

## Анализ спектральной зависимости коэффициента пропускания системы пленка диоксида титана—стеклянная подложка

© Л.В. Сотникова, А.В. Ханефт

Кемеровский государственный университет,  
65000 Кемерово, Россия  
e-mail: avkhanef@mail.ru

Поступило в Редакцию 20 июня 2024 г.

В окончательной редакции 23 сентября 2024 г.

Принято к публикации 16 октября 2024 г.

Получены слабопоглощающие пленки диоксида титана (фаза анатаз) различной толщины на стеклянной подложке. Определены спектральные зависимости коэффициентов пропускания стеклянной подложки и системы стеклянная подложка—пленка диоксида титана в интервале длин волн 350–900 nm. Спектральная зависимость коэффициента пропускания системы пленка—подложка от длины волны света спектрофотометра имеет ярко выраженные чередующиеся максимумы и минимумы, обусловленные интерференцией. Определены толщины одно-, трех- и пятислойной пленок анатаза и дисперсия показателя преломления для пятислойной пленки. Проведены расчеты спектральной зависимости коэффициента пропускания. Показано, что чем меньше отношение толщины пленки диоксида титана к длине волны света, тем лучше результаты расчетов дисперсии коэффициента пропускания согласуются с экспериментом. Определена спектральная зависимость коэффициента поглощения для пятислойной пленки диоксида титана.

**Ключевые слова:** диоксид титана (анатаз), показатель преломления, дисперсия, коэффициенты пропускания и поглощения.

DOI: 10.61011/JTF.2025.01.59476.210-24

### Введение

В последние годы интенсивно изучаются оптические, электрофизические и фотокаталитические свойства наноразмерных пленок диоксида титана  $\text{TiO}_2$ , а также пленок диоксида титана, легированных примесными атомами, в связи с его уникальными характеристиками. Как известно, примесные атомы изменяют электрофизические и оптические свойства полупроводников и диэлектриков, например, спектральные характеристики фотопроводимости, коэффициентов отражения и поглощения [1]. Это позволяет направленно регулировать оптические, электрофизические и фотокаталитические свойства пленок диоксида титана.

В работе [2] установлено, что легирование  $\text{TiO}_2$  примесями углерода и ванадия приводит к появлению в запрещенной зоне примесных состояний C и V, вследствие чего возрастает фотокаталитическая активность анатаза. В работе [3] исследовались свойства тонких пленок  $\text{TiO}_2$ , легированных наночастицами серебра, для просветляющих покрытий и прозрачных контактов при изготовлении солнечных элементов. В работе [3] показано, что концентрация наночастиц серебра влияет на показатель преломления, проводимость и толщину пленок  $\text{TiO}_2\text{—Ag}$ . Согласно [4], пленки диоксида титана, модифицированные кобальтом, проявляют магнитные свойства. В работе [5] показано, что легирование пленок диоксида титана оксидом марганца позволяет направленно изменять оптические свойства  $\text{TiO}_2$ . В [6,7]

изучалось влияние отжига в аргоне на электрические и фотоэлектрические характеристики структуры пленка  $\text{TiO}_2\text{—кремниевая}$  подложка.

Для изготовления тонких пленок  $\text{TiO}_2$  используют ряд технологических методов, в частности, реактивное магнетронное распыление, электронно-лучевое испарение, осаждение из газовой фазы, пульверизация с последующим пиролизом, термическое разложение титанорганического прекурсора. Причем оптические свойства пленок оксида титана зависят от способа их получения [2–12]. Экспериментальная ширина запрещенной зоны  $E_g$  диоксида титана ( $\text{TiO}_2$ , анатаз) лежит в интервале 3.18–3.43 eV [2,5,8], поэтому диоксид титана обладает высокой прозрачностью в видимой области спектра. В [10] показана зависимость показателя преломления и ширины запрещенной зоны от толщины пленки диоксида титана. Одной из причин этого может быть несоответствие кристаллических решеток (атомов, ионов) на границе раздела пленки диоксида титана и подложки. Рассогласование кристаллических решеток в гетероконтакте создает на границе раздела напряжения и дислокации несоответствия, что приводит к образованию на границе гетероконтакта „поверхностных уровней“ и изменению свойств диэлектрика — структуры энергетических зон, ширины запрещенной зоны [13].

Целью настоящей работы является получение кристаллических пленок диоксида титана различной толщины методом термического разложения титанорганического прекурсора на стеклянной подложке для примене-

ния в фотокатализе, определение дисперсии показателя преломления и коэффициента поглощения пленки.

## 1. Результаты экспериментов

Тонкие слои диоксида титана на прозрачной подложке получали методом активированного химического разложения пленки титанорганического прекурсора под воздействием тепла. Прозрачной подложкой служило покровное стекло микроскопа толщиной  $h = 0.18$  mm. В качестве прекурсора использовались пленки полиэтоксититана, который готовили из 5–7% раствора хлорида титана. Для формирования пленок диоксида титана на стеклянной подложке вначале проводился нагрев пленки полиэтоксититана до температуры 773 K в муфельной печи СНОЛ 15/1300 с последующим полным остыванием печи. После термического разложения титанорганического прекурсора полученная пленка диоксида титана прочно закреплялась на поверхности подложки. Оценка характерного времени прогрева, например, стеклянной подложки проводилась по выражению  $t_0 \sim h_3^2/a_3$ , где  $a^3 \approx 0.38 \cdot 10^{-6}$  m<sup>2</sup>/s — коэффициент температуропроводности стекла, составляет  $\sim 10^{-1}$  s. Следовательно, в системе пленка диоксида титана–стеклянная подложка термоупругих напряжений не возникает.

