

ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА

УДК 53.05, 519.688, 004.942

MSC 05C85

Методы матриц переноса и рассеяния для численного определения коэффициентов отражения и преломления тонкопленочных материалов*Н. В. Егоров¹, А. Г. Федоров², В. В. Трофимов¹*¹ Санкт-Петербургский государственный университет,

Российская Федерация, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7–9

² Северо-Восточный федеральный университет им. М. К. Аммосова,

Российская Федерация, 677027, Якутск, ул. Белинского, 58

Для цитирования: *Егоров Н. В., Федоров А. Г., Трофимов В. В.* Методы матриц переноса и рассеяния для численного определения коэффициентов отражения и преломления тонкопленочных материалов // Вестник Санкт-Петербургского университета. Прикладная математика. Информатика. Процессы управления. 2024. Т. 20. Вып. 4. С. 432–445.

<https://doi.org/10.21638/spbu10.2024.401>

Проведен анализ методов матриц переноса и рассеяния для определения коэффициентов отражения и пропускания электромагнитных волн. Изучались как однослойные, так и многослойные структуры. Рассмотрены полупроводниковые материалы (Si, Ge, GaAs), а также благородные металлы (Ag, Au, Cu). Многослойный образец был представлен слоистой структурой из Si. В численных расчетах использованы следующие допущения: однородность, изотропность, падение волны под прямым углом. Получены сравнительные графики для методов матриц переноса и рассеяния. Определена зависимость коэффициентов отражения и пропускания для длин волн $\lambda = 2\text{--}20$ мкм и $\lambda = 0.2067\text{--}0.8267$ мкм.

Ключевые слова: метод матриц переноса, метод матриц рассеяния, коэффициент отражения, коэффициент пропускания, многослойные структуры.

1. Введение. Исследование распространения электромагнитных волн через слоистую структуру является одной из ключевых задач многих прикладных областей физики. Обусловлено это тем, что волна, прошедшая через слоистую структуру, будет содержать всю информацию (физико-механические свойства) об объекте. Значительный интерес представляет метод электронной голографии. Так, для низкоэнергетической электронной голографии существует экспериментальная возможность регистрации и визуализации как отдельных частиц, так и слоистых структур [1, 2] в виде интерференционных картин, но экспериментальные результаты приобретают

© Санкт-Петербургский государственный университет, 2024

особую ценность только после их анализа с применением методов математического моделирования тех же процессов и численного эксперимента.

К эффективным математическим подходам описания распространения электромагнитной волны через слоистые структуры относится метод матриц переноса, который можно рассматривать с двух точек зрения: в формализме матриц Абеля (2×2 метод матриц переноса) и в рамках электромагнитного формализма [3, 4]. В первом случае матрица распространения непрерывна внутри слоя, но разрывается на границе слоев, поэтому ее считают диагональной матрицей. Во втором случае матрица интерфейсов не терпит разрыва на границе между слоями, которую можно представить через амплитуды электромагнитного поля. В настоящей работе используется метод матриц переноса в формализме матриц Абеля. В случае, когда рассматриваются относительно толстые слои более 100 \AA , применяется метод матриц рассеяния, который также обсуждается в данной статье.

Цель работы — оценка точности численных результатов и сравнение методов матриц переноса и рассеяния для слоистых структур. В частности, будут приведены численные результаты коэффициентов отражения (R) и пропускания (T) для благородных металлов (Ag, Cu, Au) и полупроводниковых материалов (Ge, Si, GaAs), которые сравниваются с литературными данными. Отметим, что в рамках этой работы допускается, что все слои изотропны и однородны. Далее для простоты расчетов будем считать, что волна плоская и падает под прямым углом к объекту. В такой постановке задачи не учитывается поляризация.

2. 2×2 метод матриц переноса. Рассмотрим случай, который иллюстрирует рис. 1.

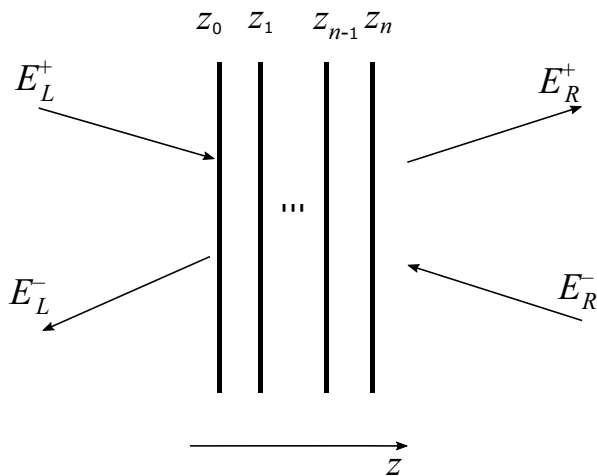


Рис. 1. Общая схема распространения волны через слоистую среду

Электромагнитную волну в левой и правой частях рис. 1 можно представить в виде суперпозиции плоских волн:

$$\begin{aligned} E_L(z) &= E_L^+(z) + E_L^-(z), \quad z \leq z_0, \\ E_R(z) &= E_R^+(z) + E_R^-(z), \quad z \geq z_n. \end{aligned} \quad (1)$$

С учетом выражения (1) линейное отношение между волнами правой и левой частей

с помощью матрицы переноса (M) можно записать следующим образом:

$$\begin{pmatrix} E_L^+(z_0) \\ E_L^-(z_0) \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} E_R^+(z_n) \\ E_R^-(z_n) \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Для упрощения дальнейших записей выражение (2) перепишем в обозначениях a и b :

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Матрица переноса представляет собой произведение матриц интерфейса (I) и распространения (P):

$$M = \left[\prod_{i=0}^{n-1} I(z_i) P(z_i, z_{i+1}) \right] I(z_n) = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

В общем виде это матрица размерности 2×2 , с помощью которой можно вычислить искомые коэффициенты R и T :

$$R = \left| \frac{m_{21}}{m_{11}} \right|^2, \quad T = \left| \frac{1}{m_{11}} \right|^2. \quad (5)$$

Для их определения остается установить вид I и P в выражении (4). Матрица интерфейса выражается через коэффициенты Френеля [5]:

$$I(z_i) = \frac{1}{t_i} \begin{pmatrix} 1 & r_i \\ r_i & 1 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Без учета поляризации коэффициенты Френеля примут вид

$$r_i = \frac{n_i^* - n_{i+1}^*}{n_i^* + n_{i+1}^*}, \quad t_i = \frac{2n_i^*}{n_i^* + n_{i+1}^*},$$

где $n_i^* = n_i - j\alpha_i$ — комплексный показатель преломления; n_i — показатель преломления i -го слоя; j — мнимая единица; α_i — коэффициент поглощения i -го слоя.

