Повышение точности широкополосного контроля процесса напыления оптических покрытий

Т. Ф. Исаев,^{1, *a*} И. В. Кочиков,² Д. В. Лукьяненко,^{1, б} А. В. Тихонравов,² А. Г. Ягола¹

¹ Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический

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

² Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Научно-исследовательский вычислительный центр. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 4.

Статья поступила 04.09.2017, подписана в печать 02.11.2017.

В работе предлагается подход к повышению точности широкополосного контроля процесса напыления оптических покрытий за счет определения фактического набора толщин слоев покрытия в процессе напыления. На серии модельных численных экспериментов с использованием симулятора процесса напыления показана эффективность предложенного подхода.

введение

Многослойные оптические покрытия широко используются в различных областях науки и современных технологий. Задача разработки оптических покрытий с заданными спектральными свойствами успешно решена [1] с помощью предложенного в работе [2] метода оптимизации структуры покрытий, названного методом игольчатых вариаций. В настоящее время наиболее важной задачей является повышение качества производства современных оптических покрытий. При этом ключевой проблемой является повышение надежности контроля процесса напыления, поскольку даже малые отклонения в параметрах напыляемых покрытий могут приводить к существенным изменениям в их спектральных характеристиках.

Множество алгоритмов, разрабатываемых для решения задач контроля процесса напыления, можно разделить на два класса: 1) алгоритмы, используемые для определения толщин уже напыленных слоев, и 2) алгоритмы, применяемые для прогнозирования момента остановки процесса напыления текущего слоя. Алгоритмы первого класса мы будем называть алгоритмами определения параметров напыленного многослойного покрытия, в то время как алгоритмы второго класса алгоритмами мониторинга.

Два наиболее широко используемых алгоритма определения параметров напыленного многослойного покрытия носят наименования «триангулярный» и «последовательный» алгоритмы (*T*- и *S*-алгоритмы) [3–5]. В случае *T*-алгоритма данные измерений, полученные в конце напыления каждого слоя, можно использовать как лля толщины послелнего определения напыленного слоя, так и для переопределения толщин всех ранее напыленных слоев. В случае S-алгоритма данные измерений, полученные в конце напыления текущего слоя, применяются для определения толщины только этого слоя (толщины всех ранее напыленных слоев фиксируются на значениях, найденных на предыдущих этапах работы алгоритма) [6].

Одной из основных проблем широкополосного оптического контроля процесса напыления является накопление ошибок в спектральных характеристиках, используемых в процессе работы алгоритмов мониторинга. В работах [7, 8] было показано, что ошибки в спектральных характеристиках могут оказывать существенное негативное влияние на решение обратных задач по определению параметров оптических покрытий. Данный эффект негативно сказывается на точности прогноза момента остановки процесса напыления текущего слоя, что, в свою очередь, может привести к существенному отличию толщины реально напыленного слоя от заданной теоретической толщины. В настоящей работе для прогнозирования момента остановки процесса напыления рассматривается подход к повышению точности работы алгоритмов мониторинга процесса напыления оптических покрытий за счет переопределения набора толщин слоев. Эффективность этого подхода продемонстрирована с помощью вычислительного эксперимента с использованием симулятора процесса напыления.

Структура данной работы следующая. В разд. 1 приведено краткое описание симулятора процесса напыления, для проведения численных экспериментов. В разд. 2 описаны особенности эффектов, приводящих к снижению точности мониторинга момента остановки процесса напыления слоя, и описан способ повышения точности мониторинга за счет переопределения используемых при расчетах толщин слоев покрытия. Основные выводы приведены в заключении.

1. СИМУЛЯТОР ПРОЦЕССА НАПЫЛЕНИЯ

Для проведения численных экспериментов, направленных на решение задач контроля процесса напыления, был разработан специализированный симулятор

^a E-mail: temurisaev@gmail.com

⁶ E-mail: lukyanenko@physics.msu.ru

процесса напыления многослойных оптических покрытий. Подобные симуляторы достаточно широко используются на практике [9], однако для отработки алгоритмов нам понадобился свой специализированный вариант, позволяющий анализировать все этапы проводимых численных экспериментов.

Опишем основные алгоритмические особенности разработанного симулятора.

