

文章编号: 0258-7025(2009)08-2171-07

减小由光谱测量数据误差造成的薄膜光学参数反演不确定度的方法

吴素勇 龙兴武 黄云 杨开勇

(国防科技大学光电科学与工程学院光电工程系, 湖南 长沙 410073)

摘要 基于对光谱测量数据中系统误差和随机误差的不同特性分析,提出了两种方法来分别减小其对薄膜光学参数反演测量精度的影响。方法一是利用薄膜光谱系数关于薄膜光学参数的一阶偏导数信息筛选数据点,选取偏导数符号相反的波段或入射角区域作为最佳测量数据点采集区域,以最小化系统误差引起的薄膜光学参数相对真实值的偏差大小。方法二是在实测光谱数据中注入独立同分布的随机噪声,利用基于偏差函数最小化方法的混合优化算法多次进行反演计算,将每次反演得到的薄膜光学参数估计值的统计均值作为薄膜真实光学参数的估计值,以减小甚至消除随机误差引起的薄膜光学参数不确定度。这两种方法不仅在提高薄膜光学参数测量精度上具有明显的实用价值,而且物理意义明确,可操作性强,不局限于特定波段和特定材料的薄膜光学参数测量,具有良好的普适性,可望在薄膜光学参数的准确测量技术中发挥重要作用。

关键词 薄膜光学; 光学参数反演不确定度; 偏导数筛选; 噪声注入; 光谱测量误差; 遗传算法

中图分类号 O484.4 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/CJL20093608.2171

Methods for Decreasing Optical Parameters Reverse Determination Uncertainty of Thin Films Caused by Spectral Measurement Errors

Wu Suyong Long Xingwu Huang Yun Yang Kaiyong

(Department of Optoelectronic Engineering, College of Optoelectronic Science and Engineering,
National University of Defense Technology, Changsha, Hunan 410073, China)

Abstract Based on different characteristics analysis of the systematic and random errors found in the spectral measurement data, two methods are put forward to diminish their impacts on the reverse determination accuracy of thin films' respectively optical parameters. The first method uses spectral coefficient's first order partial derivatives of thin films with respect to layer optical parameters to select measurement data. The spectral region or incident angle region characterized with opposite operation symbol of partial derivatives is chosen as the optimal measurement data region to minimize the deviations from the real optical parameters of thin films caused by systematic measurement errors. The second method injects independent random noise of same distribution to the actual measurement data. The data with noise are utilized as the real spectral coefficients of the thin film being measured in the reverse determination for many times. The reverse determination algorithm used is a mixed optimization method based on the discrepancy function minimization technique. The statistics mean values of all fit optical parameters obtained each time by the mixed optimization method are chosen as estimates of the real optical parameters of the measured thin film to diminish or eliminate the uncertainty of optical parameters caused by random measurement errors. These two methods are of obviously practical value to improve the determination accuracy of thin films' optical parameters. And they also characterize with concise and definite physical meaning, expedient manipulation ability and good universality, not restricted to specific spectral regions or specific materials. They are of promising importance in the accurate reverse determination techniques of thin films' optical parameters.

Key words thin films optics; reverse determination uncertainty of optical parameters; selection by partial derivatives analysis; noise injection; spectral measurement errors; genetic algorithm

收稿日期: 2008-12-12; 收到修改稿日期: 2008-12-25

作者简介: 吴素勇(1984—),男,博士研究生,主要从事光学薄膜设计与分析等方面的研究。

E-mail: sywu2001@163.com

导师简介: 龙兴武(1958—),男,教授,博士生导师,主要从事激光与光电子技术等方面的研究。

E-mail: xwlong110@sina.com

1 引言

薄膜光学参数的高度准确测量是设计和镀制高质量光学薄膜的重要基础。确定薄膜光学参数的方法总是以测量薄膜的光学性能为原理的。薄膜的光学性能主要体现在强度和相位两个方面,因此测定薄膜光学参数的方法也主要分为两类。一类是直接或间接利用薄膜透射或反射光强信息的方法,如极值法^[1]、包络线法^[2~4]和基于分光光度计的反演优化方法^[5~8],都是直接利用薄膜的透射或反射能量光谱数据进行反演计算的,而表面等离子体激元法^[9]、测量折射率的 Abeles 法^[10](布儒斯特角法)和棱镜耦合薄膜波导法^[11,12]是通过观测光强曲线的变化来间接测量的。另一类是利用薄膜透射或反射相位和偏振信息的方法,如椭偏测量法^[13,14]。现代计算机技术和最优控制理论的引入,使得基于待测薄膜测量光谱数据与理论光谱数据的偏差函数的最小化方法的反演测量方法的精度较其他分析方法大为提高,适用范围也大为拓宽。

