

Ellipsometric Expressions for a Sample Coated with Uniaxially Anisotropic Layers

Sang Youl Kim[†]

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

(Received July 23, 2015; Revised manuscript September 2, 2015; Accepted September 14, 2015)

The effective reflection coefficients for light obliquely incident upon a substrate coated with uniaxially anisotropic films and with isotropic films are derived. Multiple reflections inside anisotropic films, as well as those inside isotropic films, are properly treated. These expressions, together with the related ellipsometric expressions, can be used to find the nonuniform distribution of an uniaxially anisotropic film perpendicular to the film's surface, by approximating it as consisting of uniaxially anisotropic uniform layers and applying the conventional modeling technique for spectroscopic ellipsometry.

Keywords: Reflection ellipsometry, Uniaxial layers, Distribution of optic axis

OCIS codes: (240.2130) Ellipsometry and polarimetry; (120.4630) Optical inspection; (240.0310) Thin films; (120.2040) Displays

단축 이방성 박막들이 코팅된 시료의 타원식

김상열[†]

아주대학교 물리학과

Ⓣ 443-749 경기도 수원시 영통구 월드컵로 206

(2015년 7월 23일 받음, 2015년 9월 2일 수정본 받음, 2015년 9월 14일 게재 확정)

단축이방성 박막들과 등방성 박막들이 코팅되어 있는 시료에 비스듬히 입사한 빛의 유효반사계수 표현들을 유도하였다. 단축 이방성 박막 내에서의 다중반사 효과를 반영하여 여러 층의 등방성 박막들과 이방성 박막들이 섞여 있는 시료의 유효반사계수 표현들과 타원상수 표현들을 제시함으로써 시료면에 수직한 방향으로 균일하지 않은 단축이방성 분포를 가진 시료의 광학이방성을 여러 개의 단축이방성 박막으로 나누어 분석할 수 있도록 하였다.

Keywords: 반사타원법, 단축이방성 다층박막, 광축의 분포

OCIS codes: (240.2130) Ellipsometry and polarimetry; (120.4630) Optical inspection; (240.0310) Thin films; (120.2040) Displays

I. 서 론

광학이방성이 매우 작은 시료의 광학이방성 분포를 파악하기 위해서는 미세 광학이방성을 정밀하게 측정할 수 있는 측정 장비와 함께 미세 광학이방성을 엄밀하게 해석할 수 있게 하는 수학적 표현이 필요하다. 측정 장비와 해석식들이 갖추어 졌을 때 광학이방성의 원천이 되는 구성물질의 복굴절과 공간분포를 파악할 수 있게 된다. 미세한 광학이방성을 정밀하게 해석한 선행 연구로 일반적인 PCSA (polarizer-compensator-sample-analyzer) 구조의 타원계(ellipsometer)로부터 최근 광원, 구동부와 전자제어부, 광량측정소자, 편광제어 방식 등을 개선하여 측정정밀도를 대폭 향상시킴과 동시에 이 개선된 타원계를 사용하여 러빙된 폴리이미드(polyimide, PI) 배향막의 초기

세 광학이방성과 러빙세기의 상관관계를 분석한 결과가 보고된 바 있다.^[1-3] 한편 이방성 다층박막계의 광학이방성을 해석하기 위해서는 Berreman의 4×4 행렬식이나 상대적으로 사용이 간편한 확장된(extended) Jones 행렬이 많이 사용된다.^[4-7] 광학이방성이 매우 작은 러빙된 PI 배향막과 같이 경계면에서의 반사나 투과에 의한 편광효과를 무시할 수 없을 경우에는 단축이방성 박막 내부에서의 다중반사를 엄밀하게 취급하여야 하는데 단축이방성 박막이 두 개 있을 경우까지 유효 반사계수와 타원상수들을 구체적으로 유도한 수학적 표현이 최근에 보고된 바 있다.^[8-9]

본 연구에서는 두 개 이상의 단축이방성 박막들이 등방성 박막들과 함께 코팅된 시료의 유효반사계수의 구체적인 표현들을 유도하고 이 표현들과 함께 타원상수 표현들을 제공

[†]E-mail: sykim@ajou.ac.kr

함으로써 러빙된 PI 배향막과 같이 크기가 매우 작지만 단축 이방성을 가지고 있고 그 단축이방성이 표면으로부터 수직 방향으로 어떤 분포를 가지고 있는 시료의 단축이방성 분포를 여러 개의 균일한 단축이방성 박막들이 있는 모델을 사용하여 해석하는데 도움을 주고자 한다.

II. 단축이방성 박막 내에서의 빛의 전파

좌표축은 z축의 음의 방향에서 양의 방향으로 빛이 진행하도록 설정한다. 입사면은 yz 평면과 일치시키며 매질과 시료의 경계면은 xy 평면이 되도록 한다. 단축이방성 박막의 정상굴절률을 n_o , 이상굴절률을 n_e 라 하며 광축의 방향은 Fig. 1과 같이 z축과 이루는 각도는 θ , xy 평면상에 투영시켰을 때 x축과 이루는 각도는 ψ 라고 한다. 매질의 굴절률은 n_0 , 입사각을 ϕ_0 , 이방성 박막 내에서의 굴절각은 정상광선인 경우 ϕ_o , 이상광선일 경우 ϕ_e 와 같이 표시한다. 이방성 박막 내의 굴절각들은 파수벡터의 수직성분과 수평성분을 사용하여 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\phi_o = \tan^{-1}\left(\frac{k_{oy}}{k_{oz}}\right) \quad (1a)$$

$$\phi_e = \tan^{-1}\left(\frac{k_{ey}}{k_{ez}}\right) \quad (1b)$$

여기서 k_{oy} 와 k_{oz} 는 각각 정상광선의 파수벡터의 y축 성분과 z축 성분을 가리키며 k_{ey} 와 k_{ez} 는 각각 이상광선의 파수벡터의 y축 성분과 z축 성분을 가리키는데 이들은 아래식과 같이 표현된다.^[6,9,10]

$$k_{oy} = k_{ey} = \frac{2\pi n_0}{\lambda} \sin\phi_0 \quad (2a)$$

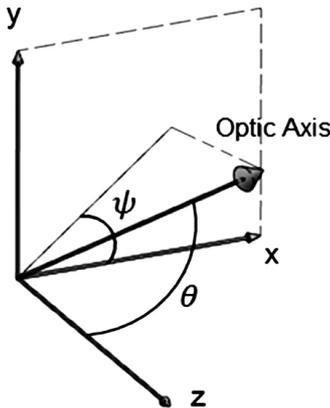


FIG. 1. A schematic figure showing that the optic axis of a uniaxial layer makes an angle θ with z-axis and its projection on xy plane makes an angle ψ with x-axis. An incident light is in yz plane and the interface is in xy plane.

