

# КОМПЛЕКСНАЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ СУБВОЛНОВЫХ ПЛАНАРНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ГЕТЕРОСТРУКТУР В ТЕРАГЕРЦЕВОМ ДИАПАЗОНЕ ЧАСТОТ

*М. Р. Конникова*<sup>a,b\*</sup>, *А. К. Третьяков*<sup>c</sup>, *Ю. А. Акимов*<sup>d</sup>, *И. А. Ожередов*<sup>a</sup>,  
*Ю. В. Кистенев*<sup>c</sup>, *А. П. Шкуринов*<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Физический факультет, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова  
119991, Москва, Россия*

<sup>b</sup> *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»  
123182, Москва, Россия*

<sup>c</sup> *Томский государственный университет  
634050, Томск, Россия*

<sup>d</sup> *Троицкое обособленное подразделение Физического института им. П. Н. Лебедева Российской академии наук  
108840, Троицк, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 30 декабря 2025 г.,  
после переработки 20 февраля 2026 г.  
Принята к публикации 21 февраля 2026 г.

Представлено аналитическое и экспериментальное обоснование метода восстановления комплексной диэлектрической проницаемости субволновых пленок по данным импульсной терагерцевой спектроскопии. Рассматривается математическая модель, основанная на одновременном использовании отраженного и прошедшего через образец терагерцевых сигналов, что позволяет определить комплексный показатель преломления пленки без необходимости дополнительных опорных измерений. Проведено сравнение полноволновой модели и приближения бесконечной подложки, показано, что последнее обеспечивает более устойчивое восстановление оптических параметров при сохранении высокой точности. Выполнена численная верификация метода и экспериментальная проверка на пленках GeTe различной толщины, испытывающих фазовый переход из аморфного состояния в кристаллическое. Продемонстрировано, что предложенный подход обеспечивает корректное определение показателя преломления и коэффициента поглощения в широком диапазоне диэлектрических свойств исследуемого материала и может быть использован для диагностики субволновых фазоизменяемых пленок в терагерцевом диапазоне.

**Ключевые слова:** терагерцевая спектроскопия, комплексная диэлектрическая проницаемость, тонкие пленки, фазоизменяемые материалы

DOI: 10.31857/S0044451026050011

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Импульсная терагерцевая спектроскопия (Terahertz time-domain spectroscopy, THz-TDS) [1] является одним из наиболее информативных методов исследования электродинамических свойств конденсированных сред [2], включая тонкие плен-

ки [3] и фазоизменяемые материалы [4]. Особый интерес представляют субволновые пленки, для которых толщина значительно меньше длины волны зондирующего излучения, что приводит к слабому влиянию образца на прошедший сигнал и усложняет корректное восстановление комплексной диэлектрической проницаемости [5].

Для описания прохождения и отражения терагерцевого (ТГц) излучения используются линеаризованные уравнения Максвелла [5]. Они справедливы в случае сплошной среды, поэтому минимальная толщина исследуемой пленки должна быть больше

\* E-mail: konnikova.mr20@physics.msu.ru

5–20 атомных слоев [5, 6]. Верхний предел толщины пленки определяется условием

$$\phi_{noise} < \frac{\omega}{c} (n - 1) d < 2\pi,$$

где  $\phi_{noise}$  — фазовый шум системы THz-TDS,  $\frac{\omega}{c} (n - 1) d$  — разность фаз между измеренными сигналами без образца и с образцом [1].

Для решения данной задачи предложен ряд подходов, основанных на использовании дифференциальных измерений, аппроксимационных моделей или привлечении дополнительных опорных экспериментов (см. обзор О'Хара и др. [3], а также гл. 5 и 8 в [1]). Однако для широкого класса материалов такие методы либо чувствительны к экспериментальному шуму, либо требуют априорных предположений о свойствах образца, что ограничивает область их применимости.

Впервые в 1998 г. Лаббе-Лавинь и др. [7] предложили наиболее распространенную на сегодняшний день методику, в основе которой лежит раздельное измерение прошедшего сигнала через подложку, а затем через подложку, покрытую пленкой. Вскоре Цзяном [8] была предложена усовершенствованная методика — «разностная THz-TDS», основной принцип которой заключен в одновременном получении разностного сигнала между подложкой и пленкой, нанесенной на другую половину той же подложки.

Примерно в то же время была предложена методика определения параметров пленки «по фазовому скачку» ТГц-волны при отражении вблизи угла Брюстера [9]. В 2001 г. команда Хангё предложила THz-TDS эллипсометрию сначала для определения характеристик объемных образцов [10], а затем и для тонких пленок [11]. Однако THz-TDS эллипсометрия не нашла широкого применения для определения характеристик тонких пленок из-за низкого отношения сигнал/шум [12].

Преодолеть эти ограничения удалось, используя интерферометрический подход для THz-TDS при исследовании тонких пленок [13]. В этом методе ТГц-пучок делится на два оптических пути так, чтобы поля, регистрируемые детектором, деструктивно интерферировали. Главным преимуществом восстановления параметров пленок из дифференциального сигнала стало уменьшение шумов, обусловленных флуктуациями лазера.

Искусственные среды, позволяющие усилить локальный электромагнитный отклик, например волноводы и метаматериалы, также могут быть использованы в задачах диагностики тонких пленок. Об-

ратный электромагнитный расчет позволяет определить свойства пленки, что было предложено группой Гришковского [14, 15], охарактеризовавшей слой воды нанометровой толщины [15]. Сейчас эта методика широко распространена в решении задач ТГц-сенсорики [16].

Аналогично «разностной THz-TDS» Юнгом и др. [17] был продемонстрирован метод, рассматривающий нормированное отношение одновременно измеренных отраженного и прошедшего сигналов через легированный объемный кремний. Ранее этот метод использовали Немец и др. [18] для одновременного определения диэлектрической и магнитной проницаемостей объемных образцов. Такой подход также позволяет минимизировать экспериментальные неопределенности, связанные с флуктуациями параметров лазерного излучения.

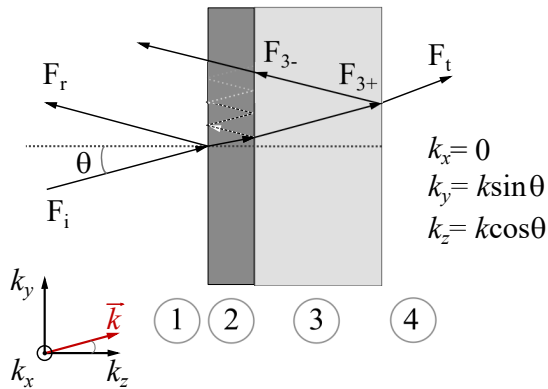
В настоящей работе рассматривается альтернативный подход к восстановлению комплексного показателя преломления субволновой пленки, основанный на одновременном использовании отраженного и прошедшего ТГц-сигналов в приближении бесконечной подложки [4]. Показано, что такая постановка задачи позволяет аналитически определить оптические параметры пленки без привлечения дополнительных опорных измерений и обеспечивает устойчивость восстановления в широком диапазоне диэлектрических свойств.

Продemonстрированы применимость и преимущества рассматриваемой теоретической модели в приближении бесконечной подложки [4] по сравнению с полноволновой моделью на примере численных решений для комплексного показателя преломления пленки кремния, расположенной на кремниевой подложке.

Метод теоретически обоснован, численно верифицирован и экспериментально апробирован на пленках GeTe, испытывающих фазовый переход из аморфного состояния в кристаллическое. Полученные результаты демонстрируют применимость предложенного подхода для диагностики субволновых фазоизменяемых пленок в ТГц-диапазоне.

## 2. АНАЛИТИЧЕСКОЕ И ЧИСЛЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ТОНКОЙ ПЛЕНКИ

В основе предлагаемой модели взаимодействия ТГц-излучения с тонкими пленками лежит идея об одновременной регистрации отраженных от пленки и проходящих через нее электромагнитных



**Рис. 1.** Прохождение плоской электромагнитной волны через многослойную диэлектрическую среду. Среда 1 и 4 — окружающая среда (воздух), среда 2 — пленка, которая является исследуемым слоем, среда 3 — подложка.  $F_i$ ,  $F_r$  и  $F_t$  обозначают амплитуды падающего, отраженного и прошедшего через образец полей соответственно

полей, а также оценки комплексного показателя преломления материала пленки из аналитического выражения, которое является гладкой функцией этих полей.

Согласно граничным условиям, которые являются следствием уравнений Максвелла (см. [19], гл. 1), взаимодействие падающей волны со средой приводит к генерации отраженной и преломленной волн. Рассмотрим двухслойную систему, представляющую собой тонкую пленку, нанесенную на диэлектрическую подложку с параллельными гранями, схема которой показана на рис. 1. Ограничимся случаем, когда показатель преломления не зависит от  $x$  и  $y$ , что соответствует неограниченной слоистой среде. ТГц-излучение падает на образец под углом  $\theta$ ,  $z$  — направление нормали к поверхности образца, так что  $yz$  — плоскость падения. Рассмотрим проекцию вектора  $\mathbf{k}$  на границу раздела сред. Пусть волновой вектор  $\mathbf{k}_i \in [k_x; k_y; k_z] \in [ku_x; ku_y; ku_z]$ , где  $\mathbf{u}_i$  — единичный вектор в направлении распространения отраженной и преломленной волн, а  $r_i \in [x; y; z]$  — координаты.

Рассматриваемая задача в указанной системе координат (см. рис. 1) демонстрирует трансляционную инвариантность относительно направления  $x$ , значит, любая производная  $d/dx$  будет равна нулю, так же как и компонента  $k_x$ . В этом случае для  $s$ -поляризации (ТЕ) магнитное и электрическое поля можно представить в виде

$$E = (E_x, 0, 0), \quad H = (0, k_z, -k_y) \frac{E_x}{\omega \mu_0},$$

а для  $p$ -поляризации (ТМ) — в виде

$$H = (H_x, 0, 0), \quad E = (0, E_y, E_z) = (0, -k_z, k_y) \frac{H_x}{\omega \epsilon_0 \epsilon}.$$

Далее будем рассматривать случаи ТЕ- и ТМ-поляризаций в общем виде, задавая  $F_i = E_{ix}$  и  $K_i = k_{iz}$  для ТЕ,  $F_i = H_{ix}$  и  $K_i = k_{iz}/\tilde{\epsilon}_i$  для ТМ. Отметим, что величины  $\tilde{F}_i$ ,  $\tilde{E}_i$  и  $\tilde{H}_i$ , а также  $\tilde{K}_i$ ,  $\tilde{k}_i$ ,  $\tilde{n}_i$  и  $\tilde{\epsilon}_i$  ( $i$  — индекс среды) являются комплексными, но для краткости символ тильда « $\sim$ » будет опущен для всех величин кроме  $\tilde{n}_i$  и  $\tilde{\epsilon}_i$ . Взаимодействие излучения с многослойной системой (см. рис. 1) далее будет рассматриваться с учетом того, что, во-первых, среды однородны и изотропны, а во-вторых, поля  $F_t$  и  $F_r$  не равны нулю.

В этом исследовании рассмотрены решения на основе двух теоретических моделей: полноволновой модели (ПМ) и в приближении бесконечной подложки (ПБП). Фундаментальное отличие между двумя моделями заключается в учете переотраженного поля в подложке для ПМ и в пренебрежении этим полем для ПБП.

