

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

На правах рукописи

Исаев Темур Фуркатович

**Моделирование процессов напыления многослойных
покрытий с широкополосным оптическим контролем толщин
слоёв**

Специальность 1.2.2

Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание учёной степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук, доцент

Лукьяненко Дмитрий Витальевич

Москва — 2026

Оглавление

	Стр.
Введение	5
 Глава 1. Математическая модель, корреляция ошибок напыления и обратные задачи напыления многослойных оптических покрытий	 15
1.1 Математическая модель многослойного оптического покрытия .	16
1.1.1 Уравнения электромагнитного поля в многослойном покрытии	16
1.1.2 Коэффициенты пропускания и отражения	22
1.1.3 Рекуррентный метод вычисления спектральных коэффициентов	29
1.2 Корреляции и эффект самокомпенсации ошибок напыления . .	34
1.2.1 Постановка обратных задач проектирования и широкополосного контроля оптических покрытий	34
1.2.2 Математическое описание корреляции и эффекта самокомпенсации ошибок напыления	36
1.2.3 Оценки степени корреляции и эффекта самокомпенсации ошибок напыления	39
1.3 Обратная задача определения толщин слоёв напылённого многослойного покрытия	42
1.3.1 S - и T -алгоритмы	43
 Глава 2. Математические методы моделирования процессов напыления многослойных покрытий с широкополосным оптическим контролем	 46
2.1 Алгоритм математического моделирования напыления многослойных покрытий	47
2.2 Исследование эффекта кумулятивного накопления ошибок напыления	50
2.2.1 Переопределение толщин напылённых слоёв в процессе контроля напыляемого покрытия	51

2.2.2	Регуляризация контроля толщины слоя напыляемого многослойного покрытия	57
2.3	Высокоэффективное математическое моделирование ошибок напыления	61
2.4	Исследование корреляции и эффекта самокомпенсации ошибок напыления	63
2.4.1	Выбор стратегий широкополосного оптического контроля напыления многослойных покрытий	69
2.4.2	Теоретические оценки среднеквадратичной нормы вектора ошибок и коэффициента корреляции	79
Глава 3. Численные методы для решения обратной задачи определения толщин слоёв напылённого многослойного покрытия		
3.1	Модифицированный T -алгоритм	85
3.1.1	Описание алгоритма	86
3.1.2	Сравнительный анализ	91
3.2	Алгоритмы с использованием положений экстремумов спектральных характеристик	94
3.2.1	Описание алгоритма	95
3.2.2	Численные аспекты поиска экстремумов экспериментально измеренной функции $T^{meas}(\lambda)$	96
3.2.3	Результаты вычислительных экспериментов	100
3.3	Нелокальный алгоритм	103
3.3.1	Модели слоя и алгоритмы анализа данных измерений	103
3.3.2	Результаты вычислительных экспериментов и верификация полученных результатов	110
Глава 4. Комплекс программ		
4.1	Описание программного комплекса метода высокоэффективного математического моделирования ошибок напыления	114
Заключение		117

Благодарности	118
Публикации автора по теме диссертации	119
Список литературы	122
Приложение А. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ	127

Введение

Оптические покрытия являются одним из ключевых элементов практически всех современных оптических и оптико-электронных устройств. Они используются в производстве офтальмологических линз, линз для смартфонов и фотоаппаратов, дисплеев, защитных элементов денежных купюр и т.д. Прогресс во многих сложных технологических областях зависит от производства высококачественных оптических покрытий. Соответствующие области включают применение лазеров, медицинское приборостроение, космическую астрономию, приборы для лазерной литографии и т.п.

Оптические покрытия обычно получают путём напыления тонких диэлектрических и металлических слоёв на хорошо отполированные подложки. Толщина этих слоёв может варьироваться от нескольких нанометров (для применения в рентгеновских лучах) до нескольких сотен нанометров (для широкого спектра применений в видимой и ближней инфракрасной областях спектра). Количество слоёв оптического покрытия также варьируется в широком диапазоне. Простейшие защитные и высокоотражающие покрытия имеют один диэлектрический или металлический слой, в то время как покрытия WDM (wavelength-division multiplexing) для телекоммуникационных устройств с разделением по длине волны могут иметь сотни таких слоёв. Для наиболее сложных современных приложений, как правило, необходимы оптические покрытия, состоящие из нескольких десятков диэлектрических слоёв. Напыление покрытий происходит в специальных вакуумных камерах напыления. Чаще всего в процессе производства оптического покрытия используются только два материала с разными показателями преломления. В соответствии со значениями этих показателей используемые материалы относятся к материалам с высокими и низкими показателями преломления.

Анализ оптических покрытий основывается на исследовании спектральных характеристик покрытий. По мере распространения электромагнитной волны через многослойное оптическое покрытие на границах, разделяющих слои, возникает множество вторичных волн из-за отражений от этих границ и прохождения через них в другие слои. В результате интерференции этих вторичных волн образуется волна, отражённая от многослойного покрытия, и волна, прошедшая через покрытие. Эти электромагнитные волны зависят от длины

волны падающего на многослойное покрытие излучения. Волны могут быть охарактеризованы коэффициентами пропускания и отражения оптического покрытия, которые являются спектральными характеристиками многослойного оптического покрытия.

Требования к многослойным оптическим покрытиям формулируются как ограничения на их спектральные характеристики в заданной области спектра. Первая математическая задача, связанная с технологией напыления оптических покрытий, заключается в определении количества слоёв покрытия и их толщин, что позволяет этому покрытию соответствовать спектральным характеристикам, близким к заданным целевым значениям. Данная задача называется задачей проектирования оптического покрытия, являющейся довольно специфической обратной задачей оптимизации, в которой пространство параметров оптимизации не фиксируется до начала поиска оптимальной конструкции покрытия (упорядоченного набора толщин слоёв покрытия, отвечающих целевым спектральным характеристикам).

В 1982 году для решения таких обратных задач проектирования был предложен эффективный метод оптимизации, называемый методом игольчатых вариаций. С тех пор этот метод получил дальнейшее развитие, и в настоящее время построение правильной теоретической конструкции оптического покрытия не является главной проблемой, как это было четыре десятилетия назад. Параллельно с развитием методов математического проектирования был достигнут огромный прогресс во внедрении новых процессов напыления и разработке новых вакуумных приборов для производства оптических покрытий. Тем самым дальнейший прогресс в технологии напыления оптических покрытий напрямую связан с реализацией надёжного контроля толщин слоёв во время создания многослойного оптического покрытия.

В процессе производства оптических покрытий применяются различные методы контроля толщин слоёв. В случае покрытий для видимой и инфракрасной области спектра широко используются методы оптического контроля. Среди множества методов оптического контроля особую роль играет метод *прямого широкополосного контроля*. Данный метод обладает низкой чувствительностью к шуму в измерениях спектральных характеристик покрытия.

Метод прямого широкополосного контроля основан на анализе широкополосных спектров пропускания или отражения оптического покрытия, который осуществляется непосредственно внутри камеры напыления. Так как ско-

рость напыления типичных материалов для оптических покрытий находится в диапазоне 0.2-0.6 нм/сек, то в промежутках времени между последующими измерениями спектральных характеристик происходит напыление лишь небольшой доли слоёв покрытия. Измеренные спектры пропускания или отражения используются для прогнозирования момента, в который необходимо прекратить напыление слоя.

Существуют различные алгоритмы для прогнозирования момента завершения напыления слоя оптического покрытия. Один из возможных подходов к построению таких алгоритмов основан на вычислении функционала невязки, который состоит из квадрата разности между измеренным и теоретически предсказанным спектром в конце напыления слоя. В этом случае процесс напыления должен быть прекращён в тот момент, когда функционал невязки достигает своего минимального значения. В качестве альтернативы можно использовать уже измеренные спектры для решения однопараметрической обратной задачи определения толщины растущего слоя. Время окончания напыления слоя определяется путём сравнения полученного значения с теоретически запланированной толщиной в каждый момент измерения спектра напыляемого покрытия.

На первый взгляд, вышеприведённые подходы кажутся достаточно надёжными. Однако даже малые ошибки в ранее напылённых слоях значительно влияют на измеренные спектры последующих напыляемых слоёв: происходит эффект кумулятивного накопления ошибок в толщинах слоёв всего оптического покрытия. Рост величин ошибок в толщинах слоёв приводит к увеличению расхождений между теоретически прогнозируемыми и фактическими спектральными характеристиками оптического покрытия. Этот рост становится особенно быстрым, когда количество напылённых слоёв превышает 15-20. В результате величина накопленных ошибок в толщинах слоёв становится настолько большой, что дальнейший контроль толщин слоёв покрытия перестаёт быть надёжным, в результате чего финальное оптическое покрытие оказывается неудовлетворительным.

Тем самым для борьбы с данным эффектом необходимо разрабатывать алгоритмы для определения времени окончания напыления слоя покрытия, которые учитывают ошибки, допущенные в процессе напыления предыдущих слоёв. Такой учёт можно реализовать путём определения фактической толщины уже напылённых слоёв оптического покрытия в автономном режиме, а затем

полученные значения толщин использовать для корректировки параметров напыления, повторной калибровки устройств и улучшения процедуры контроля толщины отдельных слоёв.

Метод широкополосного оптического контроля позволяет внедрять такие алгоритмы в производственный процесс, предоставляя возможность переопределять толщины уже напылённых слоёв в процессе контроля толщины текущего слоя, нивелируя допущенные ранее ошибки в напылённых слоях. Тем самым наибольший интерес в развитии технологий напыления оптических покрытий вызывает разработка как алгоритмов прогнозирования момента остановки напыления слоя покрытия, так и алгоритмов для решения обратной задачи поиска толщин уже напылённых слоёв.

Описанный выше эффект кумулятивного накопления ошибок в толщинах слоёв напыляемого многослойного покрытия возникает вследствие корреляции этих ошибок в процессе широкополосного контроля. Несмотря на негативное влияние данного эффекта на производство многослойных оптических покрытий, корреляция ошибок, допущенных в напылённых слоях, может привести к положительному эффекту самокомпенсации этих ошибок в процессе напыления покрытия. Суть эффекта самокомпенсации заключается в специфичном распределении допущенных ошибок в толщинах напылённых слоёв, при наличии которых спектральные характеристики итогового многослойного покрытия полностью соответствуют целевым значениям, несмотря на достаточно большие значения этих ошибок. Например, производство WDM фильтров, которые имеют сотни слоёв, возможно только благодаря наличию эффекта самокомпенсации при использовании монохроматического контроля на центральной длине волны фильтра. А совсем недавно эффект самокомпенсации ошибок напыления был обнаружен при производстве многослойных поляризаторов лазерного излучения с широкополосным оптическим контролем. Следовательно, исследование эффекта самокомпенсации ошибок в толщинах напылённых слоёв многослойного покрытия является чрезвычайно важным, так как позволяет разработать методы для выбора оптимальной стратегии широкополосного оптического контроля, которая будет обеспечивать наличие эффекта самокомпенсации в реальном производственном процессе для создания высококачественных многослойных покрытий.

Таким образом, разработка современных подходов, направленных на борьбу с эффектом кумулятивного накопления ошибок в толщинах сло-

ёв напыляемых многослойных покрытий, а также исследование эффекта самокомпенсации этих ошибок позволяют существенно повысить качество широкополосного оптического контроля напыления многослойных покрытий.

Целью диссертационной работы является разработка подходов, направленных на повышение качества широкополосного оптического контроля напыления многослойных покрытий.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Разработать методы математического моделирования процесса напыления многослойных покрытий с широкополосным оптическим контролем толщин слоёв.
2. Разработать численные методы для определения времени окончания напыления слоя многослойного покрытия.
3. Разработать методы высокоэффективного математического моделирования ошибок толщин, получаемых в процессе напыления многослойных покрытий с широкополосным оптическим контролем толщин слоёв.
4. Исследовать корреляцию и эффект самокомпенсации ошибок в толщинах напылённых слоёв многослойных покрытий.
5. Разработать численные методы для решения обратной задачи поиска толщин напылённых слоёв по измеренным спектральным характеристикам оптического покрытия.
6. Реализовать все разработанные численные методы в виде комплекса программ.

Научная новизна:

1. Разработаны и представлены в виде комплекса программ оригинальные методы математического моделирования процессов напыления многослойных покрытий с широкополосным оптическим контролем, позволяющие тестировать и разрабатывать подходы, направленные на повышение качества контроля.
2. С помощью методов математического моделирования процесса напыления покрытий разработаны новые подходы для надёжного определения момента остановки напыления слоя.

3. С помощью математического моделирования проведено оригинальное исследование напыления первого слоя покрытия с использованием данных натурного эксперимента.
4. Разработан и представлен в виде комплекса программ оригинальный метод высокоэффективного математического моделирования ошибок толщин, получаемых в процессе напыления многослойных покрытий с широкополосным оптическим контролем толщин слоёв.
5. Впервые проведено исследование корреляции и эффекта самокомпенсации ошибок в толщинах напыляемых слоёв многослойных покрытий с использованием метода высокоэффективного математического моделирования ошибок напыления.
6. Предложены новые численные методы для решения обратной задачи определения толщин напылённых слоёв многослойных покрытий.

Практическая значимость диссертационной работы заключается в том, что разработанные методы математического моделирования позволяют конструировать новые подходы, направленные на повышение качества широкополосного контроля, а также проводить вычислительные эксперименты, моделируя условия производственного процесса с использованием данных натурных экспериментов. Описанные математические методы позволяют реализовывать моделирование процесса напыления покрытий с различными стратегиями широкополосного контроля и проводить исследование влияния ошибок, которые могут быть допущены в реальном производственном эксперименте, предоставляя возможность заранее выбирать наиболее оптимальную стратегию для создания высококачественного многослойного покрытия. Предложенные в диссертационной работе подходы для повышения качества широкополосного контроля и новые численные методы для решения обратной задачи определения толщин напылённых слоёв могут быть использованы в реальных производственных процессах напыления.

Методология и методы исследования. В работе использованы следующие теоретические методы исследования: методы математической физики, физической оптики, вычислительной математики, линейной алгебры, теории решения обратных и некорректно поставленных задач, методы оптимизации, методы минимизации, математической статистики и анализа данных, методы математического моделирования и прикладного программирования с использованием платформы для программирования MATLAB.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Математическое моделирование процессов напыления многослойных покрытий позволяет разрабатывать и тестировать вычислительные подходы, направленные на повышение качества широкополосного оптического контроля напыляемых многослойных покрытий.
2. Численные методы для прогнозирования момента остановки напыления слоёв многослойных оптических покрытий и численные методы для решения обратных задач определения толщин напылённых слоёв по измеренным спектральным характеристикам оптического покрытия позволяют повысить качество широкополосного оптического контроля напыляемых многослойных покрытий.
3. Комплекс проблемно-ориентированных программ, реализующий предложенные методы математического моделирования ошибок, получаемых в процессе напыления многослойных покрытий с широкополосным оптическим контролем толщин слоёв, позволяет эффективно проводить исследование корреляции и эффекта самокомпенсации ошибок напыления для определения наиболее оптимальной стратегии широкополосного оптического контроля с целью создания высококачественных многослойных покрытий.

Выносимые на защиту положения соответствуют следующим пунктам паспорта специальности 1.2.2 Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ:

1. Положение 1 соответствует пункту 3 паспорта специальности («Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента»)
2. Положение 2 соответствует пункту 3 паспорта специальности («Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента») и пункту 8 паспорта специальности («Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента»).
3. Положение 3 соответствует пункту 2 паспорта специальности («Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных

методов с применением современных компьютерных технологий») и пункту 8 паспорта специальности («Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента»).

Апробация работы. Предложенные методы и описанные результаты диссертационного исследования были получены в рамках исполнения НИРов следующих проектов РНФ:

- № 21-11-00011, «Нелокальные алгоритмы решения обратных задач распознавания в оптике слоистых покрытий» (01 апреля 2021 – 31 декабря 2023 гг.);
- № 16-11-10219П, «Разработка алгоритмов решения обратной задачи контроля процессов напыления оптических нанопокровов» (16 мая 2019 – 31 декабря 2020 гг.);
- № 19-11-00053, «Суперкомпьютерное моделирование свойств материалов тонких пленок для оптических и лазерных технологий» (23 апреля 2019 – 31 декабря 2021 гг.);
- № 14-11-00409, «Высокопроизводительные технологии моделирования релаксационных процессов в наноструктурированных тонких плёнках» (4 мая 2017 – 31 декабря 2018 гг.);
- № 16-11-10219, «Разработка алгоритмов решения обратной задачи контроля процессов напыления оптических нанопокровов» (1 января 2016 – 31 декабря 2018 гг.).

Также предложенные методы и описанные результаты диссертационного исследования прошли апробацию и обсуждение на следующих конференциях и научных семинарах:

- Международная научная конференция «Ломоносовские чтения» (19 апреля 2018 г.);
- Научный семинар в НИВЦ МГУ имени М. В. Ломоносова «Обратные задачи математической физики» под руководством профессора А. Б. Бакушинского, профессора А. В. Тихонравова и профессора А. Г. Яголы (30 октября 2024 г.);
- Заседание кафедры математики отделения прикладной математики физического факультета МГУ имени М. В. Ломоносова (4 декабря 2024 г.).

Дополнительно получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Публикации. Автор имеет 9 опубликованных работ, в том числе 9 по теме диссертации, из них 9 статей, опубликованных в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности и отрасли наук.

Личный вклад. Все представленные в диссертационном исследовании результаты получены автором лично под научным руководством доктора физико-математических наук, доцента Д. В. Лукьяненко. В работах, написанных в соавторстве, вклад автора диссертационной работы в результаты является определяющим.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения и одного приложения. Полный объём диссертации составляет 127 страниц, включая 40 рисунков и 11 таблиц. Список литературы содержит 47 наименований.

В **первой главе** описаны некоторые хорошо известные результаты из области фундаментального исследования проблем напыления многослойных покрытий. Эта глава не содержит научной новизны и личного вклада автора, а служит целям целостного изложения материалов диссертационной работы. Во-первых, детально описана математическая модель многослойных оптических покрытий. С использованием этой модели представлен вывод аналитических формул, позволяющих точно рассчитать спектральные характеристики многослойных оптических покрытий. Во-вторых, подробно изложена математическая теория корреляции и эффекта самокомпенсации ошибок в толщинах слоёв, напыляемых с помощью широкополосного оптического контроля. Представлены формулы для расчёта оценок степени корреляции этих ошибок, а также формулы для прогнозирования того, насколько выраженным будет эффект самокомпенсации ошибок в процессе напыления покрытия. И, в-третьих, детально описаны наиболее известные и широко применяемые алгоритмы для решения обратной задачи определения толщин слоёв напылённого многослойного покрытия по измеренным спектральным характеристикам покрытия. Представленные в данной главе результаты не выносятся на защиту, а используются во всех следующих главах диссертационного исследования только для реализации методов математического моделирования и разработки численных методов, направленных на повышение качества широкополосного оптического контроля напыления многослойных покрытий.

Во **второй главе** подробно описаны методы математического моделирования процессов напыления произвольного многослойного оптического покрытия, которые опубликованы в работе автора [1]. С помощью них проведено детальное исследование эффекта кумулятивного накопления ошибок в толщинах напыляемых слоёв многослойных покрытий и предложены подходы для борьбы с этим эффектом, которые опубликованы в работах автора [1; 2]. Также в главе представлен метод высокоэффективного математического моделирования ошибок напыления, который позволяет моделировать большой объём коррелированных ошибок, возникающих в реальных экспериментах по созданию многослойных покрытий с широкополосным оптическим контролем. Метод опубликован в работе автора [3]. С использованием данного метода моделирования ошибок напыления проведено исследование эффекта самокомпенсации ошибок толщин напылённых слоёв для различных многослойных покрытий, представляющих интерес для практических применений, опубликованное в работах автора [3—5].

В **третьей главе** представлены численные методы для решения обратной задачи определения толщин слоёв напылённых многослойных покрытий, которые необходимы для более надёжной работы методов математического моделирования процесса напыления покрытий. Предложен новый алгоритм для решения обратной задачи определения толщин слоёв напылённого покрытия и проведён сравнительный анализ с существующими алгоритмами, который опубликован в работах автора [6; 7]. Детально описан алгоритм, основанный на положениях экстремумов измеренных спектральных характеристик, опубликованный в работе автора [8]. А также проведено исследование по определению параметров первого напылённого слоя оптического покрытия с использованием большого объёма экспериментальных данных, получаемых в процессе напыления покрытия с широкополосным оптическим контролем. Результаты исследования опубликованы в работе автора [9].

В **четвертой главе** описан прикладной комплекс программ для математического моделирования ошибок напыления, возникающих в процессе создания многослойных покрытий с широкополосным оптическим контролем толщин слоёв. Содержимое этой главы основано на работах автора [3—5] и на комплексе проблемно-ориентированных программ, которые реализуют численных методы, разработанные во второй главе (см. приложение А).

Глава 1. Математическая модель, корреляция ошибок напыления и обратные задачи напыления многослойных оптических покрытий

В данной главе подробно излагаются известные результаты в области фундаментального исследования проблем напыления многослойных покрытий. Параграф 1.1 основан на материалах, изложенных в работах [10—12]. В нём детально рассматривается математическая модель многослойного оптического покрытия, описывается распространение электромагнитной волны в слоистой среде оптического покрытия через решения соответствующих уравнений Максвелла (подпараграф 1.1.1). Далее на основе этих решений выводятся формулы для амплитудных и спектральных коэффициентов пропускания и отражения для слоя оптического покрытия (подпараграф 1.1.2). В подпараграфе 1.1.3 уравнения Максвелла обобщаются на случай распространения электромагнитной волны в многослойной среде оптического покрытия, и предлагается эффективный рекуррентный алгоритм для решения этих уравнений с использованием результатов предыдущего подпараграфа 1.1.2. На основе полученных решений выводятся соответствующие формулы для вычисления спектральных характеристик пропускания и отражения многослойных оптических покрытий. Параграф 1.2 основан на материалах, изложенных в работах [13—15]. В нём даются постановки обратной задачи проектирования и задачи широкополосного контроля многослойного оптического покрытия (подпараграф 1.2.1). Далее на основе этих постановок строится математическое описание корреляции и эффекта самокомпенсации ошибок напыления (подпараграф 1.2.2). Затем в подпараграфе 1.2.3 выводятся формулы для расчёта оценок степени корреляции этих ошибок, а также для прогнозирования того, насколько выраженным будет эффект самокомпенсации ошибок в процессе напыления многослойного покрытия. Параграф 1.3 основан на материалах, изложенных в работах [16—18]. В нём рассматриваются наиболее известные и широко применяемые алгоритмы для решения обратной задачи определения толщин слоёв напылённого многослойного покрытия по измеренным спектральным характеристикам покрытия. В подпараграфе 1.3.1 описываются так называемые S - и T -алгоритмы.

1.1 Математическая модель многослойного оптического покрытия

Опираясь на материалы работ [10—12], в параграфе описывается распространение электромагнитной волны в слоистой среде оптического покрытия на основе решений уравнений Максвелла с использованием разложения падающей на слой волны на S - и P -поляризованные волны. Приведены амплитудные и спектральные характеристики слоя оптического покрытия для обоих случаев поляризации. С использованием полученного решения уравнений Максвелла описан рекуррентный алгоритм вычисления спектральных характеристик многослойного оптического покрытия.

1.1.1 Уравнения электромагнитного поля в многослойном покрытии

На рисунке 1.1 представлена базовая физическая модель, используемая при изучении многослойных оптических покрытий. Модель представляет собой две однородные полубесконечные изотропные среды, разделённые совокупностью плоскопараллельных изотропных слоёв, неограниченных в любом направлении. Диэлектрическая проницаемость и проводимость слоёв зависят от одной пространственной координаты, перпендикулярной границе между слоями и средой. Плоская электромагнитная волна распространяется от первой среды к границе слоя. Вследствие этого на этой границе образуются две плоские волны: отражённая волна в первой среде и волна, прошедшая сквозь границу в слой. Данная модель адекватно описывает распространение излучения в реальных многослойных оптических покрытиях, так как ширина покрытия всегда во много раз превышает длину падающей волны и общую толщину покрытия. Будем считать эти среды и слои немагнитными (магнитная проницаемость равна 1) и предполагать отсутствие объёмных зарядов. Оба предположения вполне стандартны в многослойной тонкоплёночной оптике. С учётом этих допущений уравнения Максвелла в среде выглядят следующим образом:

$$\nabla \times \vec{\mathcal{E}} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\mathcal{H}}}{\partial t}, \quad \nabla \times \vec{\mathcal{H}} = \frac{\varepsilon}{c} \frac{\partial \vec{\mathcal{E}}}{\partial t} + \frac{4\pi\sigma}{c} \vec{\mathcal{E}}. \quad (1.1)$$

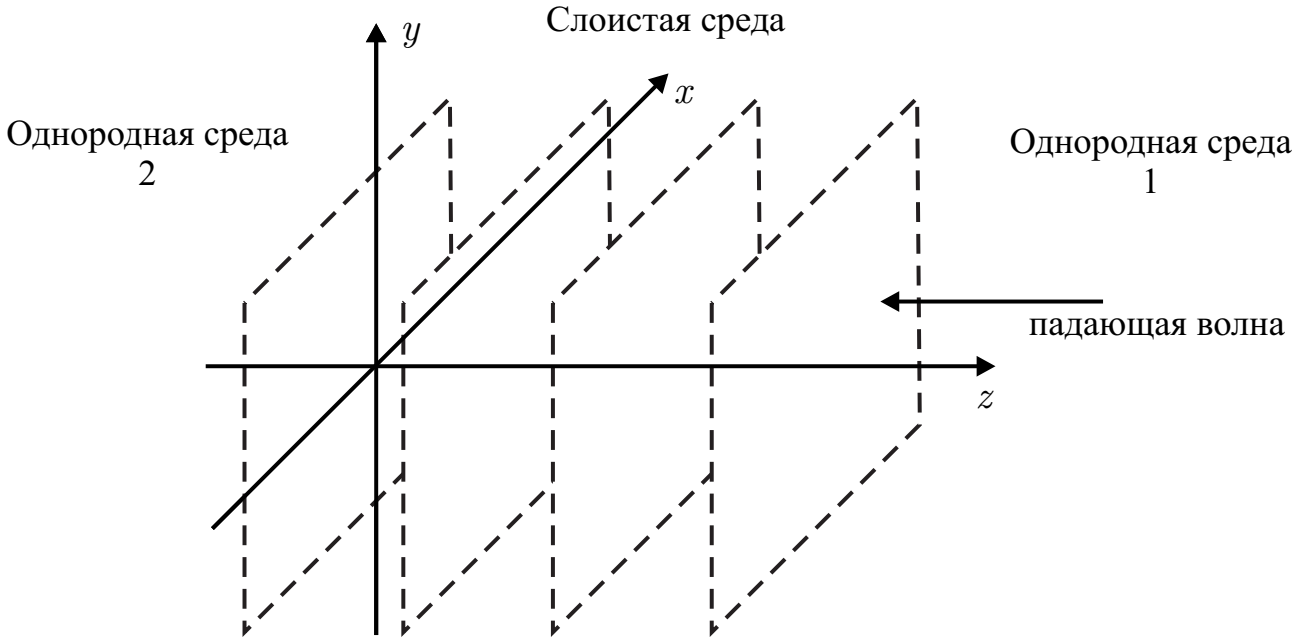


Рисунок 1.1 — Модель многослойного оптического покрытия

Здесь $\vec{\mathcal{E}}$ — электрический вектор, $\vec{\mathcal{H}}$ — магнитный вектор, ϵ — диэлектрическая проницаемость, σ — удельная проводимость среды, c — скорость света, ∇ — дифференциальный оператор набла.

Начальные условия таковы, что поля $\vec{\mathcal{E}}$ и $\vec{\mathcal{H}}$ удовлетворяют уравнениям (1.1) для непрерывных значений ϵ и σ , то есть в пределах каждого слоя. А на границах между слоями, где ϵ и σ принимают разные значения для каждого слоя, непрерывность сохраняют лишь тангенциальные компоненты $\vec{\mathcal{E}}$ и $\vec{\mathcal{H}}$. Тем самым изучение поля в слоистой среде сводится к решению уравнений (1.1) с заданными граничными условиями, когда поле индуцируется падающей плоской электромагнитной волной.

Обозначим пространственную переменную, перпендикулярную границе слоёв, как z , и направим ось z в обратном направлении распространения падающей волны (см. рисунок 1.1). Пусть падающая волна представляет собой плоскую монохроматическую волну с частотой ω . Предположим, что зависимость поля от времени равна $\exp(i\omega t)$, и имеют место следующие выражения:

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathbf{E}} \exp(i\omega t), \quad \vec{\mathcal{H}} = \vec{\mathbf{H}} \exp(i\omega t).$$

Векторы $\vec{\mathbf{E}}$ и $\vec{\mathbf{H}}$ зависят только от пространственных переменных. Подставляя эти выражения в (1.1) и далее сокращая экспоненциальный член $\exp(i\omega t)$, получаем

$$\nabla \times \vec{\mathbf{E}} = -i\frac{\omega}{c}\vec{\mathbf{H}}, \quad \nabla \times \vec{\mathbf{H}} = i\frac{\omega}{c}\epsilon\vec{\mathbf{E}} + \frac{4\pi\sigma}{c}\vec{\mathbf{E}}. \quad (1.2)$$

Обычно длина падающей волны в вакууме используется в качестве спектрального параметра, характеризующего монохроматическую волну $\lambda = \frac{c}{2\pi\omega}$. Другим удобным спектральным параметром является волновое число падающей волны в вакууме $k = \frac{2\pi}{\lambda}$. Также удобно для дальнейшего рассмотрения ввести комплексную диэлектрическую проницаемость среды, определяемую как

$$\tilde{\epsilon} = \epsilon - i\frac{4\pi\sigma}{\omega}.$$

В соответствии с ранее установленным направлением оси z , комплексная диэлектрическая проницаемость оказывается функцией переменной z . Принимая во внимание вышеуказанные назначения, уравнения (1.2) примут следующий вид:

$$\nabla \times \vec{E} = -ik\vec{H}, \quad \nabla \times \vec{H} = ik\tilde{\epsilon}(z)\vec{E}. \quad (1.3)$$

Давайте далее разложим электромагнитное поле волны на две составляющие, первая из которых является S -поляризованной компонентой с электрическим вектором, перпендикулярным плоскости падения, а другая P -поляризованной компонентой с электрическим вектором, параллельным плоскости падения.

Выберем систему координат так, чтобы ось x была перпендикулярна плоскости падения, а ось y находилась в этой плоскости. Обозначим угол падения как γ_a , диэлектрическую проницаемость внешнего пространства, из которого исходит падающая волна, как ϵ_a , диэлектрическую проницаемость второго внешнего пространства, традиционно называемого подложкой, как ϵ_s . Затем рассмотрим уравнения для S - и P -компонент поля отдельно.

