

基于灵敏度控制的光学薄膜膜系主动设计方法

黄 云 吴素勇 杨开勇

(国防科学技术大学光电科学与工程学院光电工程系, 湖南 长沙 410073)

摘要 基于斜入射薄膜制备实践中镀膜误差对光谱性能的严重退化影响的认识,提出了一种基于灵敏度控制的主动膜系设计方法,深入分析了镀膜中膜层结构参数误差的分布规律,建立了膜系灵敏度的定量计算模型,并在大角度高精度消偏振增透膜的设计实验中验证了灵敏度控制思想在膜系设计中的可行性和有效性。结果表明,这一设计方法不会显著增加程序时间消耗,能获得具有良好可镀制性能的薄膜,可以避免昂贵的失败试镀和采样,缩短新薄膜的生产周期,对于高精度斜入射薄膜的重复性制备具有显著意义。

关键词 薄膜光学;膜系设计;灵敏度控制;大角度膜;遗传算法

中图分类号 O484.4 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201131.0431002

Active Design of Multilayer Optical Coatings Based on Sensitivity Control

Huang Yun Wu Suyong Yang Kaiyong

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

Abstract Deposition errors of oblique incidence optical coatings have a serious degradation influence on their spectral characteristics according to practical preparation experiences. An active multilayer optical coating design method based on sensitivity control is put forward to minimize the above influence. The distribution law of deposited layers' errors of structural parameters is thoroughly analyzed. Calculation model of multilayer optical coating's sensitivity is analytically established. Numerical design experiments in large incident angle non-polarization antireflection coatings are operated to explore and verify the feasibility and effectiveness of sensitivity control thought in films design. And numerical results show that this optical coating design method can obtain films with good manufacture feasibility without extending much program time consumption. Additionally, this design technique can make the planning of manufacture process possible without expensive sampling and make a shortening production cycle for new coating systems. It is of obvious significance for repetitive production of high quality oblique incidence optical coatings.

Key words thin films optics; design of multilayer optical coatings; sensitivity control; films with large incident angle; genetic algorithms

OCIS codes 310.0310; 310.4165; 310.6805

1 引 言

作为现代光学系统的关键元件,光学薄膜有效地支撑和确保了系统和应用的需求。其中高精度的斜入射薄膜是许多精密光学系统必不可少的组件之一。然而,随着入射角的增大,膜层参数误差对斜入射薄膜光谱性能的影响通过有效折射率的作用被放

大,高精度的斜入射膜的重复性制备变得很具有挑战性。在文献[1]中,光刻法制作衍射光栅时所用的5层27°入射的高精度消偏振增透膜的制备困难,是斜入射膜对几何厚度误差特别敏感的有力例子之一。

目前,已镀厚膜层的离子束侵蚀修正^[2],膜系在线表征和再优化^[3~5],产前分析和虚拟镀膜^[6~8]等

收稿日期: 2010-09-24; **收到修改稿日期**: 2010-11-24

作者简介: 黄 云(1970—),男,硕士,副教授,主要从事镀膜和光学检测技术等方面的研究。

E-mail: hyun101@sina.com

技术是高精度薄膜重复制备技术中硬件改善、在线监控软件和离线可镀性模拟分析三个方面代表性的技术进展。现代膜系设计软件使得镀膜工程师能较容易地得到设计问题的具有相似光谱性能的一系列膜系^[9],存在的主要问题是理论膜系的成功实现和重复制备。基于此,本文提出了基于灵敏度控制的膜系设计思想,试图在设计阶段对薄膜的灵敏度和成品率进行最优化控制。

2 膜系误差分布和灵敏度模型

镀膜中出现的膜层参数误差是由许多不同的因素造成的,其量级和分布形式与镀膜设备、沉积技术和监控手段具有很大的相关性。有时,膜系光谱计算模型的不恰当使用也会带来膜层参数在线表征的系统误差,如热蒸法制备的多孔性膜的折射率不均匀性和老化特性以及椭偏监控中的界面粗糙度影响。对于用溅射工艺或离子镀生产的薄膜,因高能量的粒子轰击,其致密性能与块状材料相当,膜系误差主要表现为几何厚度误差,只有在长时间的镀膜情况下因晶振的疲劳或离子能量的降低才会呈现一定的折射率下降效应。而对于物理热蒸发沉积的薄膜,其多孔性的多相微结构导致了在空气中使用时水蒸汽和其他污染的吸附现象,其折射率呈现出老化特性并与镀膜时在线表征的折射率呈现较大的差别和相关性。