### 2.1. Полноволновая модель

В ПМ учитывается поле  $F_{3-}$  (см. рис. 1), которым мы пренебрегали в раннем исследовании [4]. В этом случае граничные условия для уравнений Максвелла можно записать в общем для двух поляризаций (ТМ и ТЕ) виде:

$$z = 0 : \begin{cases} F_i e_{1+}^0 + F_r (e_{1+}^0)^{-1} = \\ = F_{2+} e_{2+}^0 + F_{2-} (e_{2+}^0)^{-1}, \\ K_1 F_i e_{1+}^0 - K_1 F_r (e_{1+}^0)^{-1} = \\ = K_2 F_{2+} e_{2+}^0 - K_2 F_{2-} (e_{2+}^0)^{-1}, \end{cases} \quad z = d_f : \begin{cases} F_{2+} e_{2+}^f + F_{2-} (e_{2+}^f)^{-1} = \\ = F_{3+} e_{3+}^f + F_{3-} (e_{3+}^f)^{-1}, \\ K_2 F_{2+} e_{2+}^f - K_2 F_{2-} (e_{2+}^f)^{-1} = \\ = K_3 F_{3+} e_{3+}^f - K_3 F_{3-} (e_{3+}^f)^{-1}, \end{cases} \quad z = d_f + d_s : \begin{cases} F_{3+} e_{3+}^{fs} + F_{3-} (e_{3+}^{fs})^{-1} = \\ = F_t e_{1+}^{fs}, \\ K_3 F_{3+} e_{3+}^{fs} - K_3 F_{3-} (e_{3+}^{fs})^{-1} = \\ = K_1 F_t e_{1+}^{fs}, \end{cases} \quad (1)$$

где для  $z = 0$ :

$$e_{i+}^0 = e^{ik_{iz}0}, \quad e_{i-}^0 = e^{-ik_{iz}0}, \quad e_{i+}^0 e_{i-}^0 = 1;$$

для  $z = d_f$ :

$$e_{i+}^f = e^{ik_{iz}d_f}, \quad e_{i-}^f = e^{-ik_{iz}d_f}, \quad e_{i+}^f e_{i-}^f = 1;$$

для  $z = d_f + d_s$ :

$$e_{i+}^{fs} = e^{ik_{iz}(d_f+d_s)}, \quad e_{i-}^{fs} = e^{-ik_{iz}(d_f+d_s)}, \quad e_{i+}^{fs}e_{i-}^{fs} = 1.$$

Используемые индексы 0,  $f$ ,  $fs$  обозначают индекс границы раздела при заданном  $z$ ,  $i = 1, 2, 3, 4$  — индекс среды,  $k_{iz} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\tilde{\epsilon}_i - \sin^2 \theta}$  — компонента волнового вектора  $\mathbf{k}$  в среде  $i$  вдоль оси  $z$ ,  $\tilde{\epsilon}_i$  — комплексная диэлектрическая проницаемость среды  $i$ ,  $\omega$  — угловая частота,  $c$  — скорость света в вакууме.  $F_i$ ,  $F_r$  и  $F_t$  обозначают амплитуды соответственно падающего, отраженного и прошедшего через образец полей.

С учетом введенных обозначений граничные условия могут быть представлены в форме переходной матрицы (см. Приложение), из которой отраженное  $F_r$  и прошедшее  $F_t$  поля выражаются как функции падающего  $F_i$  поля в виде линейных соотношений:

$$F_r = \frac{\Delta F_r}{D} F_i, \quad F_t = \frac{\Delta F_t}{D} F_i, \quad (2)$$

где коэффициенты связи представлены детерминантами  $\Delta F_i$ ,  $\Delta F_r$  и  $\Delta F_t$  соответствующих матриц и приведены в Приложении. Тогда полученное выражение для отношения полей  $F_r/F_t$  может быть записано в общем виде:

$$F_{rt} = \xi(e_{2-}^f + e_{2+}^f) + \zeta K_2(e_{2+}^f - e_{2-}^f) - \mu \frac{e_{2+}^f - e_{2-}^f}{K_2}, \quad (3)$$

где

$$F_{rt} = \frac{8K_1K_3}{e_{1+}^{sf}} \frac{F_r}{F_t},$$

$$\xi = (K_1^2 - K_3^2)(e_{3-}^s - e_{3+}^s), \quad (4)$$

$$\zeta = e_{3-}^s(K_1 + K_3) - e_{3+}^s(K_1 - K_3),$$

$$\mu = K_1K_3 [e_{3-}^s(K_1 + K_3) + e_{3+}^s(K_1 - K_3)].$$

Для извлечения комплексного волнового числа пленки  $K_2$  выражение (3) может быть решено численными и аналитическими методами. В последнем случае можно воспользоваться разложением экспоненциальных функций  $e_{2+}^f$  и  $e_{2-}^f$  в ряд Тейлора до заданного порядка  $p_{max}$  (см. формулы (А.8), (А.9) и (А.17), (А.18) Приложения).

Основная цель приведенных выше математических преобразований заключается в получении аналитического выражения для  $k_{2z}$  ( $\tilde{\epsilon}_2$ ) как функции отношения экспериментально измеренных полей  $F_r/F_t$ .

Разложение соотношения (3) в ряд Тейлора для ТЕ-поляризации при  $p_{max} = 0$ , с учетом того, что

$k_0 = \omega/c$ , представляет собой линейное и биквадратное уравнения относительно  $\tilde{\epsilon}_2$ , корни которых имеют вид соответственно

$$\tilde{\epsilon}_{2,0} = \frac{1}{d_f \zeta_{TE} k_0^2} \left[ d_f \mu_{TE} + i \left( \xi_{TE} - \frac{E_{rt}}{2} \right) \right] + \sin^2 \theta, \quad (5)$$

$$\tilde{\epsilon}_{2,1} = \sin^2 \theta + \frac{6i\zeta_{TE} - 3d_f\xi_{TE} + id_f^2\mu_{TE}}{2id_f^2k_0^2\zeta_{TE}} \pm \sqrt{\frac{[6i\zeta_{TE} - 3d_f\xi_{TE} + id_f^2\mu_{TE}]^2 + 4d_f^2k_{2z,0}^2\zeta_{TE}^2}{2id_f^2k_0^2\zeta_{TE}}}. \quad (6)$$

Разложение соотношения (3) в ряд Тейлора для ТМ-поляризации при  $p_{max} = 0$  представляет из себя квадратное уравнение относительно  $\tilde{\epsilon}_{2,0}$  с корнями

$$\tilde{\epsilon}_{2,0} = -\frac{\frac{1}{id_f\zeta_{TM}} \left[ \frac{H_{rt}}{2} - \xi_{TM} \right] - k_0^2}{2\frac{\mu_{TM}}{\zeta_{TM}}} \pm \sqrt{\frac{\left[ \frac{1}{id_f\zeta_{TM}} \left[ \frac{H_{rt}}{2} - \xi_{TM} \right] - k_0^2 \right]^2 - 4\frac{\mu_{TM}}{\zeta_{TM}}k_0^2\sin^2\theta}{2\frac{\mu_{TM}}{\zeta_{TM}}}}. \quad (7)$$

## 2.2. Приближение бесконечной подложки

Одна из целей настоящего исследования заключалась в определении приближений, которые позволяют упростить теоретическую ПМ, сохраняя точность восстановления оптических параметров пленки аналитическим методом. Введем допущение о том, что эффектом Фабри – Перо в подложке можно пренебречь, т. е. об отсутствии поля  $F_{3-}$ .

Подробнее рассмотрим смысл этого допущения. Если подложка достаточно толстая,  $d_s \geq \lambda$ , и/или имеет высокий показатель преломления, то может быть использована фильтрация временным окном, что позволяет исключить из дальнейшего рассмотрения информацию о переотражениях (эффекте Фабри – Перо) между границами 3–4 и 2–3, а также границами 3–4 и 1–2 (см. рис. 1). С точки зрения математической модели это соответствует пренебрежению полем  $F_{3-}$  в выражениях (1) [1, 20].

Ширина временного окна фильтрации определяется из  $m$ -й задержки импульса, отраженного от границы 3–4, как  $\Delta t = 2m\tilde{n}_s d_s/c$  [21]. Для стандартной кремниевой пластины (обычно  $d_s = 385$  мкм,  $\tilde{n}_s = 3.418 + 0.0001i$ ) и при нормальном падении ТГц-излучения эта временная задержка для первого переотражения ( $m = 1$ ) составляет  $\Delta t = 8.8$  пс, что соответствует спектральному разрешению 114 ГГц.

При сохранении ранее введенных обозначений граничные условия запишутся следующим образом:

$$\begin{aligned}
 z = 0 : & \begin{cases} F_i + F_r = F_{2+} + F_{2-}, \\ K_1 F_i - K_1 F_r = K_2 F_{2+} - K_2 F_{2-}, \end{cases} \\
 z = d_f : & \begin{cases} F_{2+} e_{2+}^f + F_{2-} e_{2-}^f = F_{3+} e_{3+}^f, \\ K_2 F_{2+} e_{2+}^f - K_2 F_{2-} e_{2-}^f = K_3 F_{3+} e_{3+}^f, \end{cases} \quad (8) \\
 z = d_f + d_s : & F_4 = F_t = t_{3-4} F_{3+} e_{3+}^{fs} e_{1-}^{fs}.
 \end{aligned}$$

Здесь  $i = 1, 2, 3, 4$  — индекс среды, в которой распространяется поле  $F_i$ , а  $t_{3-4} = 2K_3/(K_3 + K_4)$  является амплитудным коэффициентом пропускания Френеля на границе раздела подложка–воздух (см. рис. 1). В средах 1 и 2 поля, распространяющиеся назад, учитываются через соответствующий множитель Фабри–Перо, в то время как в средах 3 и 4 аналогичные поля не учитываются благодаря ранее упомянутой оконной фильтрации.

Граничные условия (8), как и для ПМ (1), могут быть записаны в матричной форме, относительно

но которой вычисляются определители отраженного  $F_r$  и прошедшего  $F_t$  полей, которые являются функциями падающего поля  $F_i$  (см. Приложение). После преобразования полученных выражений (см. Приложение), запишем подобное ПМ равенство (3) в общем виде, содержащем информацию об одновременно зарегистрированных полях  $F_r/F_t$  и параметрах пленки  $K_2$ :

$$\begin{aligned}
 & K_2 (K_3 - K_1) (e_{2+}^f + e_{2-}^f) + (K_1 K_3 - K_2^2) \times \\
 & \times (e_{2+}^f - e_{2-}^f) = -t_{3-4} 4K_1 K_2 e_{3+}^{fs} e_{3-}^f e_{1-}^{fs} \frac{F_r}{F_t}. \quad (9)
 \end{aligned}$$

Для полученного выражения (9) может быть использовано разложение в ряд Тейлора применительно к тем же экспоненциальным функциям  $e_{2+}^f$  и  $e_{2-}^f$ , что и для ПМ (см. Приложение).