Случай S -поляризации. В этом случае электрический вектор $\vec{E}$ имеет только одну составляющую E_x , отличную от 0. На рисунке 1.2 показано поперечное yz -сечение рассматриваемой слоистой структуры. Ось x направлена от наблюдателя, поэтому вектор $\vec{E}$ перпендикулярен плоскости yz . Скалярная форма векторных уравнений (1.3) представляется как

$$\begin{aligned} H_x &= 0, & \frac{\partial E_x}{\partial z} &= -ikH_y, & \frac{\partial E_x}{\partial y} &= ikH_z, \\ \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} &= ik\tilde{\epsilon}(z)E_x, & \frac{\partial H_z}{\partial x} &= 0, & \frac{\partial H_y}{\partial x} &= 0. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Первое уравнение показывает, что магнитный вектор имеет только компоненты H_y и H_z , отличные от нуля. Таким образом, магнитный вектор лежит

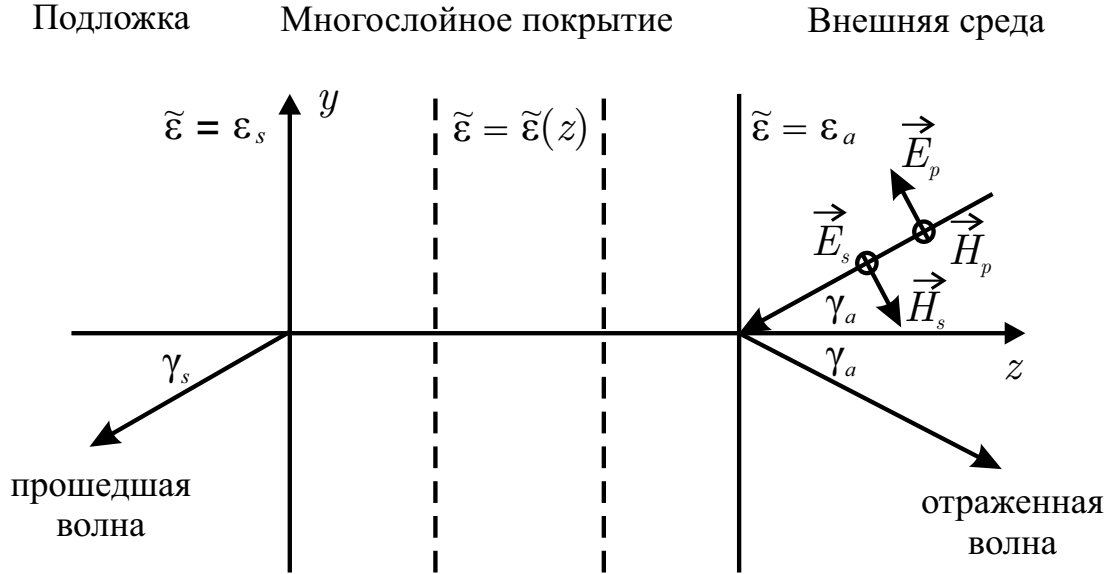


Рисунок 1.2 — Ориентация электрического ($\vec{E}_s$ и $\vec{E}_p$ составляющие) и магнитного ($\vec{H}_s$, $\vec{H}_p$ составляющие) векторов в случаях S - и P -поляризации соответственно

в плоскости yz , то есть в плоскости падения. Это свидетельствует о наличии поперечного поля плоской электромагнитной волны, при этом электрический, магнитный и волновой векторы образуют правую тройку векторов. Из двух других уравнений следует, что магнитный вектор, следовательно, и электрический вектор зависят только от y и z . Подставляя H_y и H_z из второго и третьего уравнений в четвёртое, получаем:

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} + k^2 \tilde{\epsilon}(z) E_x = 0. \quad (1.5)$$

Далее применим к уравнению метод разделения переменных. Другими словами, будем искать его решение в виде:

$$E_x(y, z) = u(z)g(y).$$

Подставляя это выражение в (1.5), сокращая его на $u(z)g(y)$ и разделяя переменные, получаем

$$-\frac{1}{g(y)} \frac{d^2 g}{dy^2} = \frac{1}{u(z)} \left[\frac{d^2 u}{dz^2} + k^2 \tilde{\epsilon}(z) u(z) \right]. \quad (1.6)$$

Из этого уравнения следует, что обе его части не могут зависеть ни от y , ни от z одновременно и, по сути, равны определённому постоянному значению. Эта константа будет дополнительно определена из условия возбуждения поля падающей плоской волны. В настоящее время удобно считать её равной $k^2 \alpha^2$,

где k — волновое число падающей волны, α — пока неопределённое значение. Затем получаем следующее уравнение для функции $g(y)$ из (1.6):

$$\frac{d^2 g}{dy^2} + k^2 \alpha^2 g(y) = 0. \quad (1.7)$$

Исходя из его вида, выберем решение

$$g(y) = \exp(ik\alpha y).$$

Это представление никоим образом не влияет на свою общность, поскольку числовая константа, которая должна быть в общем случае перед экспонентой, может быть включена в функцию $u(z)$, а знак α ещё не определён. Таким образом, E_x записывается в следующей форме

$$E_x(y, z) = u(z) \exp(ik\alpha y).$$

Из второго и третьего уравнений системы (1.4) следует, что H_y и H_z имеют аналогичный тип зависимости от y . Затем получаем из третьего уравнения следующее:

$$H_z(y, z) = \alpha u(z) \exp(ik\alpha y).$$

Далее, для удобства, предположим, что

$$H_y(y, z) = -v(z) \exp(ik\alpha y).$$

Таким образом, векторные функции $\vec{E}$ и $\vec{H}$ записываются в виде

$$\begin{aligned} \vec{E} &= \{u(z), 0, 0\} \exp(ik\alpha y), \\ \vec{H} &= \{0, -v(z), \alpha u(z)\} \exp(ik\alpha y). \end{aligned} \quad (1.8)$$

Здесь выполняются первое, третье, пятое и шестое уравнения системы (1.4). Оставшиеся два уравнения представляют собой систему для определения функций $u(z)$ и $v(z)$. Подставляя приведённые выше выражения для компонент поля в уравнения и сокращая их на $\exp(ik\alpha y)$, получаем

$$\frac{du}{dz} = ikv, \quad \frac{dv}{dz} = ik(\tilde{\varepsilon}(z) - \alpha^2)u. \quad (1.9)$$

Уравнения (1.9) справедливы для поля во всех точках непрерывности комплексной диэлектрической проницаемости $\tilde{\varepsilon}(z)$, то есть везде в точках

непрерывности ϵ и σ . В точках, где ϵ и σ меняются, а именно на границах слоёв, тангенциальные компоненты $\vec{E}$ и $\vec{H}$ должны быть непрерывными, как было отмечено ранее. Из (1.9) видно, что тангенциальные компоненты $\vec{E}$ и $\vec{H}$ равны $u(z) \exp(ik\alpha y)$ и $-v(z) \exp(ik\alpha y)$ соответственно. Поскольку условия непрерывности должны выполняться на границе слоя при любом значении y , зависимость y в любом слое, во внешнем пространстве и в подложке одинакова, в то время как функции $u(z)$ и $v(z)$ непрерывны на границах слоёв.

Давайте теперь определим константу α . Поле падающей плоской волны может быть представлено в виде

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_A \exp(-i\vec{k}\vec{r} + i\omega t).$$

Здесь $\vec{\mathcal{E}}_A$ — амплитуда поля, $\vec{k}$ — волновой вектор падающей волны, $\vec{r}$ — вектор координат точки наблюдения.

В однородной изотропной среде с диэлектрической проницаемостью ϵ_a волновой вектор равен $\vec{k} = k\sqrt{\epsilon_a}\vec{l}$, где $\vec{l}$ — единичный направляющий вектор. Пусть падающая волна распространяется в направлении, показанном на рисунке 1.2. Тогда направляющий вектор равен

$$\vec{l} = \{0, -\sin \gamma_a, -\cos \gamma_a\},$$

а поле падающей волны зависит от координат следующим образом:

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_A \exp [ik\sqrt{\epsilon_a} (z \cos \gamma_a + y \sin \gamma_a) + i\omega t].$$

Следовательно,

$$\alpha = \sqrt{\epsilon_a} \sin \gamma_a. \quad (1.10)$$

Это уравнение представляет закон Снеллиуса. В соответствии с ним α одинаков во всех слоях, во внешнем пространстве и подложке. И поэтому

$$\sqrt{\epsilon_a} \sin \gamma_a = \sqrt{\epsilon_s} \sin \gamma_s. \quad (1.11)$$

Закон Снеллиуса (1.11) справедлив также в случае поглощающей подложки. В этом случае должна быть использована комплексная диэлектрическая проницаемость $\tilde{\epsilon}_s$ в (1.11) вместо ϵ_s . Угол γ_s в этом случае также будет комплексным, что в физическом смысле подразумевает несовпадение плоскости постоянной фазы волны с плоскостью постоянной амплитуды волны.

Случай P -поляризации. Теперь вектор $\vec{H}$ имеет только одну компоненту H_x , отличную от нуля, а вектор $\vec{E}$ имеет две компоненты E_y и E_z . Проводя математические операции, аналогичные случаю S -поляризации, электромагнитное поле $\vec{E}$, $\vec{H}$ для случая P -поляризации записывается как

$$\begin{aligned}\vec{E} &= \{0, u(z), -\frac{\alpha}{\tilde{\varepsilon}(z)}v(z)\} \exp(ik\alpha y), \\ \vec{H} &= \{v(z), 0, 0\} \exp(ik\alpha y).\end{aligned}\tag{1.12}$$

А уравнения для неизвестных функций $u(z)$ и $v(z)$ выглядят следующим образом:

$$\frac{du}{dz} = ik \left(1 - \frac{\alpha^2}{\tilde{\varepsilon}(z)}\right) v, \quad \frac{dv}{dz} = ik\tilde{\varepsilon}(z)u.\tag{1.13}$$

Как и в предыдущем случае, уравнения справедливы в точках непрерывности ε и σ . На границах слоёв непрерывность функций $u(z)$ и $v(z)$, а также постоянство α вытекает из непрерывности тангенциальных составляющих поля. Константа α , очевидно, по-прежнему определяется из уравнения (1.10). Будем рассматривать уравнения (1.9)–(1.13) как основные соотношения, описывающие поле в слоистой среде. Поля $\vec{E}$, $\vec{H}$ определяются из решений этих уравнений в соответствии с формулами (1.8), (1.12). Заметим, что в случае нормального падения, то есть когда $\alpha = \sqrt{\varepsilon_a} \sin \gamma_a = 0$, уравнения (1.9) и (1.13) для S - и P -компонент поля совпадают.

Теперь перейдём к получению общих выражений для коэффициентов пропускания и отражения слоистой среды для случаев S - и P -поляризации.

1.1.2 Коэффициенты пропускания и отражения

Случай S -поляризации. Уравнения (1.9) также справедливы для внешнего пространства и подложки. Во внешнем пространстве $\tilde{\varepsilon}(z) \equiv \varepsilon_a$, следовательно, из (1.9) получаем простейшее уравнение второго порядка для $u(z)$:

$$\frac{d^2u}{dz^2} + k^2 (\varepsilon_a - \alpha^2) u = 0.\tag{1.14}$$

Введём величину

$$q_a = \sqrt{\varepsilon_a - \alpha^2} = \sqrt{\varepsilon_a} \cos \gamma_a.$$

Уравнение (1.14) имеет два линейно-независимых решения: $\exp(-ikq_az)$ и $\exp(ikq_az)$. Учитывая зависимость от времени как $\exp(i\omega t)$, первое решение соответствует распространению волны в положительном направлении оси z , а второе отвечает за распространение волны вдоль отрицательного направления оси z . Таким образом, для выбранной системы координат зависимость поля падающей волны от z принимает вид $\exp(ikq_az)$, а зависимость поля отражённой волны выглядит как $\exp(-ikq_az)$. Для падающей волны из первого уравнения в (1.9) следует, что $v = q_a u$, в то время как для отражённой волны получаем $v = -q_a u$.

Обозначим координату границы внешнего пространства как z_a , а амплитуды тангенциальных составляющих электрического вектора падающей и отражённой волн на этой границе как E_A и E_R . Таким образом, для падающей волны

$$u(z_a) = E_A, \quad v(z_a) = q_a E_A,$$

а для отражённой волны

$$u(z_a) = E_R, \quad v(z_a) = -q_a E_R.$$

Аналогично, обозначая E_T как тангенциальную составляющую электрического вектора пропускаемой волны на границе с подложкой, получаем

$$u(0) = E_T, \quad v(0) = q_s E_T.$$

где

$$q_s = \sqrt{\varepsilon_s - \alpha^2} = \sqrt{\varepsilon_s} \cos \gamma_s.$$

Амплитудные коэффициенты пропускания и отражения вводятся для S -компоненты поля следующим образом:

$$t = \frac{E_T}{E_A}, \quad r = \frac{E_R}{E_A}.$$

Коэффициенты не изменяются при пропорциональном изменении амплитуд падающих, отражённых и пропускаемых волн. Таким образом, поля могут быть нормированы относительно амплитуды пропускаемого поля. Тогда E_T равно 1.

Решения уравнений (1.9) зависят не только от z , но и от волнового числа k . Итак, далее запишем их как $u(z, k)$, $v(z, k)$, указывая на их зависимость от

волнового числа k и от координаты z . Непрерывность функций u и v на границе с подложкой приводит к следующим начальным условиям для уравнений:

$$u(0, k) = 1, \quad v(0, k) = q_s. \quad (1.15)$$

Поле на внешней границе z_a слоистой среды определяется как сумма полей падающей и отражённой волн. Таким образом, условия непрерывности для u и v на границе внешнего пространства и приведённые выше соотношения для амплитуд падающего и отражённого полей приводят к

$$u(z_a, k) = E_A + E_R, \quad v(z_a, k) = q_a (E_A - E_R).$$

Эти соотношения позволяют выразить амплитуды падающего и отражённого полей через решение системы (1.9) с начальными условиями (1.15)

$$E_R = \frac{q_a u(z_a, k) - v(z_a, k)}{2q_a}, \quad E_A = \frac{q_a u(z_a, k) + v(z_a, k)}{2q_a}.$$

Обратите внимание, что это будут значения E_R и E_A для $E_T = 1$. Это сразу приводит к выражениям для амплитудных коэффициентов пропускания и отражения. Они зависят от волнового числа k и определяются из

$$t(k) = \frac{2q_a}{q_a u(z_a, k) + v(z_a, k)}, \quad r(k) = \frac{q_a u(z_a, k) - v(z_a, k)}{q_a u(z_a, k) + v(z_a, k)}. \quad (1.16)$$

Таким образом, нормировка поля на амплитуду пропускаемой волны позволяет привести расчёты амплитудных коэффициентов отражения и пропускания к решению дифференциальных уравнений (1.9) с начальными условиями (1.15). Далее рассмотрим P -составляющую поля.

Случай P -поляризации. Из уравнений (1.13) для $u(z)$ во внешнем пространстве снова получаем уравнение (1.14). Таким образом, в P -случае справедливы аналогичные соображения о зависимости от z падающей и отражённой волн, как и в S -случае, которые приводят к схожему результату.

Для удобства объединим все результаты, полученные выше. Амплитудные коэффициенты пропускания и отражения в S - и P -случаях рассчитываются как

$$t(k) = \frac{2q_a}{q_a u(z_a, k) + v(z_a, k)}, \quad r(k) = \frac{q_a u(z_a, k) - v(z_a, k)}{q_a u(z_a, k) + v(z_a, k)},$$

где функции $u(z, k)$, $v(z, k)$ являются решениями системы дифференциальных уравнений (1.9)

$$\frac{du}{dz} = ikv, \quad \frac{dv}{dz} = ik(\tilde{\epsilon} - \alpha^2)u$$

в S -случае и системы дифференциальных уравнений (1.13)

$$\frac{du}{dz} = ik \left(1 - \frac{\alpha}{\tilde{\varepsilon}}\right) v, \quad \frac{dv}{dz} = ik \tilde{\varepsilon} u$$

в P -случае. Начальные условия для дифференциальных уравнений задаются на границе с подложкой как

$$u(0, k) = 1, \quad v(0, k) = q_s.$$

Параметры α , q_a , q_s рассчитываются по формулам:

$$\begin{aligned} \alpha &= \sqrt{\varepsilon_a} \sin \gamma_a, \\ q_a &= \sqrt{\varepsilon_a - \alpha^2}, & q_s &= \sqrt{\varepsilon_s - \alpha^2}, & S\text{-случай}, \\ q_a &= \varepsilon_a / \sqrt{\varepsilon_a - \alpha^2}, & q_s &= \varepsilon_s / \sqrt{\varepsilon_s - \alpha^2}, & P\text{-случай}. \end{aligned}$$

Во многих случаях удобнее использовать понятие показателя преломления, чем понятие диэлектрической проницаемости оптической среды. Диэлектрическая проницаемость ε связана с показателем преломления n через уравнение $\varepsilon = n^2$. Если это поглощающая среда, то её показатель преломления, как и диэлектрическая проницаемость, является комплексным. Обозначим его также волнистой линией над символом. Таким образом, в общем случае

$$\tilde{\varepsilon}(z) = \tilde{n}^2(z).$$

Давайте представим показатели преломления для внешнего пространства и подложки как $n_a = \sqrt{\varepsilon_a}$ и $n_s = \sqrt{\varepsilon_s}$ соответственно. Значение α теперь может быть выражено как

$$\alpha = n_a \sin \gamma_a,$$

и закон Снеллиуса можно записать как

$$n_a \sin \gamma_a = n_s \sin \gamma_s.$$

Параметры q_a и q_s также удобно выражать через соответствующие показатели преломления и углы распространения волн γ_a и γ_s . Простейшие арифметические операции и применение закона Снеллиуса позволяют получить

$$\begin{aligned} q_a &= n_a \cos \gamma_a, & q_s &= n_s \cos \gamma_s, & S\text{-случай}, \\ q_a &= n_a / \cos \gamma_a, & q_s &= n_s / \cos \gamma_s, & P\text{-случай}. \end{aligned}$$

Результаты приведённых выше соображений позволяют легко получить формулы Френеля для амплитудного коэффициента пропускания и коэффициента отражения на границе между двумя средами. Предположим, что $z_a = 0$, тогда рассматриваемая слоистая среда будет сведена к границе между внешним пространством и подложкой. Здесь $u(z_a, k) = u(0, k) = 1$, $v(z_a, k) = v(0, k) = q_s$ и получаются следующие выражения для амплитудных коэффициентов:

$$t = \frac{2q_a}{q_a + q_s}, \quad r = \frac{q_a - q_s}{q_a + q_s}.$$

Подставляя q_a , q_s , выраженные через показатели преломления среды и углы распространения волны, получаем

$$t = \frac{2n_a \cos \gamma_a}{n_a \cos \gamma_a + n_s \cos \gamma_s}, \quad r = \frac{n_a \cos \gamma_a - n_s \cos \gamma_s}{n_a \cos \gamma_a + n_s \cos \gamma_s}$$

в S -случае, и

$$t = \frac{2n_a \cos \gamma_s}{n_a \cos \gamma_s + n_s \cos \gamma_a}, \quad r = \frac{n_a \cos \gamma_s - n_s \cos \gamma_a}{n_a \cos \gamma_s + n_s \cos \gamma_a}$$

в P -случае.

Фактически, это формулы Френеля для амплитудных коэффициентов пропускания и отражения на границах между средами с показателями преломления n_a и n_s , когда падающая волна распространяется из среды с показателем преломления n_a под углом γ_a .

Величина и направление потока энергии для гармонической волны определяются усреднённым по времени вектором Пойнтинга по формуле

$$\vec{S} = \frac{c}{8\pi} \text{Re} [\vec{E} \vec{H}^*].$$

Звёздочка здесь является символом комплексного сопряжения, квадратные скобки обозначают векторное произведение. Поток энергии вдоль нормали к слоистой среде определяется двухкомпонентным вектором Пойнтинга. Из (1.8), (1.12) для S - и P -случаев получаем

$$S_z = \frac{c}{8\pi} \text{Re} \{-uv^*\}. \quad (1.17)$$

Предположим снова, что E_A , E_R и E_T являются амплитудами тангенциальных составляющих электрического вектора падающей, отражённой и

пропускаемой волн. Для падающей волны $u(z_a) = E_A$, $v(z_a) = q_a E_A$ на внешней границе слоистой среды. Таким образом, в соответствии с формулой (1.17) для падающей волны поток энергии по нормали к слоистой среде на внешней границе пропорционален $-\operatorname{Re} \{q_a\} |E_A|^2$. Отрицательный знак здесь указывает на то, что энергия распространяется в отрицательном направлении оси z . Аналогично, принимая во внимание, что для отражённой волны $u(z_a) = E_R$ и $v(z_a) = q_a E_R$, получаем, что поток энергии для отражённой волны вдоль оси z пропорционален $\operatorname{Re} \{q_a\} |E_R|^2$. Спектральный коэффициент отражения слоистой среды определяется как отношение абсолютных значений этих потоков и, очевидно, равен

$$R = \left| \frac{E_R}{E_A} \right|^2 = |r|^2, \quad (1.18)$$

где r — амплитудный коэффициент отражения.

Аналогично, получаем выражение для спектральный коэффициент пропускания

$$T = \frac{\operatorname{Re} \{q_s\}}{\operatorname{Re} \{q_a\}} \left| \frac{E_T}{E_A} \right|^2 = \frac{\operatorname{Re} \{q_s\}}{\operatorname{Re} \{q_a\}} |t|^2, \quad (1.19)$$

где t — амплитудный коэффициент пропускания. В случае непоглощающего внешнего пространства и подложки $\operatorname{Re} \{q_a\} = q_a$, $\operatorname{Re} \{q_s\} = q_s$.

До сих пор рассматривалась полубесконечная подложка. То есть при вычислении спектральных коэффициентов слоистой среды никак не учитывались отражения от задней стенки подложки. Модифицируем формулы (1.18) и (1.19) так, что приведённые вычисления спектральных коэффициентов отражения и пропускания будут учитывать конечность толщины подложки. Данный учёт отражения от задней поверхности подложки будет проводиться без учёта интерференции (так как предполагается, что подложка достаточно толстая), только на основе коэффициентов отражения и пропускания на её границе.

Пусть на границе подложки спектральные коэффициенты пропускания и отражения равны T^{sub} и R^{sub} , и на оптическое покрытие падает плоская волна единичной интенсивности. Расчёт конечных значений коэффициентов пропускания и отражения иллюстрируется на рисунке 1.3. Из формул (1.18) и (1.19) ясно, что T^{sub} и R^{sub} соответственно равны

$$T^{sub} = \frac{\operatorname{Re} \{q_s\}}{\operatorname{Re} \{q_a\}} \left| \frac{2q_a}{q_a + q_s} \right|^2, \quad R^{sub} = \left| \frac{q_a - q_s}{q_a + q_s} \right|^2.$$

Предполагая, что отражения продолжаются бесконечно ввиду предположения о плоскопараллельности и неограниченности слоистой среды и подложки в любом

Слоистая среда

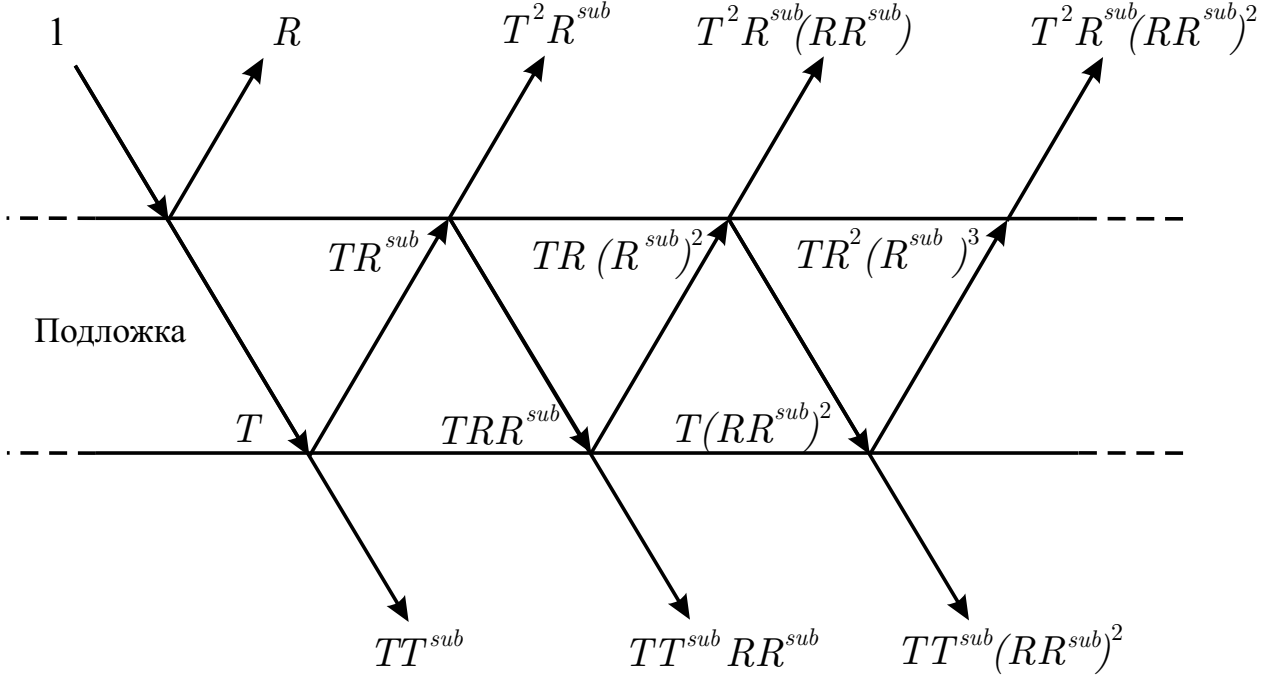


Рисунок 1.3 — Отражения и пропускания внутри подложки

направлении, результат для спектральных коэффициентов можно записать в следующем виде:

$$T \equiv TT^{sub} (1 + RR^{sub} + (RR^{sub})^2 + \dots) = \frac{TT^{sub}}{1 - RR^{sub}},$$

$$R \equiv R + T^2 R^{sub} (1 + RR^{sub} + (RR^{sub})^2 + \dots) = R + \frac{T^2 R^{sub}}{1 - RR^{sub}}.$$

Учитывая, кроме того, поглощение в подложке толщиной d_s с помощью множителя

$$\chi = \exp \left(-\frac{4\pi}{\lambda} \text{Im} d_s \sqrt{\epsilon_s - \alpha^2} \right),$$

получим следующие формулы для спектральных коэффициентов пропускания и отражения с учётом конечной толщины подложки:

$$T \equiv T \frac{\chi T^{sub}}{1 - \chi^2 R^{sub} R},$$

$$R \equiv R + \frac{\chi^2 R^{sub} T^2}{1 - \chi^2 R^{sub} R}. \quad (1.20)$$

1.1.3 Рекуррентный метод вычисления спектральных коэффициентов

При решении различных задач в области многослойной оптики в большинстве случаев предполагается, что слоистая среда состоит из конечного числа однородных и изотропных слоёв. В этом случае для определения амплитудных коэффициентов пропускания и отражения математически удобно и эффективно использовать матричный рекуррентный метод вычислений. Применение данного метода в дальнейшем позволит получить ряд важных выводов для анализа и синтеза многослойных оптических покрытий. Матричный метод вычисления спектральных коэффициентов слоистых сред был впервые предложен в работе [19] и с тех пор широко применяется. Результаты предыдущего параграфа позволяют представить очень простое изложение этого метода.

Предположим, что многослойное покрытие состоит из конечного числа однородных и изотропных слоёв. На рисунке 1.4 показано, что сохраняется та же ориентация оси z относительно внешнего пространства и подложки, что и в предыдущем параграфе. Пусть общее количество слоёв равно N . Пронумеруем слои в направлении от подложки к внешнему пространству и обозначим их правые границы как $z_1, z_2, \dots, z_N$. Таким образом, $z_N = z_a$, где z_a — координата внешней границы покрытия (в то же время z_a — общая геометрическая толщина многослойного покрытия). Обозначим геометрические толщины слоёв как $d_1, d_2, \dots, d_N$, а их комплексные показатели преломления как $\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \dots, \tilde{n}_N$. Также обозначим показатели преломления подложки и внешнего пространства как n_s и n_a соответственно. Показатель преломления подложки также может быть комплексным. Таким образом, подложка может быть поглощающей. При разработке формул предыдущего параграфа было удобно использовать комплексную диэлектрическую проницаемость среды. Используемые здесь комплексные показатели преломления связаны с $\tilde{\epsilon}$ уравнением

$$\tilde{n}^2 = \tilde{\epsilon}.$$

Как было показано ранее, амплитудные коэффициент пропускания и коэффициент отражения могут быть определены в общих случаях по формуле (1.16) с использованием решений системы дифференциальных уравнений (1.9) в S -случае и (1.13) в P -случае. Будем иметь в виду, что внутри каждого однородного слоя решения этих уравнений записаны явно. Давайте

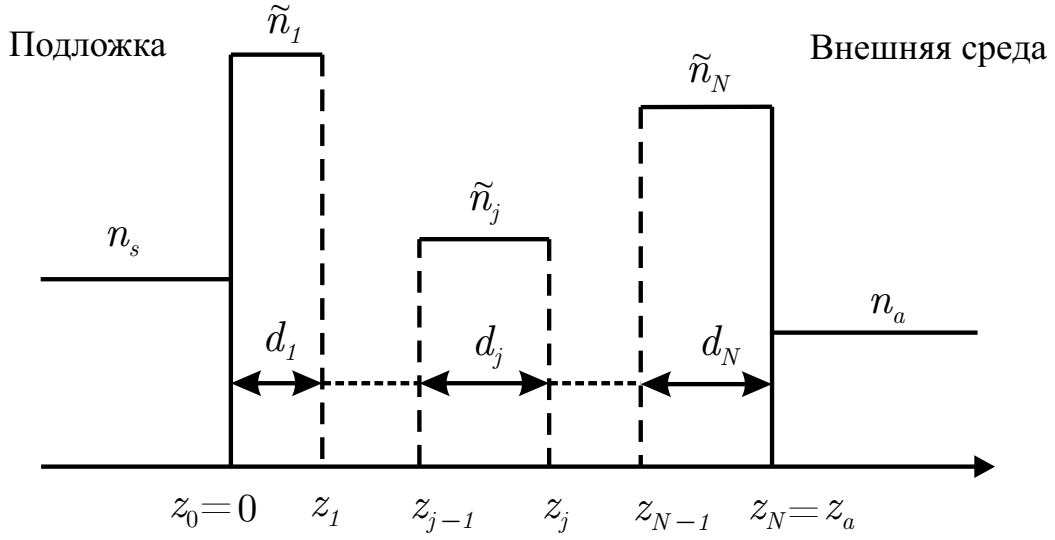


Рисунок 1.4 — Многослойное покрытие, состоящее из N слоёв

сначала рассмотрим S -компоненту поля. Уравнения (1.9) в j -ом слое записываются следующим образом:

$$\frac{du}{dz} = ikv, \quad \frac{dv}{dz} = ik(\tilde{n}_j^2 - \alpha^2)u. \quad (1.21)$$

Из (1.21) получаем следующее дифференциальное уравнение второго порядка для u :

$$\frac{d^2u}{dz^2} + k^2(\tilde{n}_j^2 - \alpha^2)u = 0. \quad (1.22)$$

Для дальнейших расчётов удобно ввести угол распространения волны в j -ом слое и обозначить его как γ_j . Это вытекает из закона Снеллиуса:

$$\tilde{n}_j \sin \gamma_j = \alpha = n_a \sin \gamma_a. \quad (1.23)$$

Обратите внимание, что γ_j является комплексной величиной в поглощающем слое. Принимая во внимание (1.23), уравнение (1.22) также может быть записано следующим образом:

$$\frac{d^2u}{dz^2} + (k\tilde{n}_j \cos \gamma_j)^2 u = 0. \quad (1.24)$$

Уравнение (1.24) имеет два линейно-независимых решения. Удобно записать их как

$$\begin{aligned} u_1(z) &= \cos[k\tilde{n}_j \cos \gamma_j(z - z_{j-1})], \\ u_2(z) &= \sin[k\tilde{n}_j \cos \gamma_j(z - z_{j-1})], \end{aligned}$$

где z_{j-1} является левой границей j -го слоя. Общим решением уравнения (1.24) является их линейная комбинация:

$$u(z) = c_1 u_1(z) + c_2 u_2(z).$$

Предполагая, что $z = z_{j-1}$, находим $c_1 = u(z_{j-1})$. Дифференцируя по z и снова предполагая $z = z_{j-1}$, получаем $k\tilde{n}_j \cos \gamma_j c_2 = u'(z_{j-1})$ или, принимая во внимание первое уравнение в (1.21), получаем $c_2 = iv(z_{j-1})/\tilde{n}_j \cos \gamma_j$. Таким образом, решение уравнения (1.24) в j -ом слое принимает вид:

$$\begin{aligned} u(z) = & u(z_{j-1}) \cos [k\tilde{n}_j \cos \gamma_j (z - z_{j-1})] + \\ & + iv(z_{j-1}) \sin [k\tilde{n}_j \cos \gamma_j (z - z_{j-1})] / \tilde{n}_j \cos \gamma_j. \end{aligned} \quad (1.25)$$

Дифференцируя функцию $u(z)$ и подставляя её производную в первое уравнение (1.21), получаем

$$\begin{aligned} v(z) = & i\tilde{n}_j \cos \gamma_j u(z_{j-1}) \sin [k\tilde{n}_j \cos \gamma_j (z - z_{j-1})] + \\ & + v(z_{j-1}) \cos [k\tilde{n}_j \cos \gamma_j (z - z_{j-1})]. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Предполагая, что $z = z_j$ в (1.25) и (1.26), получаем уравнения

$$\begin{aligned} u(z_j) = & u(z_{j-1}) \cos \varphi_j + (i/q_j)v(z_{j-1}) \sin \varphi_j, \\ v(z_j) = & iq_j u(z_{j-1}) \sin \varphi_j + v(z_{j-1}) \cos \varphi_j, \end{aligned} \quad (1.27)$$

где вводятся следующие обозначения:

$$\varphi_j = kq_j d_j, \quad d_j = z_j - z_{j-1}, \quad q_j = \tilde{n}_j \cos \gamma_j.$$

Величина φ_j известна как угловая фазовая толщина j -го слоя. Уравнения (1.27) также могут быть записаны в матричном виде:

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_{z=z_j} = \begin{pmatrix} \cos \varphi_j & (i/q_j) \sin \varphi_j \\ iq_j \sin \varphi_j & \cos \varphi_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_{z=z_{j-1}}. \quad (1.28)$$

Матрица, введённая в (1.28), то есть,

$$M_j = \begin{pmatrix} \cos \varphi_j & (i/q_j) \sin \varphi_j \\ iq_j \sin \varphi_j & \cos \varphi_j \end{pmatrix} \quad (1.29)$$

называется характеристической матрицей j -го слоя. Формула (1.28) позволяет пересчитать поле с одной границы j -го слоя на другую.

Поскольку функции u и v непрерывны на границах между слоями, можно пересчитать поле от его границы с подложкой $z_0 = 0$ до границы с внешним пространством $z_N = z_a$, используя характеристические матрицы и формулы (1.28). Поступая таким образом, находим решение дифференциальных уравнений для поля в слоистой среде. Итак, получаем

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_{z=z_a} = M_N M_{N-1} \cdots M_1 \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_{z=0}. \quad (1.30)$$

Произведение характеристических матриц слоёв

$$M = M_N M_{N-1} \cdots M_1 \quad (1.31)$$

известно как характеристическая матрица многослойного покрытия. Обозначим его элементы m_{ij} и получим

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}.$$

Сомножители в (1.31) взяты в направлении из внешнего пространства к подложке.

Формулы (1.16) для амплитудных коэффициентов пропускания и отражения включают специальные решения системы дифференциальных уравнений с начальными условиями

$$u(0, k) = 1, \quad v(0, k) = q_s, \quad (1.32)$$

где $q_s = \sqrt{\varepsilon_s - \alpha^2} = n_s \cos \gamma_s$. Характеристическая матрица многослойного покрытия позволяет найти эти решения. Подставляя начальные условия (1.32) в правую часть (1.30), получаем

$$\begin{aligned} u(z_a, k) &= m_{11} + m_{12}q_s, \\ v(z_a, k) &= m_{21} + m_{22}q_s. \end{aligned}$$

Подставляя эти решения затем в (1.16), находим, что

$$t(k) = \frac{2q_a}{q_a m_{11} + q_s m_{22} + q_a q_s m_{12} + m_{21}}, \quad (1.33)$$

$$r(k) = \frac{q_a m_{11} - q_s m_{22} + q_a q_s m_{12} - m_{21}}{q_a m_{11} + q_s m_{22} + q_a q_s m_{12} + m_{21}}. \quad (1.34)$$

где $q_a = \sqrt{\varepsilon_a - \alpha^2} = n_a \cos \gamma_a$.

