

Н.Н. Сендер

канд. физ.-мат. наук, зав. кафедрой математического анализа, дифференциальных уравнений и их приложений

ИММЕРСИОННЫЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОПТИЧЕСКИХ ПОСТОЯННЫХ АНИЗОТРОПНЫХ ПОГЛОЩАЮЩИХ КРИСТАЛЛОВ

Разработан иммерсионный метод определения оптических постоянных анизотропных поглощающих кристаллов. Характерной чертой иммерсионного метода является возможность определения матрицы отражения с помощью измерений относительной матрицы отражения. Получены расчетные формулы для определения оптических постоянных анизотропных поглощающих одноосных, ромбических, моноклинных и триклинных кристаллов. Из результатов численного эксперимента следует, что решение обратной задачи для одноосных, ромбических, моноклинных и триклинных кристаллов оказывается устойчивым к ошибкам экспериментального определения углов ψ и Δ . Одно из достоинств данного метода заключается в возможности повысить точность и чувствительность измерений. Это особенно актуально при измерении оптических постоянных кристаллов с малой анизотропией, гиротропных кристаллов и кристаллов с шероховатой поверхностью

Характерной чертой излагаемого здесь иммерсионного подхода является возможность определения матрицы отражения с помощью измерений относительной матрицы отражения при падении света из среды с показателем преломления n_1 (например, воздуха) и из среды с показателем преломления n_2 (иммерсия). При обычных эллипсометрических измерениях без иммерсии полный набор измеряемых параметров получался при фиксированном угле падения φ (точнее при фиксированном $\xi = n \sin \varphi$) путём вращения кристалла вокруг нормали к границе [1–3]. Этим самым устранялась необходимость в многоугловых измерениях. С использованием иммерсии постоянство ξ достигается при условии

$$\xi = n_1 \sin \varphi_1 = n_2 \sin \varphi_2 = const, \quad (1)$$

где φ_1 и φ_2 – углы падения из среды с показателем преломления n_1 и n_2 соответственно. Используем равенство (1) при определении оптических постоянных кристаллов.

Для одноосного поглощающего кристалла путём его вращения вокруг нормали к границе всегда можно совместить плоскость падения с главной плоскостью падения. Для коэффициентов отражения s и p составляющих в этом случае имеем [4]

$$r_s = \frac{\eta - \eta_0}{\eta + \eta_0}, \quad r_p = \frac{\eta \sqrt{\varepsilon_0 \varepsilon_e - \varepsilon} \sqrt{\varepsilon_0 \sin^2 \theta + \varepsilon_e \cos^2 \theta - \xi^2}}{\eta \sqrt{\varepsilon_0 \varepsilon_e + \varepsilon} \sqrt{\varepsilon_0 \sin^2 \theta + \varepsilon_e \cos^2 \theta - \xi^2}}, \quad (2)$$

где $\eta = n \cos \varphi$, $\eta_0 = \sqrt{\varepsilon_0 - \xi^2}$, θ – угол между нормалью \vec{q} к границе раздела и направлением оптической оси \vec{c} , $\varepsilon = n^2$ – диэлектрическая постоянная изотропной среды.

Проводя измерения в первой среде $\left(\rho_1 = \frac{r_p}{r_s} = tg \psi_1 e^{i \Delta_1} \right)$ и во второй среде $\left(\rho_2 = \frac{r_p}{r_s} = tg \psi_2 e^{i \Delta_2} \right)$, используя (2), приходим к уравнениям

$$\sqrt{\varepsilon_0 \varepsilon_e} \eta_1 (\eta_1 K_1 + \eta_0) = \varepsilon_1 \sqrt{\varepsilon_0 \sin^2 \theta + \varepsilon_e \cos^2 \theta - \xi^2} (\eta_0 K_1 + \eta_1), \quad (3)$$

$$\sqrt{\varepsilon_0 \varepsilon_e} \eta_2 (\eta_2 K_2 + \eta_0) = \varepsilon_2 \sqrt{\varepsilon_0 \sin^2 \theta + \varepsilon_e \cos^2 \theta - \xi^2} (\eta_0 K_2 + \eta_2), \quad (4)$$

где $K_{1,2} = \frac{1 - \rho_{1,2}}{1 + \rho_{1,2}}$, $\eta_{1,2} = n_{1,2} \cos \varphi_{1,2}$, $\varepsilon_{1,2} = n_{1,2}^2$. Взяв их отношение, с учётом (1) получим

квадратное уравнение относительно неизвестной величины η_0

$$a\eta_0^2 + b\eta_0 + c = 0, \quad (5)$$

$$a = K_2\eta_1\varepsilon_2 - K_1\eta_2\varepsilon_1, \quad c = \eta_1^2\eta_2\varepsilon_2K_1 - \eta_2^2\eta_1\varepsilon_1K_2, \quad (6)$$

$$b = \eta_1^2\varepsilon_2K_1K_2 + \eta_1\eta_2\varepsilon_2 - \eta_2^2\varepsilon_1K_1K_2 - \eta_1\eta_2\varepsilon_1,$$

индексы 1,2 относятся к первой и второй среде, в которых проводятся измерения.