对于直接利用透射或反射能量光谱的第一类方法,影响薄膜光学参数反演不确定度的因素主要有两个方面:所选择的薄膜光学参数的数学模型和光谱测量数据的系统误差和随机误差。对于宽光谱扫描的光谱测量数据,应该考虑膜材料的折射率的色散,而对于单波长、变入射角的测量光谱数据,材料折射率色散是不存在的。针对不同的应用波段和膜材料,消光系数及其色散也应做出合理的考虑。大量的研究还表明^[15~17]:对于由物理蒸发沉积过程生产的薄膜,应该考虑薄膜的折射率不均匀性影响,否则,将会产生不可忽视的薄膜折射率测量误差。通过一些辅助手段或改变沉积过程(如离子辅助沉积),薄膜的折射率不均匀性可以减小到忽略不计。通过细致的物理考虑,可以选择合理的数学模型来提高待测薄膜光学参数的测量准确度。另一个更为不利的现状是光谱测量数据总是存在一定的系统误差和随机误差,由此带来薄膜光学参数测量的不可忽略的偏差和不确定度。典型的随机误差来自测量系统和环境的随机杂散光和噪声,典型的系统误差来自测量光源和光谱记录设备的不稳定性。随机误差在各个测量数据点中各不相同,系统误差导致透射或反射光谱的上下平移或引起较大的波长变化。显然,应该努力减小光谱测量数据中的系统误差,如可以在每次新的测量前进行归一化处理,但是事实上系统误差总是不可避免地存在于测量数据中,在线测量时更为突出,因为仪器的校准和标定更为复杂^[18]。

迄今为止,关于光谱测量数据误差对薄膜光学参数反演不确定度的影响已经发表了一些有参考价值的分析结果^[19,20],但是减小不确定度的方法却未见报道。本文基于薄膜光谱系数关于薄膜光学参数的偏导数的准确计算模型和概率统计理论中的独立同分布大数定律,针对光谱测量数据系统误差和随机误差的不同特性,提出了两种方法来分别减小由其造成的薄膜光学参数反演偏差和不确定度的大小。同时,这两种方法具有直观的物理思想和便捷的操作性能,不局限于特定波段和特定膜材料,对薄膜光学参数的高精度测量具有非常实用的应用价值。

2 方法的建立

首先,有必要先引入薄膜光学参数反演测量的模型。本文模型建立在评价待测薄膜的测量光谱数据和理论光谱数据偏差大小的偏差函数的最小化基础上,运用基于精英保留策略的遗传算法和采用莱文伯-马克特(Levenberg-Marquardt)算法的非线性最小二乘法,一起进行薄膜光学参数的反演计算。这一混合方法首先充分利用遗传算法的全局寻优能力来搜索并收敛到薄膜真实光学参数附近的区域,再利用 Levenberg-Marquardt 算法的非线性最小二乘法对遗传算法结果进行局部精细优化(Refinement),以克服遗传算法一定程度的随机性和局部收敛效率不高的不足,稳定地确定薄膜的光学参数。这一混合优化算法的卓越性能已经在膜系设计的实践中得到充分验证^[21],只需把膜系设计评价函数换成偏差函数,就可以方便地移植到薄膜光学参数的反演测量应用中,对于变量更少的单层膜材料的光学参数反演更能轻松胜任。数值计算也表明,如果测量数据不存在误差,该混合算法能以很高的精度多次稳定地收敛于薄膜的真实光学参数,可以认为不存在算法误差。

现在从薄膜光谱测量数据中的系统误差和随机误差两方面来削弱其对薄膜光学参数反演不确定的影响。实际的光谱测量数据由薄膜的理论光谱数据、测量系统误差和随机误差叠加在一起组成。对系统误差,一方面采用各种稳定措施和校准技术获得部分的测量系统误差是可能的,这样可以实测光谱数据中分离部分系统误差,减小系统误差的影响。但另一方面,测量数据中总不可避免地有残留。既然系统误差难以完全消除,而系统误差又是通过偏导数传递影响的,那么可以通过准确计算薄膜光谱系数对材料折射率和几何厚度的偏导数,选择合

