Механизм самокомпенсации ошибок при широкополосном оптическом контроле процесса напыления многослойных покрытий

А. В. Тихонравов¹, И. В. Кочиков¹, М. К. Трубецков², С. А. Шарапова^{1,*a*}, В. Г. Жупанов³, А. Г. Ягола^{4,*b*}

¹ Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ имени М.В. Ломоносова. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 4.

² Max Planck Institute of Quantum Optics. Hans-Kopfermann Str. 1, Garching 85748, Germany. ³ ФГУП НИИ НПО «ЛУЧ».

Россия, 142115, Московская обл., г. Подольск, ул. Железнодорожная, д. 24.

⁴ Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет,

кафедра математики. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.

E-mail: ^a svet.sharapova@gmail.com, ^b yagola@physics.msu.ru

Статья поступила 11.11.2016, подписана в печать 07.12.2016.

Впервые проведено исследование механизма самокомпенсации ошибок в процессе напыления многослойных оптических покрытий в случае широкополосного оптического контроля толщин слоев покрытия. Математически описан процесс корреляции ошибок в толщинах слоев при оптическом контроле. Определены условия, при которых данная корреляция может приводить к эффекту самокомпенсации ошибок.

Ключевые слова: тонкие пленки, оптические покрытия, оптический контроль. УДК: 535.3, 538.9. PACS: 42.79.Wc, 02.70.-с.

Введение

Многослойные оптические покрытия находят самое широкое применение как в современных науке и технологиях, так и в повседневной жизни. Широкое применение инновационных покрытий связано с успехами в развитии математических методов их проектирования [1] и с существенным прогрессом в технологиях напыления покрытий [2, 3]. Дальнейшее расширение областей применения оптических покрытий и улучшение их характеристик во многом зависит от повышения точности контроля заданных теоретических параметров покрытия (в первую очередь толщин слоев покрытия) в процессе их напыления. В последние годы все более широкое внимание в этом плане приобретают методы широкополосного оптического контроля процессов напыления [4]. В значительной мере это связано с ожиданиями уменьшения влияния производственных ошибок на характеристики покрытия при использовании таких методов контроля.

Зависимость качества производимых многослойных покрытий от используемого метода контроля их напыления давно известна из практики. Наиболее драматическим образом она проявляется при производстве узкополосных интерференционных фильтров, в частности фильтров для телекоммуникационных приложений. Телекоммуникационные фильтры стандартов WDM-HDWDM могут иметь многие сотни слоев, и их производство возможно только при применении монохроматического контроля на центральной длине волны фильтра по методу поворотной точки [5]. Это связано с наличием мощнейшего эффекта самокомпенсации ошибок напыления, который проявляется только при использовании данного метода контроля [6–8]. Несмотря на то, что упомянутый эффект известен уже более 40 лет, физическое объяснение его сущности было дано относительно недавно [9].

Первые работы по широкополосному оптическому контролю процесса напыления покрытий были выполнены почти четыре десятилетия назад [10-12], и уже в этих работах было высказано предположение о возможности наличия эффекта самокомпенсации ошибок и в случае использования методов широкополосного оптического контроля. Однако это предположение оставалось практически не исследованным до самого последнего времени. Лишь в работе [13] были проведены численные эксперименты по исследованию различных типов покрытий и было показано, что эффект самокомпенсации действительно существует, причем он проявляется с различной силой в зависимости от типа покрытия и его конструкции. И совсем недавно наличие мощнейшего эффекта самокомпенсации ошибок было обнаружено при производстве с использованием широкополосного оптического контроля многослойных поляризаторов лазерного излучения [14].

Целью настоящей работы является исследование возможности проявления механизма самокомпенсации ошибок при широкополосном оптическом контроле процесса напыления. В качестве примера рассматривается многослойный поляризатор из работы [14], при производстве которого эффект самокомпенсации проявляется чрезвычайно сильно. В разд. 1 описывается общая схема алгоритма широкополосного оптического контроля. В разд. 2 обсуждаются специфические особенности широкополосного контроля поляризатора. В последнем разделе сформулированы основные выводы по работе.

1. Алгоритмы широкополосного оптического контроля

Для определенности рассмотрим алгоритм контроля процесса напыления по энергетическому коэффициенту пропускания T, измеряемому в некотором спектральном диапазоне при нормальном падении света на сетке длин волн $\{\lambda\}$. Пусть d_1^t, \ldots, d_m^t набор теоретических толщин слоев рассчитанного покрытия. Показатели преломления слоев заданы, возможные ошибки в этих показателях в настоящей работе не рассматриваются.

