

## Ellipsometric Expressions for Two Uniaxially Anisotropic Layers Coated on a Multilayered Substrate

Sang Youl Kim<sup>†</sup>

*Department of Physics, Ajou University, 206 Worldcup-ro, Yeongtong-gu, Suwon 443-749, Korea*

(Received March 6, 2015; Revised manuscript March 25, 2015; Accepted March 25, 2015)

Explicit expressions are derived for the effective reflection coefficients of obliquely incident light on a multilayered substrate coated with two uniaxially anisotropic films. Based on these reflection coefficients, ellipsometric constants are obtained as function of the tilt and azimuthal angles of the optical axes of the uniaxial films. Explicit expressions are provided, which can be used to separate the effects of surface anisotropy for anisotropic film from that of its bulk anisotropy, so that these expressions may be utilized in characterizing the surface anisotropy of alignment layers.

Keywords: Reflection ellipsometry, Two uniaxial layers, Surface anisotropy, Uniaxial anisotropy, Tilt angle of optic axis  
OCIS codes: (240.2130) Ellipsometry and polarimetry; (120.4630) Optical inspection; (240.0310) Thin films; (120.2040) Displays

## 두개의 단축이방성 박막이 있는 다층박막 시료의 타원식

김상열<sup>†</sup>

아주대학교 물리학과

☎ 443-749 경기도 수원시 영통구 월드컵로 206

(2015년 3월 6일 받음, 2015년 3월 25일 수정본 받음, 2015년 3월 25일 게재 확정)

광축의 각도가 서로 다른 두 단축이방성 박막이 다층박막 기층시료 위에 코팅되어 있을 때 비스듬히 입사한 빛의 유효반사계수 표현들을 유도하였다. 유효반사계수로부터 타원상수 표현들을 구하고 이 타원상수의 단축이방성 박막 광축각도 의존성으로부터 단축이방성 박막의 표면 이방성에 의한 효과와 주축 이방성에 의한 효과를 구분하여 해석할 수 있도록 하였다.

Keywords: 반사타원법, 두 단축이방성 박막, 표면이방성, 단축이방성, 광축의 기울임각  
OCIS codes: (240.2130) Ellipsometry and polarimetry; (120.4630) Optical inspection; (240.0310) Thin films; (120.2040) Displays

### I. 연구 배경

LCD에서 액정의 배향을 제어하기 위해 사용되는 배향막과 같이 광축이방성이 매우 작은 시료의 광축이방성 분포를 해석하기 위해서는 미세 이방성을 엄밀하게 해석하기 위한 정확한 수학적 표현이 필요하며 대개 Berreman의 4×4 행렬식을 사용한다.<sup>[1,2]</sup> 그러나 이 식 4×4 행렬식들은 매우 복잡하여 실용성이 떨어지기 때문에 상대적으로 사용이 간편한 확장된(extended) Jones 행렬을 사용하기도 한다.<sup>[3-5]</sup> 그러나 확장된 Jones 행렬에 기초한 이 방식들은 액정과 같이 이방성이 큰 매질을 진행하는 빛의 편광상태 변화는 잘 나타내지만 경계면에서의 반사/투과에 의한 편광상태 변화를 포함하여 박막내에서의 다중반사에 의한 편광상태

변화는 정확하게 반영하지 못하고 있다. 액정과 같이 이방성이 큰 매질을 따라 진행할 경우 전파에 따른 빛의 편광상태 변화가 반사나 투과에 따르는 편광상태 변화보다 매우 크기 때문에 반사나 투과에 의한 효과를 무시할 수 있지만 배향막과 같이 이방성이 작은 박막에 의한 편광효과를 분석할 때에는 반사/투과가 미치는 영향을 무시할 수 없다. 한편 이 확장된 Jones 행렬을 사용하여 다층박막이 있는 기층에 단축이방성 배향막이 코팅되어 있는 시료의 다중반사를 고려한 유효반사계수 표현이 극히 최근에 보고된 바 있으나 이 방법은 이방성 단일 박막에만 적용되는 한계를 가지고 있다.<sup>[6]</sup> 본 연구에서는 광축의 기울임각도가 다른 두개의 박막이 있는 경우, 예를 들어 배향막이 표면층과 주층으로 나누어져 있는 경우에도 적용할 수 있는

<sup>†</sup>E-mail: [sykim@ajou.ac.kr](mailto:sykim@ajou.ac.kr)

Color versions of one or more of the figures in this paper are available online.

유효반사계수의 구체적인 표현들을 제공하여 미세한 표면 이방성 분포를 해석하는데 도움을 주고자 한다.

## II. 이방성 박막내에서의 굴절률과 빛의 전파

좌표축 설정은 Fig. 1과 같이 한다. 빛은 z축의 음의 방향에서 양의 방향으로 진행하며 입사면은 yz 평면상에, 매질과 시료의 경계면은 xy 평면상에 놓이도록 한다. 단축이방성 박막내에서 광축이 z축과 이루는 각도를  $\theta$ , xy 평면상에 투영시켰을 때 x축과 이루는 각도를  $\psi$ 로 표시한다. 일반적으로 단축이방성 박막은 광축의 방향이 xy 평면과 나란하지 않으므로 o-plate로 취급될 수 있지만  $\theta$ 가  $90^\circ$  이면 광축이 xy 평면상에 놓여있는 a-plate와 같아진다.