Учитывая, что внутри слоя электромагнитная волна является непрерывной, матрицу распространения можно представить так:

$$P(z_i, z_{i+1}) = \begin{pmatrix} \exp(jkz_in_i^*) & 0 \\ 0 & \exp(-jkz_in_i^*) \end{pmatrix}. \quad (7)$$

В (7) $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ — волновое число, λ — длина волны, z_i — толщина соответствующего слоя.

2.1. Численные результаты. Первая серия экспериментов связана с определением коэффициентов R и T для однослойных структур. Были рассмотрены следующие материалы: Si, Ge, GaAs, Ag, Au, Cu. Схема прохождения волны через слой приведена на рис. 2.

Отметим, что формулу (5) следует применять в случае, когда рассматривается многослойная структура, состоящая из двух или более слоев. Например, при прямом использовании выражения (5) для Si получим $R = 0.5870$, $T = 0.1544$ (расчетные параметры: толщина слоя $z = 1$ мкм, длина волны $\lambda = 587.6$ мкм,

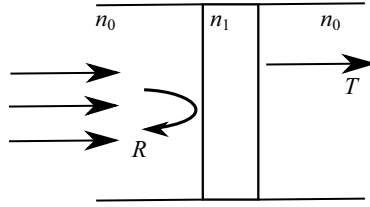


Рис. 2. Прохождение волны через однослойную структуру

n_0 — показатель преломления окружающей среды; n_1 — комплексный показатель преломления соответствующего материала.

$n_i^* = n_i - j\alpha_i = 3.9766 - j \cdot 0.030209$ [6]). С такими же параметрами $R = 0.3577$, $T = 0.52411$ (см. [7]). Как видно, результаты для R и T некорректны. Обоснованием таких результатов может служить то, что для R вклад, вносимый в конечный результат матрицей интерфейса правой части слоя, сильно искажает отражаемую электромагнитную волну. Для T матрицы интерфейсов слоя сильно искажают распространение электромагнитной волны внутри слоя. В силу вышесказанного в рамках данной работы будем применять вместо (4) для расчета R и T соответственно матрицы переноса:

$$M_R = I(z)P(z) = \begin{pmatrix} m'_{11} & m'_{12} \\ m'_{21} & m'_{22} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

$$M_T = P(z) = \begin{pmatrix} m''_{11} & m''_{12} \\ m''_{21} & m''_{22} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

С учетом (8) и (9) можно переписать выражение (5) следующим образом:

$$R_l = \left| \frac{m'_{21}}{m'_{11}} \right|^2, \quad T_l = \left| \frac{1}{m''_{11}} \right|^2, \quad (10)$$

где нижний индекс указывает на однослойность структуры. С помощью (8) было получено, что для Si $R_l = 0.3578$, $T_l = 0.5241$ (расчетные параметры см. выше).

Для проверки выражения (10) были рассмотрены полупроводниковые материалы (Ge, Si, GaAs) и благородные металлы (Ag, Cu, Au). Как видно из таблицы, численные результаты хорошо согласуются с литературными данными [7]. Численные расчеты для R_l не представлены в виду сокращения текста, отметим лишь, что все значения совпали с литературными данными для всех изученных материалов. Толщина объектов $z = 1$ мкм. Входные параметры Ag, Cu, Au взяты из работы [8], Ge, Si, GaAs — из [6].

Таблица. Сравнение численных результатов T_l с литературными данными

Материал	Входные параметры		Величина T_l	
	λ , мкм	$n_i^* = n_i - j \cdot \alpha_i$	Лит. данные	Численные результаты
Ag	1.9375	$0.240 - j \cdot 14.080$	$2.1357 \cdot 10^{-40}$	$2.1867 \cdot 10^{-40}$
Cu	1.9375	$1.090 - j \cdot 13.430$	$1.4485 \cdot 10^{-38}$	$1.4814 \cdot 10^{-38}$
Au	1.9375	$0.920 - j \cdot 13.780$	$1.4955 \cdot 10^{-39}$	$1.5304 \cdot 10^{-39}$
Ge	0.8267	$4.653 - j \cdot 0.298$	0.0108	0.0108
Si	0.8267	$3.673 - j \cdot 0.005$	0.9268	0.9268
GaAs	0.8267	$3.666 - j \cdot 0.080$	0.2964	0.2964

Следующая серия численных экспериментов была связана с расчетами при различных длинах волн в соответствии с [6]. Как видно из рис. 3, I , численные расчеты для T_l и R_l согласуются с литературными данными.

