

# METÓDA VÝPOČTU OPTICKÝCH A DIELEKTRICKÝCH KONŠTÁNT Z MERANIA ABSOLÚTNEJ SPEKULÁRNEJ ODRAZIVOSTI POVRCHU TUHÝCH LÁTOK

LUBOMÍR ŠIŠKA\*, MILOSLAV PISÁRČIK\*\*, PETER OSTATNÍK\*\*\*

\*Katedra fyziky, Elektrotechnická fakulta SVŠT,  
819 00 Bratislava, Gottwaldovo nám. 19

\*\*Ústav anorganickej chémie SAV, 809 34 Bratislava, Dúbravská cesta 5

\*\*\*Datasytém, 829 00 Bratislava, Jána Osohu 15

Došlo 18. 6. 1980

*Navrhuje sa metóda pre výpočet základných optických a dielektrických konštánt získaných z meraní absolútnej spekulárnej odrazivosti povrchov tuhých látok. Z nameraných údajov odrazivosti sa pomocou Kramersových—Kronigových integrálov vypočítavajú spektrálne priebehy zložiek komplexnej dielektrickej konštanty, komplexného indexu lomu, absorpčný koeficient a efektívna dielektrická konštantna.*

## ÚVOD

Z absorpčných spektier opticky priepustných planparalelných tenkých dosičiek je možné pri zohľadnení viacnásobných odrazov lúča vo vzorke pomerne presne vypočítať priebeh závislosti optických konštánt meranej látky od vlnovej dĺžky prechádzajúceho žiarenia. V prípade silne absorbujúcich látok sa dajú získať tieto závislosti pomocou spektrálneho priebehu optickej spekulárnej reflexie.

Najvšeobecnejšou metódou na určenie spektrálneho priebehu optických konštánt zo známeho priebehu spekulárnej odrazivosti pri takmer kolmom dopade optického lúča v širokom obore vlnových dĺžok je metóda Kramersova-Kronigova [1], [2]. Táto metóda je založená na integrálnych vzťahoch medzi reálnymi a imaginárnymi časťami komplexných dielektrických konštánt platných teoreticky v celom vlnovom obore spektra. Nazývame ich disperzné relácie medzi sebe príslušnými optickými resp. dielektrickými konštantami. Platia tri dvojice disperzných relácií, a to medzi  $\varepsilon_1$  a  $\varepsilon_2$ , reálnou a imaginárnou časťou dielektrickej konštanty, medzi indexom lomu  $n$  a absorpčným koeficientom  $k$ , reálnou a imaginárnou časťou indexu lomu a medzi odrazivosťou  $R$  a príslušným fázovým uhlom odrazenej vlny  $\Phi$ .

$$\Phi(\omega) = -\frac{\omega}{\pi} \int_{\infty}^0 \frac{I_n R(\xi) \xi}{\xi^2 - \omega^2} d\xi \quad (1)$$

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\xi \varepsilon_2(\xi)}{\xi^2 - \omega^2} d\xi \quad (2)$$

$$n(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\xi k(\xi)}{\xi^2 - \omega^2} d\xi \quad (3)$$

Tieto veľmi všeobecné disperzné relácie sa dajú presne odvodiť z princípov kauzality, lokality, linearity a niektorých všeobecných viet teórie funkcií komplexnej premennej. Význam disperzných relácií spočíva v tom, že uvedené optické konštanty nie sú nezávislé v celom vlnovom obore spektra, ale sú viazané danými vzťahmi. Namiesto dvoch meraní pre výpočet dvoch takýchto optických resp. dielektrických konštánt stačí zmerať jednu z nich v dostatočne širokom frekvenčnom obore (teoreticky od 0 do  $\infty$ ) a druhá konštant sa dá vypočítať z príslušne disperznej relácie.

Z (1) je zrejmé, že ak nameriame odrazivosť  $R(\omega)$  vzorky v dostatočne širokom frekvenčnom obore (od  $\omega_1$  do  $\omega_2$ ), možno príslušný fázový uhol odrazenej vlny vypočítať pre každú zvolenú frekvenciu. V praktických prípadoch treba ešte vykonať určité korekcie pre namerané frekvenčné obory (0,  $\omega_1$ ) a ( $\omega_2$ ,  $\infty$ ). Tieto korekcie spočívajú v interpolácii priebehu odrazivosti pre uvedené namerané intervaly. Spôsob interpolácie má vplyv na presnosť vypočítaných konštánt.

