

Projektarbeit: Optische Dünnschichtsysteme

Oğuzhan Aygün, Abdul-Malik Jakupi

WiSe 2025

Inhaltsverzeichnis

1	Das Prinzip optischer Dünnschichtsysteme	3
2	Mathematisch-Physikalisches Modell	4
2.1	Reflexion und Transmission	4
2.2	Die Transfermatrixmethode	5
3	Algorithmische Umsetzung	5
4	Benutzeroberfläche	5
5	Simulationsergebnisse	7

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 grundlegende Problem, das es hier zu lösen gilt, ist die *effiziente* Berechnung des Reflexions- und Transmissionsgrades, da es durch die Existenz mehrerer Schichten, zu einem langen Prozess von Rekalkulationen kommt, bei der bei jedem Durchdringen einer der Schichten ein neuer Prozess in beide Richtungen gestartet wird, was die Komplexität dieser Berechnung um einiges erhöht. Eine Visualisierung des Prozesses in einem Mehrschichtsystem ist in Abbildung 1 dargestellt. Genutzt wird dafür die Transfermatrixmethode, welche anhand der Polarisierung, des Einfallswinkels und den Reflexions- und Transmissionskoeffizienten, an jeder Grenzfläche, ein Reflexionsspektrum als Resultat liefert.

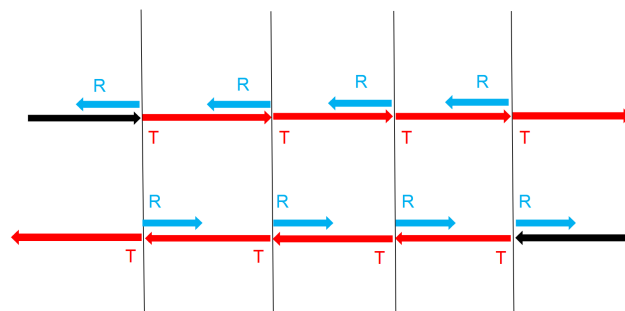


Abbildung 1: Darstellung der Reflexion und Transmission im Mehrschichtsystem

2 Mathematisch-Physikalisches Modell

Wie bereits erwähnt müssen genau zwei Dinge bewältigt werden, um dieses Prinzip in eine mathematische Form zu bringen. Die Reflexion- und Transmission muss ermittelt werden und um einige zusätzliche Rechenoperationen zu vermeiden, muss die Transfermatrixmethode genutzt werden.

2.1 Reflexion und Transmission

Im Allgemeinen werden die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten von elektromagnetischen Wellen, an einer Grenzfläche zwischen zwei Schichten, mit den *fresnelschen Formeln* ermittelt. Dabei ist n der (komplexe) Brechungsindex der jeweiligen Schicht. Ihr reeller Teil ist verantwortlich für die Darstellung der Brechung des Lichts an der Grenzfläche, während ihr imaginärer Teil die Absorption des Lichts beschreibt. Sie kann durch den Term

$$e^{i \frac{(n+i\kappa)\varphi}{c} z}$$

formuliert werden, aber um einen Term zu erhalten, der jeweils den reellen- und den komplexen Brechungsindex beschreibt, wird wie folgt umgestellt:

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

Dabei handelt es sich um die Absorption

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

und die Phasenverschiebung

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

Das α ist der Einfallswinkel in die Grenzfläche und β der Brechungswinkel zwischen den beiden Schichten. Der Brechungswinkel lässt sich durch das Snelliussche Brechungsgesetz definieren:

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

Wird nun schlicht nach β aufgelöst entsteht folgende Definition:

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

Der letzte wichtige Aspekt der mit einbezogen wird ist die Polarisation. 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:

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

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

2.2 Die Transfermatrixmethode

Es handelt sich bei der Transfermatrixmethode um eine elegante mathematische Lösung für das Problem der unendlichen Teilwellen. Anstatt schlicht 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 Benutzeroberfläche

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` getätigt 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.

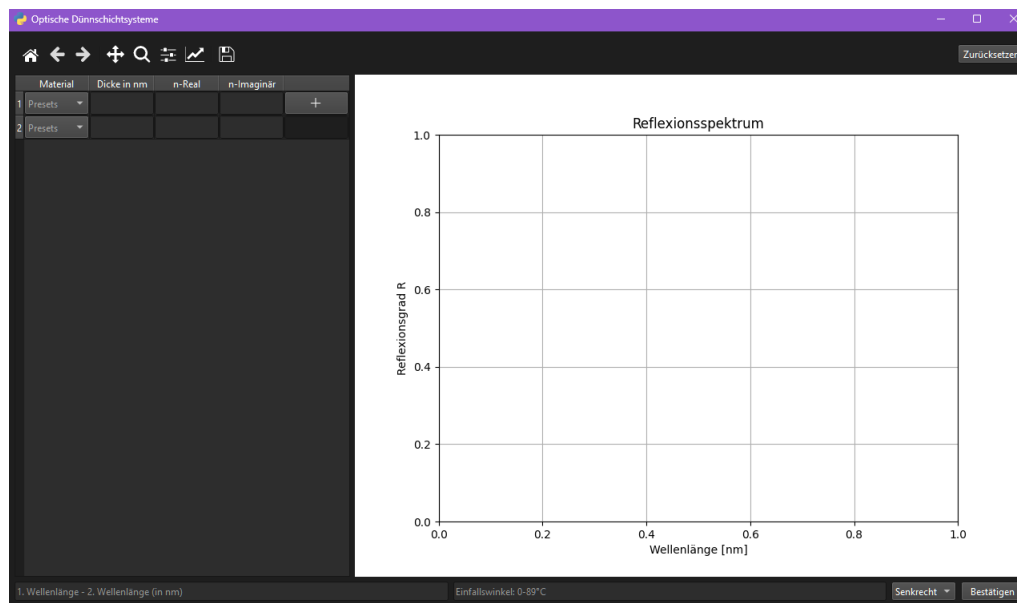


Abbildung 2: Screenshot der Benutzeroberfläche beim Start

Es stehen in der Tabelle bereits 2 Zeilen vorangefertigt zur Verfügung. Sie stellen in unserer Simulation 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 beinhaltet 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 natürlich offen, die Parameter dennoch wie gewünscht in der Tabelle abzuändern. Alternativ besteht auch die Möglichkeit im selben Menü Beliebig auszuwählen, was eine Zeile ohne Vorangaben generiert. In Tabelle 1 sind alle Parameter aufgelistet, zusammen mit einer jeweiligen Beschreibung.

