

分析光学薄膜的椭圆方程的计算方法

范正修 杨本祺

(中国科学院上海光学精密机械研究所)

提 要

叙述了用测量到的椭圆角 ψ 及 Δ 来确定光学薄膜的折射率、厚度和消光系数的方法。该方法收敛较快并节省时间。

一、引 言

椭圆偏光仪可以同时测量光学薄膜的折射率、厚度和消光系数。它的灵敏度高、精度高,对被测样品没有什么严格要求,是一种简便而有效的测量仪器。但是,由椭圆仪测量到的只是椭圆参数,必需通过一定的计算,才能得到光学薄膜的折射率 n 、厚度 d 和消光系数 k 。由于计算较为复杂,因此由椭圆参数求得薄膜参数的计算方法便成为椭圆仪应用中的一个重要问题。国产的几种椭圆仪,都还没有微型计算机(以下简称微机)进行分析和计算,也不附简便的计算程序,只有一个表和几张列线图,然而,不论查表或查列线图,都很难由它给出准确的解,这就使椭圆仪的普遍应用带来困难。用优化法直接进行二维搜索^[1],有可能得到薄膜参数的精确解,但收敛速度往往很慢,这对很多工作来说是不适宜,也是不经济的,为了提高计算速度,国外发展了几种计算方法,大多数限于透明薄膜^[2,3],本文所提出的计算方法,是通过消元运算把二维问题化为一维问题,三维问题化为二维问题,不论对透明薄膜还是对吸收薄膜,都是有效的,使用这种计算方法,可以使计算过程大大加快,对透明薄膜,用 TRS-80 I 型微机进行计算,仅一分钟左右,就可以得到足够精确的解,比用统计试验法快几十倍。

二、原 理

1. 透明薄膜

光束入射到被测薄膜之后,反射光的 p 分量和 s 分量的反射系数分别由下式表示:

$$r_p = \frac{r_{1p} + r_{2p} \exp(-i2\delta)}{1 + r_{1p}r_{2p} \exp(-i2\delta)}, \quad r_s = \frac{r_{1s} + r_{2s} \exp(-i2\delta)}{1 + r_{1s}r_{2s} \exp(-i2\delta)}, \quad (1)$$

式中, r_1 , r_2 分别表示入射介质、折射率为 n_0 与薄膜和薄膜与基体, 折射率为 n_s 的界面反射系数, p , s 分别表示两个偏振分量。

$$\text{令} \quad x = \exp(-i2\delta) = \exp(-i4\pi n d \cos \theta_n / \lambda). \quad (2)$$

n , d 为被测薄膜的折射率和厚度, θ_n 为光束在薄膜内的折射角。

则

$$\operatorname{tg} \psi e^{i\Delta} = \frac{r_p}{r_s} = \frac{(r_{1p} + r_{2p}x)(1 + r_{1s}r_{2s}x)}{(r_{1s} + r_{2s}x)(1 + r_{1p}r_{2p}x)}, \quad (3)$$

式中 ψ 、 Δ 为椭圆参数, 由 (3) 式得

$$(A_1 + iA_2)x^2 + (B_1 + iB_2)x + (C_1 + iC_2) = 0, \quad (4)$$

式中 $A_1 = r_{2p} \cdot r_{1s} \cdot r_{2s} - \operatorname{tg} \psi \cos \Delta \cdot r_{2s} \cdot r_{1p} \cdot r_{2p}$, $A_2 = -r_{2s} \cdot r_{1p} \cdot r_{2p} \cdot \operatorname{tg} \psi \sin \Delta$,

$$B_1 = r_{2p} + r_{1p}r_{1s}r_{2s} - \operatorname{tg} \psi \cos \Delta \cdot (r_{2s} + r_{1s}r_{1p}r_{2p}), \quad B_2 = -(r_{2s} + r_{1s}r_{1p}r_{2p}) \tan \psi \sin \Delta,$$

$$C_1 = r_{1p} - \operatorname{tg} \psi \cos \Delta \cdot r_{1s}, \quad C_2 = -r_{1s} \operatorname{tg} \psi \sin \Delta.$$