Квадратное уравнение (5) имеет два решения. Критерием выбора корня чаще всего служит положительность действительной части корня. Затем из $\eta = \sqrt{\varepsilon_0 - \xi^2}$ находим $\varepsilon_0 = N_0^2$ ($N_0 = N_0' - iN_0''$). Отметим, что для определения ε_0 нет необходимости знать угол θ , который может быть найден эллипсометрически из дополнительных измерений [4]. Для определения $\varepsilon_e = N_e^2$ ($N_e = N_e' - iN_e''$) можно воспользоваться одним из уравнений (3) или (4). Возьмём, например, (3), тогда выражение для нахождения ε_e имеет вид

$$\varepsilon_e = \frac{\varepsilon_1^2 (\varepsilon_0 \sin^2 \theta - \xi^2)}{\varepsilon_0 \eta_1^2 F - \cos^2 \theta \cdot \varepsilon_1^2}, \quad (7)$$

где $F = \left(\frac{\eta_1 K_1 + \eta_0}{\eta_0 K_1 + \eta_1} \right)^2$.

Если оптическая ось кристалла перпендикулярна границе, нахождение ε_0 и ε_e также осуществляется описанным выше образом.

Найти диэлектрические постоянные ε_0 и ε_e можно несколько по-иному. Как показано в [5] при условии (1) довольно просто вычисляются абсолютные значения коэффициентов отражения r_s и r_p . Так, r_p находится из решения квадратного уравнения [5]

$$\alpha r_p^2 + \beta r_p + \gamma = 0,$$

$$\alpha = r_p^0 \rho_2 - r_s^0, \quad \gamma = r_s^0 \rho_1 \rho_2 - r_p^0 \rho_1, \quad (8)$$

$$\beta = r_s^0 r_p^0 (1 - \rho_1 \rho_2) + \rho_1 - \rho_2,$$

где $r_{s,p}^0$ – френелевские коэффициенты отражения при падении света из среды с показателем преломления n_1 на границу её со средой, имеющей показатель преломления n_2 .

Зная r_p , вычисляем $r_s = \frac{r_p}{\rho_1}$, а затем исходя из формул (2), находим N_0 и N_e

$$N_0 = \sqrt{\xi^2 + \eta^2 K_s^2}, \quad K_s = \frac{1 - r_s}{1 + r_s}, \quad (9)$$

$$N_e = \sqrt{\frac{\xi^2 - \varepsilon_0 \sin^2 \theta}{\varepsilon^2 \cos^2 \theta - \eta^2 \varepsilon_0 K_p^2}}, \quad K_p = \frac{1 - r_p}{1 + r_p}.$$

Корень уравнения (8) удовлетворяет условию $|r_p|^2 < 1$. Входящие в (8) френелевские коэффициенты отражения на границе воздух – иммерсия r_p^0 и r_s^0 известны, поскольку известны показатели преломления этих сред.

Знание абсолютных значений элементов матрицы отражения позволяет увеличить число независимых измерений на одном срезе кристалла, но и значительно упро-

щает решение обратной задачи эллипсометрии. Так в случае $\vec{c} \parallel \vec{q}$, когда другие методики не дают решения обратной задачи иммерсионная методика позволяет получить явные выражения для определения ε_0 и ε_e (в (7) необходимо, чтобы $\theta = 0$).

Как и для одноосных кристаллов, использование иммерсионных измерений позволяет решение обратной задачи для ромбических кристаллов получить в аналитическом виде, причем достаточно провести измерения на одной грани кристалла. В этом случае главные значения тензора диэлектрической проницаемости могут быть найдены, когда одна из кристаллографических осей перпендикулярна грани.

Пусть две кристаллографические оси, например, X и Y лежат в плоскости грани, а третья ось Z перпендикулярна границе, причем ось X перпендикулярна плоскости падения (рисунок 1 $\vec{OX} \parallel \vec{a}$ и $\theta = 0$). Тогда для коэффициентов отражения S и P составляющих имеем [6–8].