Эти выражения дают окончательные формулы матричного метода Абелеса [19]. Чтобы использовать их для расчёта амплитудных коэффициентов пропускания и отражения, необходимо рассчитать характеристические матрицы слоёв и найти их произведение (1.31), которое является характеристической матрицей многослойного покрытия.

В случае P -поляризации аналогичные шаги снова приводят к формулам (1.33), (1.34) для амплитудных коэффициентов покрытия. Единственным отличием здесь является тот факт, что значения q_j в характеристических матрицах слоёв (1.29) определяются в P -случае уравнениями $q_j = \tilde{n}_j / \cos \gamma_j$, в то время как q_s, q_a в (1.33), (1.34) равны $n_s / \cos \gamma_s$ и $n_a / \cos \gamma_a$ соответственно.

Спектральные коэффициенты пропускания и отражения определяются с помощью амплитудных коэффициентов в соответствии с формулами

$$T = \frac{\operatorname{Re}\{q_s\}}{\operatorname{Re}\{q_a\}} |t|^2, \quad R = |r|^2.$$

Для удобства в таблице 1 представлены параметры, включённые в расчётные формулы (1.29), (1.33) и (1.34). Углы, представленные в таблице 1, определяются на основе закона Снеллиуса:

$$n_s \sin \gamma_s = \tilde{n}_j \sin \gamma_j = n_a \sin \gamma_a, \quad (1.35)$$

где γ_a — угол падения (заданное значение). При отсутствии поглощения показатели преломления, углы γ_j и все параметры, представленные в таблице 1, являются вещественными. Таким образом, элементы на главных диагоналях характеристических матриц слоёв будут также вещественными, в то время как элементы на вспомогательных диагоналях будут мнимыми. путём умножения матриц легко проверить, что характеристические матрицы покрытия будут обладать одним и тем же свойством. Следовательно, первые два элемента в знаменателе выражения для t являются вещественными, в то время как два других — мнимыми. Это означает, что коэффициент пропускания для непоглощающего покрытия может быть записан как

$$T = \frac{4q_a q_s}{(q_a m_{11} + q_s m_{22})^2 - (m_{21} + q_a q_s m_{12})^2}.$$

Отрицательный знак здесь компенсирует квадрат мнимой единицы, включённой во вторые скобки в знаменателе. Нет необходимости в отдельной формуле

Таблица 1 — Формулы для вычисления параметров

	q_s	q_a	q_j	φ_j
<i>S-случай</i>	$n_s \cos \gamma_s$	$n_a \cos \gamma_a$	$\tilde{n}_j \cos \gamma_j$	$k \tilde{n}_j \cos \gamma_j d_j$
<i>P-случай</i>	$n_s / \cos \gamma_s$	$n_a / \cos \gamma_a$	$\tilde{n}_j / \cos \gamma_j$	

для спектрального коэффициента отражения, так как $R = 1 - T$ в отсутствии поглощения.

1.2 Корреляции и эффект самокомпенсации ошибок напыления

При широкополосном оптическом контроле процесса напыления многослойных покрытий ошибки в ранее напылённых слоях влияют на измеренные спектральные характеристики слоя, который напыляется в данный момент [20—22]. Эти характеристики используются для оперативного определения толщины растущего слоя и для прогнозирования момента окончания напыления (см. главу 2, параграф 2.1). В результате ошибка в толщине этого растущего слоя оказывается коррелированной с ошибками во всех ранее напылённых слоях. Корреляция ошибок толщин вызывает негативный эффект кумулятивного накопления этих ошибок (см. главу 2, параграф 2.2), но, несмотря на это, корреляция может способствовать проявлению положительного эффекта самокомпенсации ошибок толщин слоёв [23—25]. Далее на основе материалов работ [13—15] будет дано математическое описание корреляции и эффекта самокомпенсации ошибок напыления, позволяющее оценить, насколько выраженным может быть эффект самокомпенсации ошибок в процессе напыления многослойного покрытия.

1.2.1 Постановка обратных задач проектирования и широкополосного контроля оптических покрытий

В процессе создания многослойного покрытия возникает обратная задача проектирования оптического покрытия, которая формулируется на основе

заданных целевых спектральных характеристик. Математически обратная задача проектирования формулируется в общем виде как задача оптимизации функционала качества

$$MF = \left\{ \frac{1}{2L} \sum_{\{\lambda\}} \left[\left(T_s(\lambda) - \hat{T}_s \right) + \left(T_p(\lambda) - \hat{T}_p \right) \right]^2 \right\}^{1/2}, \quad (1.36)$$

где в спектральном диапазоне λ целевой коэффициент пропускания для P -поляризованного света T_p равен $\hat{T}_p$, а целевой коэффициент пропускания для S -поляризованного света T_s равен $\hat{T}_s$. L — общее количество точек спектральной сетки длин волн. Обратим внимание на то, что в формуле (1.36) нет явной зависимости от толщин оптического покрытия, так как обратная задача проектирования является оптимизационной задачей с нефиксированным количеством параметров.

При широкополосном контроле толщин напыляемых слоёв покрытия используется следующий функционал невязки:

$$\Phi_j(d_j) = \sum_{\{\lambda\}} [T_j^{meas}(\lambda) - T(d_1, \dots, d_j, \lambda)]^2, \quad (1.37)$$

где j — номер напыляемого слоя, $T_j^{meas}(\lambda)$ — измеренный спектр напыляемого покрытия в конце напыления j -го слоя, а $T(\dots)$ — функция, позволяющая аналитически вычислить спектр пропускания покрытия с толщинами слоёв $d_1, \dots, d_j$ для длин волн λ (см. подпараграф 1.1.3). Широкополосный контроль использует спектры, полученные под прямым углом к напыляемому покрытию, что типично для данного типа контроля. Суммирование в уравнении (1.37) выполняется по сетке длин волн $\{\lambda\}$, для которых измерены спектры $T_j^{meas}(\lambda)$ в процессе контроля. Значения длин волн в сетке охватывают довольно широкий спектральный диапазон и имеют много сотен или даже тысяч точек и, вообще, могут отличаться от длин волн, по которым вычисляется функционал качества в уравнении (1.36).

Обозначим толщины слоёв теоретической конструкции многослойного покрытия с N слоями, полученные в результате минимизации функционала (1.36), как $d_1^t, \dots, d_N^t$ (обозначаемые верхним индексом « t » от слова *theoretical*). Для удобства далее опустим зависимость спектрального коэффициента пропускания от длины волны и будем рассматривать только зависимость от толщин слоёв. Измеренная спектральная зависимость $T_j^{meas}(\lambda)$ может быть

представлена в форме

$$T_j^{meas}(\lambda) \equiv T_j^{meas}(\lambda, d_j) = T(d_1^a, \dots, d_{j-1}^a, d_j, \lambda) + \delta T^{meas}, \quad (1.38)$$

где δT^{meas} — случайный шум в измеренных данных, а $d_1^a, \dots, d_{j-1}^a$ — «истинно» напылённые толщины слоёв (обозначаемые верхним индексом «a» от слова *actual*), которые, вообще говоря, отличаются от $d_1^t, \dots, d_{j-1}^t$ вследствие погрешностей напыления. Измеренные спектры пропускания регистрируются в режиме реального времени с коротким интервалом от одной до нескольких секунд, за которые напыляется лишь небольшая часть слоя. Напыление j -го слоя прекращается в тот момент, когда функционал (1.37) достигает своего минимума.

Технические детали алгоритмов, используемых для определения момента прекращения напыления слоя, обсуждаются в главе 2 (параграфы 2.1 и 2.2). Для следующих соображений наиболее важным фактором, связанным с решением обратной задачи для контроля толщины и предсказанием момента остановки напыления j -го слоя, является то, что толщина j -го напылённого слоя d_j должна соответствовать минимуму функционала (1.37) (условие прекращения напыления j -го слоя):

$$\Phi_j(d_j) = \min_{d_j} \sum_{\{\lambda\}} [T(d_1^a, \dots, d_{j-1}^a, d_j, \lambda) + \delta T^{meas} - T(d_1^t, \dots, d_j^t, \lambda)]^2. \quad (1.39)$$

1.2.2 Математическое описание корреляции и эффекта самокомпенсации ошибок напыления

Отклонения значений толщин напылённых слоёв $d_1^a, \dots, d_N^a$ от значений толщин слоёв теоретической конструкции покрытия $d_1^t, \dots, d_N^t$ приводят к изменениям функционала качества MF (1.36), который использовался для решения обратной задачи проектирования оптического покрытия. Обозначим эти отклонения как $\delta d_1, \dots, \delta d_N$. Так как толщины слоёв теоретической конструкции покрытия $d_1^t, \dots, d_N^t$ соответствуют решению задачи минимизации функционала (1.36), то они также соответствуют нулевому значению градиента функционала MF . В соответствии с анализом, проведённым в работах [13—15],

вариацию функционала можно записать в виде следующего приближенного соотношения:

$$\delta MF \approx \frac{1}{2} \sum_{i=1}^I e_i q_i^2, \quad (1.40)$$

где e_i — собственные значения гессиана функционала MF , q_i — скалярное произведение вектора $\Delta = \{\delta d_1, \dots, \delta d_N\}$ с i -ым собственным вектором гессиана функционала MF , соответствующим собственному значению e_i , а I — количество отличных от нуля собственных значений гессиана функционала MF .

Предположим теперь, что ошибки толщин слоёв скоррелированы процедурой широкополосного контроля таким образом, что все линейные комбинации q_i в уравнении (1.40) равны или близки к нулю. В этом случае изменение функционала качества также близко к нулю, и, таким образом, будет наблюдаться эффект самокомпенсации ошибок в толщинах напылённых слоёв многослойного покрытия. Из вышеописанного можно сделать вывод, что небольшое число ($I \ll N$) существенно отличных от нуля собственных значений матрицы A является *необходимым условием существования эффекта самокомпенсации* ошибок в толщинах напыляемых слоёв. Наша основная цель — понять, при каких условиях имеет место именно такая корреляция ошибок в толщинах слоёв, напыляемых с использованием широкополосного контроля.

Вернемся к рассмотрению функционала (1.39). Учитывая, что напыление j -го слоя прекращается в момент достижения функционала Φ_j минимума по d_j , и пренебрегая отклонением толщин ранее напылённых слоёв $d_1^a, \dots, d_{j-1}^a$ от теоретически заданных $d_1^t, \dots, d_j^t$, перепишем данный функционал как

$$\Phi_j(d_j) = \sum_{\lambda} \left[\sum_{i=1}^j \frac{\partial T_j}{\partial d_i} \delta d_i + \delta T^{meas} \right]^2, \quad (1.41)$$

где $\frac{\partial T_j}{\partial d_i}$ — частная производная $T(d_1^t, \dots, d_{j-1}^t, d_j, \lambda)$ по d_j , $\delta d_1, \dots, \delta d_{j-1}$ — ошибки толщин, допущенные при напылении предыдущих $j - 1$ слоёв, где $\delta d_j = d_j - d_j^t$ — отклонение толщины j -го слоя от его запланированного теоретического значения, а δT^{meas} — случайный шум в измеренных данных.

Функционал $\Phi_j(d_j)$ (1.41) является квадратичной функцией ошибок толщин слоёв покрытия, поэтому можно переписать его в виде

$$\begin{aligned} \Phi_j(d_j^t + \delta d_j) = & \sum_{i,k=1}^j \left(\sum_{\{\lambda\}} \frac{\partial T_j}{\partial d_i} \frac{\partial T_j}{\partial d_k} \right) \delta d_i \delta d_k + \\ & + 2 \sum_{i=1}^j \left(\sum_{\{\lambda\}} \frac{\partial T_j}{\partial d_i} \delta T^{meas} \right) \delta d_i + \sum_{\{\lambda\}} (\delta T^{meas})^2. \end{aligned} \quad (1.42)$$

В настоящее время в процессе широкополосного контроля анализируемые спектры пропускания измеряются на сетках длин волн с несколькими сотнями или тысячами точек. Поэтому производные $\frac{\partial T_j}{\partial d_i}$ можно рассматривать как гладкие функции относительно длин волн. В силу того, что на шум в измеренных данных влияют многочисленные факторы различной природы, δT^{meas} можно рассматривать как нормально распределённую случайную величину. Для упрощения анализа будем пренебрегать возможными систематическими ошибками в данных измерения коэффициента пропускания. В соответствии с этими допущениями математическое ожидание суммы $\sum_{\{\lambda\}} \frac{\partial T_j}{\partial d_i}$ будет близко к нулю, и можно пренебречь этими членами в следующих рассуждениях. Это означает, что при минимизации функционала $\Phi_j(d_j)$ (1.41) основную роль играет лишь первая сумма в (1.42).

Аналогично, в соответствии с анализом, проведённым в работах [13—15], и соображениями выше, условие прекращения напыления j -го слоя может быть представлено в виде

$$\sum_{i=1}^{k_j} e_i^j [W_{ij} \Delta]^2 \longrightarrow \min, \quad (1.43)$$

где e_i^j — собственные значения гессиана функционала Φ_j , а N -мерная матрица W_{ij} равна

$$W_{ij} = \sqrt{e_i^j} \{p_1^{ij}, \dots, p_j^{ij}, 0, \dots, 0\},$$

где $\{p_1^{ij}, \dots, p_j^{ij}\}$ — i -ый собственный вектор гессиана функционала Φ_j , соответствующий собственному значению e_i^j , а k_j — количество отличных от нуля собственных значений гессиана функционала Φ_j . Напомним, что это выражение получено из условия минимума функционала Φ_j , которое описывает механизм

корреляции ошибок в толщинах слоёв, напылённых с широкополосным оптическим контролем.

Как было упомянуто ранее, ошибки в толщинах напылённых слоёв вызваны множеством факторов [26] и всегда содержат случайные компоненты. По этой причине вектор ошибок Δ , компоненты которого коррелируют друг с другом в процессе прямого широкополосного контроля, также имеет случайный характер и может значительно варьироваться от одного цикла напыления к другому. Согласно условию (1.43), ошибки в толщинах скоррелированы таким образом, что вектор Δ имеет тенденцию быть ортогональным подпространству, состоящему из собственных векторов гессиана функционала Φ_j .

Напомним теперь основной вывод, полученный из рассмотрения функционала MF (1.40). Было показано, что эффект самокомпенсации ошибок наблюдается, если все линейные комбинации q_i в (1.40) равны или близки к нулю. Эти линейные комбинации являются скалярными произведениями вектора Δ с собственными векторами гессиана функционала MF , которые соответствуют собственным значениям гессиана функционала MF , заметно отличным от нуля. Предположим, что все эти собственные векторы принадлежат подпространству, состоящему из собственных векторов гессиана функционала Φ_j . Тогда это будет означать, что на функционал качества MF не влияют ошибки $\delta d_1, \dots, \delta d_j$, то есть будет наблюдаться эффект самокомпенсации ошибок напыления. Условие принадлежности собственных векторов гессиана функционала качества MF подпространству, состоящему из собственных векторов гессиана функционала невязки Φ_j , является *достаточным условием существования эффекта самокомпенсации*.

1.2.3 Оценки степени корреляции и эффекта самокомпенсации ошибок напыления

Основной вывод предыдущего подпараграфа состоит в том, что в значительной степени эффект самокомпенсации ошибок напыления проявляется тогда, когда ошибки в толщинах напыляемых слоёв многослойного покрытия коррелируют друг с другом в результате широкополосного оптического контроля таким образом, что получаемый вектор ошибок Δ оказывается практически

ортогональным к собственным векторам гессиана функционала MF , соответствующим его заметно отличным от нуля собственным значениям.

Для измерения степени эффекта самокомпенсации ошибок толщин слоёв, который потенциально может иметь место при напылении произвольного многослойного покрытия с широкополосным оптическим контролем, необходимы оценки, позволяющие предсказать степень корреляции ошибок, которые могут быть допущены в процессе напыления, при наличии данных о напыляемом покрытии и данных о параметрах широкополосного контроля. Поскольку ошибки, допускаемые в толщинах напыляемых слоёв многослойного покрытия, определяются большим количеством случайных факторов различной природы, подход, используемый для разработки таких оценок, должен быть основан на статистическом анализе большего количества векторов ошибок, получаемых в процессе широкополосного контроля. Такие наборы векторов ошибок можно получить в ходе многочисленных вычислительных производственных экспериментов (см. главу 2, параграф 2.3).

В соответствии с предыдущим подпараграфом и работами [13—15] предлагается ввести оценку степени корреляции ошибок толщин в виде

$$\alpha = \|W\Delta\|^2 / \left\langle \|W\Delta\|^2 \right\rangle_{\|\Delta\|=1}, \quad (1.44)$$

где Δ — вектор ошибок, допущенных в процессе напыления многослойного покрытия с широкополосным контролем толщин слоёв, а $\left\langle \|W\Delta\|^2 \right\rangle_{\|\Delta\|=1}$ — среднее значение квадрата нормы $\|W\Delta\|^2$ на единичной сфере ($\|\Delta\| = 1$). В случае сильной корреляции ошибок толщин значение α будет существенно меньше 1.

Далее перейдём к описанию оценок степени проявления эффекта самокомпенсации ошибок в толщинах напыляемых слоёв оптических покрытий, представленных в работе [15]. Поскольку этот эффект вызван корреляцией ошибок в толщинах слоёв, естественно оценить его наличие, сравнив с влиянием некоррелированных ошибок в толщинах слоёв на спектральные характеристики оптического покрытия. Для этого будем использовать функционал качества (1.36), который введён для постановки обратной задачи проектирования.

Обозначим $\delta MF(\Delta)$ как вариацию функционала качества, вызванную наличием ошибок Δ в толщинах слоёв рассматриваемого оптического покрытия. Сравним вариации этого функционала, вызванные наличием коррелированных и некоррелированных ошибок в толщинах слоёв. Некоррелированные ошибки в

наибольшей степени соответствуют стабильным производственным процессам с контролем по кварцевым кристаллам. Общеизвестно, что при использовании таких методов напыления наилучшая точность контроля толщины слоя составляет около 1 % от запланированных значений. Обозначим $\mathbb{E}[\delta MF]$ как математическое ожидание вариации функционала качества, рассчитанное для большого числа векторов случайных ошибок Δ , которые заданы таким образом, что их координаты δd_j , $j = \overline{1, N}$ (N — количество слоёв оптического покрытия) распределены нормально с нулевым математическим ожиданием и стандартным отклонением, равным 1 % от теоретически запланированной толщины соответствующего слоя. Таким образом, $\mathbb{E}[\delta MF]$ — оценка влияния некоррелированных ошибок.

Для вектора коррелированных ошибок Δ , полученного в процессе широкополосного оптического контроля, вариация функционала качества $\delta MF(\Delta)$ будет зависеть от нормы вектора Δ . В целом, при более низкой норме вектора ошибок следует ожидать более низких значений вариаций функционала качества (1.36). Для более объективного сравнения коррелированных и некоррелированных ошибок толщин целесообразно рассматривать в обоих случаях векторы ошибок одной и той же нормы. По этой причине все векторы коррелированных ошибок нормализуются так, чтобы их нормы составляли 1 % от нормы вектора толщин слоёв теоретической конструкции покрытия $\{d_1^t, \dots, d_N^t\}$, подобно векторам некоррелированных ошибок. При такой нормировке сила эффекта самокомпенсации ошибок для конкретного вектора коррелированных ошибок будет оцениваться как

$$S = \frac{\mathbb{E}[\delta MF]}{\delta MF(\Delta)}. \quad (1.45)$$

Как уже было сказано, положительный эффект самокомпенсации существует тогда, когда ошибки в толщинах напыляемых слоёв коррелируют друг с другом в результате широкополосного оптического контроля. Но эта корреляция также приводит к негативному кумулятивному эффекту накопления ошибок в толщинах всех слоёв, который может разрушить спектральные характеристики напыляемого многослойного покрытия. Поэтому для более точной оценки положительного эффекта самокомпенсации ошибок необходимо также учесть величины самих ошибок. С теоретической точки зрения, в первом приближении вариация функционала $\delta MF(\Delta)$ растёт линейно с увеличением

нормы вектора ошибок Δ . Сила эффекта самокомпенсации ошибок S вычисляется в (1.45) для векторов Δ с нормами, равными $0.01D$, где D — норма вектора теоретических толщин. Для учёта норм векторов ошибок рассмотрим математическое ожидание норм смоделированных векторов коррелированных ошибок $\mathbb{E} [\|\Delta\|]$. Используя это значение, введём «эффективную» оценку силы эффекта самокомпенсации ошибок, учитывающую негативный кумулятивный эффект, как

$$S_{eff} = 0.01D \frac{\mathbb{E} [S]}{\mathbb{E} [\|\Delta\|]}. \quad (1.46)$$

На практических примерах результатов реальных и вычислительных экспериментов было показано (см. [27]), что описанный подход к оценке степени корреляции ошибок в толщинах напыляемых слоёв и вышеописанный способ оценки степени эффекта самокомпенсации этих ошибок полностью согласуются с описанными выше математическими результатами в подпараграфе 1.2.2 и будут использоваться в данном диссертационном исследовании для тестирования математического метода высокоэффективного моделирования коррелированных ошибок напыления на примерах реальных многослойных покрытий (см. параграфы 2.3 и 2.4).

1.3 Обратная задача определения толщин слоёв напылённого многослойного покрытия

Как было сказано ранее, для создания высококачественных многослойных покрытий, напыляемых с широкополосным оптическим контролем толщин слоёв, необходимо разрабатывать подходы для борьбы с кумулятивным накоплением ошибок напыления, которые будут учитывать ошибки, допущенные в процессе напыления предыдущих слоёв покрытия [16; 28—31]. Такой учёт реализуется путём решения обратной задачи определения фактической толщины уже напылённых слоёв оптического покрытия, а затем полученные значения толщин используются для корректировки параметров напыления, повторной калибровки устройств и улучшения процедуры контроля толщины отдельных слоёв. В данном параграфе, основанном на материалах работ [16—18], описываются наиболее известные и широко применяемые S - и T -алгоритмы для

решения обратной задачи определения толщин слоёв напылённого многослойного покрытия по измеренным спектральным характеристикам покрытия.

1.3.1 S - и T -алгоритмы

В подпараграфе 1.2.1 был выписан функционал невязки (1.37), по которому происходит широкополосный оптический контроль напыления слоя многослойного покрытия. Очевидно, для разработки алгоритма решения обратной задачи определения толщин уже напылённых слоёв необходимо использовать аналогичный функционал невязки. В зависимости от того, какие используются данные спектров и какой набор толщин определяется в результате решения обратной задачи, существуют два наиболее известных алгоритма: S - и T -алгоритмы.

Основная идея S -алгоритма заключается в последовательном определении толщин напылённых слоёв таким образом, что с учётом введённых ранее обозначений на каждом шаге работы алгоритма определяется толщина d_j слоя с номером j путём минимизации следующего функционала невязки:

$$\Phi_j(d_j) = \sum_{\{\lambda\}} \left[T_j^{meas}(\lambda) - T(\hat{d}_1, \dots, \hat{d}_{j-1}, d_j, \lambda) \right]^2, \quad (1.47)$$

где $\hat{d}_1, \dots, \hat{d}_{j-1}$ — зафиксированные значения толщин, найденные на предыдущих шагах работы S -алгоритма, $T_j^{meas}(\lambda)$ — спектр пропускания напыляемого покрытия, измеренный в конце напыления j -го слоя, а $T(\dots)$ — функция, позволяющая рассчитать теоретический спектр пропускания (см. параграф 1) для оптического покрытия с толщинами слоёв $\hat{d}_1, \dots, \hat{d}_{j-1}, d_j$ для длин волн λ . Наглядная работа S -алгоритма отображена на рисунке 1.5.

В ходе работы S -алгоритма на каждом j -ом шаге определяется толщина j -го слоя d_j путём решения обратной задачи восстановления спектральной характеристики покрытия, которая соответствует спектру пропускания T_j^{meas} , измеренному после напыления j -го слоя. То есть на каждом шаге S -алгоритма решается однопараметрическая задача минимизации функционала невязки (1.47), что, в свою очередь, свидетельствует о линейной сложности

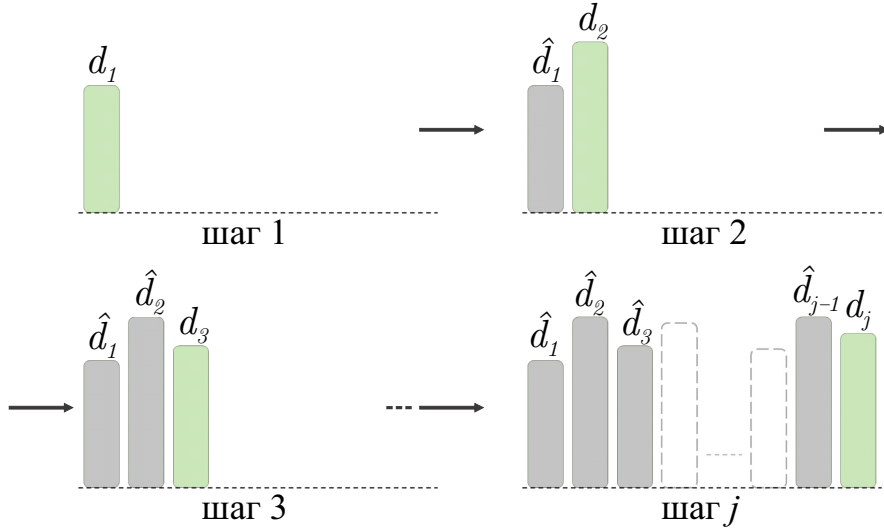


Рисунок 1.5 — Схема работы S -алгоритма; зелёные столбики обозначают толщины определяемые на данном шаге алгоритма, а серые столбики обозначают зафиксированные толщины, которые были определены на предыдущих шагах алгоритма

S -алгоритма по количеству слоёв. Благодаря этому S -алгоритм является достаточно быстрым алгоритмом решения обратной задачи определения толщин слоёв напылённого многослойного покрытия. Однако на практике при использовании S -алгоритма для определения толщин слоёв оптических покрытий с количеством слоёв больше 20-30 результаты оказываются неудовлетворительными из-за кумулятивного накопления ошибок напыления. Эту проблему удаётся решить с помощью T -алгоритма.

Главная суть и отличие T -алгоритма от S -алгоритма заключается в использовании не только спектра пропускания T_j^{meas} , но и всех ранее измеренных спектров $T_1^{meas}, \dots, T_{j-1}^{meas}$. При этом на j -ом шаге работы T -алгоритма определяется не только толщина j -го слоя d_j , но и переопределяются толщины $d_1, \dots, d_{j-1}$ всех предыдущих слоёв. Математически T -алгоритм формулируется через постановку многопараметрической задачи минимизации функционала невязки (1.48) на каждом j -ом шаге алгоритма.

$$\Phi_j(d_1, \dots, d_j) = \sum_{i=1}^j \Phi_i^p(d_1, \dots, d_i) = \sum_{i=1}^j \sum_{\{\lambda\}} [T_i^{meas}(\lambda) - T(d_1, \dots, d_i, \lambda)]^2. \quad (1.48)$$

Здесь Φ_i^p — парциальный функционал невязки Φ_j , T_i^{meas} — спектр пропускания напыляемого покрытия, измеренный в конце напыления i -го слоя, а $T(\dots)$ — функция, позволяющая рассчитать теоретический спектр пропускания (см. па-

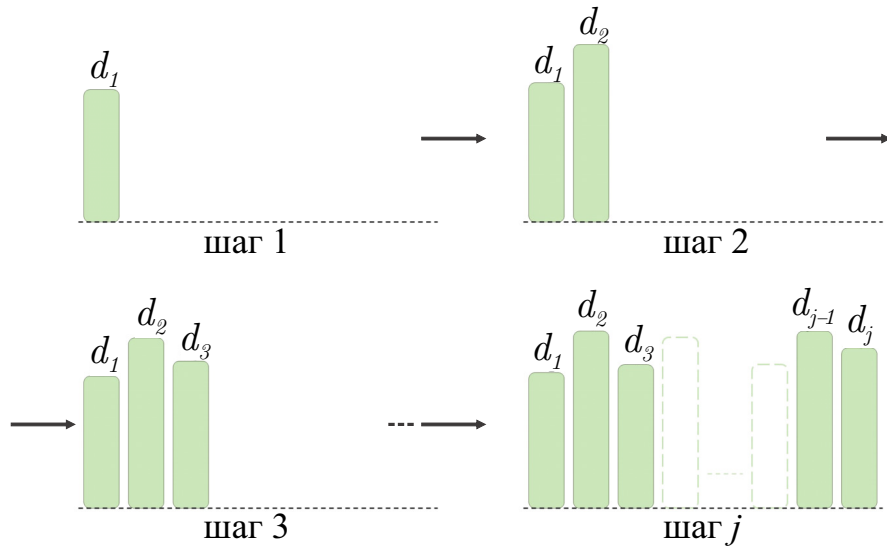


Рисунок 1.6 — Схема работы T -алгоритма; зелёные столбики обозначают толщины определяемые на данном шаге алгоритма, а серые столбики обозначают зафиксированные толщины, которые были определены на предыдущих шагах алгоритма

раграф 1) для оптического покрытия с толщинами слоёв $d_1, \dots, d_i$, где $i = \overline{1, j}$ для длин волн λ . Наглядная работа T -алгоритма отображена на рисунке 1.6. Исходя из того, как устроен функционал невязки (1.48), очевидно, что T -алгоритм имеет квадратичную сложность работы по количеству слоёв. Из-за этого он работает гораздо медленнее S -алгоритма, но на практике показывает заметно более качественные результаты решения обратной задачи, особенно для покрытий с количеством слоёв более 20-30, для которых явно выражен эффект кумулятивного накопления ошибок напыления. За счёт использования дополнительной априорной информации о спектрах $T_1^{meas}, \dots, T_{j-1}^{meas}$ удаётся определить толщины ранее напылённых слоёв более точно, избегая влияния эффекта кумулятивного накопления ошибок напыления.

Глава 2. Математические методы моделирования процессов напыления многослойных покрытий с широкополосным оптическим контролем

Как отмечалось ранее во введении, широкополосный оптический контроль [20; 21] приводит к корреляции ошибок в толщинах напыляемых слоёв в процессе производства многослойных покрытий, что, в свою очередь, является причиной эффекта кумулятивного накопления этих ошибок в толщинах всех напыляемых слоёв [22]. Такой эффект препятствует созданию качественных оптических покрытий с большим количеством слоёв. Несмотря на это, имеется ряд многослойных покрытий, для которых существенное отклонение толщин напылённых слоёв от теоретически заданных не приводит к разрушению покрытия в смысле несоответствия спектральных характеристик целевым значениям. Наоборот, полученное многослойное оптическое покрытие полностью удовлетворяет целевым спектральным требованиям. Как указывалось во введении, данный эффект заключается в специфичном распределении ошибок в толщинах напылённых слоёв, при котором происходит самокомпенсация этих ошибок в процессе напыления, и называется эффектом самокомпенсации ошибок. Предсказание наличия данного эффекта позволяет заранее выбрать оптимальную стратегию для создания многослойного оптического покрытия с точки зрения надёжности контроля толщин слоёв.

Для исследования вышеописанных эффектов необходим инструмент, позволяющий заблаговременно оценивать влияние этих эффектов на производство конкретного оптического покрытия и разрабатывать подходы для повышения качества широкополосного оптического контроля напыления многослойных покрытий [32]. Исходя из этого, структура данной главы построена следующим образом. В параграфе 2.1 подробно описаны методы математического моделирования процессов напыления многослойного покрытия с широкополосным оптическим контролем с возможностью учёта основных параметров реальной установки для напыления. Результаты параграфа 2.1 опубликованы в работе автора [1]. В параграфе 2.2 проведено детальное исследование эффекта кумулятивного накопления ошибок в толщинах напыляемых слоёв с использованием математического моделирования напыления покрытия, имеющего практическое значение. Предлагаются два подхода, позволяющих предотвратить влияние этого эффекта непосредственно в процессе создания оптического покрытия.

Первый основан на уточнении толщин напылённых слоёв для повышения качества контроля толщины текущего напыляемого слоя (подпараграф 2.2.1), а второй основан на регуляризации контроля толщины слоя, при котором используется априорная информация о параметрах установки напыления и толщинах напыляемых слоёв (подпараграф 2.2.2). Результаты параграфа 2.2 опубликованы в работах автора [1; 2].

Исследование корреляции и эффекта самокомпенсации ошибок в толщинах напылённых слоёв многослойных покрытий основывается на анализе распределения самих ошибок, имеющих случайную природу, и является статистическим. Поэтому в параграфе 2.3 описывается метод высокоэффективного математического моделирования большого количества коррелированных ошибок напыления за приемлемое время, который опубликован в работе автора [3]. С помощью данного метода моделирования ошибок напыления в параграфе 2.4 проводится исследование корреляции и эффекта самокомпенсации ошибок толщин напылённых слоёв. Дополнительно в подпараграфе 2.4.1 демонстрируется применение данного метода для анализа различных стратегий широкополосного оптического контроля с рассмотрением нескольких многослойных покрытий, имеющих практическую значимость. В подпараграфе 2.4.2 проводится теоретическое исследование оценки степени корреляции, которая вычисляется с использованием высокоэффективного метода моделирования ошибок напыления. Результаты этих исследований опубликованы в работах автора [3—5].

В совокупности результаты, описанные в данной главе, опубликованы в работах автора [1—5].