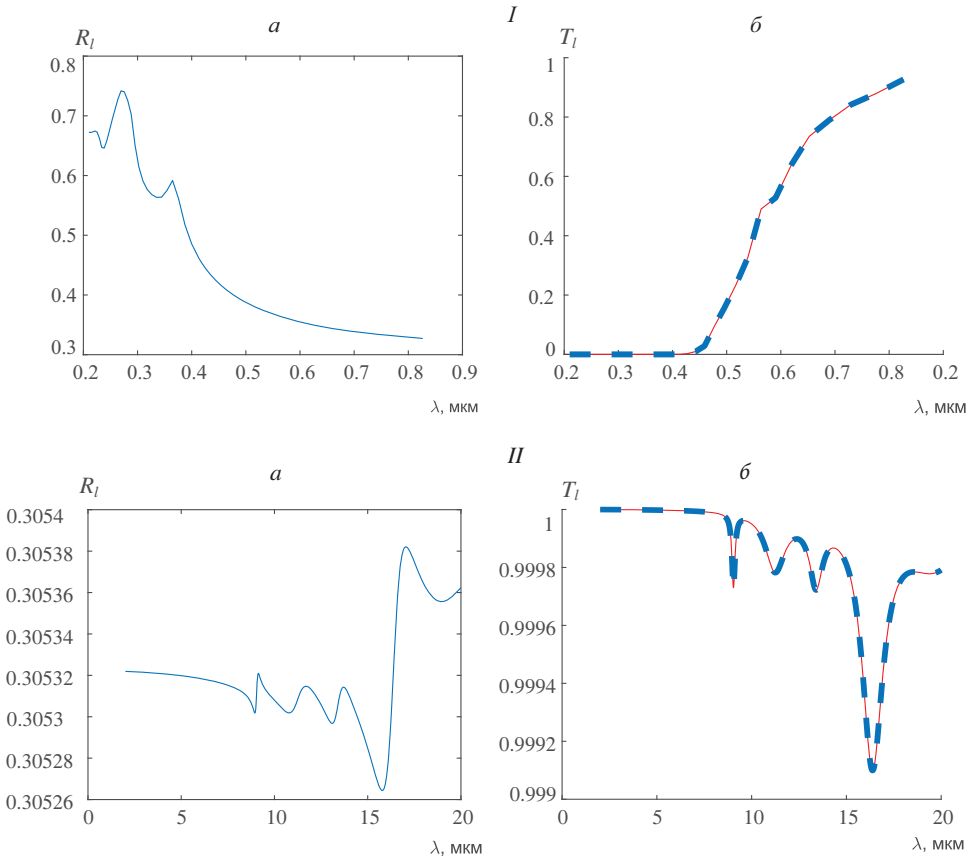


Рис. 3. Численные расчеты R_l (а) и T_l (б) для Si

Пунктирная кривая — численные результаты, сплошная — литературные данные при диапазоне длин волн $\lambda = 0.2067\text{--}0.8267$ мкм (I) и $\lambda = 2\text{--}20$ мкм (II).

На рис. 3, II приведены результаты расчетов коэффициентов отражения (R_l) и пропускания (T_l) для $\lambda = 2\text{--}20$ мкм. Входные параметры n_i^* для $\lambda = 2\text{--}20$ мкм взяты из работы [9]. Как и в предыдущем случае, коэффициенты R_l и T_l соответствуют литературным данным.

Для благородных металлов (Ag, Cu, Au) коэффициенты отражения иллюстрирует рис. 4. Входные параметры (n_i, α_i) для них взяты из работ [10–12] соответственно. Для Ge, GaAs коэффициенты отражения представлены также на рис. 4, входные параметры взяты из работ [13, 14] соответственно. Толщина рассматриваемых пленок для Ag, Cu, Au равна $z_i = 0.02$ мкм, для Ge, GaAs $z_i = 2$ мкм. Численные расчеты показали соответствие литературным данным [7]. Следует отметить, что результаты, приведенные в [10–14], являются экспериментальными. Как видно из рис. 5, где показаны коэффициенты пропускания (T_l) для Ag, Cu, Au, Ge, GaAs, численные результаты хорошо согласуются с литературными данными.

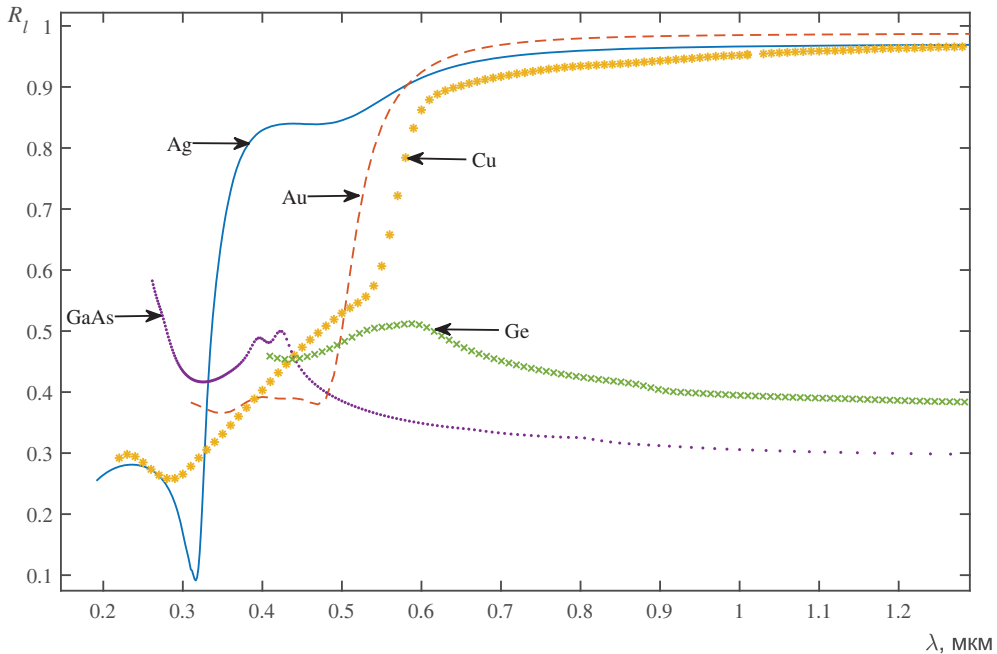


Рис. 4. Коэффициент отражения для Ag, Cu, Au при толщине пленки $z_i = 0.02$ мкм и для Ge, GaAs при толщине пленки $z_i = 2$ мкм

Как показали численные расчеты с однослойными структурами, выражения для R_l и T_l (10) с матрицами переноса (8), (9) хорошо согласуются с литературными данными. Но для более точного изучения и анализа методов численного расчета коэффициентов отражения и пропускания однослойных структур следует учитывать такие параметры как поляризация, угол падения, сферическую составляющую волны и т. д. Эти исследования планируется провести в следующих работах.