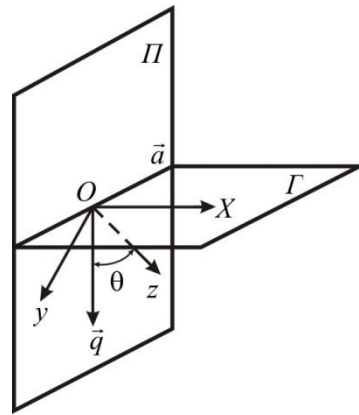


Рисунок 1 – Ориентация кристаллографических осей ромбического кристалла относительно нормали \vec{q} к плоскости границы Γ . Ось X лежит в плоскости Γ , а оси Y и Z лежат в плоскости Π .

$$r_s = \frac{\eta - \eta_a}{\eta + \eta_a}, \quad r_p = \frac{\varepsilon_y \eta - \varepsilon \eta_b}{\varepsilon_y \eta + \varepsilon \eta_b}, \quad (10)$$

$$\eta_a = \sqrt{\varepsilon_x - \xi^2}, \quad \eta_b = \sqrt{\varepsilon_y (1 - \xi^2 / \varepsilon_z)}, \quad (11)$$

где $\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z$ – главные значения комплексного тензора диэлектрической проницаемости кристалла, $\varepsilon = n^2$ – диэлектрическая постоянная изотропной среды.

Как и в случае одноосных кристаллов, измерения проводим в первой (ρ_1) и второй (ρ_2) среде. Затем, используя (10) и (11), приходим к уравнениям

$$\varepsilon_y \eta_1 (\eta_1 K_1 + \eta_a) = \varepsilon_1 \eta_b (\eta_a K_1 + \eta_1), \quad (12)$$

$$\varepsilon_y \eta_2 (\eta_2 K_2 + \eta_a) = \varepsilon_2 \eta_b (\eta_a K_2 + \eta_2), \quad (13)$$

где $K_{1,2} \cdot \eta_{1,2} \cdot \varepsilon_{1,2}$ имеют такой же вид и для одноосных кристаллов. Далее, беря отношение (12) и (13), с учетом $\xi = n_1 \sin \varphi_1 = n_2 \sin \varphi_2$ приходим к уравнениям (5), (6), где η_0 заменяется на η_a .

Повернув кристалл на 90° вокруг нормали к границе (при этом в (10), (11) следует провести замену $\varepsilon_x \rightleftharpoons \varepsilon_y$) и повторив измерения, придем к уравнениям (5), (6),

где $\eta_o = \eta_a = \sqrt{\varepsilon_y - \xi^2}$. Таким образом мы найдем ε_x и ε_y . Оставшиеся значения ε_z нетрудно найти из любого соотношения (12) или (13), например (12), тогда выражение для нахождения ε_z имеет вид

$$\varepsilon_z = \frac{\varepsilon_1^2 \xi^2 (\eta_a K_1 + \eta_1)^2}{\varepsilon_1^2 (\eta_a K_1 + \eta_1)^2 - \eta_1^2 \varepsilon_y (\eta_1 K_1 + \eta_a)^2}, \quad (14)$$

который аналогичен (7).

Найти диэлектрические постоянные ε_x , ε_y , ε_z можно по-иному, аналогично тому, как это сделано для одноосных кристаллов. В рассмотренном нами случае ориентации кристалла матрица отражения диагональна. Абсолютное значение r_p находится из уравнения (8). Зная r_p , вычисляем $r_s = r_p / \rho_1$, затем по формулам (10), (11) нетрудно рассчитать $\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z$.

Рассмотрим более сложный случай, когда в плоскости границы лежит только одна кристаллографическая ось кристалла, например, ось X , а две другие ориентированы произвольно. Обозначим через θ угол между z и нормалью к границе \vec{q} (рисунок 1). Поворачивая кристалл вокруг нормали, по положению гашения скрещенных поляризатора и анализатора, установленных на пропускание S и P компонент, всегда можно совместить плоскость падения с плоскостью, в которой лежат оси Y и Z . Ориентация кристаллографических осей ромбического кристалла относительно нормали \vec{q} к плоскости границы Γ . Ось X лежит в плоскости Γ , а оси Y и Z лежат в плоскости Π . Ось X тогда будет перпендикулярна плоскости падения. В этом случае, как показано в [6–8], коэффициент отражения r_p имеет такой же вид, как и для одноосного кристалла (2), если заменить $\varepsilon_o \rightarrow \varepsilon_y$, $\varepsilon_e \rightarrow \varepsilon_z$. Выражение для r_s совпадает с (10). Для этой плоскости падения можно осуществить два независимых измерения, например, в воздухе и в иммерсионной жидкости и тем самым найти r_s и r_p . Тогда из (10) определяется ε_x . Второе измерение позволяет выразить ε_z через ε_y

$$\varepsilon_z = \frac{\varepsilon^2 (1+r_p)^2 (\xi^2 - \varepsilon_y \sin^2 \theta)}{\varepsilon^2 (1+r_p)^2 \cos^2 \theta - (1-r_p)^2 \eta^2 \varepsilon_y}. \quad (15)$$

