

# ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 535.417

## ОБ ОЦЕНКЕ ОТКЛОНЕНИЙ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ОПТИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЙ ПРИ НАКЛОННОМ ПАДЕНИИ СВЕТА

Н. В. Гришина, А. В. Тихонравов

(кафедра математики)

Используется статистический подход для оценки влияния ошибок в параметрах слоев двухкомпонентных оптических покрытий на их спектральные характеристики при наклонном падении света.

При реализации на практике многослойного покрытия его параметры — толщины и показатели преломления слоев — всегда несколько отличаются от расчетных, вследствие чего отклоняются от расчетных и его спектральные характеристики (спектры отражения, пропускания и поглощения и фазы волн). В работе [1] был предложен статистический подход к оценке влияния ошибок в параметрах слоев покрытия на спектральные характеристики при нормальном падении света. В настоящей работе этот статистический подход используется применительно к случаю двухкомпонентных покрытий при наклонном падении света.

В основе метода лежат следующие соображения. При наиболее современном способе контроля толщин слоев напыляемых оптических покрытий — контроле по частоте колебаний кварцевого генератора — ошибки в толщинах отдельных слоев независимы, и их естественно считать распределенными по нормальному закону с нулевым математическим ожиданием. Ошибки в показателях преломления слоев определяются случайными отклонениями показателя преломления данной партии от номинального значения. Поэтому ошибки в показателях преломления слоев из одного материала полностью коррелированы. Будем считать их также распределенными по нормальному закону с математическим ожиданием, равным нулю. Пусть число слоев покрытия равно  $N$ . Обозначим  $\xi_i$  ( $i=1, 2, \dots, N+2$ ) — отклонения параметров;  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$  — отклонения от расчетных значений толщин слоев,  $\xi_{N+1}$  и  $\xi_{N+2}$  — отклонения показателей преломления нечетных и четных слоев. Пусть  $\Delta\Phi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{N+2}, k)$  — соответствующее ошибкам  $\xi_i$  отклонение реальной спектральной характеристики от расчетной  $\Phi(k)$ ,  $k$  — волновое число. По предположению,  $\xi_i$  — случайные независимые ошибки, распределенные по нормальному закону, поэтому  $\Delta\Phi$  при каждом  $k$  — также случайная величина. Обозначим  $M(k)$  и  $D(k)$  ее первые два момента (они, естественно, зависят от волнового числа  $k$ ). Эти функции примем за основные характеристики, описывающие степень влияния ошибок в параметрах слоев на спектральные свойства многослойного покрытия.

Считая ошибки в параметрах слоев малыми, порядка нескольких процентов (что соответствует уровню современной напылительной техники), и заменяя величину  $\Delta\Phi$  отрезком тейлоровского ряда с точностью до второго порядка малости по  $\xi_i$ , получаем явные выражения для  $M(k)$  и  $D(k)$ :

$$M(k) = \sum_{i=1}^{N+2} b_{ii}(k) \sigma_i^2,$$

$$D(k) = \left( \sum_{i=1}^{N+2} a_i^2(k) \sigma_i^2 + 2 \sum_{i,j=1}^{N+2} b_{ij}(k) \sigma_i^2 \sigma_j^2 \right)^{1/2}.$$

Здесь  $\sigma_i = D\xi_i$  — дисперсии случайных величин  $\xi_i$ ,  $a_i = \partial\Phi/\partial d_i$ ,  $b_{ij} = \partial^2\Phi/\partial d_i \partial d_j$ , причем производные вычисляются при расчетных значениях параметров. В качестве интересующих нас спектральных характеристик могут быть коэффициент пропускания или коэффициент отражения (при наличии поглощения в системе один не выражается явно через другой) неполяризованного света или волн  $s$ - или  $p$ -поляризации, фазы  $s$ - и  $p$ -компонент отраженной или прошедшей волн.

