

Szén vékonyrétegek optikai
tulajdonságainak elméleti és kísérleti
vizsgálata

Lájer Márton

ELTE Fizika BSc., III. évfolyam

Témavezetők:

Cserti József

ELTE Fizikai Intézet, Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

Pergerné Klupp Gyöngyi

Kamarás Katalin

MTA Wigner FK Szilárdtestfizikai es Optikai Intézet

Tartalomjegyzék

Köszönetnyilvánítás	iii
Bevezetés	iv
1. Transzfermátrix-módszer általános vékonyréteg-rendszerre, szögben beeső fény esetién	1
1.1.. Elektromágneses hullámok viselkedése közegek határán	1
1.2.. A transzfermátrix	3
1.2.1.. TM módus	4
1.2.2.. TE módus	5
1.2.3.. Szabad terjedés	6
1.3.. Reflexió, transzmisszió, kontraszt	9
1.4.. Alkalmazás grafénre	11
1.4.1.. TM módus	11
1.4.2.. TE módus	12
2. A vizsgált rendszerek. Az eredményekre vonatkozó előzetes megfontolások és a tényleges elméleti eredmények összevetése <i>Blake et al.</i> méréseivel	13
2.1.. A vizsgált rendszerek	13
2.2.. Az eredményekre vonatkozó megfontolások	14
2.3.. Összevetés egy korábbi grafénméréssel	16
3. Saját mérések: grafén azonosítása Raman-spektroszkópiával, SiO₂ vékonyré- teg vizsgáltata Si hordozón infravörös és látható spektroszkópiával	19
3.1.. A műszerek	19
3.1.1.. FTIR spektrométer	19
3.1.2.. UV/VIS spektrométer	20
3.1.3.. Raman-spektrométer	20
3.2.. A mérés menete	21
3.3.. Mérési eredmények	23
3.3.1.. SiO ₂ vékonyréteg vizsgálata infravörös és látható spektroszkópiával	23
3.3.2.. Grafénminták detektálása Raman-spektroszkópiával	24
4. Elméleti eredmények kiterjesztett paramétertartományban és kísérletileg nem vizsgált rendszerekre	29
4.0.3.. Interferenciaképek, kontúrbrák	29
4.1.. Függés a vékonyréteg vastagságától	36

Tartalomjegyzék

4.2.. Függés a vékonyréteg törésmutatójától, idealizációk	40
4.3.. A grafén mátrixa és a grafit vékonyréteg mátrixa	43
5. Összefoglalás, konklúziók	46
A. A számításokat végző szoftver	48
B. Háromrétegű rendszer reflexiója (merőleges beesés)	50

Köszönetnyilvánítás

Szeretném kifejezni hálás köszönetemet Témavezetőimnek: **Cserti Józsefnek**, **Pergerné Klupp Gyöngyinek** és **Kamarás Katalinnak**. Áldozatos és lelkiismeretes munkájuk, segítségük nélkül ez a dolgozat nem jöhetett volna létre. Külön köszönöm Gyöngyinek azt a végtelen türelmet, amivel megtanított a műszerek használatára. Hálás vagyok, amiért Témavezetőim, ha kellett, hétfvégén, ünnepek alatt, kevés szabadidejükről is lemondva segítettek a munka elkészítésében. Büszkeséggel tölt el, hogy munkámat a vezetésük alatt készíthettem el és adhatom be.

Ezzel együtt szeretném külön kiemelni **Huhn Andrásné** segítségét is, akinek rengeteg áldozatos munkájáért és hasznos tanácsaiért rendkívül hálás vagyok.

A grafénminták az MTA TTK MFA-ban, **Bíró László** csoportjában készültek. Ezek rendelkezésünkre bocsátását ezúton is nagyon köszönöm Neki, valamint **Nemes-Incze Péternek**, **Neumann Péternek**, **Tóvári Endrének** és **Csonka Szabolcsnak**.

Veres Miklósnak köszönöm a Raman-spektrométer használatának lehetőségét.

Ezen túlmenően szeretnék köszönetet mondani a Munkacsoportnak, amiért inspiráló, kellemes légkört biztosítottak a mérésekhez.

Végül, de nem utolsósorban köszönöm Családomnak és Barátaimnak, hogy támogatásukra a dolgozat írása közben is mindig számíthattam.

Bevezetés

Kétdimenziós, elkülönített atomsíkok előállítását sokáig lehetetlennek tartották. Ezért is volt áttörő jelentőségű, mikor André Geim és Konstantin Novoselov (azóta mindketten Nobel-díjasok) 2004-ben véletlenül sikeresen mutattak ki egyatomos, sík szénrétegeket.[1] Felfedezésük áttörő jelentőségűnek bizonyult.[2]

Az, hogy a grafit egymásra helyezett, egyatomos, hatszögrácsba rendeződő rétegekből áll össze, már régóta köztudott volt. Az egyetlen, vagy mindössze néhány atomréteget tartalmazó, különálló lapokat nevezzük (egy- ill. többretegű) grafénnek[3].

A grafén vizsgálata a legújabb kutatások izgalmas tárgyát képezi, egyedi tulajdonságai miatt pedig a gyakorlati alkalmazások széles skáláján komoly reményeket fűznek hozzá [2].

A kétdimenziós grafénsíkban mozgó elektronok és lyukak diszperziós relációját már 1947-ben kiszámolták [4]. Alacsony energián a diszperziós reláció lineáris, itt az elektronok és lyukak relativisztikus részecskéként viselkednek, hullámfüggvényüket az $1/2$ spinű részecskékre vonatkozó Dirac-egyenlet írja le [5].

A felfüggesztett grafén vezetőképessége szobahőmérsékleten egyedülállóan magas, a ma ismert anyagok közt a legnagyobb [6]. SiO_2 hordozóra helyezve ugyanakkor a vezetőképesség alacsonyabb [7].

Termális vezetőképessége magasabb a gyémántnál, értéke $5 \cdot 10^3 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ körül van, és függ a grafént alkotó szénizotópok arányától [8].

Mechanikai tulajdonságait nézve a grafén egyike a legerősebb anyagoknak a világon. Szakítószilárdsága az acél 200-szorosa, Young-modulusa 1 TPa körül van [9].

Gyakorlati alkalmazások tekintetében kiváló elektromos és termikus vezetőképessége miatt főleg a félvezetőiparban fűznek hozzá vérmes reményeket.

Egy graféndarab elektromos tulajdonságai függenek attól, milyen formájúra vágják. A kivágott vékony szálak, a „Graphene Nanoribbon”-ok egy nap felválthatják a réz szerepét az integrált áramkörökben [10]. Grafénből tranzisztort is lehet építeni, az eddig elkészült legkisebb FET grafén alapú [11]. Magas órajeleknél a grafén FET alkalmazása előnyösebb lehet a hagyományos, szilícium alapú tranzisztoroknál [12] A grafén használata felmerült továbbá pl. új generációs, olcsó napelemek, kijelzők ([13]), ultrakondenzátorok ([14]) és extrém magas érzékenységű gázdetektorok ([15]) fejlesztése kapcsán is.

Vizsgálatához gyakran először egy igen vékonyra preparált grafithártyát adaptálnak valamilyen hordozó anyagra. Hordozóként hagyományosan SiO_2 bevonatú Si tömböket használnak. A művelet során kapott minta nyilván nem tökéletes grafén. Emiatt, miután elhelyezték a hordozón, el kell döntenie, hol található a minta, másrészt annak különböző részei hány rétegből állnak.

A Nobel-díjas kísérletben optikai módszerhez folyamodtak [1]. Kiderült, hogy a szén vékonyrétegek szokatlanul nagy kontraszttal rendelkeznek [16][17]. Optikai mikroszkóp-

pal akár szabadszemmel is megkülönböztethetők a különböző vastagságú grafénminták. Ez a kontraszt azonban érzékenyen függ a bevilágított fény frekvenciájától és az alkalmazott SiO_2 bevonat vastagságától [18].

Vékonyrétegek tanulmányozásának régóta ismert és hatásos módszere az úgynevezett transzfermátrix-módszer[19]. A módszer azon a felismerésen alapul, hogy ha veszünk a vékonyréteg-rendszer belsejében két tetszőleges, a réteghatárokkal párhuzamos síkot, akkor ezeken a síkokon a térerősségek egymással lineáris viszonyban állnak. Ilyen módon az egyik síkon mérhető térerősség adataiból képezett kételemű vektorból egy mátrixszal való szorzás útján megkapjuk *ugyanabban a pillanatban* a térerősséget a másik síkon. Ezt a mátrixot nevezzük transzfermátrixnak. Ha a vékonyréteg-rendszert fel tudjuk bontani olyan alrendszerekre, melyek transzfermátrixát azonnal fel tudjuk írni, akkor a transzfermátrixok megfelelő sorrendben történő összeszorzásával megkapjuk az egész rendszer transzfermátrixát. Ebből a mátrixból egyszerűen kiszámolható a rendszer reflexiós és transzmissziós spektruma.

Ezen munka négy fejezetből áll:

- Az első fejezetben a Maxwell-egyenletekből kiindulva teljesen általános levezetést adunk az optikai transzfermátrixok alakjával kapcsolatban, melyek segítségével vizsgálhatók a legáltalánosabb, komplex törésmutatójú vékonyrétegekből álló rendszerek szögben történő megvilágítás esetén. Levezetjük a grafén, mint véges vezetőképeségű közeghatár transzfermátrixát.
- A második fejezetben körvonalazzuk a ténylegesen vizsgált rendszereket, egyszerű megfontolással meghatározzuk a számítások eredményeként adódó reflexiós spektrumok kvalitatív jellemzőit. A fejezet végén összevetjük saját szimulációnk eredményét [18] mérési eredményeivel.
- A harmadik fejezetben az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpontban végzett méréseinket ismertetjük. Infravörös és látható spektroszkópiával elsősorban a grafént még nem tartalmazó, SiO_2 vékonyrétegek reflexiós spektrumait tudtuk mérni. Grafénmintákat későbbi vizsgálat céljából Raman-spektroszkópiával egyértelműen azonosítani tudtunk.
- A negyedik fejezetben a számításokat kiterjesztjük a kísérletileg nem vizsgált paramétertartományra, illetve más, ideális vékonyréteg-rendszerekre. Megvizsgáljuk a szögben történő világítás hatását, a SiO_2 vastagságától való függést, a Si helyett ideális tükörré helyezett rendszert. Meghatározzuk továbbá, mennyire tér el különböző grafén-rétegvastagságok esetén a közeghatárként figyelembe vett grafén, illetve a megfelelő törésmutatójú grafit vékonyréteg hatása a reflexiós spektrumra.

A dolgozatban tehát grafénnel ellátott vékonyréteg-rendszerek reflexiós spektrumának rendkívül egyszerű, mégis a témához kapcsolódó cikkeknél pontosabb leírását igyekszünk nyújtani.

1. Transzfermátrix-módszer általános vékonyréteg-rendszerre, szögben beeső fény esetién

1.1. Elektromágneses hullámok viselkedése közegek határán

Mindenekelőtt idézzünk fel néhány alapvető információt az elektromágneses hullámok közeghatáron való viselkedéséről. A teljes Maxwell-egyenletek:

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = \rho_{szabad} \quad (1.1a)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.1b)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{B} = 0 \quad (1.1c)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (1.1d)$$

Továbbá egyszerűbb közegek esetén első közelítésben:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E} \quad \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} \quad (2.1e-f)$$

(A relatív permeabilitást egységnyiinek vesszük.)

Töltésektől és áramoktól mentes térben a (1.1b) rotációját és a (1.1d) időderiváltját véve, majd összevetve a (1.1a) Gauss-törvénnyel és a (2.1e-f) anyagi egyenletekkel, adódik a

$$\Delta \mathbf{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (1.2)$$

hullámgörvény. $\mathbf{B}$ -re a (1.1d) rotációját és a (1.1b) időderiváltját véve formailag azonos egyenletet kapunk.

Ezen egyenletek partikuláris megoldásai a

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t} \quad (1.3)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t} \quad (1.4)$$

függvények. Az ilyen alakú megoldást nevezzük síkhullámnak. A közegbeli terjedési sebesség:

$$c = \frac{1}{\sqrt{\mu\epsilon}} = \frac{c_0}{n}$$

1. Az általános transzfermátrix-módszer

Itt n a közeg törésmutatója. A hullámok a $\mathbf{k}$ hullámszám-vektor által meghatározott irányba terjednek. Az azonos fázisú pontok egy síkon helyezkednek el, melynek $\mathbf{k}$ a normálvektora. A vektor nagysága pedig

$$k = \frac{\omega}{c} = \frac{\omega}{c_0} n \quad (1.5)$$

Egyszerűen belátható, hogy a hullámok transzverzálisak és

$$\mathbf{B} = \frac{1}{\omega} \mathbf{k} \times \mathbf{E} \quad (1.6)$$

Tekintsünk két félvégtelen közeget, melyeket egymástól az $\mathbf{n}$ normálvektorú sík választ el. A két közeg dielektromos állandója legyen ϵ_1 és ϵ_2 .

A (1.1a) és a Gauss-tétel alkalmas, a határfelületet magába foglaló elemi próbatérfogatra történő alkalmazásával adódik a következő összefüggés:

$$\mathbf{n}(\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1) = \eta \quad (1.7)$$

Ahol η a felületi töltéssűrűség a közeghatáron. Ugyanígy a (1.1c)-ből

$$\mathbf{n}(\mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1) = 0 \quad (1.8)$$

A határral párhuzamos komponenseket tekintve a maradék két Maxwell-egyenlethez és a Stokes-tételhez kell folyamodni. A felületet merőlegesen átszelő elemi téglakereteket felhasználva:

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) = 0 \quad (1.9)$$

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) = \mathbf{j} \quad (1.10)$$

Vezetők esetén

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E} \quad (1.11)$$

Vegyük a $\mathbf{k}_0$ irányba terjedő elektromágneses síkhullámot! A különböző permittivitások azt jelentik, hogy a fénysebesség, és így a hullámszám-vektor nagysága is különböző a két közegben.

A közeghatárra érkező beeső fény egy része a másik közegben folytatja útját (megtörik), másik része viszont visszaverődik. Így az 1. közegben a térerősség:

$$\mathbf{E}_1 = \mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r} - i\omega t} + \mathbf{E}_r e^{i\mathbf{k}_r \mathbf{r} - i\omega t}$$

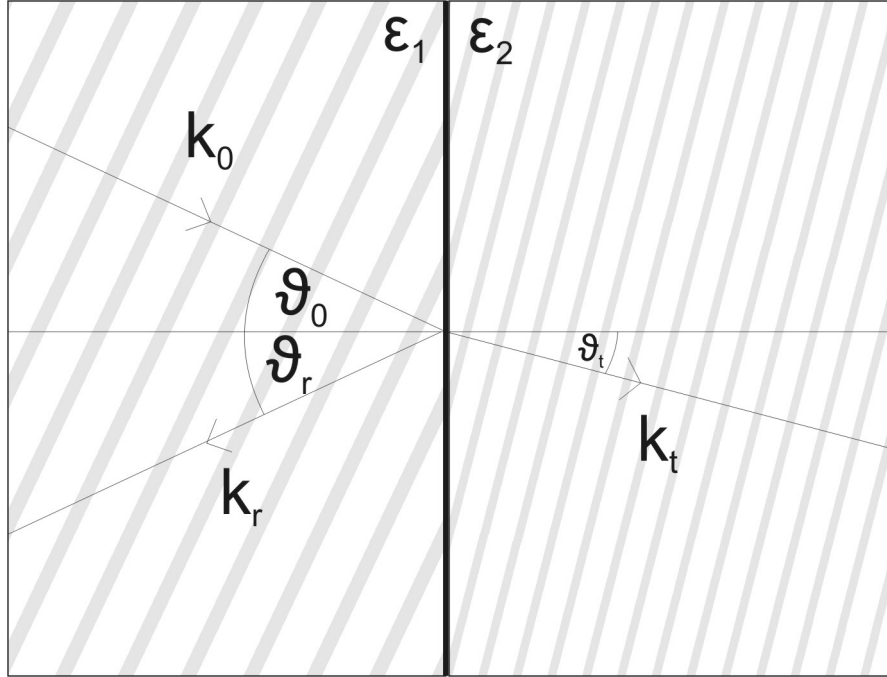
A 2. közegben pedig:

$$\mathbf{E}_2 = \mathbf{E}_t e^{i\mathbf{k}_t \mathbf{r} - i\omega t}$$

Helyettesítsük be ezeket a 1.8 és a 1.9 határfeltételbe! A határon az egyenlőségek csak akkor teljesülhetnek, ha az exponensek egyenlők.

Legyen most a közeghatár az $x = 0$ sík. Az egyszerűség kedvéért tegyük fel még azt is, hogy $\mathbf{k}_0$ az $y = 0$ síkkal párhuzamos, ezzel semmit nem veszünk az általánosságból.

1. Az általános transzfermátrix-módszer



1.1. ábra. hullám törése közeghatáron

A 1.1 ábra szögeit felhasználva az exponensek egyenlősége így is írható:

$$k_0 z \sin \vartheta_0 = k_r z \sin \vartheta_r = k_t z \sin \vartheta_t$$

és a 1.5 összefüggés miatt

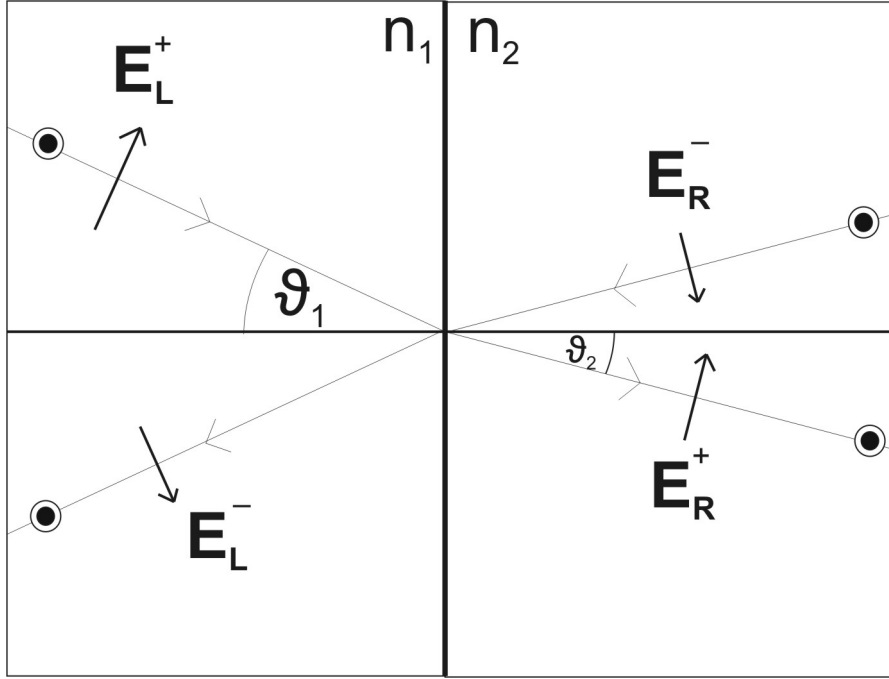
$$n_1 \sin \vartheta_0 = n_1 \sin \vartheta_r = n_2 \sin \vartheta_t$$

Ez a Snellius-törvény.

Az alábbiakban mindig két esetet fogunk megvizsgálni, mégpedig a beesési síkra merőleges és azzal párhuzamos polarizációt. Ilyen hullámok kombinációjával ugyanis tetszőlegesen polarizált fény előállítható. Az egyik esetben $\mathbf{E}$ párhuzamos a beesési síkkal. Ezt TM-módusnak, vagy p-polarizációjú hullámnak nevezik. Az másik esetben $\mathbf{E}$ merőleges a beesési síkra, ekkor TE-módusról, illetve s-polarizációjú hullámról beszélünk.

1.2. A transzfermátrix

Számításaink alapja a jól ismert transzfermátrix-módszer. A módszer kiválóan alkalmas többek közt optikai vékonyrétegeken keresztül terjedő elektromágneses síkhullámok leírására. Ha több rétegből állítjuk össze a rendszert, akkor a közbülső határfelületeken a fény általában meg is törik, vissza is verődik. Ha a hullám balról érkezik, akkor így a



1.2. ábra. törés és visszaverődés - TM módus

jobbszélső határfelületről balra minden térrészen lesz jobbra és balra terjedő hullám is. A kérdés ezen hullámok amplitúdója a különböző tartományokban.

A megoldás a következő: bontsuk részekre a problémát! Keressünk először összefüggést egy határfelület két oldalán a hullámok amplitúdói közt. A TE, illetve TM módust persze külön kell megvizsgálni, mert más határfeltételek érvényesülnek az eltérő polarizáció miatt. Ugyanígy érdekes azt is megvizsgálni, hogyan kaphatóak meg egy adott pillanatban az amplitúdók egy térrész egyik peremén, ha ismeretesek a másik szélén.