- 0. Задается теоретический дизайн оптического покрытия, определяемый набором толщин его слоев $\{d_j^{\text{theor}}\}, j = \overline{1, N}$ (здесь N — число напыляемых слоев, показатели преломления каждого слоя заданы), и подложка толщины D с показателем преломления, описываемым известной дисперсионной зависимостью.
- 1. Определяется j := 1 (j номер напыляемого слоя).
- 2. Мониторинг процесса напыления *j*-го слоя толщины d_j проводится в дискретный набор времен $\{t_m\}$: $t_m = \tau m$, где τ — шаг по времени, с которым выполняется измерение коэффициента пропускания. При этом считается, что уже напылен j — 1-слой с фактическими толщинами d_1^a, \ldots, d_{j-1}^a . Эти толщины отличаются от теоретических значений $\{d_i^{\text{theor}}\}$, $i = \overline{1, j - 1}$, как вследствие непосредственных ошибок в толщинах напыленных слоев, так и вследствие погрешностей процесса контроля напыления по минимуму функционала невязки на каждом слое (соответствующая формула для функционала невязки будет выписана ниже).

Мониторинг процесса напыления проводится следующим образом.

- а) определяется m := 1 (m индекс времени напыления);
- б) вычисляется известная симулятору «истинная» толщина напыляемого слоя $d^a(t_m)$: $d^a(t_m) = d^a(t_{m-1}) + r_m(t_m - t_{m-1})$ (с учетом того, что $d^a(t_0) = 0$), где $r_m = r + \delta r(t_m)$ (r – оценочная скорость напыления слоя, $\delta r(t_m)$ – случайный шум с дисперсией σ_r^2) с переопределением r_m ближайшим к нему значением из сегмента [$-3\sigma_r; 3\sigma_r$];
- в) на основе этих данных вычисляется (см., например, [10]) «истинный» коэффициент пропускания $T(d_1^a, \ldots, d_{j-1}^a, d^a(t_m), \lambda)$ для каждой длины волны λ -излучения, проходящего через контролируемое многослойное покрытие. Далее в этот коэффициент пропускания вносятся следующие ошибки, моделирующие «реальный» коэффициент пропускания, измеренный в натурном эксперименте: 1) случайный шум $\delta T_{\text{meas}}^{\text{random}}(\lambda, t_m)$ (некоррелированная по λ ошибка измерения с дисперсией $\sigma_{\text{meas}}^{\text{random } 2}$); 2) случайный сдвиг $\delta T_{\text{meas}}^{\text{fluc}}(t_m)$ (как целая по всем λ случайная флуктуация коэффициента пропускания с дисперсией $\sigma_{\text{meas}}^{\text{syst}}$ с дисперсией $\sigma_{\text{meas}}^{\text{syst} 2}$.

В результате выражение для «реального» коэффициента пропускания $\widetilde{T}_{\mathrm{meas}}(d_1^a,\ldots,d_{j-1}^a,d^a(t_m),$ $\lambda,t_m)$ в момент времени t_m будет иметь следующий вид:

$$T_{\text{meas}}(d_1^a, \dots, d_{j-1}^a, d^a(t_m), \lambda, t_m) =$$

= $T(d_1^a, \dots, d_{j-1}^a, d^a(t_m), \lambda) +$
+ $\delta T_{\text{meas}}^{\text{random}}(\lambda, t_m) + \delta T_{\text{meas}}^{\text{fluc}}(t_m) + \delta T_{\text{meas}}^{\text{syst}};$

г) оценивается напыленная на текущий момент времени толщина слоя $d^{\text{est}}(t_m)$:

$$d^{\text{est}}(t_m) = \underset{d}{\operatorname{argmin}} \sum_{\{\lambda\}} \left[T\left(d_1^{\text{theor}}, \dots, d_{j-1}^{\text{theor}}, d, \lambda\right) - \frac{\left(T\left(d_1^a, \dots, d_{j-1}^a, d^a(t_m), \lambda\right) + \delta T_{\text{meas}}^{\text{random}}(\lambda, t_m) + \delta T_{\text{meas}}^{\text{fluc}}(t_m) + \delta T_{\text{meas}}^{\text{syst}}\right)}{\widetilde{T}_{\text{meas}}(d_1^a, \dots, d_{j-1}^a, d^a(t_m), \lambda, t_m)} \right]^2.$$

