ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ. ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА

О выборе стратегий широкополосного оптического контроля напыления многослойных покрытий

Т. Ф. Исаев,[1,2,a] А. В. Тихонравов,[2,3] А. Г. Ягола[1,2]

[1] *Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра математики. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.*

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

[3] *Московский центр фундаментальной и прикладной математики. Россия, 119234, Москва, Ленинские горы, д. 1.*

Поступила в редакцию 13.11.2020, после доработки 20.11.2020, принята к публикации 25.11.2020.

Исследована корреляция ошибок при различных стратегиях широкополосного оптического контроля процесса напыления многослойных покрытий, включая стратегии со сменными чипами мониторинга. Показана необходимость учета эффекта самокомпенсации ошибок при обсуждении вопроса о выборе стратегии контроля. Результаты проведенного исследования могут быть использованы для выбора наиболее перспективной стратегии контроля для заданного типа многослойных покрытий.

Ключевые слова: многослойные покрытия, напыление покрытий, оптический контроль, широкополосный контроль, самокомпенсация ошибок.

УДК: 535.4. PACS: 42.25.Hz.

ВВЕДЕНИЕ

Современные многослойные оптические покрытия, в первую очередь покрытия для высокотехнологических применений, могут иметь многие десятки и даже сотни тонких слоев [1]. Надежный контроль толщин слоев в процессе напыления покрытий является на сегодняшний день основным фактором, определяющим прогресс во многих областях, требующих использования оптических покрытий. При производстве сложных покрытий с большим числом слоев наиболее широко используется оптический контроль процесса напыления [2, 3]. В настоящей работе мы рассматриваем широкополосный оптический контроль, при котором толщины слоев определяются по данным измерений спектров коэффициентов пропускания/отражения внутри напылительной камеры. Такие измерения проводятся через короткие промежутки времени, за которые толщины слоев изменяются на доли нанометра.

Большим преимуществом всех методов оптического контроля является то, что они контролируют оптические толщины слоев покрытия (произведения физических толщин на показатели преломления слоев). Именно эти толщины служат физически содержательными параметрами, определяющими спектральные свойства покрытия [2]. Среди многообразия методов оптического контроля наиболее перспективны методы прямого контроля, при котором измерения производятся непосредственно на одном из напыляемых покрытий [2, 3]. При их использовании исключаются дополнительные калибровочные ошибки, связанные с использованием любых других методов [3].

Однако методы прямого оптического контроля имеют и недостаток, проявляющийся в том, что ошибки в толщинах слоев часто начинают сильно возрастать с увеличением номера напыляемого слоя. Обычно очень сильное увеличение ошибок наблюдается при числе слоев, превышающем 20–30. Об этом увеличении принято говорить как о кумулятивном эффекте роста ошибок [4]. Было показано, что кумулятивный эффект возникает вследствие корреляции ошибок в толщинах слоев, которая неизбежна при любом методе прямого оптического контроля: ошибки в ранее напыленных слоях влияют на измеренные данные и тем самым влияют и на точность контроля толщины очередного напыляемого слоя [5].

Для предотвращения развития кумулятивного эффекта роста ошибок был предложен аппаратный подход, позволяющий последовательно контролировать не все покрытие в целом, а отдельные группы его слоев [6, 7]. В разработанной системе на месте одного из напыляемых образцов в вакуумной камере помещается специальное устройство, позволяющее в процессе напыления использовать до четырех контрольных чипов широкополосного мониторинга. Благодаря тому, что эти чипы находятся в тех же условиях, что и напыляемые образцы, сохраняются все преимущества прямого оптического контроля.