Для расчета функций  $M(k)$  и  $D(k)$  для различных спектральных характеристик были составлены программы на ЭВМ. При заданных дисперсиях  $\sigma_i$  они рассчитывают  $M(k)$  и  $D(k)$  требуемых спектральных величин в заданном спектральном интервале

для данного покрытия. Кроме того, при необходимости программы выдают на печать вычисленные частные производные (последние могут использоваться для определения слоев системы, наиболее чувствительных к ошибкам параметров) и ряд функций,

таких как  $\sum_{i=1}^N b_{ii}$  и т. п., характеризующих раздельное влияние ошибок в толщинах

слоев и показателях преломления на величины  $M(k)$  и  $D(k)$  [1].

Для сравнения результатов расчета по этим формулам с экспериментальными данными рассмотрим 3-слойное просветляющее покрытие из материалов  $\text{MgF}_2$  ( $n_1 \approx 1,38$ ),  $\text{HfO}_2$  ( $n_2 \approx 1,98$ ),  $\text{Al}_2\text{O}_3$  ( $n \approx 1,65$ ) на подложке из кварца ( $n_1 \approx 1,45$ ). Первый и третий слои покрытия четвертьволновые, второй — полуволновой на длине волны  $\lambda_0 = 0,661$  мкм при нормальном падении света. Измерения и расчет коэффициента отражения неполяризованного света проводились при угле падения  $\theta_0 = 59^\circ$ . При расчетах дисперсии ошибок при напылении в толщинах и показателях преломления слоев

принимались равными 3%, что соответствует (может быть, с некоторым занижением) напылительной установке ВУ-1А, на которой был изготовлен экспериментальный образец. На рис. 1 представлен расчетный спектр отражения неполяризованного света с коридором дисперсии, крестиками нанесены результаты измерений. Видно, что все экспериментальные данные лежат в коридоре дисперсии коэффициента отражения.

В качестве примера использования данного подхода рассмотрим ожидаемое влияние ошибок на спектральные характеристики разных типов покрытий. При расчетах дисперсии ошибок в толщинах слоев составляли 3%, а в показателях преломления — 1%. На рис. 2, 3 пред-

ставлены расчетные спектральные характеристики  $\Phi(k)$  и их математические ожидания  $\Phi(k) + M(k)$  с отложенными относительно последних и заштрихованными коридорами дисперсий  $D(k)$ . Величина и положение этого коридора и служат характеристикой возможного отклонения реальной характеристики от расчетной. Во всех случаях слои отсчитываются от воздуха.

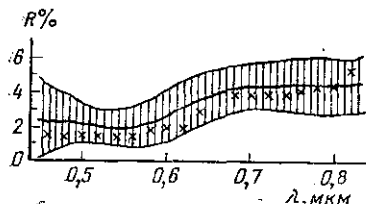


Рис. 1

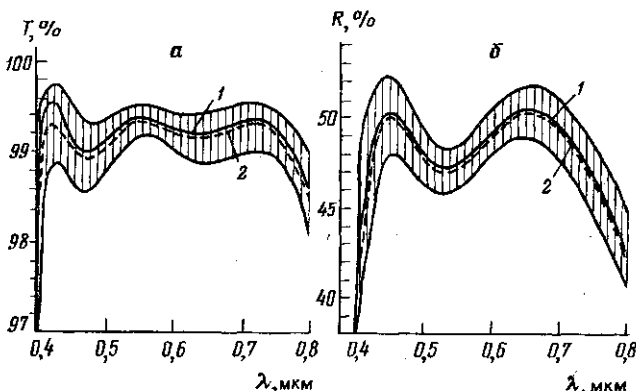


Рис. 2

На рис. 2, а представлен коэффициент пропускания неполяризованного света  $T(k)$  (1) и его математическое ожидание (2) с коридором дисперсии для 6-слойного просветляющего покрытия при  $\theta = 45^\circ$ . Расчетные параметры покрытия имеют следующие значения: показатели преломления нечетных слоев — 1,38; четных слоев — 2,30; подложки — 1,52. Толщины слоев — 0,0933; 0,0086; 0,0225; 0,1293; 0,0349; 0,0175 мкм. Заметим, что у просветляющего покрытия коэффициент отражения s-компоненты в несколько раз более чувствителен к ошибкам в параметрах, чем коэффициент отражения p-компоненты поля.

