

# 计算机辅助检测光学薄膜参数特性的一种方法探讨

胡 君, 齐 钰

(中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 吉林 长春 130021)

**摘要:** 简要的叙述了光学薄膜光学特性的通用计算方法, 即特征矩阵法。采用这种方法的逆运算形式, 应用计算机辅助计算和检测技术, 在国内首次完成对多层光学薄膜镀膜后或制备过程中各膜层光学厚度的检测。同时介绍了有关的计算公式和计算程序流程, 最后给出试验数据结果和结论。

**关键词:** 特征矩阵; 逆运算; 光学薄膜; 光学厚度; 计算机辅助检测

中图分类号: TP391.76 文献标识码: A

## 1 光学薄膜应用特性概述

随着现代科学技术的发展, 光电子技术已被普遍认为是二十一世纪高科技发展的主要方向。在能量光电子产业中所有光学仪器、光学装置都离不开光学干涉薄膜, 可以说光学薄膜已被广泛应用于光电子产业中。

光学的薄膜特性是在薄膜内的干涉效应, 应用光学干涉薄膜可得到各种各样的光学特性, 它可减少表面的反射, 增加元件的透射率; 或者增加表面的反射率, 减少透射率; 或者在一个波段内给出高的反射率(透射率), 低的透射率(反射率), 而在其余的波段则有低的反射率(透射率), 高的透射率(反射率); 也可以使不同的偏振平面有不同的透射、反射特性等等。

在薄膜技术中, 薄膜特性的检测是十分重要的。为获得任何一种预期特性的光学薄膜, 应严格对镀膜前、镀膜中和镀膜后进行必要的测试, 这些测试包括光学性质、光学常数和理化性质, 其中镀膜后和镀膜制备过程中光学薄膜参数的测量是必不可少的, 特别是对于薄膜自动化制备技术中的膜系实时修正和监控尤为重要。所以光学薄膜特性检测是薄膜技术发展中非常重要的内容。

## 2 光学特性的计算方法简介

在一个多层薄膜系统中, 光束将在每个界面上多次反射, 因此, 涉及到大量光束的干涉。由于

直接用多光束干涉的特征计算光学特性非常繁琐和困难, 通常采用单光束计算来确定多层膜系的特性, 即矩阵连乘积的方法。这种方法构成了光学薄膜解析设计的基础。

### 2.1 单层介质膜的反射率矩阵

根据平面电磁波的单一界面的反射和折射原理, 在界面上应用边界条件为:

$$\eta_1 E_1 = \eta_0 E_0^+ - \eta_0 E_0^- = H_0 \quad (1)$$

$$E_1 = E_0^+ + E_0^- = E_0$$

式中  $E$  和  $H$  都是指电场或磁场的切向分量的大小,  $E_0^+$  为入射光波电矢量;  $E_0^-$  为入射光波被多层膜反射的反向电矢量;  $\eta$  为有效导纳。振幅反射系数为  $r = (\eta_0 - \eta_1) / (\eta_0 + \eta_1)$ 。这是入射情形的推广, 可见垂直入射的结果也适用于倾斜入射的情形, 只是在计算 P-分量的反射率时用  $\eta = n / \cos(\theta)$ , 计算 S-分量时用  $\eta = n \cdot \cos(\theta)$  代入, (其中  $\theta$  为入射角,  $n$  为折射率), 然后由  $(R_s + R_p) / 2$  得到自然光合成的反射率。

设膜层和基片组合的导纳是  $Y$ , 由(1)可得  $Y E_0 = H_0$ 。单层膜的反射系数为  $r = (\eta_0 - Y) / (\eta_0 + Y)$  利用边界条件和(1)我们可以推导出组合导纳  $Y$ 。从而得到一个薄膜特征矩阵表达式。即:

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta_i & \frac{i}{\eta_1} \sin \eta_1 \\ i \eta_1 \sin \delta_i & \cos \delta_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_2 \end{bmatrix} \quad (2)$$

其中  $i$  为虚数即  $\sqrt{-1}$ ,  $\delta$  为相位厚度, 即  $\delta_i = 2\pi / \lambda \cdot n_i d_i \cdot \cos \theta_i$ , 对 P-分量  $\eta_1 = n_1 / \cos \theta_1$ , 而

