

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ. ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА

Оценки, связанные с механизмом самокомпенсации ошибок в процессе напыления оптических покрытийА. В. Тихонравов,¹ И. В. Кочиков,^{1, а} И. А. Матвиенко,² С. А. Шарапова,¹ А. Г. Ягола²¹ Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ имени М. В. Ломоносова.
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 4.² Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра математики. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.

Статья поступила 17.07.2018, принята к публикации 01.08.2018.

В работе вводится оценка степени корреляции ошибок в толщинах слоев при широкополосном оптическом контроле процесса напыления оптических покрытий. Показано, что сильный эффект самокомпенсации ошибок напыления проявляется в случае сильной корреляции ошибок в толщинах слоев. Вводится оценка силы данного эффекта. Полученные теоретические выводы подтверждаются сравнением с практическими результатами напыления, демонстрирующими наличие сильного эффекта самокомпенсации ошибок.

Ключевые слова: тонкие пленки, оптические покрытия, оптический контроль.

УДК: 535.3, 5353.4. PACS: 42.79.Ci, 42.25.Fx, 42.90.+m.

ВВЕДЕНИЕ

Вопрос о повышении точности контроля толщин слоев многослойных покрытий в процессе их напыления является в настоящее время основным при производстве сложных оптических покрытий с уникальными спектральными свойствами. При этом в качестве наиболее перспективных методов контроля рассматриваются различные методы оптического контроля [1]. Достоинством данных методов является то, что при их использовании контролируются основные с физической точки зрения параметры, а именно оптические толщины слоев покрытия. Кроме того, при их использовании возможно проявление эффекта самокомпенсации ошибок напыления. Этот эффект был впервые открыт более 40 лет назад при создании узкополосных оптических фильтров с использованием монохроматического оптического контроля по методу поворотной точки [2, 3]. Следует отметить, что производство современных телекоммуникационных фильтров с огромным количеством слоев возможно лишь благодаря наличию данного эффекта.

Методы широкополосного оптического контроля [1] имеют гораздо более широкую область применения, чем монохроматический контроль по методу поворотной точки. Возможность наличия эффекта самокомпенсации ошибок в толщинах напыляемых слоев при широкополосном контроле была отмечена еще в работах [4–6] и много позже подтверждена в работе [7]. Однако во многих случаях этот эффект является достаточно слабым. Очень сильный эффект самокомпенсации ошибок при широкополосном оптическом контроле был обнаружен совсем недавно [8] при создании поляризаторов лазерного излучения, а первая попытка объяснения механизма этого эффекта была сделана в [9]. Затем более строгое исследование механизма эффекта самокомпенсации было предпринято в [10] с использованием аппарата алгебры матриц.

Данная работа является, по сути, продолжением исследований, начатых в работах [9, 10]. Ее основная

цель — получение оценок, которые могут использоваться на практике для предсказания возможности наличия сильного эффекта самокомпенсации ошибок в толщинах слоев покрытия при использовании заданного варианта широкополосного оптического контроля. Сами оценки получаются в разд. 1, а в разд. 2 они иллюстрируются на примере практических результатов, полученных в [8] для поляризатора лазерного излучения. Основные выводы приведены в **Заключении**.

1. ОЦЕНКИ, СВЯЗАННЫЕ С МЕХАНИЗМОМ САМОКОМПЕНСАЦИИ ОШИБОК В ТОЛЩИНАХ СЛОЕВ

Обозначим d_1^t, \dots, d_m^t теоретический набор толщин слоев многослойного покрытия с числом слоев m . Слои считаются занумерованными по направлению от подложки, на которую нанесено покрытие, к внешней среде, из которой падает волна. Пусть T — энергетический коэффициент пропускания покрытия, который рассчитывается на некоторой сетке длин волн $\{\lambda\}$. В случае наклонного падения света рассматриваются два коэффициента пропускания T^s и T^p , отдельно для s - и p -составляющих падающей волны. Алгоритмы вычисления всех спектральных характеристик покрытия, в частности энергетических коэффициентов пропускания, хорошо известны (см., например, [11]).