단축이방성 박막의 정상굴절률을  $n_o$ , 이상굴절률을  $n_e$ 라 하고 이 이방성박막을 표면층과 주층으로 나누어 해석한다. 이 방법은 배향막의 표면이방성이 덩어리이방성과 어떻게 다른지를 연구하는데 유용하게 사용될 수 있다. 표면층의 광축의 방향과 주층의 광축의 방향을 각각  $\theta_1, \psi_1$ 과  $\theta_2, \psi_2$ 으로 나타낸다. 표면층에서  $x, y, z$  좌표축방향으로 진동하는 전기장의 굴절률들을 순서대로  $n_{1x}, n_{1y}, n_{1z}$ 라고 하면 이들은 각각 식 (1a), (1b), (1c)에  $\theta = \theta_1, \psi = \psi_1$ 을 대입하여 구한  $n_x, n_y, n_z$ 와 같으며 주층에서  $x, y, z$  좌표축방향으로 진동하는 전기장의 굴절률들을 마찬가지로  $n_{2x}, n_{2y}, n_{2z}$ 라고 하면 이들은 각각 식 (1a), (1b), (1c)에  $\theta = \theta_2, \psi = \psi_2$ 를 대입하여 구한  $n_x, n_y, n_z$ 와 같다.  $n_{xy}$ 는 전기장이 xy 평면상에서 진동하는 이상광선의 최대굴절률을 가리킨다.

$$\frac{\cos^2\psi \sin^2\theta}{n_e^2} + \frac{(1 - \cos^2\psi \sin^2\theta)}{n_o^2} = \frac{1}{n_x^2} \quad (1a)$$

$$\frac{\sin^2\psi \sin^2\theta}{n_e^2} + \frac{(1 - \sin^2\psi \sin^2\theta)}{n_o^2} = \frac{1}{n_y^2} \quad (1b)$$

$$\frac{\cos^2\theta}{n_e^2} + \frac{\sin^2\theta}{n_o^2} = \frac{1}{n_z^2} \quad (1c)$$

$$\frac{\sin^2\theta}{n_e^2} + \frac{\cos^2\theta}{n_o^2} = \frac{1}{n_{xy}^2} \quad (1d)$$

다층박막이 있는 시료의 매질부터 시작하여 매질을 0번, 제일 위에 있는 박막 즉 단축이방성 박막 표면층을 1번, 그 다음 박막 즉 단축이방성 박막 주층을 2번과 같이 위에서부터 번호를 매기기로 하면 박막의 수가  $k-1$ 일 때 기층은  $k$  번이 된다. 등방성 박막의 경우 입사각을  $\phi_0$ ,  $j$ 번째 박막의 굴절률을  $n_j$ (매질의 굴절률은  $n_0$ ) 그리고  $j$ 번째 박막에서의 굴절각을  $\phi_j$ 와 같이 쓰기로 하며 이방성 박막내에서의 굴절각은 표면층에서는 정상광선인 경우  $\phi_{1o}$ , 이상광선일 경우  $\phi_{1e}$ 와 같이 각각 표시하며 주층의 경우 이들을 각각  $\phi_{2o}, \phi_{2e}$ 와 같이 각각 표시하기로 한다. 이방성 박막내의 굴절각들은 파수벡터의 수직성분과 수평성분을 사용하여 다음과 같이

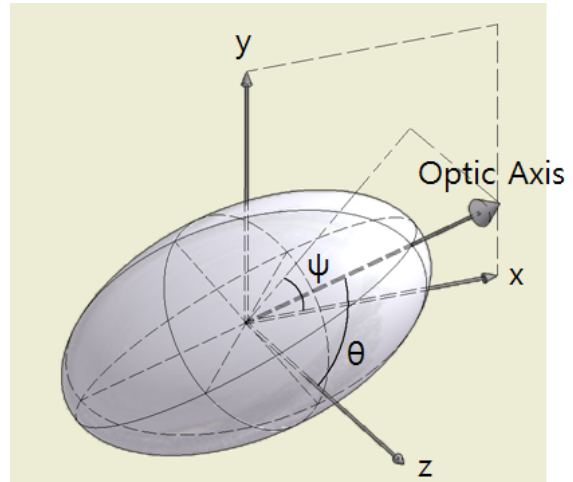


FIG. 1. A schematic figure showing the refractive index ellipsoid and the optic axis of a uniaxial layer, which makes an angle  $\theta$  with z-axis. Its projection on xy plane makes an angle  $\psi$  with x-axis. The incident light is in the yz plane and the interface is in the xy plane.

나타낼 수 있다.

$$\phi_{i\xi} = \tan^{-1} \left( \frac{k_{i\xi y}}{k_{i\xi z}} \right) \quad (i = 1 \text{ or } 2, \xi = e \text{ or } o) \quad (2)$$

여기서  $k_{i\xi y}$ 와  $k_{i\xi z}$ 는 각각  $i$ 번째 박막내 파수벡터의  $y$ 축 성분 또는  $z$ 축 성분을 가리키는데 배향막내에서 파수벡터의  $y$  성분은 매질내 파수벡터의  $y$  성분과 같으며( $k_{i\xi y} = \frac{2\pi n_0}{\lambda} \sin\phi_0$ ) 배향막내에서 파수벡터의  $z$  성분은 정상광선의 경우 식 (3a)와 같으며 이상광선의 경우 식 (3b)와 같다.<sup>[3]</sup>

$$k_{ioz} = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{n_o^2 - n_o^2 \sin^2\phi_0} \quad (i = 1 \text{ or } 2) \quad (3a)$$

$$k_{ie z} = \frac{v_i + \sqrt{v_i^2 - 4u_i w_i}}{2u_i} \quad (i = 1 \text{ or } 2) \quad (3b)$$

단  $u_i, v_i, w_i$ 는 아래와 같다.