Для получения полного набора измеряемых параметров следует воспользоваться какой-либо другой плоскостью падения. Удобно, повернув кристалл на 90° , совместить плоскость падения с осью X . При этом, однако P и S поляризации уже не являются собственными поляризациями, то есть на границе будет иметь место трансформация P поляризации в S и наоборот. Этот процесс можно описать недиагональными элементами r_{PS}, r_{SP} матрицы отражения r_{ik} , $i, k = s, p$. Опуская детали решения, приведем окончательные выражения, с помощью которых определяются элементы матрицы r_{ik} . В кристалле возникает две преломленные волны, нормальные составляющие векторов рефракции которых (обозначим их η_1 и η_2) находятся из биквадратного уравнения

$$\left[1 - \frac{\eta^2}{\varepsilon_x} - \xi^2 \left(\frac{1}{\varepsilon_y} + b \cos^2 \theta \right) \right] \left[1 - (\eta^2 + \xi^2) \left(\frac{1}{\varepsilon_y} + b \sin^2 \theta \right) \right] = \\ = \xi^2 (\xi^2 + \eta^2) b^2 \sin^2 \theta \cdot \cos^2 \theta, \quad (16)$$

где $b = 1/\varepsilon_z - 1/\varepsilon_y$. Векторы магнитного поля преломленных волн $\vec{H}_{1,2}$ удобно представить через единичные векторы фазовой нормали этих волн $\vec{n}_{1,2}$ и нормаль к плоскости падения \vec{a} :

$$\vec{H}_1 = \mu_1 \vec{a} + [\vec{n}_1 \vec{a}], \mu_1 = \frac{\xi(\xi^2 + \eta_1^2)^{1/2}}{1 - \eta_1^2/\varepsilon_x - \xi^2(1/\varepsilon_y + b \cos^2 \theta)}, \quad (17)$$

$$\vec{H}_2 = \vec{a} + \mu_2 [\vec{n}_2 \vec{a}], \mu_2 = \frac{(\xi^2 + \eta_2^2)^{1/2} \xi b \sin \theta \cdot \cos \theta}{1 - (\xi^2 + \eta_2^2)(1/\varepsilon_y + b \cos^2 \theta)}. \quad (18)$$

Здесь для η_1 и η_2 выбираются такие решения уравнения (16), которые дают μ_1 , μ_2 конечные значения. С учетом введенных в (16)–(18) величин имеем

$$r_{SS} = [(\eta_1 - \eta)(\varepsilon \eta_2 / \varepsilon_x + \eta) - \mu_1 \mu_2 (\eta_2 - \eta)(\varepsilon \eta_1 / \varepsilon_x + \eta)] \cdot X^{-1}, \quad (19)$$

$$r_{SP} = 2n\eta\mu_2(\eta_1 - \eta_2)(Xn_2)^{-1},$$

$$r_{PS} = -2n\eta\mu_1 n_1(\eta_1 - \eta_2)(\varepsilon_x X)^{-1}, \quad (20)$$

$$r_{PP} = [(\eta_1 + \eta_2)(\varepsilon \eta_2 / \varepsilon_x - \eta) - \mu_1 \mu_2 (\eta_2 + \eta)(\varepsilon \eta_1 / \varepsilon_x - \eta)] \cdot X^{-1},$$

$$X = -(\eta_1 + \eta)(\varepsilon \eta_2 / \varepsilon_x + \eta) + \mu_1 \mu_2 (\eta_2 + \eta)(\varepsilon \eta_1 / \varepsilon_x + \eta).$$

Если теперь воспользоваться измерением в воздухе при азимуте линейной поляризации падающей волны 45° , то найдем величину

$$\rho = \frac{r_{PP} + r_{PS}}{r_{SP} + r_{SS}}. \quad (21)$$

Правая часть этого выражения содержит только ε_y , поскольку ε_z исключается с помощью соотношения (15), а ε_x известно. Найти ε_y численным решением уравнения (21) не представляет трудностей.

