

基于色散傅里叶变换光谱学原理的 n 、 k 、 d 同时测定方法

孔凡平

J. R. Birch

(中国科学院上海技术物理研究所)

(National Physical Laboratory, U. K.)

摘要——本文从傅里叶变换光谱学理论出发，论证基于色散傅里叶变换光谱学原理同时测定平板样品 n 、 k 、 d 的可能性，并给出了初步的实验结果。

一、引言

介质的光学常数描述了电磁辐射在其中的传输行为，它们的数值和介质材料自身的微观组成又有密切的联系，因此，光学常数及其频率关系的测定是材料研究的重要方面。色散傅里叶变换光谱技术(DFTS)是在宽谱范围内精确测定介质光学常数(或复数折射系数)的有效手段。在 DFTS 测量研究中，待测样品放置在干涉仪的一个主臂上，主臂光束与样品相互作用而引入的电场矢量振幅衰减和相位改变信息会直接反映在干涉函数以及经傅里叶变换而得到的复原谱中。因而，DFTS 有可能用来同时测定介质的复数折射系数的实部(折射系数 n)和虚部(消光系数 k)。当然，在根据测量结果计算时，还必须考虑样品外形、几何尺度和表面状态的影响。特别是样品厚度(d)在测量过程中会发生变化的情形， n 、 k 、 d 的同时测定则是提高测量精度的关键^[1]。

本文论证了应用透射模式 DFTS 技术同时测定 n 、 k 、 d 的可能性，并提出了初步的实验结果。同样的概念和分析方法亦适用于反射模式的测量过程。由于透射测量时干涉仪主臂光束与样品相互作用而引入的电场矢量相位改变量要比反射测量时大得多，相应的测量精度高，所以，除了介质吸收过强而使透射测量无法实现的情况外，广泛采用透射测量模式。

二、理论分析

在 DFTS 干涉仪系统中，输出端观测到的总电场 \hat{E}_R 应由两部分构成：来自定镜臂的 \hat{E}_F 和来自动镜臂的 \hat{E}_M ，即 $\hat{E}_R = \hat{E}_F + \hat{E}_M$ 。任意假设样品放置在定镜臂上，则来自该主电场臂的分量 \hat{E}_F 应包含多种成份，除了主干涉光束(1, 1)光束外，还有经样品内反射后再出射的诸光束，如(2, 1)、(3, 1)光束等。光束标号(K, L)的含义是：光束穿越样品 $2K$ 次，经

本文 1985 年 3 月 7 日收到。

后镜面反射 L 次。由图 2 可见, 这些光束所对应的电场矢量传输因子不同。若以图中参考面为基准, 则光束自参考面射向镜面、经镜面反射后返回并最终离开参考面过程中的电场矢量传输因子分别为:

$$\hat{a}_{(0,1)}(\tilde{\nu}) = \exp 2\pi i \tilde{\nu} (2D + 2d) \cdot \hat{r}_M, \quad (1)$$

$$\hat{a}_{(1,1)}(\tilde{\nu}) = \hat{t}_{VS}^2 \cdot \hat{t}_{SV}^2 \hat{a}^2 \exp 2\pi i \tilde{\nu} \cdot 2D \cdot \hat{r}_M, \quad (2)$$

$$\hat{a}_{(2,1)}(\tilde{\nu}) = 2\hat{t}_{VS}^2 \cdot \hat{t}_{SV}^2 \hat{r}_{SV}^2 \hat{a}^4 \exp 2\pi i \tilde{\nu} \cdot 2D \cdot \hat{r}_M. \quad (3)$$

式(1)~(3)中诸参数含义参见图示。 \hat{t} , \hat{r} 分别是光束在界面处电场矢量振幅的透射和反射系数, 下角标“V”指真空, “S”指样品, “M”指镜面。 \hat{a} 代表电场矢量在样品内的传输因子, $\hat{a} = \exp 2\pi i \tilde{\nu} d$ 。

