第8卷 第2期 光学学报 Vol. 8, No. 2
1988年2月 ACTA OPTICA SINICA February, 1988

从吸收比计算光学薄膜的消光系数

吴启宏
(浙江大学光仪系)

提 要

对于弱吸收薄膜，当薄膜和基底的折射率在一定数值范围内时，含有吸收比的公式可以用来计算薄膜的消光系数。该式不能用来计算已经没有干涉效应的厚的强吸收膜的消光系数。

关键词: 吸收;薄膜。

一、引 言

利用光度法测量吸收薄膜的光学常数是薄膜光学中最常用的方法。在光度法中，根据吸收比$(1-R)/T$(R, T分别是薄膜的反射率，透射率)来计算薄膜的消光系数是比较方便的。在文献[1]中指出："当薄膜吸收严重时，可以放心地假定干涉不存在"，于是消光系数值可以由下式计算：

$$(1-R)/T=\exp(4\pi kd/\lambda)。\tag{1}$$

该式给出的结果已完全满足要求。我们把厚度为500Å，复折射率为$0.7-4.3i$的银膜在$\lambda=5000$Å处的反射率和透射率计算值$R=0.9803$, $T=0.0049$代入上式，得到的消光系数k只有1.1，与正确值4.3相差甚远。而将厚度为500Å的弱吸收薄膜ZnS(复折射率取为$2.3-0.01i$)在$\lambda=5000$Å处的反射率和透射率计算值$R=0.3015$, $T=0.6887$代入上式，得到消光系数为$k=0.011$，与正确值0.01十分接近。在本文中我们将详细讨论利用公式(1)计算薄膜消光系数的可能性和适用范围。

二、强吸收薄膜

在一般情况下，透明基底上的单层吸收膜(光学常数为$n-ik$)的振幅反射系数和振幅透射系数可以写为[2]

$$r=\frac{r_1+r_2\cdot e^{-2i\delta}}{1+r_1r_2\cdot e^{-2i\delta}},\quad t=\frac{t_1t_2\cdot e^{-i\delta}}{1+r_1r_2\cdot e^{-2i\delta}}。$$

式中t_1、r_1和t_2、r_2分别是空气-薄膜界面和薄膜-基板界面的振幅透、反射系数。δ是复数相位厚度，在垂直入射时，$\delta=2\pi(n-ik)d/\lambda$。记$\eta=2\pi d/\lambda$，上式可以写为$\delta=n\cdot\eta-ik\eta$，其中$d$为薄膜的几何厚度。

单层薄膜的反射率和透射率可以分别写为

收稿日期: 1986年12月30日;收到修改稿日期: 1987年3月20日

$R=|r|^2$, $T=\frac{n_s}{n_0}\cdot|t|^2$。其中 n_0 和 n_s 分别是空气和基板的折射率。

根据文献 [1] 的假定，当薄膜的吸收严重时，膜层中不存在干涉效应，即 $|r_2\cdot e^{-2\eta k}|\ll|r_1|$，因此 R 仅由空气和薄膜界面产生，于是 $R=|r_1|^2$。类似地，透射率 T 由下式决定：

$$T=\frac{n_s}{n_0}\cdot|t_1t_2\cdot e^{-i\delta}|^2。$$

这样，吸收比可以写成：

$$\frac{1-R}{T}=\frac{1-|r_1|^2}{\frac{n_s}{n_0}\cdot|t_1t_2\cdot e^{-i\delta}|^2}。\tag{2}$$

根据菲涅尔定律，r_1, t_1, t_2 的值为

$$r_1=\frac{n_0-(n-ik)}{n_0+(n-ik)},\quad t_1=\frac{2n_0}{n_0+n-ik},\quad t_2=\frac{2(n-ik)}{n-ik+n_s}。$$