2.1 Алгоритм математического моделирования напыления многослойных покрытий

Для разработки подходов, повышающих качество широкополосного контроля напыления многослойных оптических покрытий, в параграфе описывается метод математического моделирования реальных физических процессов напыления покрытий. Математическое моделирование учитывает основные экспериментальные параметры, позволяя достаточно точно воспроизводить на-

турный эксперимент напыления произвольного многослойного покрытия. Оно представляет собой следующий алгоритм, опубликованный в работе автора [1]:

0. На основе известных методов синтеза оптических покрытий, описанных в работах [33—40], определяется теоретическая конструкция толщин слоёв покрытия $d_1^t, \dots, d_N^t$ (толщины обозначаются верхним индексом « t » от слова **t**heoretical) (N — число слоёв покрытия), соответствующая целевым значениям коэффициентов пропускания и отражения для интересующего покрытия, напыляемого на подложку толщиной D . Показатели преломления каждого слоя и подложки заданы.
1. Полагается $j \equiv 1$ (j — номер напыляемого слоя).
2. Проводится широкополосный контроль процесса напыления j -го слоя толщиной d_j в дискретный набор времен $\{\tau_m\}$: $\tau_m = \tau m$, где τ — шаг по времени, с которым выполняется измерение спектрального коэффициента пропускания. При этом предполагается, что уже напылён $j - 1$ слой с толщинами $d_1^a, \dots, d_{j-1}^a$ (толщины обозначаются верхним индексом « a » от слова **a**ctual). Отметим, что из-за ошибок в толщинах уже напылённых слоёв и погрешностей контроля напыления на основе минимума функционала невязки на каждом слое данные толщины будут отличаться от теоретических значений $d_1^t, \dots, d_{j-1}^t$. Моделирование широкополосного контроля процесса напыления состоит из следующих шагов:
 - а) Положить $m \equiv 1$ (m — индекс времени напыления).
 - б) Вычислить толщину текущего напыляемого слоя d_j^a как: $d^a(\tau_m) = d^a(\tau_{m-1}) + r_m \tau$ (с учётом того, что $d^a(\tau_0) = 0$), где $r_m = r + \delta r(\tau_m)$ (r — скорость напыления слоя, $\delta r(\tau_m)$ — случайный шум, распределённый как $\mathcal{N}(0, \sigma_r)$). Также в процессе моделирования очередное r_m переопределяется ближайшим к нему значением из сегмента $[r - 3\sigma_r; r + 3\sigma_r]$.
 - в) Используя формулы из подпараграфов 1.1.2 и 1.1.3, вычислить спектральный коэффициент пропускания $T(d_1^a, \dots, d_{j-1}^a, d^a(\tau_m), \lambda)$, соответствующий контролируемому многослойному покрытию в момент времени τ_m в процессе напыления j -го слоя. С учётом наличия погрешностей различного рода в ходе напыления определим

«измеренный» спектральный коэффициент пропускания как

$$T^{meas}(d_1^a, \dots, d_{j-1}^a, d^a(\tau_m), \lambda, \tau_m) = \\ T(d_1^a, \dots, d_{j-1}^a, d^a(\tau_m), \lambda) + \delta T_{rand}^{meas}(\lambda, \tau_m) + \delta T_{fluc}^{meas}(\tau_m) + \delta T_{syst}^{meas},$$

где $\delta T_{rand}^{meas}(\lambda, \tau_m)$ — случайный шум (некоррелированная по λ ошибка измерения, распределённая как $\mathcal{N}(0, \sigma_{rand}^{meas})$), $\delta T_{fluc}^{meas}(\tau_m)$ — случайный сдвиг (одинаковая для всех λ случайная флуктуация коэффициента пропускания, распределённая как $\mathcal{N}(0, \sigma_{fluc}^{meas})$) и δT_{syst}^{meas} — систематическая ошибка, аналогично распределённая как $\mathcal{N}(0, \sigma_{syst}^{meas})$.

- г) На основе минимума функционала невязки теоретического и «измеренного» спектров коэффициента пропускания определить напылённую на текущий момент времени толщину $d^{est}(\tau_m)$ (толщины обозначаются верхним индексом «*est*» от слова **estimated**) j -го слоя:

$$d^{est}(\tau_m) = \underset{d}{\operatorname{argmin}} \sum_{\{\lambda\}} \left[T(d_1^t, \dots, d_{j-1}^t, d, \lambda) - \right. \\ \left. - T^{meas}(d_1^a, \dots, d_{j-1}^a, d^a(\tau_m), \lambda, \tau_m) \right]^2.$$

Если $d_j^t < d^{est}(\tau_m)$, то процесс напыления j -го слоя закончен: $d_j^{est} \equiv d^{est}(\tau_m)$, $d_j^a \equiv d^a(\tau_m)$ и тогда переходим к пункту 3.

- д) Располагая $(\tau_i, d^{est}(\tau_i))$, где $i = \overline{1, m}$, предсказать время остановки процесса напыления текущего слоя. Используя информацию о распределении скорости напыления (см. пункт 2б), аппроксимировать данные $(\tau_i, d^{est}(\tau_i))$ линейной зависимостью $y = r_m^{est}x + d_m^{shift}$ для определения коэффициентов r_m^{est} и d_m^{shift} . Как и в пункте 2б переопределить r_m^{est} ближайшим к нему значением из диапазона $[r - 3\sigma_r; r + 3\sigma_r]$. Определить время, через которое необходимо прекратить процесс напыления слоя требуемой толщины d_j^t , как

$$\Delta\tau = \frac{d_j^t - (r_m^{est}\tau_m + d_m^{shift})}{r_m^{est}}.$$

Если $\Delta\tau > \tau$, то положить $m \equiv m+1$ и перейти к пункту 2б. В альтернативном случае прекратить процесс напыления через

время $\Delta\tau$ и пересчитать итоговую толщину d_j^{est} напыляемого j -го слоя с учётом предстоящей остановки как

$$d^{est}(\tau_m) = \underset{d}{argmin} \sum_{\{\lambda\}} \left[T(d_1^t, \dots, d_{j-1}^t, d, \lambda) - T^{meas}(d_1^a, \dots, d_{j-1}^a, d^a(\tau_m + \Delta\tau), \lambda, \tau_m + \Delta\tau) \right]^2.$$

При этом также пересчитать $d_j^a := d^a(\tau_m + \Delta\tau)$ по формулам из пункта 2б.

3. Аналогично пункту 2в учитываются возможные погрешности в определении фактической толщины напылённого слоя δd_j^a и обновляется её значение как $d_j^a \equiv d_j^a + \delta d_j^a$, где δd_j^a — случайная ошибка, распределённая как $\mathcal{N}(0, \sigma_{add})$. Далее полагается $j \equiv j + 1$ и происходит переход к пункту 2.

По окончании моделирования процесса напыления многослойного покрытия имеем теоретические толщины $d_1^t, \dots, d_N^t$, которые были известны изначально, «оценочные» толщины $d_1^{est}, \dots, d_N^{est}$, которые найдены в процессе моделирования широкополосного контроля толщины каждого слоя, и «истинные» толщины $d_1^a, \dots, d_N^a$, которые соответствуют тому, что «в действительности» было напылено. Данный набор толщин предоставляет возможность проанализировать результаты напыления и надёжность широкополосного контроля толщин слоёв многослойного покрытия. Тем самым данное математическое моделирование является инструментом для тестирования и разработки подходов, направленных на повышение качества контроля напыления многослойного покрытия.

2.2 Исследование эффекта кумулятивного накопления ошибок напыления

В данном параграфе, результаты которого опубликованы в статьях автора [1; 2], демонстрируется работа математического моделирования процесса напыления многослойного покрытия, имеющего практическое значение. На конкретном примере моделирования напыления данного покрытия исследуется эффект кумулятивного накопления ошибок в толщинах напыляемых слоёв. Излагается детальный анализ и механизм накопления ошибок напыления. На

основе этого предлагаются численные методы, направленные на борьбу с эффектом кумулятивного накопления ошибок напыления.

2.2.1 Переопределение толщин напылённых слоёв в процессе контроля напыляемого покрытия

Исследование эффекта кумулятивного накопления ошибок напыления осуществляется на примере математического моделирования реального 40-слойного оптического покрытия типа «горячее зеркало» [41]. Спектральные характеристики покрытия изображены на рисунке 2.1. Для моделирования значение временного шага принималось $\tau = 1$ с, средняя скорость напыления каждого слоя принималась $r = 0.5$ нм/с, а дисперсии ошибок в модельных экспериментальных данных имели следующие значения:

- случайная ошибка с $\sigma_{rand}^{meas} = 1$ %
- флуктуационная ошибка $\sigma_{fluc}^{meas} = 0.5$ %
- систематическая ошибка с $\sigma_{syst}^{meas} = 0$ %
- нестабильность скорости напыления с $\sigma_r = 0.2$ нм/с (40 % от r)
- аддитивная ошибка с $\sigma_{add} = 2$ нм

В процессе напыления подобного многослойного покрытия может возникать кумулятивный эффект накопления ошибок толщин слоёв из-за наличия различных погрешностей в измерениях характеристик покрытия. Данный эффект явно наблюдается в наших вычислительных экспериментах. Давайте детально взглянем, например, на процесс напыления 28-го слоя покрытия (см. рисунок 2.2). Полное время напыления данного слоя: $\tau_{359} + \Delta\tau = 359,6$ с. На рисунке можно увидеть резкое изменение в значениях толщины $d^{est}(\tau_m)$ для $\tau_m \in [198, 202]$ с. На основе большого количества модельных экспериментов по напылению текущего «горячего зеркала», а также других многослойных покрытий, можно заключить, что подобный эффект в подавляющем большинстве случаев не наблюдается при напылении первых слоёв покрытия. Другими словами, такое резкое изменение значения d^{est} происходит именно с ростом числа напыляемых слоёв, примерно после 20-го слоя. Наряду с этим также наблюдается расхождение в значениях «истинных» напылённых d_j^a (толщин и теоретических d_j^t толщин, соответствующих целевым характеристикам напыляемого покрытия). Именно

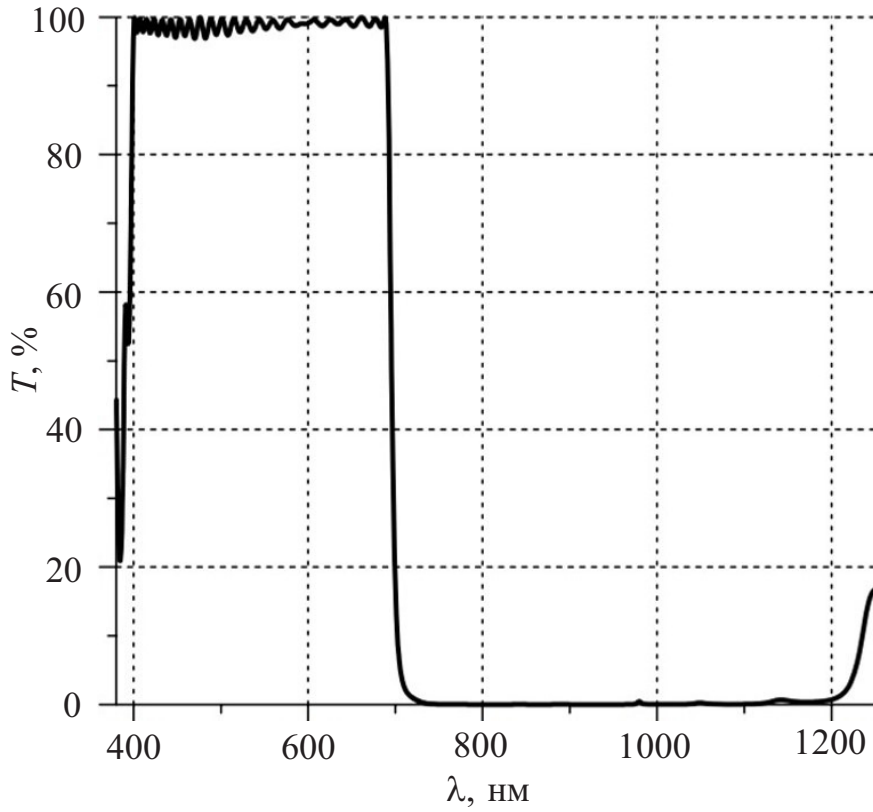


Рисунок 2.1 — Спектральные характеристики пропускания 40-слойного покрытия типа «горячее зеркало»

такое расхождение и называется кумулятивным эффектом накопления ошибок толщин слоёв напыляемого покрытия [42]. Последующие вычислительные эксперименты показывают, что резкое изменение значений d^{est} и отклонение «истинных» толщин слоёв от теоретических неразрывно связаны.

Более глубокие исследования показали, что причиной скачков d^{est} является особенность минимизации функционала невязки, который используется для определения $d^{est}(\tau_m)$ (см. пункт 2г). По мере напыления оптического покрытия значение функционала растёт вследствие увеличения расхождения между $T_{(m)}^{est}(\lambda)$ и $T_{(m)}^{meas}(\lambda)$ (здесь и далее используются обозначения $T_{(m)}^{est}(\lambda) \equiv T(d_1^t, \dots, d_{j-1}^t, d^{est}(\tau_m), \lambda)$, $T_{(m)}^{meas}(\lambda) \equiv T^{meas}(d_1^a, \dots, d_{j-1}^a, d^a(\tau_m), \lambda, \tau_m)$). Данный эффект чётко видно на рисунке 2.3. Из-за ошибок напыления в процессе контроля обе зависимости содержат шумовые компоненты (осцилляции). Тем самым оптимизация функционала невязки непосредственно связана с тем, насколько плотно расположены осцилляции вдоль кривых функций $T_{(m)}^{est}(\lambda)$ и $T_{(m)}^{meas}(\lambda)$. Более того, плотность шума в этих функциях зависит от оптической толщины покрытия [11].

Поведение зависимостей $T_{(m)}^{est}(\lambda)$ и $T_{(m)}^{meas}(\lambda)$ начинает всё сильнее различаться с увеличением номера j очередного напыляемого слоя в силу накопления

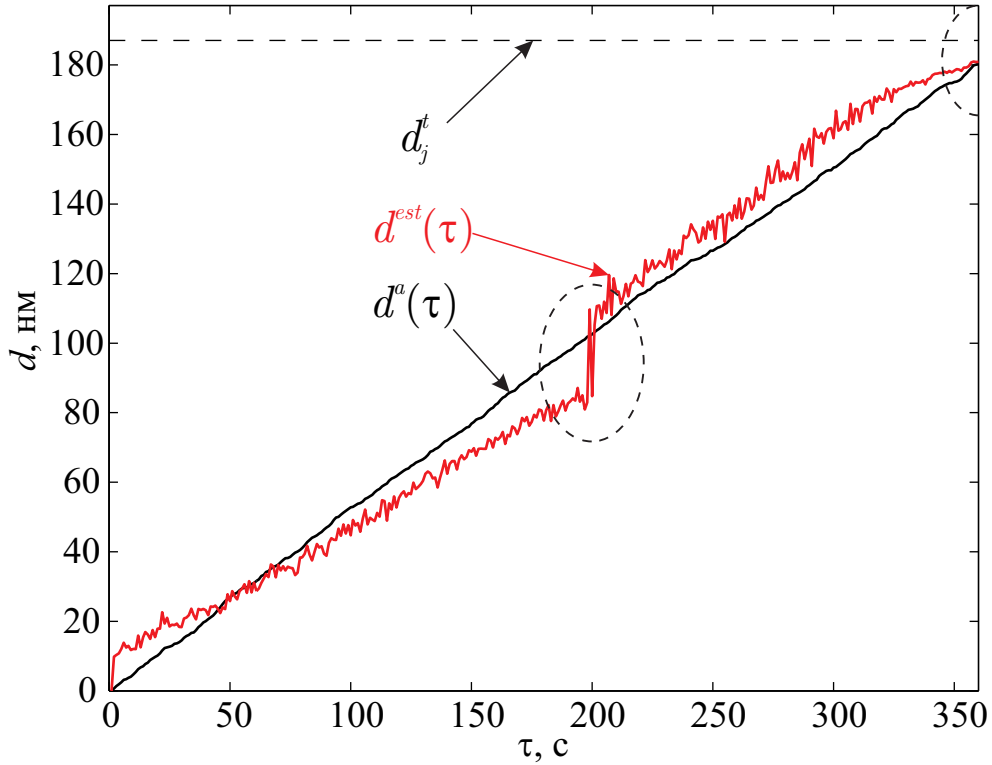


Рисунок 2.2 — Результат моделирования процесса напыления 28-го слоя 40-слойного покрытия типа «горячее зеркало» (пунктирными овалами отмечены особенности контроля процесса напыления)

общих ошибок в толщинах уже напылённых слоёв, то есть вследствие отклонения $d_1^a, \dots, d_{j-1}^a$ от $d_1^t, \dots, d_{j-1}^t$. Анализ проведённых вычислительных экспериментов приводит к выводу, что скачкообразные изменения d^{est} происходят именно из-за этих различий. Как было сказано ранее, d^{est} вычисляется путём минимизации функционала невязки. То есть в процессе напыления покрытия в определённые моменты времени d^{est} может резко измениться так, чтобы «подстроить» $T_{(m)}^{est}(\lambda)$ под шум в измеряемой спектральной характеристике $T_{(m)}^{meas}(\lambda)$. Этот эффект демонстрируется на рисунке 2.3, где видна разность между $T_{(m)}^{est}(\lambda)$ и $T_{(m)}^{meas}(\lambda)$ до и после скачка d^{est} .

Исходя из вышесказанного, стремительное увеличение несоответствия $T_{(m)}^{est}(\lambda)$ и $T_{(m)}^{meas}(\lambda)$ по мере напыления покрытия является главной причиной низкой точности контроля толщины растущего слоя. Более того, данное несоответствие связано с различием толщин реально напылённых слоёв $d_1^a, \dots, d_{j-1}^a$ от их теоретических значений $d_1^t, \dots, d_{j-1}^t$. Поэтому возможным способом улучшения процесса контроля может являться замена теоретических значений толщин в функционале невязки на $d_1^{ref}, \dots, d_{j-1}^{ref}$, которые будут более приближены к $d_1^a, \dots, d_{j-1}^a$. Подобный способ может быть построен на использовании в про-

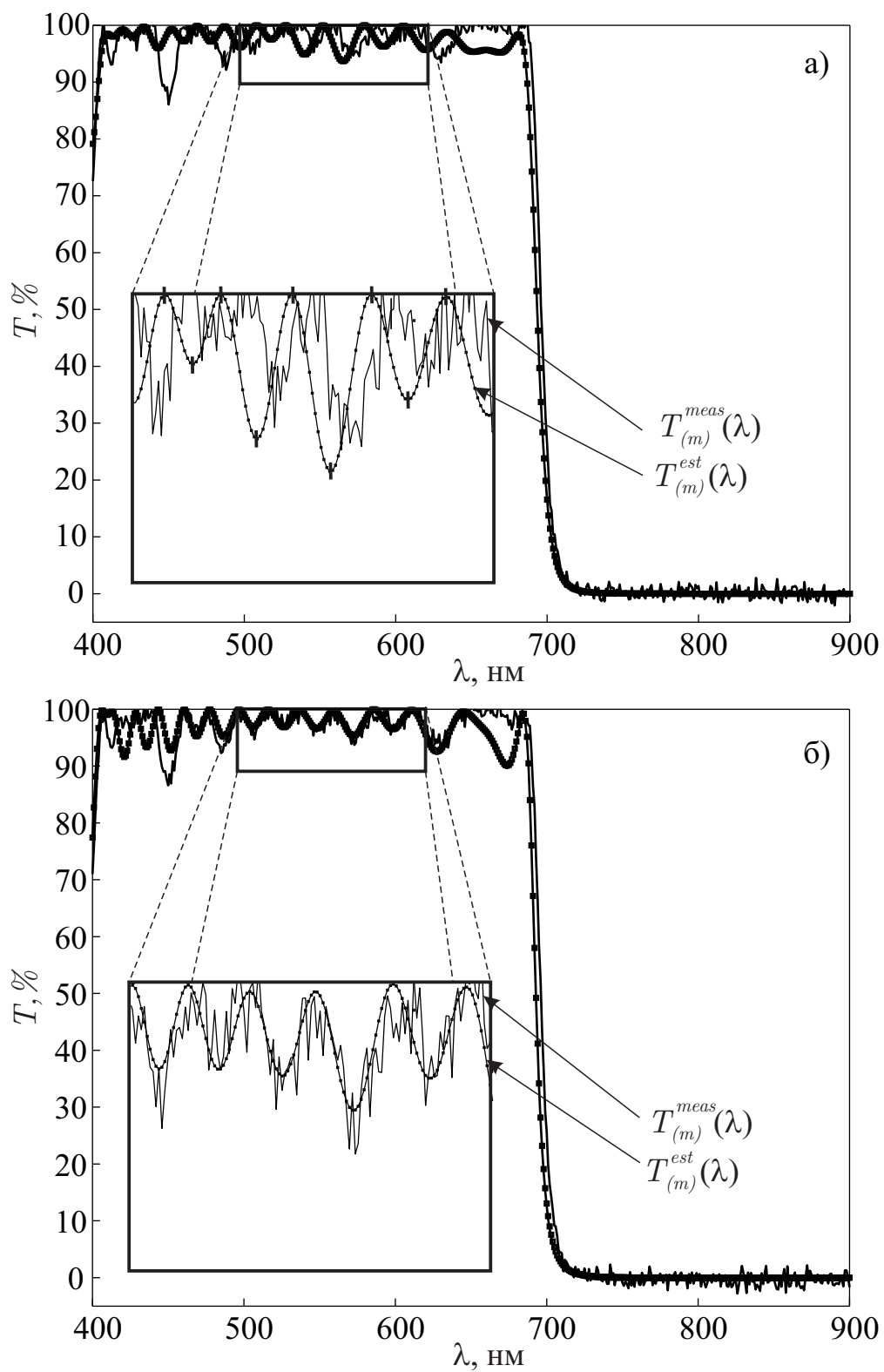


Рисунок 2.3 — «Оценочный» $T_{(m)}^{est}(\lambda)$ и измеренный $T_{(m)}^{meas}(\lambda)$ коэффициенты пропускания при моделировании напыления 28-го слоя: а) — для $m = 197$; б) — для $m = 198$

цессе напыления алгоритмов решения обратной задачи определения толщин уже напылённых слоёв покрытия (см. параграф 1.3). Дальнейшие результаты показывают, что для наших целей наиболее хорошо зарекомендовал себя известный T -алгоритм [43]. К тому же переопределение толщин выполняется лишь раз после напыления определённого числа слоёв J . Выбор конкретного значения J обсуждается далее.

Итак, очерченную выше проблему снижения точности контроля предлагается решать следующим образом. В пункте 2г в процессе моделирования вместо минимизации функционала

$$\sum_{\{\lambda\}} [T(d_1^t, \dots, d_{j-1}^t, d, \lambda) - T^{meas}(d_1^a, \dots, d_{j-1}^a, d^a(\tau_m), \lambda, \tau_m)]^2$$

будем минимизировать функционал

$$\sum_{\{\lambda\}} \left[T(d_1^{ref}, \dots, d_J^{ref}, d_{J+1}^t, \dots, d_{j-1}^t, d, \lambda) - T^{meas}(d_1^a, \dots, d_{j-1}^a, d^a(\tau_m), \lambda, \tau_m) \right]^2,$$

в котором значения J теоретических толщин $\{d_j^t\}$, $j = \overline{1, J}$ однократно пересчитываются с использованием T -алгоритма после напыления J -го слоя. На рисунках 2.4, 2.5 представлены результаты вычислительных экспериментов, полученных при переопределении толщин слоёв после моделирования процесса напыления 25-го слоя покрытия.

В ходе вычислительных экспериментов без использования переопределённых толщин слоёв было выяснено, что существенный рост ошибок начинался после напыления слоя $J = 25$. На рисунке 2.4 сразу отмечается влияние предложенного способа устранения кумулятивного эффекта ошибок толщин слоёв. Это хорошо видно, если сравнить рисунок 2.2. Оба рисунка представляют собой оценку 28-го слоя в процессе моделирования напыления покрытия. Тем самым резкие скачки d^{est} устранены. Это также выполняется для всех последующих слоёв.

Поскольку ошибки, возникающие в процессе напыления покрытия, являются следствием влияния различных случайных факторов, эффективность предложенного алгоритма оценивается с помощью статистического подхода. Были проведены две серии вычислительных экспериментов по напылению: с использованием предложенного алгоритма с переопределением слоёв при $J = 25$ и без него. Число экспериментов в каждой серии равно 10. На основе экспериментов были подсчитаны среднеквадратичные ошибки в толщинах напылённых

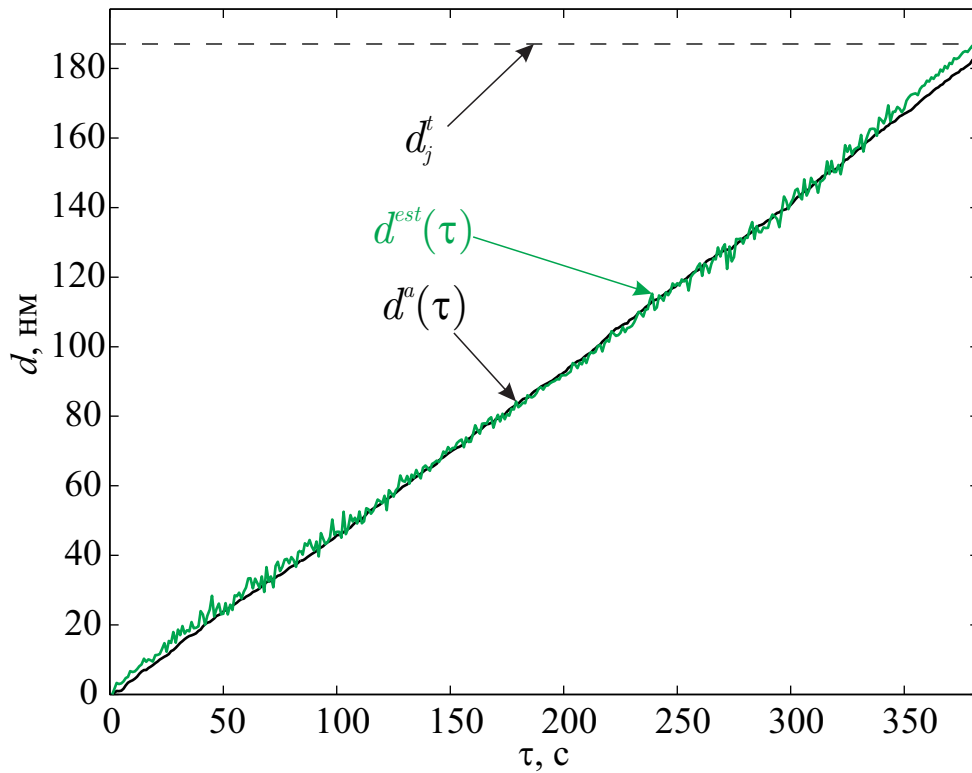
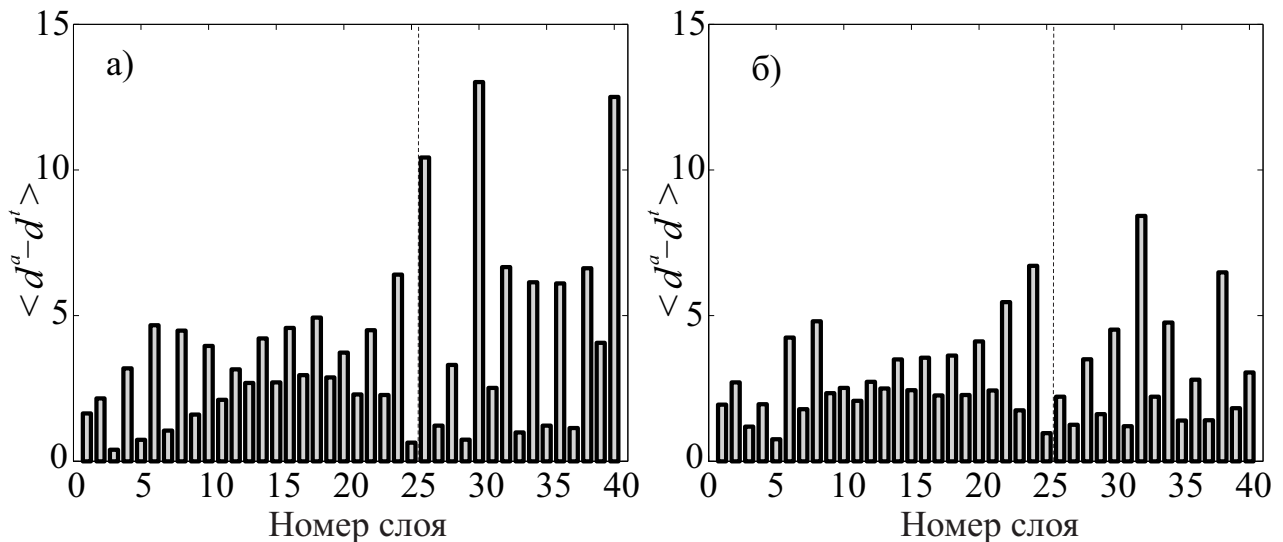


Рисунок 2.4 — Результат моделирования процесса напыления 28-го слоя 40-слойного покрытия типа «горячее зеркало» с учётом переопределения значений толщин первых 25-ти слоёв с использованием T -алгоритма



а) — изначальное моделирование процесса напыления;

б) — моделирование процесса напыления с однократным переопределением значений толщин первых 25-ти слоёв с помощью T -алгоритма.

Рисунок 2.5 — Диаграммы среднеквадратичных ошибок $\langle d^a - d^t \rangle$ в напылённых слоях

слоёв $\langle d^a - d^t \rangle$ (см. рисунок 2.5) для обоих вариантов. Из рисунка явно видно, что в результате применения метода с переопределением толщин первых 25-ти слоёв точность контроля действительно заметно повышается.

2.2.2 Регуляризация контроля толщины слоя напыляемого многослойного покрытия

Как указано в предыдущем подпараграфе 2.2.1, основная проблема, возникающая при прогнозировании момента завершения процесса напыления, заключается в том, что иногда оценочная толщина $d^{est}(\tau_m)$ может становиться нестабильной из-за кумулятивного эффекта ошибок толщин и ошибок в измеренном коэффициенте пропускания $T_{(m)}^{meas}(\lambda)$ (см. рисунок 2.2). Это приводит к значительному росту r_m^{est} , что, в свою очередь, приводит к недооценке $\Delta\tau$. В результате процесс напыления может быть прерван, и фактическая толщина d_j^a напылённого слоя j может быть значительно меньше, чем d_j^t . Для решения этой проблемы предлагается использовать регуляризующие алгоритмы, которые учитывают *априорную* информацию о скорости напыления r_m^{est} и ошибки в измеренном коэффициенте пропускания $T_{(m)}^{meas}(\lambda)$.