不同的监控手段下膜层参数系统和随机误差的表现也各异。对于如石英晶振监控或膜厚时间监控等间接监控方法,膜系折射率和几何厚度误差相互独立且不同层的误差互不相关,其主要来源包括膜材料的不准确校准,镀膜工艺条件参数与校准时的偏离和沉积过程的不稳定性如源的角蒸发特性的随机波动。而对于如极值点监控、最佳波长监控和宽带监控等直接监控方法,膜层参数误差与监控程序相关且互不独立,并会随着层数发生误差累积,其幅值主要由监控算法的灵敏度,膜系计算模型和计算所用的材料光学参数与实际镀制膜层的差别等决定。监控算法的灵敏度主要由监控测量的类型(如光谱系数本身或其对时间和波长的一阶导数或二阶导数或光谱均方偏差的精度)决定,并受沉积过程的稳定性和终止镀膜的准确性影响。

当考虑到镀膜中可能发生的误差时,对理论设计膜系的质量评价不能只停留在尽可能小的设计评价函数值上,而应该侧重考虑最具有可镀性的理论设计。膜系的灵敏度分析可以用来产前估算理论设

计膜系的可制备性能和成品率,并指出镀膜中需要重点监控的膜层。然而,这种产前分析是被动的,滞后性的,可能花费不少努力设计的一系列理论设计膜系的可镀性在可用镀膜环境下都不能实现。为了避免这种情况发生,本文探讨了在设计阶段就对膜系的可镀性进行定量考虑的可行性。膜系对镀膜膜层参数误差的灵敏度,综合评价和模拟了误差对镀膜样品的光谱性能的影响,可以作为膜系可镀性的定量指示。将膜系对可用镀膜环境下误差的灵敏度引入膜系设计进行控制,需要有针对性的进行灵敏度数学建模,以便提高待镀膜在现有镀膜环境的成品率。只有较准确地掌握了可用镀膜环境的误差来源和分布规律,并用于灵敏度模型计算,这种灵敏度控制的理论设计才能产生明显的实用价值。

在目前的膜系设计阶段,使用得最多且最有效的当属基于评价函数最小化的数值优化算法。其中 OptiLayer, Essential Macleod, TFCalc 和 OpenFilters^[10]等商业软件是现代膜系设计软件的杰出代表,其卓越设计能力使得对于给定设计问题能得到一系列满足光谱要求但结构不同的近似等价膜系,为镀膜工程师挑选适合自身镀膜环境的实际最优膜系提供了机会。然而,结合镀膜设备本身具有的误差特性,进行基于灵敏度控制的薄膜实际可镀性的主动优化设计思想却涉及不多。为了实现这种思想,以自制的遗传算法膜系设计软件的开放性源码^[11]为基础,用模拟的膜层参数误差造成的设计评价函数偏差的统计均值表征膜系灵敏度,并与原来设计评价函数相加一起作为新的评价函数进行优化设计。采用的评价函数为容差型评价函数

$$F(n, d) = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L \left[\frac{T(n, d, \lambda_l) - \hat{T}(\lambda_l)}{\Delta T_l} \right]^2, \quad (1)$$

式中 $T(n, d, \lambda_l)$, $\hat{T}(\lambda_l)$ 和 ΔT_l 分别是波点 λ_l 处的理论计算透射率、目标透射率和透射率精度(或允许偏差), n, d 是膜系设计的折射率和几何厚度向量, L 是选取的总波点数划分。这里采用透射率而不用反射率的原因是有助于减小后面即将建立的灵敏度分析模型的运算量,相似的结论在膜系设计快速算法中已经讨论过^[12]。假设膜系折射率和几何厚度误差向量分别为 $\Delta n, \Delta d$, 膜系的透射率光谱就会偏离理论计算光谱,这种偏离程度可以用扰动后的评价函数值 $F(n + \Delta n, d + \Delta d)$ 与 $F(n, d)$ 的差值大小来表征。由于膜层结构参数误差 $\Delta n, \Delta d$ 的分布形式和相关程度与镀膜工艺环境密切相关,其建模模拟要分多种情况,系统误差和随机误差要用不同的模型来

