

介质薄膜不同方向折射率的计算

周 九 林 王 学 仁
(西南技术物理研究所) (哈尔滨科学技术大学)

提 要

本文应用介电椭球理论,推导出计算介质薄膜不同方向折射率的新公式。
关键词: 薄膜折射率,薄膜的柱状结构。

一、引 言

所有真空热蒸发的光学薄膜,都具有柱状结构,即薄膜由大量柱状实体及其间的空隙所组成。这是因为成膜时的基板温度总是低于膜料熔点的一半,使得膜料的吸附粒子(原子或分子)的迁移率比较低,于是前积粒子的阻挡效应,随机冲击凝集过程中出现的群聚作用,便导致薄膜柱状生长。近年来,薄膜镀制条件与结构的关系,结构与特性的关联,乃至薄膜形貌构态的量化描述^[1,2],都是非常引人注目的课题。很自然,薄膜的折射率作为光学薄膜的主要参数,理应与薄膜的柱状结构特征联系起来。

薄膜的柱状结构具有一定的方向性,文献[3]提出了柱体取向的所谓正切规则。柱体排列的方向性,使薄膜必然表现出各向异性,因此在不同方向上,薄膜的折射率应有相异的数值。事实上,已有作者实验测出了薄膜不同方向的折射率值^[4]。

为了计算不同方向的折射率,本文应用介电椭球理论,推导出一种新的计算公式。

二、不同方向的折射率公式

设想一介电椭球,球外的电场强度为 \mathcal{E} ,球内的电感应强度和电场强度分别为 $D^{(i)}$ 和 $E^{(i)}$,球内的电场是均匀的。球内媒质的介电常数为 $\epsilon^{(i)}$,球外媒质的介电常数为 $\epsilon^{(e)}$ 。椭球内外的电场有以下关系^[4]

$$(1 - L_j) \epsilon^{(e)} E_j^{(e)} + L_j D_j^{(i)} = \epsilon^{(e)} \mathcal{E}_j, \quad (j = x, y, z), \quad (1)$$

式中 L_j 是椭球沿 j 轴方向的退极化系数,被定义为

$$\begin{aligned} L_x &= \frac{abc}{2} \int_0^\infty \frac{ds}{(s+a^2)R_s}, \\ L_y &= \frac{abc}{2} \int_0^\infty \frac{ds}{(s+b^2)R_s}, \\ L_z &= \frac{abc}{2} \int_0^\infty \frac{ds}{(s+c^2)R_s}. \end{aligned} \quad (2)$$

式中 a , b 和 c 是椭球的三个半轴, s 表示椭球坐标,

$$R_s = [(s+a^2)(s+b^2)(s+c^2)]^{\frac{1}{2}}.$$

由(2)式不难证明下述关系成立,

$$L_x + L_y + L_z = 1. \quad (3)$$

对于圆柱体(其轴指向 x 轴, $a \rightarrow \infty$), 有

$$L_x = 0 \quad L_y = L_z = \frac{1}{2}. \quad (4)$$

现在将公式(1)和(4)具体应用到柱状结构的介质薄膜。

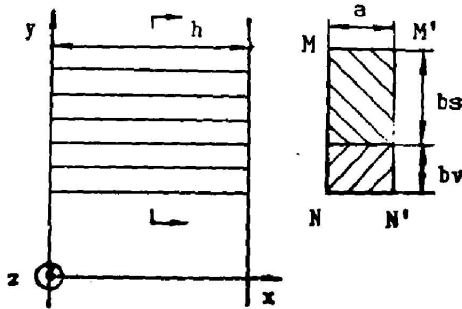


Fig. 1 The structure sketch of a film whose column apex are perpendicular to its surface, and a area unit $MM'NN'$

图1示出薄膜的柱状排列。图中取柱体的轴线方向为 x 。可以想象,在与柱轴垂直的另外两个方向,即 y 和 z 轴方向,薄膜结构是相同的,因而折射率相等,即 $n_y = n_z$ 。

