

Projektarbeit: Optische Dünnschichtsysteme

Oğuzhan Aygün, Abdul-Malik Jakupi

WiSe 2025

Inhaltsverzeichnis

1 Das Prinzip optischer Dünnschichtsysteme	3
2 Mathematisch-Physikalisches Modell	4
2.1 Brechungsindex	4
2.2 Reflexion und Transmission	4
2.3 Die Transfermatrixmethode	5
3 Algorithmische Umsetzung	6
4 Benutzerhandbuch	6
5 Simulationsergebnisse	8

1 Das Prinzip optischer Dünnschichtsysteme

Der Begriff optische Dünnschichtsysteme bezeichnet üblicherweise ein System aus oft nur wenigen Nanometer dünnen Schichten, dessen Zweck darin liegt, Wellen und ihre *Interferenz* gezielt zu nutzen, um einen gewünschten Reflexions- und Transmissionsgrad zu erreichen. Dünnschichtsysteme sind ein wichtiger Bestandteil im Bereich der Optik und haben auch in anderen Fachgebieten einige Anwendungen, z.B.:

- Antireflexbeschichtungen in Brillengläsern, Hochreflexschichten wie in Spiegeln oder Kameraobjektiven in der Optik
- Beschichtung von Geräten in der Medizintechnik
- Herstellung von Prozessoren bei Mikroelektronik

Dafür bedient man sich meist verschiedenster Materialien wie z.B. Titanoxid, Magnesiumfluorid oder Aluminiumoxid, die alle einen individuellen Brechungsindex besitzen. Diese Eigenschaft werden in allen Anwendungen als das essentielle Werkzeug genutzt, um das jeweilige Ziel im gewünschten Wellenbereich zu erreichen. Dies kann z.B. im Fall von Brillengläsern destruktive Interferenz sein, bei anderen Anwendungen, wie Spiegeln, aber auch konstruktive Interferenz.

Im Folgenden wird die Berechnung des bereits besprochenen Reflexions- und Transmissionsgrades beschrieben, um ein möglichst realistisches Programm zur Erfassung eben dieser zu entwickeln. Sie wird in Abhängigkeit der vorliegenden Brechungsindize, dicke der Schichten und dem Einfallswinkel berechnet.

Das größte Problem, das es hier zu lösen gilt, ist die Berechnung des Reflexions- und Transmissionsgrades, da es durch die Existenz mehrerer Schichten, zu einem endlosen Prozess von Rekalkulationen durch Teilwellen kommt, bei der bei jedem Durchdringen einer der Schichten ein neuer Prozess in beide Richtungen gestartet wird, was die Berechnung auf üblichem Wege erschwert. Eine Visualisierung des Prozesses in einem Mehrschichtsystem ist in Abbildung 1 dargestellt. Um dieses Problem zu lösen wird die Transfermatrixmethode angewandt, welche anhand der Brechungsindizes, des Einfallswinkels und den Reflexions- und Transmissionskoeffizienten, an jeder Grenzfläche, ein Reflexionspektrum als Resultat liefert.

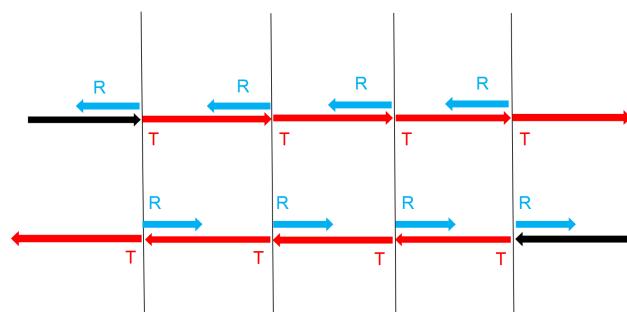


Abbildung 1: Darstellung der Reflexion und Transmission im Mehrschichtsystem

2 Mathematisch-Physikalisches Modell

2.1 Brechungsindex

Der (komplexe) Brechungsindex der jeweiligen Schicht hat die Form

$$\tilde{n} = n + i\kappa.$$

Sein realer Teil bestimmt die Brechung des Lichts an der Grenzfläche, während sein imaginärer Teil die Absorption des Lichts beschreibt. Die Wellenausbreitung kann durch den Term