适的偏导数的波段或入射角区域作为测量点区域,来减小系统误差对膜层参数反演偏差的影响。薄膜光学理论表明,不同波长或入射角处薄膜光谱系数关于膜层几何厚度和折射率的偏导数大小不同,相同的膜层参数误差会导致不同程度的光谱系数偏差,偏导数同时为零的奇点处即使出现较大的膜层参数误差,光谱系数变化也很小。相反地,在相同的光谱测量误差下,在一阶近似下,偏导数同时为零的奇点处的膜层参数误差可能相对很大,偏导数符号相反或其中一个为零的波段或入射角区域,由于偏导数传递系统误差影响的作用相互抵消,理论上膜层参数相对真实值的偏差会变小,而偏导数符号相同的波段或入射角区域,由于偏导数传递作用相互叠加,反而会加剧系统误差的影响。这一方法的物理思想简洁明了,可操作性强,关键的地方在于偏导数的准确计算,对于提高薄膜光学参数反演测量的精度是很有利的。

对于随机误差,通常的观点是将其剥离实测光谱数据。但由于各个测量点的随机性,要从实测光谱数据中分离出随机误差是不可能的。这意味着,可以认为,薄膜的真实光谱数据在实测光谱数据与残余系统误差之差的附近一定范围随机振荡。如果直接对实测光谱数据反演,那么得到的反演计算值中仍然有随机误差的影响,影响了薄膜光学参数的准确测量。既然分离测量随机误差不可能,不如在实测光谱数据中注入独立同分布的模拟随机噪声,利用基于偏差函数最小化的优化算法进行多次反演,每次反演的逼近光谱是在实测光谱数据附近随机振荡的,相应的薄膜光学参数反演估计值也是独立同分布,并在包括残余的难以剥除的系统误差影响在内的薄膜光学参数附近振荡。利用多次反演得到的薄膜光学参数估计值的统计均值,代替由实测光谱数据直接反演得到的薄膜光学参数估计值,根据概率统计理论中的独立同分布大数定律,该统计均值依概率收敛于包含残余系统误差影响在内的薄膜光学参数。这样,就可以大大减小测量随机误差对薄膜的光学参数测量的随机性影响,更能准确地逼近薄膜的真实光学参数值。同时利用概率统计理论中的“ 3σ ”原则,可以用三倍的标准差作为原来未注入噪声时反演的不确定度的度量,而本文采用的薄膜光学参数一系列估计值的统计均值的不确定度,将减小到原来未注入噪声时反演的不确定度的反演次数的平方根分之一,大大地提高了薄膜光学参数测定的准确度。理论上,可以通过增大反演计

算的次数来完全消除随机误差的影响,正是在这一意义上,光谱测量数据的随机误差对薄膜光学参数反演的不确定度的影响是非本质的,可以忽略不计。但是,始终得注意其成立前提是反演次数足够大,无论用任何反演算法,未注入噪声时的反演计算中,由光谱测量随机误差造成的不确定度还是不可忽略的,甚至可以超过系统误差造成的影响。

综上所述,针对薄膜光谱测量数据中的系统误差和随机误差,提出了两种方法来相应地减小测量误差造成的薄膜光学参数反演的偏差和不确定度。对于难以消除的残余系统误差,可以通过对薄膜光谱系数关于膜层光学参数的偏导数的准确分析,选择偏导数符号相反或其中一个为零的波段或入射角区域作为光谱测量区域,可以在相同的光谱测量精度获得更准确的薄膜光学参数值,其本质是利用一阶偏导数信息进行有利于反演计算的光谱测量数据筛选。对不可分离的随机误差,人为地在实测光谱数据中注入一定强度的独立同分布的模拟随机噪声,利用基于偏差函数最小化的优化算法多次进行反演计算,所得反演估计值的三倍标准差可以作为原来的未注入噪声时反演的不确定度的度量,所得反演估计值的统计均值作为薄膜真实光学参数的估计值,其不确定度为未注入噪声时反演的不确定度的反演次数的平方根分之一,随着反演次数的增大而逐渐趋于零,其本质是用统计平均来减小甚至消除实测光谱数据中的随机误差对薄膜光学参数测量的影响,关键是在实测光谱数据中注入随机噪声的创新思想。

3 减小系统误差影响的数值模拟分析

分析光谱测量数据中的系统误差对薄膜光学参数反演测量的影响,首先要解决的是薄膜光谱系数关于膜层光学参数的一阶偏导数的准确计算。差分近似带来的算法误差是不允许的,应该要有数学上严格的解析模型来准确计算相应的一阶偏导数^[22]。