量化。实际中系统误差和随机误差往往杂揉在一起，这就使得扰动后的评价函数 $F(n + \Delta n, d + \Delta d)$ 呈现一定的随机性，直接用其与设计评价函数 $F(n, d)$ 的差值作为膜系灵敏度不太准确。考虑到平均处理是有效降低随机性影响的常用手段，可以用多次加噪后的扰动评价函数偏差的统计均值作为理论设计膜系的灵敏度 $S(n, d)$ ，即

$$S(n, d) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [F_i(n + \Delta n, d + \Delta d)] - F(n, d), \quad (2)$$

式中 $F_i(n + \Delta n, d + \Delta d)$ 为第 i 次对膜系结构参数加

模拟误差后膜系的扰动评价函数值， N 为总次数。

事实上，(2) 式右端中的第一项是扰动评价函数 $F(n + \Delta n, d + \Delta d)$ 总体均值的一个样本估计，其准确程度随着样本容量即总次数的增大而增加。然而，当总次数增大，灵敏度的计算时间也线性增加，这对膜系设计来讲是不利的。因此，必须在准确性和设计时间消耗间做出折衷。特殊地，当 $\Delta n, \Delta d$ 完全随机且相互独立时，可以用零期望的正态分布随机噪声来模拟。具体地，一般镀膜误差相比膜系结构参数为小量，扰动后的评价函数值可以用在理论设计膜系附近的二阶泰勒展开式来高精度近似：

$$F(n + \Delta n, d + \Delta d) = F(n, d) + \sum_{i=1}^m \frac{\partial F}{\partial n_i} \Delta n_i + \sum_{i=1}^m \frac{\partial F}{\partial d_i} \Delta d_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m \left(\frac{\partial^2 F}{\partial n_i \partial n_j} \Delta n_i \Delta n_j + \frac{\partial^2 F}{\partial d_i \partial d_j} \Delta d_i \Delta d_j + 2 \frac{\partial^2 F}{\partial n_i \partial d_j} \Delta n_i \Delta d_j \right), \quad (3)$$

式中 m 为膜层数， $\Delta n = (\Delta n_1, \Delta n_2, \dots, \Delta n_m)$ 为折射率误差向量， $\Delta d = (\Delta d_1, \Delta d_2, \dots, \Delta d_m)$ 为几何厚度误差向量。由(2)式，灵敏度为扰动后的评价函数的总体期望与设计评价函数值的差，由于 $\Delta n, \Delta d$ 之间和内分量都相互独立，根据概率统计原理，则有

$$S(n, d) = \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial^2 F}{\partial n_i^2} \sigma_{n,i}^2 + \frac{\partial^2 F}{\partial d_i^2} \sigma_{d,i}^2 \right), \quad (4)$$

式中 $\sigma_{n,i}$ 和 $\sigma_{d,i}$ 分别是第 i 层膜的折射率误差和几何厚度误差的标准差(或噪声级)， $\partial^2 F / \partial n_i^2$ 和 $\partial^2 F / \partial d_i^2$ 可以用文献[12~14]中建立的膜系光谱系数关于膜层参数的一阶和二阶导数分析模型来准确计算。

需要指出的是，(4)式是在膜层折射率误差和几何厚度误差相互独立且不同层误差互不相关的假设下得到的，这种误差分布对石英晶振监控和膜厚时间监控等间接监控方式下的薄膜制备是典型的。对直接光学监控方式制备的薄膜，其误差分布彼此相关，不能用独立的随机噪声模拟，此时的灵敏度计算不再有如(4)式般的简明形式，引入膜层参数误差分布的相关矩阵可能是推导灵敏度计算的分析模型的可行手段之一^[15]。目前，对于彼此相关的镀膜误差情形，可以用(2)式作为灵敏度计算的近似表达式。