Разработанный в [6, 7] аппаратный подход позволяет использовать новые, ранее недоступные стратегии широкополосного оптического контроля. Естественно, в связи с этим возникает вопрос о выборе оптимальной для каждого конкретного покрытия стратегии. Этот вопрос не является тривиальным, поскольку не сводится только к задаче предотвращения развития кумулятивного эффекта роста ошибок. Дело в том, что корреляция ошибок в толщинах слоев может приводить еще и к позитивному эффекту самокомпенсации влияния ошибок на спектральные

[a] E-mail: temurisaev@gmail.com

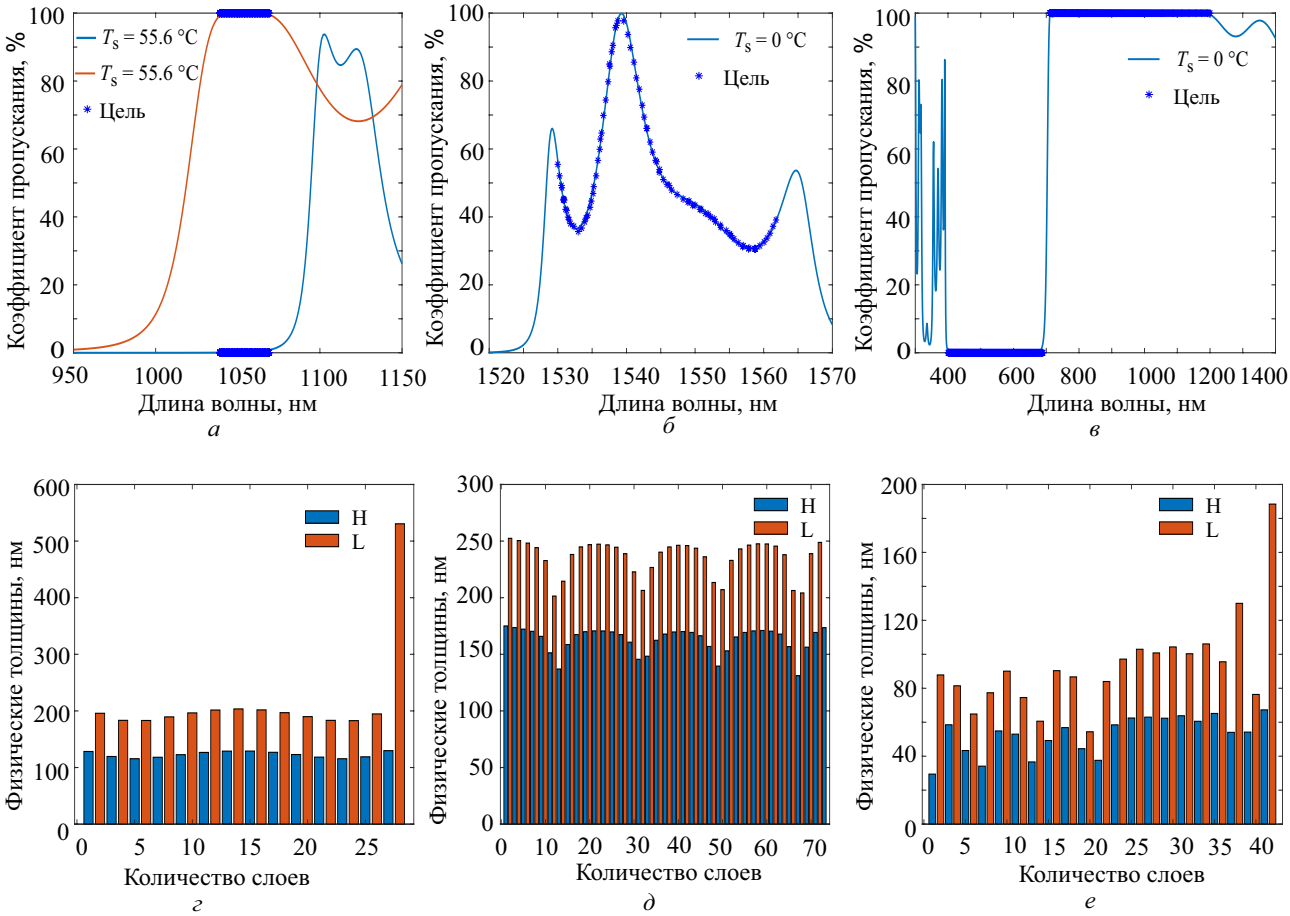

Рис. 1. Спектральные характеристики (*а, б, в*) и толщины слоев (*г, д, е*) 28-слойного поляризатора (*а, г*), 73-слойного сглаживающего фильтра (*б, д*) и 42-слойного отрезающего фильтра (*в, е*). Крестиками на *а, б, в* показаны целевые спектральные характеристики покрытий