$$k_{oz} = \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{n_o^2 - n_0^2 \sin^2\phi_0} \quad (2b)$$

$$k_{ez} = \frac{v + \sqrt{v^2 - 4uw}}{2u} \quad (2c)$$

단 u, v, w 는 아래와 같다.

$$u = \frac{\sin^2\theta}{n_e^2} + \frac{\cos^2\theta}{n_o^2} \quad (3a)$$

$$v = \sin 2\theta \sin\psi \left(\frac{2\pi n_0 \sin\phi_0}{\lambda} \right) \left(\frac{1}{n_e^2} - \frac{1}{n_o^2} \right) \quad (3b)$$

$$w = \left(\frac{2\pi n_0}{\lambda} \sin\phi_0 \right)^2 \left(\frac{1 - \sin^2\theta \sin^2\psi}{n_e^2} + \frac{\sin^2\theta \sin^2\psi}{n_o^2} \right) - \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \quad (3c)$$

입사파의 파수벡터 \vec{k}_0 와 단축이방성 박막 내에서의 굴절 파의 파수벡터 \vec{k}_o, \vec{k}_e 들은 식 (2)의 성분들과 입사각으로 각각 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\vec{k}_0 = k_{0y}\hat{y} + k_{0z}\hat{z} = k_0(\sin\phi_0\hat{y} + \cos\phi_0\hat{z}) \quad (4a)$$

$$\vec{k}_o = k_{oy}\hat{y} + k_{oz}\hat{z} = k_o(\sin\phi_o\hat{y} + \cos\phi_o\hat{z}) \quad (4b)$$

$$\vec{k}_e = k_{ey}\hat{y} + k_{ez}\hat{z} = k_e(\sin\phi_e\hat{y} + \cos\phi_e\hat{z}) \quad (4c)$$

이방성 박막 내 정상광선의 전기장 단위벡터 \hat{o} 와 이상광선의 전기장 단위벡터 \hat{e} 는 광축이 \hat{c} 와 나란한 주축 상의 단위벡터인 $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}$ 를 사용하여 각각 다음과 같이 쓸 수 있다.^[6,9]

$$\hat{o} = N_o \left[(\hat{b} \cdot \vec{k}_o)\hat{a} - (\hat{a} \cdot \vec{k}_o)\hat{b} \right] \quad (5a)$$

$$\hat{e} = N_e \left[\left(\frac{\hat{a} \cdot \vec{k}_e}{n^2 - n_o^2} \right) \hat{a} + \left(\frac{\hat{b} \cdot \vec{k}_e}{n^2 - n_o^2} \right) \hat{b} + \left(\frac{\hat{c} \cdot \vec{k}_e}{n^2 - n_e^2} \right) \hat{c} \right] \quad (5b)$$

여기에서 N_o 와 N_e 는 틀맞춤상수(normalization constant)이며 n 은 광축과 비스듬한 각도로 진행하는 일반적인 이상광선의 굴절률이다.

$$\frac{1}{n^2} = \left(\frac{1}{n_o^2} - \frac{1}{n_e^2} \right) \left(\frac{\hat{c} \cdot \vec{k}_e}{k_e} \right)^2 + \frac{1}{n_e^2} \quad (6)$$

III. 등방성 매질과 단축이방성 박막간의 경계면에서 반사계수와 투과계수

등방성 매질과 단축이방성 박막간의 경계면에서 투과계수가 Yeh와 Ryu 등에 의하여 구체적인 수식들로 제시된 바 있는 데^[6,10] 여기에서는 Fig. 2에서 보여주는 바와 같이 Azzam과 Hecht 등이 적용한 방식에 따라 p파의 방향을 설정하고

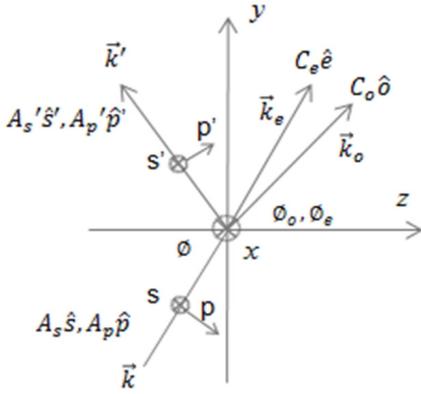


FIG. 2. Propagation of light from isotropic medium to anisotropic medium.

^[11,12] 이러한 p파의 방향 설정과 부합하도록 아래식 (7a)-(7d)와 같이 수정한 투과계수 표현들을 사용하였다.

$$t_{pe} = \frac{-2k_{0z}b_{11}}{b_{11}b_{22} - b_{12}b_{21}} \quad (7a)$$

$$t_{po} = \frac{2k_{0z}b_{21}}{b_{11}b_{22} - b_{12}b_{21}} \quad (7b)$$

$$t_{se} = \frac{-2k_{0z}b_{12}}{b_{11}b_{22} - b_{12}b_{21}} \quad (7c)$$

$$t_{so} = \frac{2k_{0z}b_{22}}{b_{11}b_{22} - b_{12}b_{21}} \quad (7d)$$

단

$$b_{11} = o_x(k_{0z} + k_{oz}) \quad (8a)$$

$$b_{21} = e_x(k_{0z} + k_{ez}) \quad (8b)$$

$$b_{12} = o_y(k_0 + k_{oz}k_{0z}/k_0) - o_z k_{0y}k_{0z}/k_0 \quad (8c)$$

$$b_{22} = e_y(k_0 + k_{ez}k_{0z}/k_0) - e_z k_{0y}k_{0z}/k_0 \quad (8d)$$

이다. 여기서 투과계수의 아래 첨자 중 p와 s는 각각 p파 또는 s파를 나타내며 e와 o는 각각 e파(이상광선) 또는 o파(정상광선)를 나타낸다. 즉 t_{pe} 는 입사파가 p파이며 투과파가 e파인 경우의 투과계수를 말한다. 등방성 매질과 단축이방성 박막간의 경계면에서 반사계수들도 다음과 같이 수정된 표현을 사용하였다.