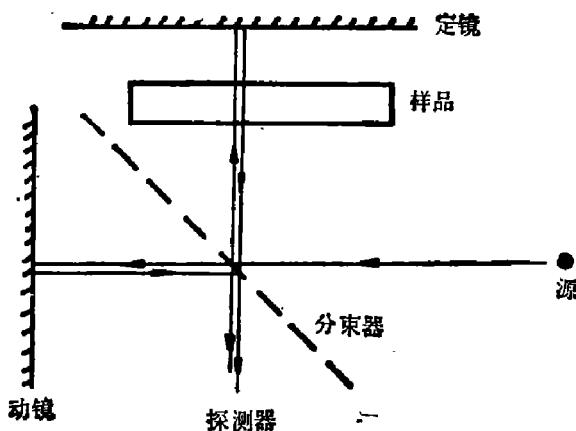


图 1 DFTS 干涉仪结构图

Fig. 1 The configuration of a DFTS interferometer

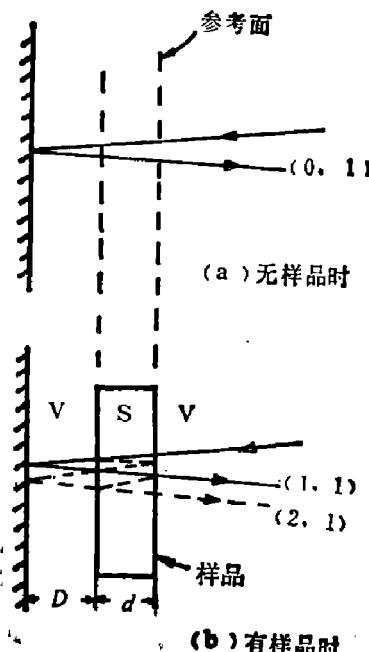


图 2 定镜臂光束与样品的互作用过程,
(2, 1) 束应由两部分构成, 实际测量是在
垂直入射条件下进行的

Fig. 2 The interaction between specimen and light beam in fixed-mirror arm of the interferometer. The (2, 1)beam consists of two parts

若把 $\hat{a}_{(0,1)}(\tilde{\nu})$ 、 $\hat{a}_{(1,1)}(\tilde{\nu})$ 、 $\hat{a}_{(2,1)}(\tilde{\nu})$ … 统一表示为 $\hat{A}_{(K,L)}(\tilde{\nu})$, 并且

$$\hat{A}_{(K,L)}(\tilde{\nu}) = A_{(K,L)}(\tilde{\nu}) \exp i\phi_{AKL}(\tilde{\nu}),$$

则对应于定镜臂(K, L)光束的电场矢量为

$$\hat{E}_F|_{(K,L)} - \int_{-\infty}^{\infty} \hat{E}_0(\tilde{\nu}) \hat{A}_{(K,L)}(\tilde{\nu}) \exp [2\pi i \tilde{\nu} (Z - Ct) + i\phi_0] d\tilde{\nu}. \quad (4)$$

而动镜臂光束的电场分量

$$\hat{E}_M = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{E}_0(\tilde{\nu}) \exp [2\pi i \tilde{\nu} (Z + a - Ct)] d\tilde{\nu}. \quad (5)$$

这里实际上选定了与定镜臂参考面对称的动镜位置为零程差(ZPD)点, 而动镜实际偏离 ZPD 点的距离为 $\frac{a}{2}$ 。式(4)和式(5)中的 $\hat{E}_0(\tilde{\nu})$ 由辐射源决定, 指数部分描述电场矢量的相位关系, ϕ_0 是两主臂光学调整不完善而引入的剩余误差。功率探测器的输出信号应正比于 $\hat{E}_R \cdot \hat{E}_R^*$, 而且

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{E}}_R \cdot \hat{\mathbf{E}}_R^*|_{(K,L)} &= \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\mathbf{E}}_0(\tilde{\nu}) \cdot \hat{\mathbf{E}}_0^*(\tilde{\nu}) [1 + A_{(K,L)}^2(\tilde{\nu})] d\tilde{\nu} \\ &\quad + 2 \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\mathbf{E}}_0(\tilde{\nu}) \cdot \hat{\mathbf{E}}_0^*(\tilde{\nu}) \cdot A_{(K,L)}(\tilde{\nu}) \cos[\phi'_{AKL} - 2\pi\tilde{\nu}x] d\tilde{\nu}.\end{aligned}\quad (6)$$

式(6)的第二项即为对应于(K, L)光束的干涉函数, 可以进一步展开为:

$$I_s(x)|_{(K,L)} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{KL}(\tilde{\nu}) \cos \phi'_{AKL} \cos 2\pi\tilde{\nu}x d\tilde{\nu} + \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{KL}(\tilde{\nu}) \sin \phi'_{AKL} \sin 2\pi\tilde{\nu}x d\tilde{\nu}, \quad (7)$$