Первый подход к регуляризации — это выбор корректного множества поиска. Этот выбор может быть выполнен при наличии определённой *априорной* информации о скорости напыления r . Если вместо фактической скорости напыления r^a известна её оценка $r^a \in [r - \delta r, r + \delta r]$, оценочная толщина $d^{est}(\tau_m)$ может быть найдена как

$$d^{est}(\tau_m) = \underset{d \in D}{argmin} [\Phi(d, \tau_m)], \quad (2.1)$$

$$\text{где } D \equiv [d^{est}(\tau_{m-1}) + (r - \delta r)\tau, d^{est}(\tau_{m-1}) + (r + \delta r)\tau],$$

а функционал $\Phi(d, \tau_m)$ равен

$$\Phi(d, \tau_m) = \sum_{\{\lambda\}} \left[T(d_1^t, \dots, d_{j-1}^t, d, \lambda) - T_{(m)}^{meas}(\lambda) \right]^2. \quad (2.2)$$

В этом случае задача определения $d^{est}(\tau_m)$ является корректной, и нам не нужно знать об ошибках в $T_{(m)}^{meas}(\lambda)$. Результаты тестирования этого подхода представлены на рисунке 2.6 для 40-слойного «горячего зеркала» из предыдущего

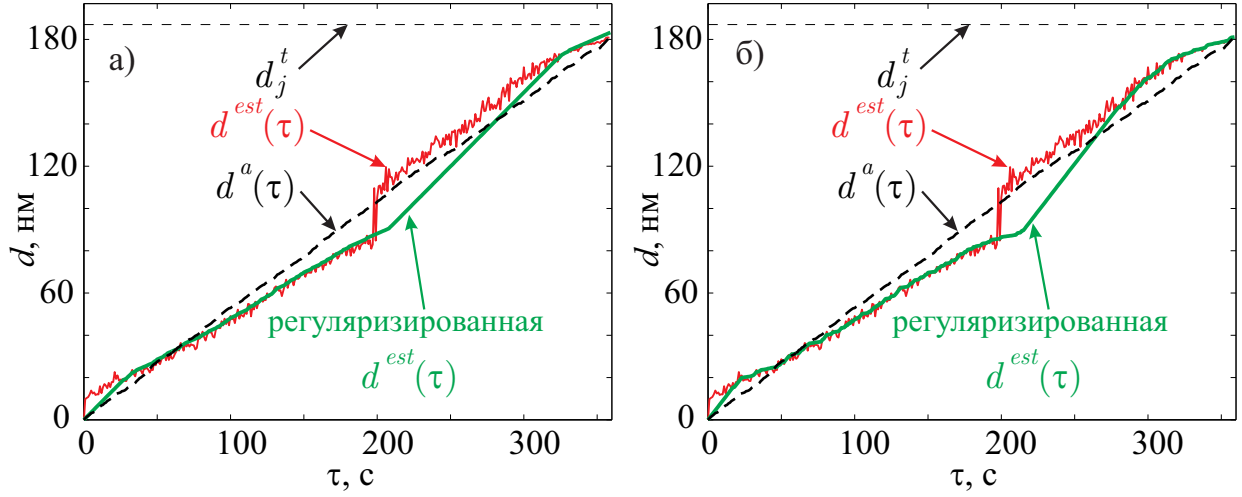


Рисунок 2.6 — Результаты регуляризации выбора корректного множества поиска D для функционала (2.1) при моделировании напыления 28-го слоя 40-слойного покрытия типа «горячее зеркало» при $r = 0.5$: а) — для $\delta r = 0.2$; б) — для $\delta r = 0.4$

подпараграфа. Два других подхода не предполагают строгих ограничений на скорость напыления, но используют оценку точности измерения спектральных характеристик. Так второй подход основан на предположении, что оценочная скорость напыления $r_m^{est} \propto (d^{est}(\tau_m)^\alpha - d^{est}(\tau_{m-1})) / \tau$ должна быть близка к известному значению r . Это приводит к следующему функционалу А. Н. Тихонова [44]:

$$d^{est}(\tau_m)^\alpha = \underset{d \in R^1}{argmin} \left[\Phi(d, \tau_m) + \alpha |d - d^{est}(\tau_{m-1}) - r \cdot \tau|^2 \right]. \quad (2.3)$$

В третьем подходе используется предположение, что $d^{est}(\tau_m)^\alpha$ должна стремиться к d_m^{pred} , где $d_m^{pred} = r \tau_m + d_{m-1}^{shift}$, с функциональным

$$d^{est}(\tau_m)^\alpha = \underset{d \in R^1}{argmin} \left[\Phi(d, \tau_m) + \alpha |d - r \cdot \tau_m - d_{m-1}^{shift}|^2 \right]. \quad (2.4)$$

Для любого $\alpha > 0$ существует экстремаль функционала А. Н. Тихонова $d^{est}(\tau_m)^\alpha$, обеспечивающая его минимум. Выбор параметра регуляризации α может быть сделан на основе обобщённого принципа невязки [44; 45]. Этот выбор должен быть согласован с ошибками $\delta T_{(m)}^{meas}(\lambda)$ входных данных $T_{(m)}^{meas}(\lambda)$ и мерой несоответствия $\mu(\tau_m) = \Phi(d^{est}(\tau_m)^{\alpha=0}, \tau_m)$. Пусть известна интегральная оценка погрешностей измерений: $\|\delta T_{(m)}^{meas}(\lambda)\| < \Delta T_{(m)}^{meas}$. Тогда параметр

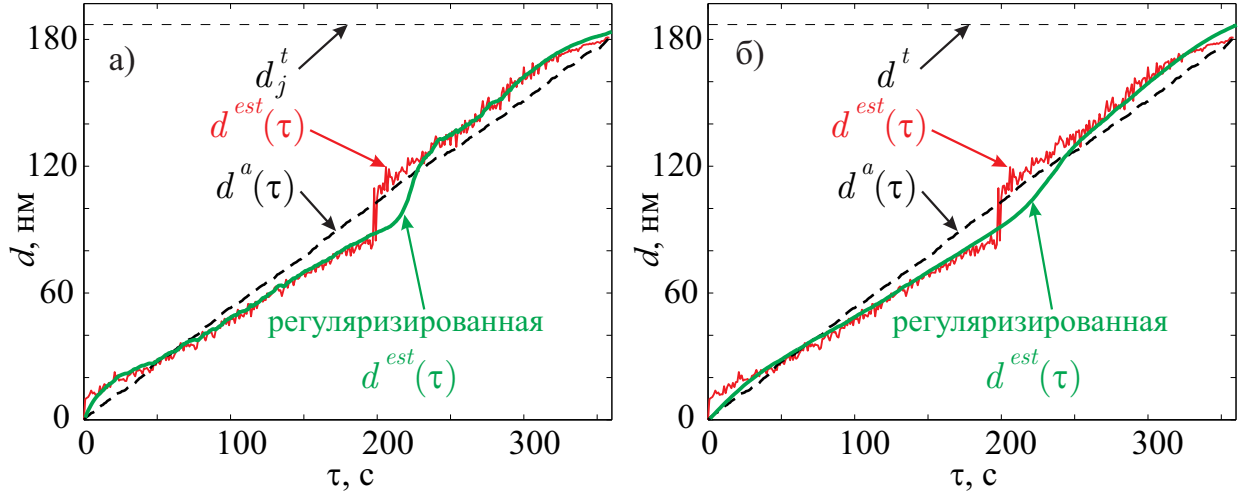


Рисунок 2.7 — Результаты регуляризации для функционала (2.3) при моделировании напыления 28-го слоя 40-слойного покрытия типа «горячее зеркало»:

а) — для $\alpha = 40$; б) — для $\alpha = 200$

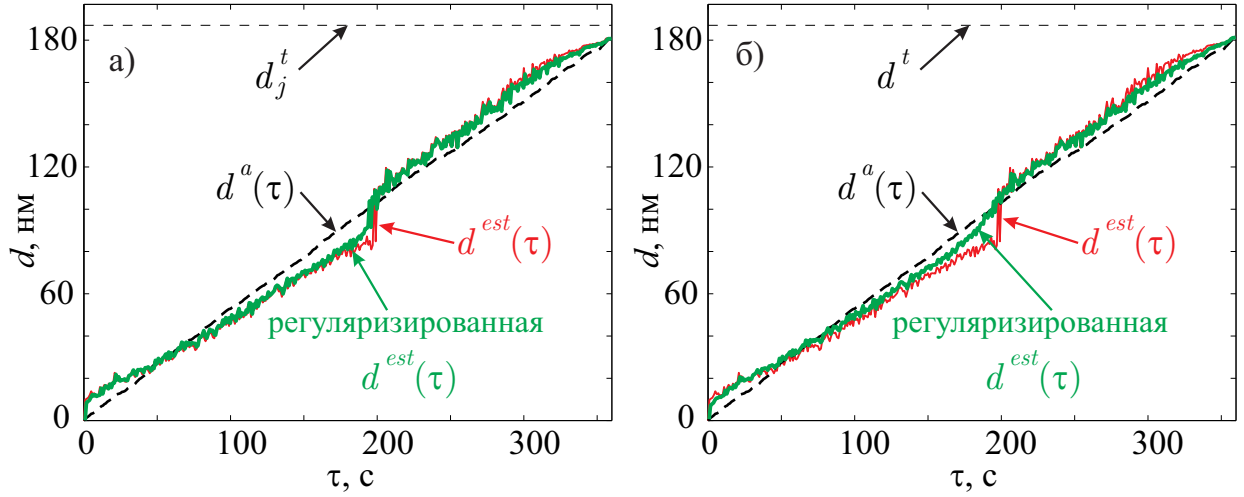


Рисунок 2.8 — Результаты регуляризации для функционала (2.4) при моделировании напыления 28-го слоя 40-слойного покрытия типа «горячее зеркало»:

а) — для $\alpha = 1$; б) — для $\alpha = 3$

$\alpha = \alpha(\Delta T_{(m)}^{meas})$ выбирается в соответствии с обобщённым принципом невязки:

$$\rho(\alpha) = 0,$$

$$\text{где } \rho(\alpha) = \Phi(d^{est}(\tau_m)^\alpha, \tau_m) -$$

$$- \sum_{\{\lambda\}} (\Delta T_{(m)}^{meas})^2 - \mu(\tau_m),$$

а значение $d^{est}(\tau_m)^\alpha$ стремится к точному решению, как $\Delta T_{(m)}^{meas} \rightarrow 0$. Экстремум функционала А. Н. Тихонова для фиксированного $\alpha > 0$ может быть найден градиентными методами. Результаты вычислительных экспериментов для этих подходов представлены на рисунках 2.7 и 2.8.

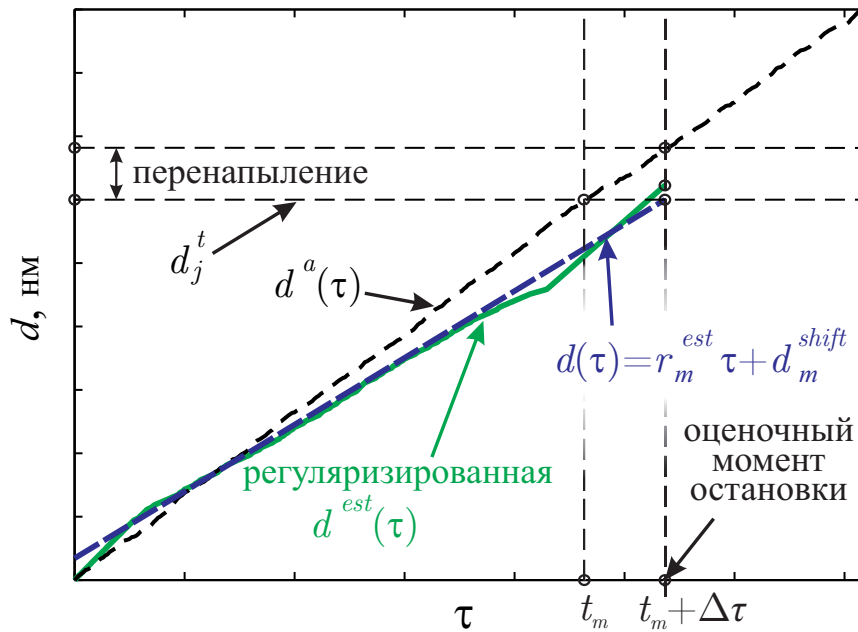


Рисунок 2.9 — Пример ситуации, когда недооценка скорости напыления приводит к чрезмерному перенапылению текущего слоя

Каждый из трёх подходов имеет свои преимущества и недостатки. Преимущество первого подхода состоит в том, что регуляризованная функция $d_j^{est}(\tau)$ является физически значимой (она обладает свойством строгой монотонности), и нет необходимости учитывать ошибки во входных данных, поскольку задача правильно поставлена. Однако этот подход очень чувствителен к ошибке в оценке скорости напыления δr : недооценка этой скорости может привести к значительной недооценке толщины напылённого слоя и, следовательно, к чрезмерному перенапылению d по сравнению с d_j^t (см. рисунок 2.9).

Преимущество второго подхода заключается в том, что регуляризованная функция $d_j^{est}(\tau)$ является квазимонотонной, и этот подход не накладывает сильных ограничений на расчётную скорость напыления r_m^{est} , что позволяет приспособиться к фактической толщине d_j^a быстрее, чем в первом случае. Однако при втором подходе эта корректировка происходит с определённой задержкой (см. рисунок 2.8), что также приводит к занижению расчётной толщины напылённого слоя. В результате, первый и второй подходы могут привести к чрезмерному перенапылению слоёв.

Третий подход дает наилучшие результаты (см. рисунок 2.8). Несмотря на наличие немонотонности оценочной толщины, резкий скачок функции $d_j^{est}(\tau)$ сглаживается без задержки (по сравнению с первыми двумя подходами). Таким образом, это сводит к минимуму нежелательные последствия недооценки или завышения скорости напыления.

2.3 Высокоэффективное математическое моделирование ошибок напыления

Как уже было упомянуто в предисловии к этой главе, исследование корреляции и эффекта самокомпенсации ошибок [23—25] в толщинах напылённых слоёв многослойных покрытий основывается на анализе распределений этих ошибок напыления, которые имеют случайный характер. Ввиду случайного характера ошибок напыления анализ должен быть статистическим. Для проведения надёжного статистического анализа требуется большое количество наборов ошибок напыления, скоррелированных в процессе широкополосного оптического контроля. На первый взгляд, предложенный в параграфе 2.1 метод математического моделирования напыления многослойных покрытий с широкополосным оптическим контролем может быть непосредственно использован для этого. Однако время работы для проведения одного вычислительного эксперимента по напылению многослойного покрытия занимает примерно одну минуту. Тем самым время, которое придётся потратить на моделирование хотя бы нескольких тысяч наборов ошибок напыления, возрастет до нескольких десятков часов. По этой причине в данном параграфе предлагается метод высокоэффективного математического моделирования ошибок, получаемых в ходе напыления многослойных покрытий с широкополосным оптическим контролем, опубликованный в работе автора [3].

Предлагаемый математический метод позволяет моделировать сотни тысяч и даже миллионы наборов ошибок, получаемых в процессе напыления многослойных покрытий, за время порядка нескольких десятков минут. Ошибки, получаемые в ходе моделирования, обладают свойством скоррелированности и несут в себе элемент случайности. Более того, данный метод позволяет моделировать ошибки напыления для случая широкополосного контроля толщин слоёв по нескольким датчикам. Например, процесс напыления многослойного покрытия может быть реализован с контролем по двум датчикам, где первый соответствует контролю чётных слоёв, а второй — контролю нечётных слоёв.

Для описания метода высокоэффективного математического моделирования ошибок напыления при широкополосном оптическом контроле на наборе длин волн $\{\lambda\}$ воспользуемся представлением (1.41) соответствующего функ-

ционала невязки:

$$\Phi_j(\delta d_j) = \sum_{\{\lambda\}} \left[\sum_{i=1}^j \frac{\partial T_j}{\partial d_i} \delta d_i + \delta T^{meas} \right]^2, \quad (2.5)$$

где $\frac{\partial T_j}{\partial d_i}$ — частная производная $T(d_1^t, \dots, d_{j-1}^t, d_j, \lambda)$ по d_j , $\delta d_1, \dots, \delta d_{j-1}$ — ошибки толщин, допущенные при напылении слоёв с номерами $1, \dots, j-1$, где $\delta d_j = d_j - d_j^t$ — отклонение толщины j -го слоя от его запланированного теоретического значения, а δT^{meas} — случайный шум в измеренных данных. Функционал (2.5) является квадратичным функционалом относительно δd_j . Минимизируя (2.5) по δd_j , получим

$$\delta d_j = - \sum_{\{\lambda\}} \left(\sum_{i=1}^{j-1} \frac{\partial T_j}{\partial d_i} \frac{\partial T_j}{\partial d_j} \delta d_i \right) / \sum_{\{\lambda\}} \left(\frac{\partial T_j}{\partial d_j} \right)^2. \quad (2.6)$$

Формула (2.6) описывает корреляцию ошибок толщин слоёв в процессе работы широкополосного оптического контроля. В реальных производственных экспериментах напыления существует множество случайных факторов, вызывающих ошибки в толщинах, но в описываемом методе моделирования их все можно представить в виде случайной составляющей v_j каждой ошибки δd_j . В итоге алгоритм моделирования ошибок толщин слоёв выглядит следующим образом:

1. Положим $j = 1$. Погрешность толщины в первом напылённом слое задаётся как $\delta d_1 = v_1$, где v_1 — нормально распределённая случайная ошибка.
2. Переопределим $j = j + 1$.
3. Вычислим δd_j в соответствии с уравнением (2.6).
4. Переопределим $\delta d_j = \delta d_j + v_j$, где v_j — нормально распределённая случайная ошибка.
5. Если $j < N$, тогда возвращаемся к шагу 2.

Этот алгоритм может быть представлен в следующей рекурсивной форме:

$$\delta d_j = \sum_{i=1}^{j-1} b_i^j v^i + v^j,$$

где

$$b_i^j = a_i^j + \sum_{k=1}^{j-i-1} a_{i+k}^j b_i^{i+k}, \quad a_i^j = - \left(\sum_{\{\lambda\}} \frac{\partial T_j}{\partial d_i} \frac{\partial T_j}{\partial d_j} \right) / \sum_{\{\lambda\}} \left(\frac{\partial T_j}{\partial d_j} \right)^2.$$

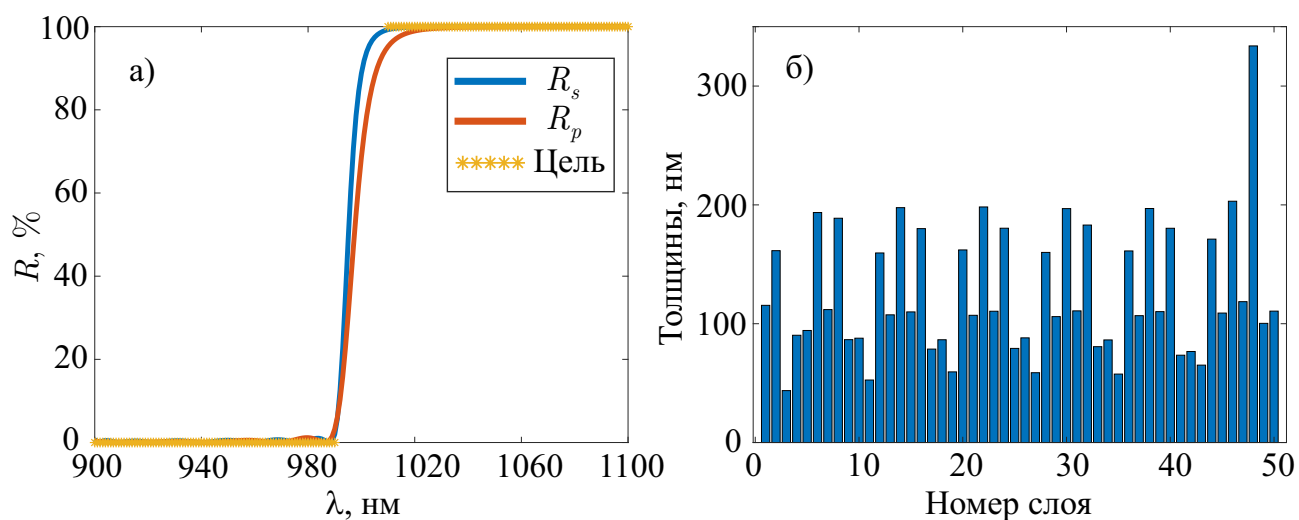
2.4 Исследование корреляции и эффекта самокомпенсации ошибок напыления

В данном параграфе продемонстрирована эффективность работы вышеописанного метода математического моделирования ошибок напыления, а также с помощью этого метода проведён анализ выбора стратегий широкополосного оптического контроля напыления многослойных покрытий, включая стратегии со сменными чипами контроля.

Для проведения вычислительных экспериментов, результаты которых опубликованы в работах автора [3—5], рассматривается многослойное покрытие, для которого было предсказано существование сильного эффекта самокомпенсации ошибок [46]. Данное многослойное покрытие называется «неполяризующий краевой фильтр», состоящий из 50-ти слоёв. Конструкция фильтра представляет собой слои с чередующимися показателями преломления, равными 2.35 для нечётных слоёв и 1.45 для чётных слоёв (например, TiO_2 и SiO_2). В качестве подложки используется стандартное стекло с показателем преломления 1.52.

Неполяризующий краевой фильтр предназначен для работы при наклонном падении света под углом 45° и должен обладать близкими отражательными характеристиками для S - и P -поляризованного света. Для обоих состояний поляризации фильтр должен обеспечивать низкую отражательную способность R_s , R_p в спектральной области от 900 нм до 990 нм и высокую отражательную способность R_s , R_p в спектральной области от 1010 нм до 1100 нм. Теоретические спектральные характеристики и физические толщины слоёв для фильтра представлены на рисунке 2.10. Целевые значения коэффициента отражения отмечены на рисунке звездочками, шаг сетки длин волн равен 1 нм.

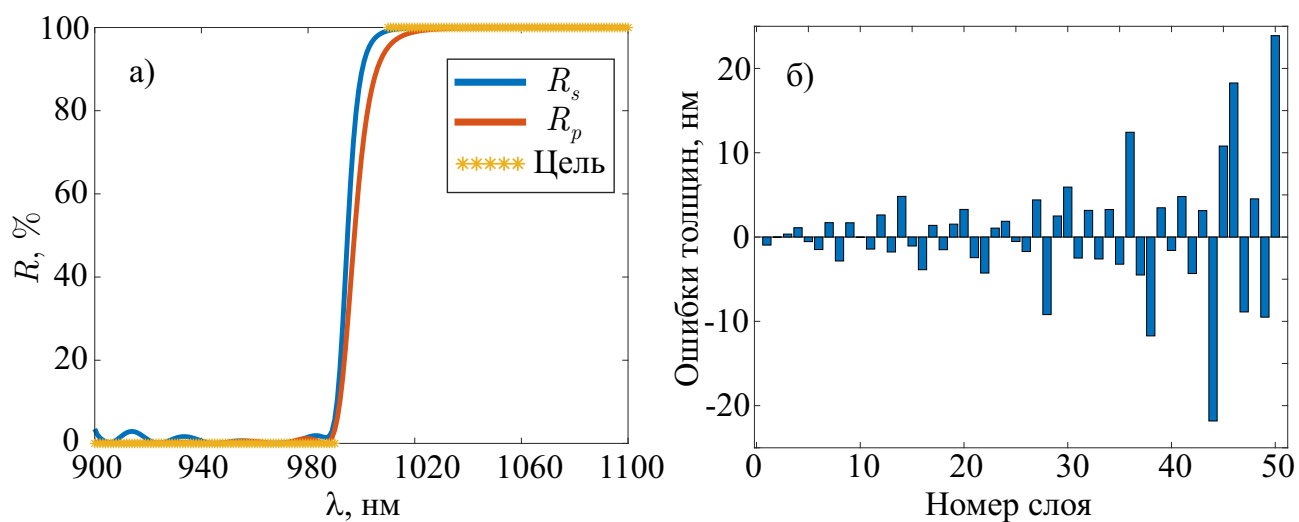
Для демонстрации эффекта самокомпенсации ошибок напыления и анализа работы метода высокоэффективного моделирования ошибок (см. параграф 2.3) с помощью математического моделирования (см. параграф 2.1) был проведён вычислительный эксперимент по напылению описанного многослойного покрытия. Широкополосный контроль напыления осуществлялся в спектральном диапазоне длин волн от 400 нм до 900 нм. На рисунке 2.11 а) изображены спектральные коэффициенты отражения для S - и P -поляризации напылённого многослойного покрытия, а на рисунке 2.11 б) показаны ошибки в



а) — теоретические спектральные коэффициенты отражения R_s , R_p для S - и P -поляризаций соответственно;

б) — толщины слоёв теоретической конструкции покрытия.

Рисунок 2.10 — 50-слойный неполяризующий краевой фильтр



а) — спектральные коэффициенты отражения R_s , R_p для S - и P -поляризаций соответственно;

б) — ошибки толщин слоёв.

Рисунок 2.11 — Математическое моделирование процесса напыления 50-слойного неполяризующего краевого фильтра

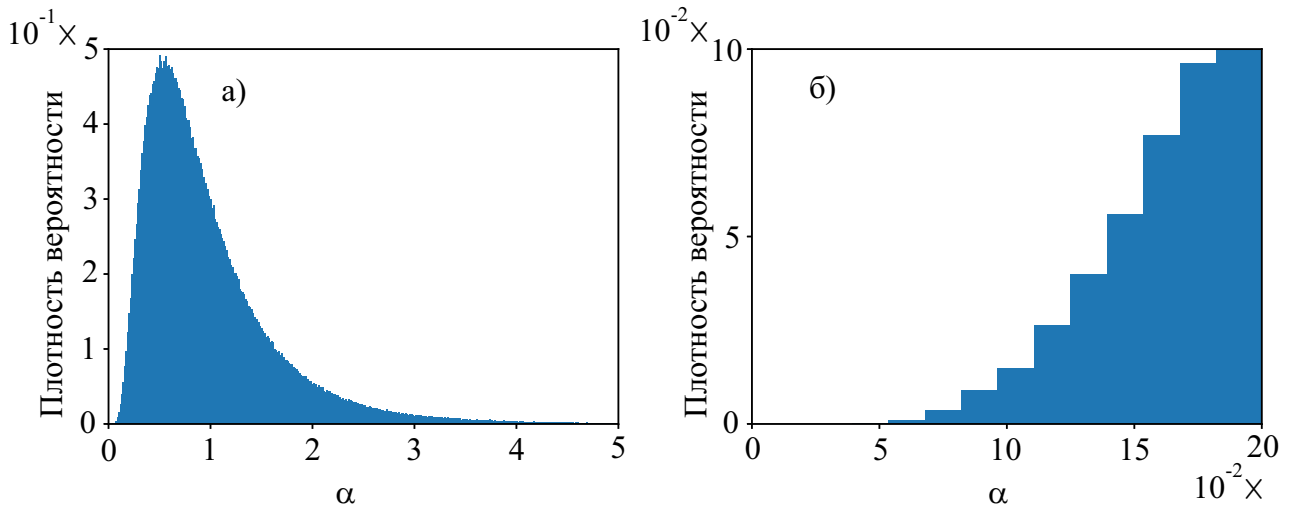


Рисунок 2.12 — Распределение значений α , вычисленных для миллиона некоррелированных векторов ошибок: а) — исходное; б) — для α в интервале от 0 до 0.2

толщинах слоёв, допущенные в ходе напыления. Несмотря на большие значения ошибок и на их кумулятивный рост, спектральные характеристики полученного покрытия почти полностью соответствуют теоретическим спектральным характеристикам на рисунке 2.10 а). Имеет место эффект самокомпенсации ошибок.

Для измерения степени корреляции ошибок, изображенных на рисунке 2.11 б), воспользуемся оценкой (1.44). Для представленного вектора ошибок $\alpha = 0.0058$, то есть $\alpha \ll 1$. Чтобы доказать, что это действительно достаточно маленькое значение, были проведены вычислительные эксперименты с одним миллионом случайно сгенерированных некоррелированных векторов ошибок. На рисунке 2.12 а) представлено распределение плотности вероятности для значений α , рассчитанных с использованием этих векторов. Среднее значение α равно 0.9993, что соответствует тому факту, что среднее значение квадратичной нормы $\langle \|W\Delta\|^2 \rangle$ для одного миллиона некоррелированных векторов должно быть близко к среднему значению этой квадратичной нормы на сфере единичного радиуса (см. уравнение (1.44)).

Стоит отметить, что в одном миллионе экспериментов с некоррелированными векторами ошибок вероятность того, что α окажется меньше 0.1, стремится к нулю. Это хорошо видно на рисунке 2.12 б). С другой стороны, вычислительные эксперименты демонстрируют сильную корреляцию получаемых ошибок толщин. Из ста таких экспериментов только в четырёх случаях векторы ошибок давали значения α , превышающие 0.1. На рисунке 2.13 а) показана гистограмма, полученная в этих экспериментах.

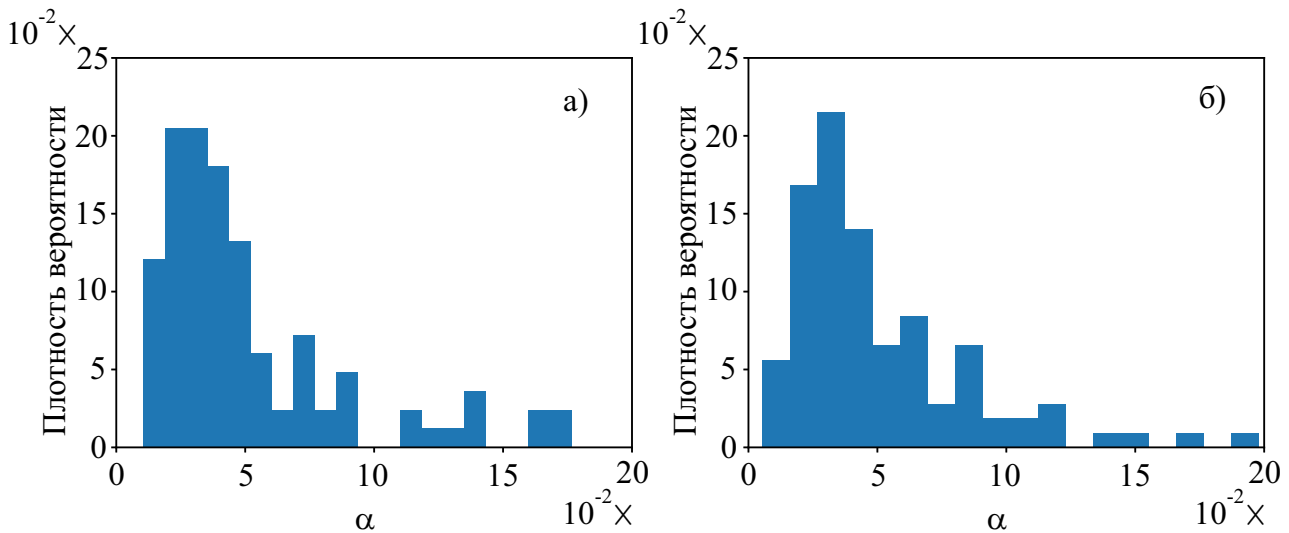


Рисунок 2.13 — Распределения значений α , полученных на основе на 100 экспериментов: а) — моделирование процесса напыления (см. параграф 2.1); б) — моделирование ошибок напыления (см. параграф 2.3)

Из рисунка 2.13 а) видно, что корреляция ошибок толщин слоёв соответствует специфическому распределению значений α . В зависимости от общего количества слоёв многослойного покрытия за разумное время можно выполнить только десятки, возможно, и несколько сотен вычислительных экспериментов по напылению покрытия. Детальное исследование распределения требует гораздо большего количества векторов ошибок. Для генерации значительно большего количества векторов ошибок используется высокоэффективное моделирование ошибок напыления (см. параграф 2.3). На рисунке 2.13 б) показано распределение значений α , аналогичное представленному на рисунке 2.13 а), но полученное на основе ста экспериментов с высокоэффективным моделированием ошибок толщин. Как и следовало ожидать, гистограммы на рисунке 2.13 не идентичны, но качественно близки. На обеих гистограммах представленные значения расположены в одном и том же диапазоне, который находится значительно левее основного диапазона значений на рисунке 2.12 а). Таким образом, метод высокоэффективного моделирования ошибок напыления адекватно отражает как случайную природу векторов ошибок, так и корреляцию, наблюдаемую в процессе широкополосного контроля. На рисунке 2.14 представлены результаты одного миллиона экспериментов по высокоэффективному моделированию ошибок напыления.

Необходимо подчеркнуть две наиболее важные особенности в распределении α в случае коррелированных ошибок толщины. Во-первых, мода этого распределения существенно меньше единицы, а во-вторых, максимальное зна-

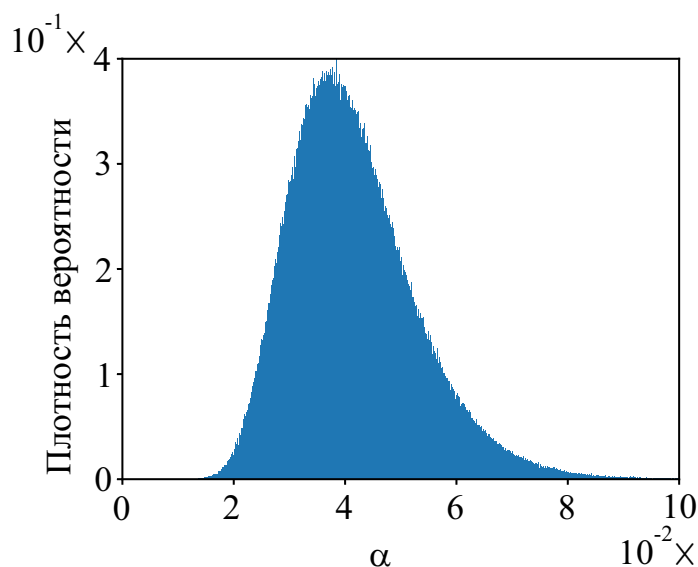


Рисунок 2.14 — Распределение значений α , полученных на основе на одного миллиона вычислительных экспериментов по высокоэффективному моделированию ошибок напыления

чение распределения значительно больше аналогичного значения в случае некоррелированных ошибок толщин (см. рисунки 2.12(а) и 2.14). Очевидно, что малое значение моды и большое значение максимума распределения характеризуют степень корреляции ошибок толщин. Таким образом, чтобы оценить степень корреляции по некоторым численным значениям, можно использовать эти два значения.

Для измерения степени эффекта самокомпенсации ошибок напыления, полученных с помощью высокоэффективного моделирования, воспользуемся оценками (1.45) и (1.46). На основе тех же векторов ошибок, для которых было построено распределение α (рисунок 2.14), было построено распределение значений S на рисунке 2.15. В полном соответствии с математическим описанием природы эффекта самокомпенсации ошибок напыления (см. подпараграф 1.2.2) и фактом наличия в значительной степени данного эффекта для рассматриваемого неполяризующего краевого фильтра (см. рисунок 2.11) значения S на гистограмме 2.15 в подавляющем большинстве случаев достаточно велики по сравнению с 1, где $S = 1$ означает отсутствие эффекта самокомпенсации ошибок напыления.

Для более явной демонстрации наличия эффекта самокомпенсации ошибок напыления для рассматриваемого покрытия на рисунке 2.16 изображены значения α и S для коррелированных и некоррелированных ошибок напыления. Пары значений, соответствующие этим двум типам ошибок, расположены

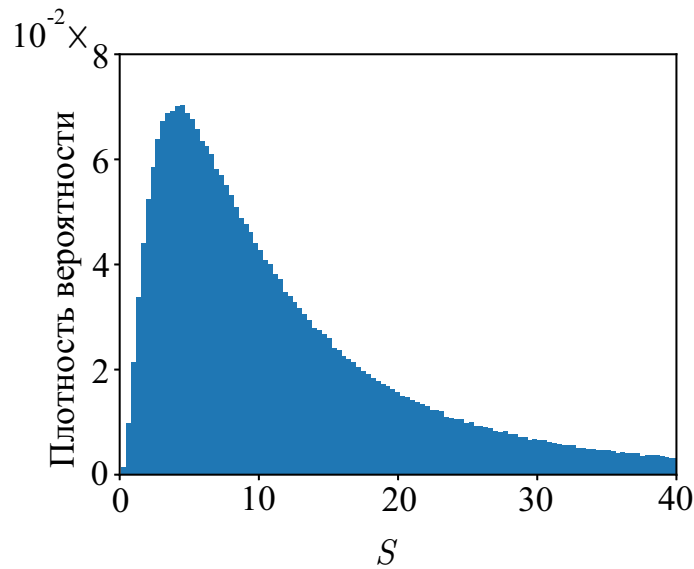


Рисунок 2.15 — Распределение значений S , полученных на основе на одного миллиона вычислительных экспериментов по высокоэффективному моделированию ошибок напыления

Таблица 2 — Средние значения S и $\langle \alpha \rangle$ рассчитанные для коррелированных и некоррелированных ошибок напыления 50-слойного неполяризующего краевого фильтра

Тип ошибок	$\langle S \rangle$	$\langle \alpha \rangle$
Коррелированные	16.552	0.042
Некоррелированные	1.011	0.998

в существенно разных частях плоскости (α, S) . В таблице 2 указаны средние значения оценок α и S , рассчитанные для моделированных коррелированных ошибок напыления и для случайно сгенерированных некоррелированных ошибок.

Исходя из проведённого исследования корреляции и эффекта самокомпенсации ошибок напыления 50-ти слойного неполяризующего краевого фильтра, для которого эффект самокомпенсации является достаточно выраженным, можно заключить, что математический метод высокоэффективного моделирования ошибок напыления является надёжным инструментом для исследования описанных эффектов. Моделируемые векторы ошибок, с одной стороны, имеют случайный характер, а с другой — адекватно отображают факт наличия корреляции ошибок, наблюдаемой в ходе работы широкополосного оптического контроля.

