

# 氧化物玻璃的中红外光学常数 计算方法的探讨

韩建军 刘继翔 周学东  
(武汉工业大学材料学院, 武汉 430070)

**摘 要** 结合数值分析、几何光学、电磁理论, 对计算氧化物玻璃的中红外光学常数折射率  $n_r$  和消光系数  $k$  的三种计算方法进行了探讨, 推导出了适合计算机计算的模型, 并编制了计算程序, 对研究氧化物玻璃空芯光纤的包皮材料提供了有效途径。

**关键词** 计算方法, 红外光学常数, 克拉默斯-克勒尼希(K-K)关系。

## 1 引 言

随着红外激光技术及应用的发展, 传输激光光纤材料的种类探究, 特别是对 CO<sub>2</sub> 激光传输材料的研究引起人们广泛兴趣<sup>[1]</sup>。关于氧化物玻璃空芯光纤<sup>[2]</sup>的研究已越来越受到世界各国的重视, 但由于这种材料在中红外波段的强吸收, 其折射率不能直接测试, 给研究工作带来了很大的困难。本文分别在数值分析法、几何光学及电磁理论基础结合材料的一些特性, 推导出了计算中红外光学常数的计算模型, 并进行了相互对比。用编制的计算程序来计算氧化物玻璃材料的有关光学常数, 为研究这种玻璃材料提供了一种行之有效的途径。

## 2 氧化物玻璃中红外光学常数计算模型

在中红外波段, 由于氧化物玻璃材料的强吸收, 其折射率不能直接测试, 为了克服上述困难, 可通过反射比的测量来计算材料的光学参数。因光学参数只隐含地依赖于反射比, 所以必须运用近似方法从反射率  $R$  的测量数据计算  $n_r$ 、 $k$ 。玻璃的反射率测试仪器为日立 260-50 型红外分光光度计, 波长范围为 2.5  $\mu\text{m}$ ~ 40  $\mu\text{m}$ 。根据测试的反射率计算氧化物玻璃中红外光学常数方法有以下几种。

### 2.1 色散分析法

利用测量反射率  $R(\omega)$  计算玻璃材料光学常数  $n_r$  和  $k$ , 即色散分析法。根据色散方程<sup>[3]</sup>:

$$n^2 - k^2 - \epsilon_\infty = \sum Q_i e^2 f_i (\omega_i^2 - \omega^2) / \{m_i \epsilon_0 [(\omega_i^2 - \omega^2)^2 + \gamma_i^2 \omega^2]\} \quad (1)$$

$$2nk = \sum Q_i e^2 f_i \gamma_i \omega / \{m_i \epsilon_0 [(\omega_i^2 - \omega^2)^2 + \gamma_i^2 \omega^2]\} \quad (2)$$

以及垂直入射时反射比的表达式

$$R = [(n_r - 1)^2 + k^2] / [(n_r + 1)^2 + k^2] \quad (3)$$

用尝试的方法确定光学常数, 即用计算机把这些参数的尝试值在色散方程中反复尝试, 并与实际测量的反射比相比较, 经反复调整这些尝试值, 直至达到良好近似为止。

## 2.2 斜入射法

计算玻璃材料光学常数的另一种方法是采用斜入射的方法: 设入射角为  $\theta$ , 在 s 和 p 偏振面的反射系数  $R_s$  和  $R_p$  分别以下式表示

$$R_s = [(\cos \theta - X)^2 + Y^2] / [(\cos \theta + X)^2 + Y^2] \quad (4)$$

$$R_p = \frac{[(X^2 - Y^2 + \sin^2 \theta) \cos \theta - X^2]^2 + (1 - 2X \cos \theta)^2 Y^2}{[(X^2 - Y^2 + \sin^2 \theta) \cos \theta + X^2]^2 + (1 + 2X \cos \theta)^2 Y^2} \quad (5)$$