Описанный выше подход можно обобщить и на моноклинные и триклинные кристаллы. Причем, в случае моноклинных кристаллов получаются аналитические выражения, связывающие оптические постоянные с измеряемыми параметрами [9].

Удобно вести тензор χ , обратный ε : $\chi = \varepsilon^{-1}$. Решая граничную задачу, находим компоненты матрицы отражения R , связывающую S и P компоненты отраженной и падающей волн:

$$r_{SS} = \left\{ \mu_1 (\eta - \eta_1) (n^2 l_2 - \eta) - \mu_2 (\eta - \eta_2) (n^2 l_1 - \eta) \right\} \cdot D^{-1},$$

$$r_{PP} = - \left\{ \mu_1 (\eta + \eta_1) (n^2 l_2 + \eta) - \mu_2 (\eta + \eta_2) (n^2 l_1 + \eta) \right\} \cdot D^{-1},$$

$$r_{SP} = 2n\eta\mu_1\mu_2(\eta_1 - \eta_2) \cdot D^{-1}, \quad (22)$$

$$r_{PS} = 2n\eta(l_1 - l_2) \cdot D^{-1},$$

$$D = \mu_1 (\eta + \eta_1) (n^2 l_2 - \eta) - \mu_2 (\eta + \eta_2) (n^2 l_1 - \eta).$$

Здесь $\eta = n \cos \varphi$ – нормальная составляющая вектора рефракции падающей волны \vec{m} ($m^2 = n^2$), n – показатель преломления изотропной среды, φ – угол падения. Нормальные составляющие η_i ($i = 1, 2$) векторов рефракции преломленных волн $\vec{m}_{1,2}$ ($m_{1,2}^2 = n_{1,2}^2$), $n_{1,2}$ – показатели преломления находятся из уравнения нормалей. В

системе координат с осями x_1, x_2, x_3 (x_1 – перпендикулярна плоскости падения, x_3 – границе) оно имеет вид

$$(1 - n_i^2 / \chi_{11}) \left[1 - \left(\xi^2 / \chi_{33} + \chi_i^2 / \chi_{22} - 2\eta\xi\chi_{33} \right) \right] - n_i^2 (\xi\chi_{13} - \eta_i\chi_{12}) = 0. \quad (23)$$

Параметры μ_i ($i=1,2$) определяют поляризацию преломленных волн, вектор магнитного поля которых можно представить в виде $\vec{H}_i = \vec{x}_1 + \mu_i [\vec{m}_i \vec{x}_1]$, $l_{1,2}$ – тангенциальные составляющие векторов электрического поля этих волн

$$\mu_i = \frac{\xi\chi_{13} - \eta_i\chi_{12}}{1 - (\eta_i^2 + \xi^2)\chi_{11}}, \quad l_i = \vec{E}x_2 = \xi\chi_{23} - \eta_i\chi_{22} + \mu_i m_i^2 \chi_{12} \quad (24)$$

Пусть вещественная часть χ' комплексного тензора χ диагонализуется в системе координат x, y, z , причем ось z параллельна оси симметрии 2-го порядка (или перпендикулярна плоскости симметрии) и, совпадающая с кристаллографической осью кристалла, лежит в плоскости границы. Мнимая часть χ'' имеет диагональный вид в иной системе координат x', y', z' , развернутой вокруг z на угол ψ , поэтому в осях x, y, z

$$\chi = \begin{pmatrix} \chi_1 & \tilde{\chi}_{12} & 0 \\ \tilde{\chi}_{12} & \chi_2 & 0 \\ 0 & 0 & \chi_3 \end{pmatrix}, \quad \begin{cases} \chi_1 = \chi'_1 - i(\chi''_1 \cos^2 \psi + \chi''_2 \sin^2 \psi), \\ \chi_2 = \chi'_2 - i(\chi''_1 \sin^2 \psi + \chi''_2 \cos^2 \psi), \\ \tilde{\chi}_{1,2} = i(\chi''_1 - \chi''_2) \sin \psi \cdot \cos \psi, \end{cases} \quad (25)$$

причем $\chi_3 = \chi'_3 - i\chi''_3$ не зависит от ψ . Для измерений на отдельной частоте, физически различным ориентациям осей x', y' относительно x, y соответствуют значения ψ .

Зададим ориентацию оси x относительно нормали к границе кристалла (ось X_3) углом θ .