对 S-分量,  $\eta_1 = n_1 d_1 \cdot \cos\theta$ ,  $n_1 d_1$  是膜层的光学厚度。矩阵  $\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix}$  定义为基片和薄膜组合的特征矩阵

$$Y = \frac{C}{B} = \frac{\eta_2 \cos\delta_1 - i\eta_1 \sin\delta_1}{\cos\delta_1 + i(\eta_2/\eta_1) \sin\delta_1} \quad (3)$$

振幅反射系数为:

$$r = \frac{\eta_0 - Y}{\eta_0 + Y} =$$

$$\frac{(\eta_0 - \eta_2) \cos\delta_1 + i(\eta_0 \eta_2 / \eta_1 - \eta_1) \sin\delta_1}{(\eta_0 + \eta_2) \cos\delta_1 + i(\eta_0 \eta_2 / \eta_1 + \eta_1) \sin\delta_1} \quad (4)$$

其能量反射率为:

$$R = r \cdot r^* =$$

$$\frac{(\eta_0 - \eta_2)^2 \cos^2 \delta_1 + (\eta_0 \eta_2 / \eta_1 - \eta_1)^2 \sin^2 \delta_1}{(\eta_0 + \eta_2)^2 \cos^2 \delta_1 + (\eta_0 \eta_2 / \eta_1 + \eta_1)^2 \sin^2 \delta_1} \quad (5)$$

其中  $r^*$  为  $r$  的共轭数。

## 2.2 多层介质膜的反射矩阵

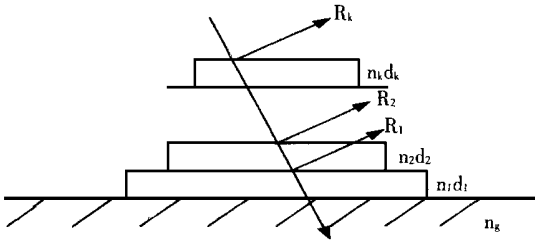


Fig. 1 Schematic flow sheet of multilayer optical thin films reflex and thickness

利用矩阵法可把对单层膜组合导纳的推导推广到任意层膜的情况,如图1所示。正如在上节所涉及到的单层膜特征矩阵一样,我们通过边界条件,经过连续的线性变换可得到多层膜的特征矩阵,根据公式(2),我们可得到多层膜系的特征矩阵表达式为:

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \left\{ \prod_{j=1}^k \begin{bmatrix} \cos\delta_j & \frac{i}{\eta_j} \sin\delta_j \\ i\eta_j \sin\delta_j & \cos\delta_j \end{bmatrix} \right\} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_{k+1} \end{bmatrix} \quad (6)$$

其矩阵形式为:

$$\begin{bmatrix} \cos\delta_j & \frac{i}{\eta_j} \sin\delta_j \\ i\eta_j \sin\delta_j & \cos\delta_j \end{bmatrix} \quad (6.1)$$

其中  $k$  为膜层数,对 P-偏振波和 S-偏振波,膜层的相位厚度公式都是  $\delta_j = 2\pi/\lambda \cdot n_j d_j \cdot \cos\theta$ 。其中折射角  $\theta$  由折射定律所确定。导纳  $\eta$  由下式给出

$$\eta_j = \begin{cases} n_j / \cos\delta_j & \text{P-偏振波} \\ n_j \cdot \cos\delta_j & \text{S-偏振波} \end{cases}$$

显然,多层膜和基片的组合导纳为  $Y = C/B$ 。其反射率为:

$$R =$$

$$\left( \frac{\eta_0 B - C}{\eta_0 B + C} \right) \left( \frac{\eta_0 B - C}{\eta_0 + C} \right)^* = \left( \frac{\eta_0 - Y}{\eta_0 + Y} \right) \left( \frac{\eta_0 - Y}{\eta_0 + Y} \right)^* \quad (7)$$

式中  $\eta_0$  是入射介质的导纳。通过(7)式可计算出任意层膜的反射率。当然,我们也可以通过(6)式,根据透射光束和入射光束的截面积不同,在透射率表达式中需乘上一个常数  $(\cos\theta_i / \cos\theta_0)$  的截面积比例因子而计算出透射率。

