

INTERACTIONS OF RADIATION AND PARTICLES WITH CONDENSED MATTER

PACS numbers: 41.20.Jb, 42.25.Bs, 42.25.Fx, 42.25.Gy, 73.20.Mf, 78.66.-w, 81.65.Ps

Числовий розрахунок умов фотохімічного субнанополірування шерсткої поверхні кварцу при освітленні з боку кварцу

В. І. Григорук, В. І. Канєвський*, С. О. Колєнов

*Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
вул. Володимирська, 60,
01033 Київ, Україна*

**Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка НАН України,
вул. Генерала Наумова, 17,
03164 Київ, Україна*

Описана числова процедура розрахунку розсіяння світла на шерсткій поверхні кварцу, причому профіль згаданої поверхні має гаусову просторову кореляційну функцію. Використано кінцево-елементний підхід для розв'язку двовимірного векторного рівняння Гельмгольца. При освітленні такої поверхні з боку кварцу, коли кут падіння променя дорівнює критичному куту й коли середньоквадратичне відхилення δ шерсткості незначне ($\delta < 10$ нм), отримано наступні результати: (а) в залежності від фази хвилі, що падає, її гребінь змінює своє положення уздовж роздільної межі; (б) величина даного гребеня в області виступів має значно більші значення, ніж в області западин, створюючи оптимальні умови для субнанополірування даної поверхні; (в) при збільшенні довжини кореляції шерсткої поверхні кварцу контрастність поля уздовж згаданої поверхні зменшується, причому вона практично не залежить від довжини хвилі,

Corresponding author: Vasyl Ivanovych Kanevskii
E-mail: vikanev@ukr.net

*Taras Shevchenko National University of Kyiv,
60 Volodymyrska Str., UA-01033 Kyiv, Ukraine
*Chuiiko Institute of Surface Chemistry, N.A.S. of Ukraine,
17 General Naumov Str., UA-03164 Kyiv, Ukraine*

Citation: V. I. Grigoruk, V. I. Kanevskii, and S. O. Kolienov, Numerical Calculation of the Conditions for Photochemical Subnanopolishing of a Rough Quartz Surface under Illumination from Quartz Side, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **42**, No. 1: 105–121 (2020) (in Ukrainian), DOI: [10.15407/mfint.42.01.0105](https://doi.org/10.15407/mfint.42.01.0105).

що падає.

Ключові слова: поверхневий плазмонний резонанс, розсіяння плоских електромагнітних хвиль, векторне рівняння Гельмгольца.

The numerical procedure for calculation of light scattering on a rough surface of quartz is described. The profile of this surface has a Gaussian spatial correlation function. The finite-element approach is used to solve the Helmholtz two-dimensional vector equation. At the illumination of such surface from quartz side, when the angle of incidence of a beam is equal to a critical angle and when the mean square deviation δ of roughness is negligible ($\delta < 10$ nm), the following results are obtained: (a) depending on the phase of the incident wave, its crest changes its position along the interface region; (b) the value of this crest in the regions of surface peaks is much greater than in the regions of the valleys, that creates optimal conditions for sub-nano-polishing of this surface; (c) the contrast of the field along the above surface decreases when the length of the correlation of quartz rough surface increases, and it practically does not depend on the length of the incident wave.

Key words: surface plasmon resonance, scattering of plane electromagnetic waves, Helmholtz vector equation.

Описана числовая процедура расчёта рассеяния света на шероховатой поверхности кварца, причём профиль упомянутой поверхности имеет гауссову пространственную корреляционную функцию. Использован конечно-элементный подход для решения двумерного векторного уравнения Гельмгольца. При освещении такой поверхности со стороны кварца, когда угол падения луча равен критическому углу и когда среднее отклонение δ шероховатости незначительное ($\delta < 10$ нм), получены следующие результаты: (а) в зависимости от фазы падающей волны её гребень меняет своё положение вдоль границы раздела; (б) величина данного гребня в области выступов имеет значительно большие значения, чем в области впадин, создавая оптимальные условия для субнанополировки данной поверхности; (в) при увеличении длины корреляции шероховатой поверхности кварца контрастность поля вдоль данной поверхности уменьшается, причём она практически не зависит от длины падающей волны.

Ключевые слова: поверхностный плазмонный резонанс, рассеяние плоских электромагнитных волн, векторное уравнение Гельмгольца.

(Отримано 2 липня 2019 р.; остаточн. варіант — 28 листопада 2019 р.)

1. ВСТУП

Важливою характеристикою багатьох оптичних елементів є ступінь неоднорідності (шерсткості) їх поверхні. Відомий ряд методів, застосування яких зменшує шерсткість поверхні, а саме: (а) хіміко-механічні способи полірування [1], (б) вакуумне іонно-променеве щавлення [2], (с) використання оптимального ближнього поля [3].

У випадку (с) процедура фотохімічного субнанополірування поверхні вимагає виконання наступних операцій. Платівку (зразок) з кварцу, що має нанометровий рівень шерсткості поверхні, розташовують на горизонтальній поверхні трикутної призми також із кварцу (рис. 1). Далі, їх розміщують у вакуумній камері, заповненій молекулярним хлором, хімічної активності якого недостатньо, щоб вступити в реакцію з кварцом при кімнатній температурі.

При опроміненні бокової грані призми лазерний промінь проходить крізь призму, потрапляє в платівку і частково відбивається від верхньої сторони даної платівки. У випадку, коли процес відбиття відбувається під кутом не меншим ніж кут повного внутрішнього відбиття, над верхньою поверхнею платівки утворюється еванесцентне поле. Це поле, яке різко спадає при віддаленні від її поверхні, сприяє фотодисоціації молекулярного хлору, що знаходиться поблизу згаданої платівки. Внаслідок цього, на ділянках підвищеного еванесцентного поля, а саме, там, де є виступи нанонеоднорідностей, виникають умови для утворення, зокрема, атомарного хлору та його іонів. Поляризуючись в зовнішньому електромагнітному полі, вони притягуються до поверхні платівки, яка також поляризується під дією вказаного поля. Під дією електромагнітного випромінювання взаємодія атомарного хлору з поверхнею платівки кварцу має більш активний характер на ділянках виступів неоднорідностей, що призводить до локального щавлення кварцу і, як наслідок, зменшує шерсткість поверхні зразка [4].