$X$ 、 $Y$  分别定义为

$$2X^2 = [(n_r^2 - k^2 - \sin^2 \theta)^2 + 4n_r^2 k^2]^{1/2} + (n_r^2 - k^2 - \sin^2 \theta) \quad (6)$$

$$2Y^2 = [(n_r^2 - k^2 - \sin^2 \theta)^2 + 4n_r^2 k^2]^{1/2} - (n_r^2 - k^2 - \sin^2 \theta) \quad (7)$$

从(4)式和(5)式中, 可以得出  $X$ ,  $Y$

$$X = - [(1 - R_p/R_s) \cos 2\theta / \cos \theta] / [-2(1 + R_p/R_s) + 4 \cos^2 \theta (1 - R_p)(1 - R_s)] \quad (8)$$

$$Y = \{ [R_s(\cos \theta + X)^2 - (\cos \theta - X)^2] / (1 - R_s) \}^{1/2} \quad (9)$$

同样, 从(6)式和(7)式可以得出

$$n_r = \{ [(X^2 - Y^2 + \sin^2 \theta) + [(X^2 - Y^2 + \sin^2 \theta)^2 + (2XY)^2]^{1/2}] / 2 \}^{1/2}, \quad (10)$$

$$k = XY/n_r \quad (11)$$

运用(8)~(11)式并结合测量到的反射率  $R_p$  和  $R_s$ , 进行  $n_r$  和  $k$  的计算。测量反射率的光路系统采用如图 1 所示的四个平面镜组合方式进行。通过调整平面镜  $M_1 \sim M_4$ , 使反射角为某一值, 输出光用 Hitachi 260-10 红外光谱仪检测, 结果由计算机处理。

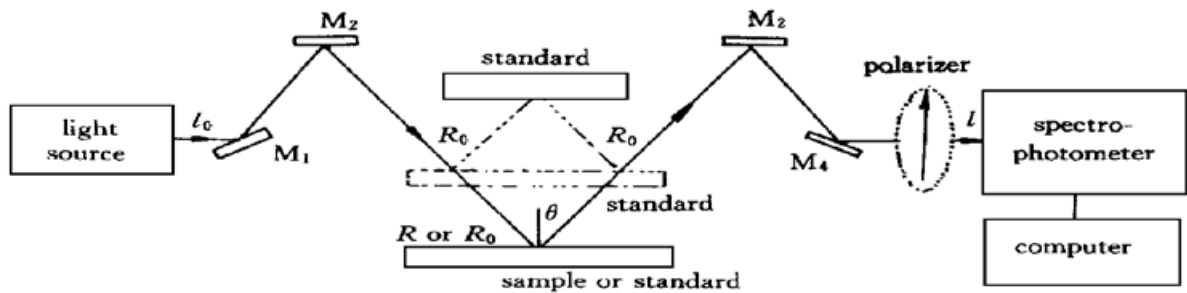


Fig. 1 Optical system for reflection measurement

测量得到的光强度  $I$  是入射光强度  $I_0$  的函数, 包括平面镜、偏振镜整个光路系统的效率用  $T_0$  表示,  $R_0$  为标样的反射率, 样品的反射率  $R$  为

$$I = I_0 T_0 R \quad (12)$$

为获得  $R$  的值, 先进行一个已知其反射率的标准样品的测量。标准样品分别置于图中实线和虚线的位置, 测量光强度  $I_1$  和  $I_2$ ,

$$I_1 = I_0 T_0 R_{11}, \quad I_2 = I_0 T_0 R_{11}^3, \quad \therefore R_{11} = (I_2/I_1)^{1/2} \quad (13)$$

由(13)式, 可以计算出玻璃样品的反射率

$$R = (I/I_1) R_{11} = (I/I_1) (I_2/I_1)^{1/2} \quad (14)$$

分别在 s 和 p 偏振方向测量反射率, 即可计算出折射率和消光系数。

### 2.3 利用 K-K 关系推导计算模型

基于色散理论, 对研究具有吸收带的各向同性的透明均质材料的光学参数和电学参数时, 引用了复折射率的概念, 即  $N = n_r - ik$ , 其中  $n_r$  为折射率,  $k$  为消光系数。通过色散分析表明, 所谓反常色散, 即在吸收波长范围内  $dn/d\lambda$  出现负值。色散理论证明了在吸收带内的高频区将会使折射率急剧下降, 甚至出现  $n_r < 1$  的现象。对于氧化物玻璃, 共振吸收带在红外区, 在当前对折射率用直接方法测试尚十分困难的情况下, 利用克拉默斯-克勒尼希关系, 推导出了计算  $n_r$ 、 $k$  的计算式<sup>[3-6]</sup>。克拉默斯-克勒尼希关系表达式为