## 3 用特征矩阵检测光学薄膜参数特性

目前,由于光学薄膜技术应用比较广泛,对薄膜特性检测方法较多,比较复杂,一般情况是给定薄膜基本参数,计算膜系的反射率或透射率,这里介绍的正相反,是在测得膜层和膜系的反射率或透射率后,应用特征矩阵检测光学薄膜每层膜的相位厚度和光学厚度的方法。

### 3.1 检测算法介绍

根据(6)和(7)式我们可得到如下反射率公式:

$$R = \frac{(\eta_0 - \eta_{k+1})^2 \cos^2 \delta_k + (\eta_0 \eta_{k+1} / \eta_k - \eta_k)^2 \sin^2 \delta_k}{(\eta_0 + \eta_{k+1})^2 \cos^2 \delta_k + (\eta_0 \eta_{k+1} / \eta_k + \eta_k)^2 \sin^2 \delta_k} \quad (8)$$

我们的目的是通过反射率  $R$  计算出每层相位厚度,经过  $k$  次循环最终计算出第  $k$  层的光学厚度  $n_k d_k$  和相位厚度  $\delta_k$ ,即:

$$\delta_k = 2\pi/\lambda \cdot n_k d_k \cdot \cos\theta \quad (9)$$

由于(9)式中的波长  $\lambda$  和偏角  $\theta$  已知,所以只要得到  $\delta_k$ ,即可知道厚度  $n_k d_k$ 。

当  $k$  比较大时,获得  $\delta_k$  计算比较复杂,也非常困难,甚至人工是无法计算的。我们这里利用数学归纳法的原理应用公式(3)、(5)、(6)、(7)和(8)式推导出了检测光学薄膜算法。即:

当  $k = 1$  时

由(3)和(5)式获得:

$$R(\eta_0 + \eta_2)^2 \cos^2 \delta_1 + R(\eta_0 \eta_2 / \eta_1 + \eta_1)^2 \sin^2 \delta_1 = (\eta_0 - \eta_2)^2 \cos^2 \delta_1 + (\eta_0 \eta_2 / \eta_1 + \eta_1)^2 \sin^2 \delta_1 \quad (10)$$

因为

$$\frac{\sin^2 \delta_1}{\cos^2 \delta_1} = \frac{R(\eta_0 + \eta_2)^2 - (\eta_0 - \eta_2)^2}{(\eta_0 \eta_2 / \eta_1 - \eta_1)^2 - R(\eta_0 \eta_2 / \eta_1 + \eta_1)^2} = \tan^2 \delta_1$$

所以

$$\delta_1 = \tan^{-1} \sqrt{\frac{R(\eta_0 + \eta_2)^2 - (\eta_0 - \eta_2)^2}{(\eta_0 \eta_2 / \eta_1 - \eta_1)^2 - R(\eta_0 \eta_2 / \eta_1 + \eta_1)^2}} \quad (11)$$

(11) 式  $\delta_1$  代入 (6.1) 式解矩阵得常数矩阵:

$$C_1 = \begin{bmatrix} C_{11}^{(1)} & iC_{12}^{(1)} \\ iC_{21}^{(1)} & C_{22}^{(1)} \end{bmatrix} \quad (12)$$

又由(9)式可解出  $n_1 d_1$ 。

当  $k = 2$  时

由(6)式可得:

$$Y = \frac{C}{B} = \frac{\eta_3 \cos \delta_2 C_{22}^{(1)} - \eta_3 \eta_2 \sin \delta_2 C_{12}^{(1)} + i(\eta_2 \sin \delta_2 C_{11}^{(1)} + \cos \delta_2 C_{21}^{(1)})}{\cos \delta_2 C_{11}^{(1)} - \frac{1}{\eta_2} \sin \delta_2 C_{21}^{(1)} + i(\frac{\eta_3}{\eta_2} \sin \delta_2 C_{22}^{(1)} + \eta_3 \cos \delta_2 C_{12}^{(1)})} \quad (14)$$