Пусть $T^{j}(d_{1}^{t},...,d_{j}^{t})$ — ожидаемый коэффициент пропускания покрытия после напыления его *j*-го слоя. Этот коэффициент рассчитывается по хорошо известным формулам [15], которые здесь не приводятся. Отметим, что T^{j} и все рассматриваемые далее коэффициенты пропускания зависят от длины волны $\{\lambda\}$ как от параметра, но для сокращения записи мы в явном виде эту зависимость указывать не будем.

В процессе напыления толщины всех слоев покрытия реализуются с некоторыми ошибками. Истинные значения толщин уже напыленных слоев будем помечать верхним индексом «*a*». Рассмотрим коэффициент пропускания $T^{j}(d_{1}^{a}, \ldots, d_{j-1}^{a}, d_{j})$, где $d_{1}^{a}, \ldots, d_{j-1}^{a}$ — неизвестные нам истинные значения толщин уже напыленных слоев, а d_{j} — переменная толщина *j*-го слоя. Измеренный в процессе напыления *j*-го слоя коэффициент пропускания есть $T^{j, \text{meas}}(d_{j}) = T^{j}(d_{1}^{a}, \ldots, d_{j-1}^{a}, d_{j}) + \delta T_{\text{meas}}$, где δT_{meas} ошибка измерений (она, естественно, также зависит от длины волны λ).

Для широкополосного оптического контроля вводится функционал F^{j} , оценивающий близость измеренного и ожидаемого в конце напыления j-го слоя коэффициентов пропускания, и процесс напыления j-го слоя прекращается в соответствии с критерием достижения минимума этого функционала:

$$F^{j}(d_{j}) = \sum_{\lambda} \left[T^{j} \left(d_{1}^{a}, \dots, d_{j-1}^{a}, d_{j} \right) + \delta T_{\text{meas}} - T^{j} \left(d_{1}^{t}, \dots, d_{j}^{t} \right) \right]^{2} \to \text{min.} \quad (1)$$

Здесь суммирование выполняется по всей сетке длин волн, на которой производятся измерения коэффициента пропускания.

В точке минимума функционала (1) толщина *j*-го слоя есть

$$d_j = d_j^t + \delta d_j,$$

где d_j^t — планируемая теоретическая толщина *j*-го слоя, δd_j — ошибка в толщине этого слоя, полученная в процессе напыления.

Обозначим ошибки в толщинах ранее напыленных слоев как $\delta d_i^a = d_i^a - d_i^t$ (i = 1, ..., j-1). Считая все ошибки малыми, запишем функционал (1) в точке минимума как

$$F^{j}\left(d_{j}^{t}+\delta d_{j}\right)=\sum_{\lambda}\left[\sum_{i=1}^{j}\frac{\partial T^{i}}{\partial d_{i}}\delta d_{i}+\delta T_{\text{meas}}\right]^{2}.$$
 (2)

Мы можем переписать выражение (2) в виде

$$F^{j}\left(d_{j}^{t}+\delta d_{j}\right)=\sum_{i,k=1}^{j}\left[\sum_{\lambda}\left(\frac{\partial T^{j}}{\partial d_{i}}\frac{\partial T^{j}}{\partial d_{k}}\right)\right]\delta d_{i}\,\delta d_{k}+\sum_{i=1}^{j}\left[\sum_{\lambda}\frac{\partial T^{j}}{\partial d_{i}}\delta T_{\text{meas}}\right]\delta d_{i}+\sum_{\lambda}(\delta T_{\text{meas}})^{2}.$$
 (3)

В процессе минимизации данного функционала последнее слагаемое в правой части не изменяется. Рассмотрим второе слагаемое в правой части (3). Будем считать, что в процессе измерений отсутствуют систематические ошибки в измерении T (на практике это требование достигается за счет постоянной калибровки измерительной системы). В таком случае ошибка измерения δT_{meas} с большей точностью может считаться случайной и распределенной по нормальному закону.