Таким чином, задачу субнанополірування шерсткої поверхні кварцу можна умовно розділити на декілька етапів: (а) електродинамічний розрахунок параметрів еванесцентного поля в ближній зоні нанонеоднорідностей шерсткої поверхні кварцу; (б) квантово-хімічний розрахунок взаємодії продуктів фотодисоціації молекулярного хлору з поверхнею кремнезему, який враховує вплив зовнішнього електромагнітного поля; взаємодія атомарного хлору та його іонів з поверхнею кремнезему; (в) опис результатів натурального експерименту ближньопольового полірування поверхні кварцу.

Метою даної роботи є (і) розрахунок конфігурації напруженості електромагнітного випромінювання, вектора Пойнтінга вздовж роздільної межі «кварц–вакуум», що забезпечує необхідні умови для ефективного щавлення кварцу в ділянках виступів поверхні кварцу та відсутність такого щавлення в ділянках западин; (ii) визначення умов забезпечення необхідного контрасту електричного поля на поверхні зразка, які, вочевидь, пов'язані з формою поверхні зразка та параметрами її шерсткості, а також з довжиною хвилі електромагнітного випромінювання. На думку авторів, вибір профілю, який описується випадковою функцією, що має гаусову просторову кореляційну функцію, фактично показує зв'язок параметрів хвилі еванесцентного поля, яка розповсюджується уздовж роздільної

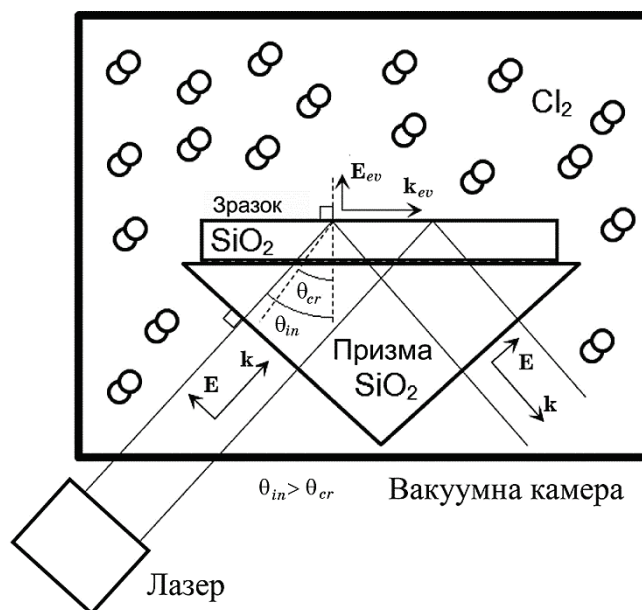


Рис. 1. Загальна схема фотохімічного субнанополірування шерсткої поверхні кварцу, де k_{ev} і E_{ev} — хвильовий вектор і напруженість еванесцентного поля відповідно, θ_{in} — кут падіння лазерного випромінювання на верхню поверхню кварцової платівки; θ_{cr} — критичний кут.

Fig. 1. The general scheme of photochemical sub-nano-polishing of the rough surface of quartz, where k_{ev} and E_{ev} are the wave vector and the strength vector of the evanescent field, respectively, θ_{in} is the incident angle of laser radiation on the upper surface of the quartz plate, θ_{cr} is the critical angle.

межі «кварц–вакуум», з просторовим спектром даного профілю поверхні.

Для виконання розрахунків було розроблене власне програмне забезпечення, що реалізує розв’язок системи рівнянь Максвелла з використанням методу кінцевих елементів.

2. МОДЕЛЬ ДЛЯ ЧИСЛОВОГО РОЗРАХУНКУ ПАРАМЕТРІВ ЕВАНЕСЦЕНТНОГО ПОЛЯ В БЛИЖНІЙ ЗОНІ ПОВЕРХНІ КВАРЦУ

На рисунку 2 показана двовимірний область для розрахунку параметрів еванесцентного поля у ближній зоні нанонеоднорідностей шерсткої поверхні кварцу, в якій роздільна межа «кварц–вакуум» є однією з реалізацій випадкового профілю, що має гаусову просторову кореляційну функцію. На рисунку відстані t , S_1 , δ , S_2 , w — відповідно товщина поглинаючого шару, відстань між верхнім поглинаю-

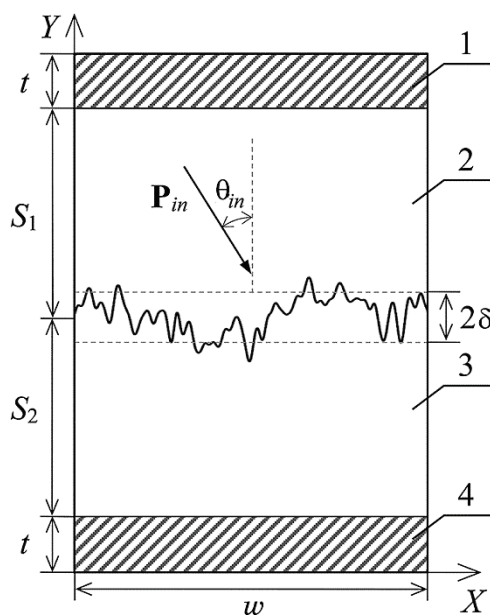


Рис. 2. Двовимірний ділянка для розрахунку параметрів еванесцентного поля в ближній зоні нанонеоднорідностей шерсткої поверхні кварцу. Ділянки 1–4 є відповідно ділянкою верхнього поглинаючого шару, шаром кварцу, вакуумом, ділянкою нижнього поглинаючого шару.

Fig. 2. 2D section used to calculate evanescent field parameters in the near-field region of the nanoirregularities of the quartz rough surface. Regions 1–4 are the region of the upper absorbing layer, the quartz layer, the vacuum, and the region of the lower absorbing layer, respectively.