Для определения всех восьми параметров кристалла воспользуемся предложенным в [10] подходом, который позволяет с привлечением эллипсометрических измерений в иммерсии определить 2×2 матрицу отражения R для границы произвольного кристалла.

Вращением кристалла вокруг нормали к границе определим положение плоскости падения, ортогональной оси z , когда матрица R диагональна. Проводя измерения в воздухе и иммерсии при условии постоянства тангенциальной составляющей вектора рефракции падающей волны ξ , найдем комплексные коэффициенты отражения r_{SS} и r_{PP} . Согласно (22)–(24) они определяются через компоненты тензора χ в системе осей x_1, x_2, x_3 связанных с ориентацией границы кристалла и плоскости падения. Последнее в свою очередь выражаются, для рассматриваемой ориентации кристалла и плоскости падения, через искомые параметры следующим образом

$$\begin{aligned} \chi_{11} &= \chi_3, \quad \chi_{13} = \chi_{12} = 0, \\ \chi_{22} &= b = b_+ + b_- \cos 2\theta - \tilde{\chi} \sin 2\theta, \quad \chi_{33} = q = b_+ - b_- \cos 2\theta + \tilde{\chi} \sin 2\theta, \\ \chi_{23} &= P = -(b \sin 2\theta + \tilde{\chi} \cos 2\theta), \quad b_{\pm} = \frac{1}{2}(\chi_1 \pm \chi_2). \end{aligned} \quad (26)$$

Тогда для преломленных в кристалле волн имеем:

$$n_2^2 = 1/b, n_1^2 = \varepsilon_3, \mu_1 = \mu_2 = 0,$$

поэтому

$$r_{SS} = \frac{\eta - \eta_1}{\eta + \eta_1}, \quad r_{PP} = \frac{\eta - n^2 \sqrt{b - \xi^2 (bq - p^2)}}{\eta + n^2 \sqrt{b - \xi^2 (bq - p^2)}}. \quad (27)$$

Поскольку левые части в этих соотношениях известны, то из первого сразу же находим $\varepsilon_3 = 1/\chi_3 = \xi^2 + \eta^2 K_S^2$, $K_S = (1 - r_{SS})(1 + r_{SS})$, а из второго получаем комплексное уравнение:

$$b - \xi^2 (bq - p^2) = C_0^2, \quad C_0 = K_P \frac{\eta}{n^2}, \quad K_P = \frac{1 - r_{PP}}{1 + r_{PP}}. \quad (28)$$

Дальнейшее определение шести оставшихся параметров удобно свести к нахождению вначале трех комплексных величин b, q, p , затем на втором этапе, из соотношений (26) могут быть определены $\chi_{1,2}, \tilde{\chi}$ и θ . Таким образом необходимо получить систему трех комплексных уравнений для величин b, q, p . Одно из них – уравнение (28). Два других получим, если проведем измерения, повернув кристалл на 90° вокруг нормали x_3 . При этом кристаллографическая ось z будет параллельна x_2 , а для компонент тензора χ в системе координат x_1, x_2, x_3 имеем $\chi_{12} = \chi_{23} = 0$, $\chi_{11} = b$, $\chi_{22} = \chi_3$, $\chi_{33} = q$, $\chi_{13} = p$. Уравнение нормалей (23) для такой ориентации кристалла имеет довольно сложный вид. Однако, если учесть имеющееся в нашем распоряжении уравнение (28), оно упрощается и из него находим

$$\eta_{1,2}^2 = \frac{C_0^2 + \chi_3 (1 - b\xi^2) \pm \left\{ \left[C_0^2 + \chi_3 (1 - b\xi^2) \right]^2 - 4b\chi_3 \left[1 - \xi^2 (q + C_0^2) \right] \right\}^{1/2}}{2\chi_3 b}. \quad (29)$$

Остальные величины, через которые выражаются коэффициенты отражения (22), имеют вид: $l_{1,2} = -\chi_3 \eta_{1,2}$, $\mu_{1,2} = \xi P / (1 - n_{1,2}^2 b)$. Определяя r_{SS} и r_{PP} , получим два недостающих уравнения. С учетом (22) после перегруппировки членов запишем их в следующей форме

$$\begin{aligned} \mu_1 (\eta + \eta_2 \tilde{\chi}_3) (\eta K_S^{\parallel} + \eta_1) &= \mu_2 (\eta + \eta_1 \tilde{\chi}_3) (\eta K_S^{\parallel} + \eta_2), \\ \mu_1 (\eta + \eta_1) (\eta K_P^{\parallel} + \tilde{\chi}_3 \eta_2) &= \mu_2 (\eta + \eta_2) (\eta K_P^{\parallel} + \tilde{\chi}_3 \eta_1). \end{aligned} \quad (30)$$