свойства напыляемого покрытия [8]. Таким образом, при выборе стратегии оптического контроля следует учитывать оба эффекта. Данная работа предлагает именно такой подход. Она в существенной мере опирается на математические результаты работ [4, 9] по оценке степени корреляции ошибок и силы эффекта самокомпенсации ошибок. В разд. 1 рассматриваются несколько типов покрытий для современных высокотехнологических приложений и исследуется корреляция ошибок в толщинах их слоев при использовании классического прямого широкополосного контроля и стратегий, связанных с применением нескольких чипов мониторинга. В разд. 2 показывается значимость учета эффекта самокомпенсации ошибок для выбора стратегии широкополосного оптического контроля. Основные выводы приводятся в Заключении.

1. КОРРЕЛЯЦИИ ОШИБОК ПРИ РАЗЛИЧНЫХ СТРАТЕГИЯХ ШИРОКОПОЛОСНОГО КОНТРОЛЯ

В данном разделе мы рассматриваем три типа покрытий, имеющих важное значение для современных технологий. Это 28-слойный поляризатор лазерного излучения, 73-слойный сглаживающий фильтр для телекоммуникационных приложений и 42-слойный отрезающий фильтр. Спектральные характеристики этих покрытий и толщины их слоев представлены на рис. 1.

Все три покрытия нанесены на подложки с показателями преломления 1.52, нечетные слои имеют высокий показатель преломления (у поляризатора 2.05, у сглаживающего фильтра 2.1, у отрезающего фильтра 2.35), а четные — низкий (1.45 у всех покрытий). Крестиками на рисунках показаны целевые спектральные характеристики покрытий.

Представленный на рис. 1, *а* поляризатор предназначен для работы при угле падения Брюстера для подложки. Такие покрытия являются одними из основных элементов в лазерных системах накачки установок термоядерного синтеза. Сглаживающие фильтры для телекоммуникационных приложений (Gain Flattening Filters — GFF фильтры) (см. рис. 1, *б*) должны иметь сильно изменяющийся коэффициент пропускания в узкой спектральной области, что может быть получено только при очень большом числе слоев покрытия. Отрезающий фильтр на рис. 1, *в* должен обеспечивать резкий переход от зоны высокого отражения к зоне высокого пропускания, что также достигается при значительном числе слоев покрытия.

В настоящей работе мы проводим исследование перспектив использования при напылении рассматриваемых покрытий трех различных стратегий широкополосного оптического контроля. Первая из них — это использование классического прямого контроля всего покрытия, вторая и третья — использование

Таблица 1. Спектральные области контроля и номера контролируемых слоев при использовании 2 и 4 чипов мониторинга

Покрытие	Область контроля, нм	Номера контролируемых слоев	
		2 чипа	4 чипа
Поляризатор	650–1150	1–14, 15–28	1–6, 7–12, 13–20, 21–28
Сглаживающий фильтр	650–1150	1–36, 37–73	1–18, 19–36, 37–54, 55–73
Отрезающий фильтр	400–900	1–20, 21–42	1–10, 11–20, 21–30, 31–42

Таблица 2. Коэффициент корреляции β для рассматриваемых покрытий при различных стратегиях контроля

Стратегия	Поляризатор	Сглаживающий фильтр	Отрезающий фильтр
Прямой контроль	3.558	3.7345	18.3353
Контроль по 2 чипам	2.022	3.0736	4.4601
Контроль по 4 чипам	1.4072	2.4956	2.1264

соответственно двух и четырех чипов мониторинга для контроля последовательных групп слоев покрытия.