Kényelmes lenne, ha ezeket az összefüggéseket egymástól függetlenül, lineáris operátorokkal le lehetne írni. Ekkor a balra- illetve jobbra terjedő hullám amplitúdóját egy kételemű vektorba rendeznénk, ha pedig több közeg van egymás mögött, csak az operátorokat reprezentáló (2x2-es) mátrixokkal kéne egymás után beszorozni:

$$\mathbf{M} = \dots \mathbf{M}_{23} \mathbf{M}_{2free} \mathbf{M}_{12} \mathbf{M}_{1free} \mathbf{M}_{01}$$

1.2.1. TM módus

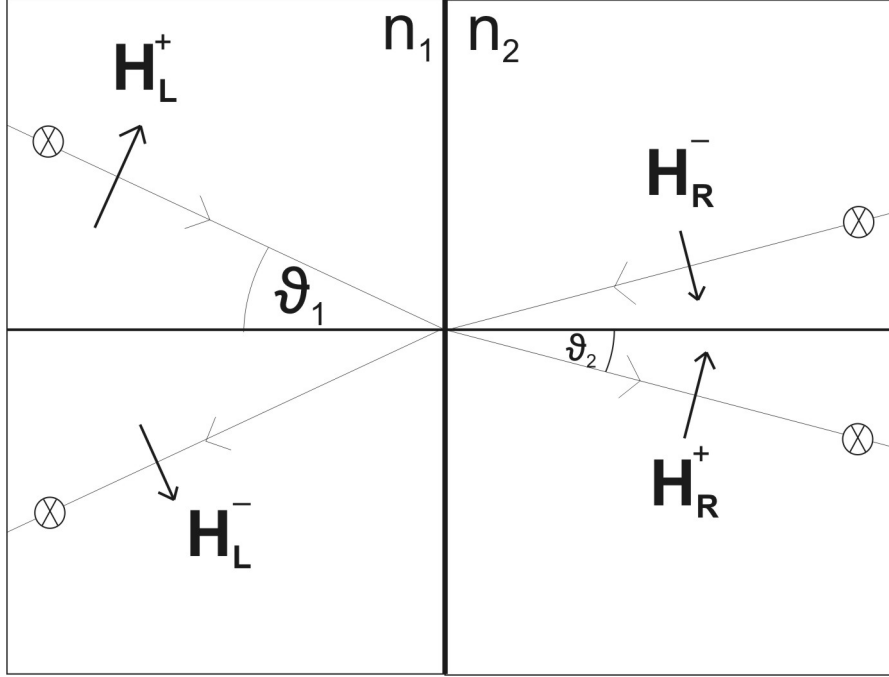
Érkezzen az $x = konst.$ határfelületre a 1.2 ábrán látható síkhullám. (A felületi töltésektől és áramoktól egyelőre tekintsünk el.) A 1.9 alapján

$$E_L^+ \cos \vartheta_1 - E_L^- \cos \vartheta_1 = E_R^+ \cos \vartheta_2 - E_R^- \cos \vartheta_2 \quad (1.12)$$

valamint a 1.10 miatt, ha még figyelembe vesszük $\mathbf{H}$ és $\mathbf{E}$ nagyságának arányát is:

$$n_1 (E_L^+ + E_L^-) = n_2 (E_R^+ + E_R^-)$$

1. Az általános transzfermátrix-módszer



1.3. ábra. törés és visszaverődés - TE módus

E két egyenletből E_R^+ -t és E_R^- -t kifejezve:

$$E_R^+ = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\cos \vartheta_1}{\cos \vartheta_2} + \frac{n_1}{n_2} \right) E_L^+ - \left(\frac{\cos \vartheta_1}{\cos \vartheta_2} - \frac{n_1}{n_2} \right) E_L^- \right]$$

$$E_R^- = \frac{1}{2} \left[- \left(\frac{\cos \vartheta_1}{\cos \vartheta_2} - \frac{n_1}{n_2} \right) E_L^+ + \left(\frac{\cos \vartheta_1}{\cos \vartheta_2} + \frac{n_1}{n_2} \right) E_L^- \right]$$

Mátrix-alakba rendezve:

$$\begin{pmatrix} E_R^+ \\ E_R^- \end{pmatrix} = \mathbf{M}_p \begin{pmatrix} E_L^+ \\ E_L^- \end{pmatrix}$$

ahol a transzfermátrix:

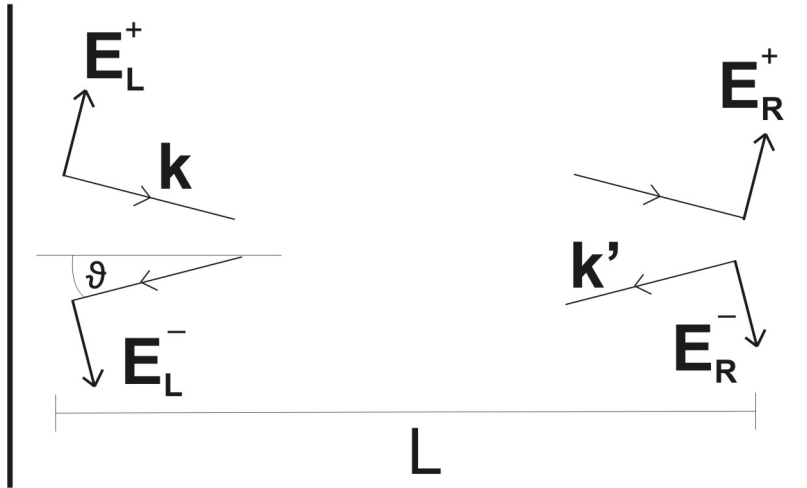
$$\mathbf{M}_p = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(\frac{\cos \vartheta_1}{\cos \vartheta_2} + \frac{n_1}{n_2} \right) & - \left(\frac{\cos \vartheta_1}{\cos \vartheta_2} - \frac{n_1}{n_2} \right) \\ - \left(\frac{\cos \vartheta_1}{\cos \vartheta_2} - \frac{n_1}{n_2} \right) & \left(\frac{\cos \vartheta_1}{\cos \vartheta_2} + \frac{n_1}{n_2} \right) \end{pmatrix} \quad (1.13)$$

1.2.2. TE módus

Az érkező hullámot most a 1.3 ábra mutatja. Az előbbivel teljesen analóg módon járunk el, csak most kissé mást mondanak a határfeltételek. A 1.9-ből

$$E_L^+ + E_L^- = E_R^+ + E_R^- \quad (1.14)$$

1. Az általános transzfermátrix-módszer



1.4. ábra. Szabad terjedés

a 1.10 szerint pedig:

$$n_1 \cos \vartheta_1 (E_L^+ - E_L^-) = n_2 \cos \vartheta_2 (E_R^+ - E_R^-)$$

Ismét kifejezve a jobboldali amplitúdókat:

$$E_R^+ = \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{n_1 \cos \vartheta_1}{n_2 \cos \vartheta_2} \right) E_L^+ + \left(1 - \frac{n_1 \cos \vartheta_1}{n_2 \cos \vartheta_2} \right) E_L^- \right]$$

$$E_R^- = \frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{n_1 \cos \vartheta_1}{n_2 \cos \vartheta_2} \right) E_L^+ + \left(1 + \frac{n_1 \cos \vartheta_1}{n_2 \cos \vartheta_2} \right) E_L^- \right]$$

A transzfermátrix pedig:

$$\mathbf{M}_s = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{n_1 \cos \vartheta_1}{n_2 \cos \vartheta_2} \right) & \left(1 - \frac{n_1 \cos \vartheta_1}{n_2 \cos \vartheta_2} \right) \\ \left(1 - \frac{n_1 \cos \vartheta_1}{n_2 \cos \vartheta_2} \right) & \left(1 + \frac{n_1 \cos \vartheta_1}{n_2 \cos \vartheta_2} \right) \end{pmatrix} \quad (1.15)$$

1.2.3. Szabad terjedés

Legyen a minta L vastagságú. Miután a hullámok

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t}$$

alakúak, ezért merőleges beesés esetén egyértelműek a következő összefüggések:

$$E_R^+ = e^{ik_x L} E_L^+$$

$$E_L^- = e^{ik_x L} E_R^-$$

1. Az általános transzfermátrix-módszer

vagyis

$$E_R^- = e^{-ik_x L} E_L^-$$

Merőleges beesésre a szabad terjedés transzfermátrixa tehát (x irányba mutató normálvektorú térrészekre)

$$\mathbf{M}_{free} = \begin{pmatrix} e^{ik_x L} & 0 \\ 0 & e^{-ik_x L} \end{pmatrix} \quad (1.16)$$

Szőgben beeső fény esetén óvatosabban kell eljárni, mert az azonos fázisú síkok nem egyszerre érkeznek a határfelülethez.

A probléma a következő: A síkhullám ϑ_0 szögben érkezik a felületre. (ld. 1.5. ábra!) A hullámfrontot az A pontban ábrázoltam. Itt a hullám megtörik, és az A' pont érintésével jut el a B pontba, ahol szuperponálódik az éppen odaért síkhullámmal. A fáziskülönbség azonban nem ugyanaz lesz, mint a merőleges esetben, hiszen a kilépés pontja térben is eltér a belépés pontjától. Az eltérést a megvastagított fekete vonal (a CB szakasz) okozza. Ezt az utat kell megtennie a bejövő hullámfrontnak, hogy a kilépési pontba jusson.

A CB szakasz hosszát a következőképpen kaphatjuk meg. Az ABC háromszög A csúcsánál lévő szög éppen ϑ_0 , mert ennek szárai merőlegesek az ábrán bejelölt ϑ_0 -ra. Az AB szakasz hossza az ábra jelölésével $2d$. a CB szakasz hossza tehát:

$$\overline{CB} = 2d \sin \vartheta_0 \quad (1.17)$$

A d hosszúsággal kapcsolatban viszont leolvashatjuk az ábráról, hogy

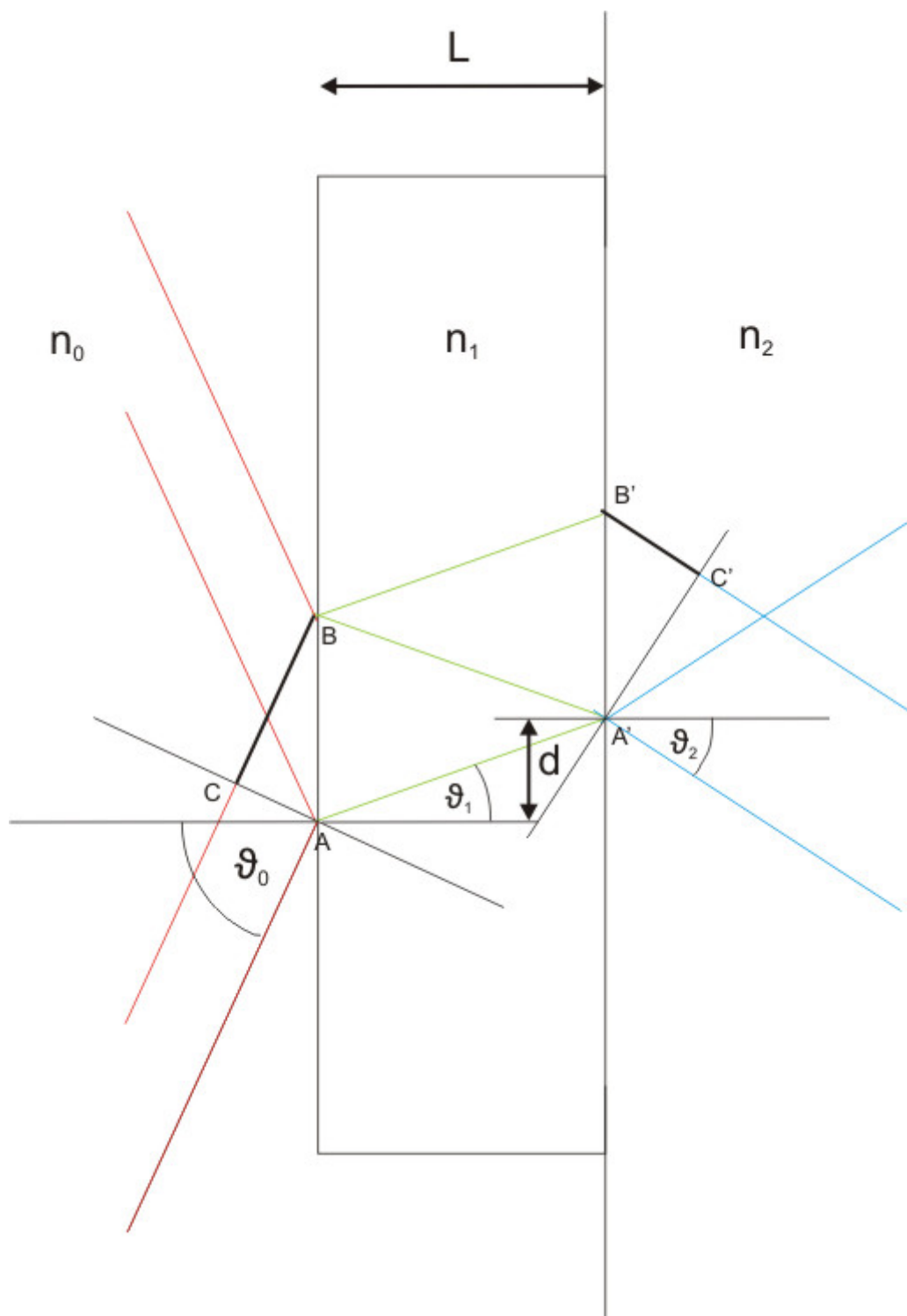
$$d = L \tan \vartheta_1 \quad (1.18)$$

A CB szakaszból adódó fáziseltolódás tehát

$$\Delta\varphi = ik\overline{CB} = \frac{i4\pi L \tan \vartheta_1 n_0 \sin \vartheta_0}{\lambda_0} \quad (1.19)$$

Ha ez az eltolódás nem csak az aktuális vékonyrétegtől, hanem a külső közeg törésmutatójától is függ, akkor bajban vagyunk. (Nem tudhatjuk, melyik oldalon leszünk kíváncsiak a térerősségre.)

Egy csoda folytán azonban ismét szerencsénk van.



1.5. ábra. Vékonyréteg-rendszerre szögben beeső fény

1. Az általános transzfermátrix-módszer

Érkezzen most a jobb oldali, $n_2 \neq n_0$ törésmutatójú közegből egy hullám. A hullámfront az $A'C'$ egyenes és a lap normálisa által kitüntetett sík. A $B'C'$ szakasz hossza:

$$\overline{B'C'} = 2L \tan \vartheta_1 \sin \vartheta_2 \quad (1.20)$$

A visszavert hullámok $B'C'$ szakaszból adódó fáziseltolódása:

$$\Delta\varphi' = ik\overline{B'C'} = \frac{i4\pi L \tan \vartheta_1 n_2 \sin \vartheta_2}{\lambda_0} \quad (1.21)$$

Azt szeretnénk, ha a bal- és jobboldali fáziseltolás megegyezne, vagyis ha teljesülne, hogy $\Delta\varphi = \Delta\varphi'$. Az egyszerűsítések után:

$$n_0 \sin \vartheta_0 = n_2 \sin \vartheta_2 \quad (1.22)$$

ami véletlenül épp a Snellius-törvény!

A szabad terjedés mátrixa tehát a következőképpen néz ki:

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} e^{i(\varphi - \frac{1}{2}\Delta\varphi)} & 0 \\ 0 & e^{-i(\varphi - \frac{1}{2}\Delta\varphi)} \end{pmatrix} \quad (1.23)$$

ahol $n_0 = 1$ esetén

$$\varphi - \frac{1}{2}\Delta\varphi = L(k \cos \vartheta_1 - k_0 \tan \vartheta_1 \sin \vartheta_0). \quad (1.24)$$

1.3. Reflexió, transzmisszió, kontraszt

Amikor transzfermátrixokkal dolgozunk, valójában intenzitásokra, pontosabban ezek arányára vagyunk kíváncsiak. Intenzitás alatt a Poynting-vektor abszolút értékét értjük.

Transzmissziónak nevezzük az optikai rendszeren áthaladó, és az arra beérkező intenzitás arányát:

$$T = \frac{I_t}{I_{be}} \quad (1.25)$$

Ezzel szemben a reflexió a rendszerről visszaverődött és a beérkező intenzitás aránya:

$$R = \frac{I_r}{I_{be}} \quad (1.26)$$

Vizsgáljuk meg azt az esetet, amikor a rendszerre jobbról nem érkezik fény! Ekkor az egész rendszerre:

$$\begin{pmatrix} E_R^+ \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} E_L^+ \\ E_L^- \end{pmatrix} \quad (1.27)$$

Kiírva az egyenleteket:

$$\begin{aligned} E_R^+ &= M_{11}E_L^+ + M_{12}E_L^- \\ 0 &= M_{21}E_L^+ + M_{22}E_L^- \end{aligned}$$

1. Az általános transzfermátrix-módszer

Innen a térerősségvektorok nagyságának aránya:

$$r = \frac{E_L^-}{E_L^+} = -\frac{M_{21}}{M_{22}} \quad (1.28)$$

$$t = \frac{E_R^+}{E_L^+} = M_{11} - \frac{M_{21}}{M_{22}} M_{12} = \frac{\det \mathbf{M}}{M_{22}} \quad (1.29)$$

Azt is tudjuk, hogy a Poynting-vektor nagysága:

$$|\mathbf{S}| = |\mathbf{E} \times \mathbf{H}| = n \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} |\mathbf{E}|^2 \sim n |\mathbf{E}|^2 \quad (1.30)$$

Ha a beeső fény hullámszámvektora θ_1 (hegyes)szöget zár be a vékonyrétegek normálvektorával, ezenfelül a törésmutatók valósak, akkor a közeghatáron az energia-megmaradás így írható:

$$n_1 |\mathbf{E}|^2 \cos \theta_1 = n_1 |\mathbf{E}|^2 |r|^2 \cos \theta_1 + n_2 |\mathbf{E}|^2 |t|^2 \cos \theta_2 \quad (1.31)$$

ahol θ_2 a megtört sugár normálvektorral bezárt szöge. A baloldallal leosztva:

$$1 = |r|^2 + \frac{n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1} |t|^2 \quad (1.32)$$

Reflexiónak nevezzük az

$$R = |r|^2$$

transzmisszióknak pedig a

$$T = \frac{n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1} |t|^2$$

menyiséget. Értelmszerűen (veszteségmentes közegek esetén) teljesül az

$$R + T = 1 \quad (1.33)$$

összefüggés. Disszipatív közegekre nyilván

$$R + T < 1$$

érvényes.

Ha egy hordozóra helyezzük el a vizsgált vékonyréteget, akkor lényeges kérdés, hogy mekkora különbség van a mintával ellátott és anélküli hordozó által visszavert intenziás között. Ennek számszerűsítéséhez bevezetjük a

$$C = \frac{R_{minta} - R_{ref}}{R_{ref}} \quad (1.34)$$

menyiséget, és ezt a továbbiakban kontrasztnak nevezzük.

1.4. Alkalmazás grafénre

Ha a mintán a felületi töltés- illetve áramsűrűség nem tekinthető 0-nak, akkor ezt a transzfermátrixok felírásánál is figyelembe kell venni. A grafén vezető, tehát itt felhalmozódott töltéssűrűséggel nem, a beeső hullám által gerjesztett áramsűrűséggel viszont számolni kell.

A d rétegű grafén optikai vezetőképességét úgy választjuk, hogy az eredmény összevágjon [16] eredményével:

$$\sigma = d\sigma_0 = d \frac{\pi e^2}{2 \hbar} \quad (1.35)$$

Érdekesség, hogy a vezetőképesség csak univerzális konstansokat (elemi töltés, Planck-állandó) tartalmaz. A (1.10) határfeltételbe behelyettesítve:

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) = \sigma \mathbf{E}_h = d\sigma_0 \mathbf{E}_h \quad (1.36)$$

Ahol $\mathbf{E}_h$ a térerősség felülettel párhuzamos komponensének értéke a határon. A (2.1e-f) és a (1.6) alapján

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) = \mathbf{n} \times \left[\hat{\mathbf{k}} \times (n_2 \mathbf{E}_2 - n_1 \mathbf{E}_1) \right] \epsilon_0 c_0 \quad (1.37)$$

A két egyenletet összevetve,

$$\mathbf{n} \times \left[\hat{\mathbf{k}} \times (n_2 \mathbf{E}_2 - n_1 \mathbf{E}_1) \right] = d \frac{\pi e^2}{2 \hbar} \frac{1}{\epsilon_0 c_0} \mathbf{E}_h \quad (1.38)$$

A jobboldalon álló konstans szorzót átrendezve:

$$\mathbf{n} \times \left[\hat{\mathbf{k}} \times (n_2 \mathbf{E}_2 - n_1 \mathbf{E}_1) \right] = d\pi\alpha \mathbf{E}_h \quad (1.39)$$

ahol

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 c_0 \hbar} \approx \frac{1}{137}$$

a finomszerkezeti állandó.