$$r_{pp} = -\frac{b_{11}a_{22} - b_{21}a_{12}}{b_{11}b_{22} - b_{12}b_{21}} \quad (9a)$$

$$r_{ps} = -\frac{b_{11}a_{21} - b_{21}a_{11}}{b_{11}b_{22} - b_{12}b_{21}} \quad (9b)$$

$$r_{sp} = \frac{b_{22}a_{12} - b_{12}a_{22}}{b_{11}b_{22} - b_{12}b_{21}} \quad (9c)$$

$$r_{ss} = \frac{b_{22}a_{11} - b_{12}a_{21}}{b_{11}b_{22} - b_{12}b_{21}} \quad (9d)$$

단

$$a_{11} = o_x(k_{0z} - k_{oz}) \quad (10a)$$

$$a_{21} = e_x(k_{0z} - k_{ez}) \quad (10b)$$

$$a_{12} = o_y(k_0 - k_{oz}k_{0z}/k_0) + o_z k_{0y}k_{0z}/k_0 \quad (10c)$$

$$a_{22} = e_y(k_0 - k_{ez}k_{0z}/k_0) + e_z k_{0y}k_{0z}/k_0 \quad (10d)$$

한편 Fig. 3에서와 같이 단축이방성 박막 아래에 굴절률이 n_j 인 등방성 매질이 있을 때 경계면에서 반사계수들은 아래와 같다.

$$r_{oo} = \frac{A_{11}B_{22} - A_{21}B_{12}}{B_{11}B_{22} - B_{12}B_{21}} \quad (11a)$$

$$r_{oe} = \frac{A_{21}B_{11} - A_{11}B_{21}}{B_{11}B_{22} - B_{12}B_{21}} \quad (11b)$$

$$r_{eo} = \frac{A_{12}B_{22} - A_{22}B_{12}}{B_{11}B_{22} - B_{12}B_{21}} \quad (11c)$$

$$r_{ee} = \frac{A_{22}B_{11} - A_{12}B_{21}}{B_{11}B_{22} - B_{12}B_{21}} \quad (11d)$$

단

$$A_{11} = (k_{oz} - k_{jz})o_x \quad (12a)$$

$$A_{12} = (k_{ez} - k_{jz})e_x \quad (12b)$$

$$A_{21} = (k_{oz}k_{jz}/k_j - k_j)o_y - (k_{oy}k_{jz}/k_j)o_z \quad (12c)$$

$$A_{22} = (k_{ez}k_{jz}/k_j - k_j)e_y - (k_{ey}k_{jz}/k_j)e_z \quad (12d)$$

$$B_{11} = (k_{oz} + k_{jz})o_x' \quad (12e)$$

$$B_{12} = (-k_{ez}' + k_{jz})e_x' \quad (12f)$$

$$B_{21} = (k_{oz}k_{jz}/k_j + k_j)o_y' + (k_{oy}k_{jz}/k_j)o_z' \quad (12g)$$

$$B_{22} = (-k_{ez}'k_{jz}/k_j + k_j)e_y' + (k_{ey}k_{jz}/k_j)e_z' \quad (12h)$$

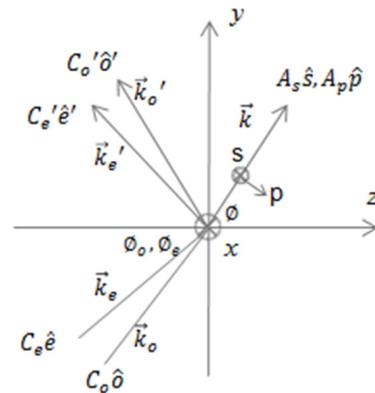


FIG. 3. Propagation of light from anisotropic medium to isotropic medium.

이다. 여기서 ' 표시는 반사광을 나타낸다. 즉 o_z' 은 단축이 방성 박막과 그 아래에 있는 등방성 매질과의 경계면에서 반사한 정상광선의 전기장 단위벡터의 z 성분을 말하며 k_{ez}' 은 반사한 이상광선의 파수벡터의 z 성분을 말한다. 반사파의 단위벡터 \hat{o}' 과 \hat{e}' 은 \vec{k}_o' 과 \vec{k}_e' 을 식 (5a)의 \vec{k}_o , 식 (5b)의 \vec{k}_e 자리에 각각 대입하여 구한다. 입사파의 파수벡터들은 식 (4b), 식 (4c)와 같이, 반사파와 굴절파의 파수벡터들은 식 (13)과 같이 표현된다. 이상광선인 경우 일반적으로 입사각과 반사각은 일치하지 않는데 식 (14b)와 식(14a)의 반사각과 파수벡터의 z 성분의 표현은 입사각과 일치하지 않는 이상광선의 반사각 관련 표현을 잘 나타내고 있다.

$$\vec{k}_o' = k_{oy}\hat{y} - k_{oz}\hat{z} = k_o(\sin\phi_o\hat{y} - \cos\phi_o\hat{z}) \quad (13a)$$

$$\vec{k}_e' = k_{ey}\hat{y} + k_{ez}'\hat{z} = k_e'(\sin\phi_e'\hat{y} - \cos\phi_e'\hat{z}) \quad (13b)$$

$$\vec{k}_j = k_{jy}\hat{y} + k_{jz}\hat{z} = k_j(\sin\phi_j\hat{y} + \cos\phi_j\hat{z}) \quad (13c)$$