В настоящее время широкополосные измерения T проводятся, как правило, на больших сетках длин волн, содержащих не менее тысячи точек. Производные $\partial T^{j}/\partial d_{i}$ в спектральной области измерений являются гладкими функциями λ . В силу сказанного выше следует ожидать, что второе слагаемое в правой части (3) мало́ по сравнению с первым слагаемым. Таким образом, мы будем считать, что остановка напыления *j*-го слоя по критерию (1) может рассматриваться как остановка по условию достижения минимума первого слагаемого в правой части (3):

$$\sum_{i,k=1}^{j} \left[\sum_{\lambda} \left(\frac{\partial T^{j}}{\partial d_{i}} \frac{\partial T^{j}}{\partial d_{k}} \right) \right] \delta d_{i} \, \delta d_{k} \to \min.$$
(4)

Введем в рассмотрение матрицу С^{*j*} с элементами

$$C_{ik}^{j} = \sum_{\lambda} \left(\frac{\partial T^{j}}{\partial d_{i}} \frac{\partial T^{j}}{\partial d_{k}} \right).$$
 (5)

Условие (4) есть условие достижения минимума квадратичной формы с этой матрицей. Вводя в рассмотрение вектор-столбец

$$D^{j} = \left\{\delta d_{1}^{a}, \ldots, \delta d_{j-1}^{a}, \delta d_{j}\right\}^{T}$$

запишем условие минимума этой квадратичной формы в виде

$$(D^j)^T C^j D^j \to \min.$$
 (6)

Условие (6) определяет связь ошибки напыления в *j*-м слое с предыдущими ошибками напыления.

Как следует из всего предыдущего изложения, в случае широкополосного оптического контроля ошибки в толщинах слоев являются коррелированными. Цель последующего рассмотрения — достижение понимания того, в каких случаях данная корреляция ошибок может приводить к появлению эффекта самокомпенсации ошибок напыления.

2. Специфика широкополосного оптического контроля поляризатора

Поляризатор, производство которого дало толчок представленному здесь исследованию, достаточно подробно описан в работе [14]. Он представляет собой 28-слойное покрытие, состоящее из слоев с высоким (ZrO_2) и низким (SiO₂) показателями преломления. Теоретические толщины слоев этого поляризатора представлены на рис. 1. На длине волны 1064 нм и при угле падения света 55.6° он обеспечивает высокий (более 98%) коэффициент пропускания *p*-поляризованного света и низкий (менее 0.6%) коэффициент пропускания *s*-поляризованного света. Контроль процесса напыления поляризатора осуществляется при нормальном падении света на сетке из 2036 точек по λ в спектральном диапазоне от 658 нм до 1172 нм.



Рис. 1. Оптические толщины слоев 28-слойного поляризатора

В работе [14] были оценены ошибки в толщинах слоев, допущенные при напылении поляризатора, и было показано, что в случае некоррелированных ошибок такого же уровня в толщинах слоев требуемые характеристики поляризатора были бы полностью разрушены. В то же время произведенный поляризатор обладает всеми требуемыми характеристиками. Из этого был сделан вывод о том, что корреляция ошибок в толщинах слоев за счет широкополосного контроля процесса напыления приводит к проявлению сильного эффекта самокомпенсации ошибок.

Преобразуем условие (6) из предыдущего раздела. Для этого введем в рассмотрение диагональную матрицу V^i , составленную из собственных значений матрицы C^i в порядке их убывания. Пусть P^i — матрица, столбцами которой являются собственные векторы матрицы C^i , расположенные в том же порядке, что и собственные числа. Тогда матрица C^i может быть представлена в виде

$$C^{j} = P^{j} V^{j} \left(P^{j} \right)^{T},$$

а условие (6) переписано в виде

$$(D^j)^T P^j V^j (P^j)^T D^j \to \min.$$
 (7)

Напомним, что в соответствии с предыдущим разделом условие (6) определяет связь ошибки в толщине *j*-го слоя с ошибками в толщинах предыдущих слоев.

Оказывается, что в случае контроля поляризатора все матрицы V^{j} обладают весьма специфическими свойствами: собственные значения матриц C^{j} очень быстро убывают и матрицы V^{j} имеют на диагонали только один-два заметно отличных от нуля элемента. В качестве примера в табл. 1 приведены первые три элемента этих матриц для слоев с номерами от 5 до 10.

Рассмотрим теперь функционал Φ , оценивающий качество решения задачи синтеза (проектирования) поляризатора. Он представляет собой сумму двух парциальных функционалов, учитывающих требования на коэффициенты пропускания *p*- и *s*-поляризованного света (T_p и T_s соответственно) при угле падения света 55.6°:

$$\Phi = \sum_{\Lambda} [T_{\rho}(\lambda) - 1]^2 + \sum_{\Lambda} T_{s}(\lambda)^2.$$
(8)

Таблица 1

В этом выражении Λ обозначает сетку длин волн, на которой проводится оценка близости коэффициента T_p к 1, а коэффициента T_s к нулю. В нашем случае это сетка из 31 точки по λ в окрестности рабочей длины волны поляризатора 1064 нм.

