

非均匀介质的光学常数

徐文兰 褚君浩

(中国科学院上海技术物理研究所, 红外物理国家重点实验室, 上海, 200083)

摘要 提出了一种计算非均匀介质光学常数的新方法, 该方法仔细地考虑了光在非均匀介质中的吸收和散射. 研究了非均匀介质层的厚度、介质中颗粒粒径、衬底反射性能等对介质光学常数的影响. 这种研究将有利于同有关的测量实验结合和比较.

关键词 非均匀介质, 光学常数.

引言

光学常数在研究物质与电磁波相互作用中是一个关键量. 不少光学常数手册虽已收集了许多物质的光学常数数据^[1,2], 但这些物质都是均匀介质. 自然界存在的或人工制作的材料大多是由不同组元构成的非均匀介质. 在以往众多的非均匀介质光学常数计算方法中, 或繁琐到要解复杂边界条件的麦克斯韦方程组, 因而在实际使用中受到限制; 或简单到仅考虑了组元的体积比, 全然不计形态等因素, 因而十分粗糙. 本文则另辟途径, 从计算非均匀介质涂层的表观反射率着手, 反过来推算出它的光学常数. 由于我们考虑的非均匀介质是涂敷在衬底上的, 这将与实验测量的样品十分接近.

1 非均匀涂层的表观反射率

假设由组元 A 和 B 组成的非均匀涂层涂敷在一个反射率为 ρ_b 的衬底上, 涂层厚度为 d . A 和 B 的光学常数分别为 (n_A, k_A) 和 (n_B, k_B) . 在一个一维二流模型中, 求解涂层能流的非齐次线性微分方程组, 便可得到整个涂层系统向外辐射的能流为^[3]

$$j = \bar{\epsilon}W_B + \bar{\rho}J_e. \quad (1)$$

式中 W_B 为与涂层系统等温的黑体辐射功率, J_e 为外来能流, $\bar{\epsilon}$ 和 $\bar{\rho}$ 即为涂层系统的表观比辐射率和表观反射率. 文献 [3] 曾详细地给出了式 (1) 的推导过程、 $\bar{\epsilon}$ 的表达式以及它与涂层结构参数的关系, 本文则集中研究 $\bar{\rho}$. 由数学推导, 可得

$$\bar{\rho} = \rho_e + \frac{(1-\rho_i)(1-\rho_e)[(1-F)M \exp(\beta d) - (1+F)O \exp(-\beta d)]}{MN \exp(\beta d) - OP \exp(-\beta d)}. \quad (2)$$

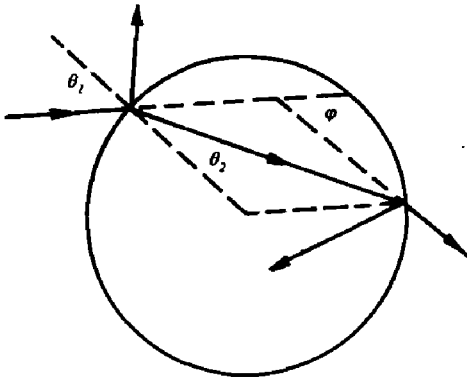


图 1 光线和球的几何关系
Fig. 1 Geometry for the ray and sphere

式中 ρ_e 为涂层表面反射率, 可由费涅耳公式求得; $\rho_i = 1 - (1 - \rho_e)/n_B^2$; 其余参数 F 、 β 、 M 、 N 、 O 和 P 都与 ρ_b 、 ρ_e 和 ρ_i 以及涂层吸收系数 a 、散射系数 s 相关. 它们的定义均可在文献 [3] 中查到; a 和 s 是两个很重要但又无法直接测量的量. 下面就介绍求 a 和 s 的方法.

设 A 组元以颗粒形式分布在 B 组元中, 进一步再设 A 组元形状为球形, 其半径为 r . 用几何光学方法求吸收系数 a 和散射系数 s . 当光射到球面上时 (如图 1), 会发生折射、反射和球内的多重反射. 下面的有关物理量的下标 z 、 f 和 d 分别表示这 3 种情形. 因为 A 、 B 两种介质都为吸收介质, 所以折射角 θ_2 将服从复数的斯奈尔定律, 可通过下式求出^[4]:

$$\theta_2 = \tan^{-1} \left(\frac{u \sin \theta_1}{\gamma \cos \delta} \right), \quad (3)$$