чим шаром і середньою лінією роздільної межі «кварц–вакуум», середнє квадратичне відхилення шерсткої поверхні кварцу, відстань між середньою лінією роздільної межі «кварц–вакуум» і нижнім поглинаючим шаром, ширина розрахункової комірки; \mathbf{P}_{in} , θ_{in} — вектор Пойнтінга хвилі, що падає, та кут, під яким падає дана хвиля.

Верхню і нижню внутрішні горизонтальні лінії двовимірної комірки (рис. 2) виберемо відповідно як джерело та приймач випромінювання, що падає. Праворуч і ліворуч розрахункову комірку обмежуємо вертикальними лініями, вздовж яких виконуються періодичні граничні умови. Об'ємний кварц в ділянці 2 має коефіцієнт заломлення $n = 1,5168$. Втратами нехтуємо. Профіль шерсткої поверхні кварцу характеризується параметрами шерсткості δ та σ , де σ — довжина кореляції. Вважаємо, що в просторовому спектрі шерсткої поверхні кварцу відсутні особливості попередньої обробки (полірування) поверхні кварцу, а саме, відсутнє домінування ви-

ступів чи западин.

При побудові згаданого профілю були враховані такі особливості: (i) випадкові амплітуди спектральних складових просторового спектра профілю мають стандартний нормальний закон розподілу ймовірності; (ii) випадкові фази спектральних складових просторового спектра профілю мають рівномірний розподіл ймовірності на інтервалі від 0 до 2π ; (iii) розподіл амплітуд спектральних складових в просторовому спектрі профілю шерсткої поверхні із заданою довжиною кореляції σ задається фільтруючою функцією, що має форму функції Гауса з параметрами шерсткості δ та σ . Також зауважимо, що у даному випадку довжина кореляції σ шерсткої поверхні кварцу відповідає значенню аргументу кореляційної функції даної поверхні, при якому ця кореляційна функція зменшується в e разів.

В роботі [5] було показано, що існує безпосередній зв'язок між енергетичним просторовим спектром шерсткої поверхні $|S(v)|^2$ та параметрами шерсткості цієї поверхні, а саме середньоквадратичним відхиленням поверхні δ та довжиною кореляції шерсткої поверхні σ . Якщо випадкова функція форми поверхні має кореляційну функцію з гаусовим розподілом, то цей зв'язок в одновимірному випадку можна записати у вигляді

$$|S(v)|^2 = \sqrt{\pi} \delta^2 \sigma \exp(-\pi^2 \sigma^2 v^2), \quad (1)$$

де v — просторова частота профілю шерсткої поверхні. Зауважимо, що ця залежність, відображена у логарифмічному масштабі, показує лінійний зв'язок між значеннями функції $|S(v)|^2$ та v^2 . Це дозволяє отримати параметри δ та σ і таким чином перевірити правильність вибору профілю шерсткої поверхні кварцу.

Розподіл напруженості електричного поля монохроматичної хвилі E_m в областях 2–3 (рис. 2) розраховується на основі розв'язку однорідного векторного рівняння Гельмгольца [6]:

$$\nabla \times (\mu_r^{-1} \nabla \times E_m) - k_0^2 \epsilon_r E_m = 0, \quad (2)$$

де ϵ_r , μ_r — тензори другого порядку відносної комплексної діелектричної і магнітної проникностей, k_0 — хвильове число у вільному просторі. Вважаємо, що об'єкти, які охоплює розрахункова комірка, не мають магнітних властивостей ($\mu_r = 1$).

Для розв'язку рівняння (2) виберемо кінцево-елементний підхід, який складається з методу Гальоркіна та, власне, з методу кінцевих елементів [7]. Трикутники були використані як векторні кінцеві елементи.

Зауважимо, що знизу та зверху розрахункової комірки (рис. 2) розташовуються поглинаючі шари, які моделюють умови випромі-

нювання Зомерфельда на нескінченності [6, 7]:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r \left(\frac{\partial \mathbf{E}_m}{\partial r} + j k_0 \mathbf{E}_m \right) = 0, \quad (3)$$

де r — відстань між точкою розсіювання променя і точкою спостереження, розташованій в далекій зоні. Числова реалізація умов випромінювання (3) здійснювалась шляхом застосування локального наближення (вибрано метод абсолютно поглинаючих шарів) [8, 9].

Поляризована в площині падіння плоска ТМ-хвиля використана як джерело світла. Вона розсіюється на роздільчій межі «кварц-вакуум». Її напрямок руху представимо за допомогою вектора Пойнтінга \mathbf{P} , що направлений під кутом θ_m відносно осі Y , причому на взразну роздільчу межу ТМ-хвиля падає з боку кварцу.

Зважаючи на те, що напруженості електричного \mathbf{E} і магнітного \mathbf{H} полів можна записати у вигляді

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{E}_m e^{j\omega t} + \mathbf{E}_m^* e^{-j\omega t}), \quad \mathbf{H} = \frac{1}{2} (\mathbf{H}_m e^{j\omega t} + \mathbf{H}_m^* e^{-j\omega t}),$$

то вектор Пойнтінга можемо представити як

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}_{av} + \mathbf{P}_{var}, \quad \mathbf{P}_{av} = \frac{1}{2} \operatorname{Re} (\mathbf{E}_m \times \mathbf{H}_m^*), \quad \mathbf{P}_{var} = \frac{1}{2} \operatorname{Re} (\mathbf{E}_m \times \mathbf{H}_m e^{j2\varphi(t)}), \quad (4)$$

де $\varphi(t) = \omega t$ — фаза хвилі, що падає; ω — циклічна частота; t — час; $\mathbf{E}_m, \mathbf{E}_m^*, \mathbf{H}_m, \mathbf{H}_m^*$ — комплексні амплітуди векторів \mathbf{E} і \mathbf{H} та їх комплексно-спряжених значень, \mathbf{P}_{av} — постійна складова вектора Пойнтінга (активна потужність), \mathbf{P}_{var} — змінна складова вектора Пойнтінга (реактивна потужність). Зауважимо, що співвідношення (4) дають можливість однозначно описати хвильовий процес поширення енергії, яка розповсюджується в розрахунковій комірці.

