

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 | 5 |
| 3.1 Materialmodellierung | 6 |
| 3.2 Berechnung der Grenzflächenkoeffizienten | 6 |
| 3.3 Aufbau der Transfermatrix | 7 |
| 3.4 Berechnung des Reflexionsgrades | 7 |
| 4 Benutzerhandbuch | 8 |
| 5 Simulationsergebnisse | 10 |

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 Eigenschaften werden in allen Anwendungen als das essenzielle 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 Brechungsindizes, 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 Re-Kalkulationen 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 Reflexionsspektrum als Resultat liefert.

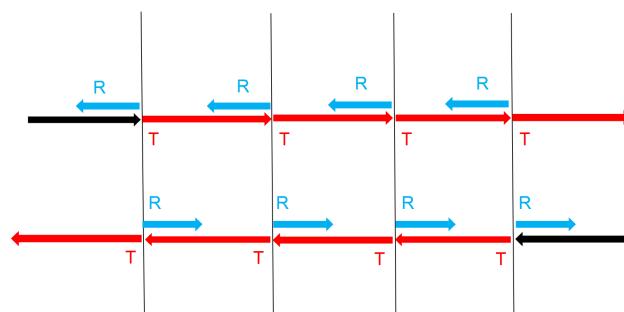


Abbildung 1: Darstellung der Reflexion und Transmission im Mehrschichtsystem

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 essenziell für spätere Berechnungen von Schichteigenschaften 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]. θ_1 ist der Einfallswinkel des Lichts auf die Grenzfläche und θ_2 der Brechungswinkel. Der Brechungswinkel lässt sich durch das snelliussche Brechungsgesetz definieren [1]:

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2.$$

Durch Auflösen nach θ_2 entsteht folgende Gleichung:

$$\theta_2 = \arcsin\left(\frac{n_1}{n_2} \sin \theta_1\right).$$

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

Senkrechte Polarisation:

$$r_s = \frac{n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2}, \quad t_s = \frac{2n_1 \cos \theta_1}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2}$$

Parallele Polarisation:

$$r_p = \frac{n_2 \cos \theta_1 - n_1 \cos \theta_2}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2}, \quad t_p = \frac{2n_1 \cos \theta_1}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2}$$

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

$$\varphi = \frac{2\pi n d \cos(\theta_2)}{\lambda},$$

wobei d die Dicke, n der Brechungsindex und θ_2 der Brechungswinkel der Schicht sind. Zuletzt bleibt die Transfermatrix selbst. Sie ergibt sich 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

Die mathematischen Beziehungen, die in Kapitel 2 beschrieben werden, finden in einer modular strukturierten Softwarearchitektur Umsetzung. Diese teilt den Berechnungspro-

zess in klar voneinander getrennte Komponenten auf. Das Programm umfasst die Materialverwaltung, die Berechnung der Fresnel-Koeffizienten, die konsistente Konstruktion der Transfermatrix und darauf basierende Reflexionsberechnungen.

Alle Schritte sind durch eigene Funktionen oder Klassen voneinander abgegrenzt, was das Programm wartbar und erweiterbar macht und es ermöglicht, dass es mit beliebigen Schichtsystemen verwendet werden kann

3.1 Materialmodellierung

Zur Repräsentation einer Schicht dient die Klasse `Material`. Sie speichert:

- den Namen des Materials,
- den Parameter `n_type` der die Art der Berechnung des Brechungsindex definiert
- die Schichtdicke `d` (bei Halbräumen: $d = \infty$)
- den optionalen Parameter `A` für die Sellmeier-Gleichung
- den optionalen `B`-Koeffizienten der Sellmeier-Gleichung,
- den optionalen `C`-Koeffizient der Sellmeier-Gleichung,
- einen optionalen festen Brechungsindex,
- eine optionale Benutzerdefinierte Formel zur Bestimmung des Brechungsindex,
- und optionale Messdaten zur Ermittlung des Brechungsindex durch Interpolation.