如果令

$$\left. \begin{aligned} E_1 &= \left(\frac{D_1}{2} + \frac{1}{2} (D_1^2 + D_2^2)^{1/2} \right)^{1/2}, & E_2 &= \left(-\frac{D_1}{2} + \frac{1}{2} (D_1^2 + D_2^2)^{1/2} \right)^{1/2}, \\ E_3 &= \frac{(E_1 - B_1)A_1 - (E_2 - B_2)A_2}{2(A_1^2 + A_2^2)}, & E_4 &= \frac{A_2(E_1 - B_1) + A_1(E_2 - B_2)}{2(A_1^2 + A_2^2)}, \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

式中 $D_1 = B_1^2 - B_2^2 - 4(A_1C_1 - A_2C_2)$, $D_2 = 2B_1B_2 - 4(A_1C_1 + A_2C_2)$,

解方程 (4) 得

$$x = E_3 + iE_4. \quad (6)$$

因 $x = \exp(-i2\delta) = \cos(-2\delta) + i \sin(-2\delta)$,

则

$$E_3 = \cos(-2\delta), \quad E_4 = \sin(-2\delta). \quad (7)$$

故

$$\cos^2(-2\delta) + \sin^2(-2\delta) = E_3^2 + E_4^2 = 1,$$

即

$$E_3^2 + E_4^2 - 1 = 0. \quad (8)$$

方程 (8) 仅是折射率 n 的函数, 这样, 就把二维问题化为一维问题, 从而大大简化了运算, 由方程 (8) 解出折射率 n 之后, 代入方程 (7) 中, 求出薄膜的几何厚度 d ,

$$d = \cos^{-1}(E_3) \cdot \lambda / 4\pi \cdot r \cdot \cos \theta_n. \quad (9)$$

2. 吸收薄膜

当被测薄膜是吸收膜时, 除了 n 、 d 之外, 还要求出消光系数 k 。由于膜层内 k 不能忽略, 所以界面反射系数有比较复杂的形式, 即变为复数, 即

$$r_{1p} = p_1 + ip'_1, \quad r_{2p} = p_2 + ip'_2, \quad r_{1s} = s_1 + is'_1, \quad r_{2s} = s_2 + is'_2. \quad (10)$$

其具体表达式见文献 [5]

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda} (n - ik) d \cos \hat{\theta}_n, \quad (11)$$

其中 $\hat{\theta}_n$ 为复折射角, 令 $\cos \hat{\theta}_n = A + iB$ 则

$$\begin{aligned} \delta &= \frac{2\pi}{\lambda} (n - ik) (A + iB) d \\ &= \frac{2\pi}{\lambda} [(nA + kB) + i(nB - kA)] d = \delta_1 + i\delta_2. \end{aligned} \quad (12)$$

令 $x_1 = \exp[-i2(\delta_1 + i\delta_2)]$, 这时椭圆方程又如 (3) 式, 不过方程中的参数, 分别为 (10) 至 (12) 式之值。求解 x_1 , 并得到

$$x_1 = E_{13} + iE_{14}. \quad (13)$$

因为椭圆方程只能确定两个未知数, 为了测定薄膜的 n 、 d 、 k , 故必须建立另一个椭圆方

程,并由它解出 x_2

$$x_2 = E_{23} + iE_{24} \quad (14)$$

由(12)式可知, δ 是被测薄膜的 n 、 d 、 k 的函数,若入射角不变,则 δ 是会改变的,即 $x_1 = x_2$, 即

$$E_{13} = E_{23}, \quad E_{14} = E_{24} \quad (15)$$

于是在方程(15)中,只有未知数 n 和 k 。若令评价函数

$$F = E_{13} - E_{23} + E_{14} - E_{24}, \quad (16)$$

可以求得 n 、 k 之值。

通过以上运算,利用求解 x 的方法,消去了未知数 d ,从而把三维问题变成了二维问题,同样简化了运算。

如果第二次测量时入射角发生了变化,消元过程同样也是有效的,就是计算稍为复杂一些。

为了二次测量时不改变入射角,选用文献[4]提出的方法,把正反二面各测一次,用改变入射介质来得到另一个椭圆方程。

由椭圆参数计算光学薄膜的参数,可以在微机上进行,计算程序见附录 I、II 的框图。

三、计算实例

测量是在北京第四光学仪器厂生产的 TP-77 型椭圆偏光仪上进行的,测量到的椭圆参数。由 TRS-80 I 型微机进行计算,语言为 Basic II,被测样品是常用的几种薄膜材料:如 TiO_2 , SiO_2 , ZrO_2 和 MgF_2 ,计算时折射率的精度选为 0.001,一分钟左右便可以输出计算结果,具体的数据见表 1,表中 1、2、3 表示在不同日期制备的膜。