Будемо вважати, що контрастність K еванесцентного поля між виступами й западинами уздовж межі розділу «кварц-вакуум» (рис. 2), визначається за допомогою співвідношення: $K = |E_1 - E_2| / (E_1 + E_2)$, де E_1, E_2 — амплітуди еванесцентного поля в ділянках виступів і западин, розташування яких визначається по відношенню до середньої лінії вказаної межі.

3. АНАЛІЗ ОТРИМАНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ

Одним зі способів перевірки правильності розрахунків числової моделі є розрахунок коефіцієнта відбиття R у випадку, коли, наприклад, між зразком з кварцу з плоскою поверхнею і вакуумом розмістити плівку золота товщиною d . Коефіцієнт відбиття при цьому можна отримати із співвідношення:

$$R = \left(\frac{E_{out}^{av}}{E_{in}^{av}} \right)^2, \quad (5)$$

де E_{in}^{av} , E_{out}^{av} — середні значення комплексних амплітуд векторів напруженостей електричного поля уздовж верхньої внутрішньої горизонтальної лінії розрахункової комірки у випадку хвилі, що падає та відбивається, відповідно. Оптичні константи n , η (n — показник заломлення, дійсна частина; η — показник заломлення, уявна частина) для золота були взяті з роботи [10], звідки випливає, що в діапазоні довжин хвиль $\lambda \in [400-650]$ нм дійсна частина діелектричної проникності $\epsilon'(\lambda)$ має особливість: $\epsilon'(\lambda) \leq 0$ ($\epsilon'(\lambda) = n^2 - \eta^2$). Отже, при розсіюванні плоскої електромагнітної хвилі на зразку із золота (у вказаному діапазоні довжин хвиль), є умови для виникнення плазмонного резонансу на його поверхні. Товщина плівки золота і довжина хвилі, що падає, визначають різні залежності коефіцієнта відбиття R від кута падіння θ_{in} , які зображені на рис. 3.

Зауважимо, що при фіксованій товщині плівки, підлаштовуючи кут падіння променя θ_{in} , можливо задовольнити умовам збудження поверхневих плазмонів-поляритонів (ППП) на межі розділу «плівка золота–вакуум» (привести у відносну відповідність тангенційні компоненти хвильових векторів фотона і плазмона на шерсткій по-

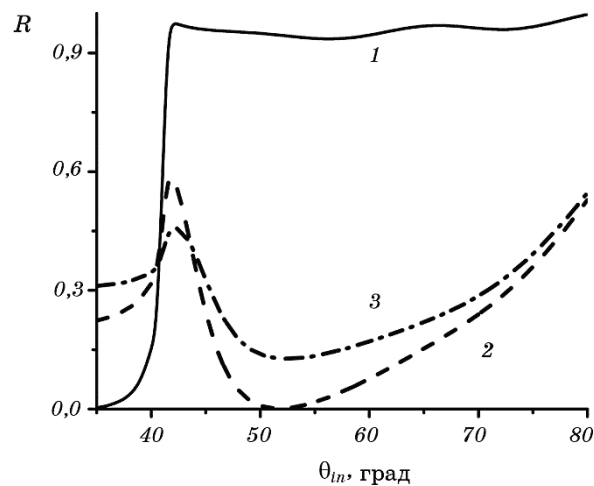


Рис. 3. Залежність коефіцієнта відбиття R від кута падіння θ_{in} світлової хвилі з довжиною $\lambda_{in} = 500$ нм, коли товщина шару гладкої поверхні золота має значення $d = 1$ нм (крива 1), $d = 30$ нм (крива 2), $d = 50$ нм (крива 3).

Fig. 3. Dependences of the reflection coefficient on the angle of incidence θ_{in} of the light wave with $\lambda_{in} = 500$ nm when the thickness of the gold film are $d = 1$ nm (curve 1), $d = 20$ nm (curve 2), $d = 30$ nm (curve 3), $d = 50$ nm (curve 4).

верхні плівки золота). Мінімум коефіцієнта відбиття R при незмінних інших параметрах відповідає згаданим умовам збудження ППП. Це призводить до часткового перетворення енергії лазерного променя в ППП [11, 12]. Занадто тонка плівка золота сприяє прискореному затуханню ППП (посилене зворотне перевипромінювання). Занадто товста плівка золота також сприяє прискореному затуханню ППП (підвищене поглинання в товщі плівки). Нульове значення коефіцієнта відбиття R відповідає оптимальним умовам збудження ППП. Отримані результати повністю узгоджуються з результатами, представленими у роботах [11, 12]. Таким чином, можна вважати, що побудована модель є правильною і її можна застосовувати для дослідження параметрів поля поблизу шерсткої поверхні кварцу на межі «кварц–вакуум».

Розглянемо розподіл модуля напруженості електричного поля уздовж роздільної межі «кварц–вакуум» при різних значеннях кута падіння (рис. 4). У випадку, коли $\theta_{in} = 42^\circ$, просторовий профіль (крива 4) і розподіл поля (крива 2), в цілому, будуть повторювати одне одного, тобто максимуми й мінімуми поля будуть співпадати з

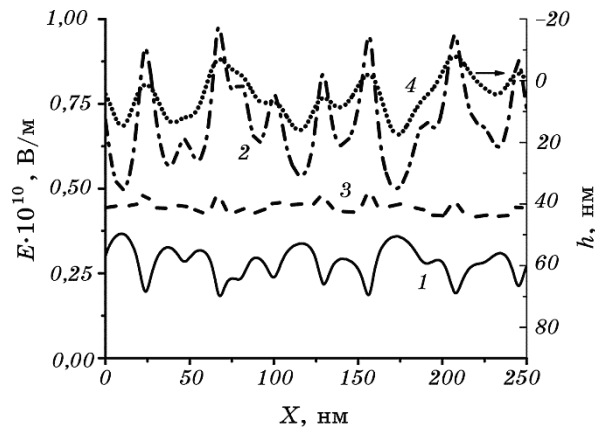


Рис. 4. Розподіл модуля напруженості електричного поля уздовж роздільної межі «кварц–вакуум» (шкала ліворуч) при різних значеннях кута падіння: $\theta_{in} = 0^\circ$ (крива 1); $\theta_{in} = 42^\circ$ (крива 2); $\theta_{in} = 70^\circ$ (крива 3). Розподіл висоти профілю уздовж згаданої межі (шкала праворуч), яка описується випадковою функцією форми поверхні (крива 4) з параметрами: $\delta = 10$ нм, $\sigma = 13,5$ нм.