$$u_i = \frac{\sin^2\theta_i}{n_e^2} + \frac{\cos^2\theta_i}{n_o^2} \quad (4a)$$

$$v_i = \sin 2\theta_i \sin\psi_i \left( \frac{2\pi n_0 \sin\phi_0}{\lambda} \right) \left( \frac{1}{n_e^2} - \frac{1}{n_o^2} \right) \quad (4b)$$

$$w_i = \left( \frac{2\pi n_0 \sin\phi_0}{\lambda} \right)^2 \left( \frac{1 - \sin^2\theta_i \sin^2\psi_i}{n_e^2} + \frac{\sin^2\theta_i \sin^2\psi_i}{n_o^2} \right) - \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \quad (4c)$$

매질내에서 입사파의 파수벡터와 이방성 박막내에서의 굴절파의 파수벡터들은 각각 다음과 같다.

$$\vec{k}_0 = k_{0y}\hat{y} + k_{0z}\hat{z} = \frac{2\pi n_0}{\lambda} (\sin\phi_0\hat{y} + \cos\phi_0\hat{z}) \quad (5a)$$

$$\vec{k}_{io} = k_{ioy}\hat{y} + k_{ioz}\hat{z} = k_{io} (\sin\phi_{io}\hat{y} + \cos\phi_{io}\hat{z}) (i = 1, 2) \quad (5b)$$

$$\vec{k}_{ie} = k_{iey}\hat{y} + k_{iez}\hat{z} = k_{ie} (\sin\phi_{ie}\hat{y} + \cos\phi_{ie}\hat{z}) (i = 1, 2) \quad (5c)$$

### III. 등방성 매질과 단축이방성 박막간의 경계면에서 반사계수와 투과계수

굴절률이  $n_0$ 인 등방성 매질과 광축의 기울임 각도와 방위 각이 각각  $\theta_i, \psi_i$ 인 단축이방성 박막의 경계면에서 Fresnel 반사계수들을 표현하기 위해 아래와 같이 주축좌표계를 도입한다. 여기에서  $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}$ 는 각각 주축좌표계상의 단위벡터들인데  $\hat{c}$ 는 광축과 나란한 단위벡터이며  $\hat{b}$ 는  $\hat{c}$ 와  $z$ 축에 동시에 수직인 단위벡터이다. 이  $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}$ 들은 직교좌표축을 이룬다.

$$\hat{a} = \cos\theta_i \cos\psi_i \hat{x} + \cos\theta_i \sin\psi_i \hat{y} - \sin\theta_i \hat{z} \quad (6a)$$

$$\hat{b} = -\sin\psi_i \hat{x} + \cos\psi_i \hat{y} \quad (6b)$$

$$\hat{c} = \sin\theta_i \cos\psi_i \hat{x} + \sin\theta_i \sin\psi_i \hat{y} + \cos\theta_i \hat{z} \quad (6c)$$

이방성 박막내 정상광선의 전기장 단위벡터  $\hat{o}_i$ 와 이상광선의 전기장 단위벡터  $\hat{e}_i$ 는 각각 다음과 같다.<sup>[3]</sup>

$$\hat{o}_i = \frac{1}{k_{io}} [(\hat{b} \cdot \vec{k}_{io})\hat{a} - (\hat{a} \cdot \vec{k}_{io})\hat{b}] \quad (i = 1, 2) \quad (7a)$$

$$\hat{e}_i = \frac{1}{k_{ie}} \left[ \left( \frac{\hat{a} \cdot \vec{k}_{ie}}{n_i^2 - n_o^2} \right) \hat{a} + \left( \frac{\hat{b} \cdot \vec{k}_{ie}}{n_i^2 - n_o^2} \right) \hat{b} + \left( \frac{\hat{c} \cdot \vec{k}_{ie}}{n_i^2 - n_e^2} \right) \hat{c} \right] \quad (i = 1, 2) \quad (7b)$$

여기서 이방성 박막내부를 진행하는 이상광선의 굴절률  $n_i$ 는 다음과 같다.

$$\frac{1}{n_i^2} = \left( \frac{1}{n_o^2} - \frac{1}{n_e^2} \right) \left( \frac{\hat{c} \cdot \vec{k}_{ie}}{k_{ie}} \right)^2 + \frac{1}{n_e^2} \quad (8)$$

이와 같이 이방성 박막내에서 정상광선의 전기장 단위벡터와 이상광선의 전기장 단위벡터들을 사용하면 Yeh와 Ryu등에 의해 제시된 바와 같이 등방성 매질과 이방성 박막간의 경계면에서 투과계수 표현들을 다음과 같이 쓸 수 있다.<sup>[3,7]</sup>

$$t_{pe} = \frac{2k_{0z}A}{AD - BC} \quad (9a)$$

$$t_{po} = \frac{-2k_{0z}B}{AD - BC} \quad (9b)$$

$$t_{se} = \frac{-2k_{0z}C}{AD - BC} \quad (9c)$$

$$t_{so} = \frac{2k_{0z}D}{AD - BC} \quad (9d)$$

단

$$A = o_{ix}(k_{0z} + k_{ioz}) \quad (10a)$$

$$B = e_{ix}(k_{0z} + k_{iez}) \quad (10b)$$

$$C = o_{iy}(k_0 + \cos\phi_0 k_{ioz}) - o_{iz}\cos\phi_0 k_{0y} \quad (10c)$$

$$D = e_{iy}(k_0 + \cos\phi_0 k_{iez}) - e_{iz}\cos\phi_0 k_{0y} \quad (10d)$$

투과계수의 아래 첨자중  $p$ 와  $s$ 는 각각  $p$ 파 또는  $s$ 파를 나타내며  $e$ 와  $o$ 는 각각  $e$ 파 또는  $o$ 파를 나타낸다. 즉  $t_{pe}$ 는 입사파가  $p$ 파이며 투과파가  $e$ 파인 경우의 투과계수를 말한다. 등방성 매질과 이방성박막간의 경계면에서 반사계수 표현들 또한 다음과 같이 주어진다.<sup>[3,7]</sup>