Так, аналитические решения уравнения (9) по  $\tilde{n}_2$  с учетом разложения ряда Тейлора до первого и второго порядков ( $p_{max} = 0, 1$ ) для ТЕ-поляризации будут иметь вид

$$(\tilde{n}_2^{(0)})^2 = -\sin^2 \theta + \frac{k_{1z} k_{3z}}{k_0^2} - \frac{j}{d_f k_0^2} \left( k_{3z} - k_{1z} + \frac{4k_{1z} k_{3z}}{k_{3z} + k_{1z}} e_{3+}^{fs} e_{3-}^f e_{1-}^{fs} \frac{E_r}{E_t} \right), \quad (10)$$

$$(\tilde{n}_2^{(1)})^2 = \frac{3}{d_f^2 k_0^2} - \frac{j}{2k_0^2} \left[ \frac{3}{d_f} (k_{3z} - k_{1z}) + j k_{1z} k_{3z} \right] \pm \frac{1}{k_0^2} \sqrt{\left[ \frac{3}{d_f^2} - \frac{j}{2} \left( \frac{3}{d_f} (k_{3z} - k_{1z}) + j k_{1z} k_{3z} \right) \right]^2 - 6 \frac{k_{2z0}^2}{d_f^2} - \sin^2 \theta}. \quad (11)$$

Для ТМ-поляризации выражение (9) сводится к уравнению относительно  $\tilde{n}_2$ . Для  $p_{max} = 0$  это уравнение является биквадратным с корнями, которые можно записать в следующем виде:

$$\tilde{n}_2^{(0)} = \left( \frac{1}{2i k_{1z} k_{3z} d_f} \right)^{1/2} \sqrt{\xi \pm \sqrt{\xi^2 + 4k_{1z} k_{3z} \tilde{\epsilon}_1 \tilde{\epsilon}_1 k_0^2 d_f^2 \sin^2 \theta}}, \quad (12)$$

где

$$\xi = -\tilde{\epsilon}_1 k_{3z} + \tilde{\epsilon}_3 k_{1z} + i \tilde{\epsilon}_1 \tilde{\epsilon}_3 k_0^2 d_f - 2t_{3-4} \tilde{\epsilon}_3 k_{1z} \frac{H_r}{E_t} e_{3+}^{fs} e_{1-}^{fs} e_{3-}^f.$$

Таким образом, оптические параметры пленки могут быть получены из измеренных отраженного  $F_r$  от образца и прошедшего  $F_t$  через образец полей, путем решения приближенных уравнений (10)–(12). Описанная процедура может быть проведена и для более высоких порядков разложения  $p_{max}$ , т. е. при  $p_{max} > 1$ . Однако использование разложения при  $p_{max} = 1$  приводит, как правило, к достаточно точному определению оптических параметров пленки.

Следует отметить, что в предложенной модели не используются дополнительные «опорные» поля,

как это делается в классических формулах Френеля для пропускания через и отражения от рассматриваемой среды. Однако это справедливо в случае оптически идеальной установки, для которой проходящее через воздух  $F_i^t$  и отраженное идеальным зеркалом  $F_i^r$  поля равны. В экспериментальной практике поля  $F_i^t$  и  $F_i^r$  не равны из-за разницы аппаратных функций детекторов, несоосности установки, слабого поглощения в воздухе и зеркале и т. д. Поэтому мы предлагаем задавать аппаратную функцию  $HF = F_i^t/F_i^r$ , которая представляет собой отношение

ние измеренных опорных полей. С учетом влияния этой аппаратной функции отношение  $F_{rt}$  в выражении (9) должно быть умножено на  $HF$ .

### 2.3. Численная проверка моделей

Переход от ПМ к ПБП связан с изменением граничных условий. Проверка влияния границы 3–4 исследуемой системы (см. рис. 1) проведена путем сравнения численных решений общих выражений для ПМ и ПБП, представляющих собой ряды Тейлора с заданным порядком разложения  $p_{max}$  и поляризацией (см. Приложение). В качестве экспериментальных данных взято измеренное отношение  $F_r/F_t$  для кремниевой (Si) пленки толщиной 10 мкм, нанесенной на кремниевую подложку толщиной 378 мкм.

В рамках текущей работы численное решение для ПМ и ПБП было получено с помощью модифицированного генетического алгоритма повышенной сходимости (ГАПС), детальное описание которого приведено в работе [22], и алгоритма Левенберга–Марквардта (ЛМ) [23, 24]. В качестве целевой функции использована среднеквадратичная ошибка. Дальнейшее описание принципов и логики получения численного решения справедливо как для ТМ-, так и для ТЕ-поляризации. Максимальное значение индекса суммирования в выражениях (A.8), (A.9) и (A.17), (A.18) Приложения носит обозначение  $p_{max}$  и определяет степень полинома по  $k_{2z}$  в соответствии с выражением  $p = 2(p_{max} + 1)$  (при условии перехода от  $\tilde{\epsilon}_2$  к  $k_{2z}$ ).

Целевая функция содержит множество локальных экстремумов, что приводит к проблеме нерегулярности численной задачи аппроксимации выражений (A.8) и (A.17) Приложения при данном  $p_{max}$ , т. е. к зависимости аппроксимированного  $\tilde{n}_2(\nu)$  от начальных и граничных условий.

В связи с этим нахождение глобального экстремума целевой функции заключалось в оптимизации выражения (A.8) или (A.17) Приложения при данном  $p_{max}$  с помощью ГАПС при минимальном  $\nu_0$  рассматриваемого частотного интервала. После этого оптимизация указанного выражения для всех последующих значений  $\nu_i$  осуществлялась с помощью метода ЛМ при начальных условиях, равных полученному значению  $\tilde{n}_2(\nu_{i-1})$  для предыдущего значения  $\nu_{i-1}$  в рассматриваемом интервале частот ( $i \in \mathbb{N}$ ). Граничные условия определены требованием положительности вещественной и мнимой частей  $\tilde{n}_2$ . Начальные условия задавались значением  $\tilde{n}_{2,0} = 10 + 10i$ . В реализованной схеме алгоритм ЛМ в соответствии со свойством непрерывности функ-

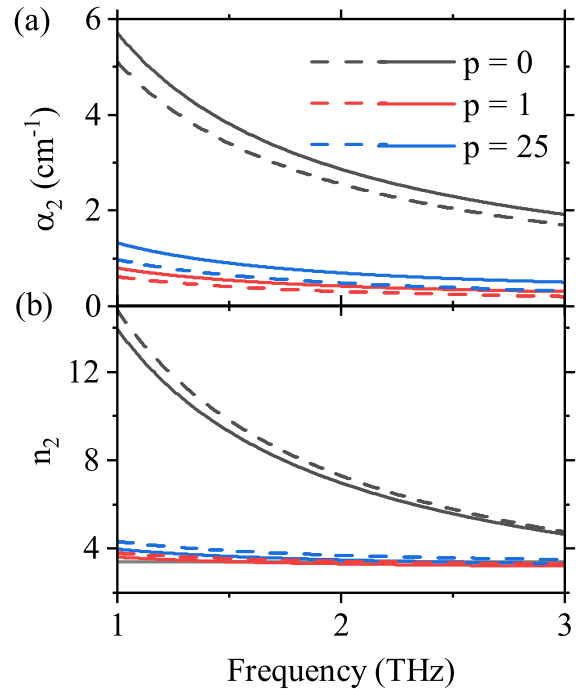


Рис. 2. Сравнение зависимостей  $\alpha_2$  (a) и  $n_2$  (b) от частоты, полученных на основе измерений пленки Si и численного решения с помощью ГАПС и алгоритма ЛМ для ПМ (сплошные линии) и ПБП (штриховые линии) при  $p_{max} = 0$  (черные линии),  $p_{max} = 1$  (красные) и  $p_{max} = 25$  (синие)

ции  $\tilde{n}_2(\nu)$  уточнял положение глобального экстремума целевой функции при переходе к последующему значению частоты  $\nu_i$ . Результатом является восстановленная частотная зависимость  $\tilde{n}_2(\nu)$ , полученная на основе выражения (A.8) или (A.17) Приложения при фиксированном  $p_{max}$  и соответствующая глобальному экстремуму целевой функции в рамках заданных граничных условий.

На рис. 2 показано сравнение численных решений общих выражений (A.9) и (A.18) Приложения для ПМ и ПБП при  $p_{max} = 0, 1, 25$  для ТМ-поляризации, в виде сравнения коэффициента поглощения  $\alpha_2$  и показателя преломления  $n_2$  пленки кремния, расположенной на кремниевой подложке (Si/Si). Толщина пленки кремния составила 10 мкм, толщина подложки — 378 мкм.

Оптические параметры пленки кремния  $\alpha_2$  и  $n_2$  близки для численных решений двух рассмотренных моделей. Для ПМ значения варьируются в пределах  $n_2 = 3.2...3.55$  и  $\alpha_2 = 0.3...0.8$  см<sup>-1</sup>, а для ПБП —  $n_2 = 3.3...3.6$  и  $\alpha_2 = 0.2...0.6$  см<sup>-1</sup> в диапазоне частот от 1 до 3 ТГц при  $p_{max} = 1$ .

**Таблица 1.** Относительные ошибки  $\Delta\alpha_2$  и  $\Delta n_2$  (в процентах), вызванные неопределенностями параметров  $d_f$ ,  $d_s$ ,  $\theta$  и  $n_3$ , для моделей ПМ и ПБП, рассчитанные при частоте 2 ТГц и  $p_{max} = 1$ , для системы Si/Si ( $d_2 = 10$  мкм,  $d_3 = 378$  мкм)

Параметр	ПМ		ПБП	
	$\Delta\alpha_2$	$\Delta n_2$	$\Delta\alpha_2$	$\Delta n_2$
$d_f$	0.1	0.075	0.06	0.02
$d_s$	0.65	0.1	1.5	2
$\theta$	6.8	3	6.5	1.1
$n_3$	3	6	2	3

Исследование различий в точности определения  $\tilde{n}_2^{(1)}$  между двумя рассматриваемыми моделями может быть проведено на основе сравнения относительных ошибок, вызванных неопределенностями параметров, идентичных для обеих моделей. Погрешность  $\Delta\tilde{n}_2^{(1)}$ , вызванная систематическими неопределенностями в измерении толщины пленки  $d_f$ , толщины подложки  $d_s$ , показателя преломления подложки  $\tilde{n}_3$  и угла падения  $\theta$ , может быть выражена как

$$\Delta\tilde{n}_2^{(1)} = \frac{\partial\tilde{n}_2^{(1)}}{\partial d_f}\Delta d_f + \frac{\partial\tilde{n}_2^{(1)}}{\partial d_s}\Delta d_s + \frac{\partial\tilde{n}_2^{(1)}}{\partial\tilde{n}_3}\Delta\tilde{n}_3 + \frac{\partial\tilde{n}_2^{(1)}}{\partial\theta}\Delta\theta + \frac{\partial\tilde{n}_2^{(1)}}{\partial(F_r/F_t)}\Delta(F_r/F_t), \quad (13)$$

где  $\Delta d_f = 100$  нм  $\Rightarrow \Delta d_f/d_f = 1\%$ ;  $\Delta d_s = 1$  мкм  $\Rightarrow \Delta d_s/d_s = 0.25\%$ ;  $\Delta n_3 = 0.05 \Rightarrow \Delta n_3/n_3 = 1.5\%$ ;  $\Delta\theta = 0.3^\circ \Rightarrow \Delta\theta/\theta = 1.6\%$  — экспериментальные неопределенности параметров модели, связанные с технологическими процессами или экспериментальными отклонениями. Рассчитанные относительные ошибки  $\Delta\alpha_2$  и  $\Delta n_2$  (13) в процентах, вызванные неопределенностями параметров модели для системы Si/Si, приведены в табл. 1.

Согласно полученным результатам для рассмотренных моделей наиболее существенное влияние на величины  $\Delta\alpha_2$  и  $\Delta n_2$  оказывает вариация значений параметров  $\theta$  и  $n_3$ . При этом для ПМ эти значения выше, что может косвенно свидетельствовать о ее меньшей точности по сравнению с ПБП. Проведенный анализ и сравнение с ПМ показывают, что применение оконной фильтрации и использование ПБП для восстановления диэлектрических свойств пленок также является релевантным подходом. Для ПБП существуют аналитические решения при  $p_{max} = 1$ , которые характеризуются высокой точностью оценки оптических параметров, что подтверждается путем сравнения относительных оши-

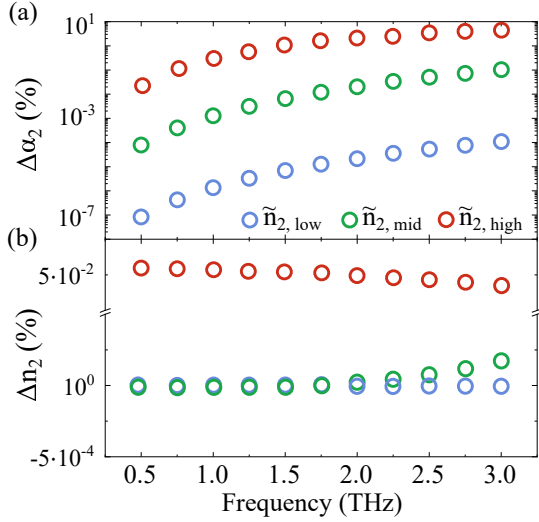
бок при  $p_{max} = 1$  и  $p_{max} = 25$  (см. рис. 2). В связи с этим дальнейшие численные и аналитические исследования пленок будут проведены на основе ПБП.

