

УДК 535.012

Николай Никитич Сендер

канд. физ.-мат. наук, доц., зав. каф. математического анализа,
дифференциальных уравнений и их приложений
Брестского государственного университета имени А. С. Пушкина

Nikolai Sender

Candidate of Phys.-Math. Sciences, Assistant Professor, Head of Department
of Mathematical Analysis, Differential Equations and Their Applications
of the Brest State A. S. Pushkin University
e-mail: sender@brsu.brest.by

**ЭЛЛИПСОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ
ПОКАЗАТЕЛЕЙ ПРЕЛОМЛЕНИЯ И КОЭФФИЦИЕНТОВ ПОГЛОЩЕНИЯ
ОДНООСНЫХ ПОГЛОЩАЮЩИХ КРИСТАЛЛОВ
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОТРАЖЕНИЯ И ПРЕЛОМЛЕНИЯ СВЕТА
НА ГРАНИЦЕ ИЗОТРОПНАЯ СРЕДА – КРИСТАЛЛ**

Получены выражения для компонент матрицы отражения для границы изотропная среда и кристалл произвольной анизотропии. Конкретизируя вид векторов $\vec{e}_{1,2}$, $\vec{h}_{1,2}$, из них можно получить соответствующие выражения для границы одноосных, низкосимметричных и гиротропных кристаллов. Рассмотрено определение показателей преломления и коэффициентов поглощения одноосных поглощающих кристаллов. Предложенный метод определения оптических постоянных поглощающих одноосных кристаллов, основанный на разложении функций в ряд по малым величинам, дает возможность получить приближенные соотношения, точность которых не превышает погрешностей эксперимента. Достоинством метода является его простота, т. к. оптические постоянные рассчитываются подстановкой измеряемых эллипсометрических параметров в аналитические выражения, а не вычисляются сложными численными методами

Ключевые слова: отражение и преломление света, показатели преломления и поглощения, изотропные и поглощающие кристаллы.

**Ellipsometric Determination of Refraction Indicators and Absorption Coefficients
of Uniaxial Absorbing Crystals by Using Reflections and Refractions of Light
at the Boundary Isotropic Medium Crystal**

Expressions are obtained for the components of the reflection matrix for the boundary of an isotropic medium and a crystal of arbitrary anisotropy. Concretizing the type of vectors $\vec{e}_{1,2}$, $\vec{h}_{1,2}$, it is possible to obtain from them appropriate expressions for the boundary of uniaxial, low-symmetric and gyrotropic crystals. The determination of refractive indices and absorption coefficients of uniaxial absorbing crystals is considered. The proposed method for determining the optical constants of absorbing uniaxial crystals, based on the decomposition of functions in a series of small quantities, makes it possible to obtain approximate ratios whose accuracy does not exceed the experimental errors. The merit of the method is its simplicity, since the optical constants are figured by substituting the measured ellipsometric parameters into analytical expressions, and are not calculated by complex numerical methods.

Key words: reflection and refraction of light, refraction and absorption indices, isotropic and absorbing crystals.

Введение

При решении большого класса задач, имеющих научное и практическое значение, широко используются такие константы, как показатели преломления n и коэффициенты поглощения δ кристаллов. Для прозрачных кристаллов методы определения n позволяют

найти их с высокой точностью. Эти методы основаны на прохождении света через кристалл и поэтому непригодны для кристаллов, обладающих сильным поглощением. Кроме того, они требуют приготовления из кристаллов призм, при этом возникают трудности, связанные с вырезанием их из кристалла и шлифовкой точно ориентированной призмы.

Эллипсометрический метод (будем иметь в виду эллипсометрический метод, основанный на отражении света) позволяет в принципе определять все оптические постоянные поглощающего кристалла.

Хорошо известно, что реальную физическую границу раздела двух сред можно считать плоскостью только в первом приближении. Этот факт подтверждается многими экспериментальными и теоретическими работами. Реальная граница раздела всегда представляет собой некоторый переходной слой, в котором оптические параметры граничащих сред изменяются непрерывно. Параметры переходного слоя зависят как от физических свойств самих сред, так и от метода подготовки поверхности раздела. Такой переходной слой может изменить условия отражения света и в конечном счете привести к ошибкам в определении оптических констант. Впервые его влияние на точность нахождения оптических постоянных рассмотрел Друде [1]. Было установлено, что переходной слой может существенно исказить найденные значения оптических постоянных и что не всяким способом можно это устранить. В настоящее время для уменьшения толщины нарушенного слоя, возникающего при механической обработке, используют химическую, химико-механическую и электрохимическую полировку.

Некоторый переходной слой на любой границе раздела существует даже тогда, когда на поверхности отсутствуют дефекты полировки, окисные пленки и загрязнения. Образование этого слоя связано с отличием условий взаимодействия для поверхностных атомов по сравнению с атомами, хранящимися в объеме [2].

Таким образом, при определении оптических параметров реальных кристаллов в отраженном свете всегда приходится иметь в виду, что полученные результаты искажены влиянием переходного слоя. В то же время наличие его является очевидным основанием для использования приближенных соотношений.

Следует подчеркнуть, что такой подход почему-то не получил развития, исключая случай тонкой изотропной пленки на подложке [3]. Отметим, что Федоров [4], развивая метод малых углов для определения показателей преломления n кристаллов, широко использовал приближенные соотношения. Теоретически им были предложены подходы для нахождения n как одноосных, так и низкосимметричных кристаллов в случае общей ориентации кристаллографических осей, основанные на использовании малости анизотропии и малых углов падения.