В выражении (8) оба коэффициента пропускания зависят от толщин слоев покрытия d_1, \ldots, d_n и вычисляются по известным формулам [15]. При решении задачи синтеза находится набор толщин слоев покрытия, доставляющий минимум функционалу (8). Поэтому в точке минимума градиент функ-

Наибольшие собственные значения матриц C^{i} для слоев с номерами *i* от 5 до 10

j	5	6	7	8	9	10
v_1	0.0392	0.0248	0.0595	0.049	0.0838	0.0658
v_2	0.0045	0.0037	0.0093	0.0076	0.0076	0.0109
v_3	0.0018	0.0029	0.0039	0.0036	0.0036	0.0051

ционала равен нулю и его приращение записывается в виде

$$\delta \Phi = \sum_{i,k=1}^{n} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial d_i \, \partial d_k} \delta d_i \, \delta d_k.$$

Вводя в рассмотрение матрицу вторых производных

$$A = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial d_i \, \partial d_k}$$

и вектор $D = \{d_1, \ldots, d_n\}^T$, мы можем записать это приращение в виде

$$\delta \Phi = D^T A D. \tag{9}$$

Далее по аналогии с (7) из (9) следует выражение

$$\delta \Phi = D^T Q U Q^T D, \tag{10}$$

где U — матрица собственных значений матрицы A, а столбцами матрицы Q являются собственные векторы матрицы A.

Аналогичные (10) выражения можно записать и для парциальных функционалов Φ_p и Φ_s , стоящих в правой части равенства (8). Обозначим символами $A_{p,s}$ и $U_{p,s}$ аналогичные A и U матрицы для этих функционалов, а $Q_{p,s}$ — соответствующие им матрицы собственных векторов.

Пусть в матрицах U, U_p , U_s все собственные значения упорядочены по убыванию. Оказывается, что в рассматриваемой нами задаче они также очень быстро убывают по величине. В табл. 2 они представлены в нормированном виде по отношению к первому собственному значению (наибольшему по величине).

Таблица 2

Собственные значения матриц A, A_p, A_s в порядке их убывания

(нормированы по отношению к наибольшему собственному значению)

Номер собственного значения	А	A_p	A_s
1	1	1	1
2	0.900	0.875	0.072
3	0.453	0.340	0.027
4	0.008	0.006	0.018

Таблица З

Углы между вектором ошибок из рис. 4 и собственными векторами матриц A, A_p, A_s

Номер собственного вектора	Α	A_p	A_s
1	89.34	89.40	89.48
2	89.23	88.97	89.67
3	88.65	88.82	88.20
4	84.00	84.60	83.10

На рис. 2 показаны собственные векторы, соответствующие двум первым собственным значениям матрицы A_p , а на рис. 3 — собственный вектор, соответствующий первому собственному значению матрицы A_s .



Рис. 2. Собственные векторы, соответствующие двум первым собственным значениям матрицы U_p . L_1, L_2 — собственные значения



Рис. 3. Собственный вектор, соответствующий первому собственному значению матрицы U_s

Из выражения (10) для полного функционала и аналогичных выражений для парциальных функционалов следует, что в пространстве толщин слоев покрытия функционалы быстрее всего возрастают в направлениях, представленных собственными векторами, соответствующими наибольшим собственным значениям. Отсюда следует, что если вектор D, компонентами которого являются отклонения толщин слоев от расчетных значений, ортогонален указанным собственным векторам, то изменение функционала будет незначительным. Таким образом, эффект самокомпенсации ошибок возможен в том случае, когда ошибки в толщинах слоев коррелированы оптическим методом контроля так, что выполняется указанное условие ортогональности. Проверим этот вывод на примере рассматриваемого поляризатора.

На рис. 4 представлены ошибки в толщинах слоев поляризатора, найденные в [14] путем решения обратной задачи определения ошибок толщин по данным широкополосного онлайн-контроля всего процесса напыления. Табл. 3 показывает углы между представленным на рис. 4 вектором ошибок



Puc. 4. Ошибки в толщинах слоев поляризатора

и первыми четырьмя собственными векторами матриц A, A_p, A_s.

Как мы видим, сделанное выше предположение о механизме работы эффекта самокомпенсации ошибок полностью подтверждается. Действительно, условие ортогональности весьма точно выполняется для всех наиболее значимых по величине собственных значений (ср. с табл. 2).