Как и в [9], обозначим $d_1^a, \dots, d_j^a, \dots$ фактически напыленные толщины слоев покрытия, которые, естественно, отличаются от теоретически заданных величин. Пусть $T^j(d_1^a, \dots, d_{j-1}^a, d_j)$ — коэффициент пропускания покрытия с числом слоев j , где d_j — переменная толщина последнего, j -го слоя. В ходе широкополосного оптического контроля толщины j -го слоя на сетке длин волн λ измеряется коэффициент пропускания $T^j(d_1^a, \dots, d_{j-1}^a, d_j) + \delta T_{\text{meas}}$, где δT_{meas} — ошибка измерения, которая, как и T^j , зависит от длины волны λ .

При широкополосном оптическом контроле процесс напыления j -го слоя прекращается в соответствии с критерием достижения минимума функционалом невязки

^а E-mail: igor@kochikov.ru

$$F^j(d_j) = \sum_{\lambda} [T^j(d_1^a, \dots, d_{j-1}^a, d_j) + \delta T_{\text{meas}} - T^j(d_1^t, \dots, d_j^t)]^2 \rightarrow \min. \quad (1)$$

Суммирование в (1) ведется по всей спектральной области измерений $\{\lambda\}$.

Толщина напыленного j -го слоя d_j отличается от теоретически запланированной величины d_j^t : $d_j = d_j^t + \delta d_j$, где δd_j — ошибка в толщине j -го слоя. Пусть δd_i — ошибки в толщинах ранее напыленных слоев: $\delta d_i = d_i^a - d_i^t$, $i = 1, \dots, j-1$. Как следует из (1), ошибка в толщине j -го слоя оказывается связанной со всеми ошибками, допущенными при напылении предыдущих слоев. Таким образом, условие (1) описывает процесс корреляции ошибок в толщинах напыляемых слоев при широкополосном оптическом контроле.

Корреляция ошибок в толщинах напыляемых слоев имеет негативное следствие, известное как кумулятивный эффект накопления ошибок напыления [12]. Но этот же процесс может вызывать и позитивный эффект самокомпенсации ошибок.

Как показано в [9], при отсутствии систематических ошибок в измерениях T процесс корреляции ошибок при напылении j -го слоя может быть с достаточной точностью представлен как условие достижения минимума квадратичной формы

$$(D^j)^T C^j D^j \rightarrow \min, \quad (2)$$

где $D^j = \{\delta d_1, \dots, \delta d_{j-1}, \delta d_j\}^T$ — вектор-столбец ошибок в толщинах слоев, а C^j — квадратная матрица вида

$$C^j = \left\| \sum_{\lambda} \frac{\partial T^j}{\partial d_i} \frac{\partial T^j}{\partial d_k} \right\|.$$

Здесь $\partial T^j / \partial d_i$ — частные производные теоретического коэффициента пропускания подсистемы из j слоев по толщинам этих слоев (эти частные производные вычисляются при теоретических значениях толщин слоев d_i^t , $i = 1, \dots, j$).

Наряду с матрицами C^j , описывающими процесс корреляции ошибок в толщинах слоев на каждом шаге напыления, в [9] рассматривалась также матрица Гессе целевого функционала Φ , оценивающего качество аппроксимации требуемых спектральных характеристик покрытия при решении задачи его проектирования. При решении задачи проектирования функционал Φ достигает минимума при теоретических значениях толщин слоев и поэтому в точке минимума приращение функционала записывается в виде

$$\delta \Phi = \frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^m \frac{\partial^2 \Phi}{\partial d_i \partial d_k} \delta d_i \delta d_k, \quad (3)$$

где δd_i — отклонения толщин слоев покрытия от теоретически планируемых толщин d_i^t .

Вводя в рассмотрение вектор $\Delta = \{\delta d_1, \dots, \delta d_m\}^T$, описывающий отклонения толщин слоев от теоретических значений (ошибки в толщинах слоев), запишем (3) в матричном виде:

$$\delta \Phi = \frac{1}{2} \Delta^T A \Delta. \quad (4)$$

Здесь A — матрица Гессе, т. е. матрица, составленная из частных производных: $\partial^2 \Phi / \partial d_i \partial d_k$.