Однако при малой анизотропии отношение недиагональных элементов матрицы отражения r_{sp}/r_{ps} , измерение которого положено в основу развитого им подхода, дает очень низкую точность определения n . Поэтому предложенный им подход практически не может быть использован.

Наличие переходного слоя на поверхности кристалла приводит к погрешности определения оптических постоянных порядка 10^{-3} . Такова и величина погрешностей при обычной точности определения поляризационных углов $\pm 1'$. Оба этих факта положены в основу развиваемого в этой статье подхода, базирующегося на использовании приближенных формул. При таком подходе оптические постоянные вычисляются непосредственно по формулам подстановкой в них измеряемых эллипсометрических параметров. Этим устраняются многие трудности, связанные с решением обратной задачи, причем без потери точности.

Отражение и преломление света на границе изотропная среда – кристалл

Получим выражения для компонентов матрицы отражения R , которая в общем случае имеет вид:

$$R = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} \\ r_{21} & r_{22} \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Пусть волна с вектором рефракции $\vec{m} = n\vec{n}$ (n – показатель преломления среды из которой падает волна, $\vec{n}$ – волновая нормаль) падает из изотропной среды на кристалл. В результате получаем отраженную волну с вектором рефракции $\vec{m}'$ и две преломленные с векторами рефракции $\vec{m}_1$ и $\vec{m}_2$ (рисунок 1).

Разложим векторы поля падающей волны $\vec{E}$ и $\vec{H}$ и отраженной $\vec{E}'$ и $\vec{H}'$ на составляющие [4]:

$$\vec{E} = A\vec{a} + B[\vec{n}\vec{a}], \vec{H} = A[\vec{m}\vec{a}] - B[\vec{n}\vec{a}], \quad (2)$$

$$\vec{E}' = A'\vec{a} + B'[\vec{n}'\vec{a}], \vec{H}' = A'[\vec{m}'\vec{a}] - B'[\vec{n}'\vec{a}],$$

где, $\vec{q}$ – единичный вектор, перпендикулярный к плоскости границы, $\vec{a} = [\vec{m}\vec{q}]$ (перпендикулярен плоскости падения), $\vec{b} = [\vec{q}\vec{a}]$ (лежит в плоскости падения) (рисунок 1).

Векторы полей преломленных волн 1 и 2 имеют вид:

$$\vec{E}_1 = A_1\vec{e}_1, \vec{H}_1 = A_1\vec{h}_1, \quad (3)$$

$$\vec{E}_2 = A_2\vec{e}_2, \vec{H}_2 = A_2\vec{h}_2,$$

где $\vec{e}_1, \vec{e}_2$ – векторы (не обязательно единичные), определяющие поляризацию электрического поля преломленных волн в кристалле, $\vec{h}_1, \vec{h}_2$ – соответствующие векторы магнитного поля.

Не конкретизируя векторы $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{h}_1$ и $\vec{h}_2$, найдем величины A', B', A_1 и A_2 , определяющие амплитуды отраженной и преломленной волн, через амплитуды A и B (A и B считаются заданными) падающей волны. Для этого составим систему граничных условий, которая в проекции на векторы $\vec{a}$ и $\vec{b}$ имеет вид:

$$\begin{cases} A + A' = A_1a_1 + A_2a_2 \\ \eta(A - A') = A_1d_1 + A_2d_2 \\ \eta/n(B + B') = A_1b_1 + A_2b_2 \\ -n(B + B') = A_1c_1 + A_2c_2 \end{cases}, \quad (4)$$

где $a_{1,2} = \vec{e}_{1,2}\vec{a}$, $b_{1,2} = \vec{e}_{1,2}\vec{b}$, $c_{1,2} = \vec{h}_{1,2}\vec{a}$, $d_{1,2} = \vec{h}_{1,2}\vec{b}$, $\eta = n \cos \varphi$, φ – угол падения.

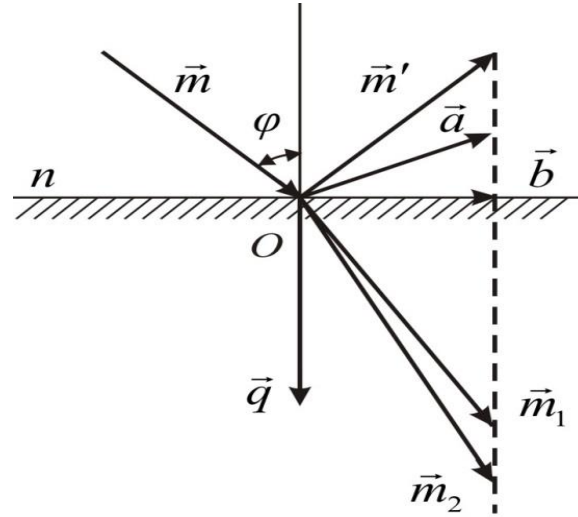


Рисунок 1. – Преломление и отражение света на границе изотропная среда – кристалл

Решая систему уравнений (4), получим

$$A_{1,2} = -(-1)^{1,2} \frac{2\eta(\beta_{2,1}A - n\alpha_{1,2}B)}{\alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1}, \quad (5)$$

$$A' = \frac{[\alpha_2\beta_1 - \alpha_1\beta_2 - \eta(a_2\beta_1 - a_1\beta_2)]A - 2n(a_1\alpha_2 - a_2\alpha_1)B}{\alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1}, \quad (6)$$

$$B' = \frac{[\eta(c_1\alpha_2 - c_2\alpha_1) + \varepsilon(b_1\alpha_2 - b_2\alpha_1)]B - 2\frac{\eta}{n}(c_1\beta_2 - c_2\beta_1)A}{(\alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1)}, \quad (7)$$

где $\alpha_{1,2} = \eta a_{1,2} + \alpha_{1,2}$, $\beta_{1,2} = \varepsilon b_{1,2} - \eta c_{1,2}$.