Für die gegebene Wellenlänge λ liefert sie den komplexen Brechungsindex der entsprechenden Schicht. Je nach Material kommen verschiedene bewährte Formeln zum Einsatz. Dadurch wird eine realistische Nachbildung der Wellenlängenabhängigkeit möglich, ohne dass Anpassungen an den späteren optischen Berechnungen erforderlich sind. Die Klasse ist zudem dafür zuständig, die Materialparameter aus der JSON-Datei zu laden. Die Schichtfolge kann flexibel über die Benutzeroberfläche festgelegt werden, ohne dass eine Anpassung des Programmcodes erforderlich ist.

3.2 Berechnung der Grenzflächenkoeffizienten

Die Funktion

```
fresnel_coefficients(n1, n2, theta1, polarization)
```

übernimmt die numerische Umsetzung der Fresnel-Gleichungen an einer Grenzfläche zwischen zwei Schichten. Sie berechnet zuerst den Brechungswinkel θ_2 mit dem snelliusschen Gesetz[1], die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten `r` und `t` und den für die Transfermatrix benötigten Phasenverlauf. Die Funktion unterscheidet streng zwischen den beiden Polarisationen

senkrecht (s-polarisiert) und parallel (p-polarisiert)

und gibt die zugehörigen Koeffizienten zurück. Damit ist die Polarisation vollständig als Parameter steuerbar, was eine Simulation beider physikalischen Fälle ermöglicht.

3.3 Aufbau der Transfermatrix

Die Funktion

```
transfer_matrix(material_list, d_list, wavelength, polarization, theta0)
```

durchläuft alle Schichten und führt für jede Grenzfläche die bekannten Schritte aus dem mathematisch-physikalischen Modell aus. Sie ermittelt die fresnelschen Koeffizienten aus den Brechungsindizes der angrenzenden Schichten, wobei für die Brechungsindizes für jede einzelne Wellenlänge die Material-Methode

```
reflective_index(self, wavelength)
```

genutzt wird. Daraufhin wird mit den Reflexions- und Transmissionskoeffizienten die Grenzflächenmatrix D generiert und anschließend für alle endlichen Schichten in Übereinstimmung mit der Dicke, dem Einfallswinkel und dem Brechungsindex, auch die Propagationsmatrix P. Zuletzt werden beide Matrizen multiplikativ in die Gesamtmatrix eingebaut. Die Transfermatrix wird iterativ aufgebaut durch

$$M \leftarrow M \cdot D \cdot P,$$

was sicherstellt, dass der aktuelle optische Zustand des Lichtfelds im Mehrschichtsystem erhalten bleibt. Dabei werden Schichten mit unendlicher Dicke (Luft und Substrat) automatisch identifiziert, und ihnen wird keine Propagationsmatrix zugewiesen. So wird das physikalische Modell exakt wiedergegeben

3.4 Berechnung des Reflexionsgrades

Die Funktion

```
reflectance(material_list, wavelengths, polarization, theta)
```

fasst alle vorher beschriebenen Schritte zu einer vollständigen Simulation zusammen. Sie übernimmt, die Umrechnung der Schichtdicken in SI-Einheiten, berechnet beliebige spektrale Abtastungen, berücksichtigt dabei mehrere oder einen Einfallswinkel, ruft die Transfermatrix auf und kümmert sich zuletzt um die Herausarbeitung des Reflexionskoeffizienten. Der Amplitudenreflexionskoeffizient wird aus der Transfermatrix bestimmt:

$$r = M[1,0] / M[0,0]$$

woraus letztlich der Reflexionsgrad resultiert:

$$R = |r|^2.$$

Weil die Berechnung vollständig vektorisiert ist, können ganze Winkel- oder Wellenlängenbereiche mit nur einem Funktionsaufruf evaluiert werden, ohne dass der Nutzer zusätzliche Einstellungen vornehmen muss.