На рис. 2, б изображен коэффициент отражения неполяризованного света  $R(k)$  (1) с его математическим ожиданием (2) с коридором дисперсии для 5-слойного 50%-го светоделителя при угле падения  $45^\circ$ . Показатели преломления нечетных сло-

ев — 2,30; четных — 1,38; подложки — 1,52. Толщины слоев — 0,00619; 0,1131; 0,0738; 0,0202; 0,0280 мкм. У светоделителя чувствительность  $s$ - и  $p$ -компонент поля к ошибкам параметров приблизительно одинакова.

Для обеих рассмотренных систем средние отклонения спектральных характеристик имеют близкие значения, в то же время дисперсия, которая характеризует разброс значений реальной спектральной характеристики, у светоделителя почти на порядок больше, чем у просветляющего покрытия.

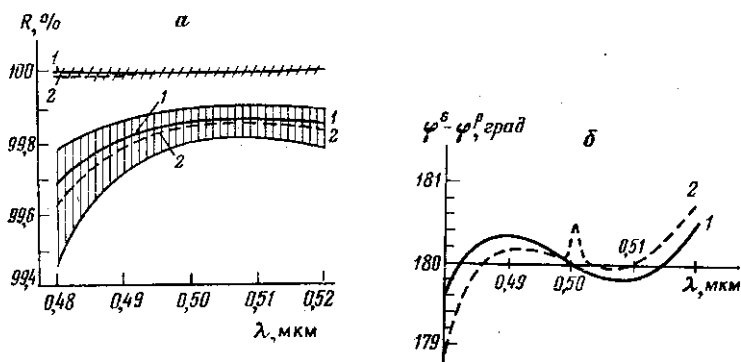


Рис. 3

В качестве еще одного примера рассмотрим 31-слойное зеркало с постоянной разностью фаз  $180^\circ$  между  $s$ - и  $p$ -компонентами отраженного поля при угле падения  $45^\circ$ . Показатели преломления нечетных слоев — 2,30; четных слоев — 1,40; подложки — 1,52. Толщины слоев зеркала, отличные от четвертьволновых, приведены в четвертьволновых долях в таблице (центральная длина волны  $\lambda_0 = 0,5$  мкм). На рис. 3, а

| Номер слоя                            | 1     | 2     | 3     | 4     | 5     | 6     | 7     |       |
|---------------------------------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Толщина слоя в четвертьволновых долях | 0,101 | 0,800 | 1,106 | 0,702 | 0,604 | 0,901 | 1,106 |       |
| Продолжение                           |       |       |       |       |       |       |       |       |
| Номер слоя                            | 8     | 9     | 10    | 11    | 12    | 13    | 14    | 15    |
| Толщина слоя в четвертьволновых долях | 0,102 | 0,106 | 0,102 | 0,106 | 0,101 | 0,106 | 1,001 | 1,002 |

представлены коэффициенты отражения волн  $s$ -поляризации (1),  $p$ -поляризации (3) с их математическими ожиданиями (2 и 4 соответственно) и коридорами дисперсий для этого зеркала. При этом  $p$ -компонента оказывается в 20—80 раз более чувствительной к ошибкам в параметрах системы, чем  $s$ -компонента поля. На рис. 3, б изображена разность фаз  $\varphi^s - \varphi^p$  между  $s$ - и  $p$ -компонентами отраженного поля (1) и ее математическое ожидание (2). Вблизи центральной длины волны,  $\lambda_0 = 0,5$  мкм, воздействие ошибок на разность фаз возрастает. Анализ производных фаз показывает, что это связано с возрастанием влияния ошибок в слоях с номерами от 16 до 24. Дисперсия разности фаз на всем интервале составляет  $10\text{--}15^\circ$ . Как и во всех системах, спектральная характеристика более чувствительна к ошибкам в коротковолновой области спектра.