Если $d_j^{\text{theor}} < d^{\text{est}}(t_m)$, то процесс напыления *j*-го слоя закончен: $d_j^{\text{est}} := d^{\text{est}}(t_m)$, $d_j^a := d^a(t_m)$ и переходим к пункту 3;

д) набор точек $(t_i, d^{\text{est}}(t_i)), i = \overline{1, m}$, аппроксимируется линейной зависимостью $d = r_m^{\text{est}} t + d_m^{\text{shift}}$. В результате определяются коэффициенты r_m^{est} и d_m^{shift} . Затем r_m^{est} переопределяется ближайшим к нему значением из диапазона $[r - 3\sigma_r; r + 3\sigma_r]$.

Определяется время, в течение которого ожидается

напыление слоя требуемой толщины d_i^{theor} :

$$\Delta \tau = \frac{d_j^{\text{theor}} - \left(r_m^{\text{est}} t_m + d_m^{\text{shift}}\right)}{r_m^{\text{est}}}.$$

Если $\Delta \tau > \tau$, то переопределяется m := m + 1и переходим к п. 26. В противном случае через момент времени $\Delta \tau$ прекращаем процесс напыления и осуществляем оценку итоговой толщины d_i^{st} напыляемого слоя:

$$d_{j}^{\text{est}} = \underset{d}{\operatorname{argmin}} \sum_{\{\lambda\}} \left[T(d_{1}^{\text{theor}}, \dots, d_{j-1}^{\text{theor}}, d, \lambda) - \left(T(d_{1}^{a}, \dots, d_{j-1}^{a}, d^{a}(t_{m} + \Delta \tau), \lambda) + \delta T_{\text{meas}}^{\text{random}}(\lambda, t_{m} + \Delta \tau) + \delta T_{\text{meas}}^{\text{fluc}}(t_{m} + \Delta \tau) + \delta T_{\text{meas}}^{\text{syst}} \right) \right]^{2}.$$

При этом также производится переопределение $d^a_i := d^a(t_m + \Delta \tau)$ по формулам п. 2 б.

3. В фактическую толщину напыленного слоя вносится дополнительная ошибка δd_j^a с дисперсией $\sigma_{\rm add}^2$ по формуле $d_j^a := d_j^a + \delta d_j^a$, переопределяется j := j + 1 и переходим к пункту 2.

В итоге симулятору известны следующие значения толщин слоев: теоретические толщины $\{d_j^{\text{theor}}\}, j = \overline{1, N}$, которые были известны изначально; «оценочные» толщины $\{d_j^{\text{est}}\}, j = \overline{1, N}$, которые найдены в соответствии с алгоритмом контроля толщины слоя; «истинные» толщины $\{d_j^a\}, j = \overline{1, N}$, которые «знает» только симулятор.

2. ЭКСПЕРИМЕНТЫ С ТЕОРЕТИЧЕСКИМ НАБОРОМ ТОЛЩИН ТИПА «ГОРЯЧЕЕ ЗЕРКАЛО»

Основная идея данной работы демонстрируется на примере вычислительного эксперимента по напылению 40-слойного оптического покрытия типа «горячее зеркало» [1]. При реализации численного эксперимента был задан следующий набор входных параметров: случайная ошибка с $\sigma_{\rm meas}^{\rm random} = 1\%$, флуктуационная ошибка $\sigma_{\rm syst}^{\rm fluc} = 0.5\%$, систематическая ошибка с $\sigma_{\rm syst}^{\rm random} = 0\%$, скорость напыления r = 0.5 нм/с, нестабильность скорости напыления с $\sigma_{\rm add} = 2$ нм.