把上三式代入式 (2) 中得到

$$\begin{aligned}\frac{1-R}{T}&=e^{2\eta k}\\&\times\left\{\frac{1-\left[\frac{n_0-(n-ik)}{n_0+(n-ik)}\right]\left[\frac{n_0-(n-ik)}{n_0+(n-ik)}\right]^*}{\left[\frac{n_s}{n_0}\left(\frac{2n_0}{n_0+n-ik}\right)\left(\frac{2n_0}{n_0+n-ik}\right)^*\left[\frac{2(n-ik)}{n-ik+n_s}\right]\left[\frac{2(n-ik)}{n-ik+n_s}\right]^*\right]}\right\}\\&=e^{2k\eta}\cdot\frac{(n_0+n-ik)(n_0+n+ik)-(n_0-n+ik)(n_0-n-ik)}{16n_0n_s\cdot\frac{(n-ik)(n+ik)}{(n-ik+n_s)(n+ik+n_s)}}。\end{aligned}$$

把上式再化简后得到

$$\frac{1-R}{T}=e^{2k\eta}\times\frac{n}{4n_s}\left[1+\frac{n_s^2+2nn_s}{n^2+k^2}\right]$$

或者写成

$$\frac{1-R}{T}=p\cdot e^{4\pi kd/\lambda}\tag{3}$$

而 P 的值为

$$P=\frac{1}{4}\left(\frac{n}{n_s}+\frac{nn_s+2n^2}{n^2+k^2}\right)。\tag{4}$$

从式 (4) 中可知，系数 P 的值与薄膜的复折射率 $n-ik$ 有关，也和基底的折射率 n_s 有关。当 $n_s=1.52$ 时，系数 P 的值如图 1 所示。从图中可知，在一般情况下 P 均不等于 1，这就解释了用公式 (1) 计算银膜消光系数时产生的巨大误差。系数 P 实际上反映了薄膜后表面的影响。当 $t_2=1$, $n_s=n-ik$ 时，薄膜与基底的交界面不复存在，从方程 (2) 可以推导得到 $P=1$; 这时薄膜可看成是半无限大介质，进入薄膜的光强为 $1-R$，在薄膜中厚度为 d 处的光强为 T，公式 (1) 实际上就是描述介质吸收的朗伯定律的数学表达式。

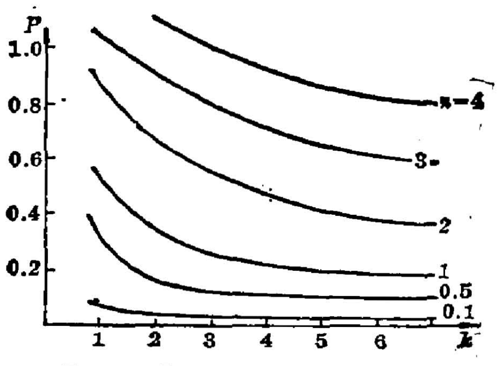

Fig. 1 Coefficient P vs n and k

Table 1　Theoretical data of strong absorbing films

	d	R	T	$\frac{1-R}{T}$	P	k
Ag	500 Å	0.9803	0.0049	4.02	0.0129	4.56
	600 Å	0.9839	0.0017	9.47	0.0129	4.38
Rh	600 Å	0.5910	0.0092	44.45	0.629	3.39
	700 Å	0.5869	0.0045	91.8	0.629	3.40
	800 Å	0.5839	0.0022	189	0.629	3.40

note: $N_{Ag}=0.07-4.3i$, $N_{Rh}=2.46-3.40i$。

我们对公式(3)的正确性用理论数据进行了验算，其结果列于表1之中，表中的透，反射率T、R均采用导纳矩阵计算得到。从中可以知道，当薄膜反射率趋于大块材料的反射率时，干涉的影响大大削弱，用公式(3)求得的消光系数与原始的光学常数十分接近。但是由于系数P随n、k的改变，其值将从10^{-2}变到1，故在实际测量中便无法利用公式(3)来求解强吸收薄膜的消光系数。