首先计算横向折射率 $n_y(n_z)$ 。设薄膜实体柱与空隙柱的介电常数分别为 ϵ_s 和 ϵ_v , 两种柱体被浸没在介电常数为 ϵ 的环境媒质(薄膜)中。柱外电场为 \mathcal{E} , 与柱轴垂直; 实体柱与空隙柱内部电场分别为 E_s 和 E_v , 它们是均匀的, 其方向与 \mathcal{E} 的方向相同。注意到前面关于介电椭球内外的电场关系式(1), 并将椭球演化为圆柱

体时的退极化系数 L_j 的表示式(4)代入式(1), 便得到实体柱与空隙柱内外电场的两个关系式:

$$\frac{1}{2}(\epsilon_s + \epsilon)E_s = \epsilon\mathcal{E}, \quad (5)$$

$$\frac{1}{2}(\epsilon_v + \epsilon)E_v = \epsilon\mathcal{E}. \quad (6)$$

要想通过(5)式和(6)式求出 ϵ , 应找到 \mathcal{E} 与 E_s , E_v 及聚集密度 p 之间的关系。

在薄膜中垂直于 x 轴的截面内取一面积元 $MM'NN'$ (见图1), 面积元沿 z 轴方向宽为 a , 沿 y 轴方向长为 b 。实际上, 在柱状结构的薄膜中, 两种柱体交界面上的粒子数相对于薄膜中粒子总数来说, 只是很小的一部分。在忽略柱体交界面上粒子相互作用的前提下, 可把面积元中所包含的两种柱体截面分别平移集中, 则面积元所包含的实体柱的总截面为

$$\sigma_s = \sum \sigma_{s_i} = ab_s,$$

空隙柱的总截面为

$$\sigma_v = \sum \sigma_{v_j} = ab_v.$$

用 U 表示面积元两端 MM' 与 NN' 之间的电位差。在匀强电场中两点间电位差等于电场强度与两点间距离的乘积, 于是

$$U = b_s E_s + b_v E_v. \quad (7)$$

另一方面, 在两种柱体外部的环境媒质薄膜中, 电场强度为 \mathcal{E} , 沿着 y 轴方向跨越尺寸 b 的电位差 U 又可写为

$$U = b\mathcal{E} = (b_s + b_v)\mathcal{E}. \quad (7')$$

注意到图 1 面积元的几何参数,按照薄膜聚集密度的定义:

$$p = \frac{b_s a h}{b_s a h + b_v a h} = \frac{b_s}{b_s + b_v} \quad (8)$$

式中 h 为圆柱体的沿 x 轴方向的高度。由式(8)、(7)和(7')得到

$$E = p E_s + (1-p) E_v \quad (9)$$

代入(5)式和(6)式便得

$$(\epsilon_s + \epsilon) E_s = 2sp E_s + 2s(1-p) E_v \quad (10)$$

$$(\epsilon_v + \epsilon) E_v = 2sp E_s + 2s(1-p) E_v \quad (11)$$

由式(10)和(11)消去 E_s 和 E_v , 建立起关于 ϵ 的一元二次方程式

$$\epsilon^2 - (2p-1)(\epsilon_s - \epsilon_v)\epsilon - \epsilon_s \epsilon_v = 0 \quad (12)$$

解出 ϵ 的两个根,舍去没有物理意义的负根,最后得到

$$\epsilon = \frac{(2p-1)(\epsilon_s - \epsilon_v)}{2} + \left\{ \left[\frac{(2p-1)(\epsilon_s - \epsilon_v)}{2} \right]^2 + \epsilon_s \epsilon_v \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (13)$$

代入关系式 $\epsilon = n_v^2$, $\epsilon_s = n_s^2$, $\epsilon_v = n_v^2$, 式中 n_s 和 n_v 分别为薄膜实体柱和空隙柱的折射率。于是

$$n_v^2 = n_s^2 = \frac{(2p-1)(n_s^2 - n_v^2)}{2} + \left\{ \left[\frac{(2p-1)(n_s^2 - n_v^2)}{2} \right]^2 + n_s^2 n_v^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (14)$$