Последняя серия численных экспериментов связана с применением 2×2 метода матриц переноса для многослойных структур. Рассмотрим многослойную структуру, представленную на рис. 6. Отметим, что численные и натурные эксперименты с такой многослойной структурой были представлены в работе [15]. Поэтому для анализа полученных нами численных результатов будем основываться на данной работе.

Пусть волна, как показано на рис. 6, падает слева направо под прямым углом. Считается, что показатель преломления воздуха между слоями и среда, окружающая многослойную структуру слева и направо, одинаковы и равны $n_{\text{air}} = 1$. Значения $n_i^* = n_i - j\alpha_i$ взяты из работы [9]. Следует отметить, что во всех слоях Si значения n_i^* будут одинаковыми при соответствующей длине падающей волны. Другими словами, значение n_i^* во всех слоях будет зависеть только от длины падающей волны в соответствии с [9]. Для расчета R и T применялось выражение (5) с матрицей пропускания вида (4).

Как видно из рис. 7, наблюдается достаточно хорошее согласие наблюдаемых максимумов и минимумов коэффициентов отражения с литературными данными (см. [15]). Однако, чтобы добиться лучшего согласия между моделью и экспериментальными кривыми коэффициента отражения, следует учитывать больше параметров, чем это сделано в настоящей работе.

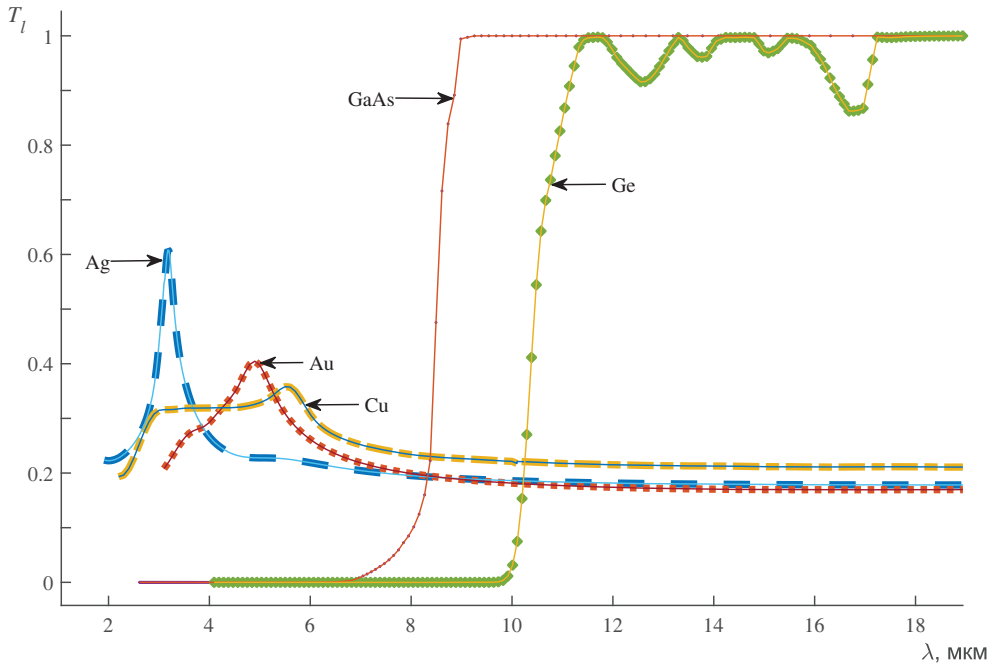


Рис. 5. Коэффициент пропускания T_l (пунктирные линии соответствуют численным результатам, сплошные — литературным данным) при толщине пленки $z_i = 0.02$ мкм для Ag, Cu, Au и $z_i = 2$ мкм для Ge, GaAs

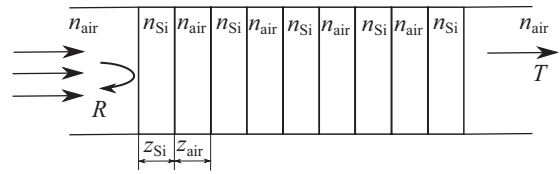


Рис. 6. Многослойная структура, где толщина слоя Si $z_{Si} = 3.3$ мкм, толщина воздушного слоя $z_{air} = 3.3$ мкм

Коэффициент пропускания в таком случае дает завышенный результат, что может быть обусловлено допущением, которое сделано для расчета многослойных структур. А именно то, что n_i^* во всех слоях будет зависеть только от длины падающей волны. Также обоснованием завышенных результатов может служить сам метод, являющийся численно нестабильным для относительно толстых слоев (см. п. 3). Дальнейшее обоснование данного метода и его оценка планируются в следующих работах.

Также следует отметить, что, как видно из рис. 7, б, с длины волны 10 мкм происходит фактически полное отражение электромагнитной волны.

3. Метод матриц рассеяния. Метод матриц переноса численно нестабильен для относительно толстых слоев (более 100 \AA), если не применяется теория эффективной массы [16]. Это выражается в невозможности масштабирования матрицы распространения вида (6), так как показатель преломления, входящий в экспоненциальное выражение, — комплексная величина, и как следствие (6) будет содержать как малые,