Заключение

В представленной работе впервые проведена попытка исследования механизма самокомпенсации ошибок процесса напыления покрытий при использовании широкополосного оптического контроля толщины слоев покрытия. Математически описан процесс корреляции ошибок в толщинах слоев при оптическом контроле. Определены условия, при которых данная корреляция может приводить к эффекту самокомпенсации ошибок. Полученные выводы проверены и подтверждены на основе анализа экспериментальных данных для многослойного поляризатора.

Дальнейшие исследования в направлении, начатом в настоящей работе, являются важными с практической точки зрения, поскольку могут ответить на вопрос о том, в каких случаях применение методов широкополосного оптического контроля процессов напыления может дать существенный выигрыш по сравнению с другими методами контроля.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 16-11-10219).

Список литературы

- Tikhonravov A.V., Trubetskov M.K. // Applied Optics. 2012. 51, N. 30. P. 7319.
- Optical Interference Coatings / Ed. by N. Kaiser, H. Pulker. Springer, 2003.
- Tikhonravov A., Trubetskov M., Amotchkina T. // Optical Thin Films and Coatings / Ed. by A. Piegari, F. Flory. Cambridge, 2013.
- Optical Thin Films and Coatings / Ed. by A. Piegari, F. Flory. Cambridge, 2013.
- 5. Macleod H.A. // Applied Optics. 1981. 20. P. 82.
- 6. Macleod H.A. // Optica Acta. 1972. 19. P. 1.
- 7. Bousque, P., Fornier A., Kowalczyk R. et al. // Thin Solid Films. 1972. 13. P. 285.
- 8. *Macleod H.A.* Thin-Film Optical Filters. Third edition (Series in optics and optoelectronics). 2001.
- Tikhonravov A.V., Trubetskov M.K. // Applied Optics. 2007. 46. P. 2084.
- Vidal B., Fornier A., Pelletier E. // Applied Optics. 1978. 17. P. 1038.
- Vidal B., Pelletier E. // Applied Optics. 1979. 18. P. 3857.
- Vidal B., Fornier A., Pelletier E. // Applied Optics. 1979. 18. P. 3851.
- Tikhonravov A., Trubetskov M., Amotchkina T. // Applied Optics. 2011. 50, N 9. P. 111.
- Tikhonravov A., Zhupanov V., Kozlov I. et al. // Applied Optics. 2017. 56. P. 30.
- 15. Furman Sh., Tikhonravov A.V. Basics of Optics of Multilayer Systems. Frontiers, 1992.

An error self-compensation mechanism for deposition of optical coatings with broadband optical monitoring A. V. Tikhonravov¹, I. V. Kochikov¹, M. K. Trubetskov², S. A. Sharapova^{1,a}, V. G. Zhupanov³, A. G. Yagola^{4,b}

- ¹Research Computer Center (MSU NIVC), Lomonosov Moscow State University. Moscow 119991, Russia.
- ² Max Planck Institute of Quantum Optics. Hans-Kopfermann Str. 1, 85748, Garching, Germany.
- ³ Scientific Research Institution «Lutch». Zheleznodorozhnaya str. 24, Podolsk, Moscow Region, Russia.

⁴Department of Mathematics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia. E-mail: ^a svet.sharapova@gmail.com, ^b yagola@physics.msu.ru.

An error self-compensation mechanism is investigated for use during the deposition of optical coatings with broadband optical monitoring. The correlation of thickness errors caused by monitoring procedure is mathematically described. It is shown that this correlation of errors may result in the effect of selfcompensation of errors.

Keywords: thin films, optical coatings, optical monitoring.

PACS: 42.79.Wc, 02.70.-c.

Received 11 November 2016.

English version: Moscow University Physics Bulletin. 2017. 72, No. 3. Pp. 274–278.

Сведения об авторах

- 1. Тихонравов Александр Владимирович доктор физ.-мат. наук, профессор; тел.: (495) 939-54-30, e-mail: tikh@srcc.msu.su.
- 2. Кочиков Игорь Викторович доктор физ.-мат. наук, вед. науч. сотрудник; тел.: (495) 939-23-46, e-mail: igor@kochikov.ru. 3. Трубецков Михаил Кириллович — доктор физ.-мат. наук, профессор; e-mail: trub@srcc.msu.ru.
- 4. Шарапова Светлана Анатольевна мл. науч. сотрудник; e-mail: svet.sharapova@gmail.com.
- 5. Жупанов Валерий Григорьевич канд. техн. наук, руководитель лаборатории; e-mail: zhupanov@luch.podolsk.ru.
- 6. Ягола Анатолий Григорьевич доктор физ.-мат. наук, профессор; тел.: (495) 939-10-33, e-mail: yagola@physics.msu.ru.