$$e^{i\frac{n\omega}{c}z} \cdot e^{-\frac{\kappa\omega}{c}z}.$$

beschrieben werden. Dabei ist die Absorption

$$e^{-\frac{\kappa\omega}{c}z}$$

und die Phasenverschiebung

$$e^{i\frac{n\omega}{c}z}.$$

Diese beiden Komponenten sind essentiell für spätere Berechnungen von Schichtegenschaft mit der Transfermatrixmethode.

Des Weiteren ist es wichtig den Brechungsindex als Funktion der Wellenlänge $n(\lambda)$ zu betrachten, um präzise Resultate zu erlangen, da Dispersion berücksichtigt werden muss. Dafür wird im Laufe der Arbeit, wenn möglich, die Sellmeier-Gleichung verwendet[3].

$$n^2(\lambda) = 1 + \sum_i \frac{B_i \lambda^2}{\lambda^2 - C_i}$$

Für manche Materialien wie Gase mussten für ein präziseres Ergebnis andere Approximationen genutzt werden[2].

2.2 Reflexion und Transmission

Reflexions- und Transmissionskoeffizienten von elektromagnetischen Wellen an einer Grenzfläche zwischen zwei Schichten werden mit den Fresnelschen Formeln ermittelt[1].

α ist der Einfallswinkel des Lichts auf die Grenzfläche und β der Brechungswinkel. Der Brechungswinkel lässt sich durch das Snelliussche Brechungsgesetz definieren[1]:

$$n_1 \sin \alpha = n_2 \sin \beta$$

Durch Auflösen nach β entsteht folgende Gleichung:

$$\beta = \arcsin\left(\frac{n_1}{n_2} \sin \alpha\right)$$

zusätzlich muss die Polarisation berücksichtigt werden. Abhängig davon, ob das Licht senkrecht oder parallel zur Einfallsebene schwingt, variieren die Formeln.

Senkrechte Polarisation:

$$r_s = \frac{n_1 \cos \alpha - n_2 \cos \beta}{n_1 \cos \alpha + n_2 \cos \beta}, \quad t_s = \frac{2n_1 \cos \alpha}{n_1 \cos \alpha + n_2 \cos \beta}$$

Parallele Polarisation:

$$r_p = \frac{n_2 \cos \alpha - n_1 \cos \beta}{n_2 \cos \alpha + n_1 \cos \beta}, \quad t_p = \frac{2n_1 \cos \alpha}{n_2 \cos \alpha + n_1 \cos \beta}$$

n_1 und n_2 stellen die Brechungsindizes der linken und rechten Schicht beim Grenzübergang da.

Dieser Prozess liefert nun die Koeffizienten an der Grenzfläche zwischen zwei Schichten und muss für jede Schicht, bzw. jeden Grenzübergang erfolgen. Die Resultate werden in der Transfermatrixmethode verwertet.

2.3 Die Transfermatrixmethode

Es handelt sich bei der Transfermatrixmethode um eine elegante mathematische Lösung für das Problem der unendlichen Teilwellen[1]. Anstatt den Verlauf des Lichtstrahls zu verfolgen, wird das gesamte Mehrschichtsystem betrachtet. Die Grundlage hierfür sind die fresnelschen Formeln, da sie das Verhältnis der Amplituden auf der linken und rechten Seite der Grenzfläche beschreiben. Das resultierende Gleichungssystem kann auch in Matrixschreibweise geschrieben werden, sodass klar wird, dass durch Matrixmultiplikation in den wie folgt definierten Matrizen, der Reflexionsgrad berechnet werden kann.