1.4.1. TM módus

A transzfermátrixokat az előbbivel analóg módon határozzuk meg. Ha a lapok ismét a $z = 0$ síkkal párhuzamosak, akkor egyrészt (1.9) alapján

$$(E_1^+ - E_1^-) \cos \vartheta_1 = (E_2^+ - E_2^-) \cos \vartheta_2$$

másrészt az imént kapott (1.39) összefüggésből

$$-n_2(E_2^+ + E_2^-) + n_1(E_1^+ + E_1^-) = d\pi\alpha \cos \vartheta_1 (E_1^+ - E_1^-) \quad (1.40)$$

1. Az általános transzfermátrix-módszer

Az egyenletrendszerből ismét kifejezhetjük E_2^+ -t és E_2^- -t az első közegbeli térerősségekkel, és ezzel megkapjuk a grafén TM-módusra vonatkozó transzfermátrixát:

$$\mathbf{M}_p = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(\frac{\cos \vartheta_1}{\cos \vartheta_2} + \frac{n_1}{n_2} \right) - \Sigma_p & - \left(\frac{\cos \vartheta_1}{\cos \vartheta_2} - \frac{n_1}{n_2} \right) + \Sigma_p \\ - \left(\frac{\cos \vartheta_1}{\cos \vartheta_2} - \frac{n_1}{n_2} \right) - \Sigma_p & \left(\frac{\cos \vartheta_1}{\cos \vartheta_2} + \frac{n_1}{n_2} \right) + \Sigma_p \end{pmatrix} \quad (1.41)$$

és

$$\Sigma_p = \frac{d\pi\alpha \cos \vartheta_1}{n_2}$$

1.4.2. TE módus

A felülettel párhuzamos polarizációjú hullám esetén a (1.9) ismét a dielektrikum esetével azonos képletet szolgáltatja:

$$E_2^+ + E_2^- - (E_1^+ + E_1^-) = 0$$

A (1.39)-ből pedig ezúttal a

$$(E_2^+ - E_2^-)n_2 \cos \vartheta_2 - (E_1^+ - E_1^-)n_1 \cos \vartheta_1 = -d\pi\alpha(E_1^+ + E_1^-) \quad (1.42)$$

egyenletet bogozhatjuk ki.

Végül az s-polarizáció transzfermátrixa:

$$\mathbf{M}_s = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{n_1 \cos \vartheta_1}{n_2 \cos \vartheta_2} \right) - \Sigma_s & \left(1 - \frac{n_1 \cos \vartheta_1}{n_2 \cos \vartheta_2} \right) - \Sigma_s \\ \left(1 - \frac{n_1 \cos \vartheta_1}{n_2 \cos \vartheta_2} \right) + \Sigma_s & \left(1 + \frac{n_1 \cos \vartheta_1}{n_2 \cos \vartheta_2} \right) + \Sigma_s \end{pmatrix} \quad (1.43)$$

ahol

$$\Sigma_s = d\pi\alpha \frac{1}{n_2 \cos \theta_2}$$

2. A vizsgált rendszerek. Az eredményekre vonatkozó előzetes megfontolások és a tényleges elméleti eredmények összevetése *Blake et al.* méréseivel

2.1. A vizsgált rendszerek

A módszert több vékonyréteg-összeállításra kipróbáltuk. Ezek közül a legfontosabb a SiO_2 vékonyréteggel bevont szilícium hordozóra helyezett grafén esete. Ezt a következő transzfermátrix írja le:

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}^{(\text{SiO}_2, \text{Si})} \mathbf{M}_{free}^{(\text{SiO}_2)} \mathbf{M}^{(1, gr, \text{SiO}_2)}$$

Ezek a mátrixok egyrészt a rendszer paramétereitől, másrészt a megvilágító fénytől függenek. A rendszer paraméterei közé tartozik a rétegvastagság, a törésmutatók és a grafénrétegek száma. A beérkező fény tulajdonságai a polarizációja, frekvenciája és a megvilágítás szöge. A rendszer bizonyos értelemben analitikusan kezelhető, hiszen “csak” a három mátrixot kell összeszorozni, a reflexók és transzmissziók zárt képlettel is felírhatók a 1.28 és a 1.29 képletek segítségével.

Így azonban hosszú és bonyolult formulákat nyerünk, arról nem is beszélve, hogy egy valós rendszer esetén az anyagok törésmutatói függenek a frekvenciától (sőt, anizotróp anyagok esetén a polarizációtól és a beesési szögtől is).

A grafén esetében a legérdekesebb kérdés a kontraszt, vagyis hogy durván szólva, mennyivel sötétebb a grafénnel borított terület a környező SiO_2 referenciánál. Ezt a tulajdonságot a 1.34 mennyiséggel számszerűsítjük.

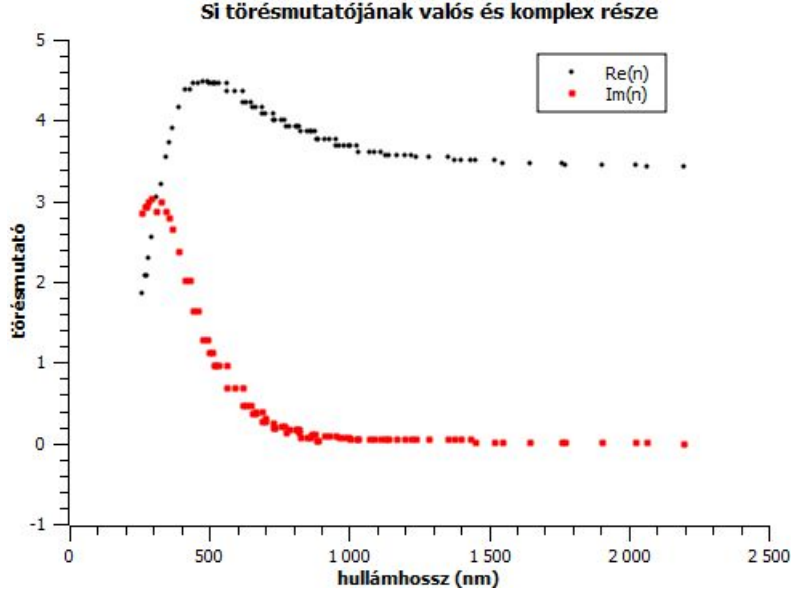
Az összefüggésben szereplő R_{ref} a grafén nélküli rendszer mátrixából számolható, mely a következő alakú:

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}^{(\text{SiO}_2, \text{Si})} \mathbf{M}_{free}^{(\text{SiO}_2)} \mathbf{M}^{(1, \text{SiO}_2)}$$

A számításokat széles paramétertartományban, egy saját készítésű, C++ nyelven írt számítógépes programmal végeztük. A fordító az ingyenesen hozzáférhető *Microsoft Visual C++ Express* volt. Az adatok vizualizációja a szintén ingyenes *SciDAVis* program-csomag segítségével történt.

A program segítségével a törésmutatók frekvenciafüggését is figyelembe tudjuk venni. Ebben az esetben az adatokat külső fájlból olvassa be, az adatsor pontjai közt lineá-

2. Előzetes megfontolások



2.1. ábra. Amorf Si törésmutatójának frekvenciafüggése. A valós részt feketével, a képzetes pirossal jelöltük

ris interpolációval közelíti a törésmutatót. A használt törésmutató-frekvencia görbéket mutatja a 2.1, illetve a 2.2 ábra. Az adatokat *Palik* művéből nyertük [23].

2.2. Az eredményekre vonatkozó megfontolások

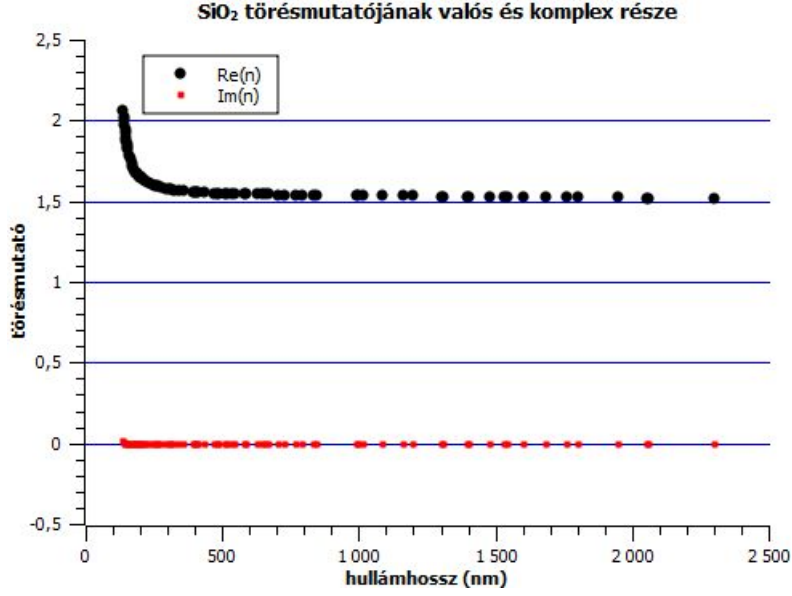
A 1.43 mátrixból kiindulva az önhordó grafén szinte teljesen átlátszó, reflexiója $1.3 \cdot 10^{-4}$ körül van. Ha azonban szigetelő felületre (pl. SiO_2) helyezzük, néhány százalékra nő a visszavert intenzitás. Ez már mérhető egy átlagos spektrométerrel.

Ha azonban a SiO_2 hordozó nagy kiterjedésű tömb lenne, akkor gyakorlatilag az alapvonal megváltozását kéne mérni. Ezért aztán célszerűbb helyett egy oxidált vékonyréteggel ellátott Si hordozót használni. Ennek hatalmas előnye, hogy amennyiben az oxidréteg vastagsága összemérhető a beeső fény frekvenciájával, akkor a spektrumban interferenciacsúcsok és -minimumok jelennek meg. Ez a következő, igen egyszerű gondolatmenetből következik.

Tekintsük a d vastagságú SiO_2 vékonyréteggel ellátott Si tömböt, melyre λ_0 hullámhosszú fény érkezik. Egyszerűsítsük a problémát annyira, hogy mindössze két visszaverődést veszünk figyelembe.

A beeső fény egy része a SiO_2 réteg külső határán reflektálódik. A megmaradó rész továbbhalad a szigetelőben, míg a Si közeget határához ér. Az itt visszavert sugár a SiO_2 külső felületén visszaverthez fáziskülönbséggel adódik hozzá. A visszavert sugár intenzi-

2. Előzetes megfontolások



2.2. ábra. SiO₂ kristály törésmutatójának frekvenciafüggése. A valós részt feketével, a képzetes pirossal jelöltük

tásáról így azt mondhatjuk, hogy

$$r \propto (A + B \cos(\omega t))^2 = \left(A + B \cos \left(2\pi \nu \cdot 2d \frac{n}{c} \right) \right)^2 = \left(A + B \cos \left(\frac{4\pi d n}{\lambda_0} \right) \right)^2$$

ahol az A és B mennyiségek határozzák meg a nyalábok egymáshoz viszonyított intenzitását.

A reflexió tehát periodikus függvénye a frekvenciának. Ez ráadásul nem közelítés, hiszen a többszörösen visszavert sugarak ugyanazon az optikai úthossz többszöröseit teszik meg a vékonyrétegben.

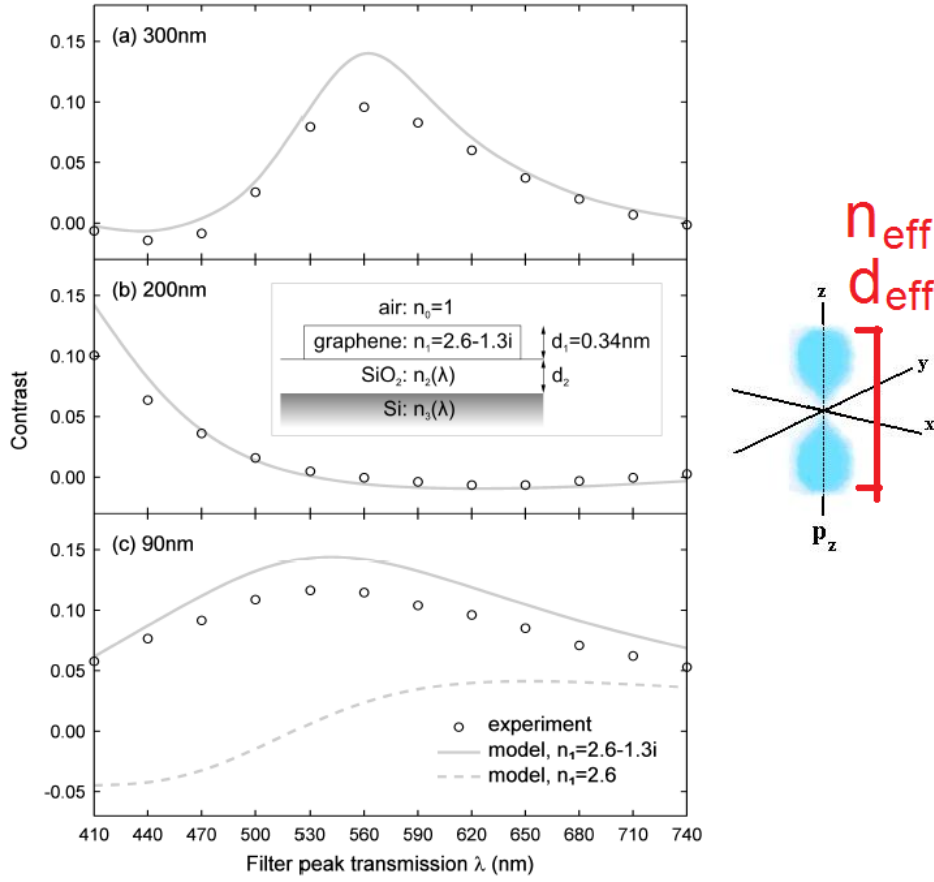
Fontos megjegyezni, hogy ebből az egyszerű érvelésből a spektrum és a törésmutatók pontos ismeretében *egzaktnak* képlet adódik a vékonyréteg vastagságára:

$$d = \frac{(2k + 1)\lambda_k}{4n}$$

ahol a $k \in \mathbb{Z}$ indexeli a reflexió minimumait a frekvencia függvényében, λ_k pedig az ehhez tartozó (vákuumbeli) hullámhossz.

A jelenség egyébként analóg a víz felszínén úszó olajfolt optikájával. A fehér fény a folt különböző pontjaiból különböző szögben érkezik a szemünkbe. A különböző szögben érkező sugarak különböző úthosszakat tettek meg (az olaj) vékonyrétegben, ezáltal a kioltott frekvenciák is különbözők. Ezért látjuk színesnek ezeket a foltokat.

2.3. Összevetés egy korábbi grafénméréssel

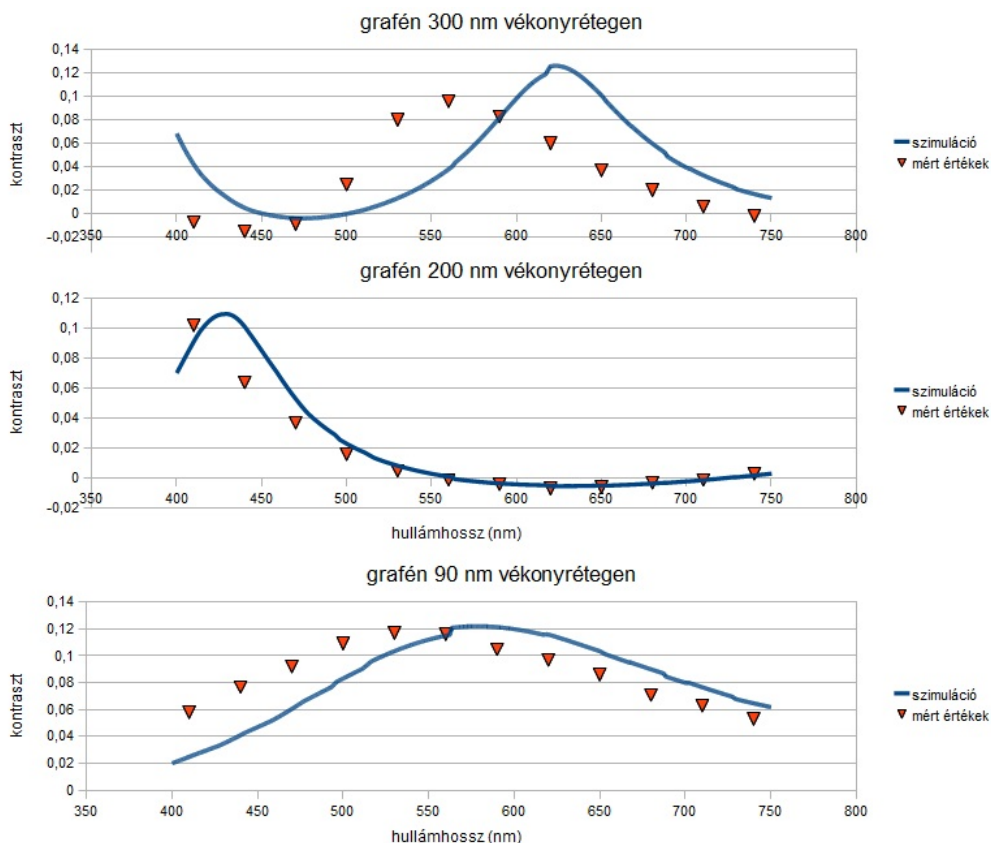


2.3. ábra. *Blake et al.* eredménye [18] különböző vastagságú SiO₂ vékonyrétegre helyezett grafén kontrasztjára vonatkozóan. A pontok mérési eredmények, a folytonos vonal elméleti számítás.

Az irodalomban többen foglalkoztak már grafén kontrasztjának mérésével. A 2.3 ábrán Blake és munkatársainak eredménye [18] látható. A mérést úgy végezték, hogy a grafénmintát merőlegesen, keskeny sávzélességű színszűrőkön keresztül világították meg, és az így megvilágított mintát monokromatikus fényképezőgéppel lefényképezték. A kontrasztot képfeldolgozó szoftverrel állapították meg. A folytonos görbét úgy kapták, hogy felhasználták [19] három vékonyrétegből álló optikai rendszerre felírt képletét. A grafént egy effektív törésmutatóval és a p_z pálya effektív átmérőjével vették figyelembe.

Ezen a ponton fontos megjegyezni, hogy a szakirodalomban a komplex törésmutatóknak kétféle konvenciója terjedt el. Egyes helyeken az imaginárius részt pozitív előjellel, máshol viszont negatív előjellel definiálják. Ennek megfelelően a transzfermátrixok alakja

2. Előzetes megfontolások

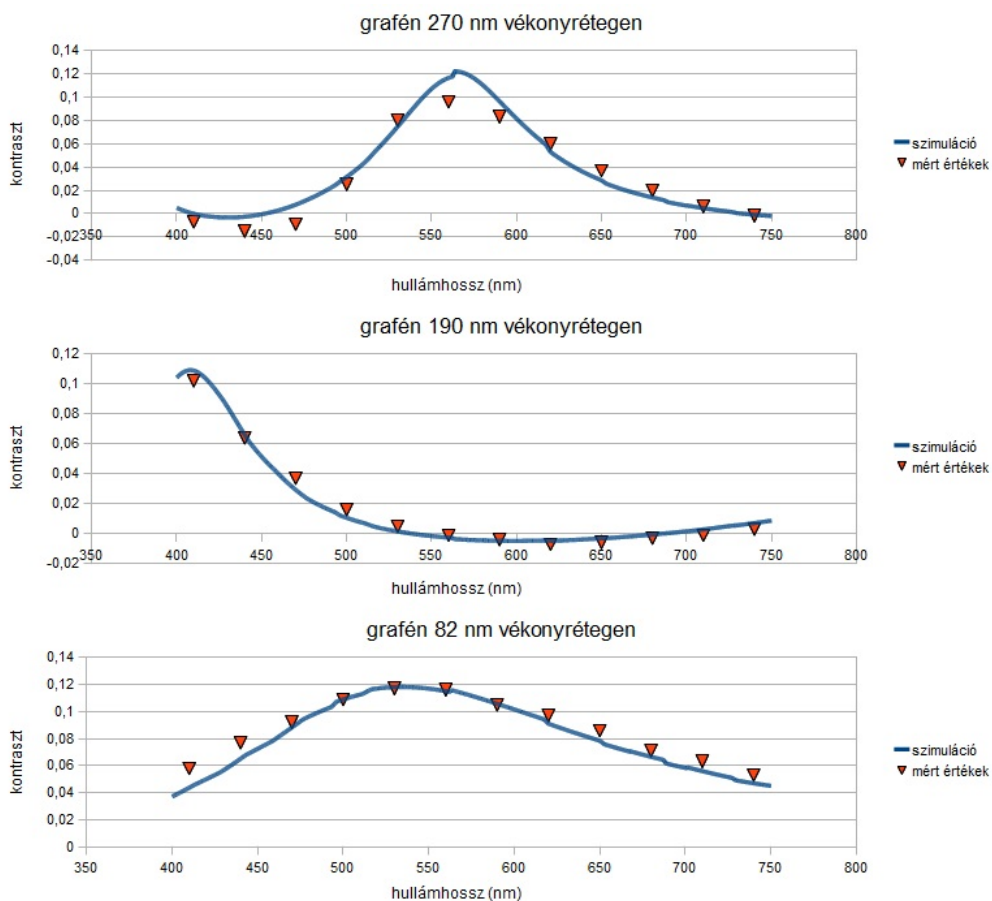


2.4. ábra. Az előző ábra mérési eredményei mellett ezúttal saját számítási eredményeinket ábrázoltuk. A két görbe láthatóan kissé eltér.

is eltér a kétféle konvencióban. Mi következetesen a $+$ előjelet használjuk, a cikkben viszont a negatív előjelet használják. Ezzel cseng egybe a cikkben idézett (2) képlet, ami szintén a negatív imaginárius előjellel helyes (ld. még: B függelék).