Основной вывод работы [9] состоял в том, что сильный эффект самокомпенсации ошибок напыления возможен тогда, когда ошибки в толщинах слоев покрытия коррелируются широкополосным оптическим контролем таким образом, что вектор ошибок Δ оказывается практически ортогональным к собственным векторам матрицы A , соответствующим ее заметно отличающимся от нуля собственным значениям. Результаты работы [9] были развиты в [10], где им была придана более строгая математическая форма.

Для получения имеющих практическую направленность оценок преобразуем, следуя [9, 10], условия (2) к виду

$$(D^j)^T P^j V^j (P^j)^T D^j \rightarrow \min. \quad (5)$$

Здесь V^j — диагональная матрица, составленная из собственных значений матрицы C^j в порядке их убывания, P^j — матрица, столбцами которой являются собственные векторы матрицы C^j .

Пусть λ_i^j — собственные значения матриц C^j . Условия (5) можно записать как

$$\sum_{i=1}^j \lambda_i^j [(P_i^j)^T D^j]^2 \rightarrow \min. \quad (6)$$

Здесь P_i^j — i -й столбец матрицы P^j , т. е. i -й собственный вектор матрицы C^j . Пусть $p_1^{ij}, \dots, p_j^{ij}$ — элементы этого собственного вектора. Введем в рассмотрение m -координатную вектор-строку W_{ij} следующего вида:

$$W_{ij} = \sqrt{\lambda_i^j} \{p_1^{ij}, \dots, p_j^{ij}, 0, \dots, 0\}.$$

С ее помощью скалярное произведение векторов с j координатами можно заменить на скалярное произведение векторов в m -мерном пространстве:

$$\sqrt{\lambda_i^j} (P_i^j)^T D^j = W_{ij} \Delta. \quad (7)$$

Далее, используя (7), условие (6) можно переписать в виде

$$\sum_{i=1}^j (W_{ij} \Delta)^2 \rightarrow \min. \quad (8)$$

Напомним, что (8) получено из (2), т. е. это условие описывает процесс корреляции ошибок при окончании напыления j -го слоя покрытия. Всего в процессе напыления m -слойного покрытия таких условий $m-1$, поскольку процесс корреляции ошибок начинается при напылении второго слоя.

Введем в рассмотрение матрицу W , строками которой являются векторы W_{ij} для всех $j = 2, \dots, m$ и $i = 1, \dots, j$. Полученная прямоугольная матрица имеет размерность $k \times m$, где $k = (m-1)(m+2)/2$. Очевидно, что $k \gg m$. Например, при $m = 50$ число строк матрицы W равно 1274.

Рассмотрим вектор $W \Delta$. Это — вектор-столбец с k координатами. Очевидно, что

$$\|W \Delta\|^2 = \sum_{j=2}^m \sum_{i=1}^j (W_{ij} \Delta)^2, \quad (9)$$

т. е. квадрат нормы данного вектора совпадает с суммой всех частичных сумм, определяющих условия (8) для всех j от 2 до m . Таким образом, следует предположить, что в результате процесса корреляции вектор ошибок в толщинах слоев Δ оказывается таким, что величина (9) мала.

Отметим теперь, что ошибки в толщинах напыляемых слоев связаны с большим числом различных случайных факторов. Поэтому, хотя они и коррелированы оптическим контролем, в них, тем не менее, присутствует существенная случайная составляющая. Для оценки степени коррелированности ошибок, описываемых вектором ошибок Δ^0 , естественно сравнивать величину $\|W\Delta^0\|^2$ со средним значением $\|W\Delta\|^2$ по всем возможным случайным векторам Δ той же длины, что и Δ^0 . В дальнейшем будем рассматривать все возможные случайные векторы единичной длины, заданный конкретный вектор ошибок Δ^0 также будем нормировать к единичной длине.

Для получения расчетных формул используем сингулярное разложение [14] прямоугольной матрицы W . Итак, представим W в виде

$$W = U\Sigma V^T, \quad (10)$$

где U и V — унитарные матрицы размерности k и m соответственно, а Σ — прямоугольная матрица размерности $k \times m$ с неотрицательными диагональными элементами в верхней квадратной части этой матрицы (все остальные элементы этой матрицы — нулевые).