表 1 计算结果举例

Table 1 Example of computed result

	TiO_2			SiO_2			ZrO_2			MgF_2		
	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
A_1	14.90	14.78	14.49	8.24	8.42	8.18	4.95	6.16	5.1	12.62	12.80	13.47
P_1	27.79	27.85	27.51	141.09	141.17	141.0	178.0	135.73	2.71	145.64	145.49	144.43
A_2	164.05	114.06	164.6	172.22	172.36	172.28	174.71	175.18	174.46	167.93	167.51	117.15
P_2	117.49	117.57	117.2	50.94	50.9	50.3	87.0	115.60	92	55.72	55.39	54.23
ψ	15.43	15.36	14.95	8.01	8.03	7.95	5.09	5.49	5.22	12.35	12.56	13.16
d	214.72	214.58	215.29	347.97	347.93	348.7	275.0	358.67	265.29	338.64	339.12	341.34
n	2.269	2.264	2.240	1.457	1.456	1.459	1.761	1.761	1.770	1.385	1.383	1.382
d	417.72	420.68	423.44	1801.36	1799.64	1777.58	397.19	549	436.55	1899.65	1882.86	1829.75

注: ZrO_2 膜是在室温下沉积的。

四、讨论

1. 椭圆仪的测量精度,除了与椭圆仪本身的结构参数以及读数精度有关外,还与被测

样品本身的参数有关, 由 $\psi, \Delta \sim n, d$ 列线图可以看出, 对于一定的入射角, 某些 ψ, Δ 区间内, n 的变化是相当剧烈的, 在另一些 ψ, Δ 区间内, n 的变化却非常平坦, 变化平坦的则测量精度高, 变化剧烈的, 测量精度就低, d 的情况也是如此, 为了提高测量精度, 应对测量时的入射角有所选择。

2. 本计算方法, 一般可以得到满意的结果, 但是在列线图中, 折射率急剧变化的那些区域, 则有可能得奇异解, 这不但由于这个区域的测量精度本来就低, 还由于该计算方法需要开方等运算, 而微处理机的计算精度比较低, 以致会造成不可接受的计算误差, 这一点, 在计算时需要注意, 故如上所述, 在用椭圆偏光仪测量薄膜的光学常数时, 应该避开那些使精度降低的区域。

3. 本计算方法甚至用微机也可以较快和较精确的算出结果, 它不仅大大节约了计算时间, 而且对椭偏仪的广泛应用也有一定的作用, 就椭偏仪的制造和改进来说, 有了比较简便的计算程序, 可以把微型计算机附在椭偏仪上, 使之自动进行监控、测试和数据处理。