式中

$$u = \frac{n_A n_B + k_A k_B}{n_A^2 + k_A^2},$$

$$v = \frac{n_A k_B - n_B k_A}{n_A^2 + k_A^2},$$

$$\gamma^4 = 1 - 2(u^2 - v^2) \sin^2 \theta_1 + (u^2 + v^2)^2 \sin^4 \theta_1,$$

$$\delta = \frac{1}{2} \tan^{-1} \left[\frac{2uv \sin^2 \theta_1}{1 - (u^2 - v^2) \sin^2 \theta_1} \right].$$

而出射光线对入射光线的偏转角 ϕ 为

$$\phi = 2(\theta_1 - \theta_2). \quad (4)$$

整个球的散射截面由折射、反射和多重内反射构成. 设入射光强 I_0 在 $d\theta$ 内落到球面的功率为

$$dP_0 = \pi r^2 I_0 \sin 2\theta_1 d\theta_1. \quad (5)$$

光线穿过两次表面出射, 没表面穿透率为 T_0 , 对于光滑表面, 有 $T_0 = 1 - R$. R 为球表面反射率, 也由费涅耳公式求出. 光线在球内穿过 $2r \cos \theta_2$ 距离时, 发生衰减, 因而透过率 T 为

$$T = \exp(-8\pi r k_A \cos \theta_2 / \lambda), \quad (6)$$

这里 λ 为波长. 这样, 折射部份功率就为

$$dP_z = \pi r^2 I_0 T_0^2 T \sin 2\theta_1 d\theta_1. \quad (7)$$

所谓散射截面, 就是散射功率与入射功率之比. 用权宗法代替相函数法, 很容易看出由折射引起的横向散射截面 $\sigma_{z,t}$ 和后向散射截面 $\sigma_{z,b}$ 分别为

$$\sigma_{z,t} = \pi r^2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} T_0^2 T \sin^2 \phi \sin 2\theta_1 d\theta_1, \quad (8a)$$

$$\sigma_{z,b} = \pi r^2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} T_0^2 T \cos^2 \phi \sin 2\theta_1 (1-p) d\theta_1. \quad (8b)$$

式 (8b) 中当偏转角 $\phi \geq \frac{\pi}{2}$ 时, 取 $p=0$; 否则, $p=1$. 这样就保证了积分是在 $\phi \geq \frac{\pi}{2}$ 下进行, 因而是后散射部分. 同样考虑因反射、内部多重反射引起的散射, 并以 t 表示横向部分, 以 b 表示后向部分, 便有

$$\sigma_{f,t} = \pi r^2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} R \sin^2 2\theta_1 \sin 2\theta_1 d\theta_1, \quad (9a)$$

$$\sigma_{f,b} = \pi r^2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} R \cos^2 2\theta_1 \sin 2\theta_1 d\theta_1, \quad (9b)$$

$$\sigma_{d,t} = \frac{2}{3} \pi r^2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{RT_0^2 T^2}{1-RT} \sin 2\theta_1 d\theta_1, \quad (10a)$$

$$\sigma_{d,b} = \frac{1}{6} \pi r^2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{RT_0^2 T^2}{1-RT} \sin 2\theta_1 d\theta_1, \quad (10b)$$

在计算多重内反射引起的散射时, 式 (10) 考虑了一个无穷级数的求和. 这样, 总的横向散射截面 σ_t 和后向散射截面 σ_b 为式 (8)、(9)、(10) 之和. 球的吸收截面为^[3]

$$\sigma_a = \pi r^2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left(1 - R - \frac{T_0^2 T}{1-RT} \right) \sin 2\theta_1 d\theta_1. \quad (11)$$

最后, 考虑到散射的各向同性和介质 B 的吸收, 吸收系数 a 和散射系数 s 为

$$a = \sqrt{3} n \sigma_a + 8\pi(1-f)k_B/\lambda, \quad (12a)$$

$$s = \sqrt{3} n (\sigma_b + \sigma_t/2). \quad (12b)$$

式中 n 为单位体积中 A 组元的个数, 与体积比 f 关系为

$$f = \frac{4}{3} \pi r^3 n. \quad (13)$$

这样, 通过介质 A 的线度 (r), 体积比 (f) 以及介质 A , B 的光学常数 n_A , k_A , n_B , k_B , 便可求得 a 和 s , 再由式 (2) 求得非均匀介质层的表观反射率 $\bar{\rho}$.