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. Beachtet werden sollte hierbei, dass eine globale Installation auf Linux Distributionen nicht auf denselben Weg möglich ist. Hierfür sollte vorher mit

```
python -m venv .venv
```

eine virtuelle Umgebung für das Programm erstellt werden. Die Installation ist daraufhin nach Aktivieren dieser virtuellen Umgebung wie vorher beschrieben auszuführen. Anschließend wird die Software 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 vor angefertigt zur

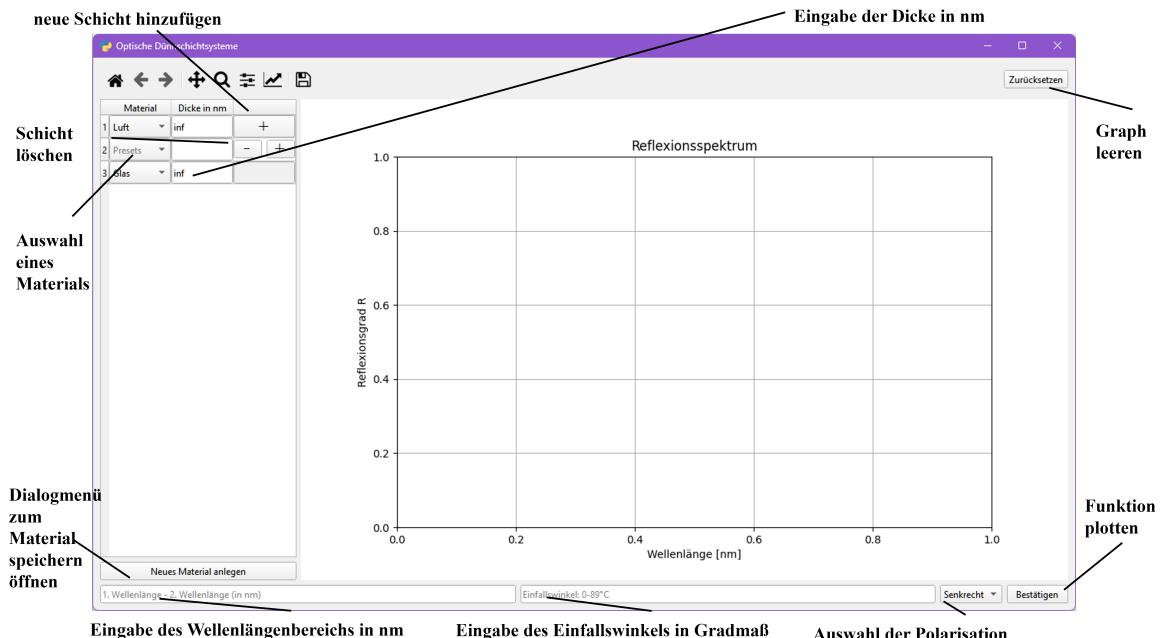


Abbildung 2: Beschreibung der Benutzeroberfläche

Verfügung. Sie stellen in der Software das Einfallsmedium und Substrat dar 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 dieselbe Funktion, wie beim Einfallsmedium, während das Minuszeichen die Schicht, in der sie beinhaltet ist, aus der Simulation löscht.

In der ersten Spalte unter Material ist ein Dropdown-Menü mit der Aufschrift Pre-sets 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 Bestätigen 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 das `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.