A saját számítások az amplitúdót tekintve jobban illeszkednek a mérési adatokra, azonban a csúcsok el vannak tolódva. Ennek oka lehet az, hogy a vékonyréteg tényleges vastagsága 10%-kal eltér a megadottól. Egy ilyen, a SiO_2 vastagságában méréshez illesztett számítás eredménye látható a 2.5. ábrán. Az eltolódás másik oka lehet, hogy a rendszert felépítő anyagok törésmutatói nem egyeznek meg pontosan az irodalomban közölt értékekkel (ezt indikálja, hogy [23] szerint az amorf, illetve kristályos Si törésmutatója, másrészt az amorf és kristályos SiO_2 törésmutatója is jelentősen eltér).

2. Előzetes megfontolások



2.5. ábra. Blake et al. cikkének mérési eredményei és saját számításunk összevetése, ha a számítás során a vékonyréteg vastagságát illesztjük a mérési eredményekre. Látható, hogy a SiO_2 vastagságának legfeljebb 10 százalékos eltérése megmagyarázza a görbék eltolódását. Ugyanígy az is elképzelhető azonban, hogy a törésmutató nem egyezik pontosan az irodalomban leírt értékkel.

3. Saját mérések: grafén azonosítása Raman-spektroszkópiával, SiO₂ vékonyréteg vizsgáltata Si hordozón infravörös és látható spektroszkópiával

Az elmélet további alátámasztása érdekében méréseket is végeztünk az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont Szilártestfizikai Intézetében. A grafénminták az MTA TTK MFA-ból, Bíró László csoportjából származnak. A mérések egyrészt a grafén detektálására, másrészt a vékonyréteg-rendszerek spektrumának vizsgálatára irányultak.

A vizsgálatokhoz rendelkezésre állt két SiO₂-Si minta, melyeken az oxidált vékonyréteg vastagsága 90, illetve 300 nm körül volt. A minták felületén helyenként grafit vékonyrétegek helyezkednek el. Ez utóbbiak néhány réteg grafénből épülnek fel, található köztük egyrétegű grafén is.

Egy grafénminta egyrétegű voltárol legegyszerűbben Raman-spektroszkópia segítségével győződhetünk meg. Ennek Raman-spektruma ugyanis megismerhető az 1580 nm-nél elhelyezkedő G-csúcsról, illetve a 2700 nm hullámhossznál található 2D csúcs alapján. Az említett csúcsok egyrétegű grafén esetén szabályos Lorentz-görbék, és a kettő közül a 2D csúcs a nagyobb.[22]

Az ilyen graféndarabok kiterjedése azonban mindössze 0.1 – 0.2 mm nagyságrendű. Ennek következménye, hogy ezeken a mintákon a grafént kis híján, de nem tudtuk közvetlenül, spektrométerrel mérni. A módszer hatékonyságáról azonban sok mindent elárul a SiO₂ vékonyréteg kontrasztja az oxidált felület nélküli Si reflexiójáoz képest. A Si mintákon ezt mértük.

Ezekon a mintákon kívül bór-nitrid (BN) vékonyréteggel bevont rézfóliákat is tanulmányoztunk, melyek közül néhány felületén homogén, egyrétegű grafén helyezkedett el. Ebben az esetben azonban a szigetelő BN réteg alig néhány nm-es vastagsága, valamint a fólia felületi egyenetlenségei megakadályozták a hitelt érdemlő mérést (a mérendő kontraszt mindössze 10⁻⁴ körül lett volna!)

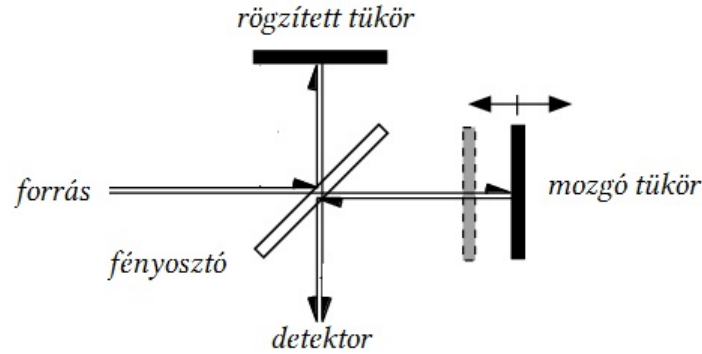
3.1. A műszerek

3.1.1. FTIR spektrométer

Az infravörös spektrumok mérésének korszerű eszköze a Fourier-transzformációs infravörös (FTIR) spektrométer. Ennek fő alkotóeleme egy Michelson-interferométer. (3.1.1.

3. Saját mérések

ábra)



3.1. ábra. Michelson-interferométer

A forrásról beeső fénysugarat egy nyalábosztó kettébontja. A két sugár egy-egy merőleges tükörről verődik vissza. Az egyik tükör rögzített, a másik viszont előre-hátra mozog. A második fénypályát változtatása következtében a két visszavert sugár közt fáziskülönbség lép fel. A szuperponált hullám intenzitása ettől a fáziskülönbségtől függ.

Ha a fény polikromatikus, akkor a szuperponált nyaláb intenzitása a mozgó tükör x helyének függvényében a következő alakú:

$$I(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty B(k) \cos(kx) dk \quad (3.1)$$

ahol $k = 2\pi/\lambda$. Látható, hogy az interferencia az intenzitás frekvenciafüggésének Fourier-transzformáltja. Az inverz transzformációval megkapjuk a spektrumot:

$$B(k) = \int_{-\infty}^\infty I(x) \cos(kx) dx \quad (3.2)$$

3.1.2. UV/VIS spektrométer

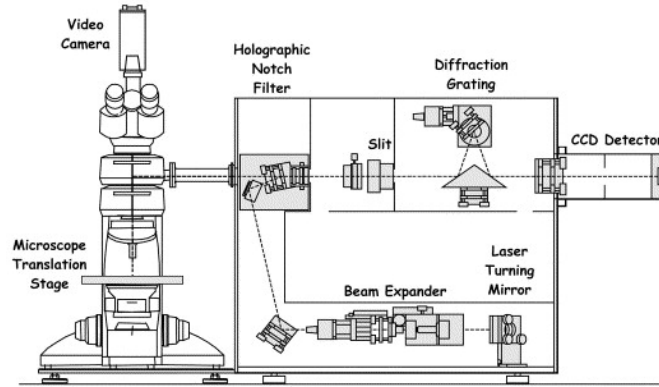
A látható tartománybeli spektrum méréséhez egy Ocean Optics QE65000 műszer állt rendelkezésre. Ez egy egyszerű UV/látható spektrométer. A vizsgálandó minta egy Nikon Eclipse E600POL mikroszkóp tárgylemezén helyezkedett el. Az erről visszavert fény egy optikai szálon jutott a spektrométerbe, ahol egy optikai rácson (grating) a különböző frekvenciájú komponensek különböző mértékben hajlottak el. Az így létrejött diffrakciós képet egy nagyfelbontású CCD detektor érzékelt. A spektrumot a *SpectraSuite* szoftverrel értékeltük ki.

3.1.3. Raman-spektrométer

A Raman-spektroszkópiát a grafénminták azonosítására használtuk. A műszer egy Renishaw System 1000B típusú készülék volt. A módszer abban áll, hogy a mintára egy

3. Saját mérések

fókuszáló optikai rendszeren (esetünkben egy mikroszkópon) keresztül lézerrel rávilágítunk, melynek fénye a mintán szóródik. A visszaverődött fényt egy optikai rácra fókuszáljuk, majd CCD chipre vetítjük. A lézer hullámhosszának közvetlen környezetét egy holografikus sávszűrővel vágjuk ki a spektrumból. Erre azért van szükség, mert minket a Rayleigh-szórásnál több nagyságrenddel kisebb másodlagos effektusok érdekelnek. A holografikus szűrő segítségével a lézer hullámszámától számítva 300 cm^{-1} relatív hullámszámtól tudjuk regisztrálni a spektrumot. Amikor a lézer rávilágít a mintára, a fotonok



3.2. ábra. Renishaw System 1000B műszer sematikus felépítése

túlnyomó része azon rugalmasan szóródik, a visszavert foton hullámhossza megegyezik a beesővel. Ez a Rayleigh-szórás. Némely esetben azonban a foton kölcsönhatásba lép a minta atomjainak elektronfelhőjével, és ott egy elektront “virtuális” energiaállapotba gerjeszt. Ha ebből a virtuális állapotból az eredetitől különböző energiaállapotba ugrik vissza, akkor beszélünk Stokes-, illetve Anti-Stokes eltolódásról. A Stokes-eltolódás esetén magasabb energiaszintre ugrik, ezáltal a kibocsátott foton a lézernél hosszabb hullámhosszú. Anti-Stokes esetén ennek fordítottja áll fenn, az új energiaszint alacsonyabb, a kibocsátott foton frekvenciája nagyobb.

A mi fényforrásunk egy 488 nm-es Ar^+ gázlézer volt.

3.2. A mérés menete

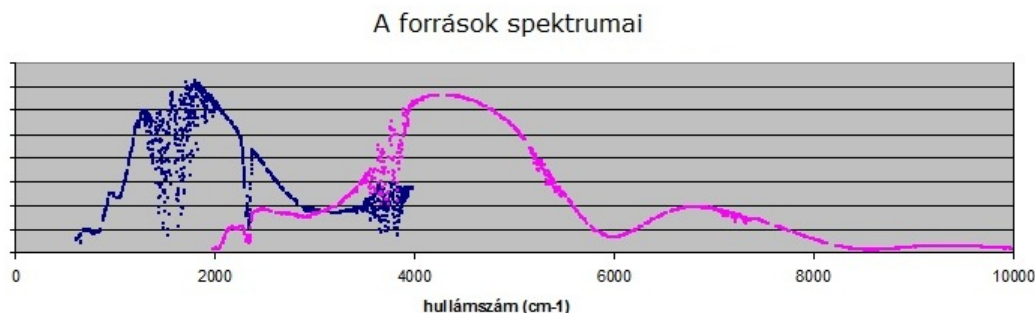
A hullámszám mérésére egy kézenfekvő mértékegységet, a cm^{-1} -et is használni fogunk. Ezt a spektroszkópiában előszeretettel használják. Az átváltás a hullámhossz és a hullámszám közt egyszerű:

$$x[\text{cm}^{-1}] = \frac{1}{100} \frac{1}{\lambda[\text{m}]} = \frac{10^7}{\lambda[\text{nm}]}$$

A mérések során a kitűzött cél a grafén reflexiós spektrumának kimérése volt. Ezt a célt szem előtt tartva először kétféle vastagságú SiO_2 vékonyréteggel ellátott Si mintákat vizsgáltunk infravörös és látható spektroszkópiával. A kétféle mintán az oxidréteg vastagsága $d = 90\text{ nm}$, illetve $d = 300\text{ nm}$ körül volt.

3. Saját mérések

A minták infravörös (reflexiós) spektrumát egy Bruker Tensor 37 típusú Fourier-transzformációs spektrométerrel mértük. Maga a minta egy speciális infravörös mikroszkóp tárgylemezén helyezkedett el, egy 50x objektív alatt. A mikroszkóp apertúráját úgy állítottuk be, hogy egyrészt a megvilágított terület minél homogénebb, egyenletesebb legyen, másrészt elegendő fény jusson át rajta a pontos méréshez. A megvilágításról igény szerint NIR- illetve MIR fényforrás gondoskodott, attól függően, hogy közeli- vagy közép infravörös tartományban dolgoztunk. Ezek spektruma látható a 3.2 ábrán.



3.3. ábra. MIR (kék színnel), illetve NIR (lila színnel) fényforrások spektrumai

Az ábráról leolvasható, hogy a közép-infravörös forrás a $800 - 3500 \text{ cm}^{-1}$ tartományban, a közeli forrás pedig $2000 - 8000 \text{ cm}^{-1}$ intervallumban használható. Az ideális forrás spektruma Planck-görbe lenne. Az ettől való eltérést a fényútban található elemek elnyelése, a vízpára abszorpciós vonalai és egyéb zavaró tényezők okozzák.

A nyers mérési adatok a *Bruker Opus* szoftver segítségével kerültek feldolgozásra.

A látható tartománybeli spektrum kinyeréséhez a már említett Ocean Optics műszer állt rendelkezésre. A minta egy optikai mikroszkóp tárgylemezén helyezkedett el, 50x objektív alatt. A visszavert fény egy üvegszál kábelén keresztül jutott a spektrométerbe, majd annak CCD chip-jéről a számítógépbe. Az elektronikus feldolgozás az *Ocean Optics SpectraSuite* szoftvere segítségével zajlott.

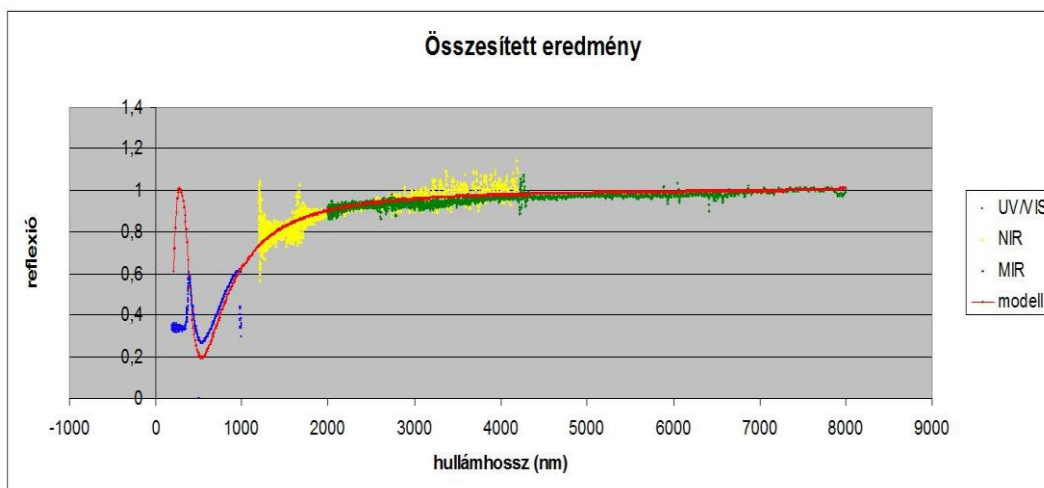
Miután a SiO_2 mintákra vonatkozó méréseink egyeztek a várakozással, elkezdtük a grafénnel ellátott mintákat vizsgálni. A grafénminták az előbbi Si lapokon helyezkedtek el, kissé vastagabb grafitdarabok környezetében. Ezek a “szennyezések” a felületen elszórtan, nyomokban voltak jelen, így az előbbi, SiO_2 -re vonatkozó mérést nem befolyásolták.

A grafén detektálásának bejáratott módszere a Raman-spektroszkópia. Az egyrétegű grafén Raman-spektruma ugyanis szembeutnő [22]. Két jellegzetes abszorpciós csúcsa van 1580 , illetve 2600 cm^{-1} közelében. Mindkettő egy-egy Lorentz-görbe. Többrétegű grafén esetén ezek a csúcsok több Lorentz-görbéből adódnak össze.

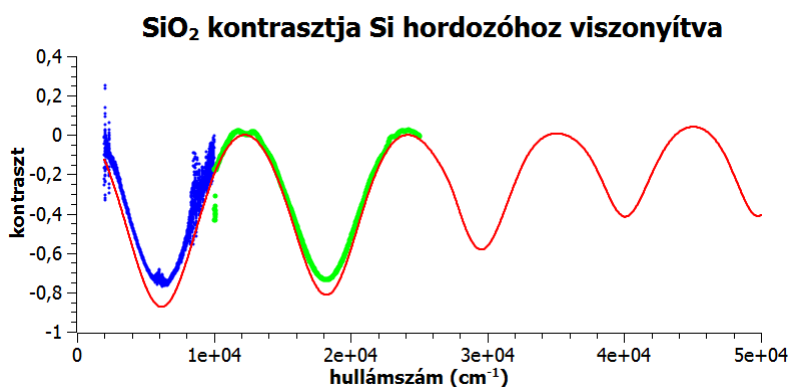
A hordozókon sikerült grafénmintákat azonosítani. A műszer segítségével ezek helyét le is fényképeztük (itt 500x nagyítást is használhattunk). Ezek lineáris mérete $0.1 - 0.2 \text{ mm}$ körül van, ezzel túlságosan kicsinek bizonyultak a pontos spektrum felvételéhez.