Fig. 4. Distribution of electric field strength module along the ‘quartz–vacuum’ interface (the scale is located on the left side) at the different incident angles: $\theta_{in} = 0^\circ$ (curve 1), $\theta_{in} = 42^\circ$ (curve 2), $\theta_{in} = 70^\circ$ (curve 3). The distribution of the profile height h (curve 4) along interface (the scale is located on the right side), which is described by the random function with parameters: $\delta = 10$ nm, $\sigma = 13.5$ nm.

максимумами й мінімумами профілю. При цьому фотодисоціація молекул хлору буде здійснюватися в ділянках виступів шерсткої поверхні кварцу, а тому і щавлення кварцу також буде здійснюватися переважно в ділянках виступів, а не западин. Освітлення зразка під іншими кутами, як показує порівняння просторового профілю зразка з відповідними розподілами напруженості електричного поля уздовж згаданої роздільної межі, є неприйнятним з точки зору нанополірування шерсткої поверхні кварцу, оскільки максимумами й мінімумами поля вже не будуть співпадати з максимумами й мінімумами профілю. Таким чином, здійснення наношавлення шерсткої поверхні кварцу бажано проводити при освітленні зразка під критичним кутом.

Знаючи кут падіння променя $\theta_{in} = \theta_{cr} = 42^\circ$, під дією якого необхідно виконувати нанолокальне щавлення кварцу, варто з'ясувати, в якому діапазоні параметра δ доцільно виконувати нанополірування. На рисунку 5 показано розподіл модуля напруженості електричного поля уздовж роздільної межі «кварц–вакуум» з профілем, який описується випадковою функцією, що має гаусову просторову кореляційну функцію, при різних значеннях середнього квадрати-

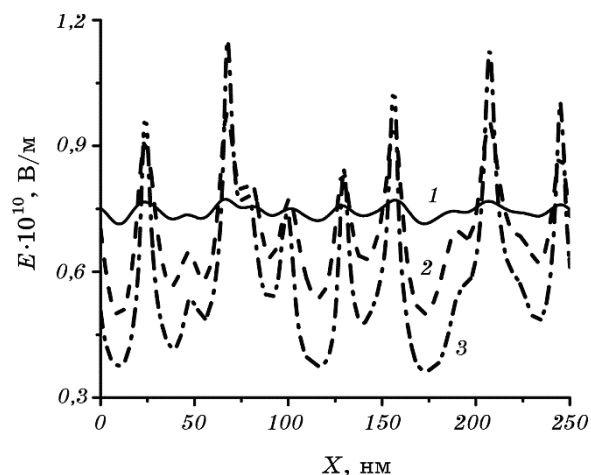


Рис. 5. Розподіл модуля напруженості електричного поля уздовж роздільної межі «кварц–вакуум» з профілем, який описується випадковою функцією, що має гаусову просторову кореляційну функцію, при різних значеннях середнього квадратичного відхилення: $\delta = 1$ нм (крива 1), $\delta = 10$ нм (крива 2), $\delta = 30$ нм (крива 3).

Fig. 5. Distribution of the electric field strength module along the 'quartz–vacuum' interface with a profile described by the random function, which has a Gaussian correlation function, at different values of the quartz surface height standard deviation: $\delta = 1$ nm (curve 1), $\delta = 10$ nm (curve 2), $\delta = 30$ nm (curve 3).

чного відхилення поверхні кварцу для кута падіння плоскої хвилі $\theta_{in} = 42^\circ$, довжини хвилі, що падає, в вакуумі $\lambda_{in} = 500$ нм та довжини кореляції поверхні кварцової платівки $\sigma = 13,5$ нм.

Згідно з рисунком 5, при різних значеннях параметра δ розподіл максимумів та мінімумів модуля напруженості електричного поля уздовж роздільної межі не змінюється і в цілому повторює форму профілю шерсткої поверхні кварцу. Втім, як буде показано нижче, при $\delta = 30$ нм залежність контрастності поля від висоти виступів профілю стає нелінійною і розподіл максимумів амплітуд поля вже не буде відповідати розподілу виступів профілю за висотою, що не зможе забезпечити рівномірне щавлення рельєфу шерсткої поверхні. Числові розрахунки показують, що ближньопольове нанолокальне щавлення кварцу доцільно виконувати, коли параметр $\delta \leq$ нм.

На рисунку 6 зображено розподіли модуля активної складової P_{av} вектора Пойнтінга та модуля вектора Пойнтінга P уздовж роздільної межі «кварц–вакуум», отримані для різних фаз хвилі, що падає, при довжині цієї хвилі в вакуумі $\lambda_{in} = 500$ нм та куті падіння світла

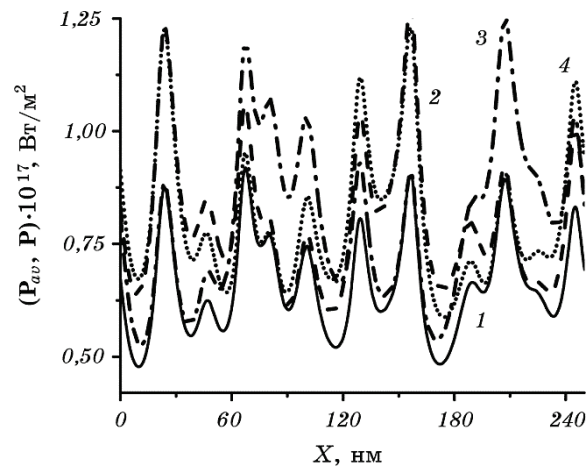


Рис. 6. Розподіл модуля активної складової P_{av} вектора Пойнтінга (крива 1) та модуля вектора Пойнтінга P уздовж роздільної межі «кварц–вакуум» залежно від фази хвилі, що падає, $\varphi = 0$ (крива 2), $\varphi = \pi/4$ (крива 3) та $\varphi = 3\pi/7$ (крива 4) для профілю, який описується випадковою функцією, що має гаусову просторову кореляційну функцію з параметрами: $\delta = 10$ нм, $\sigma = 13,5$ нм.