Здесь $K_{S,P}^{\parallel} = (r_{SS,PP} - 1) / (r_{SS,PP} + 1)$, $\tilde{\chi}_3 = n^2 / \varepsilon_3$ – известные величины (знак \parallel означает ориентацию кристалла с $z \parallel x_2$). Система (30) содержит две неизвестные величины – b и q . Однако в (30) они содержатся под знаком радикала, поэтому удобно переписать ее, разделив одно уравнение на второе и вычтя одно из другого. Затем, разрешая получившуюся систему уравнений относительно $\eta_1 \eta_2, \eta_1 + \eta_2$ и избавляясь от радикалов, получим для b квадратное уравнение (31)

$$b^2 \left[\eta^2 N_1 (2N_3 - \xi^2 N_1) - N_2^2 \right] + b \left[\eta^2 N_1^2 (C_0^2 \varepsilon_3 + 1) - 2M (A_+ N_2 - \eta^2 N_1 B) \right] - (A_+ M)^2 = 0, \quad (31)$$

$$N_1 = A_- B + A_+ F, \quad N_2 = \frac{\eta^2}{\tilde{\chi}_3} A_- D - \xi^2 A_+ (K_P^{\parallel} - 1),$$

$$N_3 = \xi^2 B (1 - K_P^{\parallel}) - \frac{\eta^2}{\tilde{\chi}_3} DF, \quad M = K_P^{\parallel} - 1 - n^2 (K_S^{\parallel} - 1) C_0^2, \quad (32)$$

$$A_{\pm} = \tilde{\chi}_3 (K_S^{\parallel} - 1) \pm (K_P^{\parallel} - 1), \quad B = K_S^{\parallel} K_P^{\parallel} - 1,$$

$$D = \tilde{\chi}_3 K_S^{\parallel} (K_P^{\parallel} - 1) + K_P^{\parallel} (K_S^{\parallel} - 1), \quad F = K_P^{\parallel} - K_S^{\parallel}.$$

Зная b , определим q

$$q = \frac{1}{\xi^2} - C_0^2 - \frac{1}{b\varepsilon_3} \left(\frac{bN_3 + MB}{N_1\xi} \right)^2. \quad (33)$$

Величина P находится из (28). Неизвестные $\chi_{1,2}, \tilde{\chi}, \theta$ определяются далее из соотношений (26) элементарно.

На основе разработанных методов иммерсионного определения оптических постоянных поглощающих одноосных, ромбических, моноклинных и триклинных кристаллов был составлен комплекс программ по их определению.

Для проверки устойчивости решения обратной задачи к ошибкам в определении эллипсометрических углов ψ и Δ был проведен численный эксперимент на ЭВМ. В расчетах не учитывался переходной слой на поверхности кристалла. По прямой задаче рассчитывались коэффициенты отражения $r_{PP}, r_{SS}, r_{PP}^{\parallel}$ и r_{SS}^{\parallel} , а по ним измеряемые эллипсометрические углы. В качестве модели для расчетов был выбран кристалл $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ [11]. Значения $N_x = \sqrt{\varepsilon_x} = 2,282 - i0,013$, $N_z = \sqrt{\varepsilon_z} = 2,455 - i0,043$, $\psi = 23^\circ 50'$ приведены в [11], а N_y и θ полагали равным $2,233 - i0,022$ и 30° . Затем в эллипсометрические углы ψ и Δ вводилась ошибка измерений не превышавшая $\pm 1'$. На основе приведенных соотношений (27)–(33) решалась обратная задача и, рассчитывались значения $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$, а также углы θ и ψ . Поскольку диэлектрическая постоянная ε_3 вычисляется также как и ε_0 в одноосных кристаллах, то ε_3 и ε_0 имеют одинаковую точность определения. В модельных расчетах она составила $1 \cdot 10^{-3}$. Значения ε_1 и ε_2 рассчитываются по довольно громоздким формулам, поэтому в расчетах происходит накопление ошибки, что и наблюдалось на численном эксперименте. При выбранной точности измерений эллипсометрических углов $\pm 1'$ значения ε_1 и ε_2 имеют точность не выше $5 \cdot 10^{-2}$.