其中 $\rho_{KL}(\tilde{\nu}) = 2\hat{\mathbf{E}}_0(\tilde{\nu}) \cdot \hat{\mathbf{E}}_0^*(\tilde{\nu}) \cdot A_{(K,L)}(\tilde{\nu})$, 是实验测得的功率谱; $\phi'_{AKL} = \phi_{AKL} + \phi_0$ 。将式(1)、(2)、(3)代入式(7), 并分别经复数傅里叶变换, 可得相应的复原谱 $\hat{S}_{(0,1)}(\tilde{\nu})$ 、 $\hat{S}_{(1,1)}(\tilde{\nu})$ 和 $\hat{S}_{(2,1)}(\tilde{\nu})$ 。这里的 $\hat{S}_{(0,1)}(\tilde{\nu})$ 实际上也是不放样品时的背景谱。进一步观察这些复原谱之间的相位关系, 可得:

$$\begin{aligned}\phi_{(0,1)}^{(1,1)} &= \text{Ph}\{\hat{S}_{(1,1)}(\tilde{\nu})\} - \text{Ph}\{\hat{S}_{(0,1)}(\tilde{\nu})\} = \text{Ph}\{\hat{a}_{(1,1)}(\tilde{\nu})\} - \text{Ph}\{\hat{a}_{(0,1)}(\tilde{\nu})\} \\ &= \text{Ph}\{\hat{t}_{sv}^2 \cdot \hat{t}_{vs}^2\} + 4\pi(n-1)\tilde{\nu}d,\end{aligned}\quad (8)$$

$$\begin{aligned}\phi_{(1,1)}^{(2,1)} &= \text{Ph}\{\hat{S}_{(2,1)}(\tilde{\nu})\} - \text{Ph}\{\hat{S}_{(1,1)}(\tilde{\nu})\} = \text{Ph}\{\hat{a}_{(2,1)}(\tilde{\nu})\} - \text{Ph}\{\hat{a}_{(1,1)}(\tilde{\nu})\} \\ &= \text{Ph}\{\hat{r}_{vs}^2\} + 4\pi\tilde{\nu}d.\end{aligned}\quad (9)$$

由于 \hat{t} 、 \hat{r} 本身也是 \hat{n} 的函数, 所以很难直接从式(8)和式(9)得到 n 、 k 、 d 的解析表达式。当样品的厚度和折射系数足够大时, 作为一级近似, 先忽略 \hat{t} 、 \hat{r} 的相位及 \hat{n} 的虚部, 式(8)和式(9)可分别简化为

$$\phi_{(0,1)}^{(1,1)} = 4\pi(n-1)\tilde{\nu}d, \quad (10)$$

$$\phi_{(1,1)}^{(2,1)} = 4\pi n\tilde{\nu}d. \quad (11)$$

所以

$$d = \frac{\phi_{(1,1)}^{(2,1)} - \phi_{(0,1)}^{(1,1)}}{4\pi\tilde{\nu}}, \quad (12)$$

$$n = \frac{\phi_{(1,1)}^{(2,1)}}{\phi_{(1,1)}^{(2,1)} - \phi_{(0,1)}^{(1,1)}}. \quad (13)$$

根据 $\hat{S}_{(0,1)}(\tilde{\nu})$ 、 $\hat{S}_{(1,1)}(\tilde{\nu})$ 的模值以及式(12)、(13), 可得:

$$k = \frac{\alpha}{4\pi\tilde{\nu}} = \frac{1}{4\pi\tilde{\nu}d'} \ln \left[\frac{(1-r^2)}{T} \right], \quad (14)$$

这里 $r = \frac{1-n}{1+n}$ 、 $T = \frac{\rho_{xx}(\tilde{\nu})}{\rho_{sx}(\tilde{\nu})}$ 、 $d' = 2d$ 。由式(13)、(14)得到 $\hat{n} = n - ik$, 进一步计算 $\text{Ph}\{\hat{t}_{sv}^2 \cdot \hat{t}_{vs}^2\}$ 和 $\text{Ph}\{\hat{r}_{vs}^2\}$, 再联立式(8)、(9)以获得更加准确的 n 、 k 、 d 值。依次类推, 逐步逼近而趋真值。

