

# 宽光谱膜厚监控系统的评价函数修正技术

尚小燕<sup>1</sup> 韩军<sup>1</sup> 姜旭<sup>2</sup>

(<sup>1</sup> 西安工业大学光电工程学院, 陕西 西安 710032)

<sup>2</sup> 西安应用光学研究所, 陕西 西安 710065

**摘要** 基于评价函数的宽光谱膜厚监控系统, 由于实测光谱曲线和理论光谱曲线相背离, 使得评价函数发散, 监控失败。利用实测的膜层透射率光谱曲线, 对于已镀层, 利用模拟退火算法实时拟合其实际的光学常数, 据此修正目标透射率曲线, 并补偿吸收的影响, 重新设计膜层数及预镀层厚度, 获得新的评价函数, 如此对评价函数进行逐层修正。实验结果表明, 薄膜厚度监控误差可以达到  $10^{-2}$  以下, 精度完全可以满足实际要求。

**关键词** 薄膜; 膜厚监控; 评价函数修正; 模拟退火算法; 逐层吸收补偿

**中图分类号** TP39      **文献标识码** A      **doi**: 10.3788/LOP49.023101

## Merit Function Correction Technology of Thin-Film Thickness Wideband Monitoring System

Shang Xiaoyan<sup>1</sup> Han Jun<sup>1</sup> Jiang Xu<sup>2</sup>

(<sup>1</sup> School of Optoelectronic Engineering, Xi'an Technological University, Xi'an, Shaanxi 710032, China)

<sup>2</sup> Xi'an Institute of Applied Optics, Xi'an, Shaanxi 710065, China

**Abstract** In thin-film thickness wideband monitoring system based on merit function, because the measured spectrum curve deviates from the designed one, the merit function becomes divergence, which results in the failure of monitoring. Utilizing the thin-film transmittance spectrum curve measured, for the thin-film layer which has been deposited, its actual optical constants are fitted in real-time by simulated annealing algorithm to correct the merit function. Then the absorption effect of layers having been deposited on the layers to be deposited is compensated, and the layer number and thickness of the layers to be deposited are redesigned. The new merit function is achieved, by correction layer by layer. Experimental results show that the monitoring error of thin-film thickness may be less than  $10^{-2}$ , and the precision satisfies the practical requirement.

**Key words** thin films; thin-film thickness monitoring; merit function correction; simulated annealing algorithm; absorption compensation layer by layer

**OCIS codes** 310.1860; 120.4530; 310.0310; 310.6845

## 1 引言

光学薄膜的光学特性与其每一层的厚度密切相关。为了镀制符合要求的光学薄膜, 在制备过程中必须监控膜厚。随着光学薄膜复杂性和精度要求的不断提高, 过去的监控方法已经无法满足要求。近年来, 一种直观易用的监控技术——宽带监控技术逐步成熟并得到应用<sup>[1~3]</sup>。宽带监控技术是利用实测的宽光谱扫描曲线与理论计算的目标光谱曲线进行实时比较, 以评价函数为最小值的一种膜厚监控方法。但由于理论计算的光谱曲线没有考虑色散和吸收的影响, 或者是由于薄膜性能严重依赖蒸镀工艺环境条件, 使用的理论光学常数与实际光学常数存在较大差异, 最终使实测光谱曲线和理论光谱曲线相背离, 评价函数发散<sup>[4~6]</sup>。本文采用模拟退火算法实时拟合所镀膜层的光学常数, 并据此补偿吸收的影响, 不断修正目标透射率及下一层的目标透射率, 设定其光学厚度, 避免前面各层误差的积累, 从而提高膜厚监控精度。

