^2 \int_0^z |\hat{J}^m(z_2)| dz_2 \end{aligned}$$

Согласно неравенству №4,

$$|\hat{J}^m(z_2)| \leq (\max |k_2|)^{2m} z_2^{2m+1} / (2m+1)!,$$

поэтому:

$$\begin{aligned} (\max |k_2|)^2 \int_0^z |\hat{J}^m(z_2)| dz_2 &\leq (\max |k_2|)^2 \int_0^z \frac{(\max |k_2|)^{2m} z_2^{2m+1}}{(2m+1)!} dz_2 = \\ &= \frac{(\max |k_2|)^{2m+1}}{(2m+1)!} \int_0^z z_2^{2m+1} dz_2 = \frac{(\max |k_2| z)^{2(m+1)}}{(2(m+1)+1)!}. \quad \blacksquare \end{aligned}$$

Перейдем к доказательству утверждений №1-4.

$$\text{Утверждение №1: } |g_1 - g_1^{[N]}| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} p_1^{2n} / (2n)!.$$

◀ Для доказательства используем формулы (2.35), (2.41) и (2.42) для g_1 :

$$|g_1^{[N]} - g_1| = |\hat{L}_N(g_1^{[0]}) - \hat{L}(g_1^{[0]})| = |\hat{L}_N(1) - \hat{L}(1)|$$

Далее, из неравенства №1 следует, что

$$|\hat{L}_N(1) - \hat{L}(1)| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} |\hat{J}^n(1)|,$$

а из неравенства №3 следует:

$$\sum_{n=N+1}^{\infty} |\hat{J}^n(1)| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} (\max |k_2| \cdot z)^{2n} / (2n)!.$$

Поскольку $h = \max(z)$ на интервале $z \in [0, h]$, то вводя безразмерный параметр $p_1 = h \cdot \max |k_2|$, получим

$$|g_1^{[N]} - g_1| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} (\max |k_2| \cdot h)^{2n} / (2n)! \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} p_1^{2n} / (2n)!.$$

$$\text{Утверждение №2: } |g_2 - g_2^{[N]}| \leq h \sum_{n=N+1}^{\infty} p_1^{2n} / (2n+1)!.$$

◀ Для доказательства также (используем (2.36), (2.41) и (2.42) для g_2 :

$$|g_2 - g_2^{[N]}| = |\hat{L}(g_2^{[0]}) - \hat{L}_N(g_2^{[0]})| = |\hat{L}(z) - \hat{L}_N(z)|.$$

Согласно неравенству №1,

$$|\hat{L}(z) - \hat{L}_N(z)| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} |\hat{J}^n(z)|,$$

а согласно неравенству №4,

$$|\hat{J}^n(z)| \leq (\max |k_2|)^{2n} z^{2n+1} / (2n+1)!,$$

поэтому:

$$\sum_{n=N+1}^{\infty} |\hat{J}^n(z)| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} (\max |k_2|)^{2n} z^{2n+1} / (2n+1)! \leq h \sum_{n=N+1}^{\infty} p_1^{2n} / (2n+1)!.$$

$$\text{Утверждение №3: } |g_1' - g_1'^{[N]}| \leq \max |k_2| \sum_{n=N+1}^{\infty} p_1^{2n-1} / (2n-1)!$$

◀ Доказательство:

$$|g_1' - g_1'^{[N]}| = |\hat{L}'(g_1^{[0]}) - \hat{L}'_N(g_1^{[0]})| = |\hat{L}'(1) - \hat{L}'_N(1)|.$$

Из неравенства №2 $|\hat{L}'(1) - \hat{L}'_N(1)| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} |(\hat{J}^n(1))'|$, а согласно неравенству №5

$$\left| (\hat{J}^n(1))' \right| \leq (\max |k_2|)^{2n} z^{2n-1} / (2n-1)!, \text{ поэтому}$$

$$|\hat{L}'(1) - \hat{L}'_N(1)| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} |(\hat{J}^n(1))'| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} (\max |k_2|)^{2n} z^{2n-1} / (2n-1)! \leq \max |k_2| \sum_{n=N+1}^{\infty} p_1^{2n-1} / (2n-1)! \quad \blacksquare$$

Утверждение №4: $|g'_2 - g_2'^{[N]}| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} p_1^{2n} / (2n)!$

◀ Доказательство:

$$|g'_2 - g_2'^{[N]}| = |\hat{L}'(g_2^{[0]}) - \hat{L}'_N(g_2^{[0]})| = |\hat{L}'(z) - \hat{L}'_N(z)|.$$

Из неравенства №2 $|\hat{L}'(f) - \hat{L}'_N(f)| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} |(\hat{J}^n(f))'|$ и №6 $\left| (\hat{J}^n(z))' \right| \leq (\max |k_2|)^{2n} z^{2n} / (2n)!$

следует, что

$$|\hat{L}'(z) - \hat{L}'_N(z)| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} \left| (\hat{J}^n(z))' \right| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} (\max |k_2| \cdot z)^{2n} / (2n)! \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} p_1^{2n} / (2n)!. \quad \blacksquare$$

Приложение L
(справочное)

**Обобщение метода последовательных приближений Пикара для случая
распространения электромагнитных волн в прямоугольном волноводе**

В данном приложении доказывается, что в том случае, когда в прямоугольном волноводе возбуждаются моды TE_{nm} , задача рассеяния электромагнитных волн на неоднородной плоскостойкой структуре в волноводе может быть при помощи некоторых замен сведена к аналогичной задаче рассеяния плоских волн в свободном пространстве.

Теория распространения электромагнитных волн в волноведущих системах детально изложена в книгах [287-289], мы здесь воспользуемся уже полученными результатами.