因此，基于灵敏度控制的主动膜系设计的新的评价函数为

$$FF(n, d) = F(n, d) + S(n, d). \quad (5)$$

将(1)式和(2)式或(1)式和(4)式代入(5)式，满足设计目标光谱特性要求并具有低膜系灵敏度的薄膜就可用膜系设计软件优化设计得到。与通常的只

对光谱性能要求进行优化设计的程序相比，采用(4)式计算的灵敏度造成的程序计算时间消耗不会增加多少，从目前的设计经验来看约为原来的2倍^[12]，但却能得到具有良好可镀性的薄膜。这种设计时间的消耗对于高精度薄膜的成功制备是很有意义的，不仅可以避免了昂贵的失败试镀和采样，还有助于缩短新薄膜的生产周期。但当误差分布不再独立，采用(2)式计算的灵敏度的时间开销会变为原来的 N 倍，对于大膜层数的设计可能会相当长，必须在灵敏度的计算准确性和总设计时间中折衷考虑。一个有利的现状是，采用现代高性能的 CPU 技术，可以把设计时间控制在可接受的时间之内。在下一节中，将以一个 45° 入射高精度消偏振增透膜为例，来探讨基于灵敏度控制的膜系设计思想的可行性和有效性。

3 斜入射膜设计实例

在某些光学器件的研制过程中，需要设计一种大角度高精度消偏振增透膜^[16,17]。其主要设计目标和参数为：激光 45° 入射，在 632.8 ± 7 nm 的波长范围，设计理论反射率小于万分之一的消偏振增透膜，入射介质为空气，基底为熔石英(折射率1.457)，可用镀膜材料折射率分别为 2.40 和 1.46。

新评价函数由(1)，(4)和(5)式构成，这与石英晶振监控镀膜环境中的误差分布情形最为吻合，膜层参数误差的标准差都选为自身的千分之五。为了抑制镀膜后可能出现的光谱平移现象影响，设计波

段展宽为 620~650 nm,采取均匀波点划分,间隔为 1 nm,透射率设计精度为万分之一。优化算法的主体是先用基于精英保留策略的遗传算法进行全局寻优,找到全局极小或准极小的附近区域,再用拟牛顿法对遗传设计膜系进行局部精细优化,以克服遗传算法一定程度上的随机性和局部收敛慢的不足,稳定地收敛于全局极小或准极小值^[11,14]。

图 1 是设计得到的一个 16 层的高精度消偏振增透的折射率轮廓及理论光谱,膜系结构为 [S 93.37H 32.76L 13.89H 127.84L 96.99H 141.13L 92.50H 167.30L 118.17H 128.89L 56.16H 86.85L 42.97H 78.66L 52.34H 182.23LA],其中 S 代表基底,A 代表空气,H,L 代表高低折射率层,数字代表相应层的几何厚度,单位 nm。设计光谱评价函数为 0.0047,其平方根为 0.0683,即平均反射率约为十万分之七,灵敏度为 0.4011,总评价函数为 0.4058,亦即当膜层参数发生千分之五的相对误差时,膜系的平均反射率约为万分之六,可以满足实用精度要求。从软件的膜层相对灵敏度分析来看,最敏感层为第 8,9 层,结构中的薄层第 3 层对折射率和几何厚度误差都不敏感,这对于监控是有利的,而较文献[17]中的结果,p 偏振光的膜层相对灵敏度相当,s 偏振光的膜层相对灵敏度得到明显减小。图 2 是在所给标准差下的膜层参数误差影响下 s 和 p 偏振光的理论透射光谱(实线),期望透射光谱(虚线)及其标准差通道(点划线和点线),可以看出,灵

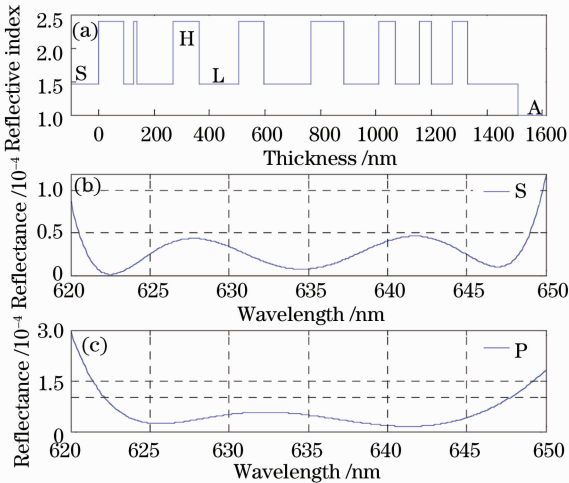


图 1 45°入射的 16 层消偏振增透膜的折射率厚度轮廓 (a),s 偏振光 (b)和 p 偏振光 (c)的剩余反射率

Fig. 1 (a) Refractive index profile, (b) residual reflectance of s-polarization light and (c) p-polarization light of a 16-layer depolarization antireflection coating with incident angle at 45°