令:

$$\left. \begin{aligned} B_{01} &= \eta_3 \cos \delta_2 C_{22}^{(1)} - \eta_3 \eta_2 \sin \delta_2 C_{12}^{(1)} \\ B_{02} &= \eta_2 \sin \delta_2 C_{11}^{(1)} + \cos \delta_2 C_{21}^{(1)} \\ B_{11} &= \cos \delta_2 C_{11}^{(1)} - \frac{1}{\eta_2} \sin \delta_2 C_{21}^{(1)} \\ B_{12} &= \eta_3 \cos \delta_2 C_{12}^{(1)} + \frac{\eta_3}{\eta_2} \sin \delta_2 C_{22}^{(1)} \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

由(8)式得:

$$R = \frac{(\eta_0 B_{11} - B_{01})^2 + (\eta_0 B_{12} - B_{02})^2}{(\eta_0 B_{11} + B_{01})^2 + (\eta_0 B_{12} + B_{02})^2} \quad (16)$$

把(15)式代入(16)式, 经过整理、二次设定和代换, 并且解一元二次方程组后, 如同(11)式解出  $\delta_2$ 。

代入(6.1)式解矩阵得常数矩阵:

$$C_2 = \begin{bmatrix} C_{11}^{(2)} & iC_{12}^{(2)} \\ iC_{21}^{(2)} & C_{22}^{(2)} \end{bmatrix} \quad (17)$$

又由(9)式可解出  $n_2 d_2$ 。

当  $k = 3$  时

根据(6)式其矩阵表达式为:

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta_3 & \frac{i}{\eta_3} \sin \delta_3 \\ i\eta_3 \sin \delta_3 & \cos \delta_3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} C_{11}^{(2)} & iC_{12}^{(2)} \\ iC_{21}^{(2)} & C_{22}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{11}^{(1)} & iC_{12}^{(1)} \\ iC_{21}^{(1)} & C_{22}^{(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_4 \end{bmatrix} \quad (18)$$

由于(18)式等号右侧前两矩阵相乘结果形式仍然

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta_2 & \frac{i}{\eta_2} \sin \delta_2 \\ i\eta_2 \sin \delta_2 & \cos \delta_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{11}^{(1)} & iC_{12}^{(1)} \\ iC_{21}^{(1)} & C_{22}^{(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_3 \end{bmatrix} \quad (13)$$

由于(13)式等号右侧第二项和第三项分别是常量矩阵和常量向量, 所以该式可解。根据(3)式,

不变, 所以与(13)式( $k = 2$ 时)的方法完全一样, 通过矩阵计算, 计算组合导纳  $Y$ , 以及设定变换等, 最终计算出相位厚度  $\delta_3$  和光学厚度  $n_3 d_3$ 。

同理, 当  $k = j$  时

根据(6)式其矩阵表达式为:

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta & \frac{i}{\eta} \sin \delta \\ i\eta \sin \delta & \cos \delta \end{bmatrix} \cdot C_{j-1} \dots C_2 \cdot C_1 \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_{j+} \end{bmatrix} \quad (19)$$

由于  $C_{j-1} \dots C_2 \cdot C_1$  为一常量矩阵连乘积, 结果仍然为常量矩阵。所以在以后的计算与  $k = 3$  完全一样。不难计算出光学厚度  $n_j d_j$ 。由此可见, 任意层的薄膜膜层光学厚度都可计算出来。

### 3.2 辅助检测程序

在图2中, 初始框是程序运行前人工录入的一些初始化数据, 其中  $\theta, R, \eta$  它们均是一组数, 每组数的个数取决于  $k$ 。计算组合导纳矩阵  $Y$ , 通过公式(14); 矩阵常量运算视  $k$  值大小, 若  $k = 1$ , 仅一个矩阵, 没有必要计算, 当  $k > 1$  以后, 需要完成所有常量的矩阵的连乘积。计算  $\delta_i$  比较复杂, 特别是当  $k$  很大时需要涉及到各种代换和解一元二次方程等。计算  $n_i d_i$  用公式(9); 计算矩阵  $C_i$  用公式(6.1)。