**收稿日期**: 2011-08-08; **收到修改稿日期**: 2011-09-28; **网络出版日期**: 2011-12-23

**作者简介**: 尚小燕 (1978—), 女, 硕士, 讲师, 主要从事薄膜测控方面的研究。E-mail: shaxiayan@126.com

## 2 基于评价函数的监控系统

宽带膜厚监控系统结构如图 1 所示,从光源发出的复色光经过斩波器调制后进入真空室照射到监控样片上,透过监控样片的光从真空室出射,经导光光纤从光纤光谱仪的狭缝入射到固定光栅,经光栅衍射后的光谱,按波长由小到大(或由大到小)的顺序沿垂直于狭缝的方向分开,并聚焦入射到 CCD 探测面上。CCD 采集到各光谱谱线对应的光强通过 CCD 驱动电路和模/数(A/D)转换电路后输入计算机。计算机监控程序对实测光谱光强数据进行处理,通过评价函数实时控制膜层的厚度。当评价函数达到极小值时,由计算机发出控制信号给控制系统,驱动挡板关闭,蒸镀结束。评价函数模型基于以下原理建立。

在膜层所要求的光谱范围内,理论设计时就能获得该层薄膜在各波长处的透射率  $T_i(\lambda, nd)$ 。在实际镀制时,利用宽带监控装置,检测出膜层在沉积过程中在各波长处的实际透射率  $T_i(\lambda, n_i d_i)$ ,两者之差在要求波长范围内的积分即为评价函数,其表达式为

$$F_i = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} |T_i(\lambda, n_i d_i) - T_i(\lambda, nd)| d\lambda, \quad (1)$$

式中  $i$  为膜层序数,  $\lambda$  为检测波长,  $nd$  为膜层理论厚度,  $n_i d_i$  为膜层实际厚度。由(1)式可以看出,当  $F_i$  趋于最小时,实际膜层厚度  $n_i d_i$  接近理论厚度  $nd$ ,这时蒸镀可以结束。

在计算评价函数时,可采取一些合理的简化:

$$F_i = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \left| \tau_i(\lambda) - \frac{\varphi_i(\lambda)}{\varphi_0(\lambda)} \right| d\lambda. \quad (2)$$

用(2)式取代(1)式,式中  $\tau_i(\lambda)$  是淀积每层膜前计算出的相对透射率,  $\varphi_0(\lambda)$ ,  $\varphi_i(\lambda)$  分别是沉积前和沉积时的透射光能量<sup>[7]</sup>。由于大部分膜系的光谱特性在 2~3 nm 厚度范围内不会发生跃变,且一般对薄膜光学特性在某些特定波段或某几个特定波长的要求较高,而对其他部分不太关心,因此,在要求的光谱范围内取  $k$  个点,将(2)式进一步改进为

$$F_i = \sum_{j=1}^k \left| \tau_i(\lambda_j) - \frac{\varphi_i(\lambda_j)}{\varphi_0(\lambda_j)} \right| \omega_j, \quad (3)$$

式中  $\omega_j$  是权重因子。这样就可控制前确定所选的波长点,并将其权重因子值和沉积前透射的光能值及  $\tau_i$  存入计算机,在控制过程中根据接收到的光能量计算评价函数做出判断,并反馈判断结果以进行监控。

## 3 实时修正评价函数的工作流程

将光谱仪输出信号送入计算机,求出实际透射率,并判断评价函数达到极小值时,停止镀制过程;否则,基于实际透射率拟合所镀膜层的实际光学常数,修正目标透射率,然后继续采集、判断。上述过程不断循环,直至评价函数达到极小值<sup>[5,8]</sup>。在进行下一层镀制前,以膜系要求的光谱特性曲线为目标,利用拟合出的膜层实际光学常数,重新设计预镀层的膜系结构,使得理论设计与实际进一步达到一致<sup>[9]</sup>。改变其膜层数和光学厚度,消除每层膜的吸收影响,并将新的设计值作为目标透射率曲线进行镀膜。采用这样逐层修正膜系的评价函数,完成整个镀膜过程。系统工作流程如图 2 所示。对于每层膜吸收的补偿,思路是当镀完第一层膜时,求得其吸收率;当要镀第二层时,可由第一层产生的吸收率去校正镀第二层的理论透射率,这样就补偿了由于第一层的吸收造成的误差。依次在镀完以后每层膜时,都及时求出吸收率去补偿下一层的理论透射率,该方法的具体内容在已发表论文中有详细阐述<sup>[10]</sup>。对于已镀层的实际折射率  $n$  与膜厚  $d$  的确定,基于已镀膜层的实测透射光谱曲线,通过模拟退化算法进行拟合<sup>[11,12]</sup>。