Статистический подход позволяет оценивать чувствительность спектральных характеристик различных многослойных систем к ошибкам в параметрах слоев при наклонном падении света и может использоваться для выбора оптимальных систем с учетом ошибок в параметрах.

В заключение выражаем нашу глубокую признательность Г. В. Пантелееву за предоставленные экспериментальные данные.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Гришина Н. В., Тихонравов А. В. // Опт. и спектр. 1985. 58, № 1. С. 192.

Поступила в редакцию  
25.04.88

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1989. Т. 30, № 1

## АКУСТИКА И МОЛЕКУЛЯРНАЯ ФИЗИКА

УДК 547.962:538.955

### ВРАЩАТЕЛЬНОЕ ТРЕНИЕ БИОПОЛИМЕРОВ В РАСТВОРЕ

В. П. Денисов, В. В. Мигулин, Ю. М. Петрусевич, О. П. Ревокатов

(кафедра физики низких температур)

Экспериментально обнаружено сильное влияние электростатических взаимодействий белок — вода на вязкость растворов биополимеров и время корреляции вращательного движения макромолекул. Исследована связь между этими параметрами.

**Введение.** Исследование динамики макромолекул биополимеров в растворе имеет большое значение для определения механизмов их взаимодействия с растворителем [1]. Такое взаимодействие во многом определяет кинетические характеристики растворов макромолекул. В связи с этим представляет интерес изучение влияния свойств биополимеров, определяющих степень их взаимодействия со средой, на их молекулярную подвижность.

Важным свойством биополимеров в водных растворах является наличие у них большого электрического заряда, энергия взаимодействия которого с дипольным моментом молекул воды может превышать тепловую. Это взаимодействие можно изучать, измеряя зависимость вязкости раствора и времен ЯМР-релаксации макромолекул при различных концентрациях ионов водорода (рН) в растворе, что позволяет определять связь макроскопических и молекулярных параметров между собой, а также их зависимость от заряда белка.

**Методика эксперимента.** В работе измерялись времена спин-решеточной  $T_1$  и спин-спиновой  $T_2$  ЯМР-релаксации протонов белков в растворе  $D_2O$  неселективным методом. Релаксационная кривая протонов белка, измеренная таким способом, состоит из трех компонент с интенсивностями 40%, 30 и 30%, которые соответствуют вкладам от протонов  $CH_2$ -,  $CH$ - и  $CH_3$ -групп белка. Известно [1, 2], что время релаксации большинства этих протонов (по крайней мере  $CH_2$ - и  $CH$ -групп) определяется вращением макромолекулы как целого.

Для связи времен релаксации с временем вращательной корреляции макромолекул  $\tau$  в данном случае можно взять соотношения Соломона—Бломбергена [3], в которых величина второго момента усреднена по всем протонам белка. При этом отношение  $T_1/T_2$  зависит только от  $x = (\omega\tau)^2$ , где  $\omega$  — частота ЯМР, и равно

$$\frac{T_1}{T_2} = \frac{12x^2 + 37x + 10}{2(8x + 5)}. \quad (1)$$

В области  $\omega\tau \gg 1$  уравнение (1) позволяет однозначно определять  $\tau$  по экспериментально измеренным  $T_1$  и  $T_2$ .

Скорость переориентации белковой макромолекулы в растворе определяется внутренним трением, которое она испытывает при вращении в вязкой среде. При этом время вращательной корреляции связано с коэффициентом вращательного трения  $\zeta$  соотношением Дебая—Эйнштейна

$$\tau = \zeta / (6 kT). \quad (2)$$

В свою очередь величина  $\zeta$  определяет увеличение макроскопической вязкости растворов  $\eta$  по отношению к вязкости чистой воды  $\eta_0$  [4]:

$$\eta = \eta_0 + \zeta \nu N_A c / (6 M), \quad (3)$$

где  $\nu$  — коэффициент, учитывающий форму макромолекулы,  $N_A$  — число Авогадро,