$$r_{pp} = \frac{AD' - BC'}{AD - BC} \quad (11a)$$

$$r_{ps} = \frac{A'B' - A'B}{AD - BC} \quad (11b)$$

$$r_{sp} = -\frac{CD' - C'D}{AD - BC} \quad (11c)$$

$$r_{ss} = \frac{A'D - B'C}{AD - BC} \quad (11d)$$

단

$$A' = o_{ix}(k_{0z} - k_{ioz}) \quad (12a)$$

$$B' = e_{ix}(k_{0z} - k_{iez}) \quad (12b)$$

$$C' = o_{iy}(k_0 - \cos\phi_0 k_{ioz}) + o_{iz}\cos\phi_0 k_{0y} \quad (12c)$$

$$D' = e_{iy}(k_0 - \cos\phi_0 k_{iez}) + e_{iz}\cos\phi_0 k_{0y} \quad (12d)$$

여기에서  $r_{pp}$ (또는  $r_{ss}$ )는 입사광이  $p$ 파(또는  $s$ 파)이고 반사광이  $p$ 파(또는  $s$ 파)일 때의 반사계수이며  $r_{ps}$ (또는  $r_{sp}$ )는 입사광이  $p$ 파(또는  $s$ 파)이고 반사광이  $s$ 파(또는  $p$ 파)일 때의 교차반사계수를 가리킨다.

이 단축 이방성 배향막 아래에 굴절률이  $n_j$ 인 등방성 매질이 있을 때 경계면에서 반사계수들은  $n_0$  자리에  $n_j$ , 입사각  $\phi_0$  자리에 굴절각  $\phi_j = \sin^{-1}\left(\frac{n_0}{n_j} \sin\phi_0\right)$ 를 대입한 표현들여의 부호를 취한 것과 같다. 또한 이 단축 이방성 박막에서 굴절률이  $n_j$ 인 등방성 매질로의 투과계수  $t_{ep}', t_{op}', t_{es}', t_{os}'$ 들 또한 아래 식들과 같이 주어진다.<sup>[7]</sup>

$$t_{ep}' = \frac{k_{0y}(e_{iy}e_{iz}' - e_{iz}e_{iy}') + e_{iy}e_{iy}'(k_{iez} + k_{iez}')}{\cos\phi_j(k_{0y}e_{iz}' + k_{iez}'e_{iy}') + e_{iy}'k_j} \quad (13a)$$

$$t_{op}' = \frac{k_{0y}(o_{iy}o_{iz}' - o_{iz}o_{iy}') + o_{iy}o_{iy}'(k_{ioz} + k_{ioz}')}{\cos\phi_j(k_{0y}o_{iz}' + k_{ioz}'o_{iy}') + o_{iy}'k_j} \quad (13b)$$

$$t_{es}' = \frac{e_{ix}(k_{iez}' + k_{iez})}{k_{icz}' + k_{jz}} \quad (13c)$$

$$t_{os}' = \frac{o_{ix}(k_{ioz}' + k_{ioz})}{k_{ioz}' + k_{jz}} \quad (13d)$$

여기서 ' 표시는 반사광을 나타낸다. 즉  $o_{iz}'$  (또는  $e_{iz}'$ )은  $i$  번째 단축이방성 박막과 그 아래에 있는 굴절률이  $n_j$ 인 등방성 매질과의 경계면에서 반사하는 정상광선(또는 이상광선)의 전기장 단위벡터의  $z$  성분을 말하며  $k_{iez}'$ 은 마찬가지로 반사하는 이상광선의 파수벡터의  $z$  성분을 말한다. 반사하는 정상광선의 단위벡터  $\hat{o}_i'$ 는  $\vec{k}_{io}' = k_{ioy}\hat{y} - k_{ioz}\hat{z}$ 를 식 (7a)의  $\vec{k}_{io}$  자리에 대입하여 구하며 반사하는 이상광선의 단위벡터  $\hat{e}_i'$ 는  $\vec{k}_{ie}' = k_{iey}\hat{y} - k_{iez}\hat{z}$ 를 식 (7b)의  $\vec{k}_{ie}$  자리에 대입하여 구한다. 굴절률이  $n_j$ 인 매질내에서의 파수벡터는 다음과 같다.

$$\vec{k}_j = \frac{2\pi n_j}{\lambda} (\sin\phi_j\hat{y} + \cos\phi_j\hat{z}) \equiv k_{jy}\hat{y} + k_{jz}\hat{z} \quad (14)$$

#### IV. 두개의 단축이방성 박막이 다층박막기층 위에 있는 시료의 유효반사계수

Figure 2에서와 같이 두 개의 단축이방성 박막이 다층박막기층위에 놓여 있는 시료의 반사행렬을 식 (15)와 같이  $\vec{R}_S^{yz}$  라 두면 이 반사행렬은 (0,1) 경계면에서의 반사를 나타내는 행렬인  $\vec{R}_{01}$ 과 그 아래 다층 박막들에 의한 효과를 나타내는 행렬들로 식 (16a), (16b), (16c)와 같이 쓸 수 있다.

$$\begin{pmatrix} E_p^- \\ E_s^- \end{pmatrix} = \vec{R}_S^{yz} \begin{pmatrix} E_p^+ \\ E_s^+ \end{pmatrix} \quad (15)$$

여기에서 반사행렬  $\vec{R}_S^{yz}$ 의 위첨자  $yz$ 은  $yz$ 좌표계를 가리키며 아래첨자인  $S$ 는 시료면을 가리킨다.  $E_p^-$ 와  $E_s^-$ 는 각각 경계면에서 반사하는 빛의 전기장의  $p$ 파 성분과  $s$ 파 성분을 가리키며  $E_p^+$ 와  $E_s^+$ 는 각각 경계면으로 입사하는 빛의 전기장의  $p$ 파 성분과  $s$ 파 성분을 가리킨다.