Решение граничной задачи удобнее представить в следующем виде. Введем обозначения

$$\alpha_{1,2}^{\pm} = \alpha_{1,2} \pm \eta a_{1,2}, \quad \beta_{1,2}^{\pm} = \varepsilon b_{1,2} \pm \eta c_{1,2}, \quad (8)$$

причем α^+ или β^+ получаются из α^- и β^- заменой $\eta \rightarrow -\eta$ и наоборот. Тогда

$$A_{1,2} = -(-1)^{1,2} \frac{2n\eta(\beta_{2,1}^- A - n\alpha_{1,2}^+ B)}{\alpha_1^+ \beta_2^- - \alpha_2^+ \beta_1^-}, \quad (9)$$

$$A' = \frac{(\alpha_2^- \beta_1^- - \alpha_1^- \beta_2^-)A + 2n\eta(\alpha_1 a_2 - \alpha_2 a_1)B}{\alpha_1^+ \beta_2^- - \alpha_2^+ \beta_1^-}, \quad (10)$$

$$B' = \frac{(\alpha_2^+ \beta_1^+ - \alpha_1^+ \beta_2^+)B + 2n\eta(b_1 c_2 - b_2 c_1)A}{\alpha_1^+ \beta_2^- - \alpha_2^+ \beta_1^-}. \quad (11)$$

Связь между амплитудами A и B падающей волны и амплитудами A' , B' отраженной волны запишем в виде

$$\begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} \\ r_{21} & r_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Тогда, сравнивая (12) с (10) и (11), имеем

$$\begin{aligned} r_{11} &= (\alpha_2^- \beta_1^- - \alpha_1^- \beta_2^-) / 3, \\ r_{22} &= (\alpha_2^+ \beta_1^+ - \alpha_1^+ \beta_2^+) / 3, \\ r_{12} &= 2n\eta (a_2 \alpha_1 - a_1 \alpha_2) / 3, \\ r_{21} &= 2n\eta (b_1 c_2 - b_2 c_1) / 3, \\ 3 &= \alpha_1^+ \beta_2^- - \alpha_2^+ \beta_1^- \end{aligned} \quad (13)$$

Мы получили выражения для компонент матрицы отражения для границы изотропная среда и кристалл произвольной анизотропии. Конкретизируя вид векторов $\vec{e}_{1,2}$, $\vec{h}_{1,2}$, из них можно получить соответствующие выражения для границы одноосных, низкосимметричных и гиротропных кристаллов.

Определение показателей преломления и коэффициентов поглощения одноосных поглощающих кристаллов

Основное уравнение отражательной эллипсометрии для изотропной среды при азимуте падающей волны 45° имеет вид [3]:

$$\rho = r_p / r_s = \operatorname{tg} \psi e^{i\Delta}, \quad (14)$$

где $\operatorname{tg} \psi = |r_p| / |r_s|$, $\Delta = \arg \frac{r_p}{r_s} = \arg r_p - \arg r_s$, $\Delta = \delta_p - \delta_s$, ρ – относительный коэффициент отражения, ψ и Δ – измеряемые эллипсометрические параметры (поляризационные углы). Зная r_p и r_s для конкретной отражающей системы, с помощью (14) устанавливается связь поляризационных углов ψ и Δ с оптическими постоянными, а также с углом падения света на систему (φ) и длиной волны (λ).

Вычисление значений ψ и Δ для конкретного вида отражающей системы при всех известных ее параметрах составляет содержание прямой задачи эллипсометрии.

В математическом плане это относительно простая задача – вычисление по известным формулам. Обратная задача эллипсометрии – определение всех или некоторых параметров отражающей системы по измеренным значениям ψ и Δ .

Эта задача существенно сложнее математически, т. к. она не имеет аналитического решения за исключением некоторых частных случаев [5]. Поэтому для ее решения привлекаются разнообразные численные методы. Если же удастся получить аналитические выражения, то неизвестные параметры находятся простой подстановкой в них измеряемых параметров ψ и Δ .

Оптические свойства поглощающих одноосных кристаллов описываются двумя комплексными значениями ε_0 и ε_e тензора диэлектрической проницаемости $\mathcal{E}$, которые являются функциями длины волны λ .

В общем случае ориентации среза кристалла относительно кристаллографических осей может быть неизвестно и положение оптической оси кристалла $\vec{c}$. Зададим его двумя углами (рисунок 2): углом θ между нормалью к границе $\vec{q}$ и $\vec{c}$ и углом γ , который составляет плоскость падения Π с плоскостью, содержащей $\vec{q}$ и $\vec{c}$. Полагаем $0 \leq \theta \leq \pi/2$, $-\pi/2 \leq \gamma \leq \pi/2$.