Tabelle 1: Beschreibung der Eingabeparameter im Programm

Parameter	Beschreibung
Dicke	Dicke der entsprechenden Schicht in Nanometern
n-Real	Reeler Teil des (komplexen) Brechungsindex der entsprechenden Schicht
n-imaginärer	Imaginärer Teil des (komplexen) Brechungsindex der entsprechenden Schicht
Wellenlängenbereich	Gewünschter Wellenlängenbereich, der im Graphen geplottet werden soll. Kann angegeben in der Form: 1.Bereich-1.Bereich(, 2.Bereich-2.Bereich, ...)
Einfallswinkel	Einfallswinkel in Gradmaß im Intervall $0 - 79^\circ$
Polarisation	Art der Polarisation mit Auswahl zwischen senkrecht und parallel

5 Simulationsergebnisse

Die erste zu simulierende Schicht ist in Tabelle 2 zu sehen. Sie ist aufgeteilt in die jeweiligen Materialien und ihre individuellen Dicken.

Tabelle 2: Zu simulierendes Schichtsystem

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

Für die übrigen Parameter wird von einem Wellenlängenbereich von 400nm bis 700nm ausgegangen. Dieser Bereich wird in vierer Schritten von 0° bis 75° geplottet, wobei dieser Prozess zwei mal wiederholt wird, um die beiden Graphen in Abbildung 3 und Abbildung 4 zu generieren, die senkrecht und parallel polarisieren.

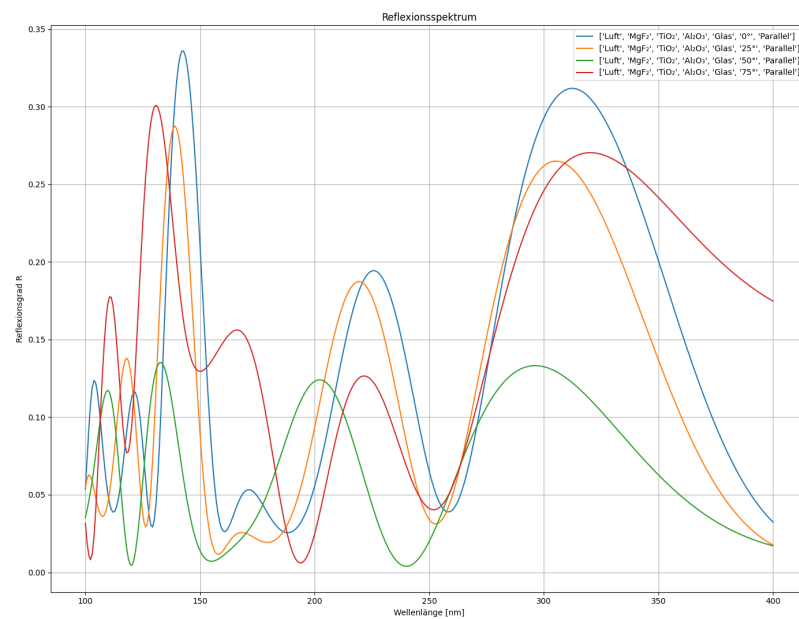


Abbildung 3: Simulationsergebnisse für parallele Polarisation

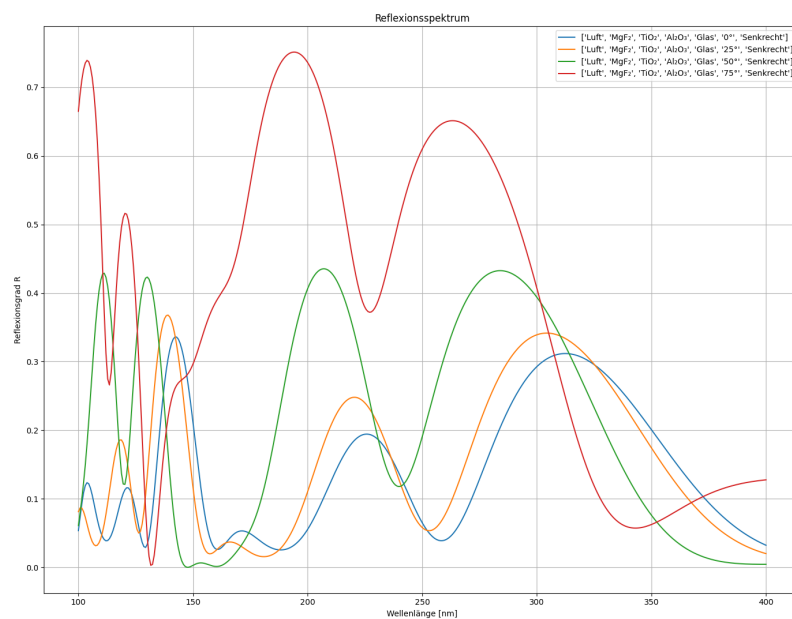


Abbildung 4: Simulationsergebnisse für senkrechte Polarisation