$$\vec{R}_S^{yz} = \vec{R}_{01} + \vec{T}_{10} \cdot \left[ I + \sum_{m=1}^{\infty} (\vec{P}_1 \cdot \vec{R}_{12}^{eff} \cdot \vec{P}_1 \cdot \vec{C}_{1+}^{LE} \cdot \vec{R}_{10} \cdot \vec{C}_{1-}^{EL})^m \right] \cdot \vec{P}_1 \cdot \vec{R}_{12}^{eff} \cdot \vec{P}_1 \cdot \vec{T}_{01} \quad (16a)$$

$$\vec{R}_{12}^{eff} = \vec{R}_{12} + \vec{T}_{21} \cdot \left[ I + \sum_{m=1}^{\infty} (\vec{P}_2 \cdot \vec{R}_{23}^{eff} \cdot \vec{P}_2 \cdot \vec{R}_{21})^m \right] \cdot \vec{P}_2 \cdot \vec{R}_{23}^{eff} \cdot \vec{P}_2 \cdot \vec{T}_{12} \quad (16b)$$

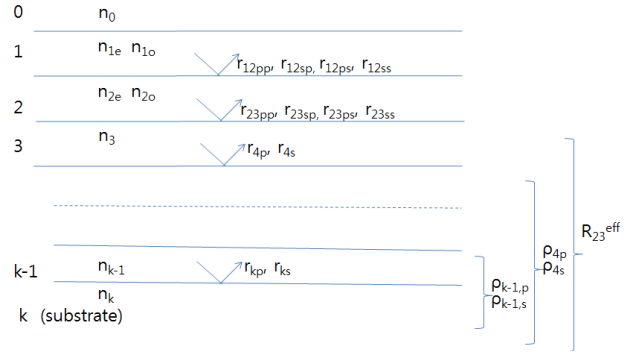


FIG. 2. A schematic figure showing the procedure of calculating effective reflection coefficients and ellipsometric expressions of a multi-layered substrate coated with two uniaxially anisotropic films.

$$\vec{R}_{23}^{eff} = \vec{C}_{2-}^{LE} \cdot \vec{R}_{23} \cdot \vec{C}_{2+}^{EL} + \vec{T}_{32} \cdot \left[ I + \sum_{m=1}^{\infty} (\vec{P}_3 \cdot \vec{R}_{34}^{eff} \cdot \vec{P}_3 \cdot \vec{R}_{32})^m \right] \cdot \vec{P}_3 \cdot \vec{R}_{34}^{eff} \cdot \vec{P}_3 \cdot \vec{T}_{23} \quad (16c)$$

$\vec{R}_{ij} = \begin{pmatrix} r_{pp} & r_{sp} \\ r_{ps} & r_{ss} \end{pmatrix}_{ij}$ 는  $ij$  경계면( $ij = 01, 10, 02, 20, 23$  또는  $32$ )에서 반사행렬을 가리키며  $\vec{T}_{ij} = \begin{pmatrix} t_{pe} & t_{se} \\ t_{po} & t_{so} \end{pmatrix}_{ij}$ 는  $ij$  경계면 ( $ij = 01, 02, 32$ )에서의 투과행렬을 가리키는데  $ij$  중 앞의 숫자는 경계면으로 입사하는 빛의 위치를 나타내며 뒤의 문자는 경계면으로부터의 반사광이나 투과광의 위치를 나타낸다. 예를 들어  $\vec{R}_{01} = \begin{pmatrix} r_{pp} & r_{sp} \\ r_{ps} & r_{ss} \end{pmatrix}_{01}$  행렬의  $r_{pp}$ 는 매질(0번)에서 이방성 박막의 표면층인 1번 박막의 경계면으로 진행할 때 입사광이  $p$ 파이고 반사광이  $p$ 파인 Fresnel 반사계수를 가리키며  $\vec{T}_{01} = \begin{pmatrix} t_{pe} & t_{se} \\ t_{po} & t_{so} \end{pmatrix}_{01}$  행렬의  $t_{pe}$ 는 매질(0번)의  $p$ 파가 표면층인 1번 박막내의 이상광선인  $e$ 파로 변환되는 Fresnel 투과계수를,  $t_{so}$ 는 매질의  $s$ 파가 표면층의 정상광선인  $o$ 파로 변환되는 Fresnel 투과계수를 가리킨다.  $\vec{T}_{ji}$  ( $ji = 10, 20, 23$ )도 마찬가지로  $e$ 파와  $o$ 파가  $p$ 파와  $s$ 파로 변환되는 Fresnel 투과계수로  $\begin{pmatrix} t_{ep} & t_{op} \\ t_{es} & t_{os} \end{pmatrix}_{ji}$ 와 같이 쓸 수 있다.  $\vec{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ 는 단위행렬이며  $\vec{P}_j = \begin{pmatrix} e^{ik_{jz}d_j} & 0 \\ 0 & e^{ik_{jz}d_j} \end{pmatrix}$  ( $j=1, 2$ ) 또는  $\vec{P}_j = \begin{pmatrix} e^{ik_{jz}d_j} & 0 \\ 0 & e^{ik_{jz}d_j} \end{pmatrix}$  ( $j \geq 3$ )는  $j$ 번째 박막의 전파행렬로써  $k_{jz}$ 과  $k_{joz}$ 은 각각 식 (3b)와 식 (3a)에 주어진 바와 같이  $j$ 번째 박막내의 이상광선과 정상광선의 파수벡터의  $z$ 성분을,  $k_{jz}$ 는 식 (14)에 주어진 바와 같이  $j$ 번째 등방성 박막의 파수벡터의  $z$ 성분을 가리키며  $d_j$ 는  $j$ 번째 박막의 두께를 나타낸다.  $\vec{R}_{ij}^{eff} = \begin{pmatrix} r_{ee}^{eff} & r_{oe}^{eff} \\ r_{eo}^{eff} & r_{oo}^{eff} \end{pmatrix}_{ij}$  ( $ij = 12, 23$ )는  $j$ 번째 박막과 그 아래의 모든 박막에서의 다