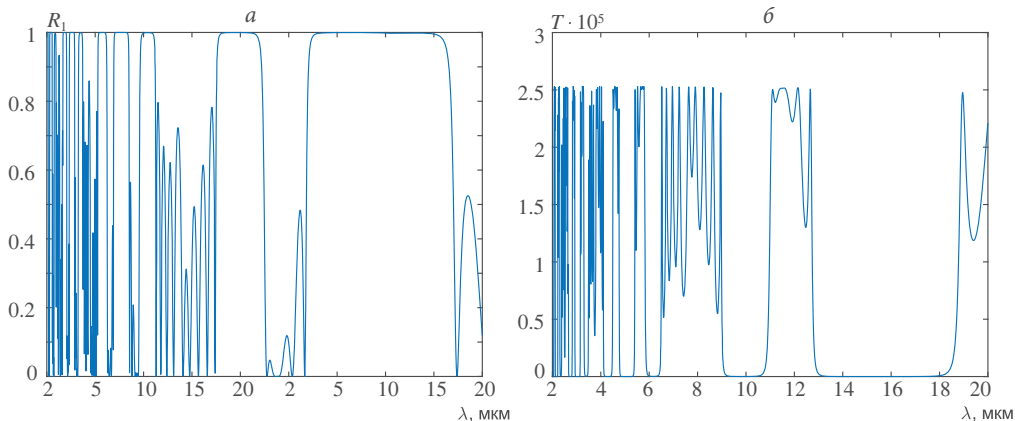


Рис. 7. Коэффициент отражения R (а) и пропускания T (б) для многослойной структуры S_i

так и большие значения, что и приводит к численной нестабильности. Другими словами, если применяется 2×2 метод матриц переноса (представленный в п. 2), нельзя рассматривать структуры (слои/гетероструктуры) произвольной толщины.

Для решения данной проблемы в [16] был предложен метод матриц рассеяния. Авторы статьи предлагают изучать матрицу рассеяния (S) относительно матрицы интерфейсов (I), например, вида (6) (или в соответствии с [17, 18]). Для упрощения расчетов за матрицу интерфейсов будем рассматривать выражение (5). Но следует отметить, что для получения адекватных результатов методом матриц рассеяния необходимо пересмотреть вид матриц интерфейсов, в частности, как сделано в работе [18], — матрицу интерфейсов можно представить как произведение матриц, зависящих от свойств материала.

Вернемся к ситуации, изображенной на рис. 1, и с учетом (1) перепишем формулу (3) относительно матриц рассеяния (вывод можно посмотреть, например, в [19]):

$$\begin{pmatrix} a_n \\ b_0 \end{pmatrix} = S(0, n) \begin{pmatrix} a_0 \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ b_n \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Условие согласования волновых функций на $(i + 1)$ -м интерфейсе будет выражаться через матрицу интерфейсов:

$$\begin{pmatrix} a_i \\ b_i \end{pmatrix} = I(i + 1) \begin{pmatrix} a_{i+1} \\ b_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_{11} & I_{12} \\ I_{21} & I_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{i+1} \\ b_{i+1} \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Для краткости $I(i + 1)$, $S(0, n)$ будем обозначать I , S соответственно. Далее после несложных операций по исключению a_n и b_n из (11) и (12) получим, что

$$\begin{pmatrix} a_{i+1} \\ b_0 \end{pmatrix} = A^{-1} B \begin{pmatrix} a_0 \\ b_{i+1} \end{pmatrix},$$

где A^{-1} обозначает обратную матрицу A ,

$$A = \begin{pmatrix} I_{11} - S_{12}I_{21} & 0 \\ -S_{22}I_{21} & 1 \end{pmatrix},$$

$$B = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12}I_{22} - I_{12} \\ S_{21} & S_{22}I_{22} \end{pmatrix}.$$

Таким образом, S можно выразить как

$$S = A^{-1}B = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}. \quad (13)$$

В итоге имеем матрицу рассеяния (13) в представлении матрицы интерфейсов вида (6). За $S(0, 0)$ берется единичная матрица в среде с левой стороны слоя. Выражение (13) для первого слоя будет строиться относительно $S(0, 0)$ и матрицы интерфейса первого слоя, для второго слоя — относительно матрицы рассеяния первого слоя и интерфейса между первым и вторым слоями и т. д. Таким образом, можно сказать, что процесс является итеративным.

Для слоистой структуры с толщиной слоя z матрицу рассеяния можно записать следующим образом (более подробно см. [18]):

$$S^{\text{tot}} = \begin{pmatrix} \exp(ikz) & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} S \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \exp(ikz) \end{pmatrix}. \quad (14)$$

В итоге получаем выражение (14), описывающее распространение волновой функции через слоистую среду.

Для численного вычисления R и T можно воспользоваться формулой (14) [19]:

$$R = \text{abs}(S_{21}^{\text{tot}})^2, \quad T = \text{abs}(S_{11}^{\text{tot}})^2.$$

3.1. Численные результаты. Как и в случае с методом матрицы переноса, применение метода матриц рассеяния для многослойных структур дает некорректные результаты в случае однослойных объектов. Поэтому для них предлагается использовать выражения для вычисления коэффициента отражения

$$A_{R,l} = \begin{pmatrix} I_{11} - S_{12}I_{21} & 0 \\ -S_{22}I_{21} & 1 \end{pmatrix}, \quad B_{R,l} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12}I_{22} - I_{12} \\ S_{21} & S_{22}I_{22} \end{pmatrix},$$

а для коэффициента пропускания

$$A_{T,l} = \begin{pmatrix} I_{11} - S_{12}I_{21} & 0 \\ -S_{22}I_{21} & 1 \end{pmatrix}, \quad B_{T,l} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12}T_{22} - T_{12} \\ S_{21} & S_{22}T_{22} \end{pmatrix},$$

в которых нижние индексы R и T указывают на соответствующий коэффициент, индекс l — на однослойность структуры. Для этого случая также были рассмотрены однослойные структуры, которые представлены в п. 2.1. Отметим, что численные результаты коэффициентов R и T хорошо согласуются с литературными данными.

Интересным с точки зрения экспериментов является определение коэффициентов отражения и пропускания многослойных структур. Для этого рассмотрим многослойную структуру, представленную на рис. 6.