$$a' = \frac{2}{\pi} p p \int_0^{\infty} [s a''(s) / (s^2 - \omega^2)] ds, \quad a'' = - \frac{2\omega}{\pi} p p \int_0^{\infty} [a'(s) / (s^2 - \omega^2)] ds \quad (15)$$

它给出了响应函数实部和虚部之间的互易关系。其中  $p p$  表示主积分。当角频率为  $\omega$  的辐射从空气入射到表面时, 材料的反射系数可表示为

$$r(\omega) = [n(\omega) - jK(\omega) - 1] / [n(\omega) - jK(\omega) + 1] = \sqrt{R(\omega)} \cos \theta(\omega) - j \sqrt{R(\omega)} \sin \theta(\omega) = |r(\omega)| \exp[-j\theta(\omega)] \quad (16)$$

式中  $R(\omega) = r(\omega)r^*(\omega)$  为测量得到的材料反射比,  $\theta(\omega)$  为反射波的相位角, 由(16)式与克拉默斯-克勒尼希关系, 即与(15)式相联系, 有下一积分成立

$$\theta(\omega) = - (\omega/\pi) \int_0^{\infty} [\ln R(\omega) / (s^2 - \omega^2)] ds \quad (17)$$

该式表明, 只要在整个频率范围内单独进行反射比  $R(\omega)$  的测量, 就能够求出在任何频率下反射波的相位角  $\theta(\omega)$ , 根据(16)式, 令实部和虚部分别相等, 则有

$$\left. \begin{aligned} [n^2(\omega) - 1 - k^2(\omega)] / \{ [n(\omega) + 1]^2 + k^2(\omega) \} &= \sqrt{R(\omega)} \cos \theta(\omega) \\ 2nk / \{ [n(\omega) + 1]^2 + k^2(\omega) \} &= \sqrt{R(\omega)} \sin \theta(\omega) \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

则得到光学参数  $n_r$  和  $k$  的计算式

$$\begin{aligned} n_r &= (1 - R) / (1 + R - 2 \sqrt{R} \cos \theta) \\ k &= - 2 \sqrt{R} \sin \theta / (1 + R - 2 \sqrt{R} \cos \theta) \end{aligned} \quad (19)$$

而相位角  $\theta(\omega)$  为

$$\theta(\omega) = (2\omega/\pi) \int_0^{\infty} \ln \sqrt{R(\omega) / (\omega_s^2 - \omega^2)} d\omega_s \quad (20)$$

(20) 式的积分范围, 由反射谱可知, 可以分为以下三段:  $\omega = \omega$  以下的低频段, 在这里  $R(\omega)$  近似不变; 积分中间段包括上至 90% ~ 100%, 下至  $10^{-4}$  的  $R(\omega)$  值; 在最末段  $R(\omega)$  在高频处又是近似不变的, 如图 2 所示。由数值分析可知, 在光谱两端的两个范围可精确的

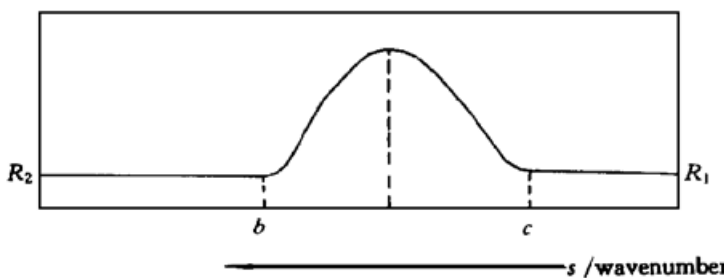


Fig. 2 Reflection spectrum of glass

计算。这是由于计算仅与式  $p p \int_a^b d\omega / (\omega^2 - \omega^2)$  有关, 式中  $a$  到  $b$  也就是  $\omega = 0$  到  $\omega_1$  或  $\omega = \omega_1$  到  $\infty$ ; 在中间段, 用计算机进行积分计算。但是在  $\omega = \omega$  处被积函数有一个奇点, 因此该积分主值不能直接用辛普生