중반사를 반영한  $ij$  경계면에서의 유효반사행렬을 가리킨다. 한편  $\vec{R}_{12}$ 나  $\vec{R}_{21}$ (또는  $\vec{T}_{12}$ 나  $\vec{T}_{21}$ )의 성분들은 두 이방성박막 간의 경계면 즉 이방성 박막의 표면층과 주층간 경계면에서의 반사계수(또는 투과계수)들로 구성되어 있는데 이들은 두께가 0인 등방성 박막을 매개체로 하여 다음과 같이 구한다.<sup>[3,7]</sup>

$$\vec{R}_{12} = \vec{C}_{1-}^{LE} \cdot \vec{R}_{10} \cdot \vec{C}_{1+}^{EL} + \vec{T}_{01} \cdot \left[ \vec{I} + \sum_{m=1}^{\infty} (\vec{R}_{02} \cdot \vec{R}_{01})^m \right] \cdot \vec{R}_{02} \cdot \vec{T}_{10} \quad (17a)$$

$$\vec{R}_{21} = \vec{C}_{2+}^{LE} \cdot \vec{R}_{20} \cdot \vec{C}_{2-}^{EL} + \vec{T}_{02} \cdot \left[ \vec{I} + \sum_{m=1}^{\infty} (\vec{R}_{01} \cdot \vec{R}_{02})^m \right] \cdot \vec{R}_{01} \cdot \vec{T}_{20} \quad (17b)$$

또는

$$\vec{T}_{ij} = \vec{T}_{0j} \cdot \left[ \vec{I} + \sum_{m=1}^{\infty} (\vec{R}_{0i} \cdot \vec{R}_{0j})^m \right] \cdot \vec{T}_{i0} \quad (ij = 12 \text{ or } 21) \quad (17c)$$

여기서 아래첨자 0은 두 이방성 박막 사이에 삽입한 두께가 0이고 굴절률이  $n_0$ 인 가상적인 등방성 박막을 가리킨다. 마지막으로  $\vec{C}_{i\pm}^{LE}$ 는  $i$ 번 박막에서  $z$ 축의 양(+) 또는 음(-)의 방향으로 진행하는 빛의 전기장의  $p$ 성분과  $s$ 성분을  $e$ 성분과  $o$ 성분으로 변환시키는 변환행렬이며  $\vec{C}_{i\pm}^{EL}$ 는  $i$ 번 박막에서  $z$ 축의 양(+) 또는 음(-)의 방향으로 진행하는 빛의 전기장의  $e$ 성분과  $o$ 성분을  $p$ 성분과  $s$ 성분으로 변환시키는 변환행렬을 가리킨다.  $i$ 번 박막내에서 전기장벡터의  $e, o$  성분을  $p, s$  성분으로 변환시키는 변환행렬  $\vec{C}_{i+}^{EL}$ 을 사용하면  $\vec{E}^{ps} = \vec{C}_{i+}^{EL} \cdot \vec{E}^{eo} = \begin{pmatrix} c_{ep} & c_{op} \\ c_{es} & c_{os} \end{pmatrix}_i \cdot \vec{E}^{eo}$ 와 같이 표현할 수 있는데 이 변환행렬은 단위 벡터들을 사용하여 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\vec{C}_{i+}^{EL} = \begin{pmatrix} \hat{e} \cdot \hat{p} & \hat{o} \cdot \hat{p} \\ \hat{e} \cdot \hat{s} & \hat{o} \cdot \hat{s} \end{pmatrix}_i \quad (18)$$

단  $\hat{k}_{ie} = (0, \sin\phi_{ie}, \cos\phi_{ie})$ ,  $\hat{k}_{io} = (0, \sin\phi_{io}, \cos\phi_{io})$ ,  $\hat{s} = (1, 0, 0)$ ,  $\hat{p} = \hat{s} \times \hat{k}_{io} = (0, -\cos\phi_{io}, \sin\phi_{io})$ 이며  $\hat{o}$ ,  $\hat{e}$ 는 각각 식 (7a), (7b)와 같이 구한다. 마찬가지로  $i$ 번 박막내에서  $p, s$  성분을  $e, o$  성분으로 변환시키는 변환행렬인  $\vec{C}_{i+}^{LE} = \begin{pmatrix} c_{pe} & c_{se} \\ c_{po} & c_{so} \end{pmatrix}_i$ 의 성분표현도 다음과 같음을 확인할 수 있다.

$$\vec{C}_{i+}^{LE} = \begin{pmatrix} \hat{p}' \cdot \hat{e}' & \hat{s}' \cdot \hat{e}' \\ \hat{p}' \cdot \hat{o}' & \hat{s}' \cdot \hat{o}' \end{pmatrix}_i \quad (19)$$

단  $\hat{k}_{ie}' = (0, \sin\phi_{ie}', -\cos\phi_{ie}')$ ,  $\hat{k}_{io}' = (0, \sin\phi_{io}', -\cos\phi_{io}')$ ,  $\hat{s}' = (1, 0, 0)$ ,  $\hat{p}' = \hat{s}' \times \hat{k}_{io}' = (0, \cos\phi_{io}', \sin\phi_{io}')$ 이다. 한편  $\vec{C}_{i-}^{LE}$ 와  $\vec{C}_{i-}^{EL}$ 은 각각  $\vec{C}_{i+}^{EL}$ 와  $\vec{C}_{i+}^{LE}$ 의 역행렬로써 이들의 성분 표현은 다음과 같다.