Рассмотрим волновод прямоугольного сечения $a \times b$, где для определенности $a > b$. Введем декартову систему координат таким образом, чтобы плоскость поперечного сечения волновода совпадала бы с плоскостью Oxy (см. рис. L.1). В таком случае комплексные амплитуды векторов электромагнитного поля в волноводе могут быть представлены в виде сумм по всевозможным модам (здесь используется временная зависимость $e^{-j\omega t}$):

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E} \\ \mathbf{H} \end{pmatrix} = \sum_{\substack{\forall n, m \geq 0, \\ \text{кроме } n=m=0}} A_{nm}^{(TE+)} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{nm}^{(TE+)}(x, y) \\ \mathbf{H}_{nm}^{(TE+)}(x, y) \end{pmatrix} e^{+j\tilde{k}_{nm}z} + \sum_{\substack{\forall n, m \geq 0, \\ \text{кроме } n=m=0}} A_{nm}^{(TE-)} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{nm}^{(TE-)}(x, y) \\ \mathbf{H}_{nm}^{(TE-)}(x, y) \end{pmatrix} e^{-j\tilde{k}_{nm}z} + \\ + \sum_{\forall n, m > 0} A_{nm}^{(TM+)} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{nm}^{(TM+)}(x, y) \\ \mathbf{H}_{nm}^{(TM+)}(x, y) \end{pmatrix} e^{+j\tilde{k}_{nm}z} + \sum_{\forall n, m > 0} A_{nm}^{(TM-)} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{nm}^{(TM-)}(x, y) \\ \mathbf{H}_{nm}^{(TM-)}(x, y) \end{pmatrix} e^{-j\tilde{k}_{nm}z}. \quad (L.1)$$

Здесь

$$\tilde{k}_{nm} = \sqrt{k^2 - (\pi n / a)^2 - (\pi m / b)^2} \quad (L.2)$$

– постоянная распространения, иногда также называемая продольным волновым числом, где k – волновое число среды, заполняющей волновод. В выражении (L.1) индекс (TE) обозначает волны класса Н (моды типа Transverse Electric, в которых $E_z = 0$ и вектор $\mathbf{E} \in Oxy$), а индекс (TM) обозначает волны класса Е (моды типа Transverse Magnetic, в которых $H_z = 0$ и вектор $\mathbf{H} \in Oxy$). Индекс (+) означает, что волна распространяется в положительном направлении оси Oz , а индекс (–) – в отрицательном направлении оси Oz . Константы $A_{nm}^{(TE\pm)}$, $A_{nm}^{(TM\pm)}$ являются комплексными амплитудами поля соответствующей моды, распространяющейся либо в положительном, либо в отрицательном направлении оси Oz . Компоненты векторов рассчитываются по формулам

$$\begin{aligned}
E_{x, nm}^{(\text{TE}^\pm)}(x, y) &= -j\omega\mu_0 \frac{\pi m}{b} \cos(\pi n x / a) \sin(\pi m y / b), & E_{x, nm}^{(\text{TM}^\pm)}(x, y) &= \pm j\tilde{k}_{nm} \frac{\pi n}{a} \cos(\pi n x / a) \sin(\pi m y / b), \\
E_{y, nm}^{(\text{TE}^\pm)}(x, y) &= j\omega\mu_0 \frac{\pi n}{a} \sin(\pi n x / a) \cos(\pi m y / b), & E_{y, nm}^{(\text{TM}^\pm)}(x, y) &= \pm j\tilde{k}_{nm} \frac{\pi m}{b} \sin(\pi n x / a) \cos(\pi m y / b), \\
E_{z, nm}^{(\text{TE}^\pm)}(x, y) &= 0, & E_{z, nm}^{(\text{TM}^\pm)}(x, y) &= (k^2 - \tilde{k}_{nm}^2) \sin(\pi n x / a) \sin(\pi m y / b), \\
H_{x, nm}^{(\text{TE}^\pm)}(x, y) &= \mp j\tilde{k}_{nm} \frac{\pi n}{a} \sin(\pi n x / a) \cos(\pi m y / b), & H_{x, nm}^{(\text{TM}^\pm)}(x, y) &= -j\omega\varepsilon \frac{\pi m}{b} \sin(\pi n x / a) \cos(\pi m y / b), \\
H_{y, nm}^{(\text{TE}^\pm)}(x, y) &= \mp j\tilde{k}_{nm} \frac{\pi m}{b} \cos(\pi n x / a) \sin(\pi m y / b), & H_{y, nm}^{(\text{TM}^\pm)}(x, y) &= j\omega\varepsilon \frac{\pi n}{a} \cos(\pi n x / a) \sin(\pi m y / b), \\
H_{z, nm}^{(\text{TE}^\pm)}(x, y) &= (k^2 - \tilde{k}_{nm}^2) \cos(\pi n x / a) \cos(\pi m y / b), & H_{z, nm}^{(\text{TM}^\pm)}(x, y) &= 0.
\end{aligned} \tag{L.3}$$

Здесь ε – абсолютная диэлектрическая проницаемость среды, заполняющей волновод, а μ_0 – магнитная проницаемость вакуума, поскольку мы рассматриваем случай немагнитных сред.

Теперь рассмотрим систему, состоящую из трех сред, аналогичную той, что была рассмотрена в параграфе 2.1, которая размещена в волноводном тракте, см. рис. L.2. Среды 1,3 однородные с волновыми числами $k_{1,3}=\text{const}$, а волновое число второй среды k_2 зависит от координаты z .

Как видно из формулы (L.2), без затухания могут распространяться лишь волны, для которых $k^2 - (\pi n / a)^2 - (\pi m / b)^2 > 0$. Это обстоятельство позволяет выбирать рабочий диапазон частот таким образом, что в волноводе без затухания способны распространяться волны единственной моды TE_{10} , для которой $n=1, m=0$.

Таким образом, второй среды (см. рис. L.2) будет достигать только падающая волна моды TE_{10}^+ с некоторой известной амплитудой $A_{10}^{\text{TE}^+}$, задаваемой генератором. По этой причине предположим, что во всех средах возможно возбуждение только волн моды TE_{10} . Данное предположение не является очевидным. Однако можно показать, что решение, полученное в данном предположении, удовлетворяет уравнениям Максвелла и граничным условиям.