Ненулевые диагональные элементы матрицы Σ называются сингулярными числами матрицы W . Обозначим их $\sigma_1, \dots, \sigma_m$. Сингулярные числа матрицы W упорядочены по убыванию. Используя сингулярное разложение (10), преобразуем выражение (9) к виду

$$\|W\Delta\|^2 = \sum_{i=1}^m \sigma_i^2 (V_i^T \Delta)^2, \quad (11)$$

где V_i — столбцы унитарной матрицы V (единичные векторы).

Очевидно, что на сфере единичного радиуса $\|\Delta\| = 1$ максимум и минимум $\|W\Delta\|^2$ определяются максимальным и минимальным сингулярными числами:

$$\max \|W\Delta\|^2 = \sigma_1^2, \quad \min \|W\Delta\|^2 = \sigma_m^2.$$

Можно подсчитать, что для среднего по сфере значения величины $\|W\Delta\|^2$ справедливо следующее выражение:

$$\langle \|W\Delta\|^2 \rangle = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \sigma_i^2. \quad (12)$$

Пусть Δ^0 — нормированный вектор ошибок в толщинах слоев, полученных в ходе напыления с широкополосным оптическим контролем. Для Δ^0

$$\|W\Delta^0\|^2 = \sum_{i=1}^m \sigma_i^2 (V_i^T \Delta^0)^2. \quad (13)$$

Заметим, что скалярное произведение $(V_i^T \Delta^0)$ в (13) — не что иное, как координаты единичного вектора Δ^0 в базисе V_i .

Степень корреляции ошибок напыления будем оценивать величиной

$$\alpha = \|W\Delta^0\|^2 / \left[\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \sigma_i^2 \right]. \quad (14)$$

В соответствии с приведенными выше рассуждениями о малости величины $\|W\Delta^0\|^2$ вследствие корреляции ошибок следует предположить, что эта величина существенно меньше среднего значения по сфере, т. е. α существенно меньше 1. В дальнейшем будем говорить, что корреляция ошибок тем сильнее, чем меньше α .

Перейдем теперь к обсуждению того, как можно оценить, будет ли корреляция ошибок напыления приводить к сильному эффекту самокомпенсации ошибок. Зададим некоторое $\alpha < 1$, определяющее степень коррелированности ошибок, и рассмотрим на сфере единичного радиуса область D_α , для которой

$$\|W\Delta\|^2 \leq \alpha, \quad (15)$$

т. е. рассмотрим совокупность всех единичных векторов, для которых степень коррелированности ошибок определяется параметром α .

В выражении (4) для вариации целевого функционала, оценивающего качество решения задачи проектирования покрытия, рассмотрим векторы ошибок единичной длины. Пусть $\langle \delta\Phi \rangle$ — среднее значение этой величины на всей сфере единичного радиуса, а $\langle \delta\Phi \rangle_\alpha$ — среднее значение вариации по области D_α . Для оценки силы эффекта самокомпенсации ошибок введем величину

$$S(\alpha) = \frac{\langle \delta\Phi \rangle}{\langle \delta\Phi \rangle_\alpha}. \quad (16)$$

Оценка возможных значений этой величины проведена в следующем разделе работы.

2. ПРАКТИЧЕСКОЕ ПРИМЕНЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ ОЦЕНОК

Отметим, что введенная в предыдущем разделе величина S аналогична по смыслу величине, введённой в [7] для оценки наличия эффекта самокомпенсации ошибок в серии вычислительных экспериментов по симуляции процесса напыления оптических покрытий различных типов. В [7] не проводилась нормировка векторов ошибок Δ и вместо области D_α рассматривалась совокупность векторов ошибок, полученных в ходе вычислительных экспериментов. Но величина S рассчитывалась аналогично (16) как отношение средних вариаций целевого функционала для некоррелированных и коррелированных ошибок одинакового уровня. В ходе всех проведенных в [7] экспериментов было получено, что величина $S > 1$, из чего был сделан вывод, что определенный эффект самокомпенсации ошибок присутствует всегда. Для различных типов покрытий величина S в [7] варьировалась в пределах от 1.6 до 15.9. В целом в [7] был сделан вывод, что в большинстве рассматривавшихся случаев эффект самокомпенсации ошибок был достаточно слабым.