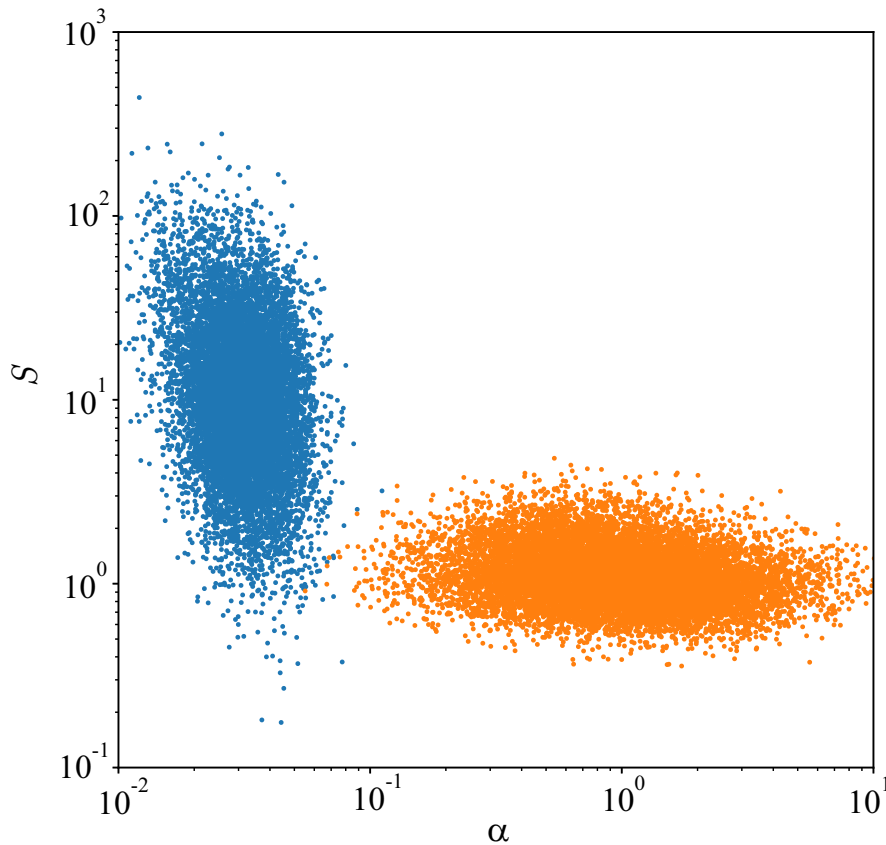


Рисунок 2.16 — Сравнение пар α и S для коррелированных (синий) и некоррелированных (оранжевый) векторов ошибок. Точки представляют 10 тыс. тестов, случайным образом выбранных из 1 млн. рассчитанных значений

2.4.1 Выбор стратегий широкополосного оптического контроля напыления многослойных покрытий

Как было сказано во введении, прямой широкополосный контроль является надежным методом для контроля толщин напыляемых слоёв многослойного покрытия, при котором измерения производятся непосредственно на одном из напыляемых покрытий [12; 20]. Несмотря на это, данный метод оптического контроля обладает существенным недостатком, проявляющимся в сильном нарастании ошибок в толщинах напыляемых слоёв с увеличением номера слоя — кумулятивном накоплении ошибок напыления. Как было показано в параграфе 2.2, сильное увеличение ошибок наблюдается при количестве слоёв, превышающем 20-30. Данный эффект кумулятивного накопления ошибок напыления происходит вследствие корреляции этих ошибок, которая неизбежна при любом методе прямого оптического контроля: ошибки толщин в ранее напы-

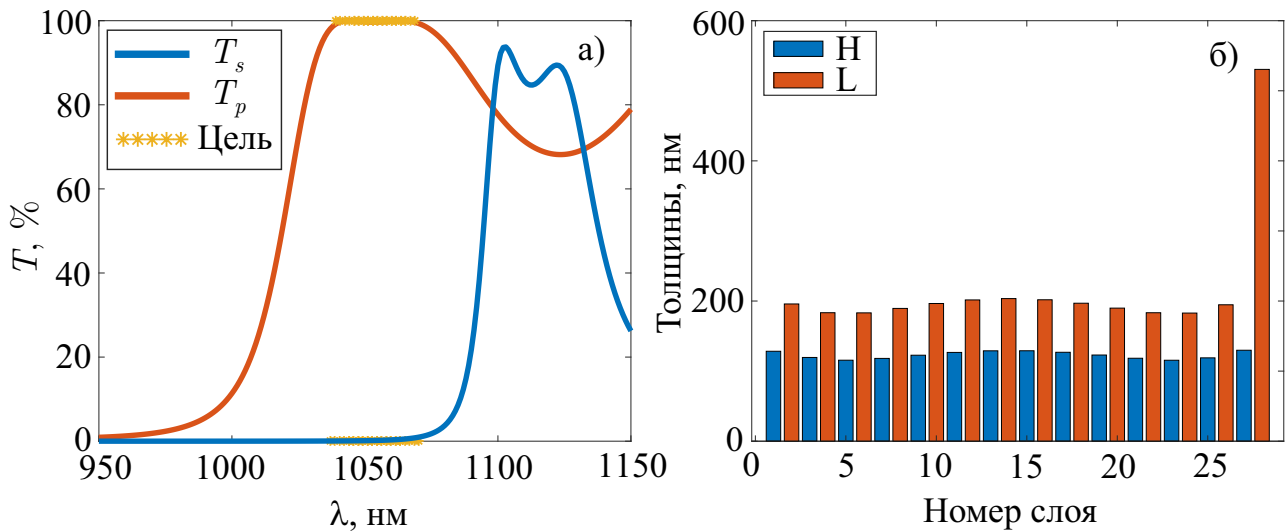
лённых слоях влияют на измеренные данные и, тем самым, влияют на точность контроля толщины очередного напыляемого слоя [42].

Для предотвращения развития кумулятивного эффекта роста ошибок в работах [47; 48] был предложен аппаратный подход, позволяющий последовательно контролировать не всё покрытие в целом, а отдельные группы его слоёв. В разработанной системе на месте одного из напыляемых образцов в вакуумной камере помещается специальное устройство, позволяющее в процессе напыления использовать до четырёх чипов широкополосного контроля. Благодаря тому, что эти чипы находятся в тех же условиях, что и напыляемые образцы, сохраняются все преимущества прямого оптического контроля.

Разработанный аппаратный подход позволяет использовать новые, ранее недоступные стратегии широкополосного оптического контроля. Естественно, в связи с этим возникает вопрос о выборе оптимальной стратегии для каждого конкретного покрытия. Этот вопрос не является тривиальным, поскольку он не сводится только к задаче предотвращения кумулятивного эффекта роста ошибок. Как указывалось ранее, корреляция ошибок в толщинах слоёв может также приводить к эффекту самокомпенсации ошибок напыления, который имеет ключевое значение для производства высококачественных многослойных покрытий (см. работу [49]). Таким образом, при выборе стратегии оптического контроля следует учитывать оба эффекта. Опираясь на математические методы оценивания наличия корреляции и силы эффекта самокомпенсации ошибок напыления, описанные в первой главе (см. параграф 1.2) на основе работ [46; 50] и на предложенный автором в параграфе 2.3 метод высокоэффективного математического моделирования ошибок напыления, далее проводится сравнительный анализ различных стратегий широкополосного оптического контроля напыления многослойных покрытий.

Для анализа стратегий широкополосного оптического контроля рассматриваются три типа покрытий, имеющих важное значение для современных технологий. Это — 28-слойный поляризатор лазерного излучения, 73-слойный сглаживающий фильтр для телекоммуникационных приложений и 42-слойный отрезающий фильтр. Спектральные характеристики пропускания T этих покрытий и толщины их слоёв представлены на рисунках 2.17, 2.18 и 2.19 соответственно. Все три покрытия напылены на подложки с показателями преломления 1.52, нечётные слои имеют высокий показатель преломления (y

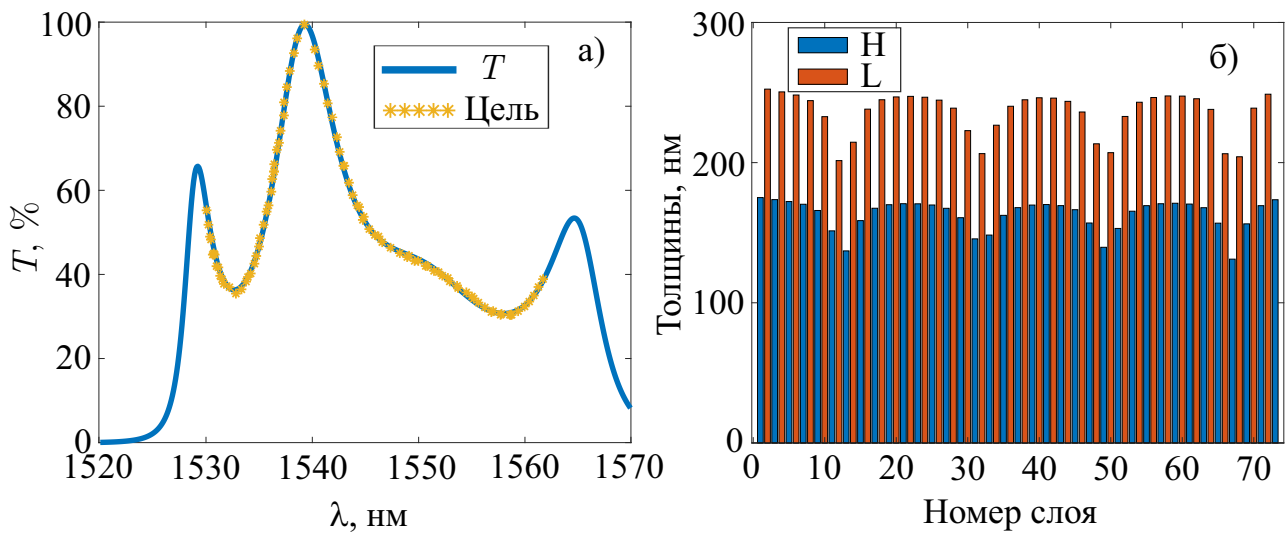
поляризатора 2.05, у сглаживающего фильтра 2.1, у отрезающего фильтра 2.35), а чётные — низкий (1.45 у всех покрытий).



а) — спектральные характеристики пропускания T_s , T_p для S - и P -поляризаций соответственно; крестиками показаны целевые значения;

б) — толщины слоёв теоретической конструкции покрытия; H и L обозначают слои с высокими и низкими показателями преломления соответственно.

Рисунок 2.17 — 28-слойный поляризатор

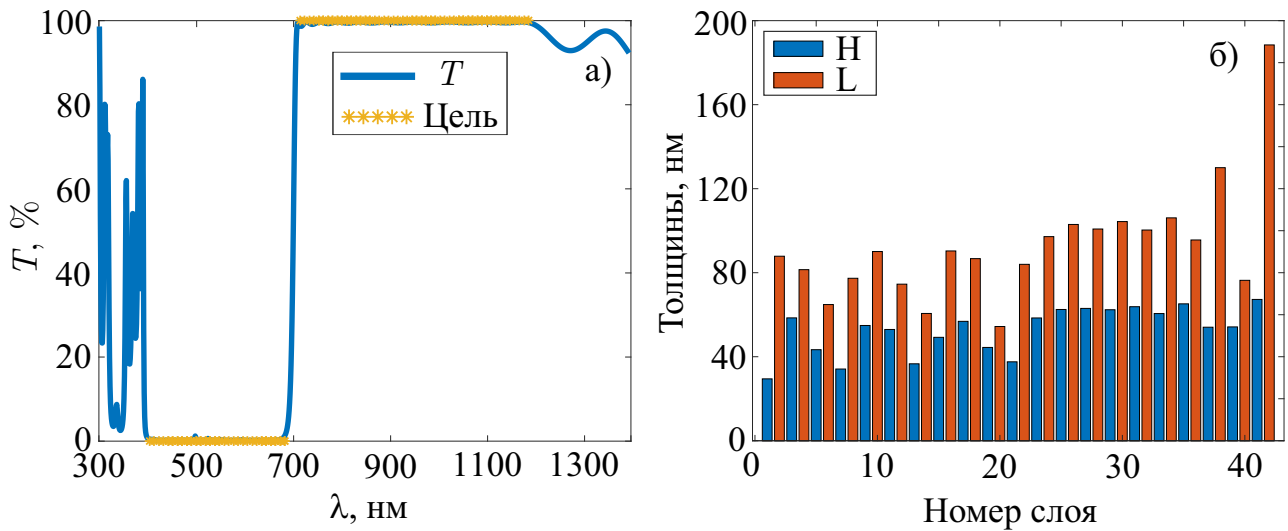


а) — спектральные характеристики пропускания T ; крестиками показаны целевые значения;

б) — толщины слоёв теоретической конструкции покрытия; H и L обозначают слои с высокими и низкими показателями преломления соответственно.

Рисунок 2.18 — 73-слойный сглаживающий фильтр

Представленный на рисунке 2.17 поляризатор предназначен для работы при угле падения Брюстера для подложки. Такие покрытия являются одними



а) — спектральные характеристики пропускания T ; крестиками показаны целевые значения;

б) — толщины слоёв теоретической конструкции покрытия; H и L обозначают слои с высокими и низкими показателями преломления соответственно.

Рисунок 2.19 — 42-слойный отрезающий фильтр

из основных элементов в лазерных системах накачки установок термоядерного синтеза. Сглаживающие фильтры для телекоммуникационных приложений (Gain Flattening Filters — GFF фильтры) (см. рисунок 2.18) должны иметь сильно изменяющийся коэффициент пропускания в узкой спектральной области, что может быть достигнуто только при очень большом количестве слоёв покрытия. Отрезающий фильтр на рисунке 2.19 должен обеспечивать резкий переход от зоны высокого отражения к зоне высокого пропускания, что также достигается при значительном числе слоёв покрытия.

На примере описанных выше многослойных покрытий проводится исследование перспектив использования трёх различных стратегий широкополосного оптического контроля. Первая стратегия — это использование классического прямого контроля всего покрытия, вторая и третья — это использование, соответственно, двух и четырёх чипов для контроля последовательных групп слоёв покрытия.

Сравнение стратегий проводится на основе анализа результатов вычислительных экспериментов по математическому моделированию процесса напыления покрытий. Для проведения таких экспериментов используется метод высокоэффективного математического моделирования ошибок напыления (см. параграф 2.3), описанный в работе автора [3]. Этот метод позволяет моделировать большое количество коррелированных ошибок напыления за приемлемое

время, что необходимо для получения надежных статистических оценок. Все представленные далее оценки базируются на результатах 1 миллиона вычислительных экспериментов для каждого из рассматриваемых покрытий и каждой стратегии контроля.

Спектральные области, в которых проводится контроль напыления покрытий, указаны в таблице 3. Во всех случаях шаг спектральной сетки по длине волны составляет 1 нм, контроль проводится по коэффициенту пропускания покрытия при нормальном падении света. В таблице 3 указаны также номера слоёв, контролируемых на разных чипах при использовании стратегий со сменными чипами для контроля.

Таблица 3 — Спектральные области контроля и номера контролируемых слоёв при использовании 2-х и 4-х чипов

Покрытие	Область λ , нм	Номера контролируемых слоёв	
		2 чипа	4 чипа
Поляризатор	650 - 1150	1-14, 15-28	1-6, 7-12, 13-20, 21-28
Сглаживающий фильтр	650 - 1150	1-36, 37-73	1-18, 19-36, 37-54, 55-73
Отрезающий фильтр	400 - 900	1-20, 21-42	1-10, 11-20, 21-30, 31-42

Важным параметром метода высокоэффективного математического моделирования ошибок напыления является уровень дополнительных случайных ошибок в толщинах каждого из слоёв покрытия. Эти ошибки задаются как Гауссовские случайные величины с нулевым математическим ожиданием и среднеквадратичным отклонением 1 нм. Эта величина и называется уровнем дополнительных ошибок. Она влияет в основном на общий уровень ошибок процесса напыления и выбрана в экспериментах таким образом, чтобы этот общий уровень ошибок соответствовал величине ошибок в реальных экспериментах напыления многослойных оптических покрытий.

Для оценки степени корреляции ошибок в толщинах слоёв используется подход, предложенный в работе автора [5]. Он основывается на рассмотрении вероятностной плотности распределения векторов ошибок в m -мерном пространстве, где m — число слоёв покрытия. Для его описания введём следующие обозначения. Пусть $\Delta = \delta d_1, \dots, \delta d_m$ — векторы ошибок в толщинах слоёв. Плотность распределения этих векторов в m -мерном пространстве опи-

сывается многомерным Гауссовым распределением:

$$f(\Delta) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{m}{2}} \sqrt{\det \mu}} \exp \left(- \sum_{i=1}^m \frac{(\delta d_i)^2}{2\sigma_i^2} \right) \quad (2.7)$$

Здесь μ — матрица, определяемая на основе полученной выборки векторов ошибок для данного типа покрытия и используемой стратегии широкополосного контроля. Напомним, что в нашем случае каждая из этих выборок содержит $M = 1$ миллион векторов ошибок. Элементы матрицы μ находятся по формуле:

$$\mu_{ij} = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \delta d_i^{(k)} \delta d_j^{(k)} \quad (2.8)$$

Стандартные отклонения σ_i в формуле (2.7) являются квадратными корнями из собственных значений матрицы μ .

Корреляция ошибок в толщинах слоёв покрытия приводит к тому, что векторы ошибок располагаются в m -мерном пространстве неравномерно. Геометрия их расположения описывается поверхностями уровня вероятностной плотности распределения. Эти поверхности представляют собой многомерные эллипсоиды, размеры которых определяются стандартными отклонениями σ_i в формуле (2.7). Пусть σ_{av} — среднеквадратичное значение стандартных отклонений σ_i . В работе [50] была предложена следующая оценка степени корреляции ошибок в толщинах слоёв:

$$\beta = \sigma_{av} \left(\prod_{i=1}^m \sigma_i \right)^{-\frac{1}{m}} \quad (2.9)$$

Согласно [50] корреляция ошибок тем сильнее, чем больше β , а при отсутствии корреляции ошибок коэффициент β близок к 1. В таблице 4 представлены найденные в соответствии с (2.9) значения коэффициента корреляции для рассматриваемых типов покрытий и трёх различных стратегий широкополосного оптического контроля. Как и следовало ожидать, наибольшие значения коэффициента корреляции соответствуют классическому прямому методу широкополосного контроля, когда ошибки в каждом новом напыляемом слое оказываются зависимыми от ошибок, допущенных во всех ранее напылённых слоях. Контроль групп слоёв с использованием дополнительных чипов исключает зависимость от ошибок в толщинах слоёв, напылённых с использованием других чипов, и корреляция уменьшается.

Таблица 4 — Коэффициент корреляции β для рассматриваемых покрытий при различных стратегиях контроля

Стратегия Покрытие	Прямой контроль	2 чипа	4 чипа
Поляризатор	3.558	2.022	1.407
Сглаживающий фильтр	3.735	3.074	2.496
Отрезающий фильтр	18.335	4.460	2.126

Корреляция ошибок в толщинах слоёв вызывает кумулятивный эффект роста ошибок. Поэтому неудивительно, что при использовании прямого контроля по всему многослойному покрытию средний уровень ошибок оказывается выше, чем при использовании стратегий со сменными чипами контроля. В приведённых ниже таблицах 5, 6 и 7 представлены математические ожидания норм векторов ошибок, которые подтверждают данное утверждение. Однако наряду с негативным кумулятивным эффектом корреляция ошибок в толщинах слоёв во многих случаях вызывает ещё и позитивный эффект самокомпенсации ошибок напыления, которые в результате не влияют на спектральные свойства многослойного покрытия. Для учёта этого эффекта в работе [15] был предложен подход, основанный на сравнении вариаций целевого функционала MF (см. формулу (1.36)), оценивающего близость спектральных характеристик покрытия к целевым характеристикам в случаях коррелированных и некоррелированных ошибок. Значения MF оценивают среднеквадратичные отклонения спектральных характеристик покрытий от целевых характеристик, показанных на рис. 2.20 а), б), в). Естественно, целевой функционал MF достигает минимума для найденной теоретической конструкции любого из рассматриваемых многослойных покрытий, а его вариации при любых видах ошибок положительны.

Далее представлены результаты расчета силы эффекта самокомпенсации для 42-слойного отрезающего фильтра. Эти результаты приведены на рисунке 2.20 в виде плотностей распределения вероятностей значений S (см. формулу (1.45) в подпараграфе 1.2.3) для трёх стратегий контроля. Математические ожидания величины S приведены в таблицах 5, 6 и 7 для покрытий всех трёх рассматриваемых типов. В этой таблице также показаны математические ожидания норм векторов ошибок и значения эффективной силы эффекта самокомпенсации. Как показывают таблицы 5, 6 и 7 для всех трёх типов покрытий,

сила эффекта самокомпенсации оказывается наибольшей при использовании прямого широкополосного контроля, то есть когда корреляция ошибок является наиболее сильной. Однако с большей корреляцией ошибок связан и более сильный кумулятивный эффект роста ошибок (см. значения $\mathbb{E} [||\Delta||]$ в таблицах 5, 6 и 7).

Для оценки совместного влияния двух обсуждаемых эффектов используется оценка S_{eff} , представляющая эффективную силу эффекта самокомпенсации ошибок с учётом их ожидаемого уровня. Вычисленные значения S_{eff} (см. формулу (1.46) в подпараграфе 1.2.3) также приведены в таблицах 5, 6 и 7. Отметим, что наибольшие значения параметра S_{eff} наблюдаются в случае поляризатора лазерного излучения. Это как раз то покрытие, для которого в работе [49] был экспериментально обнаружен чрезвычайно сильный эффект самокомпенсации ошибок при прямом широкополосном оптическом контроле процесса его напыления. Эффект самокомпенсации ошибок имеет место и для двух других типов покрытий, но он проявляется в менее выраженной форме, чем в случае поляризатора лазерного излучения. Стоит отметить, что большое значение $\mathbb{E} [S]$ соответствует и прямому широкополосному контролю отрезающего фильтра. Однако в этом случае положительное влияние эффекта самокомпенсации ошибок полностью перекрывается сильным ростом общего уровня ошибок (см. соответствующие значения $\mathbb{E} [||\Delta||]$ в таблицах 5, 6 и 7. В результате величина S_{eff} оказывается меньше 1. Использование четырёх чипов для контроля в значительной степени подавляет эффект кумулятивного накопления ошибок, но при этом в достаточной степени сохраняет эффект самокомпенсации ошибок. Таким образом, это как раз тот случай, в котором использование новых стратегий широкополосного оптического контроля может дать существенные практические результаты.

В целом, все результаты для всех рассмотренных покрытий, сведённые в таблицах 5, 6 и 7, позволяют проводить оценку перспектив использования различных стратегий широкополосного контроля при напылении важнейших типов многослойных оптических покрытий с использованием метода высокоэффективного математического моделирования ошибок напыления.

Таблица 5 — Значения $\mathbb{E}[S]$, $\mathbb{E}[||\Delta||]$, S_{eff} для 28-слойного поляризатора

Стратегия	Поляризатор		
	$\mathbb{E}[S]$	$\mathbb{E}[\Delta]$	S_{eff}
Прямой контроль	36.204	17.238	20.748
2 чипа	19.963	10.249	19.242
4 чипа	8.299	7.222	11.352

Таблица 6 — Значения $\mathbb{E}[S]$, $\mathbb{E}[||\Delta||]$, S_{eff} для 73-слойного сглаживающего фильтра

Стратегия	Сглаживающий фильтр		
	$\mathbb{E}[S]$	$\mathbb{E}[\Delta]$	S_{eff}
Прямой контроль	5.794	30.191	3.321
2 чипа	4.075	25.251	2.793
4 чипа	2.924	20.591	2.457

Таблица 7 — Значения $\mathbb{E}[S]$, $\mathbb{E}[||\Delta||]$, S_{eff} для 42-слойного отрезающего фильтра

Стратегия	Отрезающий фильтр		
	$\mathbb{E}[S]$	$\mathbb{E}[\Delta]$	S_{eff}
Прямой контроль	18.111	104.461	0.881
2 чипа	6.479	25.966	1.269
4 чипа	5.853	13.289	2.239

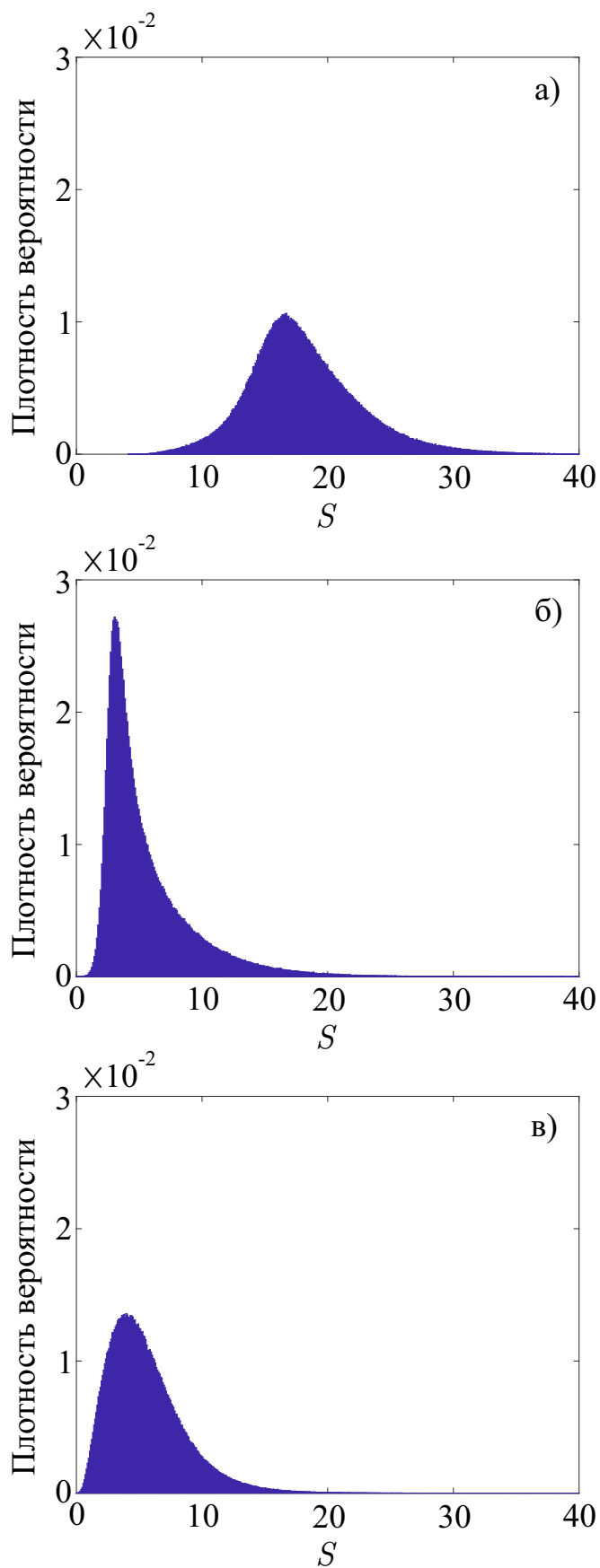


Рисунок 2.20 — Плотность распределения вероятностей для силы эффекта самокомпенсации S в случае моделирования напыления 42-слойного отрезающего фильтра при использовании различных стратегий контроля: а) — прямой контроль; б) — контроль по 2-м чипам мониторинга; в) — контроль по 4-м чипам мониторинга

2.4.2 Теоретические оценки среднеквадратичной нормы вектора ошибок и коэффициента корреляции

Метод высокоэффективного математического моделирования ошибок напыления представляет собой получение ошибок δd_j через аналитическую формулу (2.6). Одним из самых важных свойств данного метода является то, что производные в (2.6) вычисляются для теоретических значений толщин слоёв оптического покрытия. Следовательно, можно привести теоретические оценки среднеквадратичной нормы вектора ошибок Δ и коэффициента корреляции β (см. формулу (2.9)) без непосредственного моделирования ошибок и сбора статистики по ним.

Согласно алгоритму моделирования из параграфа 2.3, ошибка толщины δd_j слоя с номером j вычисляется по формуле

$$\delta d_j = \sum_{i=1}^{j-1} b_i^j v^i + v^j, \quad (2.10)$$

где

$$b_i^j = a_i^j + \sum_{k=1}^{j-i-1} a_{i+k}^j b_i^{i+k}, \quad a_i^j = - \left(\sum_{\{\lambda\}} \frac{\partial T_j}{\partial d_i} \frac{\partial T_j}{\partial d_j} \right) / \sum_{\{\lambda\}} \left(\frac{\partial T_j}{\partial d_j} \right)^2.$$

Для простоты будем считать, что уровень случайных ошибок v^j для всех значений j одинаковый и составляет ς . При этом данные ошибки v^i , v^j являются независимыми случайными величинами при $i \neq j$.

Пусть $\Delta = \{\delta d_1, \dots, \delta d_N\}$ — вектор ошибок напыления, где N — количество слоёв многослойного оптического покрытия. Среднеквадратичная норма (*root mean squared*) вектора ошибок $rms(\|\Delta\|)$ определяется по формуле:

$$rms(\|\Delta\|) = \sqrt{\mathbb{E} [\|\Delta\|^2]}, \quad (2.11)$$

где $\mathbb{E} [\|\Delta\|^2]$ — математическое ожидание $\|\Delta\|^2 = \delta d_1^2 + \dots + \delta d_N^2$. Тогда будут справедливы следующие утверждения.

Утверждение 1. Среднеквадратичная норма вектора ошибок растёт линейно с увеличением уровня случайных ошибок ς в слое:

$$rms(\|\Delta\|) = \varsigma \sqrt{\sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^{j-1} (b_i^j)^2 + N} \quad (2.12)$$

Доказательство. Из свойств математического ожидания для случайных независимых величин для $j = \overline{1, N}$ выполняется равенство

$$\mathbb{E}[(\mathbf{v}^j)^2] = \varsigma^2. \quad (2.13)$$

Тогда из (2.13) следует, что

$$\mathbb{E}[b_i^k \mathbf{v}^i \cdot b_j^m \mathbf{v}^j] = \delta_{ij} b_i^k b_j^m \varsigma^2, \quad (2.14)$$

где δ_{ij} — символ Кронекера, $i, j, k, m = \overline{1, N}$. Используя формулу (2.10) с учётом (2.14), получим оценку для математического ожидания квадрата ошибки в j -ом слое:

$$\mathbb{E}[(\delta d_j)^2] = \mathbb{E}\left[\left(\sum_{i=1}^{j-1} b_i^j \mathbf{v}^i + \mathbf{v}^j\right)^2\right] = \sum_{i=1}^{j-1} (b_i^j \varsigma)^2 + \varsigma^2. \quad (2.15)$$

Подставляя (2.15) в (2.11) и учитывая, что $\mathbb{E}[\|\Delta\|^2] = \sum_{j=1}^N \mathbb{E}[\delta d_j^2]$, получим необходимое выражение:

$$rms(\|\Delta\|) = \varsigma \sqrt{\sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^{j-1} (b_i^j)^2 + N}.$$

Утверждение 2. Коэффициент корреляции β (2.9) не зависит от уровня случайных ошибок ς и может быть рассчитан по формуле:

$$\beta = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \tilde{\psi}_j \left(\prod_{j=1}^N \sqrt{\tilde{\psi}_j} \right)^{-\frac{1}{N}}}, \quad (2.16)$$

где $\tilde{\psi}_j$ — собственные значения матрицы $\tilde{\mu}$, элементы которой определяются следующим образом:

$$\tilde{\mu}_{ij} = \begin{cases} \sum_{k=1}^{i-1} b_k^i b_k^j + b_i^j, & i < j \\ \sum_{k=1}^{i-1} (b_k^i)^2 + 1, & i = j \\ \sum_{k=1}^{i-1} b_k^i b_k^j + b_j^i, & i > j \end{cases}$$

Доказательство. Рассмотрим матрицу μ , определяемую по формуле (2.8), которую также можно переписать в виде

$$\mu_{ij} = \mathbb{E}[\delta d_i \cdot \delta d_j]. \quad (2.17)$$

Подставляя (2.10) в (2.17) и учитывая (2.14), получим

$$\tilde{\mu} = \mathbb{E} \left[\left(\sum_{k=1}^{i-1} b_k^i v^k + v^i \right) \left(\sum_{m=1}^{j-1} b_m^j v^m + v^j \right) \right] = \begin{cases} \sum_{k=1}^{i-1} b_k^i b_k^j \varsigma^2 + b_i^j \varsigma^2, & i < j \\ \sum_{k=1}^{i-1} (b_k^i)^2 \varsigma^2 + \varsigma^2, & i = j \\ \sum_{k=1}^{i-1} b_k^i b_k^j \varsigma^2 + b_j^i \varsigma^2, & i > j \end{cases}$$

Из выражения выше следует, что

$$\mu_{ij} = \varsigma^2 \tilde{\mu}_{ij}, \quad (2.18)$$

где элементы матрицы $\tilde{\mu}$, которые не зависят от ς :

$$\tilde{\mu} = \begin{cases} \sum_{k=1}^{i-1} b_k^i b_k^j + b_i^j, & i < j \\ \sum_{k=1}^{i-1} (b_k^i)^2 + 1, & i = j \\ \sum_{k=1}^{i-1} b_k^i b_k^j + b_j^i, & i > j \end{cases}$$

Пусть $\tilde{\psi}_i$ — собственные значения матрицы $\tilde{\mu}$ (2.8). Тогда $\psi_i = \tilde{\psi}_i \varsigma^2$ — собственные значения матрицы μ . Подставляя в (2.8) $\sigma_i = \sqrt{\psi_i}$, получим необходимую оценку для коэффициента корреляции ошибок толщин оптического покрытия:

$$\beta = \varsigma \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \tilde{\psi}_j} \left(\varsigma^N \prod_{j=1}^N \sqrt{\tilde{\psi}_j} \right)^{-\frac{1}{N}} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \tilde{\psi}_j} \left(\prod_{j=1}^N \sqrt{\tilde{\psi}_j} \right)^{-\frac{1}{N}}.$$

Формулы (2.12) и (2.16) позволяют оценить среднеквадратичную норму вектора ошибок и коэффициент корреляции ошибок в толщинах слоёв оптического покрытия, получаемых в процессе его напыления, без проведения математического моделирования, то есть только на основе теоретических данных покрытия.