三、实验结果

对平板硅样品的初步实验证实了上述概念。图3是实验记录的干涉函数, 两组干涉图分别对应于定镜臂(1, 1)和(2, 1)光束。两组图纹十分相似, 说明在测量的波数范围内样品折射系数无明显色散。图4~6是计算得到的 n 、 k 、 d 曲线。对照复原谱分析, 诸曲线在 30 cm^{-1} 附近出现不连续情况是入射辐射经薄膜分束器多重干涉而输出功率微弱的缘故。根据文献[1]对同类干涉仪复原相位谱的系统和偶然误差分析, 并结合式(8)、(9), 可以估算出折射系数的测量误差约为 10^{-4} , 厚度测量的绝对误差小于 $5 \times 10^{-8} \text{ mm}$ 。对于多层介质样品材料的测量研究尚待深入。

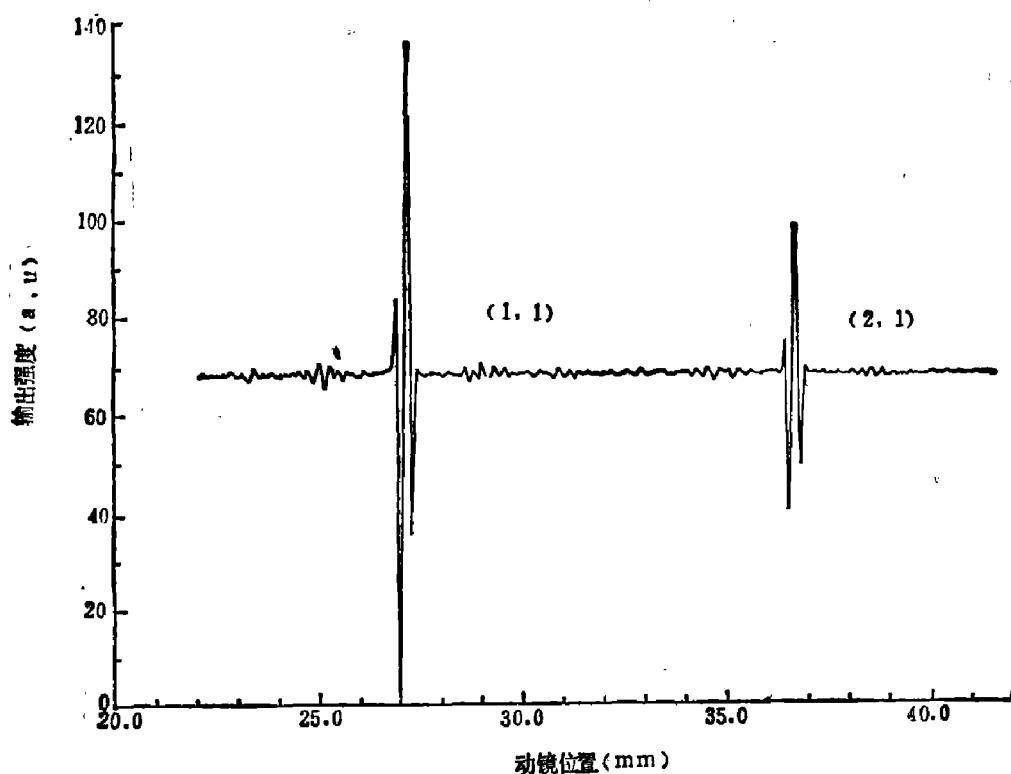


图3 对应(1, 1)束和(2, 1)束的干涉函数实验记录

Fig. 3 Interferograms corresponding to (1, 1) and (2, 1) beams

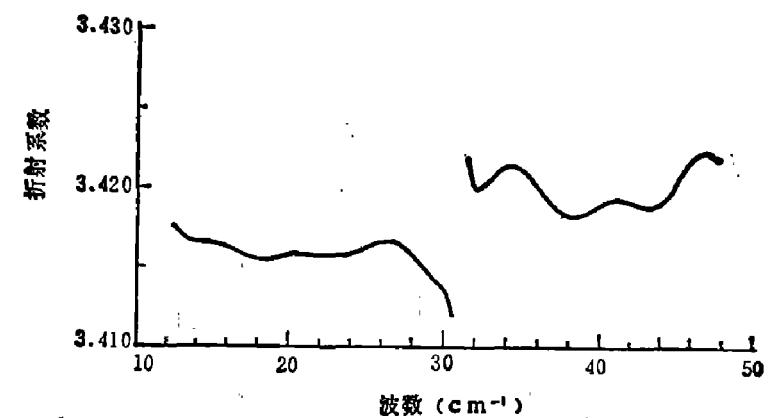


图4 平板硅样品的折射系数

Fig. 4 The refractive index of a silicon plate.