Как отмечалось во Введении, очень сильный эффект самокомпенсации ошибок был обнаружен недавно [8]

при производстве поляризаторов лазерного излучения. Поэтому интересно проверить оценки предыдущего раздела, используя практические результаты этой работы.

Структурные параметры рассматривавшегося в [8] поляризатора и вектор производственных ошибок в толщинах слоев приведены также в [9]. Число слоев поляризатора равно 28. Таким образом, дальнейшее рассмотрение проводится в 28-мерном пространстве. В нормированном виде вектор производственных ошибок в толщинах слоев представлен на рисунке. Фактический вектор ошибок в [8] имеет норму, равную 7.8 нм (в физических толщинах).

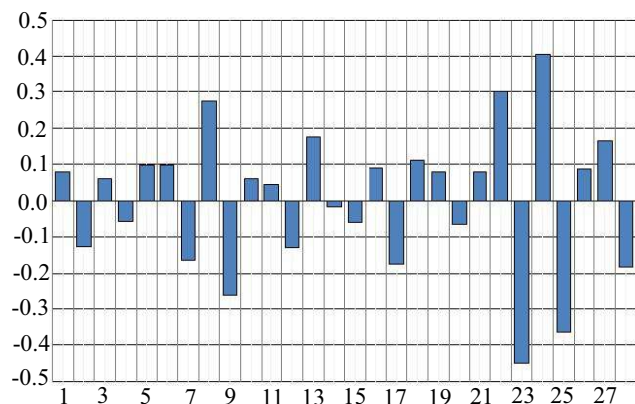


Рисунок. Нормированный вектор производственных ошибок в толщинах слоев поляризатора

Сингулярные числа матрицы W для 28-слойного поляризатора приведены на рис. 6 работы [10]. Мы не дублируем этот рисунок в настоящей работе, поскольку он не очень существенен для дальнейшего изложения. Отметим лишь, что сингулярные числа быстро убывают; уже пятое число $\sigma_5 = 0.163\sigma_{\max}$, а минимальное сингулярное число равно $\sigma_{\min} = \sigma_{28} = 8.58 \cdot 10^{-3}\sigma_{\max}$.

В работе [10] в ходе детального рассмотрения матрицы C^j , задающих условия корреляции (2), было показано, что в случае широкополосного оптического контроля поляризатора наблюдается сильная корреляция ошибок в толщинах слоев. В связи с этим интересно проверить введенную в предыдущем разделе оценку степени корреляции ошибок напыления. Вычисление в соответствии с (14) дает значение $\alpha = 0.01885$, т. е., как и было предположено в предыдущем разделе, величину, существенно меньшую 1.

То, что полученная для конкретного производственного вектора ошибок величина α действительно является уникально малой, подтверждается следующим экспериментом. Нами были сгенерированы 10^8 единичных векторов Δ , случайным образом распределенных на единичной сфере. Ни для одного из них не было получено значения $\alpha < 0.02$, как в нашем расчете с конкретным вектором ошибок из [8, 9]. Вероятность получения $\alpha < 0.1$ оказалась равной лишь 0.5%. Таким образом, уже значения $\alpha < 0.1$ можно считать признаком наличия сильной корреляции ошибок процесса напыления.

Проведем теперь оценку силы эффекта самокомпенсации ошибок для конкретного вектора ошибок, представленного на рисунке. Эту оценку проведем по аналогии с (16), подставив в знаменатель выражения

для S вместо среднего значения $\delta\Phi$ по области D_α конкретное значение $\delta\Phi^0$, рассчитанное для вектора ошибок из рисунка. Полученное значение S равно 16.5. Как мы видим, это значение превышает все оценки, полученные в [7]. Это неудивительно, поскольку реальные напылительные эксперименты, выполненные в [8], действительно продемонстрировали наличие сильнейшего эффекта самокомпенсации ошибок для случая поляризатора лазерного излучения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основной результат данной работы — получение оценки (14), описывающей степень корреляции ошибок в толщинах слоев при широкополосном оптическом контроле напыления покрытия. Теоретически показано, что при сильной корреляции ошибок величина α , даваемая данной оценкой, должна быть существенно меньше 1. Это подтверждено путем численных экспериментов и проверки с помощью практических результатов, полученных при напылении поляризатора лазерного излучения в [8].