Es werden jeweils zwei Arten von Matrizen gebildet, dabei bestimmt die Matrix D die Reflexion und Transmission an der Grenzfläche, während die Matrix P die Phasenverschiebung innerhalb einer Schicht beschreibt. Die Matrix D besitzt die Form

$$D = \frac{1}{t} \begin{pmatrix} 1 & r \\ r & 1 \end{pmatrix},$$

wobei r dem berechneten Reflexions- und t dem Transmissionskoeffizienten aus den fresnelschen Formeln entsprechen. Die Matrix P hat die Form

$$P = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} & 0 \\ 0 & e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

mit

$$\varphi = \frac{2\pi n d \cos(\beta)}{\lambda},$$

wobei d die Dicke, n der Brechungsindex und β der Brechungswinkel der Schicht sind. Die Transfermatrix selbst ergibt sich nun aus der Multiplikation der entstandenen Matrizen

$$M = D_0 \cdot P_0 \cdot D_1 \cdot P_1 \dots D_{n-1} \cdot P_n \cdot D_n$$

und wird anschließend genutzt um den Reflexionsgrad R, nach der Definition der Intensität einer elektromagnetischen Welle,

$$R = \left| \frac{M_{21}}{M_{11}} \right|^2$$

zu bestimmen.

3 Algorithmische Umsetzung

4 Benutzerhandbuch

Hier wird die grafische Nutzeroberfläche der Software präsentiert, zusammen mit einzelnen Funktionen, denen es eine Erläuterung bedarf.

Zu aller erst müssen die Abhängigkeiten installiert werden. Da die Software auf Python basiert, kann dies am einfachsten über das Paketverwaltungsprogramm pip getätigter werden. In der Repository ist eine `requirements.txt` dafür zu finden, welche über pip mit dem Befehl

```
pip install -r requirements.txt
```

zu installieren sind. Anschließend wird das Programm nach erfolgreicher Installation mit

```
Python GUI.py
```

ausgeführt.

Nun sollte eine GUI zu sehen sein, welche aus einer Tabelle, einem Graphen und einzelnen zu bestimmenden Parametern unter beiden Flächen besteht. Dies ist zusätzlich in Abbildung 2 zusehen. Es stehen in der Tabelle bereits 2 Zeilen vorangefertigt zur