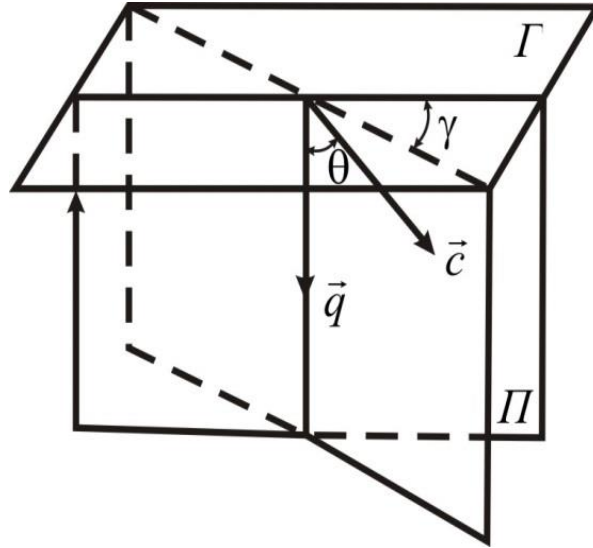


Рисунок 2. – Ориентация оптической оси $\vec{c}$ относительно плоскости падения Π и нормали $\vec{q}$ к границе кристалла

Выражения для матрицы отражения от произвольным образом ориентированного кристалла получены в [4; 6] в наших обозначениях их удобно представить в виде

$$r_{pp} = \left\{ \varepsilon_0 (\eta + \eta_e) (\varepsilon_0 \eta - \varepsilon \eta_0) l_1^2 + (\eta + \eta_0) \nu \left[(\varepsilon_0 \eta - \varepsilon \eta_e) \xi l_2 - (\varepsilon_0 \eta \eta_e - \varepsilon \eta_0^2) l_3 \right] \right\} 3^{-1},$$

$$r_{ps} = 2n\eta (\eta_e - \eta_0) (\xi l_2 + \eta_0 l_3) \varepsilon_0 l_1 3^{-1},$$

$$r_{sp} = 2n\eta (\eta_e - \eta_0) (\xi l_2 - \eta_0 l_3) \varepsilon_0 l_1 3^{-1},$$

$$r_{ss} = \left\{ \varepsilon_0 (\eta - \eta_e) (\varepsilon_0 \eta + \varepsilon \eta_0) l_1^2 + (\eta - \eta_0) \nu \left[(\varepsilon_0 \eta + \varepsilon \eta_e) \xi l_2 - (\varepsilon_0 \eta \eta_e + \varepsilon \eta_0^2) l_3 \right] \right\} 3^{-1}, \quad (15)$$

$$3 = \varepsilon_0 (\eta + \eta_e) (\varepsilon_0 \eta + \varepsilon \eta_0) l_1^2 + (\eta + \eta_0) \nu \left[(\varepsilon_0 \eta + \varepsilon \eta_e) \xi l_2 - (\varepsilon_0 \eta \eta_e + \varepsilon \eta_0^2) l_3 \right],$$

$$l_1 = \sin \theta \cdot \sin \gamma, \quad l_2 = \sin \theta \cdot \cos \gamma, \quad l_3 = \cos \theta,$$

$$\nu = \xi l_2 - \eta_0 l_3,$$

где $\xi = n \sin \varphi$, φ – угол падения, n – показатель преломления изотропной среды, из которой падает свет. Величины η_0 и η_e представляют собой нормальные составляющие векторов рефракции обыкновенной и необыкновенной волн ($\Delta \varepsilon = \varepsilon_e - \varepsilon_0$, $B = \varepsilon_0 + \Delta \varepsilon l_3^2$):

$$\eta_0 = \sqrt{\varepsilon_0 - \xi^2}, \quad \eta_e = \frac{-\xi \Delta \varepsilon l_3 + \sqrt{\varepsilon_0 [\varepsilon_e B - \xi^2 (\varepsilon_e - \Delta \varepsilon l_1^2)]}}{B}. \quad (16)$$

Как следует из (15), величины недиагональных элементов матрицы отражения различны, а после поворота кристалла на 180° вокруг нормали $\vec{Q}$ к его границе, при фиксированном ξ нельзя получить нового оборота измеряемых параметров. Выражения (15) значительно упрощаются в двух случаях: когда $\gamma = 0$ (главная плоскость) и $\gamma = \pi/2$.

Таким образом в общем случае ориентации одноосного поглощающего кристалла имеется шесть неизвестных параметров: два комплексных значения $\varepsilon_0 = \varepsilon' - i\varepsilon''$ и $\varepsilon_e' = \varepsilon_e' - i\varepsilon_e''$ и два угла θ и γ . Во многих случаях ориентация оптической оси относительно нормали к границе кристалла известна заранее. В таких случаях остается только сориентировать кристалл в эллипсомере, т. е. определить положение главной плоскости падения относительно плоскости падения, образованной осями плеч эллипсометра.