Для увеличения толщины пленки на полученную пленку оксида титана вновь наносился титанорганический прекурсор с последующим нагревом в муфельной печи до 773 K и остыванием [11]. Таким образом, были получены трехслойная и пятислойная пленки диоксида титана на стеклянной подложке. Рентгенофазовый анализ показал, что при данном способе получения пленок диоксида титана различной толщины образуется однородная кристаллическая фаза анатаз [11,12], т.е. никаких границ между наносимыми слоями нет.

Попытка получения пленок диоксида титана путем фотолиза ультрафиолетом пленки полиэтоксититана по данным рентгенофазового анализа показала, что TiO<sub>2</sub> образуется только в аморфном состоянии. Причем без термообработки слои TiO<sub>2</sub> не прочные и повторное нанесение пленки полиэтоксититана растворяет предыдущий слой. Спектры пропускания подложки и системы подложка–диоксид титана регистрировались с помощью двухлучевого спектрофотометра UV-2550 фирмы Shimadzu в диапазоне длин волн 190–900 nm [11].

На рис. 1 приведена система воздух–стеклянная подложка–диоксид титана–воздух. Здесь введены следующие обозначения:  $n_1, n_4$  — показатели преломления воздуха, равные единице;  $n_2$  — показатель преломления пленки диоксида титана (фаза анатаз);  $n_3$  — показатель преломления стеклянной пластинки.

Спектральные зависимости коэффициентов пропускания  $T(\lambda)$  системы стеклянная подложка–диоксид титана изображены на рис. 2–4. На рис. 2 (кривая 3) изображена также спектральная зависимость коэффициента пропускания стеклянной подложки.

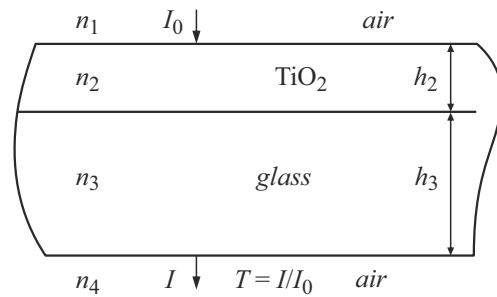


Рис. 1. Система воздух–стеклянная подложка–оксид титана–воздух.

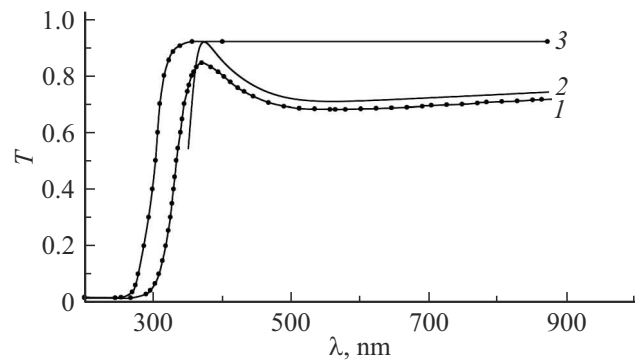


Рис. 2. Спектральная зависимость коэффициентов пропускания системы стеклянная подложка–однослойная пленка TiO<sub>2</sub> (кривые 1 и 2) и стеклянной подложки (кривая 3): 1 — экспериментальная кривая; 2 — теоретическая кривая, рассчитанная по формуле (3) [12].

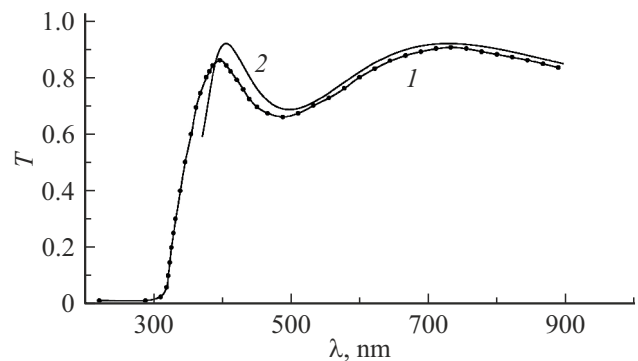
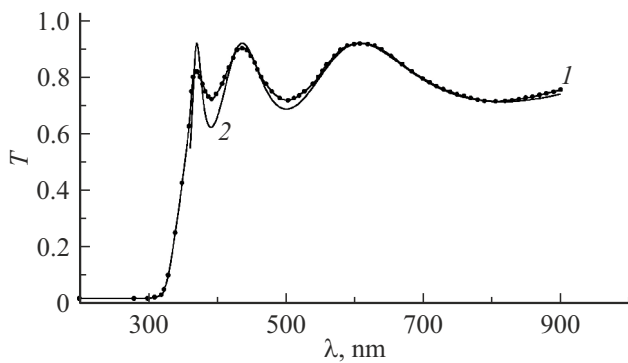


Рис. 3. Спектральная зависимость коэффициентов пропускания системы стеклянная подложка–трехслойная пленка TiO<sub>2</sub> (кривые 1 и 2): 1 — экспериментальная кривая; 2 — теоретическая кривая, рассчитанная по формуле (3) [12].