Príslušné optické konštanty  $n(\omega)$  a  $k(\omega)$  sú dané výrazmi:

$$n(\omega) = \frac{1 - R(\omega)}{1 + R(\omega) - 2\sqrt{R(\omega)} \cos \Phi(\omega)} \quad (4)$$

$$k(\omega) = -\frac{2R(\omega) \sin \Phi(\omega)}{1 + R(\omega) - 2\sqrt{R(\omega)} \cos \Phi(\omega)} \quad (5)$$

Nech  $N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega)$  je komplexný index lomu látky. Potom  $\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$  bude komplexná dielektrická konštantá, kde  $\varepsilon_1 = n^2 - k^2$ ,  $\varepsilon_2 = 2nk$ ,  $\alpha = 2\omega kc^{-1}$  je absorpčný koeficient, vyjadrujúci pokles intenzity svetelnej vlny na jednotku dĺžky.

#### PROGRAM NA KRAMERSOVU—KRONIGOVU ANALÝZU

Program umožňuje pre každú vzorku zadať 500 nameraných hodnôt. Celý program pozostáva z dvoch segmentov: hlavného a kontrolného (obr. 1). Hlavný segment obsahuje tieto pôvodné podprogramy: EINLES, KKAREF, OPTKON, PLOTX.

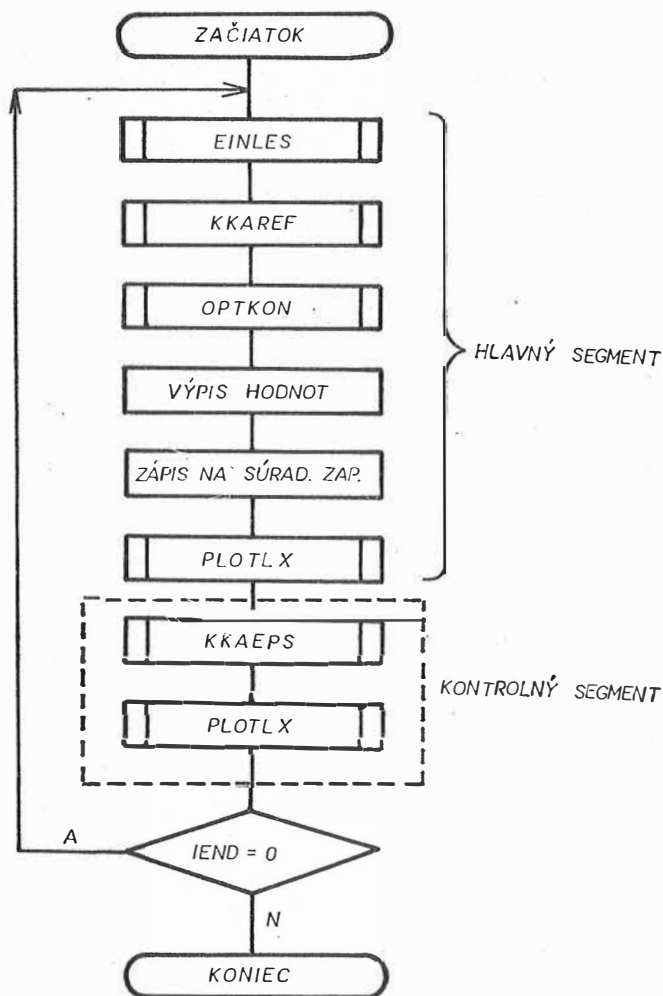
Podprogram EINLES načítava vstupné dáta. Je potrebné zadať tieto parametre: názov vzorky, uhol dopadu  $\varphi$ , exponent pre podprogram PLOTX, počet bodov grafu  $K$ , parameter NA, pomocou ktorého sa určuje počiatočný bod grafu  $K$ , atómovú alebo molekulovú váhu materiálu, hustotu materiálu a druh polarizácie. Potom nasledujú namerané hodnoty ako dvojice energia a odrazivosť.

Podprogram KKAREF vypočítava fázový uhol  $\Phi$  komplexnej odrazivosti. Hodnota uhla  $\Phi$  pre 1. bod je zvolená 0. V poslednom bode je hodnota uhla extrapolovaná.

Podprogram OPTKON vypočítava pomocou Fresnelových rovníc z vypočítaného uhla  $\Phi(\omega)$  nasledovné konštanty ako funkcie  $\nu$ : komplexnú dielektrickú konštantu  $\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$ , komplexný index lomu  $N = n + ik$ , ukazovateľ strát energie  $\text{Im}(1/\varepsilon)$ , absorpčný koeficient  $\mu(\overline{MY})$ ,  $\varepsilon_{0ef}$  a  $N_{ef}$ .