Fig. 6. Distribution of the module of active component of the Poynting vector P_{av} (curve 1) and the module of Poynting vector P along the 'quartz–vacuum' interface depending on the incident wave phase $\varphi = 0$ (curve 2), $\varphi = \pi/4$ (curve 3) and $\varphi = 3\pi/7$ (curve 4) for the profile described by the random function which has a Gaussian correlation function with parameters: $\delta = 10$ nm, $\sigma = 13.5$ nm.

$\theta_{in} = 42^\circ$. Зауважимо, що розподіл вектора Пойнтінга \mathbf{P} уздовж роздільної межі «кварц–вакуум» є аналогічним розподілу вектора \mathbf{E} і при освітленні зразка під критичним кутом повторює просторовий профіль, принаймні при $\varphi = 0$. З іншого боку, враховуючи той факт, що вектор Пойнтінга \mathbf{P} складається з векторної суми векторів \mathbf{P}_{av} і \mathbf{P}_{var} , а отже, залежить від фази φ , можемо стверджувати, що зі зміною фази хвилі, що падає, її максимальне значення (гребінь вектора \mathbf{P}) дрейфує уздовж роздільної межі «кварц–вакуум», створюючи оптимальні умови для субнанополірування даної поверхні.

Можливість щавлення згаданої поверхні потребує уточнення, оскільки необхідно виконувати локальне щавлення саме виступів, а не западин. Рисунок 7 дозволяє побачити, що вказане нанощавлення більш ефективне в ділянках виступів, ніж западин. Порівняємо розподіли модуля активної складової вектора Пойнтінга та модуля вектора Пойнтінга \mathbf{P} у перпендикулярному напрямку до роздільної межі «кварц–вакуум» в ділянці виступу та западини, які показані на рис. 7, при довжині хвилі, що падає, в вакуумі $\lambda_{in} = 500$

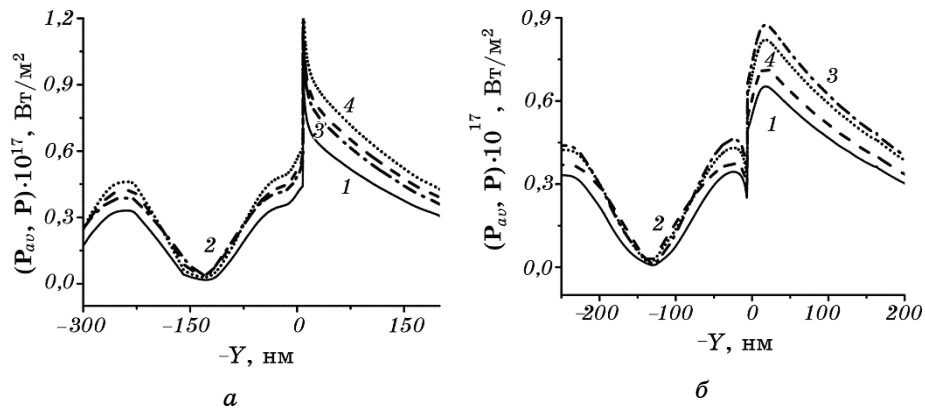


Рис. 7. Розподіл модуля активної складової \mathbf{P}_{av} вектора Пойнтінга (крива 1) та модуля вектора Пойнтінга \mathbf{P} у перпендикулярному напрямку до роздільної межі «кварц–вакуум» в залежності від фази хвилі, що падає, $\varphi = 0$ (крива 2), $\varphi = \pi/4$ (крива 3) та $\varphi = 3\pi/4$ (крива 4) для профілю, який описується випадковою функцією, що має гаусову просторову кореляційну функцію з параметрами: $\delta = 10$ нм, $\sigma = 13,5$ нм. Перпендикулярний напрямок проходить крізь виступ (а) та западину (б).

Fig. 7. Distribution of the module of active component of the Poynting vector \mathbf{P}_{av} (curve 1) and the module of the Poynting vector \mathbf{P} in the perpendicular direction to the ‘quartz–vacuum’ interface depending on the incident wave phase $\varphi = 0$ (curve 2), $\varphi = \pi/4$ (curve 3) and $\varphi = 3\pi/4$ (curve 4) for the profile described by the random function which has a Gaussian correlation function with parameters: $\delta = 10$ nm, $\sigma = 13.5$ nm. The perpendicular direction passes through the peak (a) and trough (b).

нм та кути падіння $\theta_{in} = 42^\circ$. Таким чином, можна зробити висновок: ефективність наноощавлення (з точки зору значень вектора \mathbf{P} в ділянках виступів по відношенню до ділянок западин шерсткої поверхні кварцу) більш вагома в ділянках виступів, ніж западин. Це справедливо за умови, що кут падіння дорівнює критичному куту.

Розглядаючи рисунки 6 і 7, можемо стверджувати, що за умови повного внутрішнього відбиття, перенесення енергії відбувається переважно уздовж горизонтальної координати (спостерігаємо хвилі, що біжать). Уздовж вертикальної координати практично відсутнє перенесення енергії (спостерігаємо стоячі хвилі), відбита хвиля частково заходить в об'єм розчину, затухаючи по експоненті при віддаленні від роздільної межі.