Как показали численные результаты (рис. 8), при длине падающей волны $\lambda > 10$ мкм происходит полное отражение падающей волны от многослойной структуры. Как видно из рис. 8, метод матриц рассеяния дает завышенные результаты, как и для случая матриц переноса. Для обоснования этих результатов необходимы дополнительные натурные исследования. Наблюдается хорошее согласие наблюдаемых

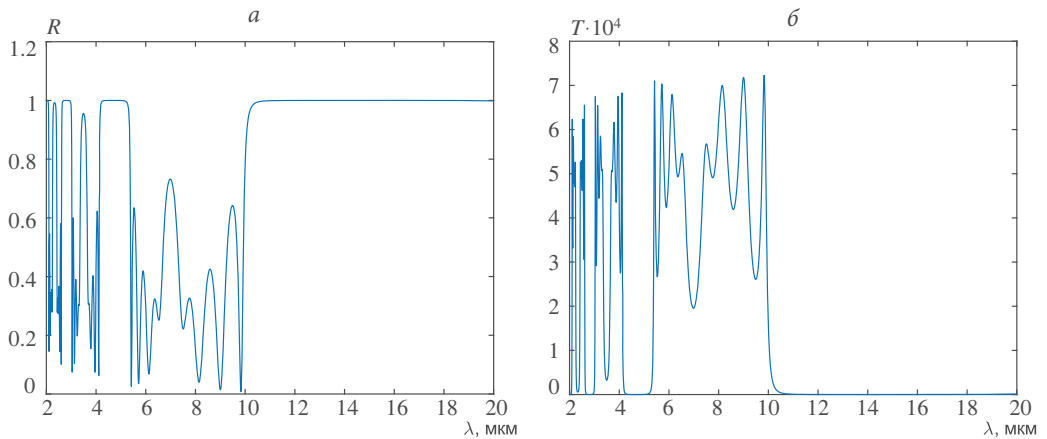


Рис. 8. Коэффициент отражения (а) и пропускания (б) для многослойной структуры Si

максимумов и минимумов коэффициентов отражения с экспериментальными данными (см. [15]) по сравнению с методом матриц переноса.

Полученные результаты для методов матриц рассеяния и переноса представлены на рис. 9. Они показывают, что в обоих случаях коэффициент пропускания завышен, а это требует дополнительных натурных исследований. Также следует отметить, что оба метода дают примерно одинаковые результаты при длинах волн более 10 мкм, электромагнитная волна практически полностью отражается от исследуемого материала. Максимумы и минимумы коэффициентов отражения более близки к экспериментальным данным, полученным методом матриц рассеяния, чем методом матриц переноса.

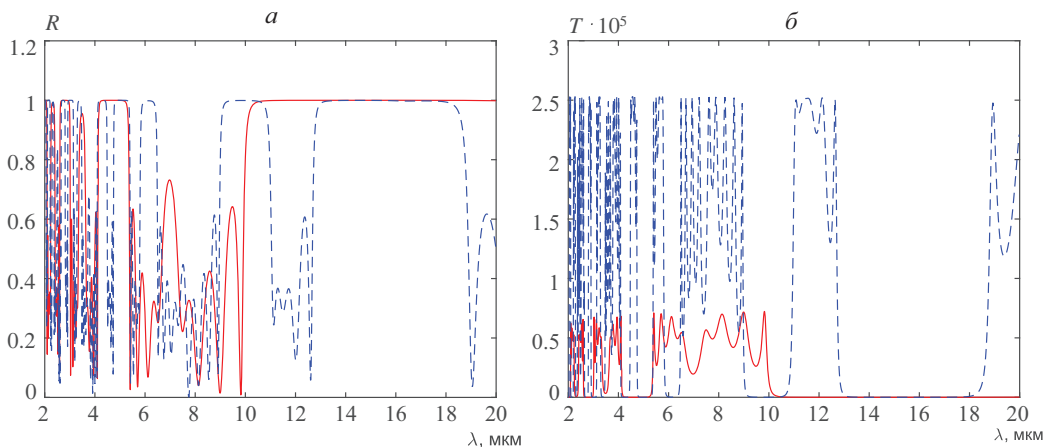


Рис. 9. Сравнение результатов вычисления коэффициентов отражения (а) и пропускания (б) методами матриц рассеяния (сплошная линия, SMM) и матриц переноса (пунктирная линия, TMM) при длине волны $\lambda = 2\text{--}20$ мкм

4. Заключение. Были проанализированы методы матриц переноса и рассеяния для расчета коэффициентов отражения и пропускания благородных металлов (Ag, Cu, Au) и полупроводниковых материалов (Ge, Si, GaAs). Рассматривались как

однослойные, так и многослойные структуры. Применялись следующие допущения (для обоих методов): изучаемые материалы изотропны и однородны; волна падает под прямым углом, как следствие, не учитывается поляризация.

Численные результаты для однослойных структур показали, что выражения для многослойных структур дают некорректные результаты для обоих методов. Поэтому в данной работе были предложены выражения для расчета коэффициентов отражения и пропускания для однослойных структур для обоих методов. Для многослойных структур максимумы и минимумы коэффициентов отражения более близки к экспериментальным данным, полученным методом матриц рассеяния, чем методом матриц переноса.

Для обоих случаев коэффициент пропускания для многослойных структур завышен, а это требует дополнительных натурных исследований. Численные результаты методом матриц переноса показывают практически полное отражение от многослойной структуры при длине волны более 10 мкм, для метода матриц рассеяния — полное отражение.