На рис. 1 представлен результат моделирования процесса напыления 28-го слоя покрытия (полное время напыления: $t_{359} + \Delta \tau = 359.6$ с). На рисунке хорошо видно резкое изменение в оценке $d^{\text{est}}(t_m)$ для $t_m \in [198, 202]$ с. Детальный анализ большого числа вычислительных экспериментов по напылению горячего зеркала, а также покрытий других типов показывает, что подобный эффект, выражающийся в резком изменении значения d^{est}, практически никогда не возникает при малых значениях номера напыляемого слоя до *j* порядка 20. Однако с ростом номера напыляемого слоя скачки d^{est} , подобные тому, что наблюдается на рис. 1, становятся все чаще. При этом с ростом числа напыленных слоев покрытия в целом возрастают и ошибки в толщинах напыляемых слоев, определяемые как отличия истинных напыленных толщин d_i^a от теоретических планировавшихся значений d^{theor}. Последний эффект широко известен и носит название кумулятивного



Рис. 1. Результат симуляции процесса напыления 28-го слоя 40-слойного покрытия типа «горячее зеркало» (пунктирными овалами отмечены особенности контроля процесса напыления)

эффекта роста ошибок в толщинах слоев напыляемых покрытий [11]. Проведенные нами вычислительные эксперименты показывают, что оба описанных эффекта взаимосвязаны.

Дальнейший анализ вычислительных экспериментов показал, что резкие скачки значений d^{est} связаны с особенностями минимизации функционала невязки, используемого для определения $d^{\text{est}}(t_m)$ (см. п. 2 г описания симулятора напыления). С ростом номера напыляемого слоя растет расхождение между первым и вторым членами в квадратных скобках в выражении для этого функционала, т.е. расхождение между $T_m^{\rm est}(\lambda)$ и $T_m^{\rm meas}(\lambda)$ (здесь и далее мы используем обозначения $T_m^{\rm est}(\lambda) \equiv T(d_1^{\rm theor}, \ldots, d_{j-1}^{\rm theor}, d^{\rm est}(t_m), \lambda),$ $T_m^{\text{meas}}(\lambda) \equiv \widetilde{T}_{\text{meas}}(d_1^a, \dots, d_{j-1}^a, d^a(t_m), \lambda, t_m)).$ Данное расхождение хорошо видно на рис. 2, иллюстрирующем процесс мониторинга в момент времени, близкий к положению скачка dest на шкале времени. В значительной части области оптического контроля обе зависимости являются осциллирующими функциями, и достижение минимума функционала невязки в значительной степени связано с близостью шагов осцилляций функций $T_m^{\mathrm{est}}(\lambda)$ и $T_m^{\mathrm{meas}}(\lambda)$. В свою очередьб шаг осцилляций этих функций связан с оптической толщиной покрытия [12].

В силу накопления ошибок в толщинах напыленных слоев, т.е. в силу отличия d_1^a, \ldots, d_{j-1}^a от $d_1^{\text{theor}}, \ldots, d_{j-1}^{\text{theor}}$, вид осциллирующих зависимостей $T_m^{\text{est}}(\lambda)$ и $T_m^{\text{meas}}(\lambda)$ становится все более заметно различным с ростом номера очередного напыляемого слоя j. Анализ хода вычислительных экспериментов показывает, что резкие изменения d^{est} связаны именно с этими различиями. Поскольку d^{est} определяется из условия минимума функционала невязки, в определенные моменты времени эта величина резко изменяется так, чтобы «подстроить» осциллирующую зависи-



Рис. 2. «Оценочный» $T_m^{\text{est}}(\lambda)$ и измеренный $T_m^{\text{meas}}(\lambda)$ коэффициенты пропускания при симуляции напыления 28-го слоя в момент времени $t_{197} = 197$ (вверху) и $t_{198} = 198$ (внизу)

мость $T_m^{\text{est}}(\lambda)$ под осцилляции измеряемой зависимости $T_m^{\text{meas}}(\lambda)$. Эта ситуация иллюстрируется на врезках к рис. 2, показывающих соответствие между $T_m^{\text{est}}(\lambda)$ и $T_m^{\text{meas}}(\lambda)$ до и после скачка d^{est} .