На рисунку 8, а показано графік усередненої по ансамблю реалізацій контрастності K еванесцентного поля на межі розділу «кварц-вакуум» залежно від довжини кореляції σ поверхні кварцової пла-

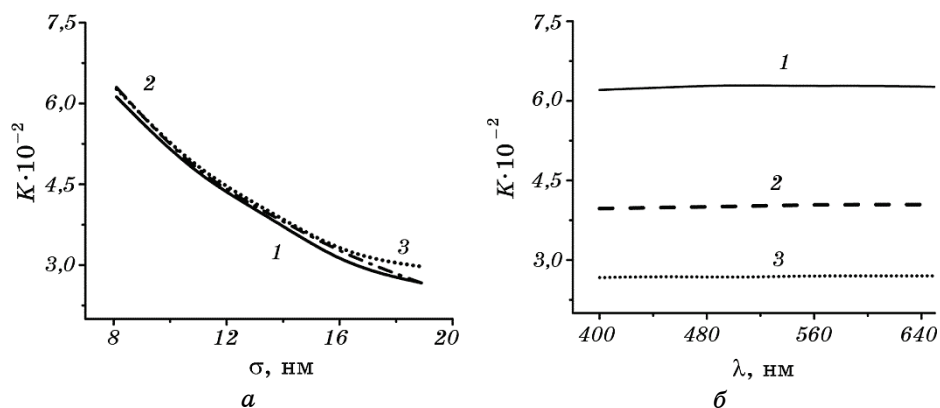


Рис. 8. Усереднена по ансамблю реалізацій контрастність K еванесцентного поля на межі розділу «кварц-вакуум» з профілем, який описується випадковою функцією, що має гаусову просторову кореляційну функцію, в залежності від довжини кореляції σ поверхні кварцової платівки (а) для довжин хвилі, що падає, $\lambda_{in} = 400$ нм (крива 1), $\lambda_{in} = 500$ нм (крива 2) та $\lambda_{in} = 600$ нм (крива 3); в залежності від довжини хвилі, що падає, λ_{in} (б) для довжини кореляції поверхні кварцової платівки $\sigma = 8,1$ нм (крива 1), $\sigma = 13,5$ нм (крива 2) та $\sigma = 18,9$ нм (крива 3).

Fig. 8. Contrast K of the evanescent field, averaged over the ensemble of realization, at the 'quartz-vacuum' interface with a profile described by the random function, which has a Gaussian correlation function, depending on the length of the surface correlation σ of the quartz plate (a) for the incident wavelengths $\lambda_{in} = 400$ nm (curve 1), $\lambda_{in} = 500$ nm (curve 2) and $\lambda_{in} = 600$ nm (curve 3); depending on the incident wavelength λ_{in} in (b), for the correlation length of the quartz rough surface $\sigma = 8.1$ nm (curve 1), $\sigma = 13.5$ nm (curve 2) and $\sigma = 18.9$ nm (curve 3).

тівки з $\delta = 1,0$ нм для різних довжин хвиль випромінювання при куті падіння $\theta_{in} = 42^\circ$. При збільшенні довжини кореляції контрастність падає, оскільки в цьому випадку поверхня кварцу стає більш плоскою. Зауважимо, що контрастність практично не залежить від довжини хвилі, що падає, за умови, що середнє квадратичне відхилення δ незначне. На рис. 8, б показано графік усередненої по ансамблю реалізацій контрастності K еванесцентного поля на межі розділу «кварц–вакуум» як функція від довжини хвилі, що падає, λ_{in} для різних довжин кореляції поверхні кварцової платівки з $\delta = 1,0$ нм при куті падіння $\theta_{in} = 42^\circ$. Криві 1–3 практично не залежать від довжини хвилі, що падає, за умови, що середнє квадратичне відхилення δ незначне. Це підтверджує висновок, отриманий при розгляді рис. 8, а.

Очевидно, що збільшуючи параметр δ (рис. 9), ми також збільшуємо значення контрастності K . У випадку, коли діапазон зміни аргументу вказаної залежності відповідає лінійній зміні значення K , виникає можливість ефективно контролювати процес щавлення кварцу. На рисунку 9 можна бачити, що для реалізації такої можливості необхідно, щоб згаданий параметр δ не перевищував 10 нм.

На рисунку 10 показано двовимірний розподіл амплітуди модуля

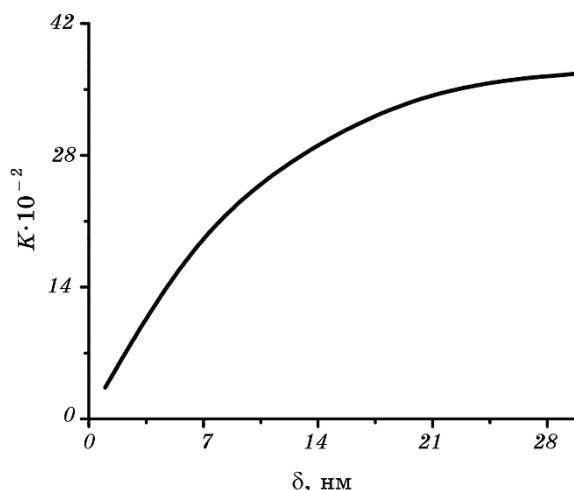


Рис. 9. Контрастність K еванесцентного поля на межі розділу «кварц–вакуум» з профілем, який описується випадковою функцією, що має гаусову просторову кореляційну функцію, залежно від середнього квадратичного відхилення δ за умови, що $\lambda_{in} = 500$ нм, $\sigma = 13,5$ нм, $\theta_{in} = 42^\circ$.

Fig. 9. Contrast K of the evanescent field at the ‘quartz–vacuum’ interface with a profile described by the random function, which has a Gaussian correlation function, depending on the standard deviation δ of the quartz surface height, provided that $\lambda_{in} = 500$ nm, $\sigma = 13.5$ nm, $\theta_{in} = 42^\circ$.

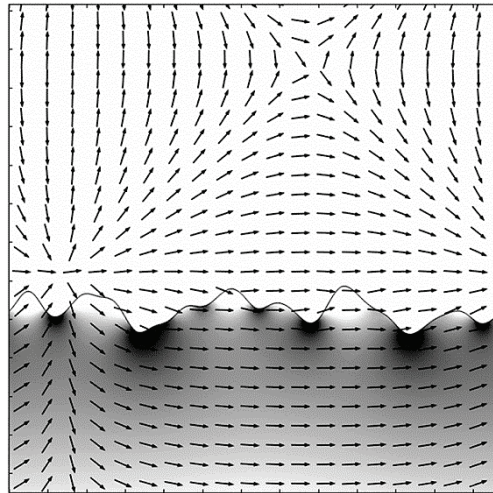


Рис. 10. Двовимірний розподіл амплітуди еванесцентного поля (сірий фон) й потоків вектора Пойнтінга (стрілки) у ближній зоні роздільної межі «кварц–вакуум».