Литература

1. Egorov N. V., Antonova L. I., Karpov A. G., Trofimov V. V., Fedorov A. G. Theoretical and experimental evaluation of the electrical parameters of a holographic microscope // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2020. Vol. 14. P. 1061–1065. <https://doi.org/10.1134/S1027451020050250>
2. Egorov N. V., Karpov A. G., Antonova L. I., Fedorov A. G., Trofimov V. V., Antonov S. R. Technique for investigating the spatial structure of thin films at a nanolevel // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2011. Vol. 5. N 5. P. 992–995. <https://doi.org/10.1134/S1027451011100089>
3. Abeles F. Sur la propagation des ondes electromagnetiques dans les milieux stratifies // Ann. Phys. (Paris). 1948. N 3. P. 504–520. <https://doi.org/10.1051/anphys/194812030504>
4. Koji O., Hatsuo I. Matrix formalism for calculation of electric field intensity of light in stratified multilayered films // Applied Optics. 1990. Vol. 29. N 13. P. 1952–1959. <https://doi.org/10.1364/ao.29.001952>
5. Charalambos C. K., Dimitrios I. S. General transfer-matrix method for optical multilayer systems with coherent, partially coherent, and incoherent interference // Applied Optics. 2002. Vol. 41. N 19. P. 3978–3987. <https://doi.org/10.1364/AO.41.003978>
6. Aspnes D. E., Studna A. A. Dielectric functions and optical parameters of Si, Ge, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV // Physical Review B. 1983. Vol. 27. P. 985–1009. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.27.985>
7. Polyanskiy M. N. Refractiveindex.info database of optical constants // Sci. Data. 2024. Vol. 11. Art. N 94. <https://doi.org/10.1038/s41597-023-02898-2>
8. Johnson P. B., Christy R. W. Optical constants of the noble metals // Physical Review B. 1972. Vol. 6. N 12. P. 4370–4379. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.6.4370>
9. Shkondin E., Takayama O., Aryaee P. M. E., Liu P., Larsen P. V., Mar M. D., Jensen F., Lavrinenko A. V. Large-scale high aspect ratio Al-doped ZnO nanopillars arrays as anisotropic metamaterials // Opt. Mater. Express. 2017. Vol. 7. P. 1606–1627. <https://doi.org/10.1364/OME.7.001606>
10. Ciesielski A., Skowronski L., Trzinski M., Szoplik T. Controlling the optical parameters of self-assembled silver films with wetting layers and annealing // Appl. Surf. Sci. 2017. Vol. 421B. P. 349–356. <https://doi.org/10.1016/j.apusuc.2017.01.039>
11. Quarry M. R. Optical constants. 1985. Contractor Report CRDC-CR-85034.
12. Amotchkina T., Trubetskov M., Hahner D., Pervak V. Characterization of e-beam evaporated Ge, YbF₃, ZnS, and LaF₃ thin films for laser-oriented coatings // Applied Optics. 2020. Vol. 59. P. A40–A47. <https://doi.org/10.1364/AO.59.000A40>
13. Olmon R. L., Slovick B., Johnson T. W., Shelton D., Oh S.-H., Boreman G. D., Raschke M. B. Optical dielectric function of gold // Physical Review. 2012. Vol. B86. Art. N 235147. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.235147>
14. Papatryfonos K., Angelova T., Brimont A., Reid B., Guldin S., Smith P. R., Tang M., Li K., Seeds A. J., Liu H., Selviah D. R. Refractive indices of MBE-grown Al_xGa_{1-x}As ternary alloys in the

transparent wavelength region // AIP Adv. 2021. Vol. 11. Art. N 025327.
<https://doi.org/10.1063/5.0039631>

15. *Dyakov S. A., Tolmachev V. A., Astrova E. V., Tikhodeev S. G., Timoshenko V. Yu., Perova T. S.* Numerical methods for calculation of optical properties of layered structures // Proceedings of SPIE 7521. International Conference on Micro- and Nano-Electronics. 2009. Art. N 75210G.
<https://doi.org/10.1117/12.862566>

16. *Yuk Kei Ko D., Inkson J. C.* Matrix method for tunneling in heterostructures: Resonant tunneling in multilayer systems // Physical Review B. 1988. Vol. 38. N 14. P. 9945–9951.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.38.9945>

17. *Lifeng Li.* Formulation and comparison of two recursive matrix algorithms for modeling layered diffraction gratings // Journal of Opt. Soc. Amer. A. 1996. Vol. 13. N 5. P. 1024–1035.
<https://doi.org/10.1364/JOSAA.13.001024>

18. *Tikhodeev S. G., Yablonskii A. L., Muljarov E. A., Gippius N. A., Teruya I.* Quasiguidded modes and optical properties of photonic crystal slabs // Physical Review B. 2002. Vol. 66. Art. N 045102(17).
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.045102>

19. *Whittaker D. M.* Scattering-matrix treatment of patterned multilayer photonic structures // Physical Review B. 1989. Vol. 60. N 4. P. 2610–2618. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.60.2610>

Статья поступила в редакцию 2 мая 2024 г.

Статья принята к печати 4 октября 2024 г.

К о н т а к т н а я и н ф о р м а ц и я :

Егоров Николай Васильевич — д-р физ.-мат. наук, проф.; <https://orcid.org/0000-0003-4721-1377>,
n.v.egorov@spbu.ru

Федоров Артур Григорьевич — канд. техн. наук, доц.; <https://orcid.org/0000-0002-8905-9564>,
ag.fedorov@s-vfu.ru

Трофимов Василий Валерьевич — ст. преп.; <https://orcid.org/0000-0003-4093-728X>,
v.v.trofimov@spbu.ru

Comparison transfer matrix methods and scattering matrix method for investigation the optical properties of multilayer structures

N. V. Egorov¹, A. G. Fedorov², V. V. Trofimov¹

¹ St. Petersburg State University, 7–9, Universitetskaya nab., St. Petersburg, 199034, Russian Federation

² M. K. Ammosov North-Eastern Federal University, 58, ul. Belinskogo, Yakutsk, 677027, Russian Federation

For citation: Egorov N. V., Fedorov A. G., Trofimov V. V. Comparison transfer matrix methods and scattering matrix method for investigation the optical properties of multilayer structures. *Vestnik of Saint Petersburg University. Applied Mathematics. Computer Science. Control Processes*, 2024, vol. 20, iss. 4, pp. 432–445. <https://doi.org/10.21638/spbu10.2024.401> (In Russian)

This article presents an analysis of transfer matrix method (TMM) and scattering matrix method (SMM) for determining reflection and transmission coefficients of thin films. Investigated single layer structures of semiconductor materials (Si, Ge, GaAs), noble metals (Ag, Au, Cu) and multilayer structure of Si. Numeric results were getting in two diapason wavelengths: $\lambda = 0.2067\text{--}0.8267 \mu\text{m}$ and $\lambda = 0.2\text{--}20 \mu\text{m}$. In this work obtained with TMM and SMM the reflection and transmission coefficient of layer structures. Numerical results of reflection coefficients of all investigation structures were exactly match with literature data. But results we got for the transmission coefficients did not match of literature data for the both of method. This mismatch is investigated, as we assume from some of normalization coefficient, corresponding a refractive index of right side of medium which we didn't take into account.