3.3. Mérési eredmények

3.3.1. SiO₂ vékonyréteg vizsgálata infravörös és látható spektroszkópiával



3.4. ábra. Si hordozón lévő SiO₂ vékonyréteg reflexiós spektruma látható (kék), közeli infravörös (sárga), illetve közép infravörös (zöld) tartományban. A különböző tartományokban felvett spektrumokhoz különböző fényforrást alkalmaztunk. Az elméleti számítást pirossal ábrázoltuk. **A vékonyréteg vastagsága: $d = 82$ nm**

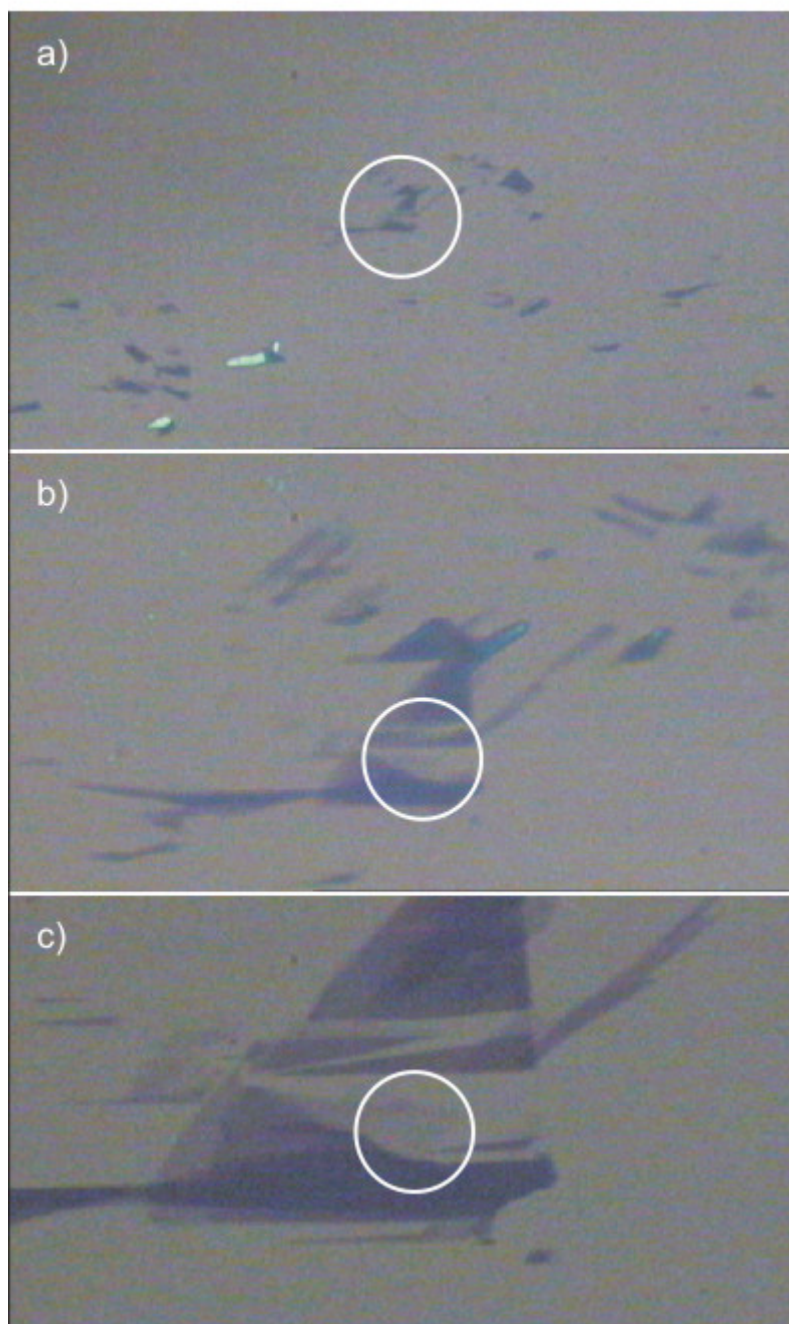


3.5. ábra. Si hordozón lévő SiO₂ vékonyréteg reflexiós spektruma látható (kék), közeli infravörös (sárga), illetve közép infravörös (zöld) tartományban. A különböző tartományokban felvett spektrumokhoz különböző fényforrást alkalmaztunk. Az elméleti számítást pirossal ábrázoltuk. **A vékonyréteg vastagsága: $d = 270$ nm**

3. Saját mérések

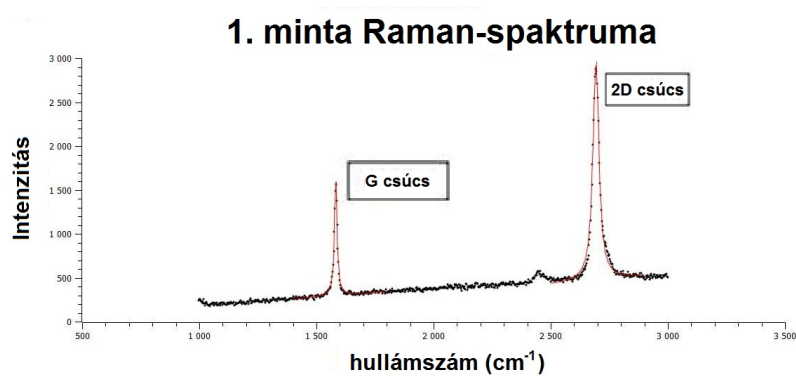
3.3.2. Grafénminták detektálása Raman-spektroszkópiával

Az "A" minta helye

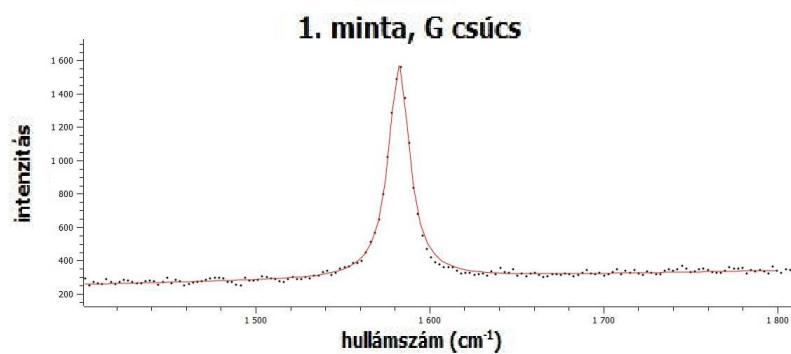


3.6. ábra. Az 1. számú grafénminta és környezete SiO₂ hordozón, különböző nagyítások mellett (a: 50x, b: 200x, c: 500x). A vékonyréteg vastagsága: $d = 270$ nm

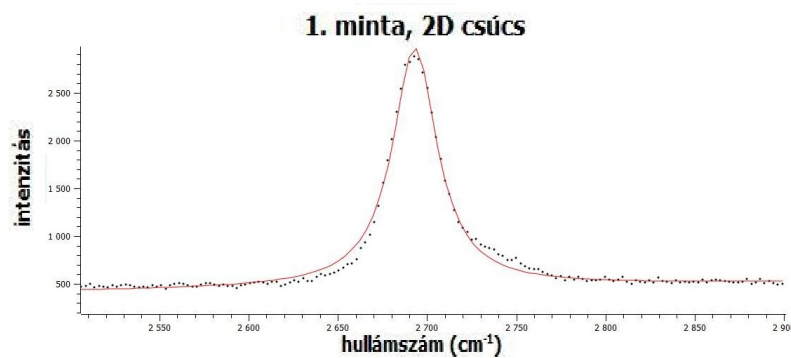
3. Saját mérések



3.7. ábra. Az 1. számú grafénminta Raman-spektruma. Az ábrán bal oldalt a G csúcs, jobb oldalt a 2D csúcs látható.

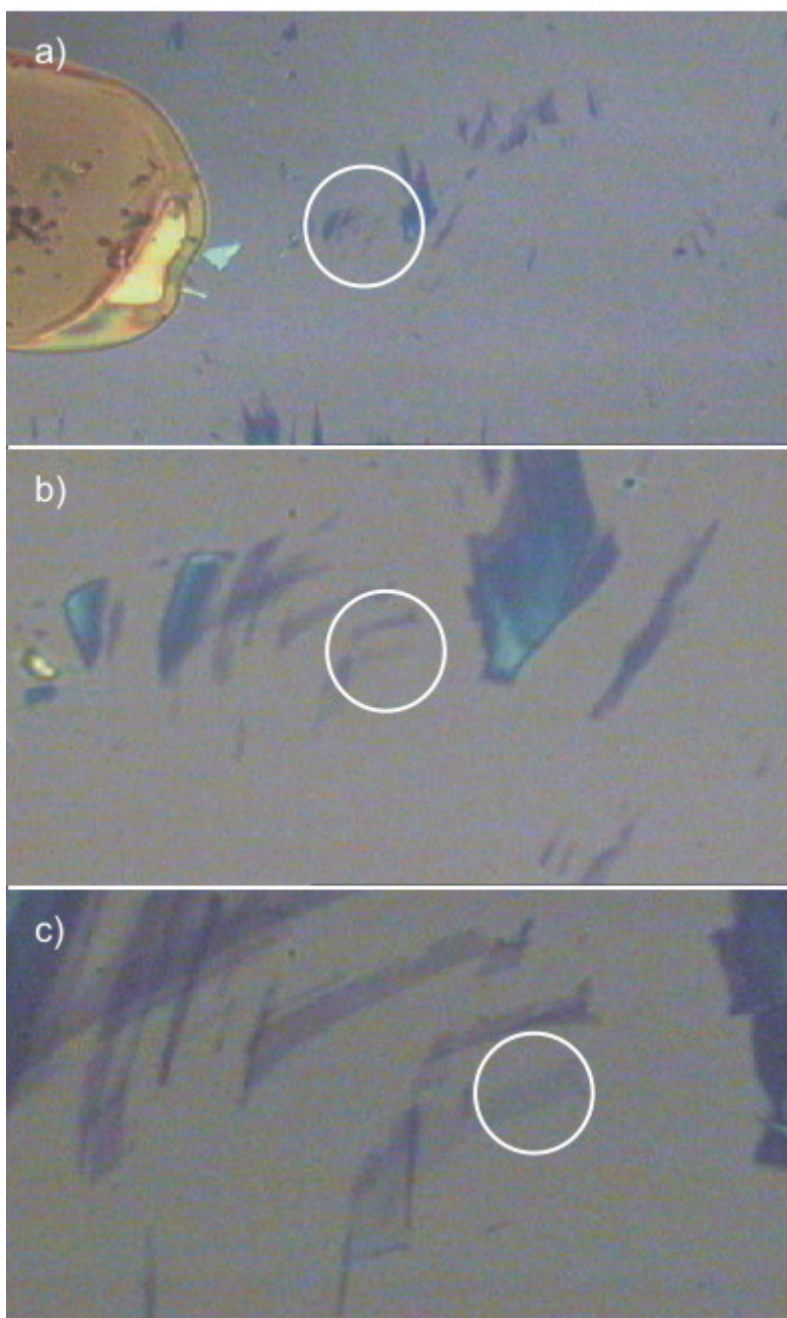


3.8. ábra. Az 1. számú grafénminta G csúcsa. A Lorentz-görbe jól illeszkedik.



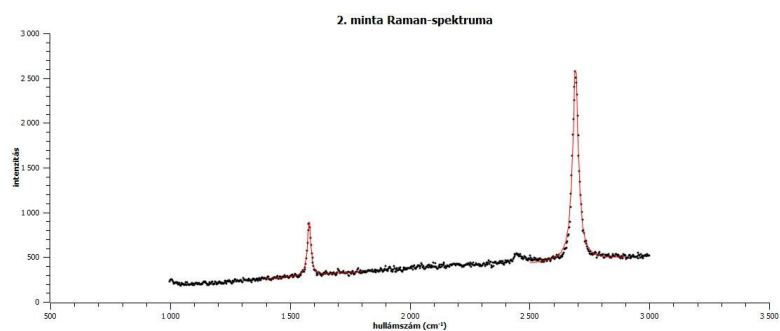
3.9. ábra. Az 1. számú grafénminta 2D csúcsa. A Lorentz-görbe jól illeszkedik.

A "B" minta helye

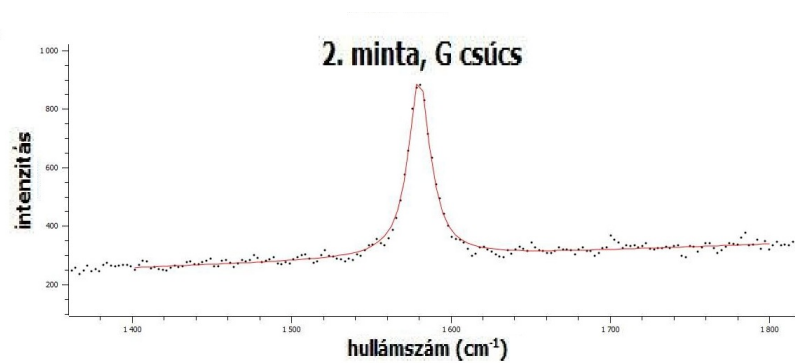


3.10. ábra. A 2. számú grafénminta és környezete SiO_2 hordozón, különböző nagyítások mellett (a: 50x, b: 200x, c: 500x). A vékonyréteg vastagsága: $d = 270 \text{ nm}$

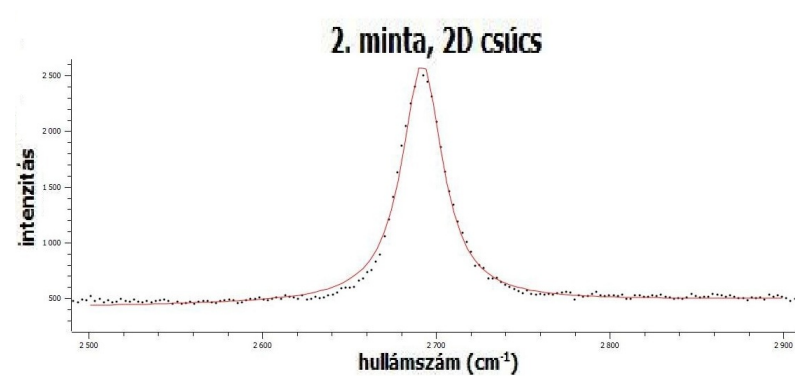
3. Saját mérések



3.11. ábra. A 2. számú grafénminta Raman-spektruma. Az ábrán bal oldalt a G csúcs, jobb oldalt a 2D csúcs látható.



3.12. ábra. A 2. számú grafénminta G csúcsa. A Lorentz-görbe jól illeszkedik.



3.13. ábra. A 2. számú grafénminta 2D csúcsa. A Lorentz-görbe jól illeszkedik.

4. Elméleti eredmények kiterjesztett paramétertartományban és kísérletileg nem vizsgált rendszerekre

4.0.3. Interferenciaképek, kontúrábrák

A számításokat a paraméterek széles skálájára végeztük. A következő kontúrábrák elsősorban kvalitatív képet adnak a rendszer viselkedéséről. Hátrányuk, hogy az ábrázolt mennyiség pontos nagysága egy adott pontban körülményesen olvasható le. Ezt azzal ellensúlyozzuk, hogy ahol mérési eredménnyel vetjük össze a modellt, ott természetesen egyszerű grafikonon ábrázoljuk a modellből adódó eredményt is.

Megjegyezzük, hogy az egyszerűség kedvéért innentől mindig a TE módust ábrázoljuk. A TM módusra vonatkozó ábrák teljesen analóg módon megkaphatók a programból. Merőleges beesés esetén a két módus egyébként is megegyezik.

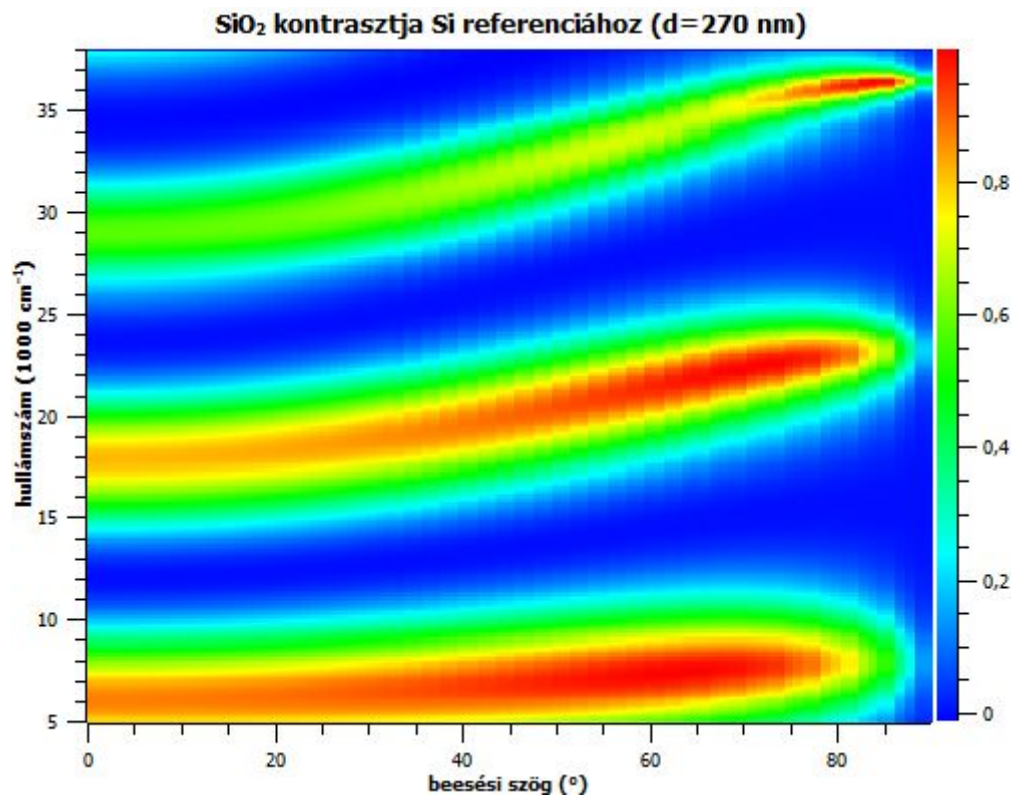
Elsőként érdemes megvizsgálni, hogyan alakul a SiO₂ vékonyréteg kontrasztja Si referenciához képest. A 4.1 ábrán 270 nm vastagságú SiO₂ vékonyréteg reflexióját hasonlítjuk össze a Si referenciával, a beeső fény hullámhosszának, illetve a megvilágítás szögének függvényében. Az ábrán jól látszik, hogy a maximális kontrasztú tartományok sávokban helyezkedik el. Ez jól összecseng a 2.2 képlettel, annyi módosítással, hogy a beesési szög miatt az optikai úthossz megváltozik:

$$x_k[cm^{-1}] = \frac{10^7}{\lambda_k} = \frac{10^7(2k+1)}{4dn \cos \theta_{bent}} \quad (4.1)$$

ahol x_k a reflexió minimumához tartozó (cm⁻¹-ben mért) hullámszám, θ_{bent} pedig a vékonyrétegen belüli terjedés szöge.

Érdemes azt is megfigyelni, hogy a sávokban a maximális kontraszt nem állandó, hanem a lapos szögek irányában lassan nő, maximuma van, majd gyorsan leesik.

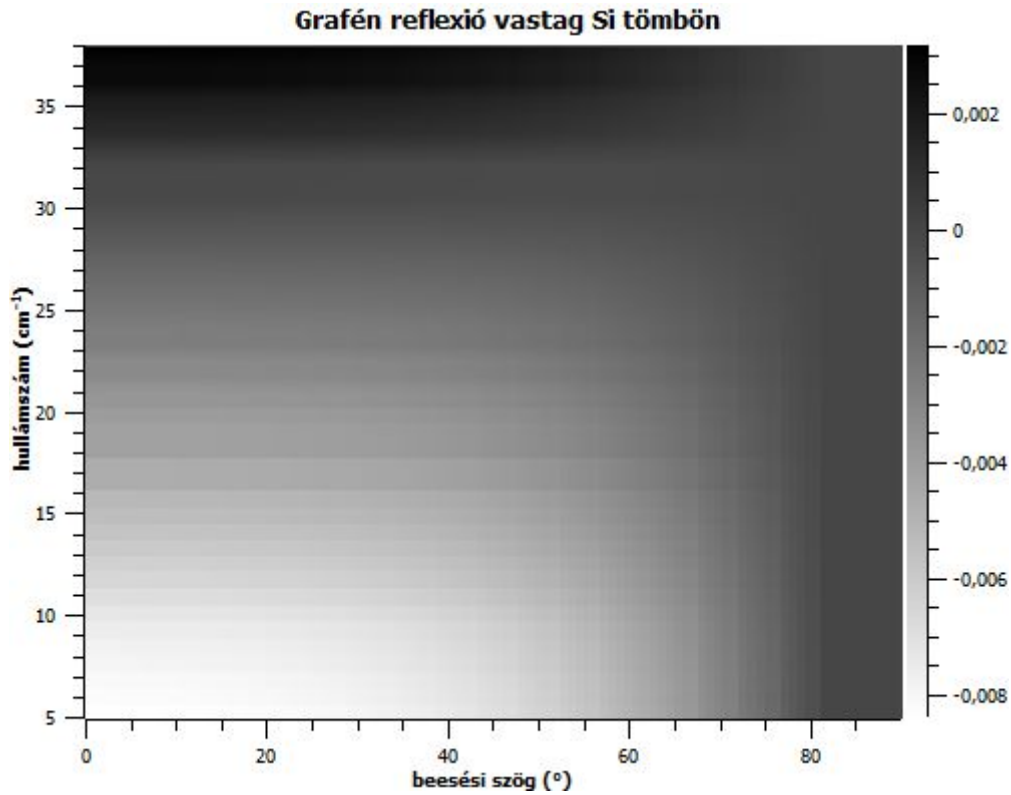
4. A szimuláció eredményei



4.1. ábra. SiO₂ vékonyréteg kontrasztja a Si hordozóhoz képest, a beesési szög és a hullámszám függvényében. A vékonyréteg vastagsága: $d = 270$ nm

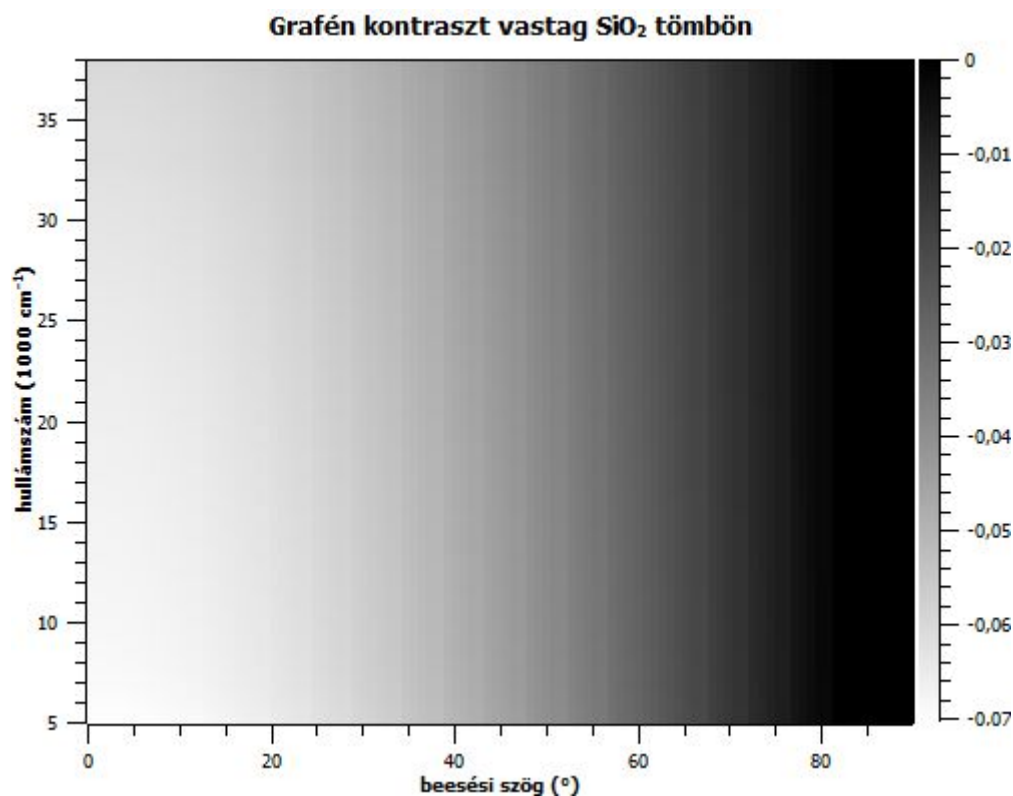
4. A szimuláció eredményei

Vizsgáljuk meg, mi történik, ha a grafénréteget egy egyszerű Si tömbre helyezzük. A 4.2 ábrán jól látszik, hogy a kontraszt igen csekély, kis hullámszámokra és merőleges beesésre magasabb, de még itt sem éri el az 1%-ot.