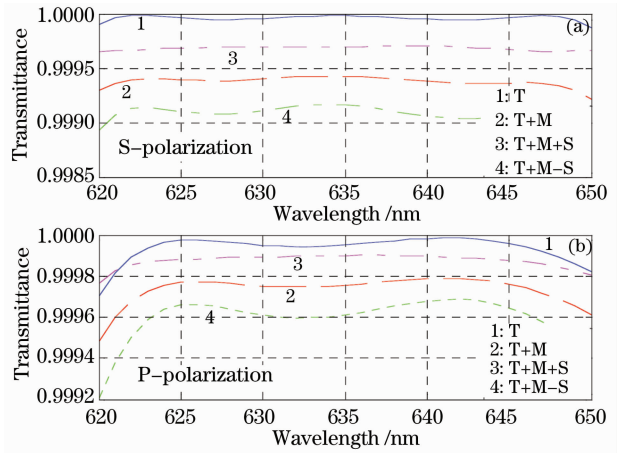


图 2 45°入射的 16 层消偏振增透膜在给定误差级下 s 和 p 偏振光的理论透射率 T,期望率 T+M 及其通道 T+M±S

Fig. 2 Theoretical transmittance T, mathematical expectation transmittance T+M and its corridor T+M±S of the 16-layer depolarization antireflection coating with incident angle at 45° of s and p polarization light with given level errors

敏度控制效果比较理想。

另外,从第 2 节的分析来看,基于灵敏度控制的膜系设计思想,对于正入射薄膜和宽角度入射膜^[18]都同样适用。目前唯一的不足是还不能对相关分布的镀膜误差进行准确建模,采用(2)式计算灵敏度必须在准确度和设计时间中折衷考虑。尽管如此,当采用大标准差的随机误差时,(4)式的分析结果是误差最恶劣情况下影响的评估,能近似为包括所有的相关分布误差的影响在内。也就是说,当镀膜环境误差相关分布时,可以用标准差为数倍于当前环境误差水平的随机误差来近似计算其灵敏度,可以相信,当这种放大的灵敏度得到控制后,真实环境的相关误差影响也能得到大幅削弱。这样,基于(1),(4)和(5)式的灵敏度控制下的膜系设计方法^[19],可以推广用来设计易于重复制备的高质量薄膜。

4 结 论

基于斜入射薄膜制备实践中误差对光谱性能的严重退化的现象的认识,提出了一种主动膜系设计方法在设计阶段就对膜系灵敏度进行优化控制。在详细分析了镀膜环境中的镀膜误差分布情况后,建立了膜系灵敏度的定量计算的分析模型。运用该分析模型,对石英晶振监控镀膜方式下的一个 45°入射高精度消偏振增透膜进行了灵敏度控制优化设计。设计结果表明,灵敏度计算的分析模型不会显

著增加设计程序的时间消耗, 所得的设计结果具有良好的制备性能。而且, 基于灵敏度控制的主动膜系设计思想, 对正入射膜和宽角度入射膜同样适用。此外, 还可以避免昂贵的失败试镀或减少采样次数, 有助于缩短新薄膜的生产周期, 对于高精度薄膜的重复制备具有重要意义。