Сравнение стратегий проводится на основе анализа результатов вычислительных экспериментов по симуляции процесса напыления покрытий. Для проведения таких экспериментов используется упрощенный симулятор, описанный в [10]. Он позволяет проводить большое число симуляций за приемлемое время, что необходимо для получения надежных статистических оценок. Все представленные далее оценки базируются на результатах 1 млн экспериментов для каждого из рассматриваемых покрытий и каждой стратегии контроля.

Спектральные области, в которых проводится контроль напыления покрытий, указаны в табл. 1. Во всех случаях шаг спектральной сетки по длине волны составляет 1 нм, контроль проводится по коэффициенту пропускания покрытия при нормальном падении света. В табл. 1 указаны также номера слоев, контролируемых на разных чипах при использовании стратегий со сменными чипами мониторинга.

Важным параметром упрощенного симулятора процесса напыления является уровень дополнительных случайных ошибок в толщинах каждого из слоев покрытия. Эти ошибки задаются как гауссовские случайные величины с нулевым математическим ожиданием и среднеквадратичным отклонением 1 нм. Эта величина и называется уровнем дополнительных ошибок. Она влияет в основном на общий уровень ошибок процесса напыления и выбрана в наших экспериментах таким образом, чтобы последний соответствовал уровню ошибок в реальных напылительных экспериментах.

Для оценки степени корреляции ошибок в толщинах слоев мы используем подход, предложенный в работе [4]. Он основывается на рассмотрении вероятностной плотности распределения векторов ошибок в m-мерном пространстве, где m — число слоев покрытия. Для его описания введем следующие обозначения. Пусть $\Delta = \delta d_1, \ldots, \delta d_m$ — векторы ошибок в толщинах слоев. Плотность распределения этих векторов в m-мерном пространстве описывается многомерным гауссовым распределением:

$$f(\Delta) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{m}{2}}\sqrt{\det \mu}} \exp\left(-\sum_{i=1}^{m} \frac{(\delta d_i)^2}{2\sigma_i^2}\right). \quad (1)$$

Здесь μ — матрица, определяемая на основе полученной выборки векторов ошибок для данного типа покрытия и используемой стратегии широкополосного контроля. Напомним, что в нашем случае каждая из этих выборок содержит $M = 1\,000\,000$ векторов ошибок. Элементы матрицы μ находятся по формуле

$$\mu_{ij} = \frac{1}{M}\sum_{k=1}^{M} \delta d_i^{(k)} \delta d_j^{(k)}.$$

Стандартные отклонения σ_i в формуле (1) являются квадратными корнями из собственных значений матрицы μ.

Корреляция ошибок в толщинах слоев покрытия приводит к тому, что векторы ошибок располагаются в m-мерном пространстве неравномерно. Геометрия их расположения описывается поверхностями уровня вероятностной плотности распределения. Эти поверхности представляют собой многомерные эллипсоиды, размеры которых определяются стандартными отклонениями σ_i в формуле (1).

Пусть σ_{av} — среднеквадратичное значение стандартных отклонений σ_i. В работе [4] была предложена следующая оценка степени корреляции ошибок в толщинах слоев:

$$\beta = \sigma_{av}\left(\prod_{i=1}^{m} \sigma_i\right)^{-\frac{1}{m}}. \quad (2)$$

Согласно [4] корреляция ошибок тем сильнее, чем больше β, а при отсутствии корреляции ошибок коэффициент β близок к 1.

В табл. 2 представлены найденные в соответствии с (2) значения коэффициента корреляции для рассматриваемых типов покрытий и трех различных стратегий широкополосного оптического контроля.