Хуже всего определяются значения углов θ и ψ . Ошибка в определении θ может достигать несколько градусов и более десяти градусов для ψ , который по программе рассчитывается последним. Отметим, что и для одноосных кристаллов ошибка в определении угла θ составляет также несколько градусов. В тоже время такая точность определения θ никак не влияет на точность нахождения значений ε_1 и ε_2 , если угол θ задавался точно, то это мало влияло на вычисление значения ε_1 и ε_2 . С помощью численного эксперимента анализировались также зависимости точности определения $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ от угла падения, показателя преломления иммерсии. Как показали расчеты, изменение угла падения и показателя преломления также мало влияют на точность определения $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$.

Из результатов численного эксперимента следует, что решение обратной задачи для одноосных, ромбических, моноклинных и триклинных кристаллов, оказывается устойчивым к ошибкам экспериментального определения углов ψ и Δ .

Одно из достоинств метода иммерсионной эллипсометрии заключается в возможности повысить точность и чувствительность измерений. Это особенно актуально при измерении оптических постоянных кристаллов с малой анизотропией, гиротропных кристаллов и с шероховатой поверхностью.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пахомов, А. Г., Определение оптических постоянных одноосных поглощающих кристаллов методом эллипсометрии / А. Г. Пахомов, А. Ф. Константинова, В. Я. Посыльный // Ковариантные методы в теоретической физике. Оптика и акустика : сб. ст. / ИФ АН БССР. – Минск, 1981. – С. 147–155.
2. Пахомов, А. Г., Определение показателей преломления и коэффициентов поглощения одноосных кристаллов методом эллипсометрии / А. Г. Пахомов, В. А. Яковлев, А. Ф. Константинова // ЖТФ. – 1981. – Т. 51, № 5. – С. 1013–1015.
3. Филиппов, В. В. Применение иммерсионной эллипсометрии для определения оптических постоянных поглощающих одноосных и ромбических кристаллов / В. В. Филиппов, Н. Н. Сендер // Кристаллография. – 1989. – Т. 34, № 4. – С. 905–908.
4. Федоров, Ф. И. Оптика анизотропных сред / Ф. И. Федоров. – Минск : изд. АН БССР, 1958. – 456 с.
5. Швец, В. А. О возможности определения комплексных коэффициентов отражения методом эллипсометрии / В. А. Швец // Оптика и спектроскопия. – 1983. – Т. 55, № 3. – С. 558–560.
6. Федоров, Ф. И. Отражение и преломление света прозрачными кристаллами / Ф. И. Федоров, В. В. Филиппов. – Минск : Наука и техника, 1976. – 222 с.
7. Филиппов, В. В. Определение оптических постоянных поглощающих ромбических кристаллов методом иммерсионной эллипсометрии / В. В. Филиппов [и др.] // Эллипсометрия – метод исследования поверхности твердых тел : сб. ст. / СО АН СССР. – Новосибирск, 1991. – С. 28–33.
8. Филиппов, В. В. Optical constants of TbFeO₃ measured by the immersion ellipsometry method at wavelength 0,63 μm . / В. В. Филиппов, Н. Н. Сендер, И. Д. Ломако // J. Phys. D. Appl. Phys. – 1994. – № 27. – P. 1964–1967.
9. Филиппов, В. В. К эллипсометрии поглощающих низкосимметричных кристаллов / В. В. Филиппов // Оптика и спектроскопия – 1989. – Т. 67, № 1. – С. 84–86.
10. Филиппов, В. В. Определение 2×2 матрицы отражения с помощью иммерсионных эллипсометрических измерений / В. В. Филиппов, М. М. Карпук // Оптика и спектроскопия – 1987. – Т. 63, № 6. – С. 1392–1394.
11. Emslie, A. G. Determination of the complex dielectric tensor of triclinic / A. G. Emslie, J. R. Aronson // J. Opt. Soc. Am. – 1983. – V. 73, № 16. – P. 916–919.

Рукапіс паступіў у рэдакцыю 10.10.2015

Sender N.N. Immersion Method for Determining Optical Constants of Anisotropic Absorbing Crystals

The immersion method for determining the optical constants of the anisotropic absorbing crystals is designed. A characteristic feature of the immersion method is the ability to determine the reflection matrix by measuring the relative reflection matrix. The calculating formulas for the determination of the optical constants of absorbing anisotropic uniaxial, orthorhombic, monoclinic and triclinic crystals are got. The results of numerical experiment show that the solution of the inverse problem for uniaxial, orthorhombic, monoclinic and triclinic crystals is stable to errors of experimental determination of the angles ψ and Δ . One advantage of this methods is the ability to increase the accuracy and sensitivity of measurement. This is especially true while measuring the optical constants of crystals with small anisotropy, gyrotropic crystals and crystals with a rough surface.