단

$$k_{ez}' = \frac{v - \sqrt{v^2 - 4uw}}{2u} \quad (14a)$$

$$\phi_e' = \tan^{-1}\left(\frac{k_{ey}}{-k_{ez}'}\right) \quad (14b)$$

$$n_0\sin\phi_o = n_j\sin\phi_j \quad (14c)$$

이다. 또한 이 단축이방성 박막에서 그 아래에 있는 굴절률이 n_j 인 등방성 매질로의 투과계수 $t_{ep}, t_{op}, t_{es}, t_{os}$ 들 또한 아래 식들과 같이 구해진다.

$$t_{ep} = \frac{g_{11}f_{22} - g_{21}f_{21}}{g_{11}g_{22} - g_{12}g_{21}} \quad (15a)$$

$$t_{op} = \frac{g_{11}f_{12} - g_{21}f_{11}}{g_{11}g_{22} - g_{12}g_{21}} \quad (15b)$$

$$t_{es} = \frac{f_{21}g_{22} - f_{22}g_{12}}{g_{11}g_{22} - g_{12}g_{21}} \quad (15c)$$

$$t_{os} = \frac{f_{11}g_{22} - f_{12}g_{12}}{g_{11}g_{22} - g_{12}g_{21}} \quad (15d)$$

단

$$f_{11} = a_1c_3 - a_3c_1 \quad (16a)$$

$$f_{12} = a_2c_4 - a_4c_2 \quad (16b)$$

$$f_{21} = b_1c_3 - b_3c_1 \quad (16c)$$

$$f_{22} = b_2c_4 - b_4c_2 \quad (16d)$$

$$g_{11} = d_1c_3 - d_3c_1 \quad (16e)$$

$$g_{12} = e_1c_3 - e_3c_1 \quad (16f)$$

$$g_{21} = d_2c_4 - d_4c_2 \quad (16g)$$

$$g_{22} = e_2c_4 - e_4c_2 \quad (16h)$$

이며

$$a_1 = o_xo_y' - o_yo_x' \quad b_1 = e_xo_y' - e_yo_x'$$

$$c_1 = e_x'o_y' - e_y'o_x' \quad d_1 = o_y' \quad e_1 = o_x'k_{jz}/k_j$$

$$a_2 = o_xe_y' - o_ye_x' \quad b_2 = e_xe_y' - e_ye_x'$$

$$c_2 = o_x'e_y' - o_y'e_x' \quad d_2 = e_y' \quad e_2 = e_x'k_{jz}/k_j$$

$$a_3 = k_{oz}o_x'(k_{oy}o_z - k_{oz}o_y) + k_{oz}o_x(k_{oy}o_z' + k_{oz}o_y')$$

$$b_3 = k_{oz}o_x'(k_{ey}e_z - k_{ez}e_y) + k_{ez}e_x(k_{oy}o_z' + k_{oz}o_y')$$

$$c_3 = k_{oz}o_x'(k_{ey}e_z' - k_{ez}'e_y') + k_{ez}'e_x'(k_{oy}o_z' + k_{oz}o_y')$$

$$d_3 = k_{jz}(k_{oy}o_z' + k_{oz}o_y')$$

$$e_3 = k_jk_{oz}o_x'$$

$$a_4 = k_{ez}'e_x'(k_{oy}o_z - k_{oz}o_y) - k_{oz}o_x(k_{ey}e_z' - k_{ez}'e_y')$$

$$b_4 = k_{ez}'e_x'(k_{ey}e_z - k_{ez}e_y) - k_{ez}e_x(k_{ey}e_z' - k_{ez}'e_y')$$

$$c_4 = k_{ez}'e_x'(k_{oy}o_z' + k_{oz}o_y') + k_{oz}o_x'(k_{ey}e_z' - k_{ez}'e_y')$$

$$d_4 = -k_{jz}(k_{ey}e_z' - k_{ez}'e_y')$$

$$e_4 = k_jk_{ez}'e_x'$$

이다.

마지막으로 이 단축 이방성박막 위에 굴절률이 n_0 인 등방성 매질이 있을 때 경계면에서 반사계수들인 $r_{oo}', r_{oe}', r_{eo}', r_{ee}'$ 과 투과계수들인 $t_{ep}', t_{op}', t_{es}', t_{os}'$ 은 식 (4)와 식 (13) 대신 식 (17)의 입사파와 반사파, 그리고 굴절파의 파수벡터 표현들을 사용하여 식 (11)과 식 (15)에 따라 계산한다.

$$\vec{k}_{o\uparrow} = k_{oy\uparrow}\hat{y} + k_{oz\uparrow}\hat{z} = k_o(\sin\phi_o\hat{y} - \cos\phi_o\hat{z}) \quad (17a)$$

$$\vec{k}_{e\uparrow} = k_{ey\uparrow}\hat{y} + k_{ez\uparrow}\hat{z} = k_e'(\sin\phi_e'\hat{y} - \cos\phi_e'\hat{z}) \quad (17b)$$

$$\vec{k}_{o\uparrow}' = k_{oy\uparrow}'\hat{y} - k_{oz\uparrow}'\hat{z} = k_o(\sin\phi_o\hat{y} + \cos\phi_o\hat{z}) \quad (17c)$$

$$\vec{k}_{e\uparrow}' = k_{ey\uparrow}'\hat{y} + k_{ez\uparrow}'\hat{z} = k_e(\sin\phi_e\hat{y} + \cos\phi_e\hat{z}) \quad (17d)$$

$$\vec{k}_{o\uparrow} = k_{oy\uparrow}\hat{y} + k_{oz\uparrow}\hat{z} = k_o(\sin\phi_o\hat{y} - \cos\phi_o\hat{z}) \quad (17e)$$

단

$$k_{oz\uparrow} = -k_{oz} \quad (18a)$$

$$k_{ez\uparrow} = k_{ez}' = \frac{v - \sqrt{v^2 - 4uw}}{2u} \quad (18b)$$

$$k_{ez\uparrow}' = k_{ez} = \frac{v + \sqrt{v^2 - 4uw}}{2u} \quad (18c)$$

이다.