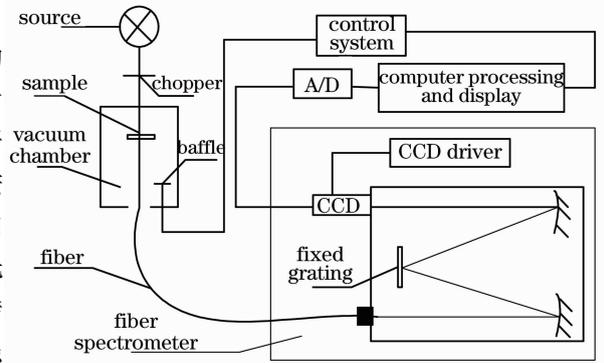


图 1 宽带膜厚监控系统结构示意图

Fig. 1 Schematic diagram of thin-film thickness wideband monitoring system

### 3.1 拟合原理

以实测透射光谱曲线为目标,预先确定其各个波长点处的光学常数与厚度,通过透射率数学模型进行拟合,当拟合曲线与实测曲线之差达到最小时,认为已确定的光学常数与厚度即为所求薄膜参数。在宽带膜厚监控系统中,监控光垂直于基片表面入射,因此对透射率的计算考虑的是入射光垂直的情况。对于单层膜,透射率数学模型为<sup>[11]</sup>

$$T = \frac{4n_0 N_g}{(n_0 \mathbf{B} + \mathbf{C})(n_0 \mathbf{B} + \mathbf{C})^*} \frac{(1 - R_2) A_s}{1 - R_1 R_2 A_s^2}, \quad (4)$$

式中  $n_0$  为空气折射率,  $N_g$  为基底复折射率,  $R_1$  为基底的等效上表面反射率,  $R_2$  为基底的等效下表面反射率,  $A_s$  为基底的吸收系数,  $\mathbf{B}, \mathbf{C}$  由矩阵

$$\begin{bmatrix} \mathbf{B} \\ \mathbf{C} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta_1 & \frac{i}{N_1} \sin \delta_1 \\ i N_1 \sin \delta_1 & \cos \delta_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ N_g \end{bmatrix}$$

可得,其中  $\delta_1 = 2\pi N_1 d_1 / \lambda$  为单层膜相位厚度,  $N_1 = n_1 + ik_1$  为单层膜复折射率。对于多层膜,该数学模型中的  $\mathbf{B}, \mathbf{C}$  变为

$$\begin{bmatrix} \mathbf{B} \\ \mathbf{C} \end{bmatrix} = \left\{ \prod_{j=1}^m \begin{bmatrix} \cos \delta_j & \frac{i}{N_j} \sin \delta_j \\ i N_j \sin \delta_j & \cos \delta_j \end{bmatrix} \right\} \begin{bmatrix} 1 \\ N_g \end{bmatrix},$$

$\delta_j = 2\pi N_j d_j / \lambda$  为第  $j$  层膜的相位厚度,  $N_j = n_j + ik_j$  为第  $j$  层膜的复折射率。由数学模型得,透射率  $T(n, k, d)$  是薄膜光学常数  $n, k, d$  的函数,且该函数为隐函数,难以显化,因而必须选取合适的计算方法,才能达到求解的目的。具体求解过程是,在透射光谱曲线上选取三个波长值及对应点处透射率值,建立方程组

$$\begin{cases} T_1 = T(n, k, d, \lambda_1) \\ T_2 = T(n, k, d, \lambda_2) \\ T_3 = T(n, k, d, \lambda_3) \end{cases} \quad (5)$$