Table 1 Computing results of two kinds of four-layer films

Film Series	High Refraction 4 Layer Films				Low Refraction 4 Layer Films			
	$nH_1$	$nH_2$	$nH_3$	$nH_4$	$nL_1$	$nL_2$	$nL_3$	$nL_4$
$n_i d_i (\text{\AA})$	221.00	55.90	39.00	84.50	208.00	325.00	481.00	286.00
$R_i$	0.05570	0.06275	0.06838	0.08221	0.04078	0.03198	0.01614	0.01260
$n_i d_i (\text{\AA})$	221.00	55.93	39.01	84.49	208.00	325.00	481.00	285.55
$\Delta n_i d_i (\text{\AA})$	0.00	+ 0.03	+ 0.01	- 0.01	0.00	0.00	0.00	- 0.45

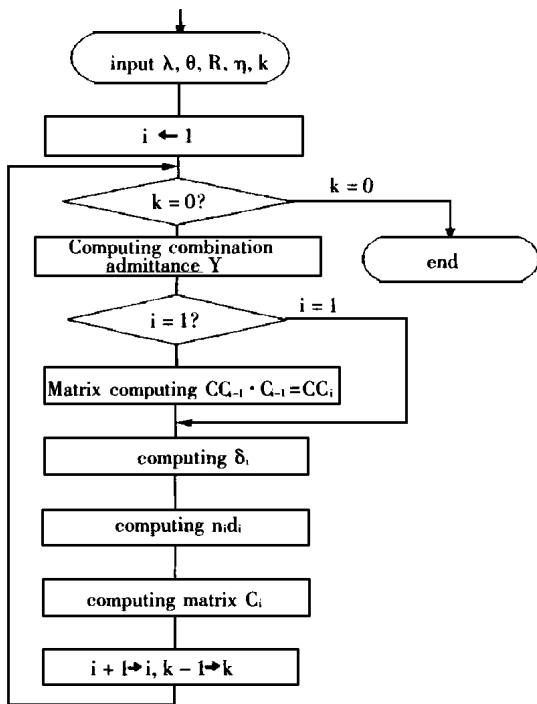


Fig. 2 Programming flow diagram of computer-aided test for optical thin films character

### 3.3 计算实例

表 1. 给出两组各四层膜的计算结果, 其中  $n = 1.52$ ,  $n_H = 2$ ,  $n_L = 1.38$ ,  $\theta = 0^\circ$ ;  $\lambda_0 = 5200\text{\AA}$ , 表中  $R_i$  由计算机按给定膜层光学厚度  $n_i d_i$  逐层计算的反射率,  $n_i d_i$  为该检测程序给定  $R_i$  后, 求得各层膜光学厚度。

## 4 结 论

利用特征矩阵法之逆运算方法所给出的多层膜光学特性参数检测方法和检测程序, 可根据给定的逐层膜反射率或透射率值很方便的计算出相应的各层相位厚度和光学厚度。该方法可用于光学镀膜后的特性分析, 亦适用于光学镀膜过程中的膜系实时修正和监控。对于入射角为零度情况下, 使用上述程序已很精确地计算出相应的各层相位厚度和光学厚度, 实践证明该方法对镀膜工艺实验有非常重要的指导意义。

### 参考文献:

- [1] 唐晋发, 顾培夫. 薄膜光学与技术[M]. 北京: 机械工业出版社, 1989.
- [2] 林永昌, 卢维强. 光学薄膜原理[M]. 北京: 国防工业出版社, 1950.

## Computer-aided test of parameters characteristic of optical thin films

HU Jun, QI Yu

(Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics,  
Chinese Academy of Sciences, Changchun 130021, China)

**Abstract:** A general calculating method of optical character of optical thin films, namely characteristic matrix method is stated concisely. By taking the method of inverse operation and the computer-aided technique, the testing of thickness of optical thin films is completed firstly in China. Meanwhile, this method is also applied to the process of this coated film. The related computing formula and the programming flow chart are introduced and the experimental data is also depicted. The conclusion from our demonstration mentioned above is given at last.

**Key words:** characteristic matrix; inverse operation; optical thin films; thickness of optical thin films; computer-aided test

作者简介: 胡君(1952-), 男, 吉林省蛟河人, 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所高级工程师, 1980年毕业于吉林大学计算机科学系, 同年被分配长春光机所一直从事科学研究工作。