- Výsledky sú udané: 1. vytlačené vo forme tabuľky,  
2. vykreslené na súradnicovom zapisovači,  
3. vytlačené na tlačiarni ako graf pomocou PLOTX.

Kontrolný segment obsahuje podprogramy KKAEPS a PLOTX. Celý segment je zabudovaný za účelom kontroly presnosti výpočtu. Presnosť je kontrolovaná výpočtom  $\varepsilon_2$  (test) ( $\omega$ ) Kramersovou-Kronigovou analýzou z vypočítanej hodnoty  $\varepsilon_1$ . Tento výpočet sa robí v podprograme KKAEPS.



Obr. 1. Bloková schéma programu na Kramersovu—Kronigovu analýzu.

Vypočítané hodnoty  $\varepsilon_2$  (test) sú vytlačené podprogramom PLOT LX. Potom je vytvorený rozdiel  $\varepsilon_2$  (vyp) —  $\varepsilon_2$  (test) a vytlačený ako graf.

Pomocou položky IEND je možné podľa počtu meraných vzoriek beh celého programu opakovať. Pre každú vzorku je vykreslených 10 grafov na súradnicovom zapisovači a tlačiarňi, navyše na tlačiarňi sú vykreslené grafy získané v kontrolnom segmente.

Program je napísaný v programovacom jazyku FORTRAN a je prispôsobený pre počítač CDC — 3300. Je uložený v Datasystéme v Bratislave.

#### Literatúra

- [1] Robinson T. S., Proc. Phys. Soc. (London) 65 B, 910 (1952).
- [2] Robinson T. S., Price W. C., Proc. Phys. Soc. (London) 66 B, 969 (1953).

МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ ОПТИЧЕСКИХ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ  
ПОСТОЯННЫХ НА ОСНОВАНИИ ИЗМЕРЕНИЯ  
АБСОЛЮТНОЙ СПЕКУЛЯРНОЙ ОТРАЖАТЕЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ  
ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДЫХ ВЕЩЕСТВ

Любомир Шишка\*, Милослав Писарчик\*\*, Петер Остатник\*\*\*

\*Кафедра физики, электротехнический факультет СПИ, Братислава

\*\*Институт неорганической химии САН, Братислава

\*\*\*Datasytém, Братислава

Разработанный нами метод вычисления оптических и диэлектрических постоянных сильно поглощающих твердых веществ на основании измерения абсолютной specularной отражающей способности основывается на анализе Крамерса-Кронига. Данная программа дает возможность для каждой пробы задать 500 измеряемых величин отражающей способности. Программа состоит из двух сегментов: основного и контрольного. Контрольный сегмент применяется с целью контроля точности вычисления. На основании рассчитанных величин  $\epsilon_1$  с помощью отношения (2) вычисляется  $\epsilon_2$  (test) и данная величина вычитается из первоначально рассчитанной величины  $\epsilon_2$ . Величина этой разности характеризует погрешность, вызванную аппроксимациями для неизмеряемых интервалов спектра. В программе на основании измеряемых данных отражающей способности вычисляются и графически изображаются спектральные ходы компонентов комплексной диэлектрической постоянной, комплексного показателя преломления, коэффициента поглощения и эффективной диэлектрической постоянной.

Рис. 1. Блок-схема программы для анализа Крамерса-Кронига.

A METHOD FOR THE CALCULATION OF OPTICAL AND  
DIELECTRIC CONSTANTS FROM MEASUREMENTS OF  
ABSOLUTE SPECULAR REFLECTANCE FROM THE  
SURFACE OF SOLIDS

Lubomír Šiška,\* Miloslav Pisárčik,\*\* Peter Ostatník\*\*\*

\*Department of Physics, Electrotechnical Faculty of the Slovak Technical University, Bratislava

\*\*Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Bratislava

\*\*\*Datasytém, Bratislava

The authors have developed a method for the calculation of optical and dielectric constants of strongly absorbing substances based on measurement of absolute specular reflectance using the Kramers—Kronig analysis. The program employed allows to obtain 500 measured reflectance values from each specimen. The program consists of two segments, the main segment and the control one. The control segment has been built in for the purpose of controlling the accuracy of the calculation. On the basis of computed values  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$  (test) is computed using equation (2) and the resulting value is subtracted from the originally computed value of  $\epsilon_2$ . The difference characterizes the error due to approximations for the spectrum intervals measured. The experimentally established reflectance data are processed by the program to yield computed and graphically plotted spectral courses of components of the complex dielectric constant, of the complex refractive index, of the absorption coefficient and of the effective dielectric constant.

Fig. 1. Block diagram of the program for Kramers—Kronig analysis.