Как и следовало ожидать, наибольшие значения коэффициента корреляции соответствуют классическому прямому методу широкополосного контроля,

Таблица 3. Значения $\mathbb{E}[S]$, $\mathbb{E}[\|\Delta\|]$, S_{eff} для рассматриваемых покрытий

Стратегия	Поляризатор			Сглаживающий фильтр			Отрезающий фильтр		
	$\mathbb{E}[S]$	$\mathbb{E}[\|\Delta\|]$	S_{eff}	$\mathbb{E}[S]$	$\mathbb{E}[\|\Delta\|]$	S_{eff}	$\mathbb{E}[S]$	$\mathbb{E}[\|\Delta\|]$	S_{eff}
Прямой контроль	36.204	17.2383	20.7478	5.7937	30.191	3.3213	18.1114	104.4613	0.8814
Контроль по 2 чипам	19.9631	10.2494	19.2415	4.0753	25.2508	2.7933	6.4788	25.9657	1.2685
Контроль по 4 чипам	8.2991	7.2223	11.3519	2.9236	20.5909	2.4574	5.8531	13.289	2.2392

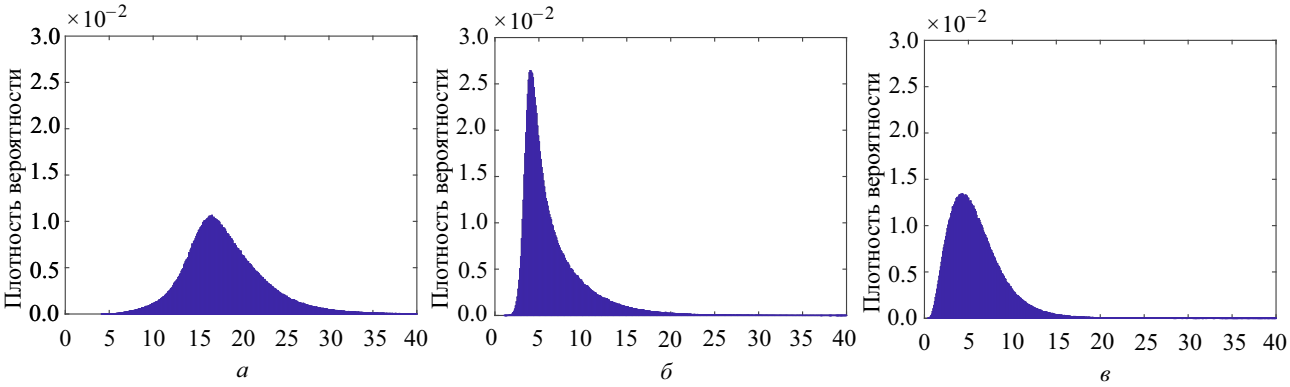

Рис. 2. Плотность распределения вероятностей для силы эффекта самокомпенсации в случае отрезающего фильтра при использовании различных стратегий контроля: *а* — прямой контроль, *б* — контроль по 2 чипам мониторинга, *в* — контроль по 4 чипам мониторинга

когда ошибки в каждом новом напыляемом слое оказываются зависящими от ошибок, допущенных во всех ранее напыленных слоях. Контроль групп слоев с использованием новых чипов мониторинга исключает зависимость от ошибок в толщинах слоев, напыленных с использованием других чипов, и корреляция уменьшается.

2. УЧЕТ ЭФФЕКТА САМОКОМПЕНСАЦИИ ОШИБОК ПРИ ВЫБОРЕ СТРАТЕГИИ ШИРОКОПОЛОСНОГО КОНТРОЛЯ

Как было отмечено во Введении, корреляция ошибок в толщинах слоев вызывает кумулятивный эффект роста ошибок. Поэтому неудивительно, что при использовании прямого контроля по всему покрытию средний уровень ошибок оказывается больше, чем при использовании стратегий со сменными чипами мониторинга. В табл. 3 представлены математические ожидания норм векторов ошибок, которые подтверждают данное утверждение.

Однако, наряду с негативным кумулятивным эффектом, корреляция ошибок в толщинах слоев во многих случаях вызывает еще и позитивный эффект самокомпенсации влияния ошибок на спектральные свойства покрытия. Для учета этого эффекта в работе [9] был предложен подход, основанный на сравнении вариаций целевого функционала, оценивающего близость спектральных характеристик покрытия к требуемым в случаях коррелированных и некоррелированных ошибок. Для его краткого описания обозначим данный функционал MF. Мы не будем выписывать выражения для MF в случаях рассматриваемых типов покрытий. Для дальнейшего достаточно сказать, что значения MF оценивают среднеквадратичные отклонения спектральных характеристик покрытий от целевых характеристик, показанных на рис. 1, *а, б, в*. Естественно, целевой функционал MF достигает минимума для найденной теоретической конструкции любого из рассматриваемых покрытий, а его вариации при любых видах ошибок положительны.