4.2. ábra. Si tömbre közvetlenül helyezett grafén monoréteg reflexiója a beesési szög és a hullámszám függvényében. A grafénnel borított terület kevésbé reflektál, mint a környező Si

4. A szimuláció eredményei

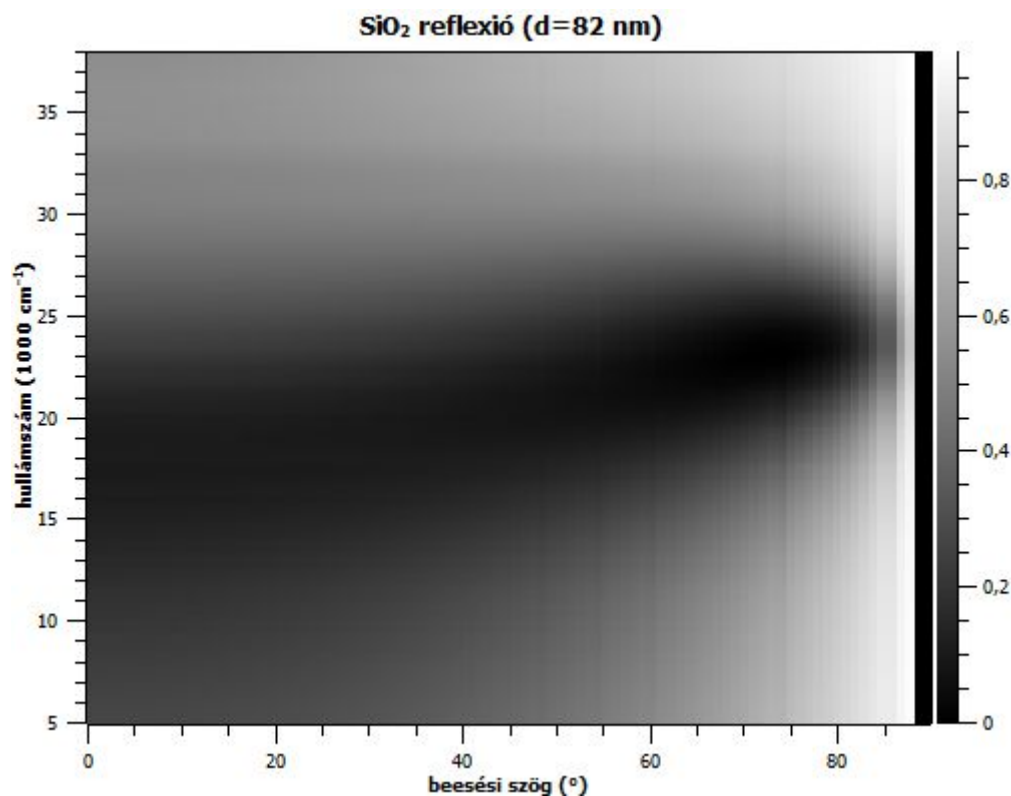


4.3. ábra. Vastag SiO₂ tömbre helyezett grafén egyréteg kontrasztja a beesési szög és a hullámszám függvényében. A kontraszt egy nagyságrenddel nagyobb, mint a tömör Si esetében

Felmerül a kérdés, hogy változik a helyzet, ha szigetelő SiO₂ tömbre helyezünk grafént. Ez látható a 4.3 ábrán. Az előzőnél jóval magasabb kontrasztot kapunk, amely azonban még mindig mindössze néhány százalék. Az ábráról leolvasható, hogy szintén merőlegesen érdemes világítani a mintát, azonban a kontraszt ezúttal kevésbé függ a sugárzás hullámhosszától.

A néhány százalékos eltérés már mérhető egy átlagos spektrométerrel. Azonban a hullámszám függvényében igen lassan változik a kontraszt: lényegében alapvonalat kell mérni. Technikai okokból jóval pontosabb, ha a spektrumnak valamilyen mintázata van, mert az amplitúdókat pontosabban lehet leolvasni.

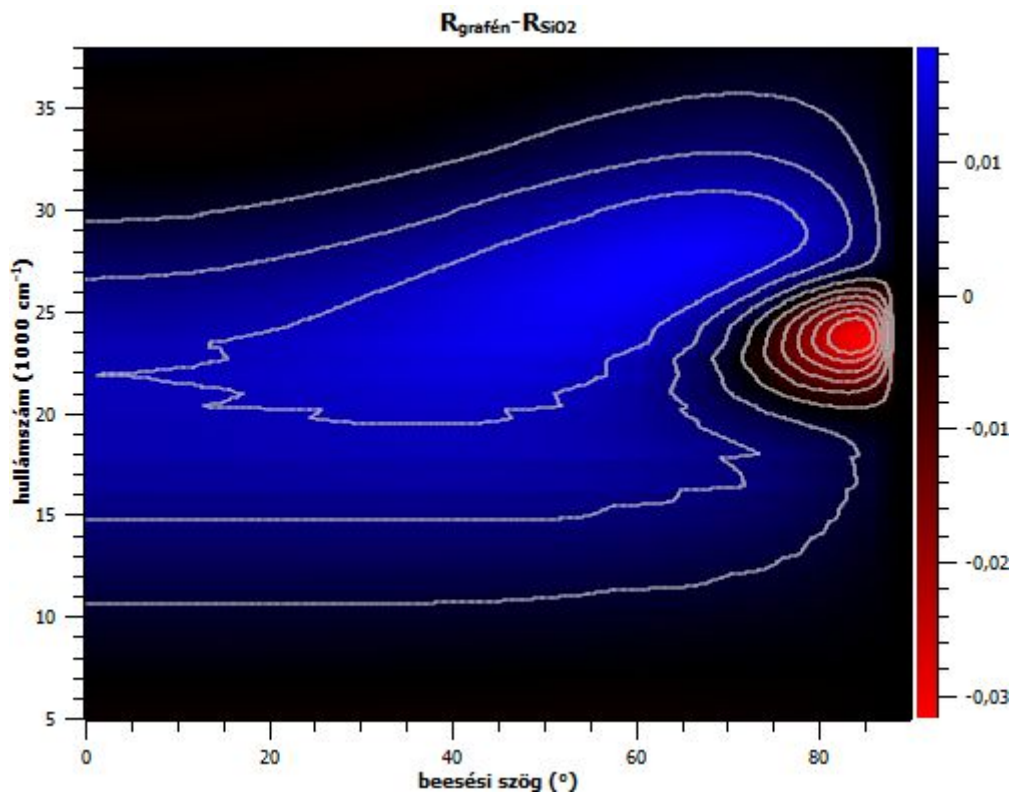
4. A szimuláció eredményei



4.4. ábra. $d = 82$ nm vastagságú SiO₂ réteg **reflexiója** Si hordozón. A reflexió 70° beesési szög és 22000 cm^{-1} hullámszám esetén 0-hoz közelít

Még mielőtt a vékonyréteges hordozóra helyezett grafén kontrasztját tárgyalnánk, érdemes egy pillantást vetni a SiO₂ vékonyréteg reflexiójára. A 4.4 ábrán látszik, hogy ennek egy adott hullámszámra és beesési szögre minimuma van, közelíti a 0-t. Mivel a grafén kontrasztjának számolásakor ezzel a mennyiséggel osztunk le, arra számítunk, hogy itt kiugró értéket kapunk. Ez azonban nem jelenti azt, hogy itt érdemes mérni, hiszen a gyakorlatban mindkét reflexiót külön-külön meg kell határozni, és ennek kis értéke rontja a pontosságot.

4. A szimuláció eredményei

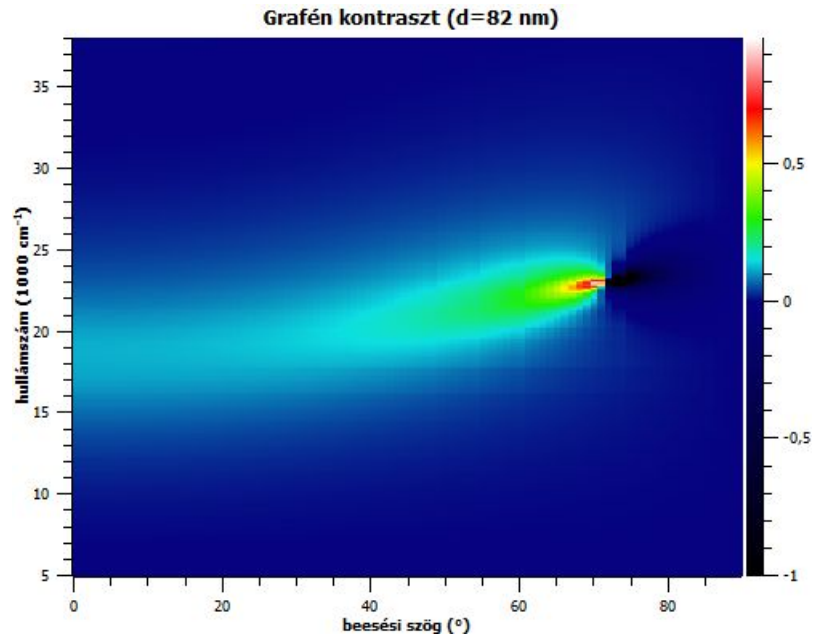


4.5. ábra. $d = 82 \text{ nm}$ SiO₂ vékonyrétegre helyezett grafén egyréteg és a SiO₂ reflexiójának különbsége. A grafén kontrasztja ebből úgy adódik, ha leosztunk a SiO₂ reflexiójával (ld. 4.4. ábra)

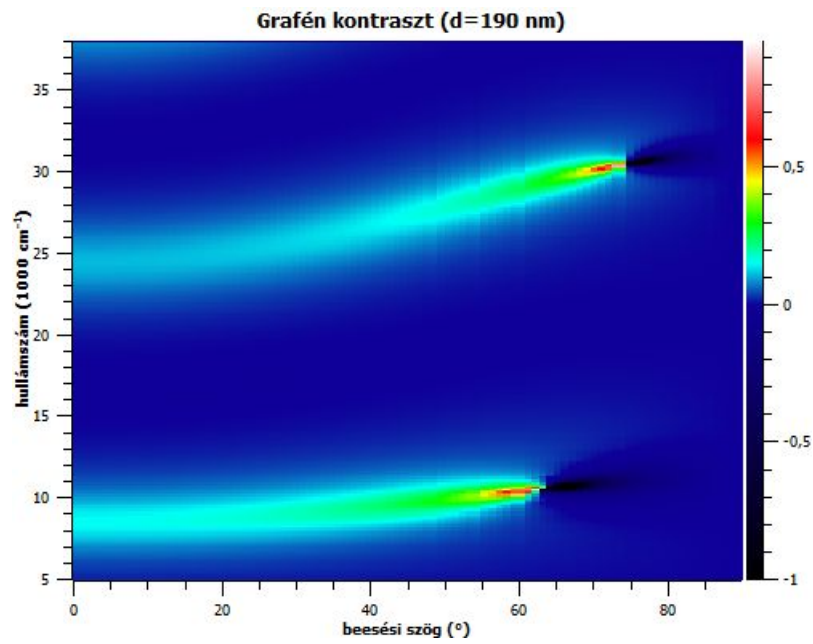
A 4.5 ábrán 82 nm vastagságú vékonyrétegre helyezett grafén reflexiójának és a grafén nélküli vékonyréteg reflexiójának különbsége látható. Azt érdemes megfigyelni, hogy a különbség sosem nagyobb 2–3%-nál. Lapos beesési szög mellett esetén egy tartományban a referencia erősebben reflektál, mint a grafénnel bevont minta.

A következő, a 4.6, a 4.7 és a 4.8 ábrák mutatják a SiO₂ vékonyrétegre helyezett grafén kontrasztját (a vékonyréteghez képest), rendre 82 , 190 és 270 nm rétegvastagságok esetén. Jól látható, hogy ahol a SiO₂ reflexiója kicsi, ott a kontraszt extrém értékeket vesz fel.

4. A szimuláció eredményei

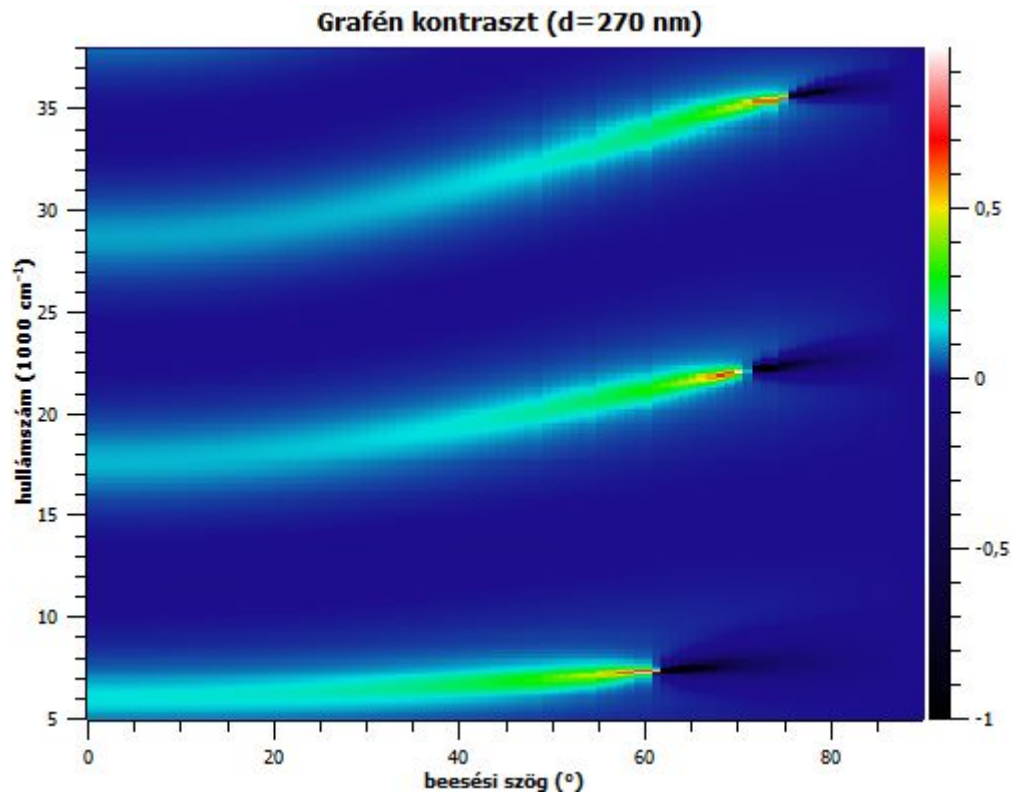


4.6. ábra. Grafén kontrasztja $d = 82$ nm vastagságú SiO₂ vékonyrétegen. A kontraszt a SiO₂ reflexiójának esése miatt ugrik meg



4.7. ábra. Grafén kontrasztja $d = 190$ nm vastagságú SiO₂ vékonyrétegen.

4. A szimuláció eredményei

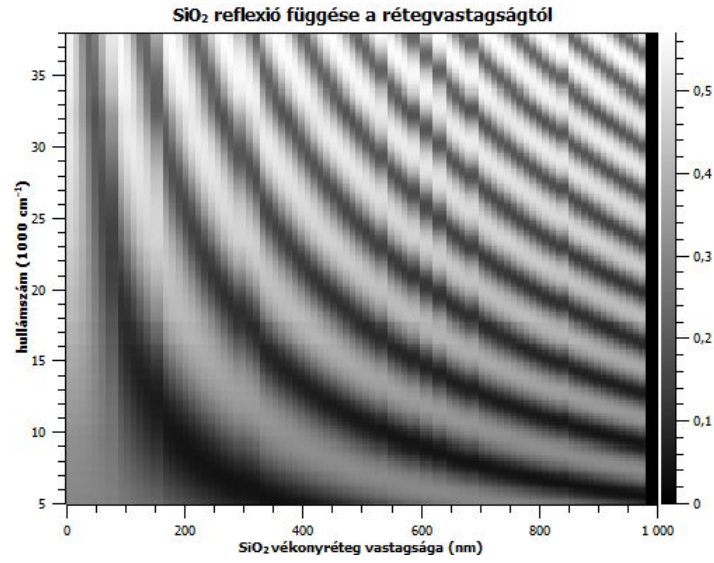


4.8. ábra. Grafén kontrasztja $d = 270$ nm vastagságú SiO_2 vékonyrétegen.

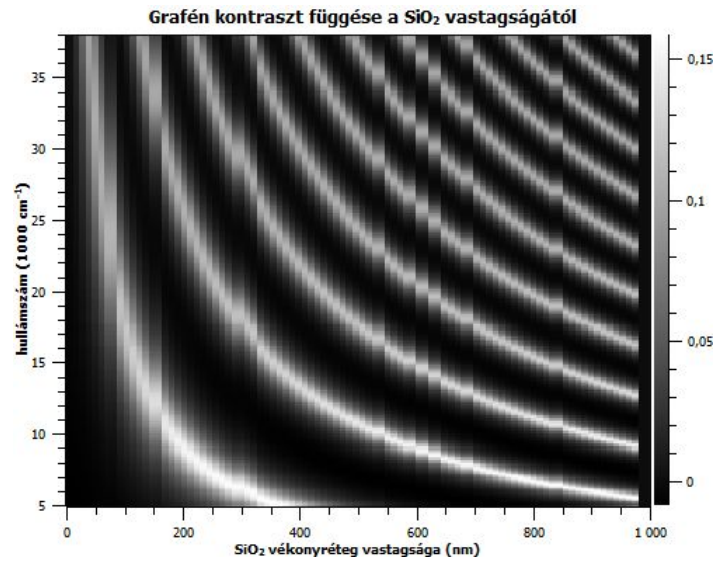
4.1. Függés a vékonyréteg vastagságától

Érdemes felvetni a kérdést, mi történik, ha változtatjuk a vékonyréteg vastagságát. Merőleges beesés esetén a 4.9 ábra mutatja a SiO_2 kontrasztját a Si referenciához viszonyítva, a 4.10 ábrán pedig a grafén SiO_2 -hoz viszonyított kontrasztja követhető nyomon.