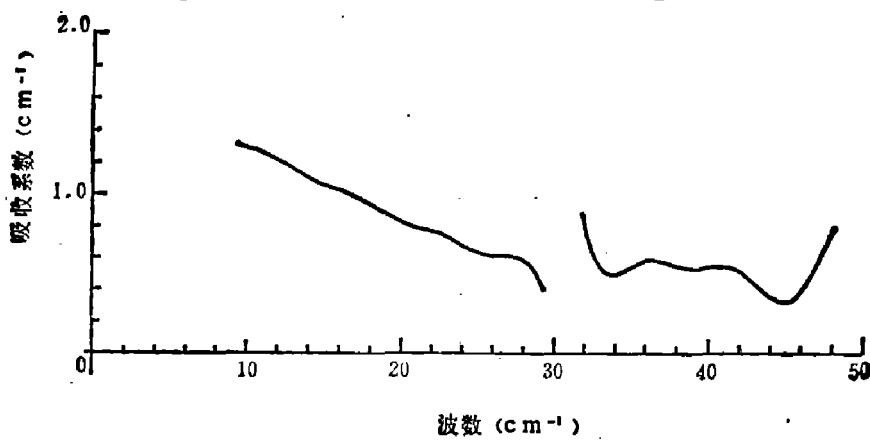


图5 硅样品的吸收系数

Fig. 5 The absorption coefficient of a silicon specimen

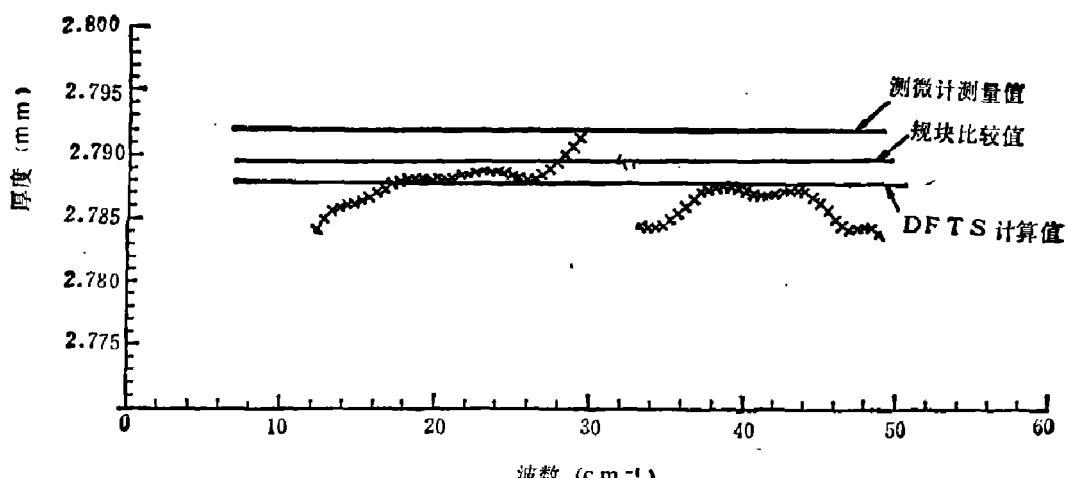


图 6 硅样品的厚度

Fig. 6 The thickness of a silicon specimen

参 考 文 献

- [1] Birch J. R. and Kong Fanping, *Infrared Physics*, 24 (1984), 2/3:309.

THE SIMULTANEOUS DETERMINATION OF n , k AND d BY MEANS OF DFTS

KONG FANPING

(Shanghai Institute of Technical Physics, Academia Sinica)

J. R. BIRCH

(National Physical Laboratory, U. K.)

ABSTRACT

Based on the theory of Fourier transform spectroscopy, the possibility of determining n , k and d by means of dispersive Fourier transform spectrometry is demonstrated. The primary experimental results are presented.