$$\vec{C}_{i-}^{LE} = \begin{pmatrix} \hat{p} \cdot \hat{e} & \hat{s} \cdot \hat{e} \\ \hat{p} \cdot \hat{o} & \hat{s} \cdot \hat{o} \end{pmatrix}_i \quad (20a)$$

$$\vec{C}_{i-}^{EL} = \begin{pmatrix} \hat{e}' \cdot \hat{p}' & \hat{o}' \cdot \hat{p}' \\ \hat{e}' \cdot \hat{s}' & \hat{o}' \cdot \hat{s}' \end{pmatrix}_i \quad (20b)$$

$\vec{R}_{34}^{eff}$ 는  $\begin{pmatrix} \rho_{4p} & 0 \\ 0 & \rho_{4s} \end{pmatrix}$ 와 같이 쓸 수 있는데  $\rho_{4p}$ 와  $\rho_{4s}$ 는 4번 박막을 포함하여 그 아래의 박막들과 기층의 효과를 모두 포함하는 유효반사계수들이다.  $p$ 파와  $s$ 파 각각에 대해 기존의 다층박막구조의 유효반사계수를 구하는 방법을 적용하면 이들은 다음과 같이 구해진다.<sup>[8-10]</sup>

$$\rho_{j-1,f} = \frac{r_{j-1,f} + \rho_{jf} e^{-2ik_j d_j}}{1 + r_{j-1,f} \rho_{jf} e^{-2ik_j d_j}} \quad (f = p \text{ or } s, k > j \geq 5) \quad (21a)$$

단

$$\rho_{k-1,f} = \frac{r_{k-1,f} + r_{kf} e^{-2ik_j d_j}}{1 + r_{k-1,f} r_{kf} e^{-2ik_j d_j}} \quad (f = p \text{ or } s) \quad (21b)$$

여기서  $r_{j-1,f}$ 는  $j-2$ 번째 박막과  $j-1$ 번째 박막의 경계면에서  $p$ 파( $f=p$ ) 또는  $s$ 파( $f=s$ )의 Fresnel 반사계수를 가리킨다. 이상과 같이 구한 반사계수, 투과계수 그리고 반사행렬, 투과행렬, 변환행렬 등의 표현들을 식 (16a), (16b), (16c)에 대입하여 정리하면 시료의 작용을 나타내는 Jones 행렬인  $\vec{R}_S^{yz}$ 의 구체적인 표현을 구할 수 있고 이를 형식적으로 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\vec{R}_S^{yz} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \quad (22)$$

이전의 보고에서 단축이방성 박막과 등방성 매질인 공간간의 경계면에서  $e$ 파와  $o$ 파가 반사에 따르는 고유편광상태가 아님에도 불구하고 반사행렬을  $\vec{R}^{eo'} = \begin{pmatrix} r_{1e}' & 0 \\ 0 & r_{1o}' \end{pmatrix}$ 와 같이 대각선 행렬로 표현한 오류를<sup>[6]</sup> 식 (16a)에서  $\vec{C}_{1+}^{LE} \cdot \vec{R}_{10} \cdot \vec{C}_{1-}^{EL}$ 와 같이 바로 잡았다. 같은 맥락으로 이방성 박막과 등방성 매질간의 경계면에서 반사에 따른 편광상태 변화를 계산할 때는 주어진 반사계수 표현들을 사용할 수 있도록 하며 이방성 박막내에서 전파할 때는 전파의 편광고유상태를 유지할 수 있도록 변환행렬을 적절하게 적용하여 반사행렬 및 투과행렬의 표현을 식 (16a), (16b) 그리고 (16c)와 같이 제시하였다. 가상적인 등방성박막이 삽입되는 단축이방성 박막 표면층과 주층간의 반사행렬과 투과행렬이나 단축이방성 박막 주층과 그 아래의 등방성 다층박막간의 계면에서의 반사행렬과 투과행렬도 동일한 형식으로 표현하였다.

### V. 유효반사계수의 근사적인 표현 및 타원상수의 측정과 분석

앞에서 설명한 바와 같이 이방성 박막의 경계면에서 반사할 때는  $p$ 파와  $s$ 파의 반사계수 표현들을 활용하고 이방성 박막내부를 진행할 때는  $e$ 파와  $o$ 파의 전파행렬을 활용하며 이방성 박막내에서의 다중반사를 반영하기위해 식 (16a), (16b), (16c)과 같은 계산식들을 제시하였다. 그러나 이 계산식들은 무한히수의 덧셈을 필요로 하므로 현실적으로 사용하기가 어렵다. 실제 LCD에 사용되는 배향막의 경우  $m=2$  이상의 항은 모두 더하여도 그 크기가 전체의 1.0 % 이하이므로 이 정도의 오차가 허용되면  $m=1$  항까지만 반영한 근사식을 사용해도 무방하다.  $m=1$  항까지만 고려할 때 반사계수의 표현들은 다음과 같다.

$$\vec{R}_S^e = \vec{R}_{01} + \vec{T}_{10} \cdot (\vec{I} + \vec{P}_1 \cdot \vec{R}_{12}^{eff} \cdot \vec{P}_1 \cdot \vec{C}_{1+}^{LE} \cdot \vec{R}_{10} \cdot \vec{C}_{1-}^{EL}) \cdot \vec{P}_1 \cdot \vec{R}_{12}^{eff} \cdot \vec{P}_1 \cdot \vec{T}_{01} \quad (23a)$$

$$\vec{R}_{12}^{eff} = \vec{R}_{12} + \vec{T}_{21} \cdot (\vec{I} + \vec{P}_2 \cdot \vec{R}_{23}^{eff} \cdot \vec{P}_2 \cdot \vec{R}_{21}) \cdot \vec{P}_2 \cdot \vec{R}_{23}^{eff} \cdot \vec{P}_2 \cdot \vec{T}_{12} \quad (23b)$$

$$\vec{R}_{23}^{eff} = \vec{C}_{2-}^{LE} \cdot \vec{R}_{23} \cdot \vec{C}_{2+}^{EL} + \vec{T}_{32} \cdot (\vec{I} + \vec{P}_3 \cdot \vec{R}_{34}^{eff} \cdot \vec{P}_3 \cdot \vec{R}_{32}) \cdot \vec{P}_3 \cdot \vec{R}_{34}^{eff} \cdot \vec{P}_3 \cdot \vec{T}_{23} \quad (23c)$$