Последующая верификация ПБП (9)–(12) в виде численной оценки относительных ошибок  $n_2$  и  $\alpha_2$  проводилась в несколько этапов: 1) задание толщины пленки  $d_f$  и исходного модельного значения  $\tilde{n}_2$ ; 2) расчет  $F_r/F_t$ ; 3) определение  $\tilde{n}_2^{(1)}$  на основе выражения (A.18); 4) сравнение полученного значения комплексного показателя преломления пленки  $\tilde{n}_2$  с исходным из пункта 1. Исходное модельное значение  $\tilde{n}_2$  не зависит от частоты.

Поскольку длина волны ТГц-излучения больше толщины исследуемого слоя, мы предполагаем, что частота может значительно влиять на рассчитанные относительные ошибки найденных значений  $n_2$  и  $\alpha_2$ . В качестве примера на рис. 3 представлены спектры рассчитанных относительных ошибок для трех модельных значений  $\tilde{n}_2$ :  $\tilde{n}_{2,low} = 2 + 0.024i$ ,  $\tilde{n}_{2,mid} = 6.76 + 0.239i$  и  $\tilde{n}_{2,high} = 521 + 598i$ . Для данных расчетов использовалось выражение (A.18) ( $p_{max} = 1$ ). Приведенный перечень модельных значений  $\tilde{n}_2$  покрывает широкий спектр материалов (или отдельных их состояний), от диэлектриков ( $\tilde{n}_{2,low}$ ) и полупроводников ( $\tilde{n}_{2,mid}$ ) до проводников ( $\tilde{n}_{2,high}$ ). Параметр толщины модельных пленок составил  $d_f = 400$  нм ( $\tilde{n}_{2,low}$ ,  $\tilde{n}_{2,mid}$ ) и  $d_f = 100$  нм ( $\tilde{n}_{2,high}$ ). Моделирование проведено для пленок на кремниевой подложке ( $\tilde{n}_3 = 3.418 + 0.0001i$ ).

Для всех модельных пленок наблюдается рост относительной ошибки  $\Delta\alpha_2$  с увеличением частоты. Для  $\tilde{n}_{2,low}$  и  $\tilde{n}_{2,mid}$  относительная ошибка мала во всем рассмотренном интервале частот в сравнении с  $\tilde{n}_{2,high}$ , погрешности для которой составили сотни процентов, что ограничивает применение нашей модели для металлических пленок. При толщине пленки с  $\tilde{n}_{2,high}$  более 100 нм амплитуда прошедшего поля  $F_t$  стремится к нулю, что противоречит одному из условий применимости модели ПБП ввиду стремления отношения  $F_r/F_t$  в выражении (9) к бесконечности. В противоположном случае с уменьшением толщины пленки растет неоднородность материала, что влияет на электромагнитный отклик в ТГц-диапазоне частот и затрудняет последующую оценку оптических параметров [25, 26].

Остановившись на моделях прозрачной  $\tilde{n}_{2,low}$  и полупрозрачной  $\tilde{n}_{2,mid}$  пленок, проведем сравнение точности предложенной модели ПБП и известных моделей на основе уравнений Френеля, для пропускания через пленку на подложке и для отражения от поверхности пленки при ТМ-поляризации падающего излучения (см. рис. 4). Выражение для коэф-



**Рис. 3.** Относительные ошибки найденных значений  $n_2$  (a) и  $\alpha_2$  (b) в зависимости от частоты для  $\tilde{n}_{2,low}$  (синие кружки),  $\tilde{n}_{2,mid}$  (зеленые) и  $\tilde{n}_{2,high}$  (красные), полученных с помощью выражения (A.18) ( $p_{max} = 1$ ). Параметр толщины  $d_f$  модельных пленок с  $\tilde{n}_{2,low}$  и  $\tilde{n}_{2,mid}$  составил 400 нм, а пленки с  $\tilde{n}_{2,high}$  — 100 нм, показатель преломления подложки  $\tilde{n}_3 = 3.418 + 0.0001i$

коэффициента пропускания при ТМ-поляризации имеет вид [1, 21, 27]

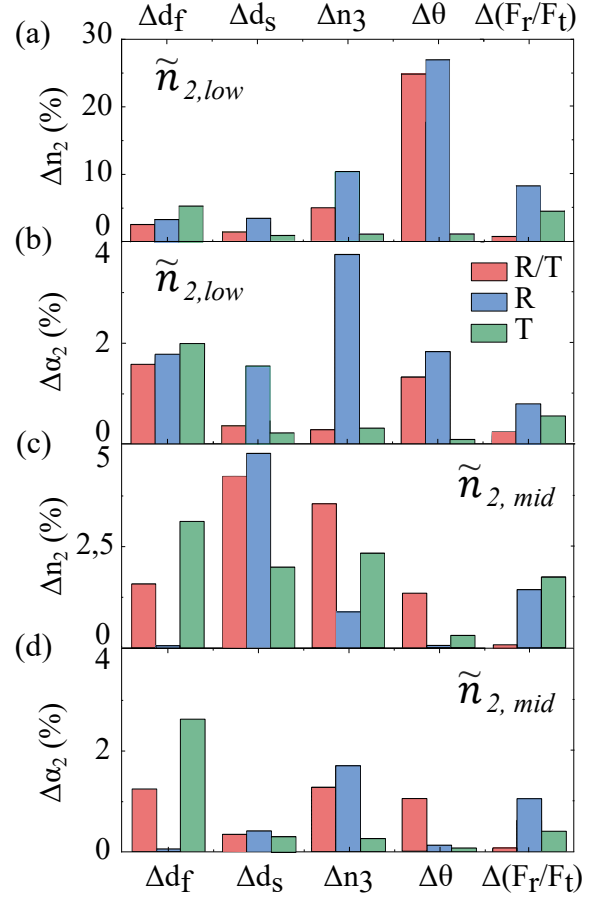
$$E_{trn} = \frac{E_{trn, film}}{E_{trn, subs}} = \frac{t_{1,2}t_{2,3}P_2(d_2)}{t_{1,3}P_1(d_2)} FP. \quad (14)$$

Коэффициент отражения при ТМ-поляризации равен [1, 27]

$$E_{rfl} = \frac{E_{rfl, film}}{E_{rfl, subs}} = \frac{t_{1,2}r_{2,3}t_{2,1}P_2^2(d_2)}{r_{1,3}P_1^2(d_2)} FP. \quad (15)$$

Здесь  $E_{trn, subs}, E_{trn, film}$  — измеряемые поля, прошедшие соответственно через подложку и пленку, которая нанесена на подложку согласно конфигурации на рис. 1;  $E_{rfl, subs}, E_{rfl, film}$  — измеряемые поля, отраженные от того же образца в тех же конфигурациях (см. рис. 1);  $i, j = 1, 2, 3$  — индексы, обозначающие среду: 1 — воздух, 2 — пленка и 3 — подложка (см. рис. 1);  $d_2$  — толщина пленки;  $t_{i,j}, r_{i,j}$  — амплитудные коэффициенты пропускания и отражения Френеля соответственно [19], FP — член, учитывающий вклад от эффекта Фабри–Перо.

Обозначим модель только на пропускание буквой (Т) (14), только на отражение — (R) (15), а ПБП — (R/T) (A.18). Для трех моделей (Т, R, R/T) сравним погрешности  $\tilde{n}_{2,low}$  и  $\tilde{n}_{2,mid}$ , вызванные систематическими неопределенностями в измерении  $d_f, d_s, n_3, \theta$  и  $F_r/F_t$ , как это сделано в (13).



**Рис. 4.** Сравнение относительных ошибок  $\Delta n_2$  (a, c) и  $\Delta \alpha_2$  (b, d), вызванных неопределенностями  $\Delta d_f, \Delta d_s, \Delta n_3, \Delta \theta$  и  $\Delta(F_r/F_t)$  для пленок толщиной 400 нм. Расчеты проведены для моделей на пропускание (Т) по формуле (14), на отражение (R) по формуле (15) и ПБП (R/T) по формуле (A.18) ( $p_{max} = 1$ ). Рассмотрены два модельных случая  $\tilde{n}_{2,low}$  (a, b) и  $\tilde{n}_{2,mid}$  (c, d)

Экспериментальные неопределенности имеют значения  $\Delta d_f = 10$  нм (1%);  $\Delta d_s = 1$  мкм (0.25%);  $\Delta n_3 = 0.05$  (1.5%);  $\Delta \theta = 0.3^\circ$  (1.6%). Неточность в значениях  $F_r$  и  $F_t$  обусловлена как систематическими ошибками при регистрации отраженного излучения, так и случайными ошибками (шумом). Чтобы оценить неопределенность измеренных полей  $F_r$  и  $F_t$ , которые в выражении (9) содержатся только в виде  $F_r/F_t$ , представим их отношение как сумму полезного сигнала и шумовой составляющей  $(F_{r, sig} + F_{r, noise}) / (F_{t, sig} + F_{t, noise})$ , где в каждом члене присутствуют вклады от амплитуды  $s$  и фазы  $\phi$ . Зададим предельные отклонения значений амплитуды шума:  $s_{F_r, noise} = 9 \cdot 10^{-6}$ ,  $s_{F_t, noise} = 3 \cdot 10^{-8}$ , и фазы шума:  $\phi_{F_r, noise} = -20^\circ$ ,  $\phi_{F_t, noise} = 20^\circ$ . Далее, опираясь на формулу (13), проанализируем от-

носительные ошибки  $\Delta n_2$  и  $\Delta \alpha_2$  пленок толщиной 400 нм, вызванные неопределенностями в параметрах модели и измерениях полей  $F_r$  и  $F_t$ .

Изучение вопроса оптимизации толщины пленки продемонстрировало невозможность использования модели (Т) (формула (14)) для тонких прозрачных пленок из-за больших значений неопределенностей [28]. Действительно, относительные ошибки  $\Delta n_2$  и  $\Delta \alpha_2$ , вызванные  $\Delta d_f$ , выше для прозрачных пленок в модели (Т) (см. рис. 4 а, б). Сравнивая модели (R) и (R/T), можно заключить, что одновременное измерение прошедшего и отраженного излучения потенциально уменьшает относительные ошибки в случае  $\tilde{n}_{2,low}$  (см. рис. 4 а, б). Для полупрозрачной пленки относительные ошибки  $\Delta \alpha_2$  и  $\Delta n_2$  имеют сравнительно меньшие значения, чем для  $\tilde{n}_{2,low}$ , для большинства параметров модели (см. рис. 4 с, d). Также в случае  $\tilde{n}_{2,low}$  неопределенности показателя преломления подложки  $\Delta n_3$  и угла падения  $\Delta \theta$  вносят основной вклад в значения  $\Delta \alpha_2$  и  $\Delta n_2$ . Трехлучевая модель (R/T) демонстрирует наименьшую относительную ошибку, вызванную неопределенностью в измерениях  $F_r/F_t$ , по сравнению с моделями (Т) и (R).