三、弱吸收膜

对于弱吸收膜，我们采用Abele's的关于吸收膜的透、反射率的公式计算[3]。

$$R=\frac{abe^{2k\eta}+cde^{-2k\eta}+2r\cos 2n\eta+2s\cdot\sin 2n\eta}{bde^{2k\eta}+ace^{-2k\eta}+2t\cos 2n\eta+2u\cdot\sin 2n\eta},$$

$$T=\frac{16n_0n_s(n^2+k^2)}{bde^{2k\eta}+ace^{-2k\eta}+2t\cos 2n\eta+2u\sin 2n\eta}。$$

其中$a=(n-n_0)^2+k^2$，$b=(n+n_s)^2+k^2$，$d=(n+n_0)^2+k^2$，$c=(n-n_s)^2+k^2$，$r=(n_0^2+n_s^2)(n^2+k^2)-(n^2+k^2)^2-n_0^2n_s^2-4n_0n_sk^2$，$t=(n_0^2+n_s^2)(n^2+k^2)-(n^2+k^2)^2-n_0^2n_s^2+4n_0n_sk^2$，$s=2k(n_s-n_0)(n^2+k^2+n_0n_s)$，$u=2k(n_s+n_0)(n^2+k^2-n_0n_s)$，$\eta=2\pi d/\lambda$。

从上两式中我们得到吸收比的公式为：

$$\frac{1-R}{T}=\frac{n(b\cdot e^{2k\eta}-c\cdot e^{-2k\eta})+4n_sk^2\cos 2n\eta+2k(n^2+k^2-n_s^2)\sin 2n\eta}{4n_s(n^2+k^2)}$$

由于仅考虑弱吸收膜，$k\ll1$，我们可以略去k^2项得到

$$\frac{1-R}{T}=\frac{n(b\cdot e^{2k\eta}-c\cdot e^{-2k\eta})+2k(n^2-n_s^2)\cdot\sin 2n\eta}{4n_sn^2}。\tag{5}$$

在上式中由于k较小，进一步略去含k的项成为

$$\frac{1-R}{T}=\frac{b\cdot e^{2k\eta}-ce^{-2k\eta}}{4n_sn}。\tag{6}$$

我们可以采用两种近似方法对(6)式进行化简。第一种方法是对折射率的范围加以限制，第二种方法是对$2k\eta$的范围加以限制。

首先讨论第一种方法。我们把(6)式改写成下列形式：

$$\frac{1-R}{T}=e^{2k\eta}\cdot\left[\frac{(n+n_s)^2-(n-n_s)^2e^{-4k\eta}}{4n_sn}\right]。\tag{7}$$

当$2\pi kd/\lambda$的值从0增加到∞时，$e^{-4k\eta}$的值从1.0减少到0。由于可见区常用的弱吸收薄

膜折射率均处在 1.3 到 2.5 之间，假定 $n_s=1.52$，我们可以计算得到式(7)方括号中的系数将在 1.00 到 1.063 之间变化。故在此范围中，我们能把上式化简为：

$$\frac{1-R}{T}=e^{2k\eta}=e^{4\pi kd/\lambda}。 \tag{8}$$

上述推导表明，当 $n_s=1.52$，n 在 1.3～2.5 之间时，利用公式(8)能够从薄膜的透、反射率 T、R 中估算弱吸收薄膜的消光系数。我们在表 2 中列出了折射率为 2.3 和 1.35 的薄膜的理论验算数据。从表中可知，低折射率薄膜的消光系数的误差极小，不超过 10^{-4}，而高折射率薄膜的消光系数的误差要稍大于前者，但是最大误差不超过 15%。鉴于一般弱吸收薄膜的消光系数多数在 1×10^{-4}～5×10^{-2} 之间，所以利用式(8)能方便地从 R、T 中求解出消光系数的大略值。