4. A szimuláció eredményei



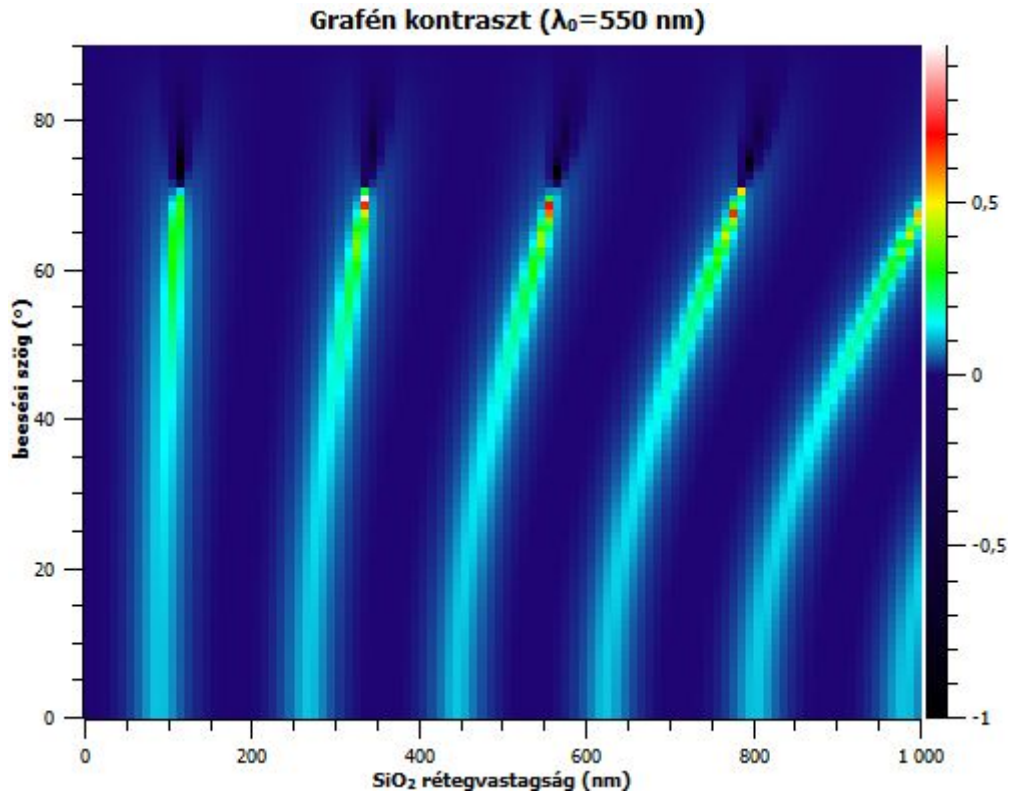
4.9. ábra. SiO₂ reflexiója Si referenciához viszonyítva, ha a vékonyréteg vastagságát (vízszintes tengely), illetve a beeső fény hullámszámát (függőleges tengely) változtatjuk.



4.10. ábra. grafén reflexiója SiO₂ referenciához viszonyítva, ha a SiO₂ vékonyréteg vastagságát, illetve a beeső fény hullámszámát változtatjuk.

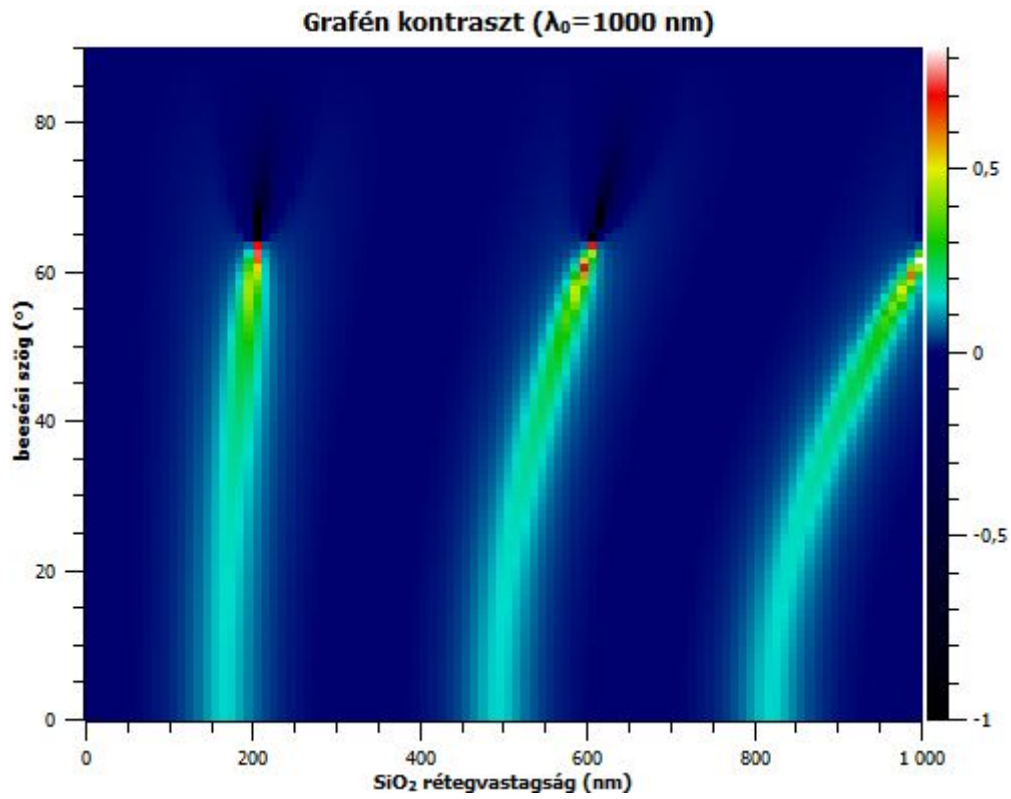
4. A szimuláció eredményei

Most nézük meg, hogy alakul a reflexió adott hullámhosszú megvilágítás esetén, ha a beesési szög mellett a vékonyréteg vastagságát változtatjuk! Ezt a 4.11 és a 4.12 ábrákon kísérhetjük figyelemmel, $\lambda_0 = 550$ nm, illetve $\lambda_0 = 1000$ nm hullámhosszak esetén.



4.11. ábra. Grafén kontrasztja állandó, $\lambda_0 = 550$ nm sugárzás esetén, ha a SiO_2 vékonyréteg vastagságát (vízszintes tengely), illetve a beesési szöget (függőleges tengely) változtatjuk.

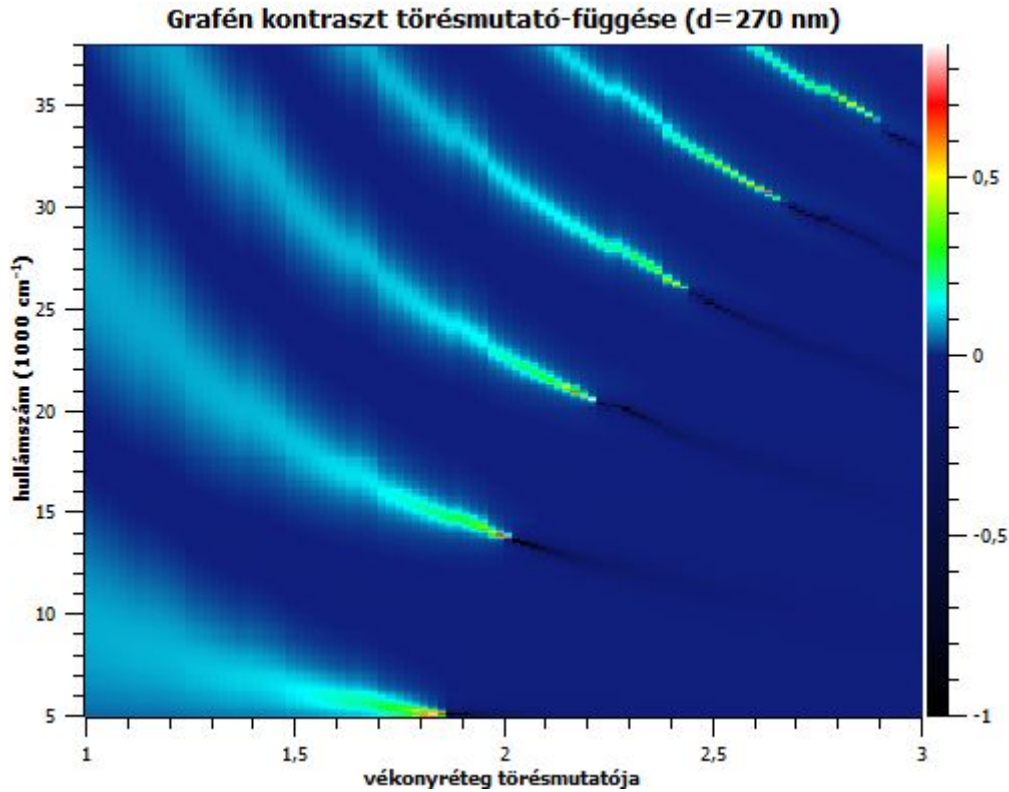
4. A szimuláció eredményei



4.12. ábra. Grafén kontrasztja állandó, $\lambda_0 = 1000$ nm sugárzás esetén, ha a SiO₂ vékonyréteg vastagságát, illetve a beesési szöget változtatjuk.

4.2. Függés a vékonyréteg törésmutatójától, idealizációk

Ha kissé elvonatkoztatunk a konkrét mérési összeállítástól, felvethetjük a kérdést, mi történik, ha a vékonyréteg törésmutatóját változtatjuk. $d = 270$ nm rétegvastagság esetén ezt a 4.13 ábra mutatja (a hordozó itt szintén Si)

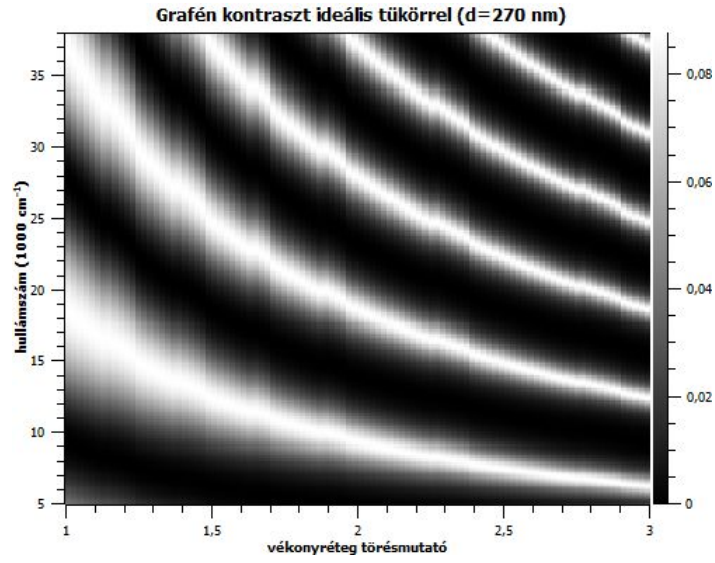


4.13. ábra. Grafén kontrasztja, ha az alatta lévő vékonyréteg törésmutatója (vízszintes tengely), illetve a beeső fény hullámszáma változik (függőleges tengely). A vékonyréteg vastagsága: $d = 270$ nm. A vékonyréteg alatt vastag Si tömböt feltételezünk.

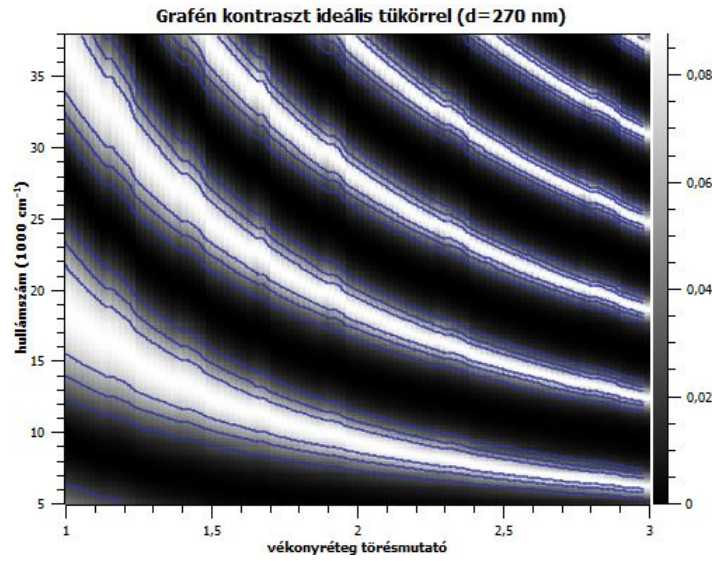
A Si hordozóhoz sem szükséges ragaszkodni. Érdekes megnézni, mi történik, ha a vékonyréteg alá ideális tükröt helyezünk (a Si közel áll ehhez). Ezt a következő, a 4.14 ábrán mutatjuk be.

Figyeljük meg, hogy ebben az esetben a sávokban konstans, 9% körüli a maximális kontraszt értéke. (ld. még 4.15 ábra)

4. A szimuláció eredményei



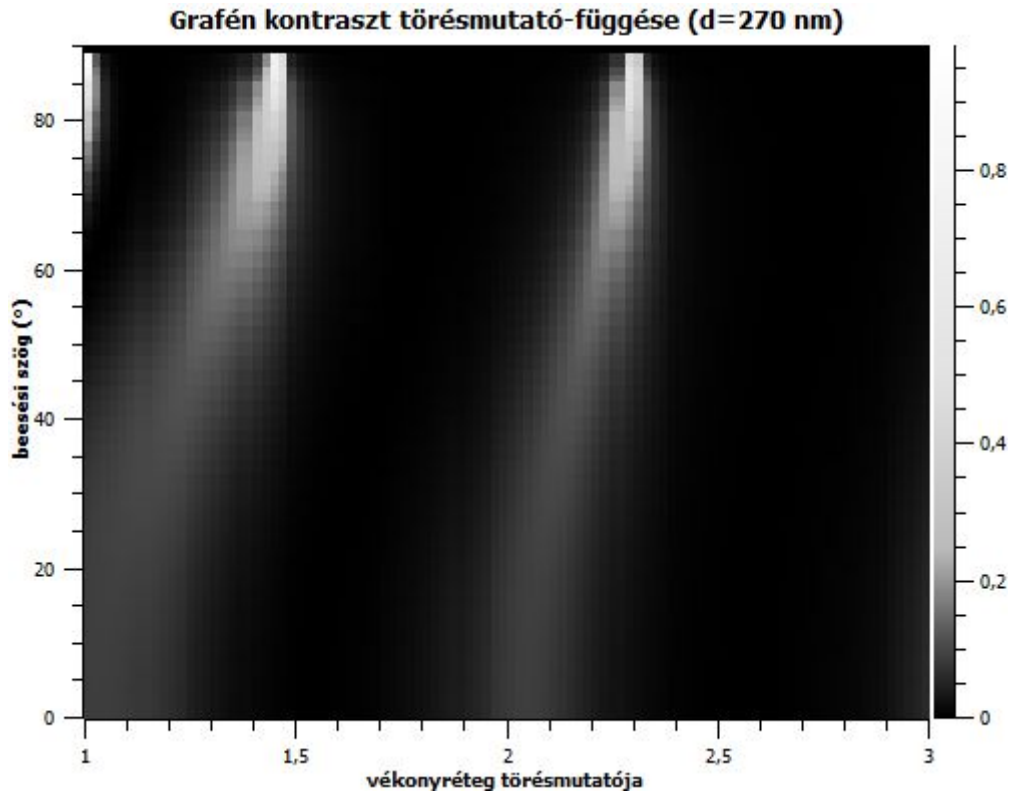
4.14. ábra. Grafén kontrasztja $d = 270$ nm vékonyrétegen, ha a vékonyréteg törésmutatója és a hullámszám változik. A vékonyréteg alatt ideális tükröt feltételezünk



4.15. ábra. Ugyanaz, mint az előző ábrán, ezúttal az azonos kontrasztú vonalak feltűntetésével. A magas kontrasztú sávokban a maximális érték független a törésmutatótól.

4. A szimuláció eredményei

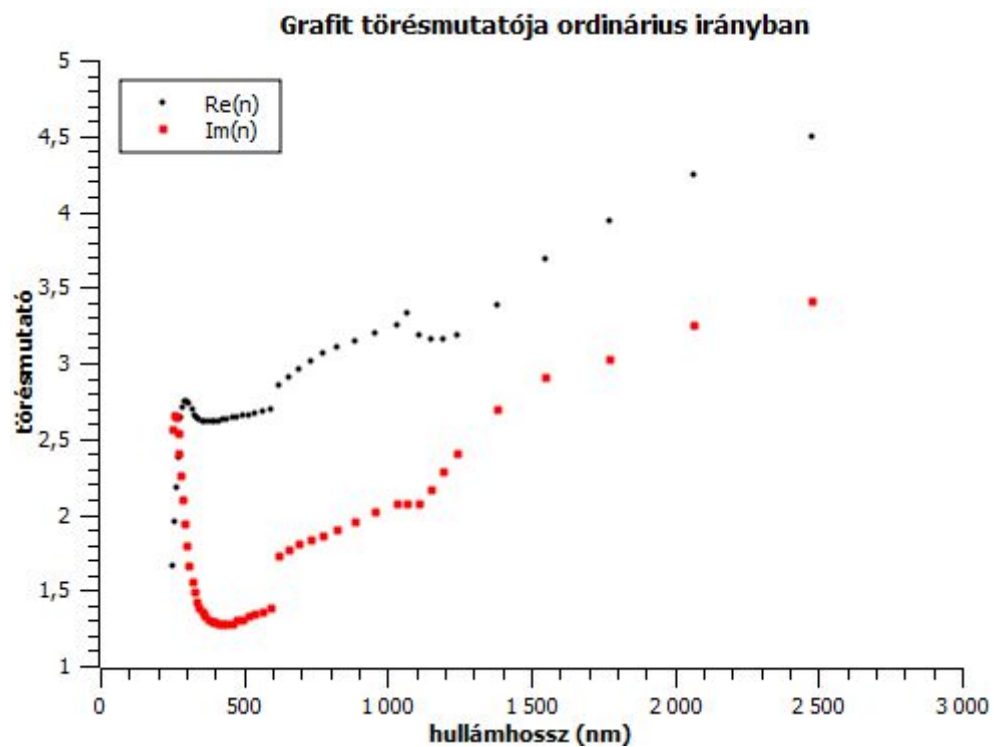
Végül vizsgáljuk meg, miként változik a reflexió adott ($\lambda_0 = 550$ nm) hullámhosszú sugárzás esetén, ha a törésmutató mellett a beeső fény szögét változtatjuk. Lapos beesés esetén a reflexió maximuma a nagyobb törésmutatók irányába tolódik el.



4.16. ábra. Grafén kontrasztja $\lambda_0 = 550$ nm beeső sugárzás esetén, ha az ideális tükrön elhelyezkedő, $d = 270$ nm vastag vékonyréteg törésmutatóját (vízszintes tengely), illetve a beesés szögét változtatjuk (függőleges tengely)

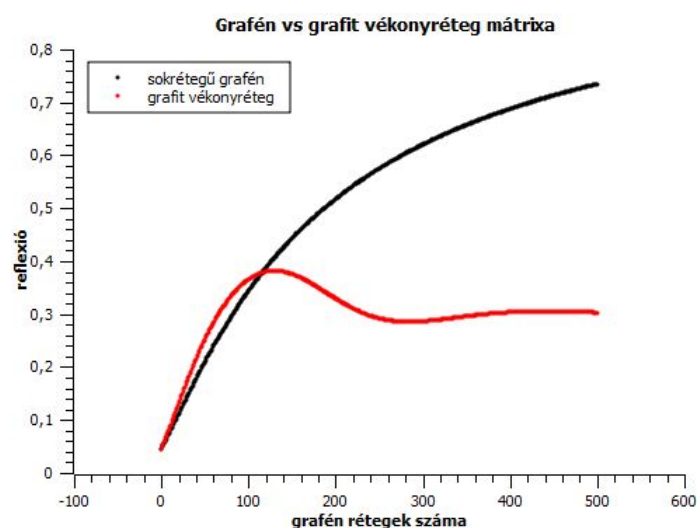
4.3. A grafén mátrixa és a grafít vékonyréteg mátrixa

Ezidáig a számításoknál (a 1.43) alatti transzfermátrixszal vettük figyelembe a grafént.

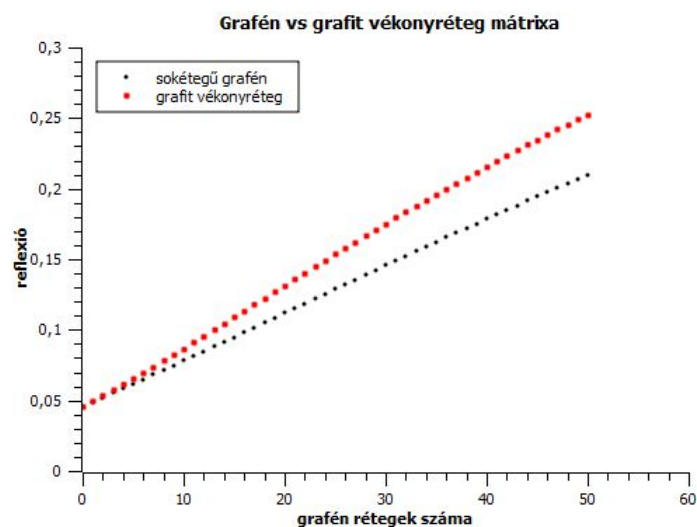


4.17. ábra. Grafít törésmutatója az atomsíkokra merőleges irányban. A valós részt feketével, a képzetes részt pirossal jelöltük.