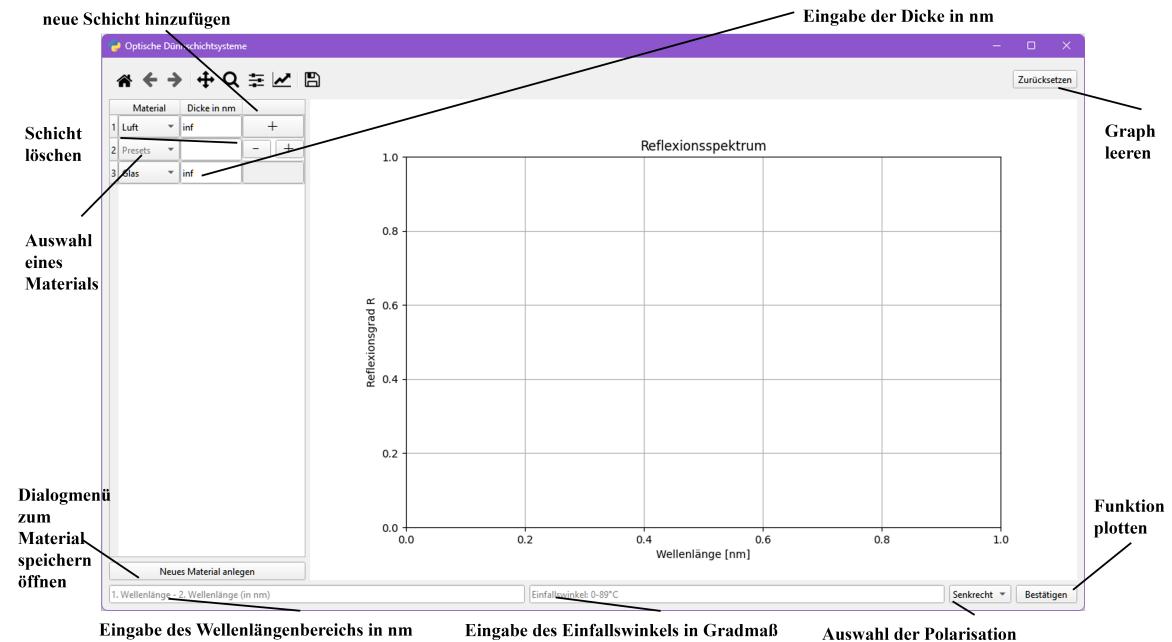


Abbildung 2: Beschreibung der Benutzeroberfläche

Verfügung. Sie stellen in der Software das Einfallsmedium und Substrat da und können entsprechend nicht entfernt werden. Am Einfallsmedium befindet sich in der letzten Spalte ein Button, welcher eine weitere Zeile, bzw. Schicht, direkt nach ihr selbst generiert und einfügt. Alle Zeilen, die eine Schicht repräsentieren, welche weder das Einfallsmedium, noch das Substrat sind, besitzen zwei Buttons in ihrer letzten Spalte. Das Pluszeichen hat die selbe Funktion, wie beim Einfallsmedium, während das Minuszeichen die Schicht, in der sie beeinhaltet ist, aus der Simulation löscht.

In der ersten Spalte unter Material ist ein Dropdown-Menü mit der Aufschrift Presets zu sehen. Benutzer können hier eine Auswahl von 5 vorgefertigten Schichten wählen, welche bereits alle Parameter belegt haben. Es steht dem Nutzer jedoch offen die Dicke der Schicht anzupassen. Alternativ besteht auch die Möglichkeit mit dem Button unter der Tabelle ein neues Material anzulegen. Das Betätigen öffnet ein zusätzliches Fenster, in dem der Nutzer einen Namen für das Material und einen komplexen Brechungsindex festlegen kann. Das Bestätigen der Eingabe erstellt ein neues Materialobjekt und fügt dessen Daten in die Material.json im Root ein, damit sie zusammen mit den vorgefertigten Materialien für den Nutzer langzeitig gespeichert sind. In Abbildung 3 ist das Dialogfenster abgebildet.

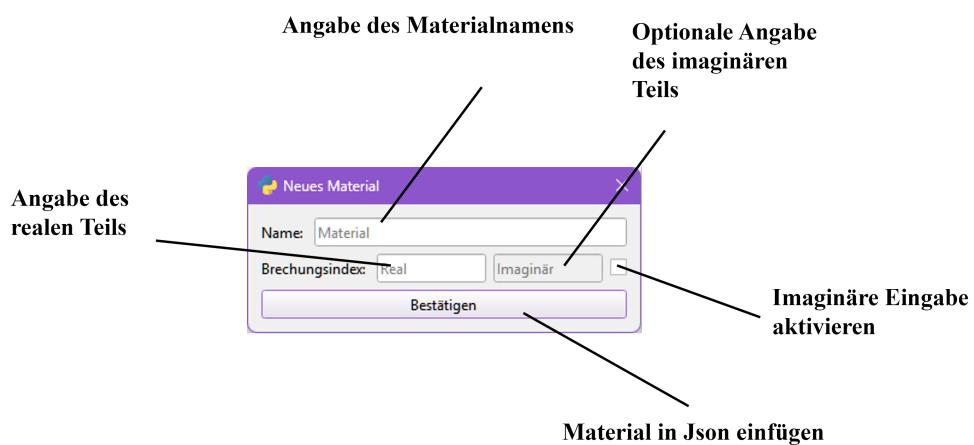


Abbildung 3: Dialogfenster zum hinzufügen neuer Materialien

Bestätigen plottet den Reflexionsgrad in Abhängigkeit des angegeben Wellenlängenbereichs in den Graphen. Sollten die Parameter in einem ungültigen Bereich liegen, wird stattdessen eine Fehlermeldung geliefert. Weiteres Nutzen des Bestätigen-Buttons fügt die gewünschten Funktionen in den Graph hinzu, bis der Nutzer sich entscheidet, diesen mit Zurücksetzen zu leeren.