IV. 등방성 매질 사이에 하나의 단축이방성 박막이 있을 때의 유효반사계수와 단축이방성 매질 사이에 하나의 등방성 박막이 있을 때의 유효반사계수

Figure 4에서와 같이 두께가 d 인 단축이방성 박막이 굴절

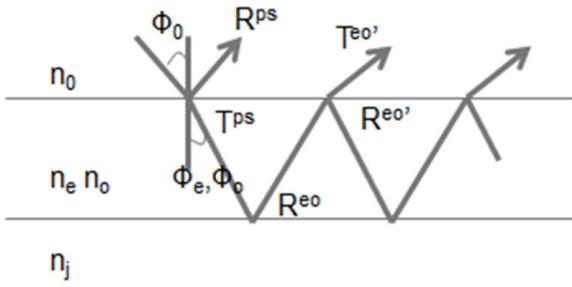


FIG. 4. A schematic diagram showing the multiple reflection in a uniaxially anisotropic film placed in between two isotropic media.

률이 n_0 인 등방성 매질(0 매질)과 굴절률이 n_j 인 등방성 매질(j 매질) 사이에 놓여 있는 시료의 유효 반사행렬을 식 (19)와 같이 \vec{R}_{eff}^{ps} 라 두면 이 반사행렬은 0 매질과 단축이방성 박막의 경계면에서의 반사를 나타내는 행렬과 단축이방성 박막 내의 다중반사에 의한 효과를 나타내는 행렬들로 식 (20)과 같이 쓸 수 있다.

$$\begin{pmatrix} E_p^- \\ E_s^- \end{pmatrix} = \vec{R}_{eff}^{ps} \begin{pmatrix} E_p^+ \\ E_s^+ \end{pmatrix} \quad (19)$$

여기에서 E_p^- 와 E_s^- 는 각각 경계면에서 반사하는 빛의 전기장의 p 와 성분과 s 파 성분을 가리키며 E_p^+ 와 E_s^+ 는 각각 경계면으로 입사하는 빛의 전기장의 p 와 성분과 s 파 성분을 가리킨다.

$$\vec{R}_{eff}^{ps} = \vec{R}^{ps} + \vec{T}^{eo'} \cdot \left[I + \sum_{m=1}^{\infty} (\vec{P}^{eo'} \cdot \vec{R}^{eo} \cdot \vec{P}^{eo} \cdot \vec{R}^{eo'})^m \right] \cdot \vec{P}^{eo'} \cdot \vec{R}^{eo} \cdot \vec{P}^{eo} \cdot \vec{T}^{ps} \quad (20)$$

여기에서 $\vec{R}^{ps} = \begin{pmatrix} r_{pp} & r_{sp} \\ r_{ps} & r_{ss} \end{pmatrix}$ 는 0 매질과 단축이방성 박막 간의 경계면에서의 반사행렬을 가리키며 $\vec{T}^{eo'} = \begin{pmatrix} t_{ep}' & t_{op}' \\ t_{es}' & t_{os}' \end{pmatrix}$ 는 단축이방성 박막에서 0 매질로의 투과행렬을 가리키며 $\vec{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ 는 단위행렬, $\vec{P}^{eo'} = \begin{pmatrix} e^{-ik_z d} & 0 \\ 0 & e^{ik_z d} \end{pmatrix}$ 와 $\vec{P}^{eo} = \begin{pmatrix} e^{ik_z d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_z d} \end{pmatrix}$ 는 단축이방성 박막 내의 전파행렬들, $\vec{R}^{eo} = \begin{pmatrix} r_{ee} & r_{oe} \\ r_{eo} & r_{oo} \end{pmatrix}$ 는 단축이방성 박막과 그 아래의 j 매질 간의 경계면에서의 반사행렬, $\vec{R}^{eo'} = \begin{pmatrix} r_{ee}' & r_{oe}' \\ r_{eo}' & r_{oo}' \end{pmatrix}$ 는 단축이방성 박막과 그 위의 0 매질 간의 경계면에서의 반사행렬, 그리고 $\vec{T}^{ps} = \begin{pmatrix} t_{pe} & t_{se} \\ t_{po} & t_{so} \end{pmatrix}$ 는 0 매질에서 단축이방성 박막으로의 투과행렬을 가리킨다.

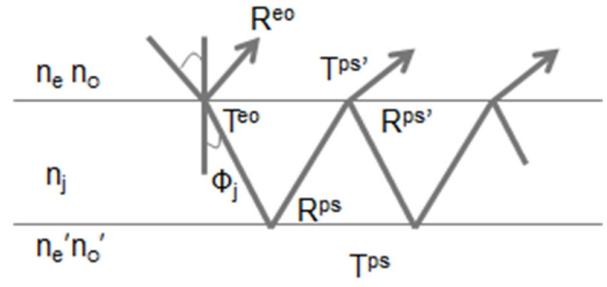


FIG. 5. A schematic diagram showing the multiple reflection in an isotropic film placed in between two uniaxially anisotropic media.

마찬가지로 Fig. 5에서와 같이 굴절률이 n_o, n_e 이고 광축의 각도가 ψ, θ 인 ξ 번째 단축이방성 매질과 굴절률이 n_o', n_e' 이고 광축의 각도가 ψ', θ' 인 η 번째 단축이방성 매질 사이에 두께가 d , 굴절률이 n_j 인 등방성 박막이 놓여 있는 시료의 유효 반사행렬을 식 (21)과 같이 \vec{R}_{eff}^{eo} 라 두면 이 반사행렬은 ξ 매질과 등방성 박막의 경계면에서의 반사를 나타내는 행렬과 단축이방성 박막 내의 다중반사에 의한 효과를 나타내는 행렬들로 식 (22)와 같이 쓸 수 있다.

$$\begin{pmatrix} E_e^- \\ E_o^- \end{pmatrix} = \vec{R}_{eff}^{eo} \begin{pmatrix} E_e^+ \\ E_o^+ \end{pmatrix} \quad (21)$$