### 3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ПРОВЕРКА МОДЕЛИ

В этом разделе представлена экспериментальная верификация разработанной модели ПБП на примере пленок GeTe разной толщины, нанесенных на одну кремниевую подложку. Напомним, что GeTe относится к классу халькогенидных фазоизменяемых материалов, которые претерпевают энергонезависимый фазовый переход из аморфного состояния (изолятор) в кристаллическое (проводник) в течение наносекундных интервалов времени, изменяя свои электрические и оптические свойства при тепловом, электрическом или оптическом воздействии [29]. Фазовый переход в GeTe соответствует трансформации структуры из R3m в Fm-3m при критической температуре 600–700 К [30, 31]. В результате пленки из GeTe являются релевантным материалом для тестирования ПБП, поскольку позволяют эмпирически оценить эффективность данного приближения в широком диапазоне значений коэффициентов преломления и поглощения.

#### 3.1. Материалы и методы

В рамках работы исследованы пленки GeTe толщиной 200, 600 и 1000 нм, осажденные методом тер-

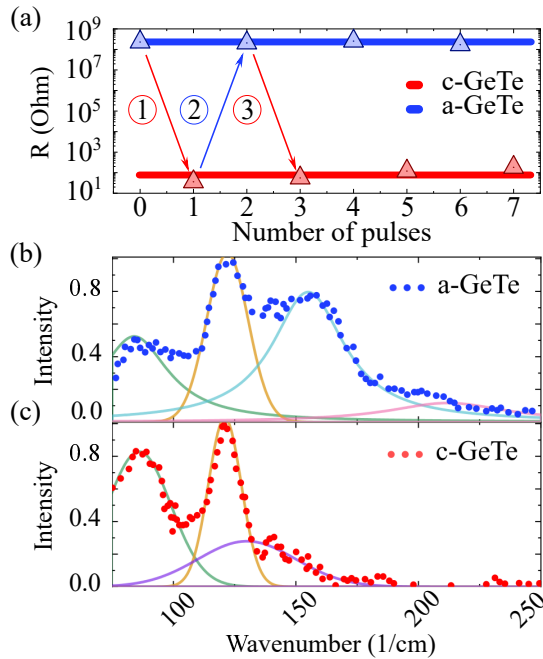
мического напыления на кремниевые подложки толщиной  $385 \pm 2$  мкм. Подложки были предварительно оксидированы, толщина SiO<sub>2</sub> составила 300 нм. Фазовый переход изолятор–металл получен при отжиге образцов в среде газообразного азота в течение 5 мин для каждого шага по температуре. Температура отжига повышалась с 40 до 120 °С с шагом 40 °С, затем со 120 до 150 °С с шагом 10 °С, со 150 до 160 °С с шагом 5 °С и, наконец, со 160 до 220 °С с шагом 20 °С.

Контроль фазового состояния пленок GeTe осуществлялся по спектрам комбинационного рассеяния (КР) в геометрии обратного рассеяния в диапазоне 70–250 см<sup>-1</sup> на КР-микроскопе (Horiba, Thermo Scientific, Франция). Длина волны диодного лазера составляла 785 нм, средняя мощность 1 мВт, спектральное разрешение 2 см<sup>-1</sup> и увеличение  $\times 100$ . Усреднение проводилось по 50 сканам. Плотность мощности лазерного излучения на образцах во избежание лазерно-индуцированной кристаллизации была ограничена величиной 4 кВт/см<sup>2</sup>. Фон в спектрах комбинационного рассеяния вычитался методом кубической сплайн-интерполяции.

Одновременные измерения терагерцевого отражения ( $F_r$ ) и пропускания ( $F_t$ ) пленок GeTe на кремниевой подложке после каждого этапа отжига проводились с помощью коммерческого импульсного ТГц-спектрометра Terasmart (Menlo Systems GmbH, Германия). Два независимых фотопроводящих детектора измеряли линейно р-поляризованные поля. Динамический диапазон спектрометра составлял 95 дБ, спектральный диапазон — 1–3 ТГц. ТГц-излучение фокусировалось на образце, при этом размер ТГц-пучка на образце составлял около 500 мкм на уровне  $1/e^2$ . Угол падения ТГц-излучения на образец мог варьироваться от 22° до 55°, однако в данном исследовании он составлял 30°. Чтобы уменьшить влияние поглощения водяным паром, эксперименты проводились с использованием системы осушения воздуха при относительной влажности 10 %. Для каждого образца усреднение результатов проводилось по трем измерениям.

### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Исследованы пленки GeTe толщиной от 200 до 1000 нм, осажденные на кремниевую подложку. GeTe является удобным эталонным объектом для верификации модели ПБП, поскольку обладает высоким контрастом оптических и диэлектрических параметров между аморфным и кристаллическим



**Рис. 5.** а — Измеренное сопротивление пленок GeTe толщиной 1000 нм: аморфных (синяя линия), после отжига при 220 °С (красная линия), оптически индуцированных аморфных (синие треугольники), оптически индуцированных кристаллических (красные треугольники). б, с — Спектры комбинационного рассеяния аморфных (b) и оптически кристаллизованных (c) пленок GeTe толщиной 1000 нм. Колебательные моды GeTe определены функцией Гаусса

состояниями. Все экспериментальные данные получены для случая ТМ-поляризации и  $p_{max} = 1$  (11) модели ПБП, описание которой также приведено в нашем исследовании [4].

#### 4.1. Контроль фазового состояния GeTe методом КР-спектроскопии при оптико-индуцированном фазовом переходе

Для оптического переключения пленок GeTe толщиной 1000 нм между аморфным и кристаллическим состояниями применялся эксимерный K<sub>g</sub>F-лазер с длительностью импульса 30 нс и длиной волны 248 нм. Экспериментально определено, что для нагрева слоя GeTe выше температуры кристаллизации достаточно одного лазерного импульса с плотностью мощности 500 мДж/см<sup>2</sup>. Нагрев материала выше температуры плавления и закалка в неупорядоченную (аморфную) фазу осуществлялись путем облучения образца лазерным импульсом с теми же параметрами (см. рис. 5 а).

Дополнительный контроль фазового состояния проводился на основе измерения электрических свойств пленок GeTe на постоянном токе при термической и оптической активации фазовых переходов, что отражено на графиках рис. 5 а. Аморфные пленки GeTe демонстрируют высокое сопротивление на постоянном токе  $2.2 \cdot 10^8$  Ом (сплошная синяя линия на рис. 5 а), что соответствует удельному сопротивлению 2200 Ом·см. После термического отжига пленки при температурах до 200 °С или оптической кристаллизации ее сопротивление на постоянном токе уменьшается до 80 Ом (сплошная красная линия на рис. 5 а), что соответствует удельному сопротивлению  $80 \cdot 10^{-5}$  Ом·см.

Спектр КР аморфной пленки GeTe (см. рис. 5 б) указывает на существование специфических КР-активных мод вблизи 85, 121, 155 и 219 см<sup>-1</sup>, аналогичных тем, о которых сообщалось ранее [31, 32]. Полученный спектр отражает локальную структуру аморфного GeTe, состоящую из дефектных октаэдрических единиц и смешанных тетраэдров GeTe<sub>4-n</sub>Ge<sub>n</sub> [33, 34]. В частности, спектральные особенности при 85 и 155 см<sup>-1</sup> связаны с изгибными и дыхательными модами дефектных октаэдрических участков [33], а колебания при 121 и 219 см<sup>-1</sup> относятся к симметричному и асимметричному растяжению GeTe в тетраэдрах [35, 36]. Аморфная фаза при нагревании или при оптической кристаллизации превращается в ромбоэдрическую структуру с характерным КР-спектром (см. рис. 5 с), состоящим в основном из вырожденных E (85 см<sup>-1</sup>) и симметричных A<sub>1</sub> (121 см<sup>-1</sup>) колебаний [37, 38]. Неразрешенные высокочастотные особенности часто связаны с дефектами в ромбоэдрической решетке. Моды измеренных спектров фитированы функцией Гаусса, параметры которой ( $\omega_0$  — центральная частота и FWHM — полная ширина на полувысоте,  $\tau$  — время жизни связанных фононов) приведены в табл. 2.

#### 4.2. Восстановление диэлектрических характеристик пленок GeTe

Для пленок GeTe толщиной 1000 нм, осажденных на кремниевую подложку, проведены одновременные измерения отраженного и прошедшего полей методом трехлучевой THz-TDS. Измерения проводились в ТМ-поляризации после каждого этапа термического отжига, что позволило отследить динамику фазового перехода в ТГц-диапазоне частот.

Для случая ТМ-поляризации при  $p_{max} = 1$  получены спектры комплексного показателя преломления  $\tilde{n}_2$ , из которых выражены коэффициент погло-

**Таблица 2.** Параметры функции Гаусса для КР-мод пленок GeTe:  $\omega_0$  — центральная частота и FWHM — полная ширина на полувысоте,  $\tau$  — время жизни связанного фонона

Параметры	$\omega_0, \text{см}^{-1}$	FWHM, $\text{см}^{-1}$	$\tau, \text{фс}$
a-GeTe	85	38	1.47
	121	17	3.17
	155	36	1.5
c-GeTe	85	26	2.07
	121	11	4.90
	130	30	1.8
	219	50	1.08

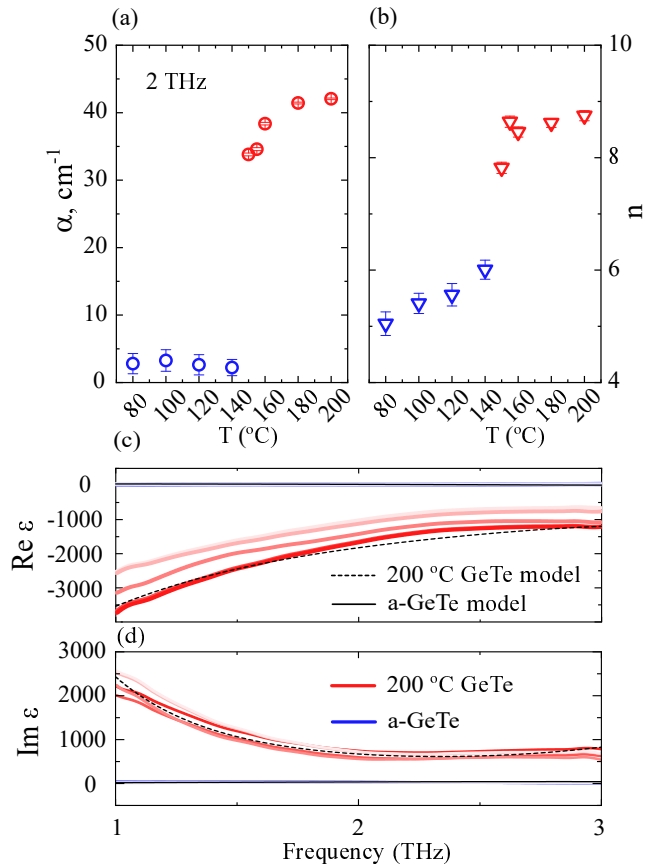
щения  $\alpha_2$  и показатель преломления  $n_2$  для пленок GeTe толщиной 1000 нм с использованием известных соотношений:

$$\tilde{n}^2 = (n + ik)^2 = \left(n + i\alpha \frac{c}{\omega}\right)^2 = \epsilon_r + i\epsilon_i = \tilde{\epsilon}. \quad (16)$$

Исследование динамики фазового перехода пленок GeTe толщиной 1000 нм при температурах от 80 до 200 °C проведено на фиксированной частоте 2 ТГц (см. рис. 6 а, б). В интервале 145–150 °C происходит скачкообразный фазовый переход пленок GeTe, что сопровождается значительным изменением коэффициента поглощения и показателя преломления. В ранних исследованиях было показано, что температура фазового перехода GeTe варьируется от 138 до 230 °C в зависимости от способа осаждения пленки, ее толщины, материала подложки, а также от условий, в которых проводился отжиг [39]. В настоящем исследовании при отжиге исследуемых образцов выше 200 °C оптические параметры пленок GeTe оставались неизменными.