Eine Übersicht zu den Parametern und validen Eingaben befindet sich in Tabelle 1.

Tabelle 1: Beschreibung der Eingabeparameter im Programm

Parameter	Beschreibung
Dicke	Dicke der entsprechenden Schicht in Nanometern
n-real	Realer Teil des (komplexen) Brechungsindex der entsprechenden Schicht
n-imaginärer	Imaginärer Teil des (komplexen) Brechungsindex der entsprechenden Schicht
Wellenlängenbereich	Gewünschter Wellenlängenbereich > 0 , der im Graphen geplottet werden soll. Kann angegeben werden in der Form: 1.Wellenlänge-2.Wellenlänge
Einfallswinkel	Einfallswinkel in Gradmaß im Bereich $0^\circ - 89^\circ$
Polarisation	Art der Polarisation mit Auswahl zwischen senkrecht und parallel

5 Simulationsergebnisse

Das Erste zu simulierende Schichtsystem ist in Tabelle 2 zu sehen. Es ist aufgeteilt in die jeweiligen Materialien und ihren individuellen Dicken und soll im sichtbaren Spektrum simuliert werden. Hierfür nehmen wir einen Wellenlängenbereich von 400nm bis 700nm mit einem senkrechten Einfallswinkel.

Tabelle 2: Zu simulierendes Schichtsystem

Material	Dicke in nm
Luft	∞
MgF ₂	102
TiO ₂	105
Al ₂ O ₃	79
Glas	∞

Das Ergebnis ist in Abbildung 4 dargestellt und zeigt keine physikalischen Auffälligkeiten, die auf einen Fehler deuten würden. Die Funktion ist im ausgewählten Bereich stetig, was auf mathematische Stabilität deutet.

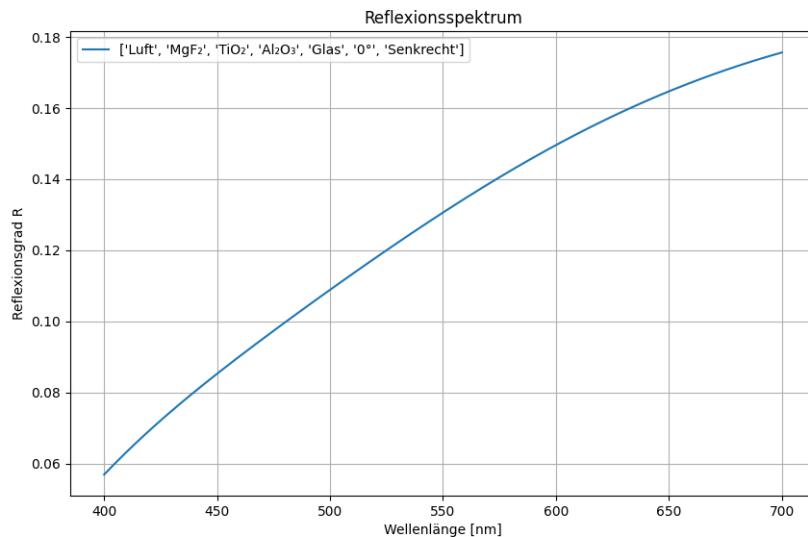


Abbildung 4: 1. Simulationsergebnis für $R(\lambda)$ bei senrektem Einfall

Die zweite zu simulierende Schicht befindet sich in Tabelle 3. Es wurde versucht für diese Schicht bei extremen Ultravioletlicht eine passende Dicke der Schichten zu ermitteln, um optimale Reflektivität zu garantieren.