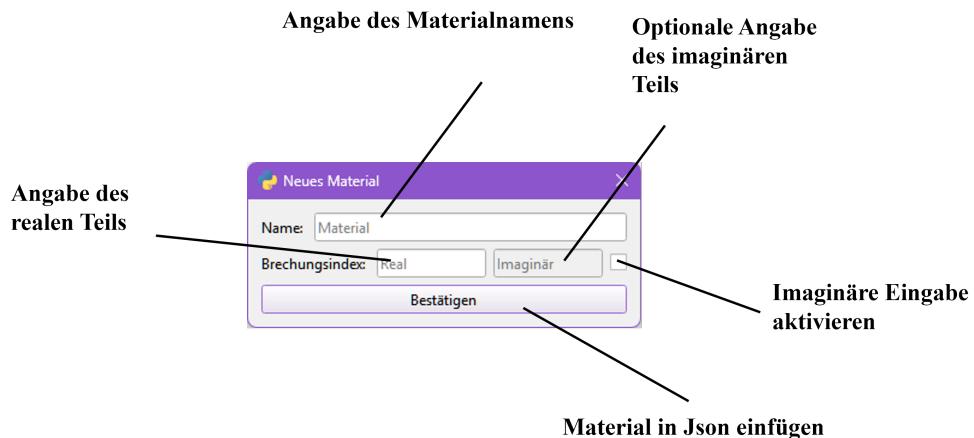


Abbildung 3: Dialogfenster zum Hinzufügen neuer Materialien

Bestätigen plottet den Reflexionsgrad in Abhängigkeit der gegebenen Parameter in den Graphen. Wichtig ist hierbei die Definition des Wellenlängenbereichs und des Einfallswinkels, da sich die berechnete Funktion sich je nach Angabe ändert. Hierbei muss eins der folgenden Muster eingehalten werden:

$$(1.\text{Wellenlänge} - 2.\text{Wellenlänge}, \text{ Einfallswinkel}) \rightarrow R(\lambda)$$

$$(\text{Wellenlänge}, 1.\text{Einfallswinkel} - 2.\text{Einfallswinkel}) \rightarrow R(\theta)$$

Sollten die Parameter in einem ungültigen Bereich liegen, wird stattdessen eine Fehlermeldung geliefert. Weiteres Nutzen des Bestätigen-Buttons fügt die gewünschten Funktionen in den Graphen 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

In diesem Kapitel werden zwei der Extremen unserer Anwendung beobachtet. Zuerst wird eine Antireflexbeschichtung betrachtet. Sie ist aufgeteilt in die jeweiligen Materialien und ihren individuellen Dicken, welche in Tabelle 2 zu sehen sind und soll im sichtbaren Spektrum simuliert werden. Hierfür nehmen wir einen Wellenlängenbereich von 400 nm bis 800 nm mit einem senkrechten Einfallswinkel. Das Ergebnis ist in Ab-

Tabelle 2: Zu simulierendes Schichtsystem

| Material | Dicke in nm |
|--------------------------------|-------------|
| Luft | ∞ |
| MgF ₂ | 102 |
| TiO ₂ | 105 |
| AL ₂ O ₃ | 79 |
| Glas | ∞ |

bildung 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. Zusätzlich kann der Reflexionsgrad mit dem eines Lichtstrahls der von Luft auf bloßes Glas trifft, im Graph verglichen werden.

Die zweite zu simulierende Schicht befindet sich in Tabelle 3. Betrachtet wird hierbei ein Hochreflektor im EUV-Bereich. Es wurde versucht für dieses Schichtsystem bei extremem Ultravioletlicht eine passende Dicke der Schichten zu ermitteln, um optimale Reflexivität zu garantieren. Die idealen Werte für den senkrechten Einfall sind in Ta-