2 非均匀介质的光学常数

对于均匀涂层, 由于不存在散射, $s=0$. 这样式 (2) 变为

$$\bar{\rho} = \rho_e + \frac{(1-\rho_i)(1-\rho_e)\rho_b \exp(-2Ad)}{1-\rho_i\rho_b \exp(-2Ad)}. \quad (14)$$

当涂层吸收很大时, 则 $\bar{\rho} = \rho_e$, 与预计符合. 从式 (12a) 得到非均匀涂层的吸收系数 a , 再从 $a = 2\alpha$ 、 $\alpha = 4\pi\tilde{k}/\lambda$ 得到涂层介质有效消光系数 \tilde{k} , 这里 α 为朗伯-比尔吸收系数, 它与本文中吸收系数 a 的差异是因为计算吸收时考虑的空间球面度范围不同. 现在假设非均匀涂层与某一假想的均匀涂层的表观反射率相同, 这样, 从式 (2) 求得 $\bar{\rho}$ 后, 令其等于式 (14) 的 $\bar{\rho}$, 然后从式 (14) 反解这个均匀涂层的 n , 我们可以把这个 n 定义为原来非均匀涂层的有效折射系数 \tilde{n} 通过这种方法就求得了非均匀涂层的光学常数.

表 1 给出一个计算实例. 设介质 A、B 的光学常数分别为 (25, 90)、(2, 10^{-3}), 波长 $\lambda = 10 \mu\text{m}$. 为了便于实验验证, 衬底选用某种高反射率金属.

表 1 有效光学常数随涂层参数的变化

Table 1 Variation of effective optical constants with coating parameters

粒径 $r (\mu\text{m})$	体积比 f	厚度 $d (\mu\text{m})$	衬底 ρ_b	\tilde{n}	\tilde{k}
10	0.4	200	0.9	3.470	1.199×10^{-3}
10	0.4	400	0.9	3.756	1.199×10^{-3}
10	0.2	200	0.9	2.893	1.100×10^{-3}
10	0.4	200	0.8	3.521	1.199×10^{-3}
20	0.4	200	0.9	2.939	8.995×10^{-4}

从表 1 可知, 非均匀介质的光学常数不仅与组元的光学常数、体积比有关, 而且还与介质层的厚度、介质颗粒的线度和衬底的反射率有关. 因而我们的研究给出了比以往许多计算方法更细致的考虑. 计算表明: 比较之下, 有效消光系数对参数变化的敏感度比较小. 为消除衬底的影响, 可增加涂层厚度. 当涂层厚度大于某临界厚度 d_c 时, 厚度和衬底反射率的变化都不再对计算结果有所影响. 对于粒径 $r = 10 \mu\text{m}$ 情形, $d_c = 2200 \mu\text{m}$. 对于粒径 $r = 20 \mu\text{m}$ 情形, $d_c = 3500 \mu\text{m}$. 大于这些临界厚度时, \tilde{n} 和 \tilde{k} 可在 10^{-6} 精度上保持不变.

总之, 本文提出的一种计算非均匀介质光学常数的新方法, 其要点是通过非均匀介质的表观反射率等价于一个均匀介质的反射率来求光学常数. 我们已注意到从反射率测量结果推断光学常数的两种方法, 即 k - k 关系和多振子拟合法. 本文的反射率是通过介质参数直接计算得到的, 因而是一个可以游离于实验的理论方法. 从本文的描述可见, 计算使用的参数以及结果均不难与实验进行比较.

由于本文在计算散射和吸收系数时, 使用的是几何方法. 因此要求介质 A 颗粒与波长相比较. 此外计算中用球形粒子代替介质 A 的颗粒, 其中有一定计算误差. 当介质 A 颗粒比较小或偏离球形较大时, 吸收系数 a 和散射系数 s 的计算需要改变或修正. 然而本文的主导思想仍然是正确的.

参考文献

- 1 Palik ED, et al. *Handbook of Optical Constants of Solids*, London: Academic Press, 1985
- 2 Palik ED, et al. *Handbook of Optical Constants of Solids II*, London: Academic Press, 1991
- 3 Xu Wenlan, Shen S C. *Applied Optics*, 1992,31:4488
- 4 Thakur A, Raman R. *Applied Energy*, 1983,15:1

THE OPTICAL CONSTANTS OF INHOMOGENEOUS MEDIUM

Xu Wenlan Chu Junhao

*(National Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics,
Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China)*

Abstract A new method to calculate the optical constants of inhomogeneous mediums is presented. This method is to consider the absorption and scattering of light in the medium carefully. The influence of the layer thickness of the inhomogeneous medium, the size of particles in the medium and the reflectivity of the substrate on the optical constants is discussed, which will be useful for comparison with the related measurement.

Key words inhomogeneous medium, optical constants.