Ромбоэдрический GeTe с пространственной группой R3m имеет две активные КР- и ИК-моды,  $A_1$  и  $E$ . Ранее мы показали, что моды при 85 и 130  $\text{см}^{-1}$  (т.е. 2.55 и 3.9 ТГц) принадлежат колебаниям  $E$  и  $A_1$  соответственно, поэтому ожидается присутствие оптических фотонов в ТГц-диапазоне, которые уже наблюдались для GeTe, но в более узком диапазоне частот [40]. Комплексная проницаемость для пленок GeTe толщиной 1000 нм при различных температурах отжига показана на рис. 6 с, d.

Действительная часть диэлектрической проницаемости кристаллической пленки имеет отрицательные значения, что ожидаемо для металлов и полуметаллов [41, 42], чья диэлектрическая проницаемость может быть описана моделью Друде. В области высоких частот (выше 2 ТГц) мнимая



**Рис. 6.** Зависимости значений коэффициента поглощения (а) и показателя преломления (б) пленок GeTe толщиной 1000 нм от температуры отжига на фиксированной частоте 2 ТГц. Зависимости от частоты действительной (с) и мнимой (d) частей диэлектрической проницаемости пленок GeTe толщиной 1000 нм, полученные на основе экспериментальных данных с помощью модели ПБП, после каждого этапа отжига (до 200 °C). Аппроксимация моделью Друде–Лоренца показана сплошной и пунктирной черными линиями

часть диэлектрической проницаемости незначительно возрастает. Это может быть связано с широкополосным фонон-фононным взаимодействием на частоте 2.6 ТГц, которое описывается моделью гармонического осциллятора. С учетом вклада свободных носителей в виде дырок, а также фонон-фононного взаимодействия спектры проницаемости как a-GeTe, так и c-GeTe могут быть описаны моделью Друде–Лоренца:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{A}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma} + \frac{\sigma_0}{(1 + i\omega\tau)(-i\omega\epsilon_0)}, \quad (17)$$

где  $\epsilon_\infty = 1.27$  — высокочастотное значение проницаемости,  $A = 600$  и  $9500$  — сила осциллятора,  $\omega_0 = 2.6$  и  $2.6$  ТГц — резонансная частота,  $\gamma = 3$  и  $2.2$  ТГц —

частота затухания,  $\sigma_0 = 0$  и 12500 См/м — проводимость постоянного тока,  $\tau = 1.76$  фс — среднее время между электрон-ионными столкновениями для а-GeTe и с-GeTe соответственно. Кристаллизация GeTe сопровождается уменьшением FWHM что соответствует уменьшению частоты затухания фонона  $\gamma = \hbar/\text{FWHM}$  в с-GeTe. Подчеркнем, что знак «+» в члене Друде обусловлен типом носителей — дырками, которые распространяются обратно во времени относительно электронов.

Проводимость по постоянному току пленок GeTe толщиной 1000 нм была измерена двухточечным методом и усреднена по 5 измерениям. Полученные значения составили  $0.45 \cdot 10^{-3}$  См/м для а-GeTe и 12500 См/м для с-GeTe. Мы предполагаем, что наличие гармонического осциллятора в ТГц-спектрах GeTe связано с  $E$  и  $A_1$  фононами [40]. Кристаллические фазы демонстрируют явный контраст проводимости по сравнению с аморфной фазой, что отчасти связано с увеличением амплитуды фононных колебаний, которая возрастает более чем на порядок.

### 5. ВЛИЯНИЕ СЛУЧАЙНЫХ ОШИБОК НА ТОЧНОСТЬ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ПЛЕНКИ

Как было показано в разд. 2.3, погрешности определения  $\tilde{n}_2^{(1)}$  в зависимости от неопределенностей различных параметров могут быть оценены с помощью выражения (13). Все члены выражения (13) вызваны систематическими ошибками, а член

$$\frac{\partial \tilde{n}_2^{(1)}}{\partial (F_r/F_t)} \Delta(F_r/F_t)$$

— еще и случайной ошибкой. Случайные ошибки для метода THz-TDS могут возникать из-за флуктуаций лазера, дробового шума в ТГц-антеннах, электронного шума в системе детектирования, случайного джиттера в линии задержки, механических колебаний в установке, а также по ряду других причин [1].

Заменяя усредненное значение шума из разд. 2.3 на экспериментально измеренный шум, исследуем его влияние на точность восстановления оптических параметров пленок. Спектр шума, регистрируемый детектором на пропускание, при разном количестве усреднений  $N$  (от 1 до 5000) приведен на рис. 7. Для схемы на пропускание шумовой сигнал получен при размещении зеркала в области ТГц-перетяжки, а для схемы на отражение шум измерялся в отсутствие какого-либо образца на оптическом пути.

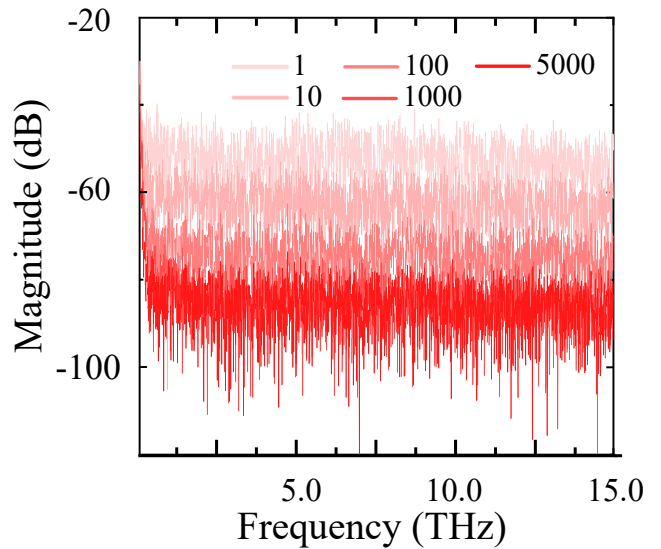
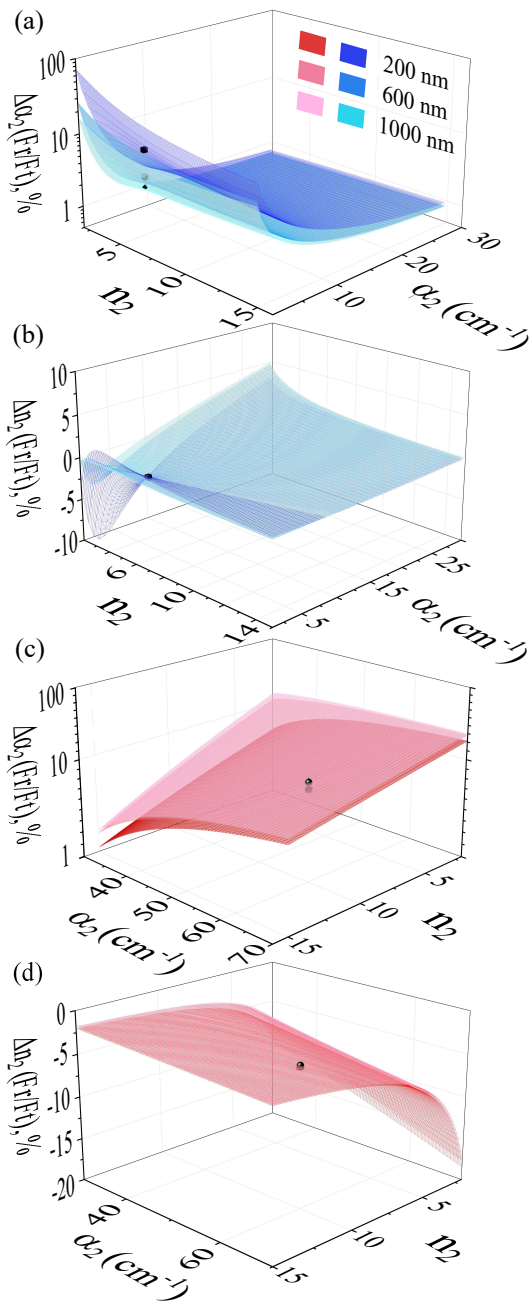


Рис. 7. Спектр шума  $F_{avg|t}^{(N)}$  в зависимости от количества усреднений  $N = 1, 10, 100, 1000, 5000$

Основываясь на выражении (13), рассмотрим относительные ошибки  $\Delta n_2$  и  $\Delta \alpha_2$  для аморфных (рис. 8 *a, b*) и кристаллических (рис. 8 *c, d*) пленок GeTe толщиной 200, 600 и 1000 нм, вызванные измеренным  $F_{avg|t,r}^{(N)}$  при  $N = 1000$  (см. рис. 7). Значения коэффициента поглощения  $\alpha_2(\omega)$  и показателя преломления  $n_2(\omega)$  задавались с помощью ПБП при  $p_{max} = 1$  в соответствии с экспериментальными спектрами пленок GeTe различной толщины. Значения коэффициента поглощения и показателя преломления для аморфных пленок GeTe толщиной 200, 600 и 1000 нм на частоте 2 ТГц составили  $\alpha_2 = 3 \text{ см}^{-1}$  и  $n_2 = 4$ . Те же значения для кристаллических пленок равны  $\alpha_2 = 60 \text{ см}^{-1}$  и  $n_2 = 10$ .

Согласно результатам расчетов, относительные ошибки  $\Delta n_2$  и  $\Delta \alpha_2$  значительно увеличиваются с уменьшением толщины пленки, что наблюдается для аморфных и кристаллических пленок GeTe толщиной 200 нм (см. рис. 8). Наименьшие значения  $\Delta n_2$  и  $\Delta \alpha_2$  (около 1%) получены для аморфных и кристаллических пленок толщиной 1000 нм. Несмотря на резкий рост величин относительных ошибок при уменьшении значений параметров  $n_2$ ,  $\alpha_2$  и  $d_f$  (или каждого из них), полученные результаты демонстрируют возможность успешного применения разработанной модели ПБП в широком диапазоне значений параметров пленки. Путем взятия нормированной разности отраженного  $F_r$  и прошедшего  $F_t$  полей модель ПБП устраняет доминирующий вклад шумовой составляющей спектра, что позволяет исследовать как прозрачные, так и



**Рис. 8.** Относительные ошибки  $\Delta\alpha_2$  (a, c) и  $\Delta n_2$  (b, d), вызванные экспериментально измеренными неопределенностями  $F_r/F_t$  аморфных (a, b) и кристаллических (c, d) пленок GeTe толщиной 200, 600 и 1000 нм. Точками показаны значения погрешностей, соответствующие реальным оптическим параметрам измеренных пленок. Мы установили  $\theta = 30$ ,  $\tilde{n}_3 = 3.2 - 1i$ ,  $d_s = 385$  мкм. Для каждой пленки поля  $F_r$  и  $F_t$  были измерены на частоте 2 ТГц. Относительные ошибки приведены для расчетов с помощью модели ПБП при  $p_{max} = 1$  (A.18)

непрозрачные материалы с толщинами, значительно меньшими длины зондирующей ТГц-волны.

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе разработан и экспериментально реализован метод восстановления комплексного показателя преломления субволновых тонких пленок в терагерцевом диапазоне, основанный на одновременном анализе отраженного и прошедшего излучения. В отличие от традиционных подходов, использующих только коэффициент пропускания либо требующих опорного образца, предложенная схема обеспечивает однозначное и устойчивое определение диэлектрических параметров без дополнительных априорных предположений. Предложены две модели для оценки оптических параметров пленки: полноволновая модель (ПМ) и модель в приближении бесконечной подложки (ПБП). Сравнение численных решений для пленки кремния, полученных на основе выражений ПМ и ПБП, продемонстрировало близость значений  $\alpha_2$  и  $n_2$  для двух указанных моделей.