Другими словами, мы попытаемся угадать частное решение уравнений Максвелла в волноводе, заполненном неоднородной плоскостройкой средой, и будем искать его в виде суперпозиций волн моды TE_{10} . Далее мы покажем, что найденное частное решение удовлетворяет уравнениям Максвелла, а также удовлетворяет граничным условиям, как на поверхности волновода, так и на границах раздела сред. Тогда из теоремы о существовании и единственности решения уравнения Гельмгольца в замкнутой области будет следовать, что это и есть единственное и верное решение.

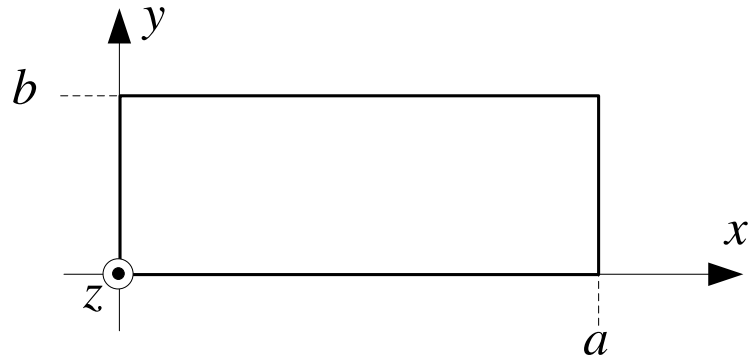


Рис. L.1. К волноводной постановке задачи.

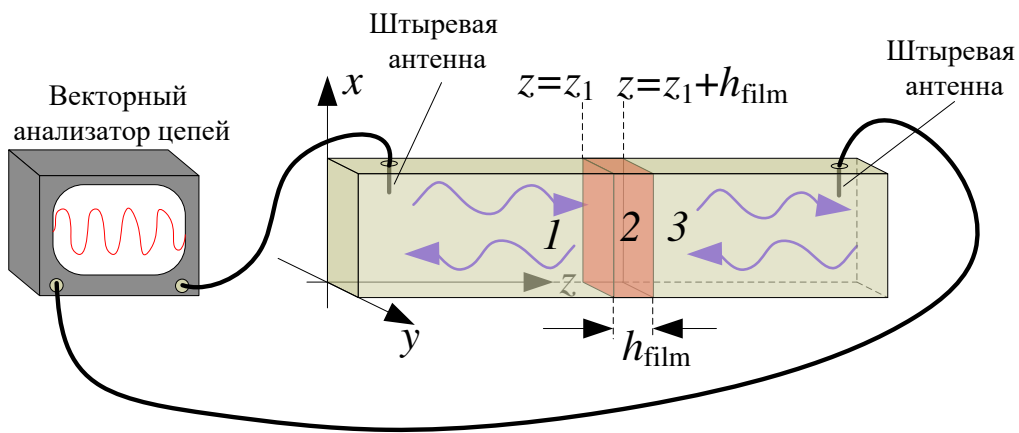


Рис. L.2. Система из трех сред, помещенная в волноводный тракт.

Мы рассмотрим, однако, чуть более общий случай мод TE_{nm} . Итак, предположим, что в волноводе возбуждаются только волны одной моды TE_{nm} . В среде 2, поскольку она неоднородна, выражения для мод TE_{nm} неизвестны, их нужно найти. Для этого заметим, что функции (L.3) сконструированы таким образом, чтобы удовлетворять граничным условиям идеального проводника на поверхностях стенок волновода

$$\begin{aligned} E_x(y=0) = E_x(y=b) = 0, E_y(x=0) = E_y(x=a) = 0, \\ H_x(x=0) = H_x(x=a) = 0, H_y(y=0) = H_y(y=b) = 0. \end{aligned} \quad (L.4)$$

По этой причине, для того, чтобы граничные условия (L.4) выполнялись и во второй среде, удобно искать решение во второй среде в виде произведений синусов и косинусов (которые фигурируют в формулах (L.3)), на некоторую неизвестную функцию координаты z . Таким образом, предположим, что во второй среде компоненты векторов электромагнитного поля моды TE_{nm} могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned}
E_{x, nm}^{(TE^\pm)}(x, y, z) &= e_{nm, x}(z) \cos(\pi n x / a) \sin(\pi m y / b), H_{x, nm}^{(TE^\pm)}(x, y, z) = h_{nm, x}(z) \sin(\pi n x / a) \cos(\pi m y / b), \\
E_{y, nm}^{(TE^\pm)}(x, y, z) &= e_{nm, y}(z) \sin(\pi n x / a) \cos(\pi m y / b), H_{y, nm}^{(TE^\pm)}(x, y, z) = h_{nm, y}(z) \cos(\pi n x / a) \sin(\pi m y / b), \quad (L.5) \\
E_{z, nm}^{(TE^\pm)}(x, y, z) &= 0, \quad H_{z, nm}^{(TE^\pm)}(x, y, z) = h_{nm, z}(z) \cos(\pi n x / a) \cos(\pi m y / b),
\end{aligned}$$

где $e_{nm, x}(z)$, $e_{nm, y}(z)$, $h_{nm, x}(z)$, $h_{nm, y}(z)$, $h_{nm, z}(z)$ – неизвестные функции, подлежащие определению. В работе [A1] показано, что в неоднородной немагнитной проводящей среде справедливы уравнения Максвелла

$$\begin{aligned}
\text{rot} \mathbf{E} = j\omega\mu_0 \mathbf{H} &\Leftrightarrow \begin{cases} \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} = j\omega\mu_0 H_x, \\ \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = j\omega\mu_0 H_y, \\ \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = j\omega\mu_0 H_z, \end{cases} & \text{rot} \mathbf{H} = -j\omega\xi \mathbf{E} &\Leftrightarrow \begin{cases} \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} = -j\omega\xi E_x, \\ \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = -j\omega\xi E_y, \\ \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = -j\omega\xi E_z, \end{cases} \\
\text{div}(\xi \mathbf{E}) = 0 &\Leftrightarrow \frac{\partial(\xi E_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\xi E_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\xi E_z)}{\partial z} = 0, & \text{div} \mathbf{H} = 0 &\Leftrightarrow \frac{\partial H_x}{\partial x} + \frac{\partial H_y}{\partial y} + \frac{\partial H_z}{\partial z} = 0,
\end{aligned} \quad (L.6)$$