В таблицах 8 и 9 приведены теоретически вычисленные значения среднеквадратичных норм векторов ошибок напыления и коэффициента корреляции β соответственно для 73-слойного сглаживающего фильтра (см. рисунок 2.18). Результаты подтверждают полученные выше формулы (2.12) и (2.16), и соответствуют тому, что значения среднеквадратичной нормы вектора ошибок $rms(\|\Delta\|)$ линейны относительно уровня случайных ошибок ς (см. рисунок 2.21).

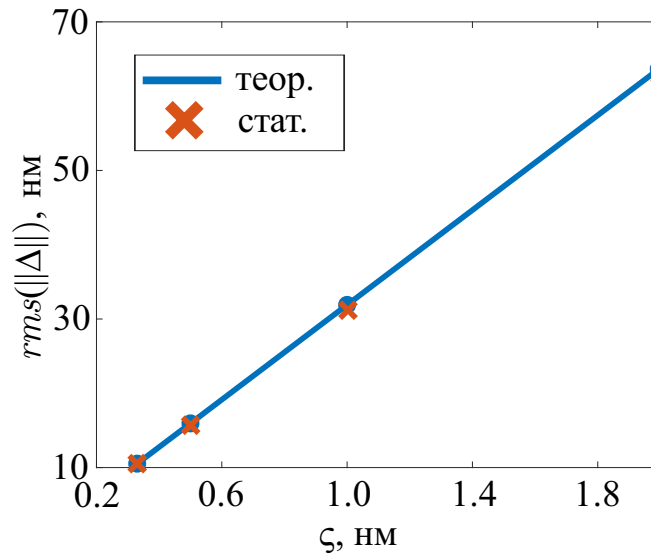


Рисунок 2.21 — Среднеквадратичные значения норм векторов ошибок $rms(\|\Delta\|)$, полученные статистически (стат.) (отмечены крестиками) на основе 1000 векторов ошибок смоделированных с помощью высокоэффективного метода из 2.3, и теоретически (теор.) согласно формуле (2.12) (отмечены кружками) в зависимости от уровня случайных ошибок ζ для 73-слойного сглаживающего фильтра

Таблица 8 — Среднеквадратичная норма векторов ошибок $rms(\|\Delta\|)$, полученная статистически на основе 1000 векторов ошибок смоделированных с помощью высокоэффективного метода из 2.3 для 73-слойного сглаживающего фильтра, и теоретически согласно формуле (2.12)

ζ , нм	Статистическое значение	Теоретическое значение
0.33	10.67	10.53
0.50	15.64	15.95
1.00	31.45	31.90
2.00	63.00	63.81

Таблица 9 — Коэффициент корреляции β ошибок, полученный статистически на основе 1000 векторов ошибок смоделированных с помощью высоко-эффективного метода из 2.3 для 73-слойного сглаживающего фильтра, и теоретический согласно формуле (2.16)

ς , нм	Статистическое значение	Теоретическое значение
0.33	3.73	3.73
0.50	3.72	
1.00	3.74	
2.00	3.74	

Глава 3. Численные методы для решения обратной задачи определения толщин слоёв напылённого многослойного покрытия

Описанные в параграфе 2.2 подходы, направленные на борьбу с эффектом кумулятивного накопления ошибок напыления, используют информацию о толщинах фактически напылённых слоёв. Данная информация является решением обратной задачи определения толщин уже напылённых слоёв рассматриваемого многослойного покрытия. Очевидно, для надёжной работы подходов, направленных на повышение качества широкополосного контроля, необходимо точно решать такую обратную задачу. В данной главе описываются различные алгоритмы для решения обратной задачи определения толщин слоёв напылённого многослойного покрытия. В параграфе 3.1 описывается модифицированный *T*-алгоритм (подпараграф 3.1.1) и проводится сравнительный анализ с другими актуальными алгоритмами (подпараграф 3.1.2). Результаты параграфа 3.1 опубликованы в работах автора [6; 7]. В параграфе 3.2 предлагается подход для построения алгоритмов решения обратной задачи, основанный на сравнении положений экстремумов экспериментальных и теоретических спектральных характеристик покрытия (подпараграф 3.2.1). В подпараграфе 3.2.2 уделяется особое внимание аспектам поиска экстремумов экспериментальной зависимости спектральной характеристики от длины волны. Далее в подпараграфе 3.2.3 приводятся результаты вычислительных экспериментов. Результаты параграфа 3.2 опубликованы в работе автора [8]. В финальном параграфе диссертации 3.3 проведено детальное исследование по определению параметров первого напылённого слоя оптического покрытия с использованием большого объёма экспериментальных данных, получаемых в процессе напыления покрытия с широкополосным оптическим контролем. Результаты параграфа 3.3 опубликованы в работе автора [9].

В совокупности материалы данной главы опубликованы в работах автора [6—9].

3.1 Модифицированный T -алгоритм

В подпараграфе 1.3.1 для построения S -алгоритма решения обратной задачи определения толщин слоёв напылённого покрытия используется только один парциальный функционал, который относится к напылённому слою j . Более того, на каждом шаге работы алгоритма определяется толщина лишь текущего слоя d_j , а все ранее найденные толщины слоёв $d_1, \dots, d_{j-1}$ фиксируются. Как было упомянуто ранее, работа данного алгоритма может быть очень нестабильной из-за выраженного эффекта кумулятивного накопления ошибок. В случае T -алгоритма все данные измерений, записанные в конце напыления слоя, используются для определения толщины текущего напылённого слоя и для повторного определения толщины всех предыдущих слоёв. Неоднократно демонстрировалось в [16—18], что T -алгоритм обладает значительно большей точностью по сравнению с S -алгоритмом, но работает гораздо менее эффективно с точки зрения времени работы.

В работе [51] впервые предлагается модифицированный S -алгоритм, который работает намного быстрее, чем T -алгоритм, и в то же время обладает сопоставимой точностью. Его основная идея заключается в повторном определении некоторых толщин ранее напылённых слоёв в соответствии с заданным критерием. Однако модифицированный S -алгоритм, так же как и S -алгоритм, на каждом шаге своей работы использует лишь один парциальный функционал и не учитывает остальные экспериментальные данные, накопленные в процессе напыления многослойного покрытия. Это может являться причиной низкой точности по сравнению с T -алгоритмом, который использует все парциальные функционалы, соответствующие экспериментальным спектрам покрытия в конце напыления каждого слоя (см. подпараграф 1.3.1).

В этом параграфе развиваются идеи модифицированного S -алгоритма и предлагается модифицированный T -алгоритм, опубликованный в работах автора [6; 7]. Модифицированный T -алгоритм обладает скоростью работы, сопоставимой с S -алгоритмом, и высоким качеством, сравнимым с T -алгоритмом, которое превосходит модифицированный S -алгоритм.

3.1.1 Описание алгоритма

Исходя из принципа работы описанных в параграфе 1.3 алгоритмов, S - и T -алгоритмы можно рассматривать как крайние случаи всех возможных алгоритмов, на каждом шаге которых, помимо определения толщины текущего рассматриваемого слоя, переопределяется какое-то подмножество толщин предыдущих слоёв. Данное подмножество может быть пустым, а может содержать значения толщин всех предыдущих слоёв, причем как для функционала (1.47) (S -алгоритм), так и для функционала (1.48) (T -алгоритм).

Для вывода формул, описывающих общий класс таких алгоритмов, рассмотрим сначала функционал невязки S -алгоритма и представим его в виде, аналогичном формуле (1.41):

$$\Phi_j = \sum_{\{\lambda\}} \left[\sum_{i=1}^j \frac{\partial T_j}{\partial d_i} \delta d_i + \delta T^{meas}(\lambda) \right]^2, \quad (3.1)$$

где $\frac{\partial T_j}{\partial d_i}$ — частная производная $T(d_1^t, \dots, d_{j-1}^t, d_j, \lambda)$ по d_j , $\delta d_1, \dots, \delta d_{j-1}$ — ошибки толщин, допущенные при напылении предыдущих $j - 1$ слоёв, где $\delta d_j = d_j - d_j^t$ — отклонение толщины j -го слоя от его запланированного теоретического значения, а $\delta T^{meas}(\lambda)$ — случайный шум в измеренных данных, зависящий в общем случае от длины волны λ . Предполагаем, что Φ_j зависит не только от d_j , но и от $d_1, \dots, d_{j-1}$, но для удобства записи опускаем эту зависимость.

Как было указано в подпараграфе 1.2.2, функционал Φ_j является квадратичной функцией ошибок δd_i в толщинах слоёв покрытия. Выделим в выражении (3.1) ошибку в толщине δd_i , $1 \leq i \leq j$ и перепишем (3.1) в виде

$$\Phi_j = \sum_{\{\lambda\}} \left[\frac{\partial T_j}{\partial d_i} \delta d_i + \sum_{l \neq i} \frac{\partial T_j}{\partial d_l} \delta d_l - \delta T^{meas}(\lambda) \right]^2. \quad (3.2)$$

Функционал (3.2) является квадратичным функционалом относительно δd_i . Из условия минимума этого функционала по δd_i получаем

$$\delta d_i = \frac{\left[\sum_{\{\lambda\}} \frac{\partial T_j}{\partial d_i} \delta T^{meas}(\lambda) - \sum_{l \neq i} \left(\sum_{\{\lambda\}} \frac{\partial T_j}{\partial d_i} \frac{\partial T_j}{\partial d_l} \right) \delta d_l \right]}{\left[\sum_{\{\lambda\}} \left(\frac{\partial T_j}{\partial d_i} \right)^2 \right]}. \quad (3.3)$$

Полученное выражение (3.3) будет основным для дальнейших выкладок. Введём следующие обозначения:

$$\beta_i^j = \sum_{\{\lambda\}} \frac{\partial T_j}{\partial d_i} \delta T^{meas}(\lambda), \quad \alpha_{il}^j = \sum_{\{\lambda\}} \frac{\partial T_j}{\partial d_i} \frac{\partial T_j}{\partial d_l}, \quad \mu_i^j = \sum_{\{\lambda\}} \left(\frac{\partial T_j}{\partial d_i} \right)^2, \quad (3.4)$$

и перепишем (3.3) в виде

$$\delta d_i = \frac{\left[\beta_i^j - \sum_{l \neq i} \alpha_{il}^j \delta d_l \right]}{\left[\mu_i^j \right]}. \quad (3.5)$$

Тот факт, что данное выражение не зависит от способа получения значения δd_l , является основным свойством, которое позволяет нам использовать формулу для δd_i в качестве оценки работы алгоритмов определения ошибок в толщинах слоёв в режиме “on-line”. Тем самым можно использовать значения δd_l для определения δd_i , несмотря на то, что это те значения, которые были найдены из соответствующего условия минимума функционала.

Для определения толщины d_j рассматриваемого слоя с помощью S -алгоритма (см. подпараграф 1.3.1) для минимизации функционала невязки используется измеренный спектр пропускания T_j^{meas} . Этот спектр пропускания можно использовать для переопределения толщин предыдущих слоёв в процессе минимизации функционала (1.47) и рассматривать такой алгоритм как модифицированный S -алгоритм, описанный в работе [51].

На основе уравнений выше введём критерий, указывающий на то, толщины каких именно слоёв нужно переопределять дополнительно на каждом шаге модифицированного S -алгоритма. Для вывода такого критерия прибегнем к следующим предположениям. Все ошибки в толщинах слоёв будем рассматривать как независимые случайные величины из нормального распределения с нулевым математическим ожиданием. Так как время напыления покрытия зависит от большого числа случайных факторов [26], то это предположение вполне уместно в наших рассуждениях. Также далее будем говорить, что среднеквадратичные отклонения данных ошибок одинаковы и равны σ . Погрешности в измерениях спектральных характеристик $\delta T^{meas}(\lambda)$ будем также рассматривать как нормально распределённые случайные величины с нулевым средним и среднеквадратичным отклонением σ_{meas} . Также будем считать, что значение σ_{meas} одинаково для всех слоёв и для всех длин волн λ .

Из вышеуказанных предположений о поведении ошибок толщин δd_l и ошибок измерений спектров $\delta T^{meas}(\lambda)$ очевидно, что математическое ожидание δd_i , вычисленное для формулы (3.5), равно нулю. С помощью этого выражения можно аналогично получить значение для среднеквадратичного отклонения δd_i :

$$\sigma^j(\delta d_i) = [(B_i^j)^2 \sigma_{meas}^2 + (C_i^j)^2 \sigma^2]^{\frac{1}{2}}. \quad (3.6)$$

где

$$B_i^j = \frac{1}{\left[\sum_{\{\lambda\}} \left(\frac{\partial T_j}{\partial d_i} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}}, \quad C_i^j = \frac{\left[\sum_{l=1, l \neq i}^j \left(\sum_{\{\lambda\}} \frac{\partial T_j}{\partial d_i} \frac{\partial T_j}{\partial d_l} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}}{\left[\sum_{\{\lambda\}} \left(\frac{\partial T_j}{\partial d_i} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}}. \quad (3.7)$$

Зададим соотношение между σ_{meas} и σ через введение коэффициента κ . Пусть

$$\sigma_{meas} = \kappa \sigma. \quad (3.8)$$

Тогда из (3.6) получаем выражение

$$\sigma^j(\delta d_i) = A_i^j \sigma, \quad (3.9)$$

где

$$A_i^j = [\kappa^2 (B_i^j)^2 + (C_i^j)^2]^{\frac{1}{2}}.$$

Таким образом, выражение (3.9) может быть использовано как вычислительный способ оценить точность определения толщины для каждого слоя. На основании данного метода можно искать наиболее эффективные алгоритмы для решения задачи восстановления толщин напылённых слоёв. Для идентификации номеров слоёв, толщина которых должна быть переопределена, сравниваются коэффициенты A_i^j из уравнения (3.9) с аналогичными коэффициентами, найденными на предыдущих этапах алгоритма. Предположим, что для i -го слоя

$$A_i^j < \min_{1 \leq k \leq j-1} A_i^k. \quad (3.10)$$

Это будет означать, что на j -ом шаге работы модифицированного S -алгоритма при определении толщины d_j текущего слоя толщина ранее напыленного i -го слоя d_i может быть определена более точно, чем это было сделано на предыдущих шагах. Таким образом, основная идея модифицированного S -алгоритма

заключается в использовании функционала невязки (1.47) не только для определения толщины d_j , но и для переопределения тех толщин d_i , для которых выполняется неравенство (3.10).

В выражении (3.5) для определения ошибки толщины δd_i в i -ом слое использовался один функционал Φ_j (1.47) ($i < j$). Но для повышения точности работы алгоритма можно использовать несколько парциальных функционалов Φ_k^p (1.48) и определять δd_i , минимизируя сумму таких функционалов:

$$\Phi_J = \sum_{k \in J} \Phi_k^p, \quad (3.11)$$

где J — некоторое подмножество номеров слоёв. Тогда по аналогии с (3.5) выражение для δd_i будет выглядеть как

$$\delta d_i = \frac{\left[\sum_{k \in J, k \geq i} \beta_i^k - \sum_{k \in J, k \geq i} \sum_{l=1, l \neq i}^k \alpha_{il}^k \delta d_l \right]}{\left[\sum_{k \in J, k \geq i} \mu_i^k \right]}, \quad (3.12)$$

где коэффициенты β_i^k , α_{il}^k , μ_i^k вычисляются по формуле (3.4). Здесь суммирование ведётся по всем k , соответствующим выбранной совокупности парциальных функционалов. При этом в выражении (3.12) суммирование ведётся только по тем k , которые больше или равны i . Это связано с тем, что переменная толщина d_i и соответствующая ей ошибка δd_i не входят в парциальные функционалы с номерами, меньшими i .

Перепишем выражение (3.12) в виде

$$\delta d_i = \sum_{k \in J, k \geq i} \sum_{\{\lambda\}} \tilde{\beta}_i^k(\lambda) \delta T_k^{meas}(\lambda) + \sum_{k \in J, k \geq i} \sum_{l=1, l \neq i}^k \tilde{\alpha}_{il}^k \delta d_l, \quad (3.13)$$

где

$$\tilde{\beta}_i^k(\lambda) = \frac{\frac{\partial T_k}{\partial d_i}}{\sum_{k \in J, k \geq i} \sum_{\{\lambda\}} \left(\frac{\partial T_k}{\partial d_i} \right)^2}, \quad \tilde{\alpha}_{il}^k = \frac{\sum_{\{\lambda\}} \frac{\partial T_k}{\partial d_i} \frac{\partial T_k}{\partial d_l}}{\sum_{k \in J, k \geq i} \sum_{\{\lambda\}} \left(\frac{\partial T_k}{\partial d_i} \right)^2}.$$

Поменяем во втором члене в правой части (3.13) порядки суммирования по k и l . Получим

$$\delta d_i = \sum_{\{\lambda\}} \sum_{k \in J, k \geq i} \tilde{\beta}_i^k(\lambda) \delta T_k^{meas}(\lambda) + \sum_{l=1, l \neq i}^{k_{max}} \left(\sum_{k \in J, k \geq \max\{i, l\}} \tilde{\alpha}_{il}^k \right) \delta d_l. \quad (3.14)$$

В этом выражении k_{max} обозначает максимальный номер парциального функционала из набора парциальных функционалов J , используемых для определения ошибок в толщинах слоёв δd_i .

При сделанных предположениях о характере ошибок $\delta T_k^{meas}(\lambda)$ и δd_l математическое ожидание δd_i , вычисленное на основании соотношения (3.14), будет равно нулю. Вычисляя с помощью этого соотношения среднеквадратичное отклонение $\sigma^J(\delta d_i)$ ошибки δd_i , получим:

$$\sigma^J(\delta d_i) = [(B_i^J)^2 \sigma_{meas}^2 + (C_i^J)^2 \sigma^2]^{\frac{1}{2}}. \quad (3.15)$$

Введённый в выражении (3.15) верхний индекс J призван указать, что все соответствующие величины зависят от выбора набора парциальных функционалов J . При этом для B_i^J и C_i^J получаем следующие выражения:

$$B_i^J = \frac{1}{\left[\sum_{k \in J, k \geq i} \sum_{\{\lambda\}} \left(\frac{\partial T_k}{\partial d_i} \right)^2 \right]}, \quad C_i^J = \frac{\left[\sum_{l=1, l \neq i}^{k_{max}} \left(\sum_{k \in J, k \geq \max\{i, l\}} \sum_{\{\lambda\}} \frac{\partial T_k}{\partial d_i} \frac{\partial T_k}{\partial d_l} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}}{\left[\sum_{k \in J, k \geq i} \sum_{\{\lambda\}} \left(\frac{\partial T_k}{\partial d_i} \right)^2 \right]}. \quad (3.16)$$

Зададим соотношение между σ_{meas} и σ также, как и в выражении (3.8). Пусть

$$\sigma_{meas} = \kappa \sigma. \quad (3.17)$$

Тогда из формулы (3.15) получим выражение

$$\sigma^J(\delta d_i) = A_i^J \sigma, \quad \text{где} \quad (3.18)$$

$$A_i^J = [\kappa^2 (B_i^J)^2 + (C_i^J)^2]^{\frac{1}{2}}. \quad (3.19)$$

Таким образом, каждому слою покрытия можно сопоставить оценку точности определения его толщины d_i , выражаемую коэффициентом A_i^J в формуле (3.18). Естественнo, что эта оценка зависит от выбора набора парциальных функционалов, используемых для решения задачи восстановления параметров слоёв. Полученная оценка может быть использована также для поиска более эффективных алгоритмов решения задачи восстановления толщин напылённых слоёв.

В случае T -алгоритма на j -ом шаге решения задачи определения толщин слоёв используется сумма всех парциальных функционалов с номерами от 1 до j . В модифицированном T -алгоритме предлагается использовать ту

же сумму парциальных функционалов (в формулах (3.15), (3.16), (3.18), (3.19) $J = \{1, \dots, j\}$), но определять не все толщины, как в T -алгоритме, а только те, для которых выполняется аналогичное (3.10) неравенство:

$$A_i^j < \min_{1 \leq k \leq j-1} A_i^k. \quad (3.20)$$

Как и в случае модифицированного S -алгоритма, модифицированному T -алгоритму можно сопоставить набор коэффициентов $\{A_1, \dots, A_N\}$ (N — количество слоёв многослойного покрытия). Этот набор можно рассматривать как оценку точности работы модифицированного T -алгоритма.

3.1.2 Сравнительный анализ

Сравнение работы модифицированного T -алгоритма с работой других описанных алгоритмов было проведено для трёх многослойных покрытий. Структура покрытий представляет собой поочерёдно следующие друг за другом слои с высоким (H) и низким (L) показателями преломления, состоящие из ZrO_2 (нечётные слои) и SiO_2 (чётные слои) соответственно.

Для сравнения использовались методы математического моделирования напыления многослойных оптических покрытий из параграфа 2.1. Экспериментальные данные напыления были получены для следующих модельных задач: поляризатор (28 слоёв) [49], горячее зеркало (40 слоёв) [41] и трёхполосный фильтр (51 слой). Для моделирования данных использовались случайные ошибки в толщинах слоёв ($\sigma_{add} \sim 6\%$ от толщины слоя). Также для значений спектральных характеристик в зависимости от длин волн были использованы случайные ($\sigma_{rand}^{meas} \sim 1\%$ от толщины слоя) и флуктуационные ($\sigma_{fluc}^{meas} \sim 0.5\%$ от толщины слоя) ошибки. Показатели преломления для материалов слоёв и подложки (S) принимались постоянными для рассматриваемых длин волн ($n_H = 2.05$, $n_L = 1.45$, $n_S = 1.5$), а поглощение не учитывалось. Моделирование экспериментальных данных выполнялось для диапазона длин волн 450-1000 нм. Отметим, что из-за сильного влияния эффекта кумулятивного накопления ошибок S -алгоритм не учитывался в сравнительном анализе, так как для всех рассмотренных покрытий он работал достаточно плохо.

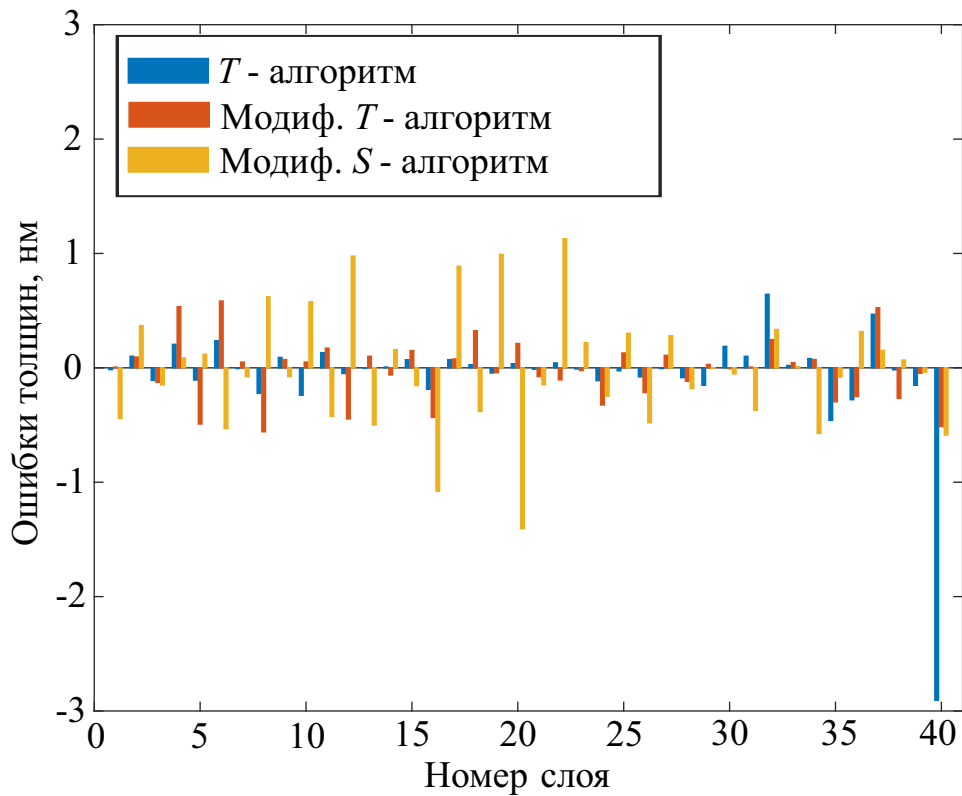


Рисунок 3.1 — Модельная задача для 40-слойного горячего зеркала: ошибки толщин слоёв, определённых различными алгоритмами

На рисунке 3.1 изображены распределения значений ошибок толщин слоёв для 40-слойного горячего зеркала для результатов работы различных алгоритмов. Как и следовало ожидать, результат модифицированного S -алгоритма наименее надёжен по сравнению с результатами работы полного и модифицированного T -алгоритма. Исходя из заданных в процессе моделирования величин шумов, полученные толщины могут содержать ошибки, в среднем не превышающие 1%. Результаты работы алгоритмов для трёхполосного фильтра аналогичны рассмотренному выше случаю (см. рисунок 3.2). Полученные результаты сравнения алгоритмов показывают, что самый затратный по времени (но, как правило, наиболее надёжный) T -алгоритм приводит к росту ошибок толщин слоёв покрытия на последних этапах работы. Однако модифицированная версия данного алгоритма не имеет подобного недостатка и обеспечивает высокую точность восстановления искомым толщин слоёв. В полном T -алгоритме избыток измерительных данных с большими погрешностями приводит к переопределению уже надёжно определённых толщин слоёв. В связи с этим в модифицированных алгоритмах переопределяются только те слои, которые могут быть найдены более точно. Результаты моделирования 28-слойного по-

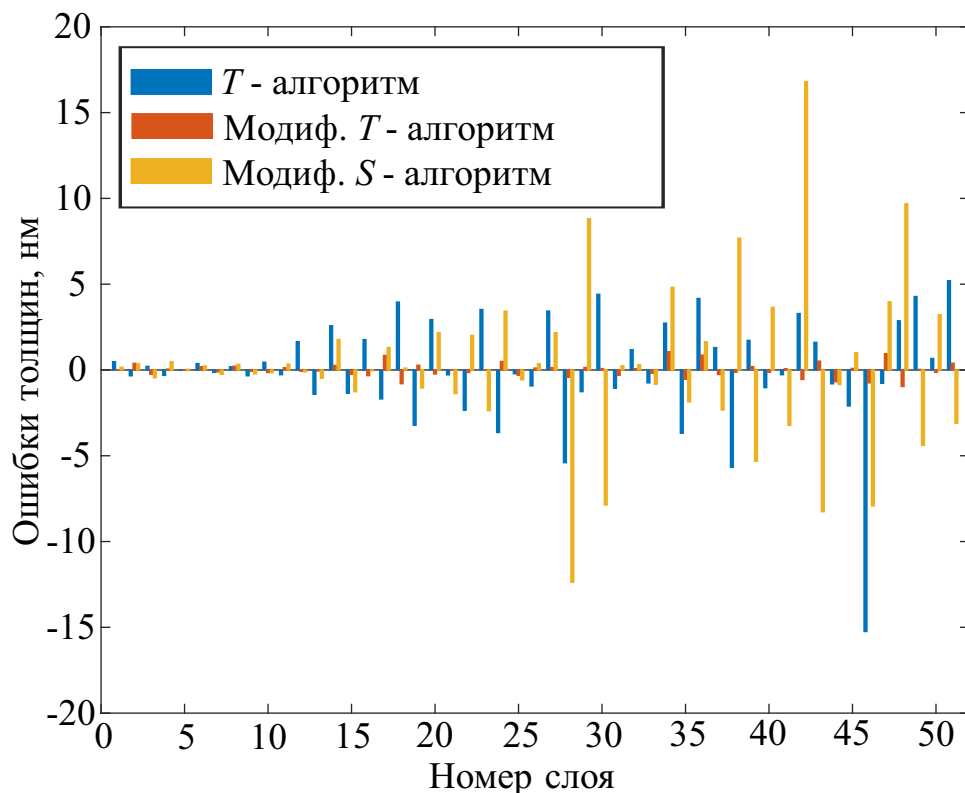


Рисунок 3.2 — Модельная задача для трёхполосного фильтра: ошибки толщин слоёв, определённых различными алгоритмами

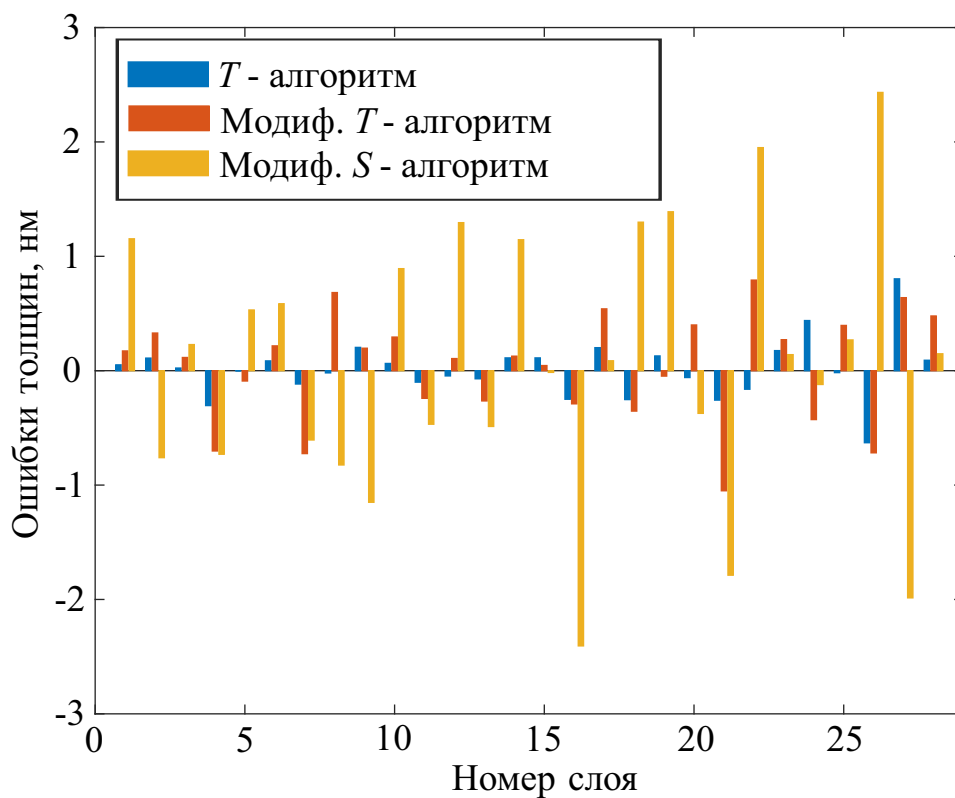


Рисунок 3.3 — Модельная задача для 28-слойного поляризатора: ошибки толщин слоёв, определённых различными алгоритмами

ляризатора (см. рисунок 3.3) в целом воспроизводят характерные черты уже рассмотренных многослойных покрытий.

Анализ результатов работы описанных алгоритмов для рассматриваемых многослойных покрытий показывает явное преимущество модифицированного T -алгоритма перед полным T -алгоритмом и модифицированным S -алгоритмом, особенно для покрытий с большим количеством слоёв ($N > 30$).

3.2 Алгоритмы с использованием положений экстремумов спектральных характеристик

При применении вышеописанных алгоритмов для решения обратной задачи определения толщин напылённых слоёв существует риск существенного влияния на результат систематических ошибок в спектральных данных. Как было показано в работах [52; 53], именно такие ошибки оказывают наиболее негативное влияние на решение обратных задач по определению параметров оптических покрытий. На рисунке 3.4 продемонстрирован типичный пример расхождения экспериментальной и теоретической зависимостей спектральных характеристик пропускания вследствие наличия систематических ошибок. Вследствие этого в работе [54] был предложен подход к остановке процесса напыления на основе сравнения положения экстремумов экспериментальной и теоретической зависимостей коэффициента пропускания напылённого многослойного покрытия. Очевидно, что систематические ошибки в спектре не влияют на положение этих экстремумов. В данном параграфе предлагается развитие подхода, предложенного в [54], для разработки алгоритмов определения толщин слоёв напылённого оптического покрытия. Результаты данного параграфа опубликованы в работе автора [8].