На примере пленок GeTe показано, что температурная эволюция восстановленных оптических характеристик демонстрирует резкое изменение параметров в области фазового перехода аморфное–кристаллическое состояние, сопровождающееся ростом эффективной проводимости и мнимой части диэлектрической функции. Наблюдаемое поведение согласуется с известными представлениями о скачкообразном увеличении концентрации свободных носителей при кристаллизации GeTe.

**Благодарности.** Авторы выражают глубокую благодарность J.-L. Coutaz за обсуждение статьи и ценные советы. Также авторы благодарят В. Н. Глебова и группу О. А. Новодворского за подготовку образцов GeTe.

**Финансирование.** Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ им. М. В. Ломоносова в части экспериментального исследования, государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» в части изготовления образцов, а также в рамках государственного задания ТГУ (№ FSWM-2025-0038) в части вычислительных методов.

**Конфликт интересов.** Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

**Вклад авторов.** Вклад авторов равноценен.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Полноволновая модель

В полноволновой модели отраженное и прошедшее поля связаны с падающим полем линейными соотношениями, представленными формулой (1) в виде граничных условий, которые также могут быть записаны на основе метода матрицы переноса:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -K_1 & -K_2 & K_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e_{2+}^f & (e_{2+}^f)^{-1} & -e_{3+}^f & (-e_{3+}^f)^{-1} & 0 \\ 0 & K_2 e_{2+}^f & -K_2 (e_{2+}^f)^{-1} & -K_3 e_{3+}^f & K_3 (e_{3+}^f)^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{3+}^{fs} & (e_{3+}^{fs})^{-1} & -e_{1+}^{fs} \\ 0 & 0 & 0 & K_3 e_{3+}^{fs} & -K_3 (e_{3+}^{fs})^{-1} & -K_1 e_{1+}^{fs} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_r \\ F_{2+} \\ F_{2-} \\ F_{3+} \\ F_{3-} \\ F_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -e_{1+}^0 \\ -K_1 e_{1+}^0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} F_i. \quad (A.1)$$

Коэффициенты связи рассчитаны как детерминанты матриц для полей  $\Delta F_i$ ,  $\Delta F_r$  и  $\Delta F_t$ :

$$\Delta F_i = e_{1+}^{sf} \left\{ e_{3-}^s \left[ -e_{2-}^f (K_1 + K_2) (K_1 + K_3) (K_2 + K_3) - e_{2+}^f (-K_1 + K_2) (K_1 + K_3) (-K_2 + K_3) \right] + e_{3+}^s \left[ -e_{2-}^f (-K_1 + K_3) (K_1 + K_2) (K_2 - K_3) + e_{2+}^f (K_1 - K_2) (K_1 - K_3) (K_2 + K_3) \right] \right\}, \quad (A.2)$$

$$\Delta F_r = e_{1+}^{sf} \left\{ e_{3-}^s \left[ -e_{2-}^f (-K_1 + K_2) (K_1 + K_3) (K_2 + K_3) + e_{2+}^f (K_1 + K_2) (K_1 + K_3) (K_2 - K_3) \right] + e_{3+}^s \left[ e_{2-}^f (-K_1^2 K_2 + K_1^2 K_3 + K_1 K_2^2 - K_1 K_3^2 - K_2^2 K_3 + K_2 K_3^2) - e_{2+}^f (K_1 + K_2) (K_1 - K_3) (K_2 + K_3) \right] \right\}, \quad (A.3)$$

$$\Delta F_t = 8K_1 K_2 K_3. \quad (A.4)$$

В результате соотношение для отраженной и прошедшей волн будет записано как

$$\frac{F_r}{F_t} = \frac{\Delta F_r}{\Delta F_t} = \frac{e_{1+}^{sf}}{8K_1 K_3} (e_{2-}^f + e_{2+}^f) (K_1^2 - K_3^2) (e_{3-}^s - e_{3+}^s) + \frac{e_{1+}^{sf}}{8K_1 K_3} K_2 (e_{2+}^f - e_{2-}^f) \times [e_{3-}^s (K_1 + K_3) - e_{3+}^s (K_1 - K_3)] - \frac{e_{1+}^{sf}}{8K_1 K_3} (e_{2+}^f - e_{2-}^f) [e_{3-}^s (K_1 + K_3) + e_{3+}^s (K_1 - K_3)]. \quad (A.5)$$

Выражение для отношения полей можно записать в общем виде (см. формулу (3)). Это выражение может быть решено при разложении экспоненциальных функций  $e_{2+}^f$  и  $e_{2-}^f$  в ряд Тейлора:

$$\begin{aligned} e_{2+}^f &= e^{ik_{2z} d_f} = 1 + ik_{2z} d_f + \frac{(ik_{2z} d_f)^2}{2!} + \dots + \frac{(ik_{2z} d_f)^{2n}}{(2n)!} + \frac{(ik_{2z} d_f)^{2n+1}}{(2n+1)!}, \\ e_{2-}^f &= e^{-ik_{2z} d_f} = 1 - ik_{2z} d_f + \frac{(ik_{2z} d_f)^2}{2!} + \dots + \frac{(ik_{2z} d_f)^{2n}}{(2n)!} - \frac{(ik_{2z} d_f)^{2n+1}}{(2n+1)!}. \end{aligned} \quad (A.6)$$

Эти комплексные экспоненциальные функции зависят от отношения  $\omega d_f / c$ , характерное абсолютное значение которого мало (около  $10^{-2} - 10^{-3}$ ) для ТГц-частот и субмикронных тонких пленок. Учитывая разложения (A.6), запишем ряд Тейлора для членов  $(e_{2+}^f + e_{2-}^f)$  и  $(e_{2+}^f - e_{2-}^f)$ :

$$e_{2+}^f + e_{2-}^f = 2 \sum_{p=0}^{+\infty} (-1)^p \frac{(k_{2z} d_f)^{2p}}{(2p)!}, \quad e_{2+}^f - e_{2-}^f = 2i \sum_{p=0}^{+\infty} (-1)^p \frac{(k_{2z} d_f)^{2p+1}}{(2p+1)!}. \quad (A.7)$$

Тогда, комбинируя (3) и (A.7), получим общую формулу, связывающую искомое значение комплексного показателя преломления и экспериментально измеренного отношения полей для ТЕ-поляризации:

$$F_{rt} = 2 \sum_{p=0}^{+\infty} (-1)^p \frac{(k_{2z} d_f)^{2p}}{(2p+1)!} [\xi (2p+1) - id_f \mu + ik_{2z}^2 d_f \zeta]. \quad (A.8)$$

Для ТМ-поляризации имеем

$$F_{rt} = 2 \sum_{p=0}^{+\infty} (-1)^p \frac{(k_{2z} d_f)^{2p}}{(2p+1)!} \left[ \xi (2p+1) + id_f \zeta \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - \left(\frac{c}{\omega}\right)^2 k_{2z}^2 \mu \right]. \quad (A.9)$$

### Приближение бесконечной подложки

Граничные условия модели в приближении бесконечной подложки также могут быть записаны в матричной форме:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ K_1 & K_2 & -K_2 & 0 \\ 0 & e_{2+}^f & e_{2-}^f & -e_{3+}^f \\ 0 & K_2 e_{2+}^f & -K_2 e_{2-}^f & -K_3 e_{3+}^f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_r \\ F_{2+} \\ F_{2-} \\ F_{3+} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ K_1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} F_i. \quad (A.10)$$

Для определения отраженного и прошедшего полей необходимо вычислить определители матрицы (A.10):

$$\begin{aligned} \Delta_{F_i} &= [(K_2 - K_3)(K_2 - K_1)e_{2+}^f - (K_1 + K_2)(K_2 + K_3)e_{2-}^f] e_{3+}^f, \\ \Delta_{F_r} &= [(K_1 + K_2)(K_3 - K_2)e_{2+}^f - (K_1 - K_2)(K_3 + K_2)e_{2-}^f] e_{3+}^f, \\ \Delta_{F_{3+}} &= -4K_1 K_2. \end{aligned} \quad (A.11)$$

После этого поля могут быть выражены как

$$\frac{F_r}{F_i} = \frac{\Delta_{F_r}}{\Delta_{F_i}}, \quad \frac{F_{3+}}{F_i} = \frac{\Delta_{F_{3+}}}{\Delta_{F_i}}, \quad (A.12)$$

где  $\Delta_{F_i}$ ,  $\Delta_{F_r}$  и  $\Delta_{F_{3+}}$  — определители для полей  $F_i$ ,  $F_r$  и  $F_{3+}$  соответственно. Тогда выражения для полей  $F_r$  и  $F_{3+}$  запишутся в виде

$$F_r = - \frac{\frac{e_{2+}^f}{e_{2-}^f} \frac{K_3 - K_2}{K_2 - K_1} + \frac{K_3 + K_2}{K_2 + K_1}}{\frac{e_{2+}^f}{e_{2-}^f} \frac{K_3 - K_2}{K_1 + K_2} + \frac{K_2 + K_3}{K_2 - K_1}} F_i, \quad F_{3+} = \frac{K_1 K_2}{\frac{e_{2+}^f}{e_{2-}^f} \frac{K_3 - K_2}{K_1 + K_2} + \frac{K_2 + K_3}{K_2 - K_1}} \frac{4}{e_{3+}^f e_{2-}^f (K_2^2 - K_1^2)} F_i. \quad (A.13)$$

После подстановки определителей  $\Delta_{F_i}$ ,  $\Delta_{F_r}$  и  $\Delta_{F_{3+}}$  в выражение (А.12) и с учетом связи полей  $F_{3+}$  и  $F_t$  нормированная разность отраженного и переданного полей примет вид

$$\frac{F_r - F_t}{F_r + F_t} = \frac{A + t_{3-4}4K_1K_2e_{3+}^{fs}e_{1-}^{fs}e_{3-}^f}{A - t_{3-4}4K_1K_2e_{3+}^{fs}e_{1-}^{fs}e_{3-}^f}, \tag{A.14}$$

где  $A = K_2(K_3 - K_1)(e_{2+}^f + e_{2-}^f) + (K_1K_3 - K_2^2)(e_{2+}^f - e_{2-}^f)$ . Из формулы (А.14) также легко выразить  $A$ :

$$A = -t_{3-4}4K_1K_2e_{3+}^{fs}e_{1-}^{fs}e_{3-}^f \frac{F_r}{F_t}. \tag{A.15}$$

Приравнивая между собой полученные равенства для  $A$ , получим общее выражение для приближенной модели (9). Из приведенного электромагнитного расчета (А.10)–(А.15), (9) следуют выражения для отраженного  $F_r$  и прошедшего  $F_t$  полей, которые являются функциями падающего поля  $F_i$ :

$$F_r = F_i + 2K_2 \frac{e_{2+}^f(K_3 - K_2) + e_{2-}^f(K_3 + K_2)}{D} F_i, \quad F_t = -t_{3-4} \frac{4K_1K_2}{D} e_{3+}^{fs}e_{1-}^{fs} F_i, \tag{A.16}$$

где  $D = e_{2+}^f(K_2 - K_3)(K_2 - K_1) - e_{2-}^f(K_1 + K_2)(K_2 + K_3)$ .

Для получения аналитического выражения для  $k_{2z}$  ( $\tilde{\epsilon}_2$ ) как функции отношения  $(F_r - F_t)/(F_r + F_t)$  экспериментально измеренных полей мы также предлагаем использовать разложение экспоненциальных функций  $e_{2+}^f$  и  $e_{2-}^f$  в ряд Тейлора, как это сделано в (А.6), (А.7).