积分或梯形积分计算。有两种方法可以克服这种困难: 1) 是分部积分及幂函数; 2) 在利用计算机计算时, 须作  $n^2$  次的内循环较少。考察积分

$$\int_0^a \ln \sqrt{R(\omega)/(\omega^2 - \omega^2)} d\omega \quad (21)$$

中  $R(\omega)$  是  $R$  在  $\omega$  处的常数值, 因此

$$\frac{2\omega}{\pi} \int_0^a \frac{\ln \sqrt{R(\omega)}}{\omega^2 - \omega^2} d\omega = \frac{2\omega}{\pi} \int_0^a \frac{\ln \sqrt{R(\omega)} - \ln \sqrt{R(\omega)}}{\omega^2 - \omega^2} d\omega \quad (22)$$

根据罗比大法则:

$$\lim [\ln \sqrt{R(\omega)} - \ln \sqrt{R(\omega)}]/(\omega^2 - \omega^2) = \lim [(1/R) - [1/R(\omega)]/4(\omega)] dR/d\omega \quad (23)$$

用这种方法计算, 可以通过在计算机产生如下函数而求出积分主值:

$$[\ln \sqrt{R(\omega)} - \ln \sqrt{R(\omega)}]/(\omega^2 - \omega^2) \quad (24)$$

该函数是一相当于  $\omega$  平滑变化的函数, 且可用梯形积分计算。在  $\omega = \omega$ , 该函数值足够的准确, 取为  $[f(\omega_{+1}) + f(\omega_{-1})]/2$ 。依据上面的分析, 结合图 2 推导出计算机计算模型如下:

1) 当  $0 < s < c$  时, (在低频段)  $R(s) = R_1$

$$\int_0^{\infty} \ln [R(x) - \ln R(s)]/(s^2 - x^2) dx = 0 + \int_b^c \ln R(x)/(s^2 - x^2) dx - \ln(R_2/R_1) \ln |(s-b)/(s+b)| \quad (25)$$

2) 当  $b > s \geq c$  时, (在中间段)  $R(s) = R(x)$

$$\int_0^{\infty} \ln [R(x) - \ln R(s)]/(s^2 - x^2) dx = \ln [R_1/R(s)] \ln |(c-s)/(c+s)| + \int_b^c \ln R(x)/\ln R(s)/(s^2 - x^2) dx - [\ln R_2/R(s)] \ln |(b-s)/(b+s)| \quad (26)$$

3) 当  $s \geq b$  时, (在高频段)  $R(s) = R_2$

$$\int_0^{\infty} \ln [R(x) - \ln R(s)]/(s^2 - x^2) dx = \ln (R_1/R_2) \ln |(s-c)/(s+c)| + \int_b^c \ln R(x)/\ln R_2/(s^2 - x^2) dx \quad (27)$$

所以, 相位角  $\theta(\omega) = - (s/\pi) \int [\ln R(x) - \ln R(s)]/(s^2 - x^2) dx$ , 在不同频率下可表示为

$$0 + (-\frac{s}{\pi}) \int_c^b \frac{\ln [R(x)/R_1]}{s^2 - x^2} dx + (\frac{s}{\pi}) (\ln \frac{R_2}{R_1} \ln |\frac{s-b}{s+b}|), \quad 0 < s < c \quad (28)$$

$$(-\frac{s}{\pi}) \ln [R_1/R(s)] \ln |(s-c)/(s+c)| - \frac{s}{\pi} \int_c^b \frac{\ln [R(x)/R(s)]}{s^2 - x^2} dx + \frac{s}{\pi} \ln \frac{R_2}{R(s)} \ln |\frac{s-b}{s+b}|, \quad c \leq s \leq b \quad (29)$$

$$\frac{s}{\pi} \ln \frac{R_1}{R_2} \ln |\frac{s-c}{s+c}| - \frac{s}{\pi} \int_c^b \frac{\ln [R(x)/R_2]}{s^2 - x^2} dx, \quad s > b \quad (30)$$