Fig. 10. 2D distribution of the amplitude of the evanescent field strength (grey background) and the flows of the Poynting vector (arrows) in the near zone of the 'quartz–vacuum' interface.

напруженості електричної складової електромагнітного поля (сірий фон) й потоків вектора Пойнтінга (стрілки) для довжини хвилі випромінювання, що падає, $\lambda_{in} = 500$ нм за умови, що середнє квадратичне відхилення $\delta = 10$ нм, кут падіння $\theta_{in} = 42^\circ$, довжина кореляції поверхні кварцової платівки $\sigma = 13,5$ нм. На рисунку добре видно, що (i) розподіл модуля напруженості поля у ближній зоні роздільної межі «кварц–вакуум» повторює форму поверхні кварцу, (ii) розподіл потоків вектора Пойнтінга підтверджує факт, що перенесення енергії відбувається переважно тільки уздовж горизонтальної координати; уздовж вертикальної координати практично відсутнє перенесення енергії, (iii) потоки енергії (потоки вектора Пойнтінга), спричинені хвилею, що падає, суттєво змінюються тільки поблизу згаданої поверхні кварцу (якщо порівнювати ситуації з наявністю шерсткої і гладкої поверхні кварцу).

4. ВИСНОВКИ

В результаті аналізу розсіювання світлової хвилі, яка падає з боку кварцу на поверхню кварцової платівки, профіль якої має гаусову просторову кореляційну функцію, отримано зв'язок контрастності поля, що утворюється хвилею, що падає, з функцією просторового

спектра шерсткої поверхні, яка визначається параметрами даної поверхні: довжиною кореляції й середнім квадратичним відхиленням. Це дозволяє практично застосовувати дане явище, наприклад, для фотохімічного субнанополірування поверхні кварцу.

При освітленні згаданої шерсткої поверхні з боку кварцу, за умови повного внутрішнього відбиття світла ($\theta_{in} = \theta_{cr} = 42^\circ$), коли середньоквадратичне відхилення шерсткості незначне (не перевищує 10 нм), а довжина світлової хвилі, що падає, значно більша довжини кореляції функції профілю даної поверхні, було визначено, що потоки енергії (потоки вектора Пойнтінга), спричинені хвилею, що падає, суттєво змінюються тільки поблизу згаданої поверхні кварцу (якщо порівнювати ситуації з наявністю шерсткої і гладкої поверхні кварцу). Двовимірний розподіл потоків енергії, спричинених хвилею, що падає, реагує на наявність шерсткої поверхні кварцу тільки поблизу цієї поверхні. Зі зміною фази хвилі, що падає, її максимальне значення (гребінь) дрейфує уздовж роздільної межі «кварц–вакуум», створюючи оптимальні умови для субнанополірування даної поверхні. При цьому амплітуда коливань енергії в ділянках виступів має більші значення, ніж в ділянках западин. Перенесення енергії відбувається переважно тільки уздовж горизонтальної координати; уздовж вертикальної координати перенесення енергії практично відсутнє. Зауважимо, що фактично тільки в даному випадку профіль напруженості електричного поля уздовж роздільної межі «кварц–вакуум» повторює форму просторового профілю уздовж згаданої роздільної межі.

Необхідно також зазначити, що особливістю досліджень шерсткої поверхні з випадковим профілем є необхідність проведення розрахунків з використанням великої кількості реалізацій профілю шерсткої поверхні. Це потребує значних об'ємів даних для обчислень та тривалого часу проведення моделювань. Вибір детермінованої функції профілю шерсткої поверхні кварцу дозволить зменшити тривалість обчислень. Встановлений зв'язок синусоїдального профілю поверхні з контрастом поля можна буде використати для аналізу контрасту складніших поверхонь, оскільки будь-яку поверхню можна представити сукупністю синусоїдальних профілів різної просторової частоти.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА—REFERENCES

1. I. Ali, S. R. Roy, and G. Shinn, *Solid State Technol.*, No. 10: 63 (1994).
2. G. F. Ivanitskii and V. I. Petrov, *Ionno-Plasmennaya Obrabotka Materialov* [Ion-Plasma Processing of Materials] (Moscow: Radio i Svyaz': 1986), p. 232 (in Russian).
3. Otsu Genichi, Yatsui Takashi, and Nomura Ko, *Etching Method Using Near-Field Light*: Patent JP 2014-022411A (H01L 21/302, H01L/21/027)

- (Publ. 03.02.2014).
4. W. Nomura, T. Yatsui, and M. Ohtsu, *Springer Series in Optical Sciences*, **155**: 113 (2010).
5. H. Raether, *Surface Plasmons on Smooth and Rough Surfaces and on Gratings (Springer Tracts in Modern Physics)*, **111** (1988).
6. J. L. Volakis, A. Chatterjee, and L. C. Kempel, *Finite Element Method for Electromagnetics (Wiley-IEEE Press: 1998)*.
7. J. Jin, *The Finite Element Method in Electromagnetics* (Second Edition) (New York: Wiley, 2002).
8. W. C. Chew and W. C. Weedon, *Microwave Opt. Tech. Lett.*, **7**: 599 (1994).
9. Z. S. Sacks, D. M. Kingsland, R. Lee, and J. F. Lee, *IEEE Transactions Antennas Propagation*, **43**: 1460 (1995).
10. P. W. Johnson and R. W. Christy, *Phys. Rev. B*, **6**, No. 12: 4370 (1972).
11. L. Novotni and M. Xext, *Osnovy Nanooptiki* [Fundamentals of Nano-Optics] (Moscow: Fizmatlit: 2009) (in Russian).
12. M. Quinten, *Optical Properties of Nanoparticle Systems: Mie and Beyond* (Weinheim: Wiley-VCH Verlag&Co. KGaA: 2011).