Если угол θ неизвестен, то он определяется при решении обратной задачи вместе с ε_0 и ε_e . Следовательно в общем случае она сводится к системе пяти нелинейных уравнений с пятью неизвестными: θ , ε_0 , ε_e . Обычно удобно использовать более чем пять измерений для упрощения обратной задачи или повышения точности рассчитываемых величин. Для определения θ можно получить простое уравнение, если, следуя Федорову [6], измерить поляризационное отношение (14) при трех азимутах χ падающего света и $\gamma \neq 0$; например, $\chi_1 = 0^\circ$ ($\rho = \rho_1$), $\chi_2 = 90^\circ$ ($\rho = \rho_2$), $\chi_3 = 45^\circ$ ($\rho = \rho_3$). Тогда дополнительное уравнение для определения угла θ получается в виде [7]

$$\operatorname{tg} \theta = \frac{\alpha n \sin \varphi}{\cos \gamma \sqrt{\varepsilon_0 - n^2 \sin^2 \varphi}}, \quad (17)$$

где $\alpha = \frac{1+\beta}{1-\beta}$, $\beta = \frac{\rho_3 - \rho_2}{\rho_3 - \rho_1} \rho_1$. Это уравнение должно решаться вместе с уравнением

для определения ε_0 . Однако в тех случаях, когда для исследования доступны две грани кристалла, углы γ и θ могут быть определены вне зависимости от нахождения величин ε_0 и ε_e . Для этого необходимо определить главные плоскости падения на двух гранях, а линия пересечения этих плоскостей и даст положение оптической оси. Угол θ можно найти непосредственно из измерений следующим образом [4].

Вначале ориентируют кристалл так, чтобы оптическая ось лежала в плоскости падения, а затем отыскивают углы падения φ_1 , φ_2 , при которых наступает затемнение для двух азимутов падения, например, $\varphi_1 = 30^\circ$, $\varphi_2 = 45^\circ$, тогда

$$\operatorname{tg}^2 \theta = \frac{\sin^2 \varphi_2 \cos^2 \gamma_1 - \sin^2 \varphi_1 \cos^2 \gamma^2}{\cos^2 \gamma_1 \cos^2 \gamma_2 (\sin^2 \varphi_1 - \sin^2 \varphi_2)}. \quad (18)$$

Методика определения главных значений ε_0 , ε_e тензора ε или главных показателей преломления $N_0 = N'_0 - iN''_0 = \sqrt{\varepsilon_0}$ и $N_e = N'_e - iN''_e = \sqrt{\varepsilon_e}$

Рассмотрим методику определения главных значений $\varepsilon_0, \varepsilon_e$ тензора ε или главных показателей преломления $N_0 = N'_0 - iN''_0 = \sqrt{\varepsilon_0}$ и $N_e = N'_e - iN''_e = \sqrt{\varepsilon_e}$. Малость анизотропии в видимом и ближнем ИК диапазонах частот позволяет воспользоваться приближенными соотношениями для коэффициентов отражения с целью упрощения решения обратной задачи. Такие попытки предпринимались в [4] и для определения оптических постоянных ромбических кристаллов [8], эллипсометрическое исследование которых имеют свои особенности. Что касается одноосных кристаллов, то для них значения N_0 и N_e довольно просто могут быть рассчитаны из приближенных соотношений и эллипсометрических измерений на одном срезе кристалла в широком интервале значений угла θ (угол между нормалью $\vec{Q}$ к границе раздела и направлением оптической оси $\vec{c}$). Эффективность использования приближенных соотношений обусловлена не только малостью анизотропии кристаллов, а также наличием переходного слоя на любой поверхности кристалла.

Получим исходные расчетные выражения. Для определения двух комплексных величин N_0 и $\Delta N = N_e - N_0$ воспользуемся измерением поляризационных углов ψ и Δ в главной плоскости падения ($\rho_{\parallel} = \operatorname{tg} \psi_{\parallel} e^{i\Delta_{\parallel}}$) и в плоскости, ортогональной к ней ($\rho_{\perp} = \operatorname{tg} \psi_{\perp} e^{i\Delta_{\perp}}$). Направление оптической оси $\vec{c}$ считаем произвольным. Ее положение можно найти, например, с помощью эллипсометрических измерений при двух азимутах падения.

Поскольку для изотропной среды $\rho_{\parallel} = \rho_{\perp}$, то величина $\rho_{\parallel} - \rho_{\perp}$ или

$$A = 1 - \frac{\rho_{\parallel}}{\rho_{\perp}} \quad (19)$$

является мерой анизотропии кристалла: $A = C\Delta N$, где C зависит от ориентации оптической оси, N_0 и угла падения. Систему уравнений, из которой находятся C и N_0 , получим, раскладывая в ряд по степеням ΔN , выражения для коэффициентов отражения $r_p^{\parallel, \perp}$ и $r_s^{\parallel, \perp}$ (индексы « p » и « s » соответствуют случаям, когда вектор электрического поля падающей волны лежит в плоскости падения или перпендикулярен ей). Получающиеся при этом выражения приведем с точностью до членов, пропорциональных ΔN^2 включительно.