여기에서 E_e^- 와 E_o^- 는 각각 경계면에서 반사하는 빛의 전기장의 e 와 성분과 o 파 성분을 가리키며 E_e^+ 와 E_o^+ 는 각각 경계면으로 입사하는 빛의 전기장의 e 와 성분과 o 파 성분을 가리킨다.

$$\vec{R}_{eff}^{eo} = \vec{R}^{eo} + \vec{T}^{ps'} \cdot \left[I + \sum_{m=1}^{\infty} (\vec{P}^{ps} \cdot \vec{R}^{ps} \cdot \vec{P}^{ps} \cdot \vec{R}^{ps'})^m \right] \cdot \vec{P}^{ps} \cdot \vec{R}^{ps} \cdot \vec{P}^{ps} \cdot \vec{T}^{eo} \quad (22)$$

여기에서 $\vec{R}^{eo} = \begin{pmatrix} r_{ee} & r_{oe} \\ r_{eo} & r_{oo} \end{pmatrix}$ 는 ξ 번째 단축이방성 매질과 j 번째 등방성 박막간의 경계면에서 반사행렬을 가리키며 $\vec{T}^{ps'} = \begin{pmatrix} t_{pe}' & t_{se}' \\ t_{po}' & t_{so}' \end{pmatrix}$ 는 j 번째 등방성 박막과 그 위의 ξ 번째 단축이방성 매질 간의 경계면에서 투과행렬, $\vec{P}^{ps} = \begin{pmatrix} e^{ik_z d} & 0 \\ 0 & e^{-ik_z d} \end{pmatrix}$ 는 j 번째 등방성 박막 내의 전파행렬, $\vec{R}^{ps} = \begin{pmatrix} r_{pp} & r_{sp} \\ r_{ps} & r_{ss} \end{pmatrix}$ 는 j 번째 등방성 박막과 아래의 η 번째 단축이방성 매질 간의 경계면에서 반사행렬, $\vec{R}^{ps'} = \begin{pmatrix} r_{pp}' & r_{sp}' \\ r_{ps}' & r_{ss}' \end{pmatrix}$ 는 j 번째 등방성 박막과 그 위의 ξ 번째 단축이방성 매질 간의 경계면에서 반사행렬, 그

리고 $\vec{T}^{eo} = \begin{pmatrix} t_{ep} & t_{es} \\ t_{op} & t_{os} \end{pmatrix}$ 는 ξ 번째 단축이방성 매질에서 j 번째 등방성 박막 간의 경계면에서 투과행렬을 각각 가리킨다. 단 $\vec{T}^{ps'}$, \vec{R}^{ps} 그리고 $\vec{R}^{ps'}$ 의 성분들을 계산할 때에는 n_0 대신 n_j 을 사용하고 $\vec{T}^{ps'}$ 과 $\vec{R}^{ps'}$ 의 성분을 계산할 때에는 추가로 식 (4)의 파수벡터 z 성분의 부호를 반대로 한다.

한편 이전의 연구에서 단축이방성 박막과 등방성 매질 간의 경계면에서 e 파와 o 파의 반사행렬을 $\vec{R}^{eo'} = \begin{pmatrix} r_{1e}' & 0 \\ 0 & r_{1o}' \end{pmatrix}$ 와 같이 표현한 오류를^[8] $\vec{C}_+^{LE} \cdot \vec{R}^{ps} \cdot \vec{C}_-^{EL}$ 와 같이 변환행렬들을 사용하여 정정한 바 있다.^[9] 두 개의 단축 이방성 박막 사이에 가상의 등방성 박막이 삽입될 때 단축이방성 박막과 등방성 다층박막간의 계면에서의 반사행렬과 투과행렬도 동일하게 변환행렬을 사용하여 표현하였는데 본 연구에서는 이방성 박막과 등방성 매질 간의 경계면에서 반사계수들을 r_{ee} , r_{eo} , r_{oe} , r_{oo} 의 형태로 유도함으로써 변환행렬을 포함한 반사행렬 표현인 $\vec{C}_+^{LE} \cdot \vec{R}^{ps} \cdot \vec{C}_-^{EL}$ 대신 간단한 반사행렬인 \vec{R}^{eo} 을 사용할 수 있게 되어 식 (20), 식 (22)와 같이 한결 단순화된 유효 반사행렬 표현들을 얻었다.

V. 두 단축이방성 매질 사이의 경계면에서 유효반사계수와 유효투과계수

두 개의 단축이방성 매질이 있을 때 이 경계면에서의 반사는 두께가 0인 가상의 등방성 박막을 이 경계면에 삽입하고 등방성 박막 내에서의 다중반사를 고려하여 식 (22)로부터 그 유효반사행렬 $\vec{R}_{eff}^{eo+} = \begin{pmatrix} r_{ee,eff}^+ & r_{oe,eff}^+ \\ r_{eo,eff}^+ & r_{oo,eff}^+ \end{pmatrix}$ 의 표현을 얻을 수 있다. 즉 $d=0$ 두면 $\vec{P}^{ps} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ 가 되므로 식 (22)는 다음과 같이 간단하게 된다. 여기서 $+$ 표시는 두 단축이방성 매질 사이의 경계면에서의 반사임을 가리킨다.

$$\vec{R}_{eff}^{eo+} = \vec{R}^{eo} + \vec{T}^{ps'} \cdot \left[\vec{I} + \sum_{m=1}^{\infty} (\vec{R}^{ps} \cdot \vec{R}^{ps'})^m \right] \cdot \vec{R}^{ps} \cdot \vec{T}^{eo} \quad (23)$$

두 단축이방성 매질 간의 경계면에서 유효 투과행렬 $\vec{T}_{eff}^{eo+} = \begin{pmatrix} t_{ee,eff}^+ & t_{oe,eff}^+ \\ t_{eo,eff}^+ & t_{oo,eff}^+ \end{pmatrix}$ 의 표현도 마찬가지로 두께가 0인 가상의 등방성 박막을 경계면에 삽입하여 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\vec{T}_{eff}^{eo+} = \vec{T}^{ps} \cdot \left[\vec{I} + \sum_{m=1}^{\infty} (\vec{R}^{ps'} \cdot \vec{R}^{ps})^m \right] \cdot \vec{T}^{eo} \quad (24)$$

단 여기에서 \vec{T}^{ps} 는 j 번째 등방성 박막에서 그 아래에 있

는 단축이방성 매질로의 투과행렬을 가리킨다.