Tabelle 3: Zu simulierendes EUV-Schichtsystem

Material	Brechzahl bei 13.5 nm
Mo	$1 - 7,6044 \cdot 10^{-2} - 6,4100 \cdot 10^{-3}i$
Si	$1 - 9,3781 \cdot 10^{-4} - 1,7260 \cdot 10^{-3}i$
SiO ₂	$1 - 0,0218338 - 0,010721i$

Dabei war eine optimale Schichtdicke für den Einfallswinkel 15° und eine weitere optimale Schichtdicke für senkrechten Einfall. Die Werte für die optimale Dicke lassen sich durch die im Programm liegenden Funktionen ermitteln und sind in Tabelle 4 zu sehen. Die Ergebnisse in Abbildung 5 und 6 sind die gewünschten Funktionen für die EUV-

Tabelle 4: Optimierte Schichtdicke für EUV-Schicht

Material	optimierte Dicke für 0°	optimierte Dicke für 15°
Mo	2,8nm	2,8nm
Si	4,1nm	4,35nm

Schicht mit ihren optimierten Dicken. Der Hochpunkt bei etwa 13.5nm in Abbildung 5 bestätigt die Werte der Schichtdicke, während der Reflexionsgrad für 15° ebenfalls ein akzeptables Ergebnis liefert.

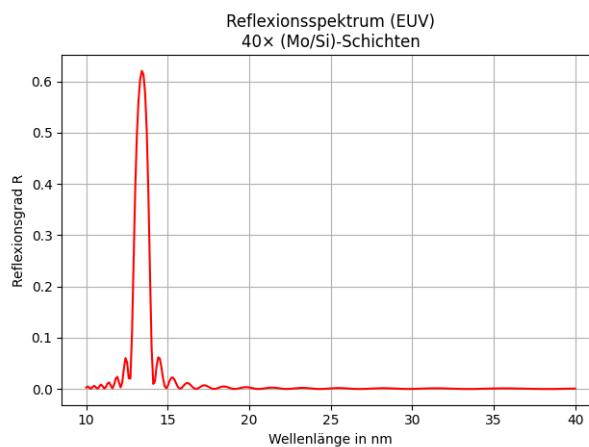


Abbildung 5: Darstellung der Reflexion und Transmission im Mehrschichtsystem

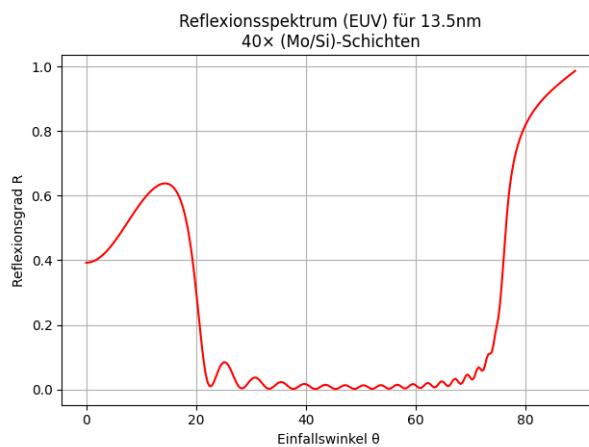


Abbildung 6: Darstellung der Reflexion und Transmission im Mehrschichtsystem

Literatur

- [1] Eugene Hecht. *Optik*. Berlin, Boston: De Gruyter, 2018. ISBN: 9783110526653.
DOI: doi : 10 . 1515 / 9783110526653. URL: <https://doi.org/10.1515/9783110526653>.

- [2] Petr Křen. “Comment on ‘Precision refractive index measurements of air, N₂, O₂, Ar, and CO₂ with a frequency comb’”. In: *Appl. Opt.* 50.35 (Dez. 2011), S. 6484–6485. DOI: 10.1364/AO.50.006484. URL: <https://opg.optica.org/ao/abstract.cfm?URI=ao-50-35-6484>.
- [3] H. H. Li. “Refractive index of alkaline earth halides and its wavelength and temperature derivatives”. In: *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 9.1 (Jan. 1980), S. 161–290. ISSN: 0047-2689. DOI: 10.1063/1.555616. eprint: https://pubs.aip.org/aip/jpr/article-pdf/9/1/161/11502934/161_1_online.pdf. URL: <https://doi.org/10.1063/1.555616>.