依据推导出的数学模型, 编制了计算程序。

### 3 结果及讨论

#### 3.1 计算方法的选取

对于研究氧化物玻璃空芯光纤包皮材料,了解其材料在中红外波段的光学常数折射率和消光系数是非常重要的,本文提出了三种计算途径,其一是利用  $K-K$  关系推导出的计算模型,其二是色散分析法,最后一种是斜入射法。色散分析法是一种尝试的计算方法,在计算时需先大概确定  $n_r$  和  $k$  的值,然后利用色散方程反算出反射率  $R$ ,再与测试的数据进行比较,这种计算方法在数据量很少的情况下是可以的,但在处理大批数据时十分繁琐。根据本工作测试出的红外反射率知,在波长范围  $2.5 \mu\text{m} \sim 40 \mu\text{m}$  内,要求计算出每个频率所对应的折射率,才能得到反常色散曲线,数据很多,工作量大,而且容易出错。另外,材料的折射率、消光系数和反射率之间有内在联系,这种计算不能够很明确的反应。

利用斜入射法计算时有两个十分关键的影响因素即入射角度和标准样品,本文利用这种方法选取不同的入射角计算了  $n_r$  和  $k$ ,发现它必须有合适的范围,否则误差是很大的;斜入射要求在测量时先选择标准样品,并且其折射率应该是已知的,这在中红外波段是非常困难的,这主要是因为选择的标准样品,一方面其性能要和所研究的玻璃材料相近,另一方面其折射率是已知的,在实际计算中难度比较大。利用克拉默斯-克勒尼希关系推导出的计算模型不存在上面的问题。这主要是因为,克拉默斯-克勒尼希关系已在许多研究领域中被采用,已经十分成熟。另外在数据处理中采用了最小二乘法进行曲线拟合,根据拟合出的  $n$  次多项式计算每个频率所对应的光学参数,在数据存储的同时,把它们三个之间的关系以曲线的形式反应出来,这样对了解参数之间的内在联系十分方便。为了提高计算速度,在编制计算程序时做了一些技巧处理,减少了  $n^2$  的循环指令。因此,在实际研究中采用了克拉默斯-克勒尼希关系式及推导出的适合于计算机计算的模型,对所研究系统氧化物玻璃的光学参数进行了计算,证明这种计算方法对研究氧化物玻璃空芯光纤的包皮材料是可行的,且十分有效。

#### 3.2 误差控制及分析

计算过程中误差控制主要采用拟合结果和测试曲线比较而进行。即根据测试的结果,对测试曲线进行分析,找出若干关键的点,输入误差控制范围,由拟合的结果与这些点进行比较,分析计算误差,若计算结果超出误差范围就会报警,因此应修正拟合多项式的次数,并重新进行曲线拟合,经过若干次的计算并和已知的数据比较,就可获得比较满意的结果。

#### 3.3 计算实例

根据以上分析,利用克拉默斯-克勒尼希关系推导出的计算模型编制了计算程序。计算了

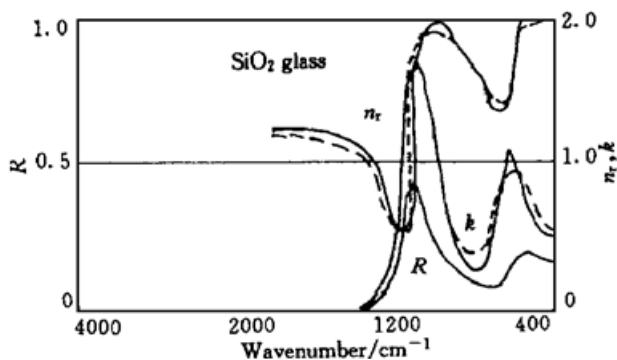


Fig. 3 Relation between  $R$  and  $n_r$ ,  $k$  of  $\text{SiO}_2$  glass.