VI. 등방성 박막과 단축이방성 박막이 섞여 있는 시료의 유효반사계수와 타원법

이상과 같은 분석을 통해 등방성 매질과 단축이방성 매질, 등방성 박막과 단축이방성 박막이 섞여 있는 경우에도 두 매질 사이에 하나의 박막이 있는 계의 유효반사계수를 표현할 수 있음을 알게 되었다. 이에 따라 등방성이나 이방성의 여부에 무관하게 두 매질 사이에 하나의 박막이 있을 때 유효반사계수를 표현하는 방법을 알아보자. $k-1$ 번째인 박막과 $k+1$ 번째인 기층 사이에 k 번째인 박막이 있을 경우 유효반사행렬을 식 (25)와 같이 $\vec{R}_{eff}^{\xi\eta}$ 라 두면 이 유효반사행렬은 $k-1$ 번째인 박막과 k 번째인 박막의 경계면에서의 반사를 나타내는 행렬인 $\vec{R}^{\xi\eta}$ 과 k 번째인 박막 내의 다중반사에 의한 효과를 나타내는 행렬들로 식 (26)과 같이 쓸 수 있다.

$$\begin{pmatrix} E_{\xi}^- \\ E_{\eta}^- \end{pmatrix} = \vec{R}_{eff}^{\xi\eta} \begin{pmatrix} E_{\xi}^+ \\ E_{\eta}^+ \end{pmatrix} \quad (\xi, \eta = e, o \text{ or } p, s) \quad (25)$$

여기에서 E_{ξ}^- 와 E_{η}^- 는 각각 $k-1$ 번째인 박막과 k 번째인 박막간의 경계면에서 반사하는 빛의 전기장의 $\xi(e \text{ or } p)$ 과 성분과 $\eta(o \text{ or } s)$ 과 성분을 가리키며 E_{ξ}^+ 와 E_{η}^+ 는 각각 경계면으로 입사하는 빛의 전기장의 ξ 과 성분과 η 과 성분을 가리킨다.

$$\vec{R}_{eff}^{\xi\eta} = \vec{R}^{\xi\eta} + \vec{T}' \cdot \left[\vec{I} + \sum_{m=1}^{\infty} (\vec{P}' \cdot \vec{R} \cdot \vec{P} \cdot \vec{R}')^m \right] \cdot \vec{P}' \cdot \vec{R} \cdot \vec{P} \cdot \vec{T} \quad (\xi, \eta = e, o \text{ or } p, s) \quad (26)$$

여기에서 $\vec{R}^{\xi\eta}$ 는 $k-1$ 번째인 박막과 k 번째인 박막의 경계면에서 반사행렬, \vec{T}' 은 k 번째인 박막과 그 위의 $k-1$ 번째인 박막간의 경계면에서 투과행렬, \vec{P}' 과 \vec{P} 는 k 번째인 박막 내의 전파행렬, \vec{R} 은 k 번째인 박막과 그 아래의 $k+1$ 번째인 기층간의 경계면에서 반사행렬, \vec{R}' 은 k 번째인 박막과 그 위의 $k-1$ 번째인 박막간의 경계면에서 반사행렬, 그리고 \vec{T} 는 $k-1$ 번째인 박막과 k 번째인 박막간의 경계면에서 투과행렬을 각각 가리킨다. 이들 행렬을 구성하는 성분들의 구체적인 표현은 박막이나 기층의 등방성 또는 단축이방성 여부에 따라 적절한 수식을 사용하면 된다.

식 (25)와 식 (26)은 박막이 한 층이 있을 때 매질이나 박막이 등방성 물질이거나 단축이방성 물질이거나 여부에 관계없이 그 박막 내부에서의 다중반사를 반영한 유효반사행렬을 구할 수 있게 하는 표현이다. 등방성 다층박막이 있는 시료의 유효반사계수를 구할 때 기층과 그 위의 박막을 하나의 유효기층으로 대치시키고 이 유효기층과 그 위의 박막을 또 다른 유효기층으로 대치는 과정을 되풀이 하여 최종적으

로는 등방성 다층박막들이 있는 시료를 하나의 유효기층으로 대치시키는 Rouard의 방법^[13] 단축이방성 다층박막이 있는 시료에 적용시키면 다음과 같이 단축이방성 다층박막 시료의 유효반사계수를 구할 수 있다. 즉 박막이 여러 층이 있을 경우에 기층과 그 바로 위에 있는 박막만으로 구성된 계에 식 (25)와 식 (26)을 적용하여 기층과 이 박막으로 이루어진 계의 유효반사행렬을 먼저 구한다. 이 유효반사행렬은 기층과 그 위의 박막 내의 다중반사에 의한 작용과 동일한 작용을 하는 유효기층의 반사행렬이므로 기층과 그 위의 박막을 대치하는 유효기층의 반사행렬이 된다. 그 다음 이 유효기층과 그 바로 위에 있는 박막만으로 구성된 계에 대하여 동일한 과정을 적용하면 기층과 그 위에 있는 두 개의 박막으로 구성된 계에 의한 작용과 동일한 작용을 하는 새로운 유효기층의 반사행렬을 구할 수 있게 된다. 이러한 과정이 되풀이하면 다층박막 구조 시료를 대치하는 유효기층의 반사행렬을 구할 수 있다. 식 (25)와 식 (26)은 등방성 박막과 단축이방성 박막 모두에 적용되므로 이 방법은 단축이방성 박막과 등방성 박막이 섞여있는 임의의 다층박막 시료에 적용될 수 있는 활용성이 매우 큰 방법이라고 할 수 있다. 이 상과 같이 구한 유효반사행렬 \vec{R}_S 는 다층박막 시료의 반사 작용을 나타내는 Jones 행렬인데 아래와 같이 쓸 수 있다.