至于薄膜的纵向折射率 n_x , 我们沿用文献[5]的方法,概括说来,就是把薄膜看成是实体柱与空隙柱两种介质电容的并联。根据静电学电容组合理论不难得到

$$n_x^2 = pn_s^2 + (1-p)n_v^2 \quad (15)$$

三、与 Stoner 公式的比较

为了计算介质薄膜不同方向的折射率,文献[6]曾援用 Stoner 公式。代入圆柱体的退极化系数 L_l 的值,可得到 Stoner 公式的具体表示式。计算表明,纵向折射率 n_x 的表示式与(15)式完全相同,而横向折射率公式为

$$n_y^2 = n_z^2 = \frac{2n_s^2 n_v^2 + pn_s^2 (n_s^2 - n_v^2)}{2n_s^2 - p(n_s^2 - n_v^2)} \quad (16)$$

下面通过薄膜实例,对本文推导的公式(14)与 Stoner 公式(16)的计算结果进行比较。

对于 ZrO_2 薄膜, $n_s = 2.05$, $n_v = 1.00$ 。应用公式(15)计算薄膜的纵向折射率 n_x , 并分别应用公式(14)和(16)计算横向折射率 $n_y(n_z)$, 其结果列于表 1。

Table 1 The principal indices of ZrO_2 film computed by Stoner's formulas and the present formulas respectively

Principal indices	Formulas	Packing density p							
		0.95	0.90	0.85	0.80	0.75	0.70	0.65	0.60
n_x	Same	2.011	1.970	1.929	1.887	1.844	1.800	1.755	1.709
$n_y(n_z)$	Present	1.987	1.923	1.859	1.796	1.732	1.670	1.608	1.548
	Stoner's	1.988	1.927	1.869	1.811	1.755	1.701	1.647	1.594

从表 1 可以看出,首先,沿着薄膜柱轴方向的折射率 n_z 大于横向折射率 n_y (n_x), 这同薄膜的结构特征是一致的,从物理概念推想是合理的,更重要的是实验测量已经证实了这种差异^[1]。其次,两种理论模型算得的薄膜横向折射率是非常接近的,特别是当聚集密度 $p \geq 0.85$ 时,两者的差值 < 0.01 ; 而当 $0.6 < p < 0.8$ 时,两者相差稍大。对于各种 p 值, Stoner 公式的计算值略高于本文公式的计算值。

四、结 语

本文应用介电椭球理论,推导出薄膜不同方向的折射率计算公式,并与 Stoner 公式进行了实例计算比较。这些公式都有待于用丰富的实验资料加以检验。

最后,必须指出,本文推导薄膜横向折射率公式时,假定了薄膜在 y 轴与 z 轴两个方向上的结构是相同的。当柱体轴与薄膜表面垂直时,这个假定是成立的。但当柱体轴与薄膜表面倾斜时,深入分析和实验测量指出,薄膜在垂直于蒸气入射平面的方向的折射率 n_z (见图 1),与另一横向折射率 n_y 是有细微差别的^[1,6]。这有待于更精细的理论处理。

参 考 文 献

- [1] H. A. Macleod; *J. Vac. Sci. Technol. A.*, 1986, 4, No. 3 (May/Jun), 418.
- [2] B. Messir; *J. Vac. Sci. Technol. A.*, 1986, 4, No. 3 (May/Jun), 490.
- [3] A. G. Dirks, H. J. Leamy; *Thin Solid Films*, 1977, 47, No. 3 (Dec), 219.
- [4] Л. Д. 朗道, Е. М. 栗弗席兹;《连续媒质电动力学》, (人民教育出版社, 1963 年版) 上册, 第一章。
- [5] 王学仁;《激光技术》, 1986, No. 5 (Sept/Oct), 21.
- [6] M. Sikkens et al.; *Optical Engineering*, 1986, 25, No. 2 (Feb), 142.

Calculation of principal refractive indices of dielectric thin films

ZHOU JIULIN

(South-west Technical Physics Institute)

WANG XUREN

(Harbin University of Science and Technology)

(Received 4 May 1987; revised 15 July 1987)

Abstract

According to the theory of dielectric ellipsoid, a new formula for calculating the principal refractive indices of thin films with columnar structure is derived in this paper.

Key words: refractive index of thin films; columnar structure of thin films.