Спектр пропускания системы стеклянная подложка–однослойная пленка TiO<sub>2</sub> (рис. 2, кривые 1 и 2) имеет один максимум и один минимум в интервале длин волн  $340.0 \leq \lambda \leq 900.0$  nm. На данном спектральном интервале коэффициент пропускания стеклянной подложки  $T_0 = 0.919$ .



**Рис. 4.** Спектральная зависимость коэффициента пропускания системы стеклянная подложка—пятислойная пленка  $\text{TiO}_2$  (кривые 1 и 2): 1 — экспериментальная кривая; 2 — теоретическая кривая, рассчитанная по формуле (3) [12].

На рис. 3 приведен спектр коэффициента пропускания системы стеклянная подложка—трехслойная пленка диоксида титана. Спектр пропускания этой системы (кривые 1 и 2) имеет уже два максимума и один минимум в интервале длин волн  $340.0 \leq \lambda \leq 900.0$  nm.

На рис. 4 изображен спектр пропускания системы стеклянная подложка—пятислойная пленка диоксида титана. Как видно из рис. 4, экспериментальная спектральная кривая коэффициента пропускания (1) имеет уже четыре ярко выраженных чередующихся максимума и минимума. Максимумы и минимумы коэффициента пропускания системы прозрачная подложка— $\text{TiO}_2$  обусловлены интерференцией света на пленке диоксида титана. Как видно из рис. 2–4, увеличение толщины пленки  $\text{TiO}_2$  приводит к увеличению числа максимумов и минимумов на спектральных зависимостях коэффициента пропускания.

## 2. Результаты расчетов

Проведем анализ экспериментальных зависимостей коэффициентов пропускания, изображенных на рис. 2–4 с использованием работы А.С. Валева [14]. А.С. Валева рассмотрел случай, который часто осуществляется на практике, когда слабо поглощающая пленка нанесена на прозрачную подложку [15].

Вначале определим показатель преломления стеклянной подложки. Коэффициент пропускания стеклянной пластинки  $T_0$ , находящейся в воздухе с показателями преломления  $n_1 = n_4 = 1$  (рис. 1) в пренебрежении поглощением и с условием, что толщина стеклянной подложки  $h_3 \gg \lambda$ , определяется по формуле [14]:

$$T_0 = \frac{T_{34}^2}{1 - R_{34}^2} = \frac{2n_3}{n_3^2 + 1}, \quad (1)$$

где  $T_{34}$ ,  $R_{34}$  — коэффициенты пропускания и отражения на одной поверхности стеклянной подложки. Данные

коэффициенты определяются формулами [14]:

$$T_{34} = \frac{4n_3}{(n_3 + 1)^2}, \quad R_{34} = \left( \frac{n_3 - 1}{n_3 + 1} \right)^2. \quad (2)$$

Из выражения (1) следует формула для определения показателя преломления стеклянной подложки, находящейся в воздушной среде

$$n_3 = \frac{1}{T_0} + \sqrt{\frac{1}{T_0^2} - 1}.$$

Подставляя в данную формулу значение  $T_0 = 0.919$ , получим, что показатель преломления стеклянной подложки  $n_3 = 1.517$ .

Теперь рассмотрим систему стеклянная подложка с нанесенной на поверхность тонкой пленкой диоксида титана. Коэффициент пропускания стеклянной подложки с тонким нанесенным слабопоглощающим слоем, с учетом интерференции и при нормальном падении светового пучка определяется по формуле [14]:

$$T = \frac{T_{31}T_{34}}{1 - R_{31}R_{34}} = \frac{T_{34}}{1/T_{31} - R_{34}R_{31}/T_{31}}, \quad (3)$$

где  $T_{31}$  и  $R_{31}$  — коэффициенты пропускания и отражения слоя при падении света на слой из подложки. Данные коэффициенты определяются по следующим формулам [14]:

$$\begin{aligned} \frac{1}{T_{31}} = & \frac{1}{16n_2^2n_3} [(n_3 + n_2)^2(n_2 + 1)^2 \exp(\gamma_2) + (n_3 - n_2)^2 \\ & \times (n_2 - 1)^2 \exp(-\gamma_2) + 2(n_3^2 - n_2^2)(n_2^2 - 1) \cos \varphi_2 \\ & + 4k_2(n_3 + 1)(n_2^2 - n_3) \sin \varphi_2], \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{R_{31}}{T_{31}} = & \frac{1}{16n_2^2n_3} [(n_3 - n_2)^2(n_2 + 1)^2 \exp(\gamma_2) + (n_3 + n_2)^2 \\ & \times (n_2 - 1)^2 \exp(-\gamma_2) + 2(n_3^2 - n_2^2)(n_2^2 - 1) \cos \varphi_2 \\ & - 4k_2(n_3 - 1)(n_2^2 + n_3) \sin \varphi_2]. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь

$$\varphi_2 = \frac{4\pi n_2 h_2}{\lambda}, \quad \gamma_2 = \frac{4\pi k_2 h_2}{\lambda} = \alpha_2 h_2, \quad (6)$$

где  $h_2$  — толщина нанесенной пленки на стеклянную подложку;  $k_2$  — показатель поглощения пленки;  $\alpha_2$  — коэффициент поглощения пленки.