于是,问题归结为求解非线性方程组。式中  $n$  为折射率,  $d$  为膜层厚度,  $k$  为消光系数。

首先要定义一个合适的目标函数来判别所尝试的近似解是否最佳近似解。这里采用普遍使用的最小二乘法对尝试的计算值和实际测量值之间的接近程度进行判断,目标函数设为<sup>[13]</sup>

$$\Delta = \sum_{i=1}^m [T_d(\lambda_i, n, k, d) - T_{m_i}]^2, \quad (6)$$

式中  $T_d(\lambda, n, k, d)$  与  $T_m$  分别表示尝试计算的透射率值和实际测量透射率值。 $m$  为光谱范围内采样光谱点个数,  $\Delta$  越小,就说明尝试的计算值越接近实际测量值,于是问题就归结为求目标函数  $\Delta$  的最小值。评价函数的最小值问题是一个非常复杂的全局优化问题,模拟退火算法具有较强的全局域内搜索能力,能够保证反演结果基本上是最优解<sup>[14]</sup>。

### 3.2 拟合步骤

具体拟合步骤如下。

1) 首先设定初始退火温度  $t_0 = 10000$ , 退火次数  $f = 0$ , 给出  $n, k, d$  的初始解,均介于薄膜光学常数可能的最大值和最小值之间,  $d$  根据实际需要由用户自定义。并根据目标函数[(6)式]计算初始的目标函数值

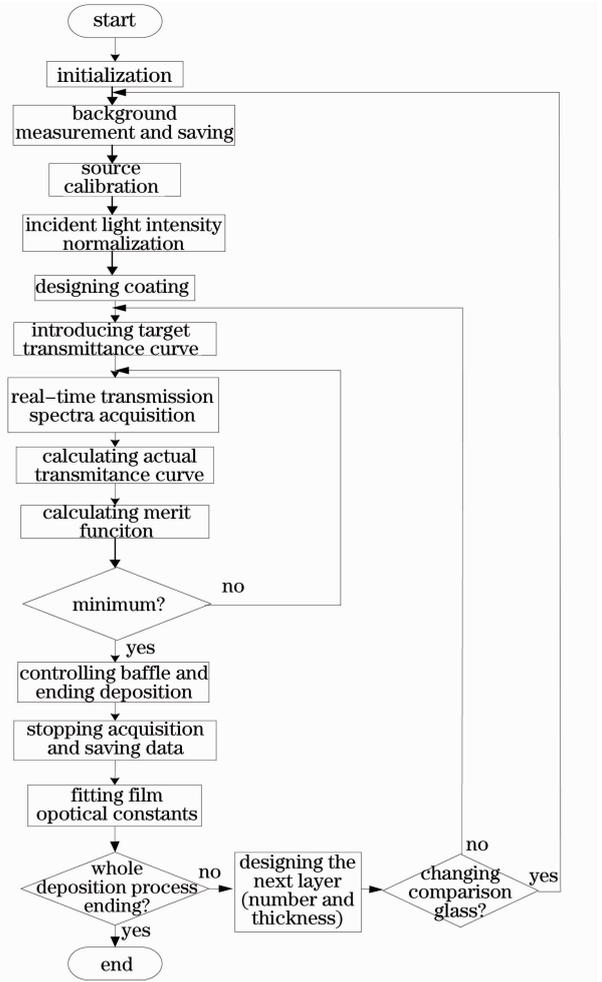


图2 系统工作流程图

Fig. 2 Working flow chart of the system

$\Delta_0(n_0, k_0, d_0)$ 。

2) 产生新解。生成新解可根据公式

$$X_{j+1} = X_j + q_r \times (X_{\max} - X_{\min}), \quad (7)$$

式中  $X$  表示一组  $(n, k, d)$  中的任一参数,  $X_j$  表示当前解,  $X_{j+1}$  表示新解,  $q_r$  是为  $[0, 1]$  区间内的均匀分布随机数,  $X_{\max}, X_{\min}$  分别为参数的最大值和最小值。产生的新解必须位于参数规定的范围之内。如果不满足条件, 则重新生成, 直到满足为止。