Некоррелированные ошибки в толщинах слоев могут задаваться различным способом. В [9] было предложено задавать эти ошибки как независимые нормально распределенные случайные величины с нулевыми математическими ожиданиями и со среднеквадратичными отклонениями, равными 1% от толщин соответствующих слоев. Заметим, что среднеквадратичное значение норм большого числа векторов ошибок при таком задании будет равно 0.01 от нормы вектора толщин слоев покрытия. Обозначим данную норму D. Мы рассматриваем набор из 1 млн таких векторов. Нормы полученных векторов будут иметь разброс относительно величины $0.01D$. В соответствии с [9] нормируем векторы ошибок так, чтобы их нормы были равны $0.01D$, и найдем соответствующие им вариации целевого функционала δMF. Обозначим $\mathbb{E}[\delta MF]$ как математическое ожидание этих вариаций.

Пусть Δ — вектор коррелированных ошибок. Нормируем и его так, чтобы норма составляла $0.01D$. Обозначим $\delta MF(\Delta)$ получаемую при этом вариацию целевого функционала. Величина

$$S = \frac{\mathbb{E}[\delta MF]}{\delta MF(\Delta)}$$

оценивает силу эффекта самокомпенсации в случае коррелированных ошибок, заданных вектором Δ.

Далее в качестве примера мы приводим результаты расчета силы эффекта самокомпенсации для 42-слойного отрезающего фильтра. Эти результаты приведены на рис. 2 в виде плотностей распределения вероятностей значений S для трех стратегий контроля.

Математические ожидания величины S приведены в табл. 3 для покрытий всех трех рассматриваемых типов. В таблице показаны также математические ожидания норм векторов ошибок и значения эффективной силы эффекта самокомпенсации.

Как показывает табл. 3, для всех трех типов покрытий сила эффекта самокомпенсации оказывается наибольшей при использовании прямого широкополосного контроля, т. е. когда корреляция ошибок является наиболее сильной. Однако с большей корреляцией ошибок связан и более сильный кумулятивный эффект роста ошибок (см. значения $\mathbb{E}[\|\Delta\|]$ в табл. 3). Для оценки совместного влияния двух обсуждаемых эффектов по аналогии с [9] введем параметр

$$S_{\text{eff}} = 0.01D\frac{\mathbb{E}[S]}{\mathbb{E}[\|\Delta\|]},$$

представляющий эффективную силу эффекта самокомпенсации ошибок с учетом их ожидаемого уровня. Вычисленные значения S_{eff} также приведены в табл. 3.

Отметим, что наибольшие значения параметра S_{eff} наблюдаются в случае поляризатора лазерного излучения. Это как раз то покрытие, для которого в работе [8] был экспериментально обнаружен чрезвычайно сильный эффект самокомпенсации ошибок при прямом широкополосном оптическом контроле процесса его напыления. Работа [8] и дала толчок интенсивному теоретическому исследованию процесса корреляции ошибок и связанному с ним эффекту самокомпенсации ошибок.

Эффект самокомпенсации ошибок имеет место и для двух других типов покрытий, но он проявляется в менее яркой форме, чем в случае поляризатора лазерного излучения. Стоит отметить, что большое значение $\mathbb{E}[S]$ соответствует и прямому широкополосному контролю отрезающего фильтра. Однако в этом случае положительное влияние эффекта самокомпенсации ошибок полностью перекрывается сильным ростом общего уровня ошибок (см. соответствующее значение $\mathbb{E}[\|\Delta\|]$ в табл. 3). В результате величина S_{eff} оказывается меньше 1. Использование четырех чипов мониторинга в очень сильной степени подавляет кумулятивный эффект роста ошибок, но при этом в достаточной степени сохраняет эффект самокомпенсации ошибок. Таким образом, это как раз тот случай, в котором использование новых стратегий широкополосного оптического контроля может дать ощутимый практический результат.