где $\xi = \varepsilon(x, y, z) + j\sigma(x, y, z)/\omega$ – комплексная диэлектрическая проницаемость, зависящая от пространственных координат. Мы будем считать, что $\xi = \xi(z)$. Подставим (L.5) в (L.6). Все синусы и косинусы сокращаются и уравнения Максвелла (L.6) приводят к системе из 8-ми уравнений только относительно неизвестных $e_{nm, x}(z)$, $e_{nm, y}(z)$, $h_{nm, x}(z)$, $h_{nm, y}(z)$, $h_{nm, z}(z)$:

$$h_{nm, z} \frac{\pi m}{b} + h'_{nm, y} = j\omega\xi e_{nm, x}, \quad (L.7)$$

$$h'_{nm, x} + \frac{\pi n}{a} h_{nm, z} + h'_{nm, y} = -j\omega\xi e_{nm, y}, \quad (L.8)$$

$$h_{nm, x} \frac{\pi m}{b} - h_{nm, y} \frac{\pi n}{a} = 0, \quad (L.9)$$

$$-e'_{nm, y} = j\omega\mu_0 h_{nm, x}, \quad (L.10)$$

$$e'_{nm, x} = j\omega\mu_0 h_{nm, y}, \quad (L.11)$$

$$e_{nm, y} \frac{\pi n}{a} - e_{nm, x} \frac{\pi m}{b} = j\omega\mu_0 h_{nm, z}, \quad (L.12)$$

$$e_{nm, x} \frac{\pi n}{a} + e_{nm, y} \frac{\pi m}{b} = 0, \quad (L.13)$$

$$h_{nm, x} \frac{\pi n}{a} + h_{nm, y} \frac{\pi m}{b} + h'_{nm, z} = 0. \quad (L.14)$$

Здесь для краткости производная по переменной z обозначается штрихом. Заметим, что функции $e_{nm,x}(z)$, $h_{nm,x}(z)$, $h_{nm,y}(z)$, $h_{nm,z}(z)$ можно выразить через $e_{nm,y}(z)$ и производную $e'_{nm,y}(z)$. Действительно, из уравнения (L.13)

$$e_{nm,x} = -e_{nm,y} \frac{m a}{b n}. \quad (\text{L.15})$$

Подставляя (L.15) в (L.12) получим

$$h_{nm,z} = \frac{a}{\pi n} \frac{1}{j\omega\mu_0} e_{nm,y} \left\{ \left(\frac{\pi n}{a} \right)^2 + \left(\frac{\pi m}{b} \right)^2 \right\}. \quad (\text{L.16})$$

Подставляя (L.15) в (L.11) получим

$$h_{nm,y} = -\frac{m a}{b n} \frac{e'_{nm,y}}{j\omega\mu_0}. \quad (\text{L.17})$$

Наконец, из (L.10) получим

$$h_{nm,x} = -\frac{1}{j\omega\mu_0} e'_{nm,y}. \quad (\text{L.18})$$

Подстановки (L.15)-(L.18) в оставшиеся уравнения приводят либо к тождественным равенствам (это подстановки (L.15)-(L.18) в уравнения (L.9), (L.14)), либо к уравнению

$$e''_{nm,y} + \left(k_2^2(z) - \tilde{k}_{nm}^2 \right) e_y = 0, \quad k^2(z) = \omega^2 \xi(z) \mu_0. \quad (\text{L.19})$$

(это подстановки (L.15)-(L.18) в (L.7)-(L.8)). Таким образом, мы доказали следующее утверждение. Если $e_{nm,y}(z)$ удовлетворяет уравнению (L.19), то выражения (L.5), в которых $e_{nm,x}(z)$, $h_{nm,x}(z)$, $h_{nm,y}(z)$, $h_{nm,z}(z)$ находятся по формулам (L.15)-(L.18), удовлетворяют уравнениям Максвелла в неоднородной среде.

Значит, задача о нахождении выражения для мод TE_{nm} в неоднородной среде 2 сводится к решению уравнения (L.19).

Отметим, что все изложенные выкладки могут быть проведены и для однородных сред 1 и 3. Поэтому в итоге в каждой из сред должно выполняться уравнение

$$e''_{y, nm} \{i\} + \left(k_{\{i\}}^2 - \tilde{k}_{nm}^2 \right) e_{y, nm} \{i\} = 0, \quad k_{\{1,3\}}^2 = \omega^2 \varepsilon_{\{1,3\}} \mu_0 = \text{const}, \quad k_{\{2\}}^2(z) = \omega^2 \xi_{\{2\}}(z) \mu_0. \quad (\text{L.20})$$

Здесь во избежание путаницы индексами в фигурных скобках обозначается номер среды.

Общее решение уравнения (L.20) в среде 1 и 3 записывается в виде

$$e_{nm,y}^{\{1,3\}}(z) = C_{nm}^{+\{1,3\}} e^{j\sqrt{k_{\{1,3\}}^2 - \tilde{k}_{nm}^2} z} + C_{nm}^{-\{1,3\}} e^{-j\sqrt{k_{\{1,3\}}^2 - \tilde{k}_{nm}^2} z}. \quad (\text{L.21})$$

Поэтому, как следует из (L.5)

$$\begin{aligned} E_{y, nm}^{(TE^+)\{1,3\}}(x, y, z) &= C_{nm}^{+\{1,3\}} e^{j\sqrt{k_{\{1,3\}}^2 - \tilde{k}_{nm}^2} z} \sin(\pi n x / a) \cos(\pi m y / b), \\ E_{y, nm}^{(TE^-)\{1,3\}}(x, y, z) &= C_{nm}^{-\{1,3\}} e^{-j\sqrt{k_{\{1,3\}}^2 - \tilde{k}_{nm}^2} z} \sin(\pi n x / a) \cos(\pi m y / b). \end{aligned} \quad (\text{L.22})$$