以中心波长为 632.8 nm 的单层 $\lambda/4$ Ta_2O_5 薄膜为例,基底折射率为 1.457,从空气中入射。设其几何厚度为 d ,折射率为 n ,反射率为 R ,反射率关于薄膜几何厚度和折射率的偏导数分别记为 $\partial R/\partial d$ 和 $\partial R/\partial n$ 。采用的 Ta_2O_5 薄膜的折射率色散公式为 $n = \sqrt{4.1869 + 0.13158 \times (1000/\lambda)^2}$,波长 λ 的单位为 nm。图 1 给出了中心波长为 632.8 nm 的单层 $\lambda/4$ Ta_2O_5 薄膜在 300~1200 nm 波段的反射率曲

线及其关于薄膜几何厚度和折射率的偏导数曲线(没有考虑基片的背面反射影响)。这里,偏导数曲线是基于物理上的考虑,在一阶近似下,光谱测量系统误差对薄膜光学参数反演测量的影响是通过一阶偏导数来传递的。可以看出,反射率曲线的极小值点(343 nm处)同时是反射率关于薄膜几何厚度和折射率的偏导数的零点,是一个奇点;而极大值点(632.8 nm处)只是反射率关于薄膜几何厚度的偏导数的零点,关于折射率的偏导数的另一个零点(448 nm处)偏离了反射率的极大值点。

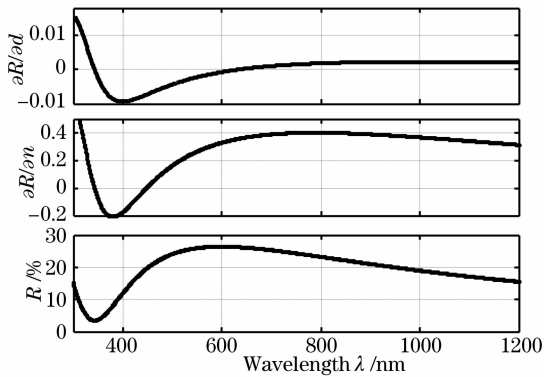


图1 中心波长为632.8nm的单层 $\lambda/4$ Ta_2O_5 膜的反射率及其对膜层几何厚度、折射率的偏导数

Fig.1 Reflectance and its partial derivatives to layer thickness and refractive index of a single quarter-wave layer Ta_2O_5 film with central wavelength of 632.8 nm

为了探讨不同波长处的反射率测量系统误差引起的薄膜光学参数偏差的大小区别和规律,采用单波长、变入射角测量的反射光谱数据进行反演模拟计算。为了避开偏导数在 $60^\circ\sim 80^\circ$ 的入射角内的零点(奇点,会加剧系统误差影响),反射光谱数据选 $10^\circ\sim 50^\circ$ 的入射角区域内间隔 5° 的数据点作为偏差函数中的逼近光谱参数。偏差函数 f_{DF} 的定义为

$$f_{\text{DF}} = \left\{ \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L \left[\frac{R(\gamma_l) - \tilde{R}(\gamma_l)}{\Delta R_l} \right]^2 \right\}^{1/2}, \quad (1)$$

式中 $\tilde{R}(\gamma_l)$, $R(\gamma_l)$ 和 ΔR_l 分别为待测薄膜在入射角 γ_l 处的实测反射率、理论计算反射率和反射率测量精度, L 是选取的总入射角数目。当所有测量点的理论计算反射率与实测反射率的偏差小于反射率测量精度时,偏差函数值小于1。

数值模拟计算时,在理论计算反射率数据中人为加入0.1%的正向系统误差,作为实测反射率数据。利用第二节中的混合优化算法,并考虑薄膜折射率的色散,在不同波长处进行反演计算,所得的薄膜光学参数的反演估计值 n, d ,偏差函数大小 f_{DF} ,反演估计值相对真实值 \tilde{n}, \tilde{d} 的偏差大小 $\Delta n, \Delta d$ 及

其相应的偏导数 $\partial R/\partial n$ 和 $\partial R/\partial d$ 的符号都列于表1中。同时,图2给出了500 nm处在0.1%的正向系统误差下100次反演计算得到的折射率、几何厚度和偏差函数估计值的分布情况,也验证了第二节中的混合优化算法的稳定性和全局收敛能力。值得一提的是,当系统误差是负向时,偏差函数大小与正向时非常接近,相应的折射率和几何厚度偏差反号,呈现良好的对称性,限于篇幅,不再重复列出。