В целом сведенные в табл. 3 результаты позволяют проводить оценку перспектив использования различных стратегий широкополосного контроля при напылении важнейших типов многослойных оптических покрытий.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе впервые проведено теоретическое исследование перспектив использования различных стратегий широкополосного оптического контроля при напылении многослойных покрытий различных типов. Исследование базируется на ранее полученных авторами работы математических результатах по оценке степени корреляции ошибок в толщинах слоев покрытий и оценке силы связанного с этой корреляцией эффекта самокомпенсации ошибок. Исследование проводилось путем статистического анализа большого числа данных, полученных в ходе вычислительных экспериментов по симуляции процесса напыления покрытий. Показано, что результаты проведенного статистического анализа могут быть использованы для выбора наиболее перспективной стратегии контроля без проведения дорогостоящих натурных экспериментов.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Piegari A., Flory F.* // Optical Thin Films and Coatings. 2nd edition. Woodhead Publishing, Cambridge, UK, 2018.
2. *Macleod H. A.* // Optical Thin Films and Coatings. 4th edition. Taylor & Francis Group, 2010.
3. *Tikhonravov A., Trubetskov M., Amotchkina T.* Optical Thin Films and Coatings. 2nd ed. 2018. P. 65.
4. *Kochikov I. V., Sharapova S. A., Yagola A. G., Tikhonravov A. V.* // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2020.
5. *Tikhonravov A. V., Trubetskov M. K., Amotchkina T. V.* // Applied Optics. 2006. **45**. P. 7026.
6. *Zoeller A., Williams J., Hartlaub S.* // Precision filter manufacture using direct optical moni-toring. In Proceedings of the OIC 11th Topical Meeting. OSA. Washington. DC. USA. 2010. P. 6.
7. *Zoeller A., Hagedorn H., Weinrich W., Wirth E.* // Testglass changer for direct optical monitoring. Proc. SPIE. 2011. 8168.
8. *Zhupanov V., Kozlov I., Fedoseev V.* et al. // Appl. Opt. 2017. **56**. P. C30.
9. *Tikhonravov A., Kochikov I., Matvienko I.* et al. // COATINGS. 2019. **9**, N 12(809). P. 1.
10. *Tikhonravov A. V., Kochikov I. V., Matvienko I. A.* et al. // Num. Methods Program. 2018. **19**. P. 439.

On the Choice of a Strategy for Broadband Optical Monitoring of the Deposition of Multilayer Coatings

T. F. Isaev[1,2,a], **A. V. Tikhonravov**[2,3], **A. G. Yagola**[1,2]

[1]*Department of Mathematics, Faculty of Physics;* [2]*Research Computing Center, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119191, Russia.*
[3]*Moscow Center for Fundamental and Applied Mathematics. Moscow 119234, Russia.*
E-mail: [a]*temurisaev@gmail.com.*

The correlation of errors for various broadband optical monitoring strategies for controlling deposition of multilayer coatings, including strategies with replaceable monitoring chips, is investigated. It is shown that it is necessary to take into account the effect of error self-compensation when choosing a monitoring strategy. The results of this study can be used to select the most promising monitoring strategy for a given type of multilayer coatings.

Keywords: multi-layer covers, direction of covers, optical monitor, broadband monitor, self-compensation for errors.
PACS: 42.25.Hz.
Received 13 November 2020.

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2021. **76**, No. 1. Pp. 36–41.

Сведения об авторах

1. Исаев Темур Фуркатович — студент; тел.: (495) 939-10-33, e-mail: temurisaev@gmail.com.
2. Тихонравов Александр Владимирович — доктор физ.-мат. наук, профессор; тел.: (495) 939-54-24, e-mail: tikh@srcc.msu.ru.
3. Ягола Анатолий Григорьевич — доктор физ.-мат. наук, профессор; тел.: (495) 939-10-33, e-mail: yagola@physics.msu.ru.