$$\vec{R}_S = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \quad (27)$$

PSA(Polarizer-Sample-Analyzer) 구조를 가지고 회전검광자 방식으로 구동하는 타원계에 측정되는 빛의 세기는 검광자의 회전각속도 ω 의 삼각함수로 다음과 같이 표현된다.^[14]

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

여기에서 푸리에 계수인 α 와 β 는 편광자의 방위각 P 와 식 (27)의 반사행렬의 성분으로 식 (28a), (28b), (28c)와 같이 표현되는 ζ_{cc} , ζ_{ss} , ζ_{sc} 로써 아래 식 (29a), (29b)와 같이 표현된다.^[8,9]

$$\zeta_{cc} = |T_{11}|^2 \cos^2 P + |T_{12}|^2 \sin^2 P - (T_{11} T_{12}^* + T_{11}^* T_{12}) \sin P \cos P \quad (28a)$$

$$\zeta_{ss} = |T_{21}|^2 \cos^2 P + |T_{22}|^2 \sin^2 P - (T_{21} T_{22}^* + T_{21}^* T_{22}) \sin P \cos P \quad (28b)$$

$$\zeta_{sc} = (T_{11} T_{21}^* + T_{11}^* T_{21}) \cos^2 P + (T_{12} T_{22}^* + T_{12}^* T_{22}) \sin^2 P - (T_{11} T_{22}^* + T_{11}^* T_{22} + T_{12} T_{21}^* + T_{12}^* T_{21}) \sin P \cos P \quad (28c)$$

$$\alpha = \frac{\zeta_{cc} - \zeta_{ss}}{\zeta_{cc} + \zeta_{ss}} \quad (29a)$$

$$\beta = \frac{\zeta_{sc}}{\zeta_{cc} + \zeta_{ss}} \quad (29b)$$

식 (29a)와 식 (29b)에 따라 계산한 푸리에계수 α, β 를 측정한 α, β 값들에 최적맞춤하는 소위 모델링과정을 통하여 각 단축이방성 박막의 광축의 각도들, 두께 그리고 정상굴절률과 이상굴절률 등 미지변수들을 결정할 수 있다. 러빙된 PI 배향막이나 광배향된 배향막과 같이 시료 표면으로부터 수직인 방향으로 균일하지 않은 이방성분포를 가질 것으로 예상되는 단축이방성 박막은 균일한 여러 개의 단축이방성 박막의 합으로 근사하여 분석함으로써 시료면으로부터 수직인 방향으로의 이방성분포를 파악할 수 있다. 즉 배향막의 경우 타원법을 사용하여 배향막의 정상굴절률과 이상굴절률, 두께에 대하여 광축의 각도 분포를 파악하는데 본 수학적 표현들이 도움을 줄 수 있을 것으로 판단한다.

요 약

여러 층의 등방성 박막들과 단축이방성 박막들이 섞여 있는 시료의 유효반사계수 표현들을 유도하고 이 유효반사계수를 바탕으로 회전검광자형 타원계에 적용되는 타원상수 표현들을 구체적으로 제시하였다. 시료면에 수직인 방향의 단축이방성 분포를 여러 개의 단축이방성 박막으로 나누어 분석할 수 있도록 함으로써 PI 배향막이나 꼬인 액정층과 같은 비균일 단축이방성 박막의 정상굴절률 n_o , 이상굴절률 n_e , 두께 d 그리고 광축의 방위각과 기울임각의 분포를 정량적으로 해석할 수 있도록 하였다.

References

1. K. H. Lyum, S. U. Park, S. M. Yang, H. K. Yoon, and S. Y. Kim, "Precise measurement of ultra small retardation of rubbed polyimide alignment layer using an improved transmission ellipsometer," Korean J. Opt. Photon. (Hankook Kwanghak Hoeji) **24**, 77-85 (2013).
2. K. H. Lyum, H. K. Yoon, S. J. Kim, S. H. An, and S. Y. Kim, "Study of ultra-small optical anisotropy profile of rubbed polyimide film by using transmission ellipsometry," J. Opt. Soc. Korea **18**, 156-161 (2014).
3. J. H. Lee, M. S. Park, S. M. Yang, S. U. Park, M. H. Lee, and S. Y. Kim, "Precise measurement of ultra small anisotropy of rubbed polyimide using an improved reflection ellipsometer," Korean J. Opt. Photon. (Hankook Kwanghak Hoeji) **26**, 195-202 (2015).
4. D. W. Berreman, "Optics in stratified and anisotropic media: 4x4-matrix formalism," J. Opt. Soc. Am. **62**, 502-510 (1972).
5. I. Hirose, "Method of characterizing rubbed polyimide film for liquid crystal display devices using reflection ellipsometry," Jpn. J. Appl. Phys. **35**, 5873-5875 (1996).
6. P. Yeh and C. Gu, *Optics of Liquid Crystal Displays* (John Wiley & Sons, Inc., New York, USA, 1999), Chapter 3 and Chapter 8.
7. A. Lien, "Extended Jones matrix representation for the twisted nematic liquid-crystal display at oblique incidence,"

- Appl. Phys. Lett. **57**, 2767-2769 (1990).
8. 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).
 9. S. Y. Kim, "Ellipsometric expressions for two uniaxially anisotropic layers coated on a multilayered substrate," Korean J. Opt. Photon. (Hankook Kwanghak Hoeji) **26**, 115-120 (2015).
 10. J. W. Ryu, Ph. D. Thesis, Ajou University, Suwon (2010).
 11. R. M. A. Azzam and N. M. Bashara, *Ellipsometry and Polarized Light* (North-Holland, Amsterdam, Netherlands, 1987), Chapter 4.
 12. E. Hecht, *Optics* (Addison-Wesley Publishing Co., Massachusetts, USA, 1987), Chapter 8.
 13. O. S. Heaven, *Optical Properties of Thin Films* (Dover Publication, Inc., 1955).
 14. S. Y. Kim, *Ellipsometry* (Ajou University Press, Gyeonggi, Korea, 2000), Chapter 3-4.