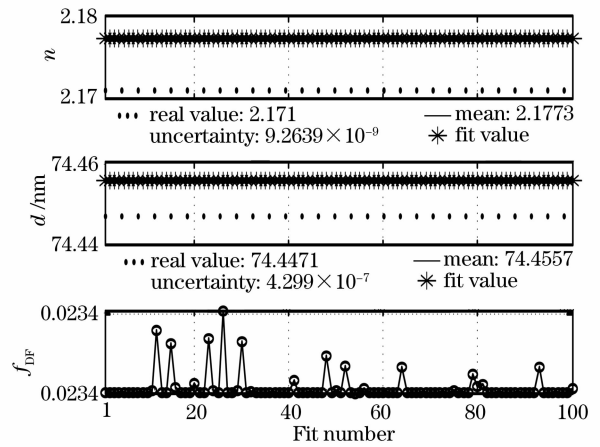


图2 500 nm处在0.1%的正向反射率测量系统误差下100次反演计算得到的薄膜折射率、几何厚度和偏差函数值的分布

Fig.2 Distribution of refractive index, thickness and discrepancy function value obtained by 100-time reverse determination with 0.1% positive systematic reflectance measurement error at 500 nm

由表1可以看出,奇点343 nm处及其附近区域非常不适合用来反演测量薄膜的光学参数,折射率和几何厚度都存在相当大的偏差。理论上,在一阶近似下,反射率偏差为零,而实际反射率测量必然存在系统误差,通过一阶偏导数的传递作用,引起的薄膜光学参数的偏差必然很大。在 $448\sim 632.8$ nm的波段内,折射率和几何厚度的偏差都很小,原因是在该波段内偏导数的符号相反,两偏导数的误差传递作用相互抵消,由光谱测量系统误差引起的两光学参数的偏差都减小。在两端点处,偏导数为零对应的光学参数的不确定度相对会变大,导致了另一个光学参数的偏差相对变小。在其他波段,偏导数的符号同正或同负,传递作用相互叠加,增强了系统误差对薄膜光学参数反演测量的影响,产生了较大的折射率偏差或几何厚度偏差。值得一提的是,在这种单波长变入射角的测量技术中,测量的精度可以提高到0.01%,这样系统误差的影响可以进一步减小。

表 1 0.1% 的正向反射率测量系统误差在不同波长处引起的中心波长为 632.8 nm 的 $\lambda/4$ Ta_2O_5 薄膜的折射率和几何厚度反演测量的偏差

Table 1 Reverse determination deviations of the refractive index and thickness of a quarter-wave Ta_2O_5 film with central wavelength at 632.8 nm caused by 0.1% positive systematic error of reflectance measurement at different wavelengths

λ / nm	\tilde{n}	\tilde{d} / nm	f_{DF}	n	d / nm	Δn	Δd / nm	$\partial R/\partial n$	$\partial R/\partial d$
300	2.3767		0.0178	2.4446	71.8378	0.0679	-2.6093	+	+
343	2.3033		0.312	2.0843	81.5145	-0.2190	7.0674	0	0
360	2.2808		0.0261	2.3228	73.0913	0.042	-1.3558	-	-
380	2.2579		0.0089	2.2831	73.7294	0.0252	-0.7177	-	-
400	2.2381		0.0101	2.2544	74.0384	0.0163	-0.4087	-	-
448	2.2006		0.0168	2.2094	74.3124	0.0088	-0.1347	0	-
500	2.171	74.4471	0.0234	2.1773	74.4557	0.0063	0.0086	+	-
570	2.1429		0.0336	2.1474	74.6826	0.0045	0.2355	+	-
600	2.1336		0.0395	2.1375	74.8374	0.0039	0.3903	+	-
632.8	2.125		0.048	2.1277	75.0843	0.0027	0.6372	+	0
700	2.1108		0.0808	2.1092	76.0672	-0.0016	1.6201	+	+
800	2.0958		0.0725	2.1186	70.5274	0.0228	-3.9197	+	+
1000	2.0781		0.0106	2.0985	71.7756	0.0204	-2.6715	+	+
1200	2.0684		0.0029	2.0929	71.544	0.0245	-2.9031	+	+