Из условия, что

$$\frac{d}{d\varphi_2} \left( \frac{1}{T_{31}} - \frac{R_{31}}{T_{31}} R_{34} \right) = 0,$$

в [14] получено выражение для экстремумов коэффициента пропускания:

$$T_{ext} = \frac{A}{B \exp(\gamma_2) - (-1)^m C + D \exp(-\gamma_2)}, \quad (7)$$

где  $A = 16n_2^2n_3$ ,  $B = (n_2 + 1)^3(n_2 + n_3^2)$ ,  $C = 2(n_2^2 - 1) \times (n_2^2 - n_3^2)$  и  $D = (n_2 - 1)^3(n_2 - n_3^2)$ .

Выражение (7) получено из условия, что  $\sin \varphi_2 = 0$ , а  $\cos \varphi_2 = (-1)^m$ , где  $m$  — порядок интерференции. Следовательно, при четном  $m$  имеем  $T_{ext} = T_M$ , а при нечетном  $m$  коэффициент пропускания  $T_{ext} = T_m$ . Здесь  $T_m$  — минимум коэффициента пропускания;  $T_M$  — максимум коэффициента пропускания.

Оценим вначале толщину пятислойной пленки  $\text{TiO}_2$ , используя выражение

$$\frac{4\pi n_2(\lambda_m)h_2}{\lambda_m} = m\pi. \quad (8)$$

Отсюда имеем

$$h_2 = \frac{m\lambda_m}{4n_2(\lambda_m)} = \frac{(m+1)\lambda_{m+1}}{4n_2(\lambda_{m+1})}. \quad (9)$$

Положим, что при больших длинах волн дисперсия показателя преломления незначительна [16], т.е.  $n_2(\lambda_m) \approx n_2(\lambda_{m+1})$ . С учетом этого выражение (9) приобретает вид

$$m\lambda_m \approx (m+1)\lambda_{m+1}. \quad (10)$$

Отсюда порядок интерференции будет определяться выражением

$$m = \frac{\lambda_{m+1}}{\lambda_m - \lambda_{m+1}}. \quad (11)$$

Подставив в (11) экспериментальные данные из рис. 4:  $\lambda_m = 810.5 \text{ nm}$  (минимум) и  $\lambda_{m+1} = 608.5 \text{ nm}$  (максимум), получим  $m = 3.012$ . Как видно, порядок интерференции практически не отличается от целого числа. Следовательно, для  $\lambda_m = 810.5 \text{ nm}$  порядок интерференции равен 3, а для  $\lambda_{m+1} = 608.5 \text{ nm}$  порядок интерференции  $m = 4$ .

В случае слабого поглощения света, полагая  $\gamma_2 \approx 0$ , формулы для  $T_M$  и  $T_m$  (7) упрощаются, и, согласно (7), приобретают вид [14]:

$$T_M = T_0 = \frac{2n_3}{n_3^2 + 1}, \quad T_m = \frac{4n_2^3n_3}{(n_2^2 + 1)(n_3^2 + n_2^2)}. \quad (12)$$

Сравнение  $T_0 = 0.919$  и  $T_M = 0.9182$  показывает, что данные значения практически равны. Это позволяет из формулы (12) для  $T_m$  получить выражение для оценки показателя преломления для пленки анатаза при  $\lambda_3 = 810.5 \text{ nm}$ :

$$n_2 = \sqrt{\left[ \frac{2n_3}{T_m} - \frac{1+n_3^2}{2} \right] + \sqrt{\left[ \frac{2n_3}{T_m} - \frac{1+n_3^2}{2} \right]^2 - n_3^2}}. \quad (13)$$

Согласно экспериментальным данным, в области слабого поглощения при длине волны света  $\lambda = 810.5 \text{ nm}$  коэффициент пропускания в минимуме равняется  $T_m = 0.71278$ . Подставив численные значения для  $T_m = 0.71278$  и  $n_3 = 1.517$  в формулу (13), получим, что

при  $\lambda = 810.5 \text{ nm}$  показатель преломления пленки диоксида титана  $n_2 = 2.174$ . Это позволяет из выражения (9) вычислить толщину пятислойной пленки диоксида титана:

$$h_2 = \frac{m\lambda}{4n_2} = \frac{3 \cdot 810.5}{4 \cdot 2.172} \approx 279.87 \text{ nm}.$$

Так как толщина пленки теперь известна, воспользовавшись формулой (8), получим выражение для вычисления показателя преломления в экстремальных точках

$$n_2(\lambda_m) = \frac{m\pi\lambda_m}{4\pi h_2}. \quad (14)$$

В работе [10] для аппроксимации зависимости показателя преломления от длины волны воспользовались одноосцилляторной моделью. Согласно данной модели, зависимость показателя преломления от длины волны имеет монотонный спад. Пленка диоксида титана в работе [10] получена методом магнетронного распыления титанового катода. В нашем случае пленка диоксида титана получена химическим способом. Хотя численно зависимости показателей преломления в нашей работе и в [10] близки, однако качественные зависимости  $n_2(\lambda)$  отличаются. Как уже отмечалось, оптические свойства пленок диоксида титана зависят от способа их получения.