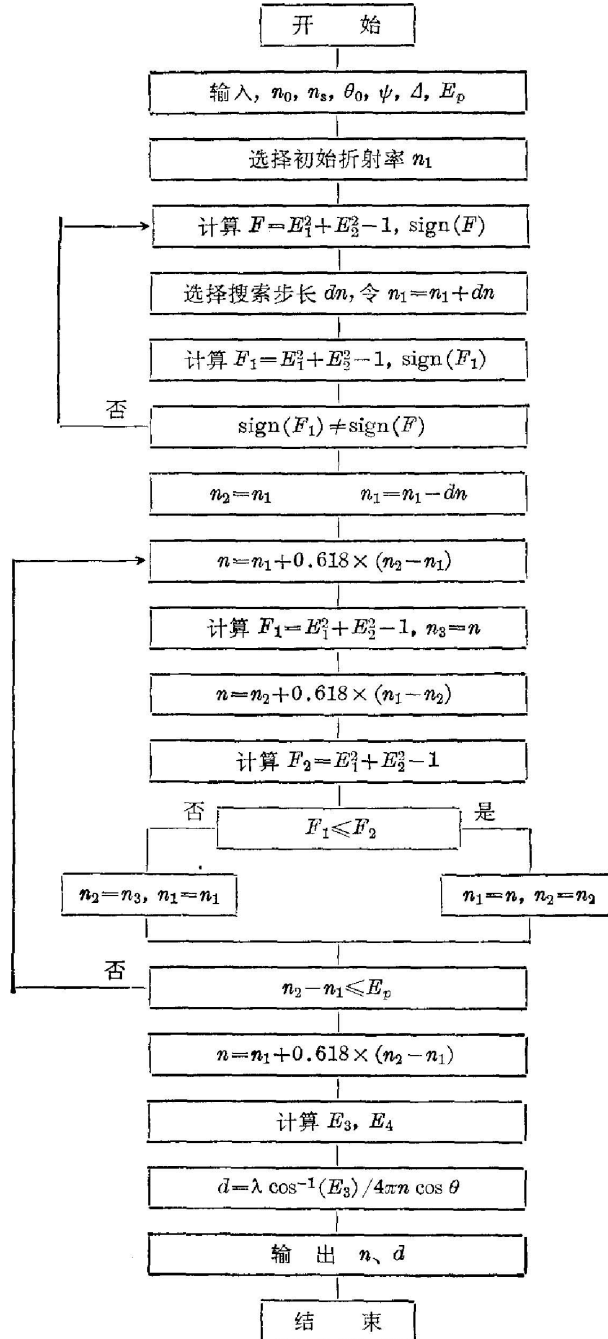
4. 椭偏参数对薄膜折射率的非均匀性也是相当敏感的, 又采用样品的正反面各测一次的办法^[4], 当光由玻璃入射时, 由于光二次通过空气-玻璃界面, 会引起椭圆状态的变化, 本文均未予以计算。

参 考 文 献

- [1] 吴启宏, 唐晋发; 《浙江大学学报》, 1980, No. 4 (11月).
- [2] Yutaka Yotiume; *J. Opt. Soc. Am.*, 1983, **73**, No. 7 (Jul), 888.
- [3] A. R. Reinberg; *Appl. Opt.*, 1982, **11**, No. 5 (May), 1273.
- [4] 吴启宏; 《浙江大学学报》, 1981, No. 4 (11月) 111.
- [5] 范正修; 《激光》, 1981, **8**, No. 8 (Aug), 45.