总的看来,偏导数符号相反的波段更有利于减小由光谱测量系统误差造成的薄膜光学参数反演的偏差大小,偏导数同时为零的奇点及其附近波段最不适合用来进行反演计算,应当予以剔除。同时可以看出,极值法利用了全部的奇点信息进行薄膜光学参数测量,实际上加剧了光谱测量系统误差对薄膜光学参数反演测量造成的影响,特别会造成较大的几何厚度不确定度,原理上限制了其测量水平的提高。合理的反演测量数据的选择,应该避免薄膜光谱系数关于折射率和几何厚度的偏导数同时零点的奇点及其附近波段,选择偏导数符号相反的波段的光谱测量数据作为反演时要逼近的光谱系数,有利于抵消系统误差造成的影响,同时减小薄膜几何厚度和折射率的反演测量不确定度,特别是在线测量和镀膜监控中有利于提高薄膜光学参数的测量水平。

4 减小随机误差影响的数值模拟分析

在第二节中,提出在实测光谱数据中注入独立同分布的模拟随机噪声,运用多次反演计算获得的薄膜光学参数估计值的统计平均值,作为待测薄膜的真实光学参数的估计值,能比未注入噪声时反演估计值更准确地逼近薄膜光学参数的真实值,同时其不确定度减小到未注入噪声时反演的不确定度的反演次数的平方根分之一,理论上可以完全消除光谱测量数据中随机误差的影响。

当数值模拟分析随机误差的影响时,先假设不存在系统误差,在理论计算反射率数据的每个点中

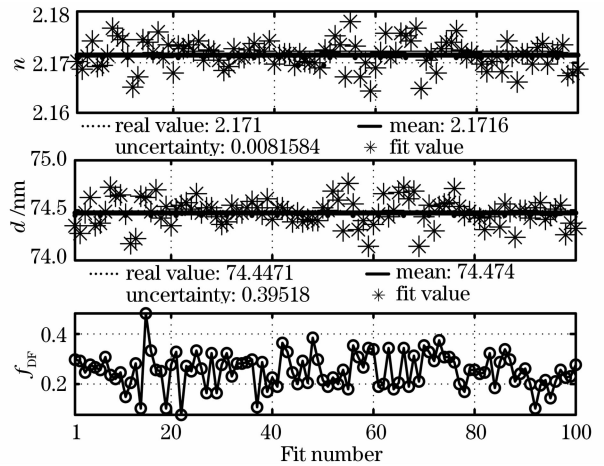


图 3 500 nm 处在 0.1% 的正态分布型反射率测量随机误差下 100 次反演计算得到的薄膜折射率、几何厚度和偏差函数值的分布

Fig. 3 Distribution of refractive index, thickness and discrepancy function value obtained by 100-time reverse determination with 0.1% normal distributed random reflectance measurement error at 500 nm

相互独立地注入标准差为反射率测量精度的三分之一、均值为零的正态分布的随机噪声,作为模拟的实测光谱数据,且每次反演计算前都通过随机设置发生器状态,重新注入具有相同分布的不同随机噪声。图 3 给出了 0.1% 的正态分布型反射率测量随机误差下在 500 nm 处 100 次反演得到的折射率和几何厚度以及偏差函数估计值的分布图,其中的不确定度值是根据概率统计中的“ 3σ ”原则,用三倍的标准差来确定的。可以看出,当实测反射率数据中存在随

机误差时,未注入噪声时反演计算得到的薄膜折射率和几何厚度估计值的不确定度分别为0.0082 nm和0.3952 nm,都大于表1中列出的同样大小的系统误差造成的折射率和几何厚度偏差0.0063 nm和0.0086 nm。这意味着,如果不在实测光谱数据中注入随机噪声而直接进行反演,那么实测光谱数据中随机误差的影响将不可忽略,甚至超过系统误差的影响而成为主要因素。而在实测反射率数据中注入独立同分布的随机噪声后,用多次反演计算得到的估计值的统计平均值作为薄膜折射率和几何厚度的估计值,相对真实值的偏差分别为0.0006 nm和0.0269 nm,比未注入噪声时反演得到的估计值更准确地逼近其真实值。同时,根据概率统计理论,独立同分布总体的样本统计平均值的标准差为总体标准差的样本容量的平方根分之一,这样多次反演计算得到的估计值的统计平均值的不确定度相应地为未注入噪声时反演的不确定度的反演次数的平方根分之一,在本例中取1/10,即折射率和几何厚度的不确定度分别为0.0008 nm和0.04 nm,与上面计算的统计均值相对于真实值的偏差大小相一致。根据独立同分布的大数定律,当反演次数足够大时,该统计平均值依概率收敛于薄膜的真实光学参数,其不确定度趋于零,完全消除了随机误差的影响。在这一意义上,光谱测量数据中的随机误差对薄膜光学参数测量的影响是非本质的,可以完全消除。实际应