Получим эмпирическую формулу для аппроксимации зависимости показателя преломления от длины волны, воспользовавшись рядом Коши [17]:

$$n_2 = a_0 + \frac{a_1}{\lambda^2} + \frac{a_2}{\lambda^4} + \frac{a_3}{\lambda^6} + \frac{a_4}{\lambda^8} + \frac{a_5}{\lambda^{10}}. \quad (15)$$

Число коэффициентов ряда Коши определялось из числа показателей преломления в экстремальных точках. Исходя из уравнения (15), мы записали систему из шести линейных уравнений для коэффициентов  $a_0$  и  $a_i$  ( $i = 1 \dots 5$ ), которая решалась методом Гаусса [18]. В итоге получили следующие значения коэффициентов:  $a_0 = 2.2554$ ,  $a_1 = -0.2208 \cdot 10^{-1} \mu\text{m}^2$ ,  $a_2 = -0.6601 \cdot 10^{-1} \mu\text{m}^4$ ,  $a_3 = 0.3963 \cdot 10^{-1} \mu\text{m}^6$ ,  $a_4 = -0.7174 \cdot 10^{-2} \mu\text{m}^8$ ,  $a_5 = 0.4363 \cdot 10^{-3} \mu\text{m}^{10}$ .

По формуле (15) рассчитана зависимость показателя преломления пятислойной пленки диоксида титана от длины волны (рис. 5). Как видно из рис. 5, при  $\lambda \geq 600 \text{ nm}$  показатель преломления не зависит от длины волны. Независимость от длины волны показателя

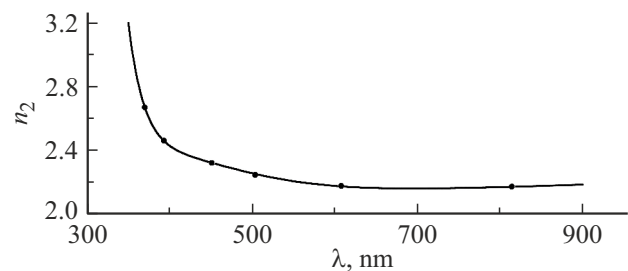


Рис. 5. Спектральная зависимость показателя преломления пленки диоксида титана от длины волны.

преломления наблюдается, например, для ионных кристаллов CsF, CsBr, KI и KBr [16]. Зная спектральную зависимость показателя преломления пленки диоксида титана, рассчитали по формуле (3) спектральную зависимость коэффициента пропускания от длины волны для пятислойной пленки при  $\gamma_2 = 0$  (рис. 4, кривая 2). Как видно из рис. 4, координаты  $\lambda_m$  для экспериментальных и расчетных значений  $T_M$  и  $T_m$  совпали, причем чем меньше отношение  $h_2/\lambda$ , тем лучше расчетные значения коэффициента пропускания (кривая 2) согласуются с экспериментом. Таким образом, используя экспериментальные данные по интерференции коэффициента пропускания, определили толщину пленки диоксида титана и дисперсию показателя преломления.

Коэффициент поглощения  $\alpha_2$  пленки диоксида титана можно рассчитать в экстремальных точках из преобразованных выражений (7) для максимумов  $T_M$  и минимумов  $T_m$  коэффициентов пропускания:

$$\alpha_2 = \frac{1}{h_2} \ln \left[ \frac{1}{2B} \left( \frac{A}{T_M} + C \right) + \sqrt{\frac{1}{4B^2} \left( \frac{A}{T_M} + C \right)^2 - \frac{D}{B}} \right], \quad (16)$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{h_2} \ln \left[ \frac{1}{2B} \left( \frac{A}{T_m} - C \right) + \sqrt{\frac{1}{4B^2} \left( \frac{A}{T_m} - C \right)^2 - \frac{D}{B}} \right], \quad (17)$$

Результаты расчетов коэффициента поглощения  $\alpha_2$  приведены на рис. 6 и 7.

На рис. 6 изображены результаты расчета коэффициента поглощения пленки  $\text{TiO}_2$  по формуле (16) в области максимумов коэффициента пропускания  $T_M$  от энергии квантов света. Как видно из рис. 6, экспериментальные точки хорошо ложатся на экспоненциальную зависимость в интервале энергий 2.0–3.5 eV. Кроме того, на данном рисунке приведены точки, взятые на огибающей, проведенной через точки  $T_M$  с использованием лекала при  $\lambda$ , равном 393.0, 504.0 и 810.5 nm. Как видно из рис. 6, данные точки ложатся достаточно близко к прямой, проведенной через экспериментальные точки максимумов коэффициента пропускания  $T_M$ .

Спектральная зависимость  $\alpha_2$  определяется выражением

$$\alpha_2 = A_0 \exp(h\nu/\Delta_0), \quad (18)$$

где  $A_0 = 2.955 \text{ m}^{-1}$ ,  $\Delta_0 = 0.2865 \text{ eV}$ . Подобная зависимость для  $\alpha_2$  от энергии наблюдается в работе [19] для пластинки CdTe с примесью хлора толщиной 0.5–0.7 mm. Параметр  $\Delta_0$  характеризует протяженность хвостов плотности состояний внутрь запрещенной зоны. Параметр  $\Delta_0$  рассматривается в [20] как мера разупорядочения полупроводника. Например, для GeTe  $\Delta_0 \approx 0.067 \text{ eV}$ , что значительно меньше, чем у пленки  $\text{TiO}_2$ . Выражение (18) можно представить также в виде

$$\alpha_2 = \alpha_0 \exp\left(-\frac{E_g - h\nu}{\Delta_0}\right),$$

где  $\alpha_0 = A_0 \exp(E_g/\Delta_0)$ ,  $E_g$  — ширина запрещенной зоны диоксида титана.

При расчете спектральной зависимости коэффициента пропускания было предположено, что  $\gamma_2 = 0$ .