Сравнивая формулы (L.22) с формулами (L.1) и (L.3), приходим к тому что

$$A_{nm}^{(TE+)} = j\omega\mu_0 \frac{\pi n}{a} C_{nm}^{+\{1,3\}}, \quad (L.23)$$

но поскольку множитель $\omega\mu_0 \pi n / a$ не зависит от номера среды, то можно положить

$$A_{nm\{1,3\}}^{(TE\pm)} = C_{nm}^{\pm\{1,3\}}. \quad (L.24)$$

Далее можно показать, что если функции $e_{y,nm}^{(i)}(z)$ на границах раздела сред (т.е. при $z=z_1$ и при $z=z_1+h_{\text{film}}$, см. рис. L.2) удовлетворяют граничным условиям

$$e_{y,nm}^{(1)}(z_1) = e_{y,nm}^{(2)}(z_1), \quad e'_{y,nm}{}^{(1)}(z_1) = e'_{y,nm}{}^{(2)}(z_1), \quad (L.25)$$

$$e_{y,nm}^{(2)}(z_1 + h_{\text{film}}) = e_{y,nm}^{(3)}(z_1 + h_{\text{film}}), \quad e'_{y,nm}{}^{(2)}(z_1 + h_{\text{film}}) = e'_{y,nm}{}^{(3)}(z_1 + h_{\text{film}}), \quad (L.26)$$

то вектора напряженности электрического \mathbf{E} и магнитного \mathbf{H} поля на границах сред удовлетворяют классическим граничным условиям. Для определенности рассмотрим границу $z=z_1$. Тогда на этой границе должны удовлетворяться равенства:

$$\xi_{\{1\}} E_z^{(1)} = \xi_{\{2\}} E_z^{(2)}, \quad E_x^{(1)} = E_x^{(2)}, \quad E_y^{(1)} = E_y^{(2)}, \quad (L.27)$$

$$H_z^{(1)} = H_z^{(2)}, \quad H_x^{(1)} = H_x^{(2)}, \quad H_y^{(1)} = H_y^{(2)}. \quad (L.28)$$

Поскольку мы рассматриваем ТЕ моды, $E_z=0$ и первое равенство в (L.27) обращается в тождество $0 \equiv 0$. Рассмотрим второе равенство в (L.27), используя (L.5), придем к тому что

$$e_{nm,x}^{(1)}(z_1) \cos(\pi n x / a) \sin(\pi m y / b) = e_{nm,x}^{(2)}(z_1) \cos(\pi n x / a) \sin(\pi m y / b). \quad (L.29)$$

Синус и косинус сокращаются, далее воспользуемся формулой (L.15), получим, что

$$-e_{nm,y} \frac{m a}{b n} e_{nm,y}^{(1)}(z_1) = -e_{nm,y} \frac{m a}{b n} e_{nm,y}^{(2)}(z_1) \Rightarrow e_{nm,y}^{(1)}(z_1) = e_{nm,y}^{(2)}(z_1). \quad (L.30)$$

Очевидно, что третье равенство в (L.27) приведет снова к формуле (L.30). Рассмотрим первое равенство в (L.28), используя (L.5) и (L.16), получим

$$h_{nm,z}^{(1)}(z_1) \cos(\pi n x / a) \cos(\pi m y / b) = h_{nm,z}^{(2)}(z_1) \cos(\pi n x / a) \cos(\pi m y / b) \Rightarrow h_{nm,z}^{(1)}(z_1) = h_{nm,z}^{(2)}(z_1) \stackrel{(3.98)}{\Rightarrow} \\ \frac{a}{\pi n} \frac{1}{j\omega\mu_0} e_{nm,y}^{(1)}(z_1) \left\{ \left(\frac{\pi n}{a} \right)^2 + \left(\frac{\pi m}{b} \right)^2 \right\} = \frac{a}{\pi n} \frac{1}{j\omega\mu_0} e_{nm,y}^{(2)}(z_1) \left\{ \left(\frac{\pi n}{a} \right)^2 + \left(\frac{\pi m}{b} \right)^2 \right\} \Rightarrow e_{nm,y}^{(1)}(z_1) = e_{nm,y}^{(2)}(z_1).$$

Рассмотрим второе равенство в (L.28). Используя (L.5) и (L.18), получим

$$h_{nm,x}^{(1)}(z_1) \sin(\pi n x / a) \cos(\pi m y / b) = h_{nm,x}^{(2)}(z_1) \sin(\pi n x / a) \cos(\pi m y / b) \Rightarrow h_{nm,x}^{(1)}(z_1) = h_{nm,x}^{(2)}(z_1) \stackrel{(3.100)}{\Rightarrow} \\ \Rightarrow -\frac{1}{j\omega\mu_0} e'_{nm,y}{}^{(1)}(z_1) = -\frac{1}{j\omega\mu_0} e'_{nm,y}{}^{(2)}(z_1) \Rightarrow e'_{nm,y}{}^{(1)}(z_1) = e'_{nm,y}{}^{(2)}(z_1). \quad (L.31)$$

Рассмотрим третье равенство в (L.28). Используя (L.5) и (L.17), получим

$$h_{nm,y}^{(1)}(z_1) \cos(\pi n x / a) \sin(\pi m y / b) = h_{nm,y}^{(2)}(z_1) \cos(\pi n x / a) \sin(\pi m y / b) \Rightarrow h_{nm,y}^{(1)}(z_1) = h_{nm,y}^{(2)}(z_1) \stackrel{(3.99)}{\Rightarrow}$$

$$\Rightarrow -\frac{m a}{b n} \frac{e_{nm,y}^{\prime(1)}(z_1)}{j \omega \mu_0} = -\frac{m a}{b n} \frac{e_{nm,y}^{\prime(2)}(z_1)}{j \omega \mu_0} \Rightarrow e_{nm,y}^{\prime(1)}(z_1) = e_{nm,y}^{\prime(2)}(z_1). \quad (\text{L.32})$$

Таким образом, мы доказали, что если $e_{y, nm}^{(i)}(z)$ удовлетворяют граничным условиям (L.25)-(L.26), то удовлетворяются и граничные условия для всех компонент векторов **E** и **H**.