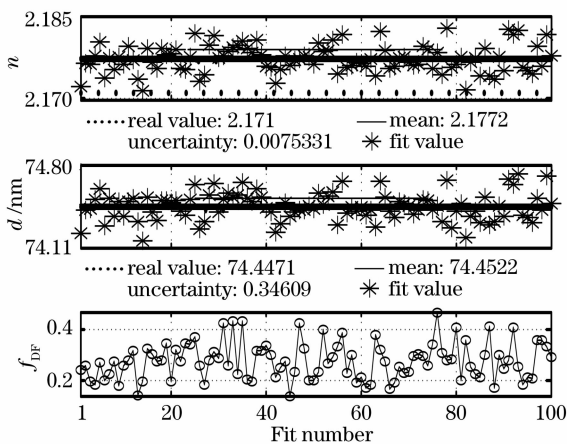


图4 500 nm处在0.1%的正向反射率测量系统误差和0.1%的正态分布型随机误差下100次反演计算得到的薄膜折射率、几何厚度和偏差函数值的分布

Fig. 4 Distribution of refractive index, thickness and discrepancy function value obtained by 100-time reverse determination with 0.1% positive systematic reflectance measurement error and 0.1% normal distributed random error at 500 nm

用时反演次数不用非常大,只要随机误差引起的不确定度远小于系统误差引起的偏差,就可以忽略其影响。

最后,图4给出了0.1%的正向反射率测量系统误差和相同大小的正态分布随机误差共同存在时的模拟结果。可以看出,图4与图2,3吻合得很好。统计均值相对薄膜的真实光学参数的偏差仅是由残余的难以分离的系统误差造成的,未注入噪声时反演的不确定度仅由随机误差决定,注入噪声后得到的统计均值的不确定度为未注入噪声时的不确定度的反演次数的平方根分之一,随着反演次数的增大而趋于零,大大地减小了光谱测量数据中随机误差对薄膜光学参数反演测量的影响。值得一提的是,模拟时采用的是反射率,实际上本文结论对透射率完全适用,更为有利的是现有光谱测量仪器的透射率测量精度都高于反射率测量精度,这就为更准确地测量薄膜的光学参数创造了有利条件。

5 结 论

基于对光谱测量数据中系统误差和随机误差的不同特性分析,提出了两种方法来分别减小其对薄膜光学参数反演测量精度的影响。方法一是利用薄膜光谱系数关于薄膜光学参数的一阶偏导数信息筛选数据点,选取偏导数符号相反的波段或入射角区域作为最佳测量数据点采集区域,以最小化系统误差引起的薄膜光学参数相对真实值的偏差大小。方法二是在实测光谱数据中注入独立同分布的随机噪声,利用基于偏差函数最小化方法的混合优化算法多次进行反演计算,将每次反演得到的薄膜光学参数估计值的统计均值作为薄膜真实光学参数的估计值,并能定量给出未注入噪声时反演的不确定度值。该统计均值比未注入噪声时反演得到的估计值更准确地逼近薄膜的真实光学参数,其不确定度为未注入噪声时反演的不确定度的反演次数的平方根分之一。随着反演次数的增大,该统计均值依概率收敛于薄膜的真实的光学参数,且其不确定度趋于零。这两种方法不仅在提高薄膜光学参数测量精度上具有明显的实用价值,而且物理意义明确,可操作性强,不局限于特定波段和特定材料的薄膜光学参数测量,具有良好的普适性,可望在薄膜光学参数的准确测量技术中发挥重要作用。