3) 计算新解对应的目标函数值  $\Delta$ , 得到  $\delta\Delta = \Delta - \Delta_0$ 。

4) 判断是否接受。若  $\delta\Delta < 0$ , 则新解被接受; 若  $\delta\Delta > 0$ , 则新解按概率  $P = \exp(-\delta\Delta/t)$  进行接受,  $t$  为温度<sup>[15]</sup>。当新解被接受时, 置新解为初始值,  $\Delta_0 = \Delta$ 。

5) 在温度  $t$  下, 重复步骤 2) ~ 4), 当循环达到 Markov 链链长时或当连续多次目标函数值不变时, 结束循环<sup>[16]</sup>。

6) 缓慢地降低温度  $t$ 。

7) 重复步骤 5), 6), 当温度足够低、满足收敛条件时, 算法终止<sup>[17]</sup>。

8) 输出最后的解, 即为系统最优解。

### 3.3 拟合实验

通过拟合步骤, 利用南光机器厂的 ZZS700-1/G 箱式光学镀膜机, 在石英玻璃基底上镀制 ZnS 单层膜, 拟合透射率曲线与实测曲线对比如图 3 所示。并采用椭偏仪对此薄膜的参数进行测量, 测量结果如表 1 所示。表中下标 ell 和 fit 分别表示椭偏仪测量值和算法拟合得到的值, 下标中的 600 表示对应的入射光波长为 600 nm。对比以上结果可知, 采用模拟退火算法对实测单层膜进行拟合, 能够同时准确地获得薄膜的三个光学常数  $n, k, d$ 。该算法有效可行, 反演精度高。

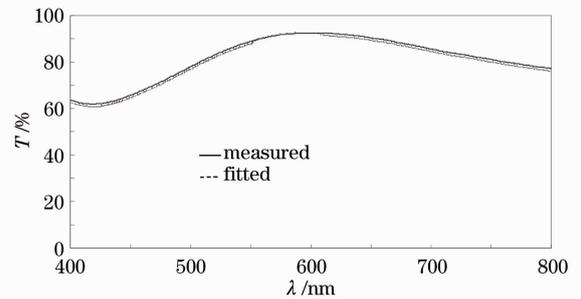


图 3 实测与拟合透射率曲线比较

Fig. 3 Comparison between measured and fitted transmittance curves

表 1 拟合单层 ZnS 薄膜的结果

Table 1 Fitting results of ZnS single layer film

$d_{\text{ell}}$	$d_{\text{fit}}$	$n_{\text{ell}600}$	$n_{\text{fit}600}$	$k_{\text{ell}600}$	$k_{\text{fit}600}$	Target function	Iterations
141.8	142.1326	2.1705	2.1803	0.019608	0.0195	0.005231	1800

有了实际的薄膜光学常数, 就可以根据实际值重新设计预镀膜层的膜系结构。重新设计过程中, 目标所要求的薄膜透射率不能发生变化, 拟合出的膜层光学常数作为修改膜系结构的基础, 其值也不能变化, 可变的是膜层数和每层膜的光学厚度。将此设计值作为目标值进行镀膜, 在镀完每层膜后实时拟合膜层光学常数, 消除每层膜的吸收偏差, 最终完成预镀膜层膜系结构的设计。

## 4 镀膜监控实验及分析

基于上述评价函数的修正方法, 在 K9 玻璃上交替镀制 ZnS 和  $\text{SiO}_2$ 。若不修正评价函数, 评价函数的极小值为 0.0983, 最终的镀制结果如图 4 所示。造成实测曲线和理论曲线偏差的最大原因是实际镀制的薄膜的光学常数与理论光学常数不一致。因此, 采用修正评价函数的方法, 逐层修正膜层的光吸收, 用实际的光学常数代替通用的光学常数, 计算镀制过程中的理论透射率曲线, 评价函数的极小值为 0.0052, 使得实测曲线和理论曲线的吻合程度有很大的提高, 如图 5 所示。薄膜厚度监控误差可以达到  $10^{-2}$  以下, 精度完全可以满足实际要求。