Теперь рассмотрим одномодовый режим, при котором возбуждается лишь мода TE₁₀, что соответствует $n=1, m=0$. Тогда в средах 1 и 3 решение $e_{y,10}(z)$ ищется в виде

$$e_{y,10}^{(1)}(z) = A_{\{1\}}^+ e^{j\sqrt{k_{\{1\}}^2 - \tilde{k}_{10}^2} z} + A_{\{1\}}^- e^{-j\sqrt{k_{\{1\}}^2 - \tilde{k}_{10}^2} z}, \quad e_{y,10}^{(3)}(z) = A_{\{3\}}^+ e^{j\sqrt{k_{\{3\}}^2 - \tilde{k}_{10}^2} z} + A_{\{3\}}^- e^{-j\sqrt{k_{\{3\}}^2 - \tilde{k}_{10}^2} z}, \quad (\text{L.33})$$

где $A_{\{1\}}^+$ и $A_{\{3\}}^-$ – известные амплитуды падающих на среду 2 волн, задаваемые генератором. Для проведения прямой аналогии с материалами, изложенными в параграфе 2.1, положим $z_1=0$. Тогда с учетом решений (L.33), граничные условия (L.25)-(L.26) приводят к тому, что на границе раздела сред функция $e_{y,10}(z)$ обязана удовлетворять граничным условиям

$$A_{\{1\}}^+ + A_{\{1\}}^- = e_{y,10}^{(1)}(z=0) = e_{y,10}^{(2)}(z=0), \quad (\text{L.34})$$

$$j\sqrt{k_{\{1\}}^2 - \tilde{k}_{10}^2} (A_{\{1\}}^+ - A_{\{1\}}^-) = e_{y,10}^{\prime(1)}(z=0) = e_{y,10}^{\prime(2)}(z=0), \quad (\text{L.35})$$

$$A_{\{3\}}^+ e^{j\sqrt{k_{\{3\}}^2 - \tilde{k}_{10}^2} h_{\text{film}}} + A_{\{3\}}^- e^{-j\sqrt{k_{\{3\}}^2 - \tilde{k}_{10}^2} h_{\text{film}}} = e_{y,10}^{(2)}(z = h_{\text{film}}) = e_{y,10}^{(3)}(z = h_{\text{film}}), \quad (\text{L.36})$$

$$j\sqrt{k_{\{3\}}^2 - \tilde{k}_{10}^2} (A_{\{3\}}^+ e^{j\sqrt{k_{\{3\}}^2 - \tilde{k}_{10}^2} h_{\text{film}}} - A_{\{3\}}^- e^{-j\sqrt{k_{\{3\}}^2 - \tilde{k}_{10}^2} h_{\text{film}}}) = e_{y,10}^{\prime(2)}(z = h_{\text{film}}) = e_{y,10}^{\prime(3)}(z = h_{\text{film}}). \quad (\text{L.37})$$

Выражения (L.34)-(L.37) почти добуквенно повторяют аналогичные выражения (L.3)-(L.6) из параграфа 2.1 (см. формулы (2.11)-(2.14)). Все различия сводятся к тому, что волновое число в i -ой среде $k_{\{i\}}$ заменяется на коэффициент $k_{\perp\{i\}} = \sqrt{k_{\{i\}}^2 - \tilde{k}_{10}^2}$, который иногда называют поперечным волновым числом. По аналогии с материалами, изложенными в параграфе 2.1, уравнения (L.34)-(L.37) являются начальными условиями для функции $e_{10,y}^{(2)}(z)$. В итоге приходим к тому, что для поиска выражений, связывающих амплитуды $A_{\{1,3\}}^\pm$, необходимо решить одномерное уравнение Гельмгольца

$$e_{y,10}^{\prime(2)} + \left(k_{\{2\}}^2(z) - \tilde{k}_{10}^2 \right) e_{y,10}^{(2)} = 0, \quad k_{\{2\}}^2(z) = \omega^2 \xi_{\{2\}}(z) \mu_0, \quad (\text{L.38})$$

при заданных начальных условиях

$$A_{\{1\}}^+ + A_{\{1\}}^- = e_{y,10}^{(2)}(z=0), \quad j\sqrt{k_{\{1\}}^2 - \tilde{k}_{10}^2} (A_{\{1\}}^+ - A_{\{1\}}^-) = e_{y,10}^{\prime(2)}(z=0).$$

Аналогично изложенной в параграфе 2.1 методике, приближенное решение уравнения (L.38) можно сконструировать при помощи метода последовательных приближений Пикара.

Итак, можно сделать следующий вывод. Задача рассеяния электромагнитных волн моды TE₁₀ на неоднородной плоскостройной структуре в волноводе заменами $k_{(i)} \rightarrow k_{\perp(i)} = \sqrt{k_{(i)}^2 - \tilde{k}_{10}^2}$ сводится к аналогичной задаче рассеяния плоских волн в свободном пространстве.