Table 2 Theoretical data of weak absorbing films

n	k	d/λ	R	T	$\bar{k}$
2.3	0.01	2.2	0.0779	0.8920	0.0112
2.3	0.01	3.4	0.2281	0.7349	0.0105
2.3	0.1	2.4	0.1501	0.5931	0.109
2.3	0.1	6	0.0996	0.3843	0.104
1.35	0.01	2.2	0.0358	0.7301	0.01006
1.35	0.01	2.8	0.0122	0.6935	0.01005
1.35	0.1	2.4	0.0183	0.2941	0.09992
1.35	0.1	3	0.0277	0.2158	0.09982

第二种方法是利用 $e^x=\operatorname{ch}x+\operatorname{sh}x$ 把(6)式改写为：

$$\frac{1-R}{T}=\operatorname{ch}(2k\eta)+\frac{1}{2}\operatorname{sh}(2k\eta)\left(\frac{n}{n_s}+\frac{n_s}{n}\right)。$$

当 $2k\eta<0.05$ 时，因为 $\operatorname{ch}(2k\eta)\doteq1$，$\operatorname{sh}(2k\eta)\doteq2k\eta$，上式就化简为：

$$\frac{1-R}{T}=1+k\eta\left(\frac{n}{n_s}+\frac{n_s}{n}\right)。 \tag{9}$$

由此可见式(9)不仅象文献[1]指出那样适用于透反射率的极值点上，而且可以推广至非极值点上。我们把理论验算的数据列于表 3 之中。从表上可知，当干涉级 m 不为整数时，用式(9)计算消光系数产生的误差均不大。但当近似条件 $2\pi kd/\lambda<0.05$ 不满足时，消光系数的误差便显著增大。

Table 3 Theoretical data of weak absorbing films with different interference orders from eq. (9)

k	m	$2\pi kd/\lambda$	R	T	$\bar{k}$
0.01	2.2	0.017	0.0779	0.8920	0.0104
0.01	3.4	0.023	0.2281	0.7349	[illegible]
0.1	2.4	0.197	0.1501	0.5931	0.12[illegible]
0.1	6	0.410	0.0996	0.3843	0.15[illegible]

$n=2.3$

对式(8)进一步采用 $2k\eta<0.05$ 的近似条件化简，可以似得到

$$\frac{1-R}{T}=1+4\pi kd/\lambda_{\circ} \tag{10}$$

类似地，当 $n_s=1.52$ 而 n 为 1.3～2.5 之间时，由于 $n/n_s+n_s/n\doteq 2$，从式(9)中也能得到上式。式(10)在计算时比前两式更简洁。在红外波段，因为折射率常大于 2.5，不能满足 $n/n_s+n_s/n\doteq 2$ 的条件，故不能利用式(8)和式(10)来计算消光系数。这时若对薄膜的折射率作一估计，利用式(9)能求出有参考价值的消光系数的近似值。

四、结　论

在 $n_s=1.52$，薄膜的折射率在 1.3～2.5 之间时，利用式(1)可以直接估算弱吸收薄膜的消光系数。但是式(1)无法用于估计强吸收薄膜的消光系数。

参 考 文 献

[1] 周九林，尹树百译；《光学薄膜技术》，(国防工业出版社，1974 年)，363～365。
[2] 同上书；43～44。
[3] F. Abele's; «Progr. Opt», (North-Holland Publishing Company 1963)，251.

Determination of extinction coefficient of optical thin films from the special absorption

Wu Qihong
(Department of Optical Engineering, Zhejiang University, Hangzhou)

(Received 30 December 1986; revised 20 March 1987)

Abstract

For a weak absorbing film, if the refractive indices of the film and the substrate are set among certain ranges the formula $(1-R)/T=\exp(4\pi kd/\lambda)$ can be used for determination of the extinction coefficient of the film. The formula, however, is not suitable for the thick strong absorbing film, in which the interference effect has vanished.

Key words: absorption; film.