Другим результатом работы является оценка силы эффекта самокомпенсации ошибок (16). Показано, что в случае поляризатора лазерного излучения эта оценка действительно дает величину, существенно превышающую 1.

Оценки (14) и (16) могут быть полезны для решения вопроса о выборе способа широкополосного оптического контроля для производства заданного типа покрытий. При этом для оценки величин α и S могут быть использованы результаты численных симуляций процесса напыления.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 16-11-10219).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tikhonravov A., Trubetskov M., Amotchkina T. // Optical Thin Films and Coatings / Ed. by Piegari A., Flory F. Woodhead, Cambridge, 2nd ed., 2018. P. 65–101.
2. Macleod H. A. // Optica Acta. 1972. 19. P. 1.
3. Bousque, P., Fornier A., Kowalczyk R. et al. // Thin Solid Films. 1972. 13. P. 285.
4. Vidal B., Fornier A., Pelletier E. // Applied Optics. 1978. 17. P. 1038.
5. Vidal B., Pelletier E. // Applied Optics. 1979. 18. P. 3857.
6. Vidal B., Fornier A., Pelletier E. // Applied Optics. 1979. 18. P. 3851.
7. Tikhonravov A., Trubetskov M., Amotchkina T. // Applied Optics. 2011. 50, N 9. P. 111.
8. Zhupanov V., Kozlov I., Fedoseev V. et al. // Applied Optics. 2017. 56. P. 30.
9. Тихонравов А. В., Кочиков И. В., Трубецков М. К. и др. // Вестник Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2017. № 3. С. 55. (Tikhonravov A. V., Kochikov I. V., Trubetskov M. K. et al. // Moscow Univ. Phys. Bull. 2017. 72, N 3. P. 274.)
10. Tikhonravov A., Kochikov I., Yagola A. // IPSE (Inverse Problems of Science and Engineering). 2018. 26. P. 1214.
11. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М.: Наука. 1973.
12. Tikhonravov A., Trubetskov M., Amotchkina T. // Applied Optics. 2006. 45. P. 7026.
13. Tikhonravov A., Trubetskov M. // Applied Optics. 2005. 44. P. 6877.
14. Гыртышников Е. Е. Основы алгебры. М.: Физматлит, 2017.

Estimates Related to the Error Self-Compensation Mechanism in Optical Coatings Deposition**A. V. Tikhonravov¹, I. V. Kochikov^{1,a}, I. A. Matvienko², S. A. Sharapova¹, A. G. Yagola²**¹*Research Computer Center, Moscow State University. Moscow 119991, Russia.*²*Department of Physics, Moscow State University. Moscow 119991, Russia.**E-mail: ^aigor@kochikov.ru.*

This paper introduces an estimate for the strength of the correlation of layer thickness errors in the process of coating deposition with broadband optical monitoring. It is shown that a strong effect of self-compensation of deposition errors is observed in the case of a strong correlation of layer thickness errors. An estimate for the strength of this effect is introduced. Theoretical conclusions are confirmed by comparison with practical deposition results that demonstrate the presence of a strong self-compensation effect.

Keywords: thin films, optical coatings, optical monitoring.

PACS: 42.79.Ci, 42.25.Fx, 42.90.+m.

Received: 17 July 2018.English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2018. **73**, No. 6. Pp. 627–631.**Сведения об авторах**

1. Тихонравов Александр Владимирович — доктор физ.-мат. наук, профессор, директор НИВЦ; тел.: (495) 939-54-30, e-mail: tikh@srcc.msu.ru.
2. Кочиков Игорь Викторович — доктор физ.-мат. наук, вед. науч. сотрудник; тел.: (495) 939-23-46, e-mail: igor@kochikov.ru.
3. Матвиенко Иван Андреевич — студент, e-mail: matvienko.ivan.a@gmail.com.
4. Шарاپова Светлана Анатольевна — мл. науч. сотрудник, e-mail: svet.sharapova@gmail.com.
5. Ягола Анатолий Григорьевич — доктор физ.-мат. наук, профессор, тел.: (495) 939-10-33, e-mail: yagola@physics.msu.ru.