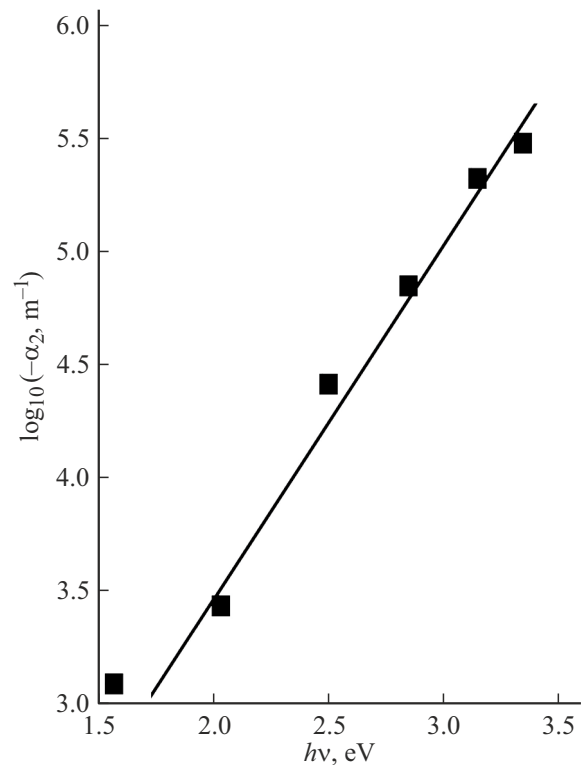


Рис. 6. Спектральная зависимость коэффициента поглощения пленки диоксида титана в области максимумов спектральной кривой коэффициента пропускания.

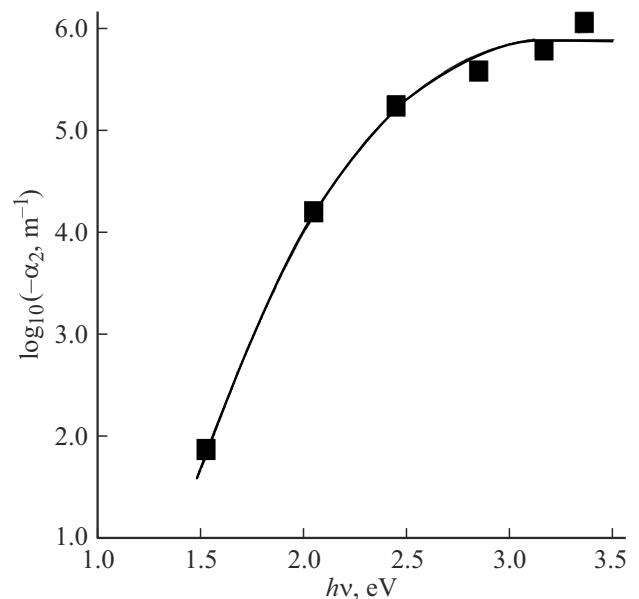


Рис. 7. Спектральная зависимость „коэффициента поглощения“ пленки диоксида титана в области минимумов спектральной кривой коэффициента пропускания.

Согласно [13],  $\gamma_2 = \alpha_2 h_2$ . При  $\lambda = 371 \text{ nm}$  получим  $\alpha_2 \approx 0.32 \cdot 10^6 \text{ m}^{-1}$ . Отсюда

$$\gamma_2 = \alpha_2 h_2 \approx 0.32 \cdot 10^6 \cdot 279.0 \cdot 10^{-9} \approx 9.0 \cdot 10^{-2} \ll 1.$$

Таким образом, расчеты при  $\gamma_2 = 0$  и  $\sim 9.0 \cdot 10^{-2}$  будут отличаться примерно на 10%. А в области более длинных волн влиянием поглощения на  $T_M$  можно пренебречь.

На рис. 7 изображены результаты расчетов коэффициента поглощения пленки  $\text{TiO}_2$  по формуле (17) в области минимумов коэффициента пропускания  $T_m$  в зависимости от энергии квантов света. Расчеты показали, что в области минимумов коэффициент поглощения  $\alpha_2 < 0$ , т.е. наблюдается эффект „просветления“ пятислойной пленки диоксида титана. Кроме того, на данном рисунке приведены точки, взятые на огибающей, проведенной через экспериментальные точки  $T_m$  при  $\lambda$ , равном 371.0, 437.0 и 608.5 nm. Огибающая, проведенная через экспериментальные точки  $T_m$ , является практически прямой линией. Расчетная кривая  $T(\lambda)$  в области минимума даже без учета поглощения света проходит ниже экспериментальной кривой, причем, как уже отмечалось, чем больше длина волны света, тем лучше расчетная кривая согласуется с экспериментом.

Чем может быть обусловлен эффект „просветления“ пятислойной пленки  $\text{TiO}_2$ ? Если предположить, что поверхность пленки диоксида титана имеет шероховатость, то это приведет к изменению углового распределения светового потока, т.е. к рассеянию лучей света на границе пленка–воздух и преломлению рассеянных лучей в самой пленке. При отражении лучей света от границы раздела пленка–стеклянная подложка лучи света частично отразятся от границы раздела пленка–воздух. Если угол падения лучей света на границу раздела пленка–воздух внутри пленки будет больше критического угла полного отражения  $\beta_C$ , то лучи света полностью отразятся от данной поверхности и пройдут через стеклянную подложку, что и приведет к эффекту просветления. Критический угол полного отражения от границы раздела определяется из выражения [17]:

$$\sin \beta_C = n_1/n_2,$$

из которого следует, что  $\beta_C \sim 22.0^\circ - 27.0^\circ$ . Таким образом, угол полного внутреннего отражения в пленке зависит от дисперсии показателя преломления. Так как угол  $\beta_C$  не слишком большой, эффект просветления вполне возможен.