参 考 文 献

- determination optical constants of a weakly absorbing thin film [J]. *Appl. Opt.*, 1997, **36**(25): 6325~6328
- 2 R. Swanepoel. Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon[J]. *J. Phys. E*, 1983, **16**: 1214~1222
- 3 Wang Yanzhi, Zhang Weili, Fan Zhengxiu *et al.*. Analysis for accurately fitting the refractive index of SiO₂ thin film [J]. *Chinese J. Lasers*, 2008, **35**(5): 760~763
王胭脂, 张伟丽, 范正修 等. SiO₂ 薄膜折射率的准确拟合分析 [J]. *中国激光*, 2008, **35**(5): 760~763
- 4 Gu, Peifu, Chen Haixing, Ai Manling *et al.*. Determination of the extinction coefficient of TiO₂ and effect of preparation parameters[J]. *Acta Optica Sinica*, 2005, **25**(7): 1005~1008
顾培夫, 陈海星, 艾曼灵 等. TiO₂ 膜消光系数的确定及制备参量的影响 [J]. *光学学报*, 2005, **25**(7): 1005~1008
- 5 J. A. Dobrowski, F. C. Ho, A. Waldorf. Determination of optical constants of thin film coating materials based on inverse synthesis[J]. *Appl. Opt.*, 1983, **22**: 3191~3200
- 6 D. P. Arndt, R. M. A. Azzam, J. M. Bennett *et al.*. Multiple determination of the optical constants of thin-film coating materials[J]. *Appl. Opt.*, 1984, **23**: 3571~3596
- 7 A. B. Djuricic, J. M. Elazar, A. D. Ratic. Simulated-annealing-based genetic algorithm for modeling the optical constants of solids[J]. *Appl. Opt.*, 1997, **36**(28): 7097~7103
- 8 J. S. Parramon, J. F. Borrull, Salvador Bosch *et al.*. Use of information on the manufacture of samples for the optical characterization of multilayers through a global optimization[J]. *Appl. Opt.*, 2003, **42**(7): 1325~1328
- 9 W. P. Chen, J. M. Chen. Use of surface plasma waves for determination of the thickness and optical constants of thin metallic films[J]. *J. Opt. Soc. Am.*, 1981, **71**: 189~191
- 10 F. Abeles. Methods for determining optical parameters of thin films[C]. *Progress in Optics* ed by E. Wolf, 1963. 251~288
- 11 R. Ulrich, K. Torge. Measurements of thin film parameter with a prism coupler[J]. *Appl. Opt.*, 1973, **12**: 2901~2908
- 12 Julien Cardin, Dominique Leduc. Determination of refractive index, thickness, and the optical losses of thin films from prism-film coupling measurements [J]. *Appl. Opt.*, 2008, **47**(7): 894~900
- 13 G. P. de Lariviere, J. M. Frigerio, J. Rivory *et al.*. Estimate of the degree of inhomogeneity of the refractive index of dielectric films from spectroscopic ellipsometry [J]. *Appl. Opt.*, 1992, **31**: 6056~6061
- 14 P. Chindaudom, K. Vedam. Characterization of inhomogeneous transparent substrates by spectroscopic ellipsometry; refractive indices $n(\lambda)$ of some fluoride-coating materials [J]. *Appl. Opt.*, 1994, **33**: 2664~2671
- 15 J. P. Borgogno, P. Bousquet, F. Flory *et al.*. Inhomogeneity in films; limitation of the accuracy of optical monitoring of thin films [J]. *Appl. Opt.*, 1981, **20**: 90~94
- 16 J. P. Borgogno, P. Bousquet, E. Pelletier. Automatic determination of optical constants of inhomogeneous thin films [J]. *Appl. Opt.*, 1982, **21**: 4020~4029
- 17 J. P. Borgogno, F. Flory, P. Roche *et al.*. Refractive index and inhomogeneity of thin films [J]. *Appl. Opt.*, 1984, **23**: 3567~3570
- 18 A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov, M. A. Kokarev *et al.*. Effect of systematic errors in spectral photometric data on the accuracy of determination of optical parameters of dielectric thin films [J]. *Appl. Opt.*, 2002, **41**(19): 2555~2560
- 19 J. M. del Pozo, L. Diaz. Method for the determination of optical constants of thin films; dependence on experimental uncertainties [J]. *Appl. Opt.*, 1992, **31**(22): 4474~4481
- 20 I. Konstantinov, T. Babeva, S. Kitova. Analysis of errors in the thin-film optical parameters derived from spectrophotometric measurements at normal light incidence [J]. *Appl. Opt.*, 1998, **37**(19): 4260~4267
- 21 Wu Suyong. Application of genetic algorithm in the design of optical coatings [D]. Changsha: National University of Defense Technology, 2007. 16~32
吴素勇. 遗传算法在膜系设计中的应用 [D]. 长沙: 国防科技大学, 2007. 16~32
- 22 Sh. Furman, A. V. Tikhonravov. Basics of Optics of Multilayer Systems [M]. France: Editions Frontieres, 1992. 58~64