参 考 文 献

- 1 D. Poitras, J. A. Dobrowolski, T. Cassidy *et al.*. Black layer coatings for the photolithographic manufacture of diffraction gratings[J]. *Appl. Opt.*, 2002, **41**(16): 3306~3311
- 2 D. Poitras, J. A. Dobrowolski, T. Cassidy *et al.*. Ion-beam etching for precise manufacture of optical coatings[J]. *Appl. Opt.*, 2003, **42**(19): 4037~4044
- 3 B. T. Sullivan, J. A. Dobrowolski. Deposition error compensation for optical multilayer coatings theoretical description[J]. *Appl. Opt.*, 1992, **31**(19): 3821~3835
- 4 B. T. Sullivan, G. A. Clarke, T. Akiyama *et al.*. High-rate automated deposition system for the manufacture of complex multilayer coatings[J]. *Appl. Opt.*, 2000, **39**(1): 157~167
- 5 A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov. On-line characterization and reoptimization of optical coatings[C]. *SPIE*, 2004, **5250**: 406~413
- 6 A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov. Automated design and sensitivity analysis of wavelength-division multiplexing filters[J]. *Appl. Opt.*, 2002, **41**(16): 3176~3182
- 7 A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov. Computational manufacturing as a bridge between design and production[J]. *Appl. Opt.*, 2005, **44**(32): 6877~6884
- 8 A. V. Tikhonravov. Virtual deposition plant[C]. *SPIE*, 2005, **5870**: 0D1~0D13
- 9 A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov, T. Amotchkina *et al.*. Key role of the coating total optical thickness in solving design problems[C]. *SPIE*, 2004, **5250**: 312~321
- 10 N. Kaiser, C. J. Stolz. Optical society of America's 2007 topical meeting on optical interference coatings: overview[J]. *Appl. Opt.*, 2008, **47**(13): OIC1~OIC7
- 11 Wu Suyong. Application of Genetic Algorithm in the Design of Optical Coatings[D]. Changsha: National University of Defense Technology, 2007. 43~44
- 吴素勇. 遗传算法在膜系设计中的应用[D]. 长沙: 国际科技大学, 2007. 43~44
- 12 Wu Suyong, Long Xingwu, Yang Kaiyong. Accurate calculation and Matlab based fast realization of merit function's Hesse matrix for the design of multilayer optical coating[J]. *Optoelectronics Letters*, 2009, **5**(5): 359~363
- 13 Wu Suyong, Long Xingwu, Huang Yun *et al.*. Calculation model for spectral coefficient's first and second order partial derivatives of multilayer optical coatings with respect to layer parameters[J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2010, **22**(1): 81~90
- 吴素勇, 龙兴武, 黄云等. 膜系光谱系数对膜层参数的一阶和二阶偏导数的计算模型[J]. *强激光与粒子束*, 2010, **22**(1): 81~90
- 14 Wu Suyong, Long Xingwu, Huang Yun *et al.*. Methods for decreasing optical parameters reverse determination uncertainty of thin films caused by spectral measurement errors[J]. *Chinese J. Lasers*, 2009, **36**(8): 2171~2177
- 吴素勇, 龙兴武, 黄云等. 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的示法[J]. *中国激光*, 2009, **36**(8): 2171~2177
- 15 Sh. Furman, A. V. Tikhonravov. Basics of Optics of Multilayer Systems[M]. France: Editions Frontieres, 1992. 64~68
- 16 Yang Kaiyong, Long Xingwu. Design of high-precision, large-angle incidence, nonpolarization anti-reflection coatings [J]. *Chinese J. Lasers*, 2002, **29**(8): 703~706
- 龙兴武, 杨开勇. 非偏振大角度高精度减反膜的设计[J]. *中国激光*, 2002, **29**(8): 703~706
- 17 Yang Kaiyong. Research of Automatic Optical Coating Software [D]. Changsha: National University of Defense Technology, 2003. 76~81
- 杨开勇. 自动光学镀膜软件的研究 [D]. 长沙: 国防科技大学, 2003. 76~81
- 18 Zheng Zhengrong, Gu Peifu, Chen Haixing *et al.*. Design and preparation of super broadband antireflection coating[J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(7): 2026~2029
- 郑荣, 顾培夫, 陈海星等. 超宽带减反射膜的设计和制备[J]. *光学学报*, 2009, **29**(7): 2026~2029
- 19 Luo Zhenyue, Liu Xu, Shen Weidong *et al.*. Novel design method for initial structure of dispersion compensation filters[J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(9): 2619~2623
- 罗震岳, 刘旭, 沈伟东等. 新型色散补偿薄膜的初始结构设计方法 [J]. *光学学报*, 2009, **29**(9): 2619~2623