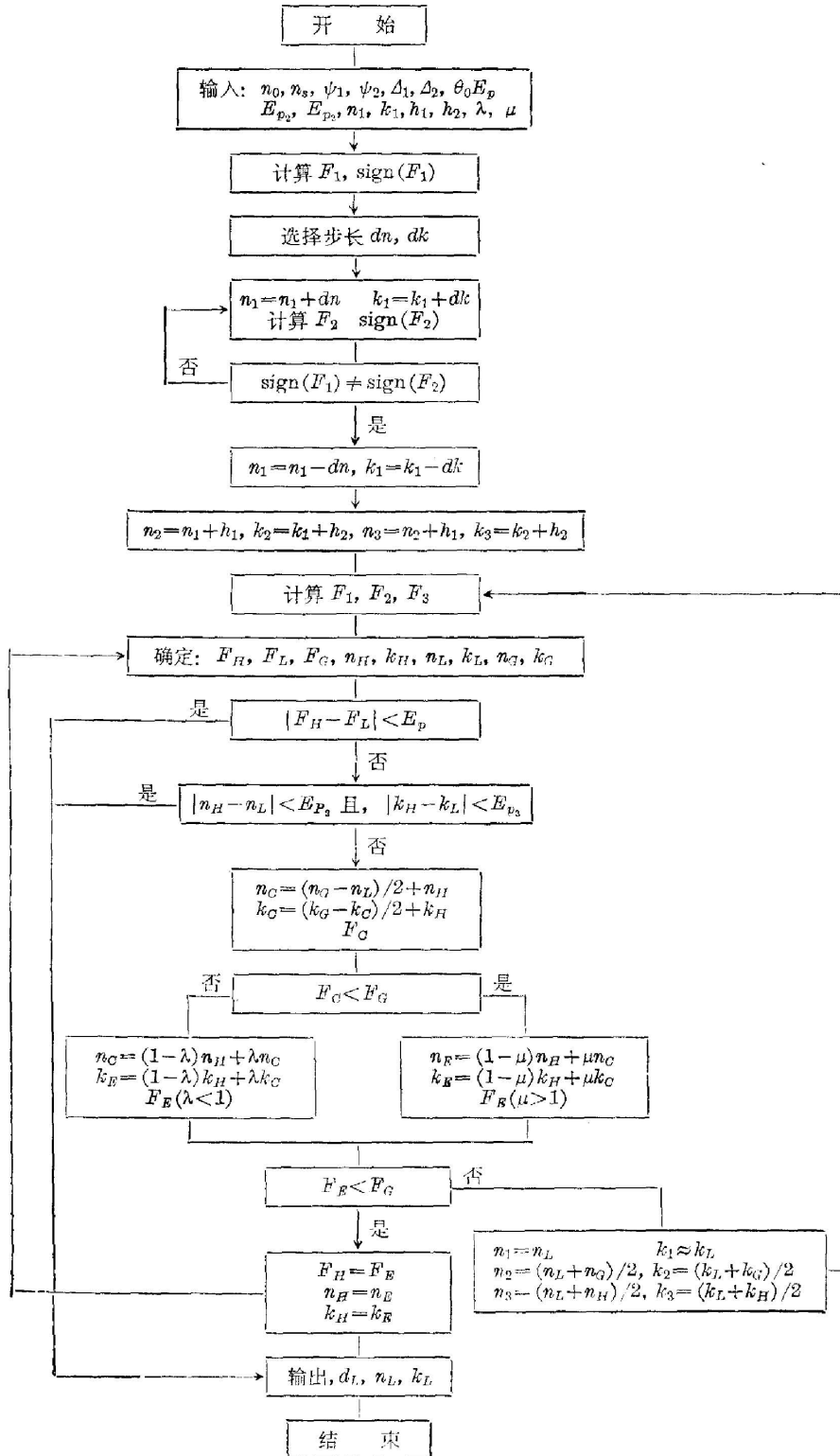
附录 I

计算透明薄膜的折射率和厚度的程序框图



附 录 II

计算吸收薄膜的折射率、厚度及消光系数的程序框图



Computation method for analysing ellipsometric equation of optical thin films

FAN ZHENGXIU AND YANG BENQI

(Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Academia Sinica)

(Received 29 February 1984)

Abstract

A method for determining the refractive index, thickness and extinction coefficient of optical films from measured ellipsometric ψ and Δ is described. This method is founded more convergent and time-saving parameters.

CLEO '85 会议预告

The Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO '85) 将于 1985 年 5 月 21~24 日在美国 Baltimore, Maryland 召开。应 CLEO '85 节目委员会主席 D. H. Auston 和 R. R. Jacobs 的邀请, 我国由中国科学院上海光学精密机械研究所王之江教授为主席、上海复旦大学章志鸣教授、中国科学院大连化学物理研究所张存浩教授和天津南开大学张光寅副教授等组成地区节目委员会, 受理国内投稿。

会议论题的范围

- | | |
|--------------------|---------------------|
| 1. 大气应用; | 9. 非线性光学和非线性光谱学; |
| 2. 工业应用(包括材料加工等); | 10. 光通信(包括纤维光学和光源); |
| 3. 激光化学物理; | 11. 光学信息处理、光开关和双稳态; |
| 4. 激光聚变和激光产生的等离子体; | 12. 光学贮存; |
| 5. 气体激光器; | 13. 超快光学和电子学; |
| 6. 固体和液体激光器; | 14. 光学材料和元件; |
| 7. 医学应用; | 15. 其它。 |
| 8. 激光在微电子学上的应用; | |

国内投稿请寄: 上海市 8211 邮政信箱 王之江教授收

收稿截止日期: 1984 年 12 月 3 日