Приведенные выше рассуждения показывают, что основной причиной снижения точности контроля толщины слоя с ростом его номера является растущее несоответствие между $T_m^{\mathrm{est}}(\lambda)$ и $T_m^{\mathrm{meas}}(\lambda)$, которое, в свою очередь, связано с отличиями реально напыленных толщин слоев d_1^a,\ldots,d_{j-1}^a от их теоретически планировавшихся значений $d_1^{\text{theor}}, \ldots, d_{j-1}^{\text{theor}}$. Поэтому повышение точности контроля толщины текущего слоя связано с возможностью замены в функционале невязки теоретических значений толщин на значения $d_1^{ref}, \ldots, d_{j-1}^{ref}$, более точно соответствующих реальным значениям толщин слоев d_1^a, \ldots, d_{i-1}^a . Такая возможность действительно существует, и она связана с использованием в процессе напыления алгоритмов определения параметров уже напыленных слоев покрытия. В приводимых далее результатах для этих целей используется хорошо зарекомендовавший себя T-алгоритм. При этом определение параметров напыленных слоев производится только один раз после напыления \tilde{J} -слоев, где \tilde{J} — некоторый заранее задаваемый параметр, рассуждения о выборе которого проводятся ниже.

Итак, проблему повышения точности контроля толщин слоев предлагается решать следующим образом. В п. 2 г алгоритма работы симулятора вместо минимизации функционала

$$\sum_{\{\lambda\}} \left[T\left(d_1^{\text{theor}}, \dots, d_{j-1}^{\text{theor}}, d, \lambda\right) - \widetilde{T}_{\text{meas}}\left(d_1^a, \dots, d_{j-1}^a, d^a(t_m), \lambda, t_m\right) \right]^2$$

предлагается минимизировать следующий функционал:

$$\sum_{\{\lambda\}} \left[T\left(d_1^{ref}, \dots, d_{\tilde{J}}^{ref}, d_{\tilde{J}+1}^{\text{theor}}, \dots, d_{j-1}^{\text{theor}}, d, \lambda\right) - \widetilde{T}_{\text{meas}}(d_1^a, \dots, d_{j-1}^a, d^a(t_m), \lambda, t_m) \right]^2,$$

в котором \tilde{J} теоретических значений толщин $\{d_j^{\text{theor}}\}$, $j = \overline{1, \tilde{J}}$, разово переопределяются с помощью T-алгоритма после напыления \tilde{J} -го слоя.

На рис. 3, 4 представлены результаты расчетов, полученные при переопределении значений толщин слоев после симуляции напыления 25-го слоя покрытия.

Значение $\tilde{J} = 25$ было выбрано в связи с тем, что при многочисленных вычислительных экспериментах без переопределения толщин слоев заметный кумулятивный рост ошибок наблюдался после напыления именно 25-го слоя. Рис. 3 приведен для сравнения



Рис. 3. Результат моделирования процесса напыления 28-го слоя 40-слойного покрытия типа «горячее зеркало» с учетом переопределения значений толщин первых 25 слоев с помощью *T*-алгоритма



Рис. 4. Диаграммы среднеквадратичных ошибок $\langle d^a - d^{\text{theor}} \rangle$ в напыленных слоях без (слева) и с (справа) однократным переопределением значений толщин первых 25 слоев с помощью *T*-алгоритма

с рис. 1, который, как и рис. 1, демонстрирует оценку толщины 28-го слоя покрытия в одном из процессов симуляции его напыления. Как видно, резкие скачки d^{est} более не наблюдаются. Это же верно и для всех остальных слоев с j > 25.

Поскольку ошибки процесса напыления связаны с большим числом случайных факторов, эффективность предложенного подхода к повышению точности широкополосного контроля процесса напыления может быть оценена только статистически. С целью получения таких статистических оценок были проведены две серии вычислительных экспериментов по напылению без переопределения толщин слоев и с их переопределением при $\tilde{J} = 25$. Число экспериментов в каждой серии было равно 10. На рис. 4 представлены среднеквадратичные ошибки в толщинах напыленных слоев $\langle d_i^a - d_i^{\text{theor}} \rangle$, рассчитанные на основе этих экспериментов. Как следует из этого рисунка, в результате переопределения первых 25 толщин слоев точность контроля толщин слоев при j > 25 действительно заметно улучшается.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Широкополосный контроль процесса напыления оптических покрытий в настоящее время рассматривается как наиболее перспективный метод контроля при изготовлении инновационных типов покрытий с уникальными спектральными свойствами. Однако его широкое применение при напылении сложных покрытий с большим числом слоев сдерживается из-за возможности развития кумулятивного эффекта роста ошибок в толщинах слоев при росте числа напыленных слоев. В представленной работе с помощью вычислительных экспериментов по симуляции напыления покрытий выявлена основная причина появления ошибок в работе алгоритмов определения момента остановки напыления слоя и предложен подход к повышению точности контроля процесса напыления за счет переопределения используемых в расчетах толщин слоев покрытий.