## 5 结论

在宽光谱膜厚监控系统中, 基于实测的透射光谱曲线, 利用模拟退火算法, 实时拟合出已镀膜层的实际折射率  $n$ 、膜层厚度  $d$  和消光系数  $k$ 。然后, 以膜系要求光谱特性曲线为目标, 计算新的目标透射曲线, 并修

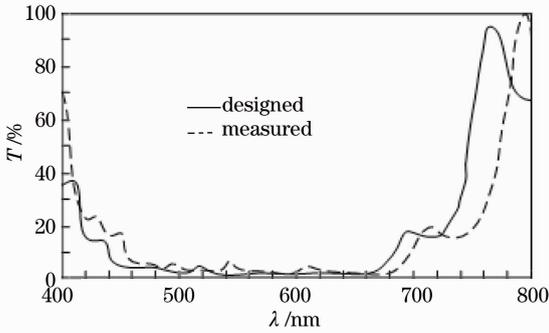


图4 未修正评价函数时实测和理论透射率曲线的比较  
Fig. 4 Comparison between the designed and measured transmittance curves when the merit function is not corrected

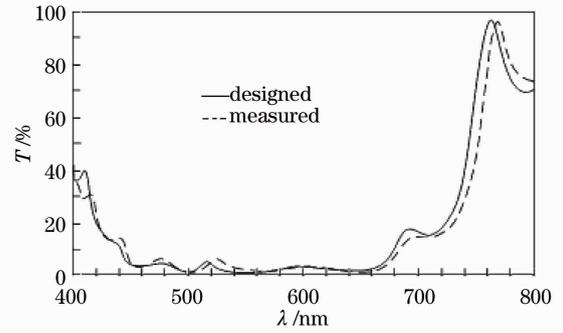


图5 修正评价函数后实测和理论透射率曲线的比较  
Fig. 5 Comparison between the designed and measured transmittance curves after the merit function is corrected

正已镀膜层吸收对预镀层的影响,重新设计预镀层层数与厚度,获得新的评价函数。以修正后的评价函数进行监控,薄膜厚度监控误差可以达到  $10^{-2}$  以下,精度完全可满足实际要求。