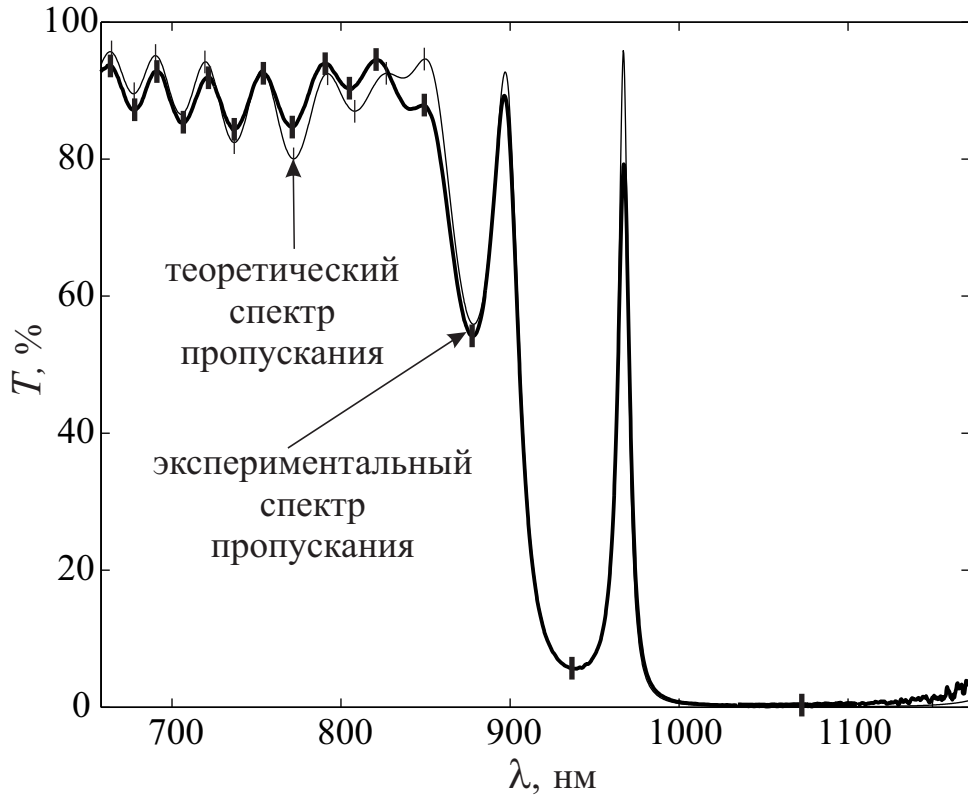


Рисунок 3.4 — Пример типичных экспериментального и теоретического спектров пропускания; засечками отмечены положения соответствующих экстремумов

3.2.1 Описание алгоритма

Аналогично тому, как конструировались алгоритмы решения обратной задачи в параграфе 1.3, зададим основной функционал, который будет использоваться для поиска толщин напылённых слоёв. Функционал будет состоять из суммы квадратов разностей положений всех экстремумов на экспериментальных и модельных зависимостях коэффициента пропускания от длины волны напылённых k слоёв с толщинами $d_{\overline{1,k}} = \{d_1, \dots, d_k\}$:

$$\Phi(d_{\overline{1,k}}) = \sum_{i=1}^{I(k)} \left(\lambda_{k,i}^e - \lambda_i^t(d_{\overline{1,k}}) \right)^2,$$

где $\lambda_{k,i}^e$ — положение i -го экспериментального экстремума (определяется из экспериментальной спектральной зависимости $T^{meas}(\lambda)$ после напыления k слоёв), $\lambda_i^t(d_{\overline{1,k}})$ — положение i -го теоретического экстремума (определяется из теоретической зависимости для $T(\lambda)$ (см. параграф 1.1), как итог решения прямой задачи по определению оптических параметров многослойной системы,

состоящей из k слоёв), $I(k)$ — количество экстремумов функции $T(\lambda)$ для покрытия с k напылёнными слоями, $i = \overline{1, I(k)}$.

Теперь составим функционал $\Phi_T(d_{\overline{1,j}})$, который представляет собой сумму функционалов $\Phi(d_{\overline{1,k}})$ для последовательности многослойных покрытий, получаемых в процессе напыления итогового покрытия слой за слоем, начиная с однослойного покрытия и заканчивая многослойной системой с числом слоёв j :

$$\Phi_T(d_{\overline{1,j}}) = \sum_{k=1}^j \Phi(d_{\overline{1,k}}) \equiv \sum_{k=1}^j \left[\sum_{i=1}^{I(k)} \left(\lambda_{k,i}^e - \lambda_i^t(d_{\overline{1,k}}) \right)^2 \right].$$

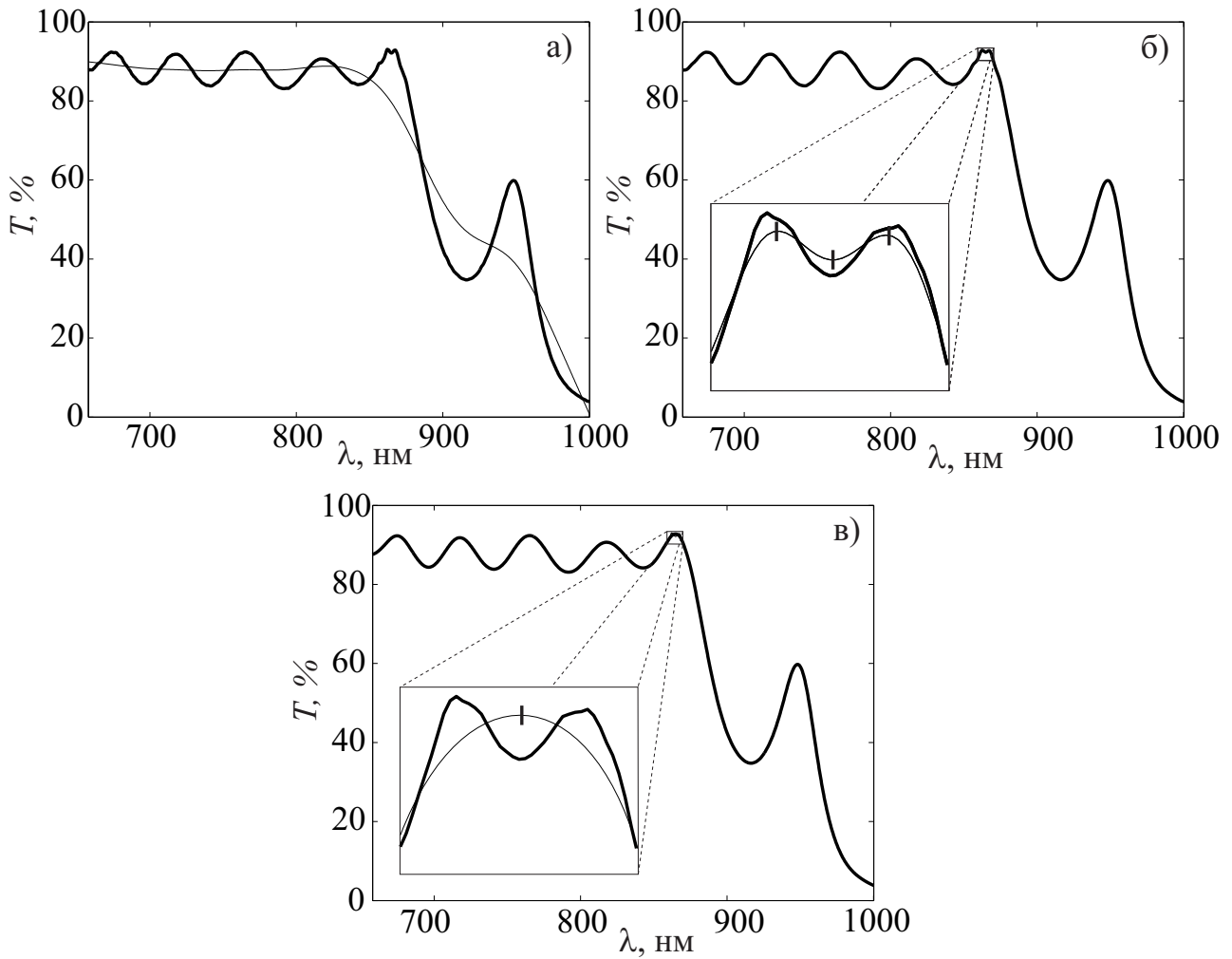
По аналогии с методами решения обратных задач оптики на основе минимизации функционалов невязки [16—18] функционал Φ_T будет соответствовать T -алгоритму. Ещё раз обратим внимание на то, что для каждого набора $d_{\overline{1,k}}$ определяется $\lambda_i^t(d_{\overline{1,k}})$ посредством решения прямой задачи определения спектрального коэффициента пропускания $T(\lambda)$ (см. параграф 1.1), а $\lambda_{k,i}^e$ — из экспериментальной зависимости коэффициента пропускания $T^{meas}(\lambda)$ от длины волны, измеренной для покрытия с числом слоёв k . Минимизируя функционал $F_T(d_{\overline{1,j}})$, можно определить значения толщин напылённых слоёв $d_{\overline{1,j}} = \{d_1, \dots, d_j\}$, наиболее близких к реальным, в чём и заключается суть T -алгоритма.

При реализации S -алгоритма, в отличие от T -алгоритма, аналогично тому, как это было сделано в подпараграфе 1.3.1, будем минимизировать функционал $\Phi_S(d_j)$, переменным аргументом которого является только значение толщины d_j текущего напылённого слоя:

$$\Phi_S(d_j) = \sum_{i=1}^{I(j)} \left(\lambda_{j,i}^e - \lambda_i^t(d_{\overline{1,j}}) \right)^2.$$

3.2.2 Численные аспекты поиска экстремумов экспериментально измеренной функции $T^{meas}(\lambda)$

Одной из ключевых проблем при реализации рассматриваемых алгоритмов является определение положения экстремумов $\lambda_{j,i}^e$ на экспериментально измеренной зависимости $T^{meas}(\lambda)$ после напыления j слоёв. Это связано с тем, что экспериментальные данные измеряются с погрешностью, и, как следствие,



а) — слишком сильное сглаживание (теряются реальные экстремумы);

б) — недостаточное сглаживание (возникают «ложные» экстремумы);

в) — оптимальное сглаживание.

Рисунок 3.5 — Примеры сглаживаний зависимости спектральной характеристики пропускания от длины волны

прямое достоверное определение локальных экстремумов невозможно (см. типичные примеры экспериментально измеренных зависимостей на рисунках 3.5 и 3.6).

Для решения этой проблемы предлагается использовать сплайн-аппроксимацию экспериментальных зависимостей $T^{meas}(\lambda)$, заданных своими сеточными значениями $T^{meas}(\lambda_l)$ ($l = \overline{1, L}$, где L — количество измеренных данных $T^{meas}(\lambda)$ на отрезке $[\lambda_{min}, \lambda_{max}]$), гладким кубическим сплайном $f(\lambda) \in C^{(2)}[\lambda_{min}, \lambda_{max}] \subset W_2^2[\lambda_{min}, \lambda_{max}]$. В связи с тем, что набор экспериментальных значений $T^{meas}(\lambda_l)$ задан с ошибкой, задача определения оптимальной функции $f(\lambda)$ является некорректно поставленной. Для её решения предлагается использовать регуляризирующий алгоритм, основанный на минимизации функ-

ционала А. Н. Тихонова следующего вида:

$$\Phi_L^\alpha[f] = \alpha \sum_{l=1}^L \left(T^{meas}(\lambda_l) - f(\lambda_l) \right)^2 + (1 - \alpha) \int_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} \left(\frac{d^2 f}{d\lambda^2} \right)^2 d\lambda,$$

где α — параметр сглаживания (регуляризации): $\alpha \in (0,1)$. Вторая производная, а затем и интеграл в сглаживающем функционале могут быть вычислены приближённо со вторым порядком точности.

Обоснованный выбор параметра регуляризации α чрезвычайно важен, так как при его необоснованном выборе можно получить такие выражения для аппроксимирующей функции $f(\lambda)$, которые сильно отличаются от оптимальной ситуации. На рисунке 3.5 представлены примеры для: а) слишком большого значения α , которое приводит к чрезмерному сглаживанию экспериментально измеренной кривой $T^{meas}(\lambda)$, аппроксимирующей функцией $f^\alpha(\lambda)$, и, как следствие, к потере части (или всех) локальных экстремумов; б) слишком маленького значения α , которое приводит к недостаточному сглаживанию, и, как следствие, к возникновению «ложных» локальных экстремумов; в) оптимального значения α^* , при котором аппроксимирующая функция $f^{\alpha^*}(\lambda)$ соответствует реальности.

Как известно из [44; 45], выбор параметра регуляризации α должен быть согласован с погрешностью задания входных данных δ . Оптимальный параметр сглаживания (регуляризации) α^* , соответствующий уровню погрешности задания входных данных δ , может быть выбран по обобщённому принципу невязки [44; 45]:

$$\rho(\alpha^*) = 0,$$

где

$$\rho(\alpha) = \sum_{l=1}^L \left(T^{meas}(\lambda_l) - f^\alpha(\lambda_l) \right)^2 - \delta^2,$$

$f^\alpha(\lambda)$ — экстремум функционала $\Phi_L^\alpha[f]$, δ^2 определяется из соотношения

$$\sum_{l=1}^L \left(T^{meas}(\lambda_l) - T(\lambda_l) \right)^2 \leq \delta^2,$$

где $T(\lambda_l)$ — результат решения прямой задачи λ_l (см. параграф 1.1).

Таким образом, после реализации сплайн-аппроксимации экспериментальной зависимости $T^{meas}(\lambda)$ с оптимальным параметром сглаживания получаем гладкую функцию, по которой можно определить все экстремумы, соответствующие реальным экспериментальным зависимостям $T^{meas}(\lambda)$.

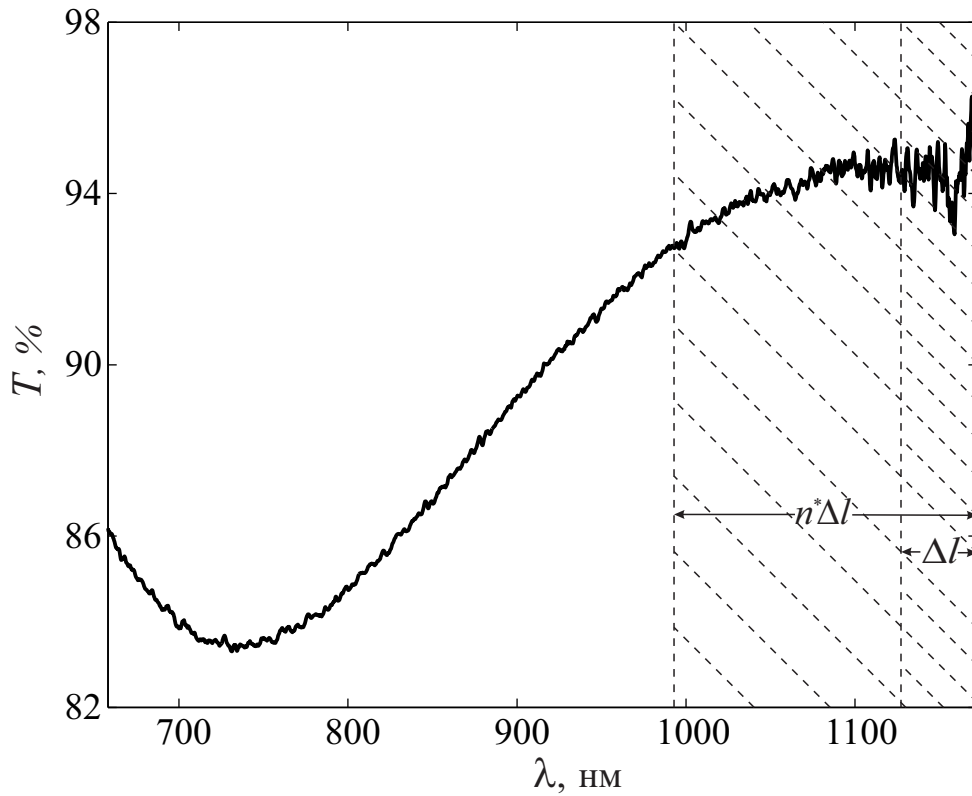


Рисунок 3.6 — Пример обрезания экспериментальной зависимости $T(\lambda)$

В качестве следующей проблемы численного характера следует отметить проблему, связанную с тем, что в данном классе задач абсолютная погрешность экспериментально измеряемых значений $T^{meas}(\lambda)$ может значительно увеличиваться на границах измеряемого диапазона длин волн (см. рисунок 3.6). Из-за этого среднеквадратичная погрешность задания входных данных может оказаться сильно завышенной, что может привести к излишнему сглаживанию $T^{meas}(\lambda)$. В связи с этим был разработан подход, основанный на автоматическом исключении из обработки наиболее зашумлённых экспериментальных данных.

На основе характерного для эксперимента числа точек измерений Δl (см. рисунок 3.6) определяется число точек $n^*\Delta l$, которые следует исключить из дальнейшей обработки:

$$n^* = \underset{n=0, \left[\frac{L}{\Delta l}\right]}{\operatorname{argmin}} \Phi_{L-n\Delta l}^{\alpha^*}[f^{\alpha^*}(\lambda)].$$

В качестве итоговой аппроксимирующей функции $f^{\alpha^*}(\lambda)$ выбирается функция, реализующая экстремум функционала $\Phi_{L-n^*\Delta l}^{\alpha^*}[f]$.

3.2.3 Результаты вычислительных экспериментов

Численные эксперименты были проведены для S - и T -алгоритмов на примере двух различных многослойных покрытий, состоящих из чередующихся слоёв (чётный слой — SiO_2 , нечётный слой — ZrO_2). Покрытия напылены на подложку толщиной $D = 10^{-3}$, сделанную из материала $BK7$. Дисперсионные зависимости показателей преломления от длины волны для соответствующих материалов и зависимость коэффициента поглощения подложки от длины волны были взяты из справочных материалов.

Первый тип покрытия представлял собой многослойную систему, состоящую из 14 слоёв, каждый из которых имеет толщину 100 нм. Второй тип покрытия представлял собой 14-ти слойную систему со следующими значениями толщин в нанометрах:

$$d_{\overline{1,14}} = \{130, 125, 120, 115, 110, 105, 100, 105, 110, 115, 120, 125, 130, 135\}.$$

Для каждого из покрытий были смоделированы ошибки двух видов:

1. Ошибка +5% в толщине первого слоя. Случайные ошибки до 0.5% в измеренных данных.
2. Ошибка $\pm 1\%$ в толщинах всех слоёв, кроме двух, в которых ошибка толщин составляла +5% (3-й слой) и -7% (10-й слой). Случайная ошибка до 0.5% в измеренных данных.

На рисунке 3.7 представлены результаты работы S - и T -алгоритмов для покрытия первого типа. Соответственно, в первый слой была внесена ошибка толщины +5% от номинальной толщины напылённого слоя (то есть $d_1^{exp} = 105$, а $d_{\overline{1,14}}$ принимаем за теоретическую конструкцию толщин слоёв покрытия). Из результатов работы алгоритмов видно, что эффективность T -алгоритма выше, чем эффективность S -алгоритма.

На рисунке 3.8 представлены результаты работы T - и S -алгоритмов для покрытия второго типа. В этом случае были внесены ошибки $\pm 1\%$ от толщины всех слоёв, а в толщины 3-го и 10-го слоёв были внесены ошибки величиной +5% и -7% от толщины напылённых слоёв. В этом случае также наблюдается бесспорно более высокая эффективность работы T -алгоритма по сравнению с S -алгоритмом.

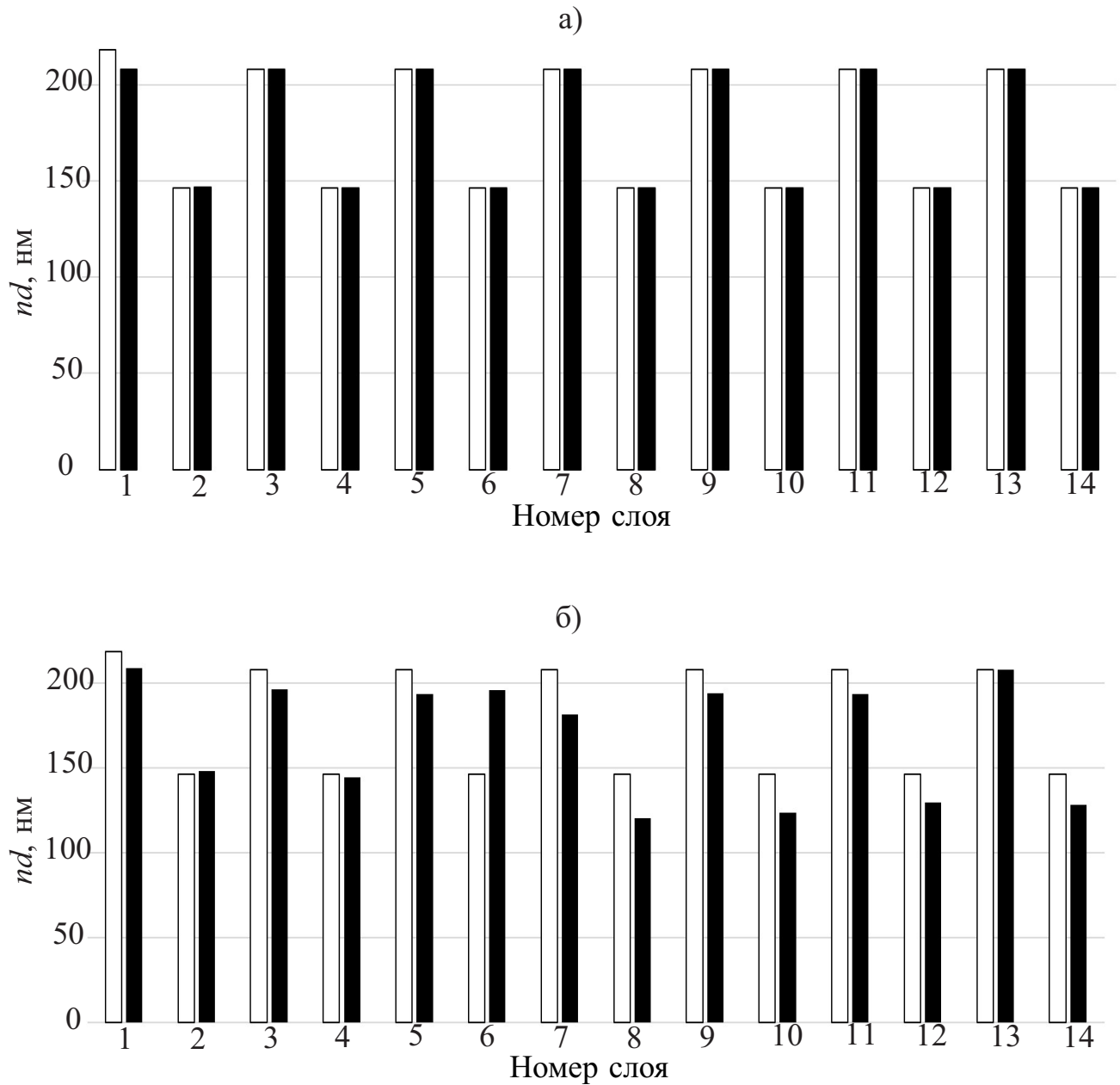


Рисунок 3.7 — Результат работы алгоритмов в виде оптических толщин для первого типа покрытия с ошибками первого вида, где столбцы белого цвета — реальные значения толщин, столбцы черного цвета — значения толщин, полученные как итог работы алгоритмов: а) — T -алгоритм; б) — S -алгоритм

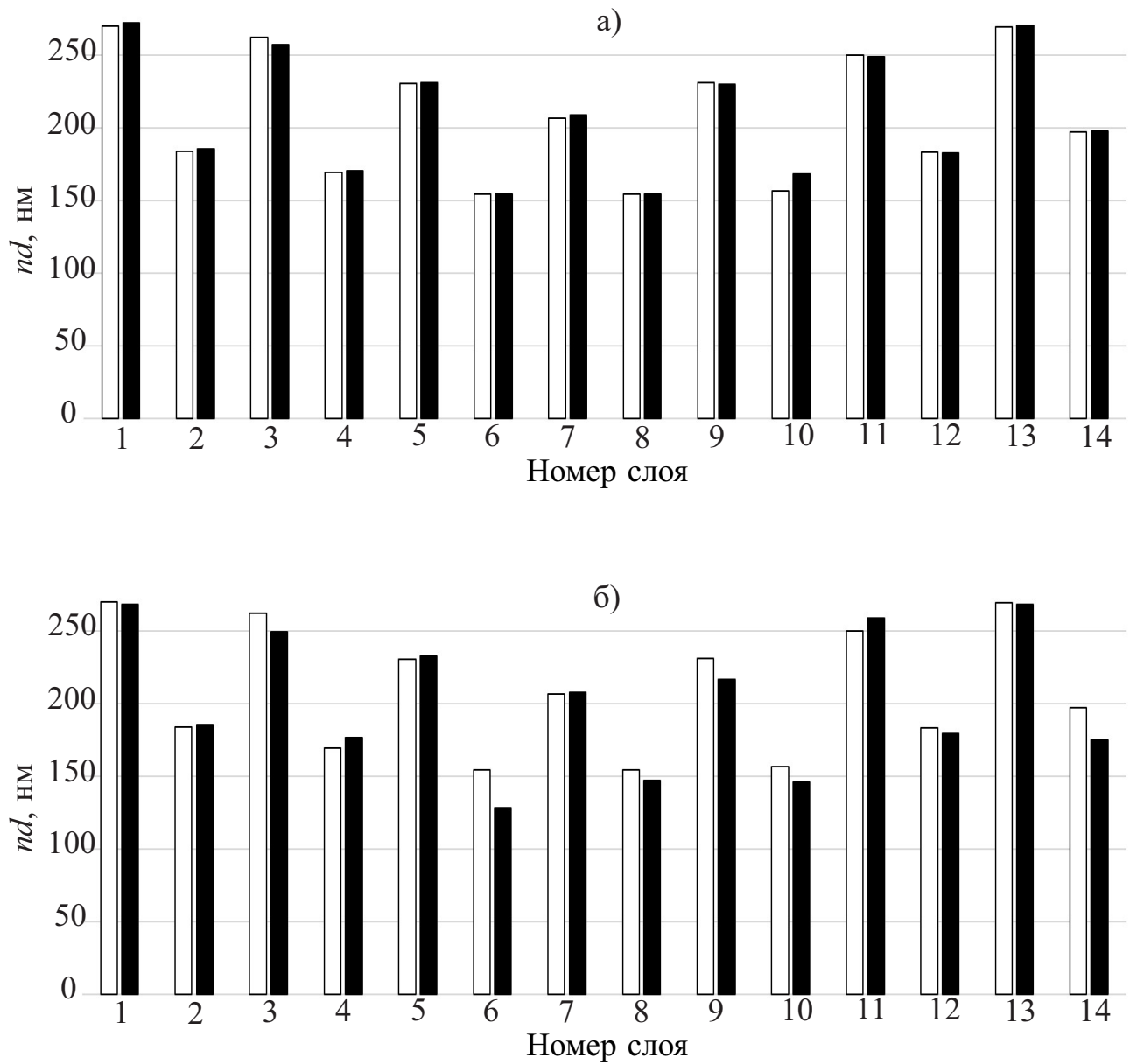


Рисунок 3.8 — Результат работы алгоритмов в виде оптических толщин для второго типа покрытия с ошибками первого вида, где столбцы белого цвета — реальные значения толщин, столбцы черного цвета — значения толщин, полученные как итог работы алгоритмов: а) — T -алгоритм; б) — S -алгоритм

3.3 Нелокальный алгоритм

При работе широкополосного оптического контроля напыления многослойных покрытий накапливаются огромные массивы экспериментальных данных, измеряемых внутри напылительной камеры через короткие интервалы времени порядка одной или нескольких секунд. Наличие таких объёмов экспериментальных данных позволяет подойти к вопросу о повышении точности контроля толщин слоёв оптических покрытий гораздо глубже, чем это было сделано в главе 2.

Как уже было указано ранее, широкополосному оптическому контролю присущ эффект кумулятивного накопления ошибок напыления. Особенно сильное негативное воздействие на точность контроля всего покрытия могут оказать ошибки в параметрах первого слоя покрытия, поскольку существует ещё и так называемая проблема первого слоя [49]. В отличие от всех остальных, первый слой напыляется на чистую подложку, что часто приводит к заметному отличию его показателя преломления от показателей преломления последующих слоёв из того же материала [49]. Возможны и другие особенности первого слоя покрытия. Поэтому повышение точности определения параметров этого слоя имеет определяющее значение для повышения точности широкополосного контроля процесса напыления всего покрытия в целом.

В данном параграфе представлен детальный анализ контроля напыления первого слоя, результаты которого опубликованы в работе автора [9]. Во-первых, обсуждается обоснованный выбор математической модели слоя. Во-вторых, при моделировании учитываются все имеющиеся в распоряжении экспериментальные данные и вся априорная информация об искомых параметрах модели. В конце параграфа анализируются полученные результаты вычислительных экспериментов.

3.3.1 Модели слоя и алгоритмы анализа данных измерений

В случае широкополосного оптического контроля важнейшее значение для надёжного определения параметров первого слоя покрытия имеет наличие

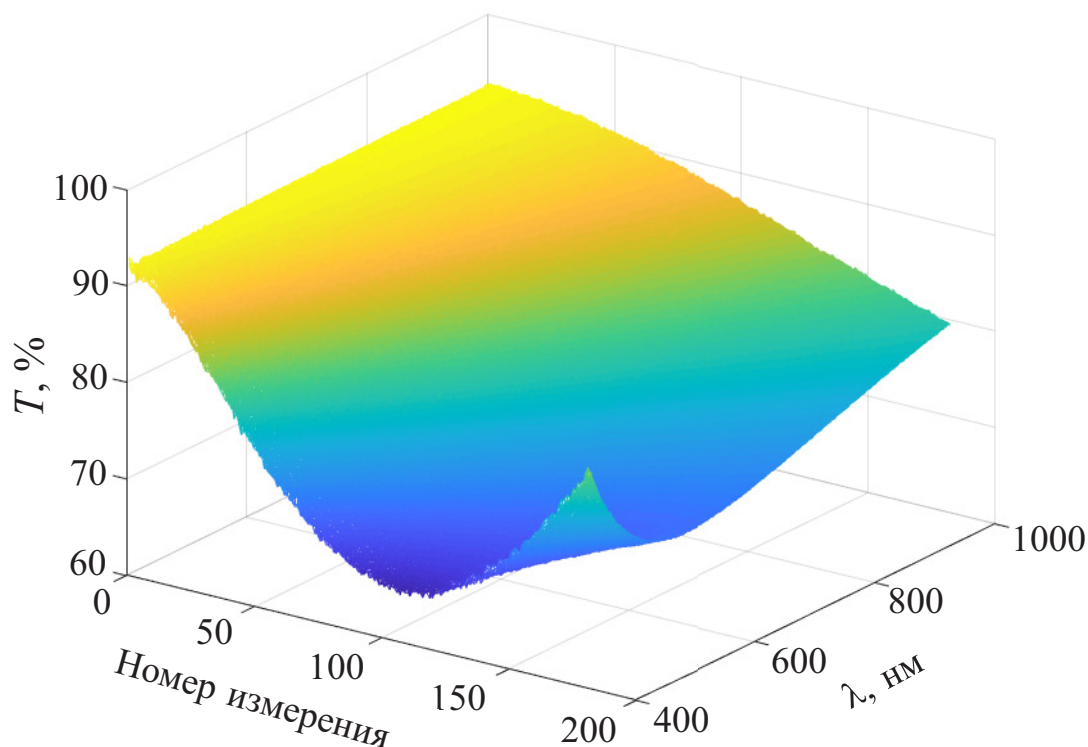


Рисунок 3.9 — Данные измерений коэффициента пропускания T , полученные при напылении первого слоя покрытия: число измеренных спектров коэффициента пропускания равно 184, число точек по длине волны в каждом спектре равно 1494

большого объёма экспериментальных данных, получаемых в процессе его напыления. В данном подпараграфе демонстрируются возможности использования всех этих данных на примере исследования параметров первого слоя покрытия, образованного на основе оксида ниобия Nb_2O_5 . Этот материал является одним из наиболее широко используемых на практике плёночных материалов с высоким показателем преломления.

Для напыления покрытия с первым слоем из Nb_2O_5 использовалась модернизированная вакуумная камера Balzerz BAK-1052, на которой была установлена новая система широкополосного оптического контроля немецкой фирмы BR-optics GmbH. Измерение спектров коэффициента пропускания во время напыления производилось каждые 2 секунды. При этом каждый спектр содержал 1494 точки на сетке длин волн в спектральном диапазоне от 400 нм до 1000 нм. Общее число измеренных спектров в течение напыления первого слоя составило 184. Данные измерений, полученные при напылении первого слоя покрытия, представлены на рисунке 3.9.

В обсуждаемом эксперименте напылялся слой с целевой толщиной 68.11 нм. Контроль толщины осуществлялся по минимуму невязки между измеренным спектром пропускания и ожидаемым в конце напыления слоя спектром с помощью программы контроля, поставляемой вместе с системой широкополосного оптического контроля. Как было указано ранее (см. параграф 2.1), толщина реально напылённого слоя может отличаться от запланированного значения. Главной задачей является наиболее точное определение истинной толщины и других параметров напылённого слоя.

При численной обработке данных измерений важнейшим вопросом является правильный выбор модели слоя. Эта модель должна включать в себя основной искомый параметр — толщину слоя. В модель также включается параметрическое представление дисперсионной зависимости показателя преломления слоя от длины волны. Возможно также включение и других параметров, необходимость учёта которых обсуждается далее.

В рассматриваемых нами видимой и ближней инфракрасной областях спектра Nb_2O_5 является слабо поглощающим материалом, а дисперсионная зависимость его показателя преломления хорошо описывается моделью Коши:

$$n(\lambda) = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4}, \quad (3.21)$$

где A , B , C — некоторые коэффициенты, λ — длина волны.

Зависимость показателя волны, определяемая выражением (3.21), была заранее детально исследована на основе преломления Nb_2O_5 от длины экспериментов с существенно более толстыми, чем первый слой, однослойными покрытиями, что необходимо для более надёжного определения хода дисперсионной зависимости [55]. При этом были найдены следующие значения для набора входящих в (3.21) параметров: $A = 2.1239$, $B = 1.7656 \cdot 10^4$, $C = 3.8222 \cdot 10^9$ (предполагается, что в (3.21) длина волны задается в нанометрах).

Хорошо известно, что напыляемые тонкие плёнки часто оказываются неоднородными по толщине [55]. Неоднородность определяется в первую очередь вариациями плотности напыляемой плёнки, что приводит к изменению её показателя преломления в процессе напыления. Поскольку изменения плотности являются достаточно малыми, ход дисперсионной зависимости показателя преломления изменяется незначительно, и вариации показателя преломления плёнки сводятся в первом приближении к сдвигу дисперсионной зависимости

вверх или вниз в целом. Это позволяет представить зависимость показателя преломления плёнки с малой неоднородностью в виде [55]:

$$n(z, \lambda) = n(\lambda) q