Разработанный для проведения вычислительных экспериментов симулятор процесса напыления может использоваться на практике для определения числа слоев покрытия, после напыления которых целесообразно вводить коррекцию толщин слоев покрытия в алгоритмы определения времени остановки напыления слоев, используемых приборами широкополосного контроля.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 16-11-10219).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Tikhonravov A. V., Trubetskov M. K. // Applied Optics. 2012.
 51. P. 7319–7332.
- 2. *Тихонравов А.В.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1982. 23, № 6. С. 91. (*Tiknhonravov A. V.* // Moscow Univ. Phys. Bull. 1982. 37, N 6. P. 108.)
- 3. Amotchkina T. V., Trubetskov M.K., Pervak V. et al. // Applied Optics. 2011. 50. P. 3389.
- Tikhonravov A. V., Trubetskov M. K. // Proceedings of SPIE. 2003. 5250. P. 406.
- Wilbrandt S., Stenzel O., Kaiser N. et al. // Applied Optics. 2008. 47. P. 49.
- Tikhonravov A. V., Gorokh A. // Optics Express. 2015. 23, N 18. P. 23561.
- Tikhonravov A., Trubetskov M., DeBell G. // Proceedings of SPIE. 2003. 5188. P. 190.
- 8. *Tikhonravov A. V., Trubetskov M. K., Kokarev M. A.* et al. // Applied Optics. 2002. **41**, N 13. P. 2555.
- 9. www.optilayer.com
- Isaev T.F., Lukyanenko D.V., Tikhonravov A.V., Yagola A.G. // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2017. 57, N 5. P. 867.
- 11. Tikhonravov A. V., Trubetskov M. K., Amotchkina T. V. // Applied Optics. 2006. 45, P. 7026.
- Furman Sh., Tikhonravov A. V. // Editions Frontiers Gif-sur. Yvette, 1992.

Improving the Accuracy of Broad-Band Monitoring of Optical Coating Deposition

T. F. Isaev^{1,a}, I. V. Kochikov², D. V. Lukyanenko^{1,b}, A. V. Tikhonravov², A. G. Yagola¹

¹Department of Mathematics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia ²Research Computing Center, Lomonosov Moscow State University, Moscow 119191, Russia *E-mail:* ^atemurisaev@gmail.com, ^blukyanenko@physics.msu.ru.

A method for improving the accuracy of the broad-band monitoring of the process of depositing optical coatings is proposed. The method is based on determining the actual set of thicknesses of deposited layers in the deposition process. The effectiveness of the proposed approach is demonstrated in a series of model numerical experiments using a simulator of deposition process.

Keywords: multilayer optical coatings, broad-band optical monitoring, spectral characteristics. PACS: 42.25.Hz. *Received 04 September 2017.*

English version: Moscow University Physics Bulletin. 2018. 73, No. 4. Pp. 382-387.

Сведения об авторах

1. Исаев Темур Фуркатович — студент; тел.: (495) 939-10-33, e-mail: temurisaev@gmail.com.

- 2. Кочиков Игорь Викторович доктор физ.-мат. наук; тел.: (495) 939-54-24, e-mail: igor@kochikov.ru.
- 3. Лукьяненко Дмитрий Витальевич канд. физ.-мат. наук, доцент; тел.: (495) 939-10-33, e-mail: lukyanenko@physics.msu.ru.
- 4. Тихонравов Александр Владимирович доктор физ.-мат. наук, профессор; тел.: (495) 939-54-24, e-mail: tikh@srcc.msu.ru.
- 5. Ягола Анатолий Григорьевич доктор физ.-мат. наук, профессор; тел.: (495) 939-10-33, e-mail: yagola@physics.msu.ru.