В главе 2 помимо волновых чисел использовались также показатели преломления сред n_i и показатель преломления поверхности пленки η_i . Покажем, каким образом изменяется выражение для n_i и η_i в волноводе. Поскольку в итоговые формулы для расчета оптических коэффициентов (см. формулы (3.13)-(3.14), (3.19) в параграфе 3.1) входят лишь отношения матричных элементов матрицы рассеяния S_{nm} , то показатель преломления i -ой среды в случае волновода можно ввести либо как отношение поперечного волнового числа $k_{\perp(i)} = \sqrt{k_{(i)}^2 - \tilde{k}_{10}^2}$ к волновому числу вакуума $k_0 = \omega\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$, либо как отношение поперечного волнового числа $k_{\perp(i)}$ к поперечному волновому числу вакуума в волноводе $k_{\perp 0} = \sqrt{k_0^2 - \tilde{k}_{10}^2}$. Мы везде используем первый вариант, таким образом

$$n_i = \sqrt{k_{(i)}^2 - \tilde{k}_{10}^2} / k_0 . \quad (\text{L.39})$$

Согласно определению коэффициента η (см. формулу (2.79) в параграфе 2.5),

$$\eta = h \langle k_2^2 \rangle / (jk_0), \quad \langle k_2^2 \rangle = \frac{1}{h} \int_0^h k_2^2(z) dz . \quad (\text{L.40})$$

По аналогичным причинам в случае волновода коэффициент преломления пленки можно определить либо как $\eta_{\perp} = h \langle k_{\perp 2}^2 \rangle / (jk_0)$, либо как $\eta_{\perp} = h \langle k_{\perp 2}^2 \rangle / (jk_{\perp 0})$. Мы для определенности выбираем первый вариант, поэтому в итоге в случае волновода

$$\eta_{\perp} = h \langle k_{\perp 2}^2 \rangle / (jk_0), \quad \langle k_{\perp 2}^2 \rangle = \frac{1}{h} \int_0^h (k_2^2(z) - \tilde{k}_{10}^2) dz = \langle k_2^2 \rangle - \tilde{k}_{10}^2 \Rightarrow$$

$$\eta_{\perp} = h \langle k_2^2 \rangle / (jk_0) - \tilde{k}_{10}^2 / (jk_0) = \eta - \tilde{k}_{10}^2 / (jk_0) . \quad (\text{L.41})$$

Однако в случае металлов $k_2^2(z) \gg \tilde{k}_{10}^2$. Действительно, пусть широкая сторона сечения волновода имеет размеры $a = 23$ мм, тогда для частоты 10 ГГц и проводимости 10 МСм/м:

$$\tilde{k}_{10}^2 = (\pi/a)^2 = 1.9 \cdot 10^4 \text{ м}^{-2}, \quad k_2^2(z) \approx \langle k_2^2 \rangle \sim \mu_0 \sigma_{\text{bulk}} \omega = 7.9 \cdot 10^{11} \text{ м}^{-2} . \quad (\text{L.42})$$

Поэтому даже для случая волновода с хорошей степенью точности можно считать, что

$$\eta_{\perp} = \eta = h \langle k_2^2 \rangle / (jk_0). \quad (\text{L.43})$$

Приложение М
(справочное)

Доказательство ограниченности сеточного решения численной схемы Годунова

В данном приложении доказывается, что при выполнении условий (5.55) сеточное решение W_n^m остается ограниченным при сколь угодно малых шагах дискретизации Δ_τ и Δ_ξ . Будем считать, что $W_n^m, \theta_n^m \geq 0$ при любых n, m (это следует непосредственно из результатов численного эксперимента).

Выполним в выражении (5.51) тождественные преобразования:

$$W_n^{m+1}\theta_n^{m+1} - W_n^m\theta_n^m = (W_n^{m+1} - W_n^m) \left\{ (b\theta_n^{m+1} + a\theta_n^m) - \alpha\theta_n^m (aW_n^{m+1} + bW_n^m) \right\} + 2W_n^m (aW_n^{m+1} + bW_n^m) \Delta_\tau. \quad (\text{M.1})$$

Здесь a – произвольный коэффициент, а $b = 1 - a$. Отметим, что при выводе (M.1) использовалось уравнение (5.52). Подставляя (M.1) в (5.51) и исключая разность $\theta_n^{m+1} - \theta_n^m$ при помощи уравнения (5.52), приведем (5.51) к виду:

$$(W_n^{m+1} - W_n^m)(1/\tilde{u}_m^m) + \tilde{\sigma}'_n{}^m W_n^m \Delta_\tau = -(\Delta_\tau / \Delta_\xi) \Delta D_n^m, \quad (\text{M.2})$$

$$\tilde{u}_m^m = \left\{ 1 - \frac{\beta\theta_0}{2} - \frac{\beta\theta_n^m}{2} + \beta(b\theta_n^{m+1} + a\theta_n^m) - \alpha\beta\theta_n^m (aW_n^{m+1} + bW_n^m) \right\}^{-1},$$

$$\tilde{\sigma}'_n{}^m = \frac{\beta}{\alpha} \left\{ 1 + 2\alpha(aW_n^{m+1} + bW_n^m) \right\}.$$

Функции \tilde{u}_m^m и $\tilde{\sigma}'_n{}^m$ являются некоторыми приближениями для u_m^m и σ_m^m (равенства $\tilde{u}_m^m = u_m^m, \tilde{\sigma}'_n{}^m = \sigma_m^m$ выполняются только при $\theta_n^{m+1} = \theta_n^m$ и $W_n^{m+1} = W_n^m$).

Из формул (5.50) для ΔD_n^m можно показать, что $\Delta D_n^m = r_n^m \Delta_{n-1}^m$, где r_n^m – некоторый коэффициент, такой что $0 \leq r_n^m \leq 2$. С учетом вышесказанного выражение (M.2) сводится к виду:

$$W_n^{m+1} = W_n^m \left(1 - r_n^m \tilde{u}_n^m \Delta_\tau / \Delta_\xi - \tilde{\sigma}'_n{}^m \tilde{u}_n^m \Delta_\tau \right) + W_{n-1}^m r_n^m \tilde{u}_n^m \Delta_\tau / \Delta_\xi. \quad (\text{M.3})$$

Возьмем модуль от выражения (M.3), используя свойство $|x+y| \leq |x| + |y|$, и то что $\max_n |W_n^m| \geq |W_n^m|, |W_{n-1}^m|$, получим:

$$|W_n^{m+1}| \leq \max_n |W_n^m| \times \left(\left| 1 - r_n^m \tilde{u}_n^m \Delta_\tau / \Delta_\xi - \tilde{\sigma}'_n{}^m \tilde{u}_n^m \Delta_\tau \right| + \left| r_n^m \tilde{u}_n^m \Delta_\tau / \Delta_\xi \right| \right). \quad (\text{M.4})$$