Оценим толщину трехслойной пленки диоксида титана. Согласно рис. 3, первый минимум коэффициента пропускания находится при  $\lambda = 488.0 \text{ nm}$ . Второй максимум коэффициента пропускания находится при  $\lambda = 729.0 \text{ nm}$ . В данной области спектра, согласно рис. 5, показатель преломления изменяется незначительно. Поэтому, воспользовавшись выражением (11), получим, что  $m = 2.025$ . Следовательно, для  $\lambda = 729.0 \text{ nm}$  показатель интерференции равняется  $m = 2$ , а для  $\lambda = 488.0 \text{ nm}$

показатель интерференции равняется 3. Далее по формуле (9) и показателю преломления, полученному для пятислойной пленки при  $\lambda = 729.0 \text{ nm}$ , получим, что толщина трехслойной пленки  $h_2 \approx 168.0 \text{ nm}$ .

Для однослойной пленки первый максимум коэффициента пропускания находится при  $\lambda = 370.5 \text{ nm}$ , а первый минимум — при  $\lambda = 563.0 \text{ nm}$ . В данной области спектра, согласно рис. 5, показатель преломления изменяется примерно в полтора раза. Поэтому показатель интерференции оценим из формулы (9):

$$\frac{m\lambda}{4n_2(\lambda_m)} = \frac{(m+1)\lambda_{m+1}}{4n_2(\lambda_{m+1})},$$

где показатели преломления вычислены по формуле (9) для пятислойной пленки  $\text{TiO}_2$ . Так как показатели преломления для данных длин волн известны, получим после округления  $m = 1$ , а толщина однослойной пленки  $h_2 \approx 70.0 \text{ nm}$ .

Как видно из рис. 2 и 3, расчетные и экспериментальные значения первых максимумов коэффициентов пропускания сдвинуты относительно друг друга. Это обусловлено тем, что показатель преломления зависит от толщины пленки  $\text{TiO}_2$  [10], причем чем меньше отношение  $h_2/\lambda$ , тем лучше расчетные значения коэффициента пропускания (кривые 2) согласуются с экспериментом. Покажем на примере трехслойной пленки  $\text{TiO}_2$  зависимость показателя преломления от толщины. Согласно расчетам по формуле (9), в экстремальных точках коэффициента пропускания при  $\lambda = 397.5, 488.0$  и  $727.0 \text{ nm}$  показатели преломления пленки соответственно равны  $n_2 = 2.44, 2.27$  и  $2.16$ . Как видно из рис. 3, расчетные и экспериментальные значения максимумов коэффициента пропускания совпадают удовлетворительно при  $\lambda = 720.0 \text{ nm}$ . Поэтому предположим, что экспериментальное значение  $n_2 = 2.16$ . Далее по формуле (9), записанной в виде

$$n_2(\lambda_{m+1}) = \frac{(m+1)\lambda_{m+1}}{m\lambda_m} n_2(\lambda_m)$$

рассчитаем показатель преломления при  $\lambda = 397.5$  и  $488.0 \text{ nm}$ . В итоге получим  $n_2 = 2.36$  и  $2.17$  соответственно. Как видно из результатов расчета, уменьшение толщины пленки  $\text{TiO}_2$  приводит к уменьшению показателя преломления, что согласуется с работой [7].

Согласно рис. 2 и 3, в одно- и трехслойной пленках диоксида титана эффект просветления не наблюдается. Возможно, это обусловлено тем, что шероховатость данных пленок меньше шероховатости пятислойной пленки. Кроме того, уменьшение показателя преломления  $n_2$  приводит к увеличению угла полного внутреннего отражения  $\beta_C$ .

## Заключение

Измерены спектральные зависимости коэффициентов пропускания для одно-, трех- и пятислойной пленки



диоксида титана на прозрачной подложке. Спектральные зависимости коэффициентов пропускания от длины волны света спектрофотометра имеют ярко выраженные чередующиеся максимумы и минимумы, обусловленные интерференцией. Применение работы А.С. Валеева для анализа спектров пропускания позволило оценить толщины пленок диоксида титана и рассчитать спектр коэффициентов пропускания. Показано, что чем меньше отношение толщины пленки  $\text{TiO}_2$  к длине волны, тем лучше расчетный спектр коэффициента пропускания согласуется с экспериментальным.

Для пленки диоксида титана толщиной 279.87 nm получена эмпирическая формула на основе ряда Коши для показателя преломления. Показатель преломления пленки  $\text{TiO}_2$  на интервале  $550.0 < \lambda < 900.0$  nm не зависит от длины волны. Показано, что с уменьшением толщины пленки диоксида титана уменьшается показатель преломления.

По максимумам коэффициента пропускания  $T_M$  рассчитана спектральная зависимость коэффициента поглощения света пленки  $\text{TiO}_2$ . Коэффициент поглощения света экспоненциально зависит от энергии квантов света. В области минимумов  $T_m$  обнаружен эффект просветления. Предполагается, что данный эффект обусловлен полным внутренним отражением лучей света в пленке от ее внешней поверхности вследствие углового рассеяния света.

## Финансирование работы

Работа выполнена на приборной базе „ЦКП“ научным оборудованием „КемГУ“ и „ЦКП КемНЦ СО РАН“.

## Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] В.И. Фистуль. *Сильно легированные полупроводники* (Наука, М., 1967)
- [2] В.М. Зайнулина, В.П. Жуков, В.Н. Красильников, М.Ю. Янченко, Л.Ю. Булдакова, Е.В. Поляков. *ФТП*, **52** (2), 253 (2010). [V.M. Zainulina, V.P. Zhukov, V.N. Krasil'nikov, M.Yu. Yanchenko, L.Y. Buldakova, E.V. Polyakov. *Phys. of the Solid State*, **52** (2), 271 (2010).]
- [3] Л.С. Лунин, М.Л. Лунина, А.А. Кравцов, И.А. Сысоев, А.В. Блинов. *ФТП*, **50** (9), 1253 (2016). [L.S. Lunin, M.L. Lunina, A.A. Kravtsov, I.A. Sysoev, A.V. Blinov, *Semiconductors*, **50** (9), 1231 (2016). DOI: 10.1134/S1063782616090141]
- [4] В.А. Логачева, А.Н. Лукин, Н.Н. Афонин, О.В. Сербин. *Опт. и спектр.*, **126** (6), 751 (2019). DOI: 10.21883/OS.2019.06.47769.32-19 [V.A. Logacheva, A.N. Lukin, N.N. Afonin, O.V. Serbin, *Opt. Spectr.*, **126** (6), 674 (2019). DOI: 10.1134/S0030400X19060158]
- [5] В.В. Брус, З.Д. Ковалюк, П.Д. Марьянчук. *ЖТФ*, **82** (8), 110 (2012). [V.V. Brus, Z.D. Kovalyuk, P.D. Maryanchuk. *Tech. Phys.*, **57** (8), 1148 (2012).]
- [6] В.М. Калыгина, И.М. Егорова, И.А. Прудаев, О.П. Толбанов. *ФТП*, **50** (8), 1036 (2016). [V.M. Kalygina, I.M. Egorova, V.A. Novikov, I.A. Prudaev, O.P. Tolbanov. *Semiconductors*, **50** (9), 1156 (2016).]
- [7] В.М. Калыгина, И.М. Егорова, И.А. Прудаев, О.П. Толбанов. *ФТП*, **50** (9), 1178 (2016). [V.M. Kalygina, I.M. Egorova, V.A. Novikov, I.A. Prudaev, O.P. Tolbanov, *Semiconductors*, **50** (9), 1015 (2016).]
- [8] Н.В. Чиркунова, М.В. Дорогов, А.Е. Романов. *Письма в ЖТФ*, **49** (11), 7, (2023). DOI: 10.21883/PJTF.2023.11.55530.19522. [N.V. Chirkunov, M.V. Dorogov, A.E. Romanov. *Tech. Phys. Lett.*, **49** (6), 7 (2023).]
- [9] M. Landmann, E. Rauls, W.G. Schmidt. *J. Phys.: Condensed Matter*, **24** (19), 1 (2012). DOI: 10.1088/0953-8984/24/19/195503
- [10] А.А. Гончаров, А.Н. Евсюков, Е.Г. Костин, Б.В. Стеценко, Е.К. Фролов, А.И. Щуренко. *ЖТФ*, **80** (8), 127 (2010). [A.A. Goncharov, A.N. Evsyukov, E.G. Kostin, B.V. Stecenko, E.K. Frolov, A.I. Shchurenko. *Tech. Phys.*, **55** (8), 1200 (2010).]
- [11] А.Ю. Степанов, Л.В. Сотникова, А.А. Владимиров, А.В. Ханефт, Е.В. Просвиркина, Ф.В. Титов, Д.В. Дягилев. *Ползуновский вестник*, **3**, 53 (2014).
- [12] Д.В. Дягилев, Т.А. Ларичев, В.М. Пугачев, А.А. Владимиров, Л.В. Сотникова, Т.С. Манина, А.Ю. Степанов, Ю.Н. Дудникова. *Журнал структурной химии*, **55** (6), 1208 (2014). [D.V. Dyagilev, T.A. Larichev, V.M. Pugachev, A.A. Vladimirov, L.V. Sotnikova, T.S. Manina, A.Yu. Stepanov, Yu.N. Dudnikova. *J. Structural Chem.*, **55** (6), 1152 (2014). DOI: 10.1134/S0022476614060250]
- [13] В.И. Ильин, С.Ф. Мусихин, А.Я. Шик. *Варизонные полупроводники и гетероструктуры* (Наука, СПб., 2000)
- [14] А.С. Валеев. *Опт. и спектр.*, **15** (4), 500 (1963).
- [15] Ю.И. Уханов. *Оптические свойства полупроводников* (Наука, М., 1966)
- [16] M. Garbuny. *Optical physics* (Academic press, NY. and London, 1965)
- [17] Н.М. Годжаев. *Оптика* (Высшая школа, М., 1977)
- [18] А.Е. Мудров. *Численные методы для ПЭВМ на языках Бейсик, Фортран и Паскаль* (МП „РАСКО“, Томск, 1991)
- [19] В.Д. Попович, Р. Потера, И.С. Вирт, М.Ф. Бильк. *ФТП*, **43** (6), 759 (2009). [V.D. Popovych, R. Potera, I.S. Virt, M.F. Bilyk. *Semiconductors*, **43** (6), 730 (2009). DOI: 10.1134/S1063782609060086]
- [20] N.F. Mott, E.A. Davis. *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials* (Clarendon Press, Oxford, 1979)