На основании общих соотношений [4, 6], имеем:

а) для главной плоскости падения

$$\rho_{\parallel} = \frac{r_p^{\parallel}}{r_s^{\parallel}} = \frac{r_p}{r_s} \left\{ 1 + \Delta N \left[B - (a + Bp) \Delta N \right] \right\},$$

$$a = \frac{BN_0 \cos^2 \theta}{2\eta_0^2}, \quad p = \frac{(\eta_0 \eta + n^2 \cos^2 \theta) N_0}{(N_0^2 \eta + n^2 \eta_0) \eta_0}, \quad (20)$$

$$B = \frac{2n^2 N_0 \eta (N_0^2 \sin^2 \theta - \xi^2)}{(N_0^4 \eta^2 - n^4 \eta_0^2) \eta_0},$$

где $\eta_0 = \sqrt{\varepsilon_0 - \xi^2}$, $\xi = n \sin \varphi$, $\eta = n \cos \varphi$, φ – угол падения, n – показатель преломления среды, из которой падает волна, r_p и r_s – коэффициенты отражения для « p » и « s » составляющих волны от изотропной среды с показателем преломления N_0 :

$$\frac{r_p}{r_s} = \frac{\xi^2 - \eta \eta_0}{\xi^2 + \eta \eta_0} = \rho_0; \quad (21)$$

б) для плоскости падения, перпендикулярной главной плоскости падения (здесь для компактности оставлены члены пропорциональные ΔN^3 и ΔN^4),

$$\frac{1}{\rho_{\perp}} = \frac{r_s^{\perp}}{r_p^{\perp}} = \frac{r_s}{r_p} \left[1 + D \delta (1 + b \delta) \right]. \quad (22)$$

В этом выражении двулучепреломлению пропорциональна величина

$$\delta = \eta_e - \eta_0 = \frac{\eta_0}{N_0} (E + N_0 F \Delta N) \Delta N, \quad (23)$$

$$F = -\frac{2\eta_0^2 \cos^2 \theta + \xi^2}{2\eta_0^4} + \frac{3 \cos^4 \theta - \cos^2 \theta}{2N_0^2}, \quad E = -\cos^2 \theta + \frac{N_0^2}{\eta_0^2}.$$

В (22) коэффициенты D и b имеют вид:

$$D = \frac{2\eta N_0^2 \left[(\eta \xi \cos \theta - \eta \eta_0 \sin \theta)^2 - \xi^4 \sin^2 \theta \right]}{(N_0^4 \eta^2 - n^4 \eta_0^2) (N_0^2 \sin^2 \theta + \xi^2 \cos^2 \theta)}, \quad (24)$$

$$b = \frac{N_0^2 (N_0^2 \eta - n^2 \eta_0) \sin \theta - n^2 (\eta + \eta_0) \xi^2 \cos^2 \theta + n \eta \xi N_0^2 \sin 2\theta}{(N_0^2 \sin^2 \theta + \xi^2 \cos^2 \theta) (\eta + \eta_0) (N_0^2 \eta - n^2 \eta_0)}.$$

Для многих кристаллов достаточным является учет членов, пропорциональных ΔN . Разберем процедуру расчета величин N_0 и ΔN в этом приближении, когда выра-

жения (20) и (22) значительно упрощаются. Подразумевая далее под N_0 и ΔN относительные параметры $\frac{N_0}{n}$ и $\frac{\Delta N}{n}$ из (20) и (22), получаем систему двух уравнений, которая является основной для определения N_0 и ΔN :

$$\rho_{\parallel} = \rho_0(1 + B\Delta N), \quad \Delta N = \frac{A}{C}, \quad (25)$$

где $C = -B - ED \frac{\eta_0}{N_0}$.

Очевидно, что для нахождения ΔN в принятом приближении при вычислении коэффициента C достаточно ограничиться нулевым приближением для комплексного показателя преломления N_0 ; обозначим его $N_0^{(0)}$. Полагая в первом уравнении (25) $\Delta N = 0$, получаем

$$N_0^{(0)} = R \sin \varphi, \quad (26)$$

где $R = \sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 \varphi \left(\frac{1 - \rho}{1 + \rho} \right)^2}$, $\rho = \rho_{\parallel}$.

Затем, подставив во второе уравнение (25) вычисленное значение $C = f(N_0^{(0)})$ и найденную из измерений величину A , определим ΔN . Зная ΔN , из первого уравнения (25) и уравнения (26) находим значение N_0 в первом приближении (обозначим его $N_0^{(1)}$) с учетом членов $\sim \Delta N$. При этом ρ вычисляется через ΔN и B следующим образом:

$$\rho = \rho_{\parallel}(1 - B\Delta N), \quad B = B(N_0^{(0)}). \quad (27)$$

Следовательно, по измеренным эллипсометрическим параметрам на основании приближенных соотношений (25), (26) могут быть просто вычислены главные комплексные показатели преломления кристалла N_0 и $N_e = N_0 + \Delta N$. Существенно, что при этом снимаются трудности, связанные с решением обратной эллипсометрической задачи. Необходимые для расчета $N_0^{(1)}$ и ΔN величины C и B вычисляются через известные или измеряемые параметры по формулам $\left(\eta_0 = \sin \varphi \sqrt{R^2 - 1} \right)$

$$C = B + \frac{2R \cos \varphi \left[\sin^2 \varphi \cdot \sin^2 \theta - \left(\cos \theta - \sqrt{R^2 - 1} \cos \varphi \cdot \sin^2 \theta \right)^2 \right]}{\sqrt{R^2 - 1} (R^4 \sin^2 \varphi \cdot \cos^2 \varphi - R^2 + 1)}, \quad (28)$$

$$B = \frac{2R(1 - R^2 \sin^2 \theta) \cos \varphi}{\sqrt{R^2 - 1} (R^4 \sin^2 \varphi \cdot \cos^2 \varphi - R^2 + 1)}. \quad (29)$$

Заметим, что поскольку в соотношении $\Delta N = \frac{A}{C}$ слева стоит константа кристалла, не зависящая от φ и θ , то отношение величин A и C не может обращаться в нуль

ни при каких значениях φ и θ , т. е. изменять знак при изменении φ и θ . В частности, для прозрачных кристаллов при $\theta = \frac{\pi}{2}$ имеем $C > 0$. Откуда следует, что знак ΔN (положительность и отрицательность кристалла) совпадает со знаком введенной величины A (19): при $|\rho_{\parallel}| < |\rho_{\perp}|$ – кристалл оптически отрицателен, при $|\rho_{\parallel}| > |\rho_{\perp}|$ – оптически положительный.