Тогда, комбинируя (9) и (А.7) и учитывая, что  $F_i = E_{ix}$  и  $K_i = k_{iz}$ , получим общую формулу для ТЕ-поляризации, связывающую искомое значение комплексного показателя преломления и экспериментально измеренного отношения полей:

$$2 \sum_{p=0}^{+\infty} (-1)^p \frac{(k_{2z}d_f)^{2p}}{(2p+1)!} \left[ (k_{3z} - k_{1z})(2p+1) + ik_{2z}d_f \frac{k_{1z}k_{3z} - k_{2z}^2}{k_{2z}} \right] + 4k_{1z}t_{3-4}e_{3+}^{fs}e_{1-}^{fs}e_{3-}^f \frac{E_r}{E_t} = 0. \tag{A.17}$$

Также с учетом ранее введенных замен для ТМ-поляризации,  $F_i = H_{ix}$  и  $K_i = k_{iz}/\tilde{\epsilon}_i$ , общее выражение может быть записано для ТМ-поляризации в следующем виде:

$$2 \sum_{p=0}^{+\infty} (-1)^p \frac{(k_{2z}d_f)^{2p}}{(2p+1)!} \left[ \left( \frac{k_{3z}}{\tilde{\epsilon}_3} - \frac{k_{1z}}{\tilde{\epsilon}_1} \right) (2p+1) + ik_{2z}d_f \frac{\frac{k_{1z}k_{3z}}{\tilde{\epsilon}_1\tilde{\epsilon}_3} - \left( \frac{k_{2z}}{\tilde{\epsilon}_2} \right)^2}{\frac{k_{2z}}{\tilde{\epsilon}_2}} \right] + 4 \frac{k_{1z}}{\tilde{\epsilon}_1} t_{3-4} e_{3+}^{fs} e_{1-}^{fs} e_{3-}^f \frac{H_r}{H_t} = 0. \tag{A.18}$$

Здесь следует отметить, что уравнения (А.17) и (А.18) зависят только от отношения  $F_r/F_t$ , а не от их нормированной разности, полученной в (А.14). Уравнения (А.17) и (А.18) определяют комплексный показатель преломления пленки:  $\tilde{n}_2 = \sqrt{\tilde{\epsilon}_2} = \sqrt{(k_{2z}c/\omega)^2 + \sin^2 \theta}$ .

Отметим, что суммирование в (А.17), (А.18) выполняется до максимального значения  $p_{max}$  степени  $p$  полинома по  $k_{2z}$ :  $p = 2(p_{max} + 1)$ . Оптимальное значение  $p_{max}$ , которое приводит к желаемой точности оценки оптических параметров пленки, определялось в нашем раннем исследовании путем численного и аналитического решения выражений (А.17), (А.18) [4].

## ЛИТЕРАТУРА

1. J. Coutaz, F. Garet, and V. Wallace, *Principles of Terahertz Time-Domain Spectroscopy*, Jenny Stanford Publ., New York (2018).
2. D. Grischkowsky, S. Keiding, M. Van Exter, and C. Fattinger, *J. Opt. Soc. Amer. B* **7**, 2006 (1990).
3. J. O'Hara, W. Withayachumnankul, and I. Al-Naib, *J. Infrared Millim. Terahertz Waves* **33**, 245 (2012).
4. M. Konnikova, A. Tretyakov, Y. Kistenev, J. Coutaz, I. Ozheredov, and A. Shkurinov, *J. Infrared Millim. Terahertz Waves* **46**, 18 (2025).
5. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Electrodynamics of Continuous Media*, Pergamon Press, England (1984) [Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1982)].
6. N. Kaiser, *Appl. Opt.* **41**, 30530 (2002).
7. S. Labbe-Lavigne, S. Barret, F. Garet, L. Duvillaret, and J. Coutaz, *J. Appl. Phys.* **83**, 6007 (1998).
8. Z. Jiang, M. Li, and X. Zhang, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 3221 (2000).
9. M. Li, G. Cho, T. Lu, X. Zhang, S. Wang, and J. Kennedy, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 2113 (1999).
10. T. Nagashima and M. Hangyo, *Appl. Phys. Lett.* **79**, 3917 (2001).
11. N. Matsumoto, T. Hosokura, T. Nagashima, and M. Hangyo, *Opt. Lett.* **36**, 265 (2011).
12. X. Chen and E. Pickwell-MacPherson, *APL Photon.* **7**, 071101 (2022).
13. S. Krishnamurthy, M. Reiten, S. Harmon, and R. Cheville, *Appl. Phys. Lett.* **79**, 875 (2001).
14. R. Mendis and D. Grischkowsky, *Opt. Lett.* **26**, 846 (2001).
15. J. Melinger, N. Laman, S. Harsha, and D. Grischkowsky, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 251110 (2006).
16. H. Amarloo and S. Safavi-Naeini, *Opt. Express* **29**, 17343 (2021).
17. B. Ung, J. Li, H. Lin, B. Fischer, W. Withayachumnankul, and D. Abbott, *IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol.* **3**, 216 (2013).
18. H. Nemeč, F. Kadlec, P. Kuzel, L. Duvillaret, and J. Coutaz, *Opt. Commun.* **260**, 175 (2006).
19. M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics*, Pergamon Press, Oxford (1968) [М. Борн, Э. Вольф, *Основы оптики*, Наука, Москва (1973)].
20. M. Nazarov, L. Mukina, A. Shuvaev, D. Sapozhnikov, A. Shkurinov, and V. Trofimov, *Laser Phys. Lett.* **2**, 471 (2005).
21. J. Neu and C. Schmuttenmaer, *J. Appl. Phys.* **124**, 231101 (2018).
22. A. K. Tretyakov and Yu. V. Kistenev, *Izvestiya vuzov. Fizika* **68** (6), 95 (2025) [А. К. Третьяков, Ю. В. Кистенёв, *Изв. вузов. Физика* **68** (6), 95 (2025)].
23. K. Madsen, H. Nielsen, and O. Tingleff, *Methods for Non-Linear Least Squares Problems*, DTU, Denmark (2004).
24. K. Levenberg, *Quart. Appl. Math.* **2**, 164 (1944).
25. F. Garet, L. Duvillaret, and J. Coutaz, *Infrared and Millimeter Waves, Conference Digest of the 2004 Joint 29th Int. Conf. and 12th Int. Conf. on Terahertz Electronics* (2004), pp. 467–468.
26. M. Walther, D. Cooke, C. Sherstan, M. Hajar, M. Freeman, and F. Hegmann, *Phys. Rev. B* **76**, 125408 (2007).
27. J. Coutaz and A. Shkurinov, in *Molecular and Laser Spectroscopy*, ed. by V. P. Gupta and Y. Ozaki, Elsevier (2020), pp. 121–166.
28. W. Withayachumnankul, B. Fischer, and D. Abbott, *Opt. Express* **16**, 7382 (2008).
29. J. Park, S. Eom, H. Lee, J. Da Silva, Y. Kang, T. Lee, and Y. Khang, *Phys. Rev. B* **80**, 115209 (2009).
30. T. Chatterji, C. Kumar, and U. Wdowik, *Phys. Rev. B* **91**, 054110 (2015).
31. K. Andrikopoulos, S. Yannopoulos, G. Voyiatzis, A. Kolobov, M. Ribes, and J. Tominaga, *J. Phys. Condens. Matter* **18**, 965 (2006).
32. S. Park, H. Park, M. Jang, M. Ahn, W. Yang, J. Han, H. Jeong, C. Kim, Y. Kwon, and M. Cho, *J. Mater. Chem. C* **3**, 9393 (2015).
33. R. Mazzarello, S. Caravati, S. Angioletti-Uberti, M. Bernasconi, and M. Parrinello, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 085503 (2010).
34. S. Perego, D. Dragoni, S. Gabardi, D. Campi, and M. Bernasconi, *Phys. Status Solidi RRL* **17**, 2200433 (2023).
35. A. Tverjanovich, M. Khomenko, C. Benmore, M. Bokova, A. Sokolov, D. Fontanari, M. Kassem, T. Usuki, and E. Bychkov, *Chem. Mater.* **33**, 1031 (2021).

36. M. Konnikova, M. Khomenko, A. Tverjanovich, S. Bereznev, A. Mankova, O. Parashchuk, I. Vasilevsky, I. Ozheredov, A. Shkurinov, and E. Bychkov, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **15**, 9638 (2023).
37. U. Wdowik, K. Parlinski, S. Rols, and T. Chatterji, *Phys. Rev. B* **89**, 224306 (2014).
38. A. Pawbake, C. Bellin, L. Paulatto, K. Béneut, J. Biscaras, C. Narayana, D. Late, and A. Shukla, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 145701 (2019).
39. X. Zhang, Z. Bu, S. Lin, Z. Chen, W. Li, and Y. Pei, *Joule* **4**, 986 (2020).
40. F. Kadlec, C. Kadlec, and P. Kuzel, *Solid State Commun.* **152**, 852 (2012).
41. A. Zaitsev, P. Demchenko, D. Zykov, E. Korotina, E. Makarova, I. Tkhorzhevskiy, A. Tukmakova, N. Kablukova, A. Asach, A. Novotelnova, and M. Khodzitsky, *Appl. Sci.* **10**, 2724 (2020).
42. V. Phanindra, S. Das, K. Kumar, P. Agarwal, R. Rana, and D. Rana, *Phys. Rev. B* **95**, 085114 (2017).
43. S. Roychowdhury, M. Samanta, S. Perumal, and K. Biswas, *Chem. Mater.* **30**, 5799 (2018).
44. K. Singh, S. Kumari, H. Singh, N. Bala, P. Singh, A. Kumar, and A. Thakur, *Appl. Nanosci.* **13**, 95 (2023).

## Complex Permittivity of Subwavelength Planar Elements of Heterostructures in the Terahertz Frequency Range

*M. R. Konnikova*<sup>a,b</sup>, *A. K. Tretyakov*<sup>c</sup>, *Yu. A. Akimov*<sup>d</sup>, *I. A. Ozheredov*<sup>a</sup>, *Yu. V. Kistenev*<sup>c</sup>,  
*A. P. Shkurinov*<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University  
119991, Moscow, Russia

<sup>b</sup> National Research Center «Kurchatov Institute»  
123182, Moscow, Russia

<sup>c</sup> Tomsk State University  
634050, Tomsk, Russia

<sup>d</sup> Troitsk Separate Division of P. N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences  
108840, Troitsk, Moscow, Russia

### Abstract

The paper presents both analytical and experimental justifications for a method of restoring the complex dielectric permittivity of subwavelength films using data from pulsed terahertz (THz) spectroscopy. It discusses a mathematical model that is based on the simultaneous utilization of reflected and transmitted THz signals through the sample, enabling the determination of the complex refractive index of the film without the need for additional reference measurements. A comparison has been conducted between the full-wave model and the infinite substrate approximation, demonstrating that the latter provides a more stable recovery of optical parameters while maintaining high accuracy. A numerical verification of the method has been performed, along with experimental validation on GeTe films of varying thicknesses undergoing a phase transition from an amorphous to a crystalline state. It has been demonstrated that the proposed approach ensures accurate determination of the refractive index and absorption coefficient across a wide range of dielectric properties of the investigated material and can be employed for the diagnosis of sub-wavelength phase-changing films in the THz range.

**Keywords:** terahertz spectroscopy, complex dielectric permittivity, thin films, phase-change materials

**Acknowledgements.** The authors are deeply grateful to J.-L. Coutaz for discussing the paper and offering valuable suggestions. The authors would also like to thank V. N. Glebov and the group of O. A. Novodvorsky for preparing the GeTe samples.

**Funding.** This work was supported in experimental part by the state assignment of Lomonosov Moscow State University, in sample preparation part by the state assignment of the National Research Center «Kurchatov Institute», as well as in computational methods by the TSU state-funded project (No. FSWM-2025-0038).

**Conflict of interest.** The authors of this work declare no conflict of interest.

**Authors' contributions.** The contribution of the authors is equal.