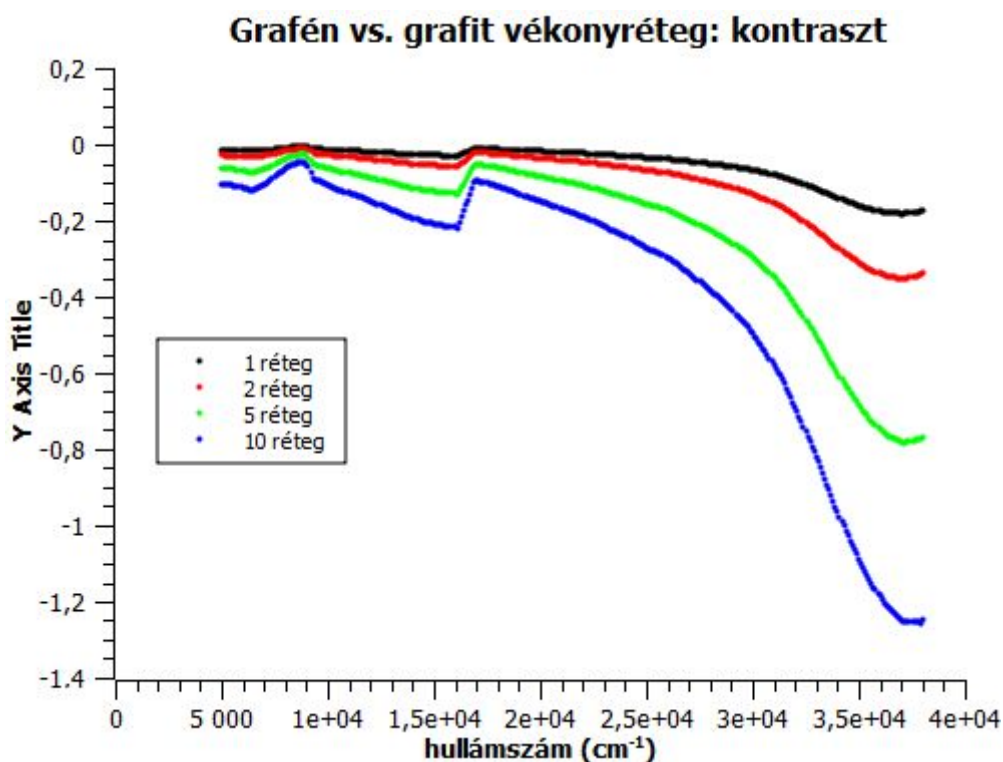
4. A szimuláció eredményei



4.18. ábra. Különböző modellek sok atomréteg esetén. A hordozó félvégtelen SiO_2 . Merőleges bevilágítás, a hullámhossz: $\lambda_0 = 550$ nm. A vízszintes tengelyen a grafénrétegek száma, a függőlegesen pedig a **reflexió** látható. Feketével a grafén transzfermátrixból számított értékeket, pirossal pedig a grafit vékonyréteg mátrixából számított értékeket ábrázoltuk.



4.19. ábra. Az előző ábra nagyobb felbontásban. Kevés grafénréteg esetén a modellek közelednek egymáshoz, de már egy réteg esetén sem fedik teljesen egymást.



4.20. ábra. Különböző rétegvastagságú grafén kontrasztjának összehasonlítása. Az ábrán a kontrasztot úgy értelmezzük, mintha a különböző transzfermátrixszal figyelembe vett grafénmintákat tennénk egymás mellé, és ezek reflexiójának különbségét néznénk. Fekete vonal: egyrétegű, piros vonal: kétrétegű, zöld vonal: ötrétegű, piros vonal: tízrétegű grafén. Látható, hogy főleg nagyobb frekvenciákon lényeges, hogy melyik módszerrel vesszük figyelembe a grafént.

5. Összefoglalás, konklúziók

Ebben a dolgozatban optikai vékonyréteg-rendszereket, és ezen belül is különösen a grafént tartalmazó összeállításokat vizsgáltuk.

Az első fejezetben ismertettük a szögben beeső fény leírására is alkalmas transzfermátrix-módszert. Levezettük a néhányrétegű grafén 1.43 transzfermátrixát. A második fejezetben előzetes megfontolásokat tettünk a vékonyrétegek reflexiós spektrumával kapcsolatban, majd a számításból adódó eredményt összevetettük *Blake et al.* [18] korábbi méréseivel. A harmadik fejezetben saját méréseinket ismertettük. Si hordozóra helyezett SiO₂ vékonyrétegen Raman-spektroszkópiával azonosítottunk grafénmintákat. Infravörös és látható spektroszkópiával vizsgáltuk a modell pontosságát SiO₂ vékonyréteg esetén. A mérési adatok jó egyezést mutatnak az elméleti várakozással. A negyedik fejezetben közöltük az elméleti számítások eredményeit a kísérletileg nem vizsgált tartományokban. Meghatároztuk grafénnel ellátott vékonyrétegek reflexiós spektrumát szögben történő beesés esetén és a SiO₂ réteg vastagságának függvényében. Határesetként megvizsgáltuk a félvégtelen Si, illetve SiO₂ tömbre helyezett grafén spektrumát is. Tanulmányoztuk a vékonyréteg törésmutatójától való függést. Megvizsgáltuk a Si helyett ideális tükörre helyezett SiO₂ vékonyréteg, illetve az erre alkalmazott grafén reflexióját. Végül megvizsgáltuk a közeghatárként figyelembe vett grafén, illetve a megfelelő vastagságú grafit vékonyréteg spektrumra kifejtett hatása közti eltérést különböző rétegvastagságok esetén.

Konklúzióink a következők:

- A transzfermátrix-módszer egyszerű eljárást ad a grafént tartalmazó vékonyrétegek reflexiójának meghatározására, segítségével meghatározhatók a maximális kontraszthoz tartozó hullámhosszak tetszőleges összeállítású rendszer esetén.
- Az eredmény azonban érzékenyen függ a rendszert alkotó anyagok törésmutatóitól. Az amorf szilícium törésmutatója jelentősen eltér a szilícium egykristályétól. Egy polikristályos minta törésmutatója a kettő közt bármi lehet. A szakirodalomban [23] sajnos hiányosan és esetenként kissé inkonzisztensen szerepel a törésmutatók frekvenciafüggése. Ezért is érdemes méréssel meghatározni a grafén szubsztrátjának paramétereit.
- A SiO₂ vékonyrétegre vonatkozó spektroszkópiai mérések jól illeszkednek az elméletre, attól eltekintve, hogy az elméletileg számított csúcsok amplitúdója kissé nagyobb a mérési eredménynél. Ezt annak tudjuk be, hogy a megvilágító fény a minta felületén szóródik; másrészt a minta törésmutatójának kis eltérése az irodalmi adattól is hozzájárulhat ehhez.
- Grafénmintákat Raman-spektroszkópiával tudtunk azonosítani. A grafén reflexiós spektrumának mérése még várat magára, további vizsgálataink tárgyát képezi.

5. Összefoglalás, konklúziók

- Megmutattuk, hogy a grafént azért célszerű egy szigetelő vékonyréteg tetején detektálni, mert egyrészt szigetelő felületén sokkal nagyobb a kontrasztja, másrészt vékonyréteg esetén az interferencia jóvoltából a reflexiós spektrum csúcsai nagyobb kontrasztúak lesznek, mint ha a szigetelő tömbre tennénk a grafént. Harmadrészt, az interferencia-hullámok révén maga a spektrum is könnyebben mérhető, mintha az alapvonalat kellene mérni.
- A reflexió minimumai és ezzel a kontraszt maximumai a hullámszámban lineárisan követik egymást. A maximumokhoz tartozó hullámszám nemcsak a vékonyréteg vastagságának növelésével, hanem törésmutatójának növelésével is csökkenthető. Ha adott mintánk van, és ezt adott hullámhossz-tartományban szeretnénk vizsgálni, itt a magas kontraszt beállítása még megvalósítható lehet a minta adott szögben való megdöntésével.
- Kevés grafénréteg (<10) esetén úgy gondoljuk, vezető közeghatárként, efölött viszont grafit vékonyréteggént célszerű figyelembe venni a többretegű grafént. A kontraszt függése a rétegek számától szintén egy későbbi mérés tárgya lesz.

A. A számításokat végző szoftver

A saját készítésű szoftver előnye, hogy a program igen gyorsan számol, mégis egyszerűen átalakítható a problémának megfelelően. A C++ előnyeit kihasználva létrehoztunk egy mátrix osztályt, amely nyelvi szinten kezeli a komplex elemű mátrixok összeadását és szorzását. Ezután a transzfermátrixokat már csak definiálni kell, majd összeszorozni őket az előző pontokban leírtaknak megfelelően.

A Matrix osztály deklarációja a következő:

```
class Matrix
{
    int i; // sorok száma
    int j; // oszlopok száma
    std::vector<std::vector<complex>> contents;

public:
    Matrix();
    Matrix(int i_in, int j_in);
    Matrix(std::vector<std::vector<complex>>);

    //Operátorok túlterhelése: ezek függvények deklarációi
    Matrix operator+(Matrix); //mátrixok összeadása
    Matrix operator-(Matrix); //kivonás
    Matrix operator*(complex); //szorzás skalárral
    Matrix operator*(Matrix); //mátrixok szorzása
    Matrix operator/(complex); // osztás skalárral

    complex get(int i, int j) {return contents[i][j];}
    //így lehet lekérdezni a mátrix egy elemét
    void set(int i, int j, complex v) {contents[i][j]=v;}
    // így lehet megváltoztatni egy elemet

    //sorok/oszlopok számának lekérdezése:
    int row() {return i;}
    int column() {return j;}
};
```

Ennek segítségével a mátrixokat változóknak tárolhatjuk. A változóknak praktikusán függvényhívással adhatunk értéket. Így például a szabad terjedés mátrixának definíciója:

A. A számításokat végző szoftver

```
//L: a réteg vastagsága
//lambda: a sugárzás hullámhossza
//n: a közeg törésmutatója
//costheta: theta a hullámvektor és a határokra állított merőleges
//által bezárt szög; costheta ennek koszinusza
Matrix Free(long double L, long double lambda, complex n,
             complex costheta)
{
    std::vector<std::vector<complex>> vec(2);
    vec[0].resize(2);
    vec[1].resize(2);

    vec[0][0]= exp(I*n*costheta*2*pi/lambda*L);
    vec[0][1]=0;
    vec[1][0]=0;
    vec[1][1]= exp(-I*n*costheta*2*pi/lambda*L);

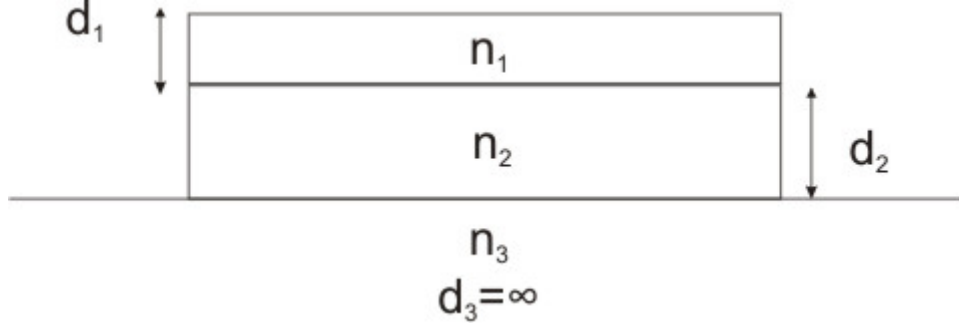
    return Matrix(vec);
}
```

A transzfermátrix kiszámítása egyszerűen abban áll, hogy az elemi mátrixokat összeszorozzuk:

```
Matrix Transfermatrix(char mode, short layer,
                      double lambda, double theta0)
{
    // A mátrixokhoz szükséges koszinuszok számolása
    // a Snellius-törvény alapján:
    long double costheta0= cos(theta0);
    complex costheta1= calculateCosTheta(costheta0,1,n_SiO2);
    complex costheta2= calculateCosTheta(costheta1,n_SiO2,n_Si);

    // C++ tudja, hogy a szorzás nem kommutatív, jó sorrendben
    // csinálja
    return Refraction(mode,n_SiO2,n_Si,costheta1,costheta2)*
           Free(SiO2_thickness,lambda,n_SiO2,costheta1)*
           Graphene(mode,layer,1,n_SiO2,costheta0,costheta1);
}
```

B. Háromrétegű rendszer reflexiója (merőleges beesés)



B.1. ábra. Három rétegből álló vékonyréteg-rendszer

A kiszámolandó transzermátrix:

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}^{(2,3)} \mathbf{F}^{(2)} \mathbf{M}^{(1,2)} \mathbf{F}^{(1)} \mathbf{M}^{(0,1)} \quad (\text{B.1})$$

ahol a közegethatárok $\mathbf{M}_{i,i+1}$ mátrixát a 1.13 képlet, a szabad terjedés $\mathbf{F}$ mátrixát pedig 1.16 definiálja. (Merőleges beesés esetén transzmisszió/reflexió szempontjából a két módus megegyezik.)

Így a következő szorzatot kell kiszámolnunk:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} C_1 & C_2 \\ C_2 & C_1 \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} e^{i\varphi_2} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 & B_2 \\ B_2 & B_1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{M}'} \underbrace{\begin{pmatrix} e^{i\varphi_1} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 & A_2 \\ A_2 & A_1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{M}''}$$

Itt A , B , C a réteghatárok mátrixainak elemei. Ezek a mátrixok a fő- és melléktengegyre is szimmetrikusak (az időtükrözési invarianciából adódó szimmetriák viszont csak akkor állnak fenn, ha nem disszipatív a közeg). Így például $A_1 = 1/n_1 + 1$, $A_2 = 1/n_1 - 1$, stb.

A szabad terjedés mátrixainál $\varphi = kL = 2\pi nL/\lambda_0$

Az összekapcsolt mátrixok alakilag ugyanazok, érdemes tehát először ezeket a szorzásokat elvégezni:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} C_1 & C_2 \\ C_2 & C_1 \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} e^{i\varphi_2} B_1 & e^{i\varphi_2} B_2 \\ e^{-i\varphi_2} B_2 & e^{-i\varphi_2} B_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\varphi_1} A_1 & e^{i\varphi_1} A_2 \\ e^{-i\varphi_1} A_2 & e^{-i\varphi_1} A_1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{M}'}$$

B. Háromrétegű rendszer reflexiója (merőleges beesés)

A kapoccsal jelölt szorzást elvégezve a kapott mátrix komponensei:

$$\begin{aligned}\mathbf{M}'_{11} &= e^{i(\varphi_2+\varphi_1)}B_1A_1 + e^{i(\varphi_2-\varphi_1)}B_2A_2 \\ \mathbf{M}'_{12} &= e^{i(\varphi_2+\varphi_1)}B_1A_2 + e^{i(\varphi_2-\varphi_1)}B_2A_1 \\ \mathbf{M}'_{21} &= e^{i(-\varphi_2+\varphi_1)}B_2A_1 + e^{-i(\varphi_2+\varphi_1)}B_1A_2 \\ \mathbf{M}'_{22} &= e^{i(-\varphi_2+\varphi_1)}B_2A_2 + e^{-i(\varphi_2+\varphi_1)}B_1A_1\end{aligned}\tag{B.2}$$

A reflexió:

$$\begin{aligned}R &= \left| \frac{M_{21}}{M_{22}} \right|^2 = \left| \frac{C_2M'_{11} + C_1M'_{21}}{C_2M'_{12} + C_1M'_{22}} \right|^2 = \\ &= \left| \frac{e^{i(\varphi_2+\varphi_1)}C_2B_1A_1 + e^{i(\varphi_2-\varphi_1)}C_2B_2A_2 + e^{i(-\varphi_2+\varphi_1)}C_1B_2A_1 + e^{-i(\varphi_2+\varphi_1)}C_1B_1A_2}{e^{i(\varphi_2+\varphi_1)}C_2B_1A_2 + e^{i(\varphi_2-\varphi_1)}C_2B_2A_1 + e^{i(-\varphi_2+\varphi_1)}C_1B_2A_2 + e^{-i(\varphi_2+\varphi_1)}C_1B_1A_1} \right|^2\end{aligned}$$

A számlálót és nevezőt is leosztva $A_1B_1C_1$ -el, valamint bevezetve az

$$\begin{aligned}r_1 &= \frac{A_2}{A_1} = \frac{1 - n_1}{1 + n_1} \\ r_2 &= \frac{B_2}{B_1} = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \\ r_3 &= \frac{C_2}{C_1} = \frac{n_2 - n_3}{n_2 + n_3}\end{aligned}$$

jelöléseket, az eredmény:

$$R = \left| \frac{e^{i(\varphi_2+\varphi_1)}r_3 + e^{i(\varphi_2-\varphi_1)}r_1r_2r_3 + e^{i(-\varphi_2+\varphi_1)}r_2 + e^{-i(\varphi_2+\varphi_1)}r_1}{e^{i(\varphi_2+\varphi_1)}r_1r_3 + e^{i(\varphi_2-\varphi_1)}r_2r_3 + e^{i(-\varphi_2+\varphi_1)}r_1r_2 + e^{-i(\varphi_2+\varphi_1)}} \right|^2\tag{B.3}$$

Ezt összevetve Blake et al. (1) képletével, láthatjuk, hogy megegyeznek, annyi eltéréssel, hogy az említett cikkben az összes fázis *ellentétes előjelű*. A két képlet tehát akkor egyezik meg, ha a cikkbeli változatba a törésmutatók képzetes részét a negatív előjelű konvenció szerint írjuk be! Ekkor ugyanis az abszolút érték alatti mennyiség éppen a komplex konjugáltja lesz a B.3 abszolút érték alatti mennyiségének.

Irodalomjegyzék

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
- [2] A. K. Geim, K. S. Novoselov, *Nature Materials* **6**: 183–191 (2007).
- [3] *IUPAC Gold Book*. International Union of Pure and Applied Chemistry.
- [4] P. R. Wallace, *Phys. Rev.* **71**, 622-634 (1947).
- [5] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, A. A. Firsov, *Nature* **438**, 197-200 (2005).
- [6] K. I. Bolotin, K. J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, P. Kim, H. L. Stormer, *Solid State Communications* **146**: 351-355 (2008).
- [7] J.-H. Chen, C. Jang, S. Xiao, M. Ishigami, M. S. Fuhrer, *Nature Nanotechnology* **3**, 206-209 (2008).
- [8] S. Chen, Q. Wu, C. Mishra, J. Kang, H. Zhang, K. Cho, W. Cai, A. A. Balandin, R. S. Ruoff, *Nature Materials* **11**: 203-207 (2012).
- [9] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysa, J. Hone, *Science* **321**, 5887:385-8 (2008).
- [10] J. H. Chen, M. Ishigami, D. R. Hines, C. Jang, M. S. Fuhrer, E.D. Williams, *Adv. Mater.*, **19**: 3623–3627 (2007).
- [11] L. A. Ponomarenko, F. Schedin, M. I. Katsnelson, R. Yang, E. W. Hill, K. S. Novoselov, A. K. Geim, *Science* **320**, 5874 : 356-358 (2008) .
- [12] Y.-M. Lin, C. Dimitrakopoulos, K. A. Jenkins, D. B. Farmer, H.-Y. Chiu, A. Grill, Ph. Avouris, *Science* **327**, 5966: 662 (2010).
- [13] G. Eda, G. Fanchini, M. Chhowalla, *Nature Nanotechnology* **3**, 270-274 (2008).
- [14] M. D. Stoller, S. Park, Y. Zhu, J. An, R. S. Ruoff, *Nano Letters* **8**, pp 3498–3502 (2008).
- [15] F. Schedin, A. K. Geim, S. V. Morozov, E. W. Hill, P. Blake, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, *Nature Materials* **6**, 652-655 (2007).
- [16] R. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres, A. K. Geim, *Science* **320**, 1308 (2008).

- [17] H S Skulason, P E Gaskell and T Szkopek, *Nanotechnology* **21**, 295709 (2010).
- [18] P. Blake, E. W. Hill, A. H. Castro Neto, K. S. Novoselov, D. Jiang, R. Yang, T. J. Booth, A. K. Geim, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 063124 (2007).
- [19] M. Born, E. Wolf, *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light*. Oxford, Pergamon Press, 1964.
- [20] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*. John Wiley & Sons, New York, 1995.
- [21] B. Sernelius előadásvázlata, <http://www.ifm.liu.se/courses/TFYY67/Lect13.pdf>
- [22] A. C. Ferrari, J. C. Meyer, V. Scardaci, C. Casiraghi, M. Lazzeri, F. Mauri, S. Piscanec, D. Jiang, K. S. Novoselov, S. Roth, A. K. Geim, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 187401 (2006).
- [23] E. D. Palik (szerk.): *Handbook of Optical Constants of Solids*. Academic Press, New York, 1991.