Это весьма простой способ эллипсометрического определения характера (оптически положительных или оптически отрицательных) прозрачных и слабопоглощающих кристаллов. Он дает возможность определять отрицательность или положительность кристалла непосредственно на эллипсометре при проведении измерений, не привлекая других средств в отличие, например, от [9].

Исходя из общих выражений (20), (22), можно получить значения N_0 и N_e с точностью до членов, пропорциональных ΔN^2 включительно. Процедура расчета здесь точно такая же, как и при учете членов, пропорциональных ΔN . Отличие заключается в том, что коэффициенты C и B должны быть найдены через измеряемые величины в следующем (с точностью до ΔN) приближении. Обозначим значение ΔN , вычисленное согласно (25), через $\Delta N^{(0)}$. Составляя с помощью (20), (22) разность $1 - \frac{\rho_{\parallel}}{\rho_{\perp}}$, вычисляем в нужном приближении коэффициент C . Его удобно представить в виде

$$C = C_1 + C_2 \Delta N^{(0)}. \quad (30)$$

Здесь через C_1 обозначен коэффициент C , который находится по формуле (28). Теперь он должен быть вычислен не в нулевом приближении, как ранее, а в первом, что осуществляется очень просто. Для этого в (28) следует подставить значение R (26), рассчитанное для ρ (27). Коэффициент C_2 имеет вид

$$C_2 = \frac{\eta_0}{N_0} \left(bE^2 \frac{\eta_0}{N_0} - BE - N_0 F \right) D + a + Bp. \quad (31)$$

Поскольку C_2 умножается на $\Delta N^{(0)}$, то входящие в (31) величины должны вычисляться в нулевом приближении, величины a и B находятся согласно (20), для остальных на основании (23), (24), (26) получаем

$$E = -\cos^2 \theta + \frac{R^2}{R^2 - 1}, \quad F = \frac{2(1 - R^2) - 1}{2 \sin^2 \varphi (R^2 - 1)^2} + \frac{3 \cos^4 \theta - \cos^2 \theta}{2 R^2 \sin^2 \varphi},$$

$$b = \frac{R^2 (R^2 \sin^2 \varphi \cdot \cos \varphi - \eta_0) \sin^2 \theta - (\cos \varphi + \eta_0) \cos^2 \theta + 0.5 R^2 \sin 2\theta \cdot \sin 2\varphi}{(R^2 \sin^2 \theta + \cos^2 \theta) (\cos \varphi + \eta_0) (R^2 \sin^2 \varphi \cdot \cos \varphi - \eta_0)}, \quad (32)$$

$$D = \frac{2 \cos \varphi \cdot R^2 \left[(\sin \varphi \cdot \cos \theta - \cos \varphi \cdot \sin \theta \cdot \eta_0)^2 - \sin^4 \varphi \cdot \sin^2 \theta \right]}{(1 - R^2 \sin^2 \varphi) (1 - R^2 \cos^2 \varphi) (R^2 \sin^2 \theta + \cos^2 \theta)}.$$

Далее, аналогично тому, как это делалось при учете членов $\sim \Delta N$, вычисляем N_0 по формуле (26), но при

$$\rho = \rho_{\parallel} \left[1 - B\Delta N + \Delta N^2 (a + B\rho + B^2) \right]. \quad (33)$$

Заключение

Предложенный метод определения оптических постоянных поглощающих одноосных кристаллов, основанный на разложении функций в ряд по малым величинам, дает возможность получить приближенные соотношения, точность которых не превышает погрешностей эксперимента. Достоинством метода является его простота, т. к. оптические постоянные рассчитываются подстановкой измеряемых эллипсометрических параметров в аналитические выражения, а не вычисляются сложными численными методами. Предложенный метод применялся в [10–13].