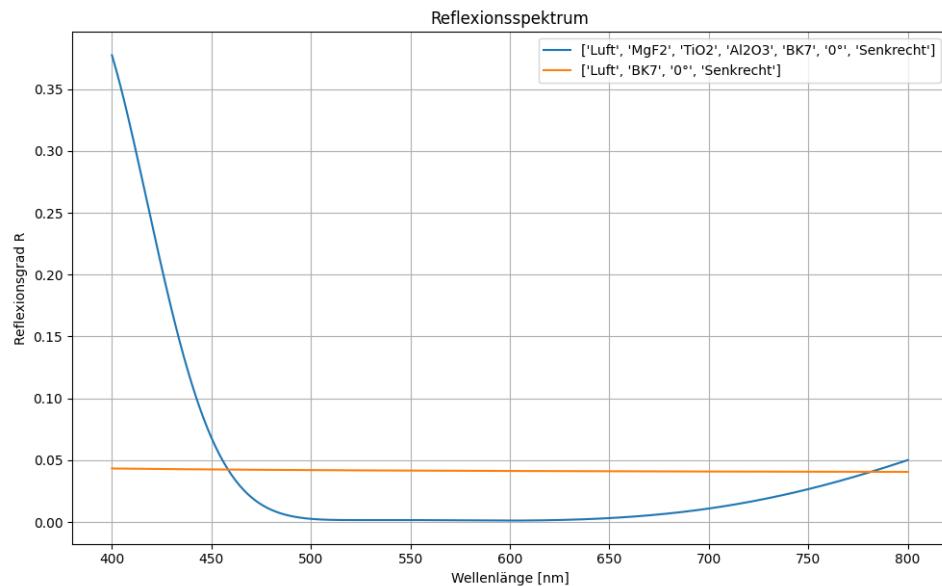
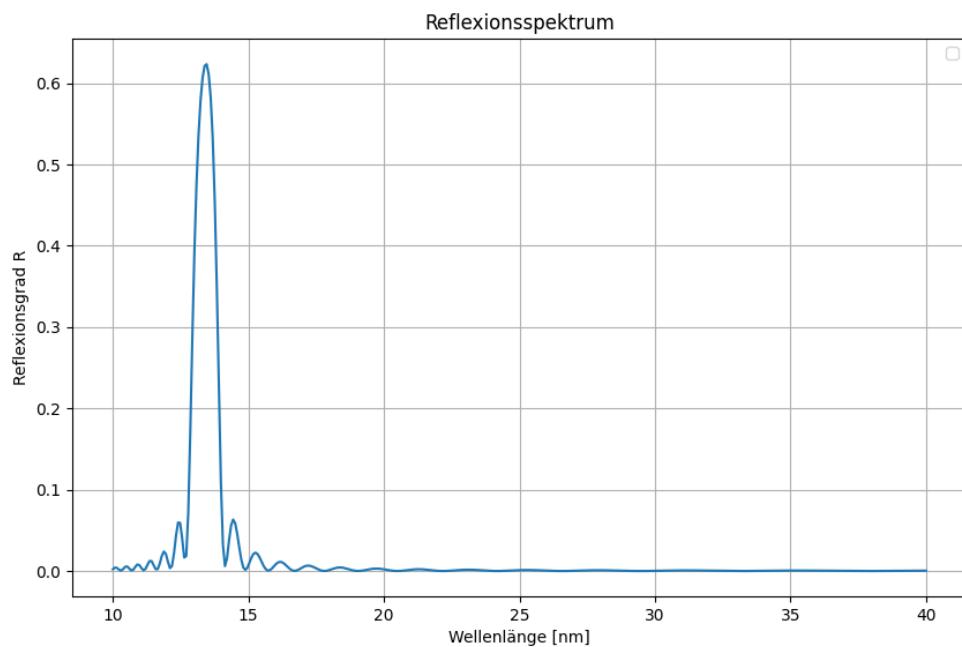
Tabelle 3: Zu simulierendes EUV-Schichtsystem

| 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 | $1 - 0,0218338 - 0,010721i$ |

belle 4 zu sehen. Die Ergebnisse in Abbildung 5 ist die gewünschte Funktion für die EUV-Schicht mit ihren optimierten Dicken. Der Hochpunkt bei etwa 13.5 nm bestätigt die gewählten Werte der Schichtdicke als optimal für die gewünschte Anwendung.

Tabelle 4: Optimierte Schichtdicke für EUV-Schicht

| Material | optimierte Dicke für 0° |
|----------|--------------------------------|
| Mo | 2,8nm |
| Si | 4,1nm |

Abbildung 4: 1. Simulationsergebnis für $R(\lambda)$ bei senkrechtem EinfallAbbildung 5: Darstellung von $R(\lambda)$ für die EUV-Schicht bei Senkrechtem Einfallswinkel

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 / A0 . 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>.