### 参 考 文 献

- 1 B. Vidal, A. Fornier, E. Pelletier. Wideband optical monitoring of nonquarterwave multilayer filters[J]. *Appl. Opt.*, 1979, **18**(22): 3851~3856
- 2 Liao Zhenxing, Yang Fang, Xia Wenjian. The progress of optical thin film thickness monitoring[J]. *Laser Journal*, 2004, **25**(4): 10~12  
廖振兴, 杨芳, 夏文建. 光学薄膜膜厚监控方法及其进展[J]. 激光杂志, 2004, **25**(4): 10~12
- 3 Telemark Co. Ltd. Model Om820 *In Situ* Spectroscopic Opticalmonitor User's Guide[R]. Telemark Co., 2000
- 4 Wayne G. Sainty, David W. Sainty. Multiwavelength monitoring of thin filmgrowth using a fiber spectrometer[C]. *SPIE*, 2000, **4094**: 31~37
- 5 Liu Xiaoyuan, Huang Yun, Zhou Ningping *et al.*. The system of the wideband monitoring of optical film thickness[J]. *J. National University of Defense Technology*, 2001, **23**(1): 23~27  
刘晓元, 黄云, 周宁平等. 光学镀膜宽带膜厚监控系统[J]. 国防科技大学学报, 2001, **23**(1): 23~27
- 6 Zhang Cheng, Lu Weiqiang, Wang Yongtian. Autocontrol technology of optical thin-film manufacture based on *in situ* broadband optical monitor [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2004, **33**(9): 1136~1139  
张诚, 卢维强, 王涌天. 基于宽光谱监控的光学薄膜自动控制技术[J]. 光子学报, 2004, **33**(9): 1136~1139
- 7 Zhou Pengfei, Chen Guilian, Zhang Rongfu. Development the instrument of monitoring the thickness of film by wideband spectrum[J]. *Optical Instruments*, 2001, **23**(5-6): 36~40  
周鹏飞, 陈桂莲, 张荣福. 宽光谱膜厚监控仪的研制[J]. 光学仪器, 2001, **23**(5-6): 36~40
- 8 Luo Yuqiang, Ren Hao, Wang Qiaobin *et al.*. A comprehensive monitoring system with wideband spectrum by fiber optic spectrometer[J]. *Vacuum*, 2008, **45**(6): 57~59  
罗宇强, 任豪, 王巧彬等. 基于光纤光谱仪的宽光谱综合监控系统[J]. 真空, 2008, **45**(6): 57~59
- 9 Yu Tianyan, Cheng Xiaochun, Qin Yang *et al.*. Design and manufacture of broadband infrared antireflection coatings for germanium windows[J]. *Acta Optica Sinica*, 2010, **30**(4): 1197~1200  
于天燕, 成效春, 秦杨等. 锗窗口红外宽光谱增透膜的研制[J]. 光学学报, 2010, **30**(4): 1197~1200
- 10 Han Jun, Kong Xiuying, Shang Xiaoyan *et al.*. Absorption coefficient of thin film material affection optical coating wideband monitoring technology[J]. *Optical Technique*, 2005, **31**(5): 672~678  
韩军, 孔秀英, 尚小燕等. 膜料吸收系数对光学膜厚宽带监控的影响[J]. 光学技术, 2005, **31**(5): 672~678
- 11 Yang Shenghong, Yu Zhaoxian, Li Huiqiu *et al.*. Simulated annealing optimization algorithm for inverting ellipsometric spectra[J]. *J. Infrared Millimeter Waves*, 2000, **19**(5): 338~341  
阳生红, 余招贤, 李辉迢等. 模拟退火法在椭偏光谱数值反演中的应用[J]. 红外与毫米波学报, 2000, **19**(5): 338~341
- 12 Liu Xicheng, Wang Zhiheng, Liao Qingjun *et al.*. Determination of optical constants of thin films by means of transmission spectra and simulated annealing algorithm[J]. *Laser Technology*, 2003, **27**(2): 94~96  
刘细成, 王植恒, 廖清君等. 用透射光谱和模拟退火算法确定薄膜光学常数[J]. 激光技术, 2003, **27**(2): 94~96

- 13 Shen Weidong, Liu Xu, Ye Hui *et al.*. A new method for determination of the optical constants and thickness of thin film [J]. *Acta Optica Sinica*, 2004, **24**(7): 885~889  
沈伟东, 刘旭, 叶辉等. 确定薄膜厚度和光学常数的一种新方法[J]. 光学学报, 2004, **24**(7): 885~889
- 14 Zhang Xiaojuan, Qiao Guanjun, Liu Hanchen. Simulated annealing algorithm for multi-layer optical thin films[J]. *Acta Optica Sinica*, 2010, **30**(12): 3660~3664  
张晓娟, 乔冠军, 刘汉臣. 多层光学薄膜模拟退火算法的研究[J]. 光学学报, 2010, **30**(12): 3660~3664
- 15 Guo Maozu, Jiang Junfeng, Li Jingmei. Research on cooling schedule selecting method in simulated annealing algorithm[J]. *Computer Engineering*, 2000, **26**(9): 63~64  
郭茂祖, 姜俊峰, 李静梅. 模拟退火算法中冷却调度选取方法的研究[J]. 计算机工程, 2000, **26**(9): 63~64
- 16 Gao Shang. Research on annealing strategy in simulated annealing algorithm[J]. *Aeronautical Computer Technique*, 2002, **32**(4): 20~22  
高尚. 模拟退火算法中的退火策略研究[J]. 航空计算技术, 2002, **32**(4): 20~22
- 17 Li Jianchao, Su Junhong. Research on stimulated annealing algorithm of film optical constant[J]. *Optica & Optoelectronic Technology*, 2005, **3**(1): 58~60  
李建超, 苏俊宏. 薄膜光学常数的模拟退火算法研究[J]. 光学与光电技术, 2005, **3**(1): 58~60