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Drude, P. Über oberflächenschichten I und II / P. Drude // *Annalen der Physik.* – 1989. – Bd. B36, H. 2 (NF). – S. 532–560, 865–897.
2. Кизель, В. А. Отражение света / В. А. Кизель. – М. : Наука, 1973. – 352 с.
3. Ржанов, А. В. Основы эллипсометрии / А. В. Ржанов, К. К. Свитащев, А. И. Семенов. – Новосибирск : Наука, 1979. – 424 с.
4. Федоров, Ф. И. Оптика анизотропных сред / Ф. И. Федоров. – Минск : Изд-во АН БССР, 1958. – 380 с.
5. Аззам, Р. М. Эллипсометрия и поляризованный свет / Р. М. Аззам, Н. М. Башара. – М. : Мир, 1981. – 638 с.
6. Федоров, Ф. И. Отражение и преломление света прозрачными кристаллами / Ф. И. Федоров, В. В. Филиппов. – Минск : Наука и техника, 1976. – 222 с.
7. Определение оптических постоянных одноосных поглощающих кристаллов методом эллипсометрии / А. Г. Пахомов [и др.] // *Ковариантные методы в теоретической физике. Оптика и акустика : сб. науч. тр.* – Минск : Изд-во АН БССР, 1981. – С. 147–155.
8. Aspnes, D. E. Approximate solution of ellipsometric equations for optically biaxial crystals / D. E. Aspnes // *J. Opt. Soc. Am.* – 1980. – Vol. 70, № 10. – P. 1275–1277.
9. Elshazlu-Zaghloul, M. Specieal-angle-ofincidem-ce ellipsometry for uniaxial crystals. Part 1. Negative crystals / M. Elshazlu-Zaghloul // *Opt. Comm.* – 1985. – Vol. 54, № 4. – P. 195–200.
10. Сендер, Н. Н. Иммерсионный метод определения оптических постоянных анизотропных поглощающих кристаллов / Н. Н. Сендер // *Весн. Брэсц. ун-та. Сер. 4, Фізіка. Матэматыка.* – 2015. – № 2. – С. 40–48.
11. Сендер, Н. Н. Определение оптических постоянных анизотропных поглощающих кристаллов на основе разложения в ряд коэффициентов отражения / Н. Н. Сендер // *Весн. Брэсц. ун-та. Сер. 4, Фізіка. Матэматыка.* – 2016. – № 1. – С. 38–45.
12. Сендер, Н. Н. Экспериментальное определение оптических постоянных поглощающих кристаллов на основе приближенных соотношений / Н. Н. Сендер // *Весн. Брэсц. ун-та. Сер. 4, Фізіка. Матэматыка.* – 2018. – № 1. – С. 48–58.
13. Сендер, Н. Н. Экспериментальное определение оптических постоянных поглощающих кристаллов на основе метода иммерсионной эллипсометрии / Н. Н. Сендер // *Весн. Брэсц. ун-та. Сер. 4, Фізіка. Матэматыка.* – 2020. – № 1. – С. 53–58.

REFERENCES

1. Drude, P. Über oberflächenschichten I und II / P. Drude // *Annalen der Physik.* – 1989. – Bd. B36, H. 2 (NF). – S. 532–560, 865–897.
2. Kiziel', V. A. Otrazhenije svieta / V. A. Kiziel'. – M. : Nauka, 1973. – 352 s.
3. Rzhanov, A. V. Osnovy ellipsometrii / A. V. Rzhanov, K. K. Svitashv, A. I. Siemienko. – Novosibirsk : Nauka, 1979. – 424 s.
4. Fiodorov, F. I. Optika anisotropnykh sried / F. I. Fiodorov. – Minsk : Izd-vj AN BSSR, 1958. – 380 s.
5. Azzam, R. M. Ellipsometrija i poliarizovannyj sviet / R. M. Azzam, N. M. Bashara. – M. : Mir, 1981. – 638 s.
6. Fiodorov, F. I. Otrazhenije i prielomlienije svieta i prozrachnymi kristallami / F. I. Fiodorov, V. V. Filippov. – Minsk : Nauka b tiekhnika, 1976. – 222 s.
7. Pakhomov, A. G. Opriedielienije optichieskikh postojannykh odnoosnykh pogloshchajushchikh kristallov mietodom ellipsometrii / A. G. Pakhomov [et al.] // *Kovariantnyje mietody v tieorietichieskoj fizikie. Optika i akustika : sb. nauch. tr.* – Minsk : Izd-vo AN BSSR, 1981. – S. 147–155.
8. Aspnes, D. E. Approximate solution of ellipsometric equations for optically biaxial crystals / D. E. Aspnes // *J. Opt. Soc. Am.* – 1980. – Vol. 70, № 10. – P. 1275–1277.
9. Elshazlu-Zaghloul, M. Specieal-angle-of-incidem-ce ellipsometry for uniaxial crystals. Part 1. Negative crystals / M. Elshazlu-Zaghloul // *Opt. Comm.* – 1985. – Vol. 54, № 4. – P. 195–200.
10. Siendier, N. N. Immiersionnyj mietod opriedielienija optichieskikh postojannykh anizotropnykh pogloshchajushchikh krystallov / N. N. Siendier // *Viesn. Besc. un-ta. Sier. 4, Fizika. Matematyka.* – 2015. – № 2. – S. 40–48.
11. Siendier, N. N. Opriedielienije optichieskikh postojannykh anizotropnykh pogloshchajushchikh krystallov na osnovie razlozhenija v riad koeficientjv otrazhenija / N. N. Siendier // *Viesn. Besc. un-ta. Sier. 4, Fizika. Matematyka.* – 2016. – № 1. – S. 38–45.
12. Siendier, N. N. Ekspierierimiental'noje opriedielienije optichieskikh postojannykh anizotropnykh pogloshchajushchikh krystallov na osnovie priblizhonnykh sootnoshenij / N. N. Siendier // *Viesn. Besc. un-ta. Sier. 4, Fizika. Matematyka.* – 2018. – № 1. – S. 48–58.
13. Siendier, N. N. Ekspierierimiental'noje opriedielienije optichieskikh postojannykh anizotropnykh pogloshchajushchikh krystallov na osnovie mietoda immersionnoj ellipsometrii / N. N. Siendier // *Viesn. Besc. un-ta. Sier. 4, Fizika. Matematyka.* – 2020. – № 1. – S. 53–58.

Рукапіс паступіў у рэдакцыю 18.04.2022