Если выполнено условие

$$\Delta_\tau / \Delta_\xi \leq 1 / (r_n^m \tilde{u}_n^m), \quad (\text{M.5})$$

то из (M.4) при достаточно малом Δ_τ получим:

$$|W_n^{m+1}| \leq \max_n |W_n^m| \times (1 - \tilde{\sigma}'_n{}^m \tilde{u}_n{}^m \Delta_\tau). \quad (\text{M.6})$$

Неравенство (M.6) верно для любого n , в том числе и для n , при котором $|W_n^{m+1}| = \max_n |W_n^m|$. Поэтому, мы можем переписать формулу (M.6) в виде:

$$\max_n |W_n^{m+1}| \leq \max_n |W_n^m| \times (1 - \tilde{\sigma}'_n{}^m \tilde{u}_n{}^m \Delta_\tau). \quad (\text{M.7})$$

Ниже мы покажем, что коэффициенты a и b , можно выбрать таким образом, что $\max_{n,m} |\tilde{\sigma}'_n{}^m| \leq \max_{n,m} |\sigma'_n{}^m|$ и $\max_{n,m} |\tilde{u}_n{}^m| \leq \max_{n,m} |u_n{}^m|$. Поэтому, если ввести коэффициент

$$R = \max_{n,m} |\sigma'_n{}^m| \times \max_{n,m} |u_n{}^m|, \text{ то}$$

$$1 - \tilde{\sigma}'_n{}^m \tilde{u}_n{}^m \Delta_\tau \leq 1 + |\tilde{\sigma}'_n{}^m| |\tilde{u}_n{}^m| \Delta_\tau \leq 1 + \max_{n,m} |\tilde{\sigma}'_n{}^m| \max_{n,m} |\tilde{u}_n{}^m| \Delta_\tau \leq 1 + R \Delta_\tau \leq \exp(R \Delta_\tau),$$

и неравенство (M.7) можно переписать в виде:

$$\max_n |W_n^{m+1}| \leq \max_n |W_n^m| \times \exp(R \Delta_\tau). \quad (\text{M.8})$$

Пусть $m = 0, 1, 2, \dots, M$, а моделирование проводится от начального момента времени $\tau_0=0$ до конечного момента времени $\tau_1 = M \Delta_\tau$. Тогда применяя неравенство (M.8) последовательно к m -ому временному слою (начиная со слоя $m = 0$), получим неравенство

$$\max_n |W_n^M| \leq \max_n |W_n^0| \times \exp(R \tau_1), \quad (\text{M.9})$$

которое и представляет собой условие ограниченности численного решения W_n^m . Если система (5.51)-(5.52) была бы линейной, то из (M.9) следовала бы устойчивость численного решения. Заметим, что (M.9) выполняется только при Δ_τ, Δ_ξ ,

удовлетворяющих неравенству (M.5). Однако поскольку $\max_{n,m} r_n^m = 2$, при $\Delta_\tau / \Delta_\xi \leq 1 / (2 \tilde{u}_n^m)$

неравенство (M.5) также будет выполняться. Далее мы воспользуемся произволом в выборе коэффициентов a и b . Сначала рассмотрим случай, $\alpha, \beta < 0$. Пусть $a = 1, b = 0$ при

$W_n^{m+1} < W_n^m$, а в противном случае $a = b = 1/2$. Можно показать, что при таком определении

коэффициентов a и b , при $W_n^{m+1} < W_n^m$ выполняется неравенство $\tilde{u}_n^m \leq u_n^m$, при этом

$\tilde{\sigma}'_n{}^m \equiv \sigma'_n{}^m$. При $W_n^{m+1} \geq W_n^m$ выполняется неравенство $\tilde{u}_n^m \leq u_n^{m+1}$, при этом $\tilde{\sigma}'_n{}^m \equiv$

$0.5(\sigma'_n{}^m + \sigma'_n{}^{m+1})$. Поэтому $\max_{n,m} |\tilde{u}_n^m| \leq \max_{n,m} |u_n^m|$, а $\max_{n,m} |\tilde{\sigma}'_n{}^m| \leq \max_{n,m} |\sigma'_n{}^m|$. Таким образом,

если $\Delta_\tau / \Delta_\xi \leq 1 / (2 \max_{n,m} |u_n^m|)$, то неравенство (M.5) выполнено, а если $\max_{n,m} |u_n^m| < \infty$ и

$\max_{n,m} |\sigma'_n{}^m| < \infty$, то $R < \infty$ и, следовательно, $\max_n |W_n^M|$ ограничен сверху (M.9).

В случае, когда коэффициенты α и β положительны, можно доказать, что $\max_{n,m} \tilde{u}_n^m \leq \max_{n,m} u_n^m$ и $\max_{n,m} \tilde{\sigma}'_n^m \leq \max_{n,m} \sigma'_n^m$ в области, где $W_n^m \neq 0$ (очевидно, что в области, где $W_n^m = 0$, решение остается ограниченным). Действительно, если положить $b = \alpha\theta_n^m(W_n^{m+1} - W_n^m)/(2W_n^m\Delta_\tau)$, $a = 1 - b$, то $\tilde{u}_n^m \equiv u_n^m$, для $\tilde{\sigma}'_n^m$ получится оценка

$$\tilde{\sigma}'_n^m = \frac{\beta}{\alpha} \left\{ 1 + 2\alpha \left(W_n^{m+1} - \alpha\theta_n^m \frac{(W_n^{m+1} - W_n^m)^2}{2W_n^m\Delta_\tau} \right) \right\} \leq \frac{\beta}{\alpha} \{1 + 2\alpha W_n^{m+1}\} \equiv \sigma'_n^m.$$

На этом доказательство завершается.