—— Known data, - - - calculated data

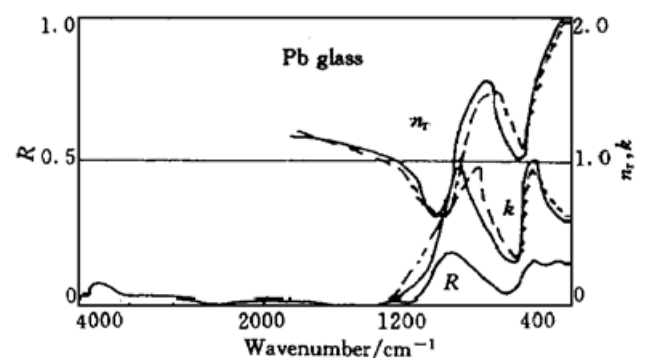


Fig. 4 Relation between  $R$  and  $n_r$ ,  $k$  of  $\text{PbO}$  glass.

—— Known data, - - - calculated data

SiO<sub>2</sub> 为 0.90 mol 的玻璃和 PbO 为 0.25 mol 的玻璃的  $n_r$ 、 $k$  曲线, 计算结果如图 3 和图 4 所示。并对结果进行了比较, 发现计算结果和已知结果<sup>[1]</sup>相差很小, 证明了计算模型和计算程序的可靠性。

**结 论** 通过数值分析法、电磁理论及结合材料的相关性能, 对计算氧化物玻璃材料的中红外光学参数的三种方法进行了比较, 结果是: 色散分析法计算量大, 且不能直接反映出参数之间的内在联系; 斜入射法由于受入射角度和标准样品选择的限制, 在实际操作中比较困难; 而利用 K-K 关系推导出的计算模型不受上面几方面的影响, 而且可以反应出材料的折射率和消光系数之间的内在联系, 对研究氧化物玻璃空芯光纤包皮材料来说是一种行之有效的途径, 同时推导出了适合于计算机计算的数学模型, 并编制了计算程序。

### 参 考 文 献

- [1] Hidaka T, Morikawa T, Shimada J. Hollow-core oxide-glass cladding optical fibers for middle-infrared region. *J. Appl. Phys.*, 1981, **52**(7): 4467~ 4471
- [2] Hidaka T, Kumada K, Shimada J. GeO<sub>2</sub>-InO-K<sub>2</sub>O glass as the cladding materials of 940 cm<sup>-1</sup> CO<sub>2</sub> laser light transmitting hollow-core waveguide. *J. Appl. Phys.*, 1989, **53**(8): 5484~ 5488
- [3] 陈 衡. 红外物理学. 北京: 国防工业出版社, 1985.
- [4] 密勒 R G J, 斯特 B C 著. 于铨林译. 红外光谱学的实验方法. 北京: 机械工业出版社, 1985.
- [5] 冯 康. 数值计算方法. 北京: 国防工业出版社, 1980.
- [6] Liu Jixiang, Han Jianjun, Zhan Liyuan. Calculation of infrared optical constants for CO<sub>2</sub> laser hollow waveguide materials. *J. Wuhan University of Technology*, 1996, **11**(2): 58~ 66

## Study on Calculation Method for Oxide Glasses Infrared Optical Constants

Han Jianjun      Liu Jixiang      Zhou Xuedong

(Institute of Materials Science and Engineering, Wuhan University of Technology, 430070)

(Received 23 March 1998; revised 17 August 1998)

**Abstract** Three calculating methods for oxide-glasses infrared optical constants including refractive index  $n_r$  and extinction coefficient  $k$  were discussed using numerical analysis, geometrical optics and electromagnetic theory. A simple method was deduced for calculating refractive index and extinction coefficient. It provides a useful way for study of the infrared oxide-glass materials.

**Key words** calculation method, infrared optical constants, Kramers-Kroning (K-K) relation.