PSA(Polarizer-Sample-Analyzer) 구조를 가지고 회전검광자 방식으로 구동하는 타원계에 측정되는 빛의 세기는 검광자의 회전 각속도  $\omega$ 의 삼각함수로 다음과 같이 표현된다.<sup>[10]</sup>

$$I_D = |E|^2 = I_0(1 + \alpha \cos 2\omega t + \beta \sin 2\omega t) \quad (24)$$

여기에서 푸리에 계수인  $\alpha$ 와  $\beta$ 는 편광자의 방위각  $P$ 와 식 (22)의 반사행렬의 성분으로 식 (25a), (25b), 그리고 (25c)와 같이 표현되는  $\zeta_{cc}$ ,  $\zeta_{ss}$  그리고  $\zeta_{sc}$ 로써 아래 식 (26a), (26b)와 같이 표현된다.<sup>[6]</sup>

$$\zeta_{cc} = |T_{11}|^2 \cos^2 P + |T_{12}|^2 \sin^2 P - (T_{11} T_{12}^* + T_{11}^* T_{12}) \sin P \cos P \quad (25a)$$

$$\zeta_{ss} = |T_{21}|^2 \cos^2 P + |T_{22}|^2 \sin^2 P - (T_{21} T_{22}^* + T_{21}^* T_{22}) \sin P \cos P \quad (25b)$$

$$\zeta_{sc} = (T_{11} T_{21}^* + T_{11}^* T_{21}) \cos^2 P + (T_{12} T_{22}^* + T_{12}^* T_{22}) \sin^2 P - (T_{11} T_{22}^* + T_{11}^* T_{22} + T_{12} T_{21}^* + T_{12}^* T_{21}) \sin P \cos P \quad (25c)$$

$$\alpha = \frac{\zeta_{cc} - \zeta_{ss}}{\zeta_{cc} + \zeta_{ss}} \quad (26a)$$

$$\beta = \frac{\zeta_{sc}}{\zeta_{cc} + \zeta_{ss}} \quad (26b)$$

식 (26a)와 식 (26b)에 따라 계산한 푸리에계수  $\alpha, \beta$ 를 측

정으로 구한  $\alpha, \beta$  값들에 최적맞춤하는 과정을 통하여 이방성 박막의 미지변수들을 결정할 수 있다. 푸리에계수에 내포되어 있는 유효반사계수를 표현하는 구체적인 수식들은 모델링 방법으로 등방성 다층박막이 있는 기층위에 코팅되어 있는 단축이방성 박막을 해석하는데 도움을 줄 것이다. 배향막의 경우 타원법을 사용하여 배향막의 정상굴절률과 이상굴절률, 두께, 광축의 방위각에 더하여 표면층의 존재여부와 더불어 광축의 각도 분포를 파악하는데 본 수학적 표현들이 도움을 줄 수 있을 것으로 판단한다.

### 요 약

두 개의 단축이방성 박막이 다층박막시료에 코팅되어 있을 때 유효반사계수들을 구하였다. 이 유효반사계수를 바탕으로 회전검광자형 타원계에 적용되는 타원상수 표현들을 구체적으로 제시하였다. 이를 통해 배향막과 같은 단축이방성 박막을 분석할 때 배향막의 정상굴절률  $n_o$ 와 이상굴절률  $n_e$ 과 함께 이 배향막을 표면층과 주층 각각으로 나누어 각각의 두께, 광축의 방위각과 기울임각 들을 정량적으로 해석할 수 있도록 하였다.

### References

1. D. W. Berreman, "Optics in stratified and anisotropic media: 4x4-matrix formalism," J. Opt. Soc. Am. **62**, 502-510 (1972).
2. I. Hirose, "Method of characterizing rubbed polyimide film for liquid crystal display devices using reflection ellipsometry," Jpn. J. Appl. Phys. **35**, 5873-5875 (1996).
3. P. Yeh and C. Gu, *Optics of Liquid Crystal Displays* (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1999), Chapter 3 & Chapter 8.
4. A. Lien, "Extended Jones matrix representation for the twisted nematic liquid-crystal display at oblique incidence," Appl. Phys. Lett. **57**, 2767-2769 (1990).
5. A. Lien, "A detailed derivation of extended Jones matrix representation for twisted nematic liquid crystal displays," Liquid Crystals **22**, 171-175 (1997).
6. S. Y. Kim, "Ellipsometric expressions of multilayered substrate coated with a uniaxially anisotropic alignment layer," Korean J. Opt. Photon. (Hankook Kwanghak Hoeji) **24**, 271-278 (2013).
7. J. W. Ryu, Ph. D. Thesis, Ajou University, Suwon (2010).
8. R. M. A. Azzam and N. M. Bashara, *Ellipsometry and Polarized Light* (North-Holland, Amsterdam, 1987), Chapter 4.
9. O. S. Heaven, *Optical Properties of Thin Films* (Dover Publication, Inc., 1955).
10. S. Y. Kim, *Ellipsometry* (Ajou University Press, Gyeonggi, Korea, 2000), Chapter 3-4.