Keywords: transfer matrix methods, scattering matrix method, reflection coefficient, transmission coefficient, layer structures.

References

1. Egorov N. V., Antonova L. I., Karpov A. G., Trofimov V. V., Fedorov A. G. Theoretical and experimental evaluation of the electrical parameters of a holographic microscope. *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 2020, vol. 14, pp. 1061–1065. <https://doi.org/10.1134/S1027451020050250>
2. Egorov N. V., Karpov A. G., Antonova L. I., Fedorov A. G., Trofimov V. V., Antonov S. R. Technique for investigating the spatial structure of thin films at a nanolevel. *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 2011, vol. 5, no. 5, pp. 992–995. <https://doi.org/10.1134/S1027451011100089>
3. Abeles F. Sur la propagation des ondes electromagnetiques dans les milieux stratifies. *Ann. Phys. (Paris)*, 1948, no. 3, pp. 504–520. <https://doi.org/10.1051/anphys/194812030504>
4. Koji O., Hatsuo I. Matrix formalism for calculation of electric field intensity of light in stratified multilayered films. *Applied Optics*, 1990, vol. 29, no. 13, pp. 1952–1959. <https://doi.org/10.1364/ao.29.001952>
5. Charalambos C. K., Dimitrios I. S. General transfer-matrix method for optical multilayer systems with coherent, partially coherent, and incoherent interference. *Applied Optics*, 2002, vol. 41, no. 19, pp. 3978–3987. <https://doi.org/10.1364/AO.41.003978>
6. Aspnes D. E., Studna A. A. Dielectric functions and optical parameters of Si, Ge, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV. *Physical Review B*, 1983, vol. 27, pp. 985–1009. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.27.985>
7. Polyanskiy M. N. Refractiveindex.info database of optical constants. *Sci. Data*, 2024, vol. 11, art. no. 94. <https://doi.org/10.1038/s41597-023-02898-2>
8. Johnson P. B., Christy R. W. Optical constants of the noble metals. *Physical Review B*, 1972, vol. 6, no. 12, pp. 4370–4379. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.6.4370>
9. Shkondin E., Takayama O., Aryaee P. M. E., Liu P., Larsen P. V., Mar M. D., Jensen F., Lavrinenko A. V. Large-scale high aspect ratio Al-doped ZnO nanopillars arrays as anisotropic metamaterials. *Opt. Mater. Express*, 2017, vol. 7, pp. 1606–1627. <https://doi.org/10.1364/OME.7.001606>
10. Ciesielski A., Skowronski L., Trzinski M., Szoplík T. Controlling the optical parameters of self-assembled silver films with wetting layers and annealing. *Appl. Surf. Sci.*, 2017, vol. 421B, pp. 349–356. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.01.039>
11. Querry M. R. Optical constants, 1985. Contractor Report CRDC-CR-85034.
12. Amotchkina T., Trubetskoy M., Hahner D., Pervak V. Characterization of e-beam evaporated Ge, YbF₃, ZnS, and LaF₃ thin films for laser-oriented coatings. *Applied Optics*, 2020, vol. 59, pp. A40–A47. <https://doi.org/10.1364/AO.59.000A40>
13. Olmon R. L., Slovick B., Johnson T. W., Shelton D., Oh S.-H., Boreman G. D., Raschke M. B. Optical dielectric function of gold. *Physical Review*, 2012, vol. 86, art. no. 235147. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.235147>
14. Papatryfonos K., Angelova T., Brimont A., Reid B., Guldin S., Smith P. R., Tang M., Li K., Seeds A. J., Liu H., Selviah D. R. Refractive indices of MBE-grown AlxGa1-xAs ternary alloys in the transparent wavelength region. *AIP Adv.*, 2021, vol. 11, art. no. 025327. <https://doi.org/10.1063/5.0039631>
15. Dyakov S. A., Tolmachev V. A., Astrova E. V., Tikhodeev S. G., Timoshenko V. Yu., Perova T. S. Numerical methods for calculation of optical properties of layered structures. *Proceedings of SPIE 7521. International Conference on Micro- and Nano-Electronics*, 2009, art. no. 75210G. <https://doi.org/10.1117/12.862566>
16. Yuk Kei Ko D., Inkson J. C. Matrix method for tunneling in heterostructures: Resonant tunneling in multilayer systems. *Physical Review B*, 1988, vol. 38, no. 14, pp. 9945–9951. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.38.9945>
17. Lifeng Li. Formulation and comparison of two recursive matrix algorithms for modeling layered diffraction gratings. *Journal of Opt. Soc. Amer. A*, 1996, vol. 13, no. 5, pp. 1024–1035. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.13.001024>
18. Tikhodeev S. G., Yablonskii A. L., Muljarov E. A., Gippius N. A., Teruya I. Quasiguided modes and optical properties of photonic crystal slabs. *Physical Review B*, 2002, vol. 66, art. no. 045102(17). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.045102>
19. Whittaker D. M. Scattering-matrix treatment of patterned multilayer photonic structures. *Physical Review B*, 1989, vol. 60, no. 4, pp. 2610–2618. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.60.2610>

Received: May 2, 2024.

Accepted: October 4, 2024.

A u t h o r s' i n f o r m a t i o n:

Nikolay V. Egorov — Dr. Sci. in Physics and Mathematics, Professor;
<https://orcid.org/0000-0003-4721-1377>, n.v.egorov@spbu.ru

Arthur G. Fedorov — PhD in Engineering, Associate Professor;
<https://orcid.org/0000-0002-8905-9564>, ag.fedorov@s-vfu.ru

Vasiliy V. Trofimov — Senior Lecturer; <https://orcid.org/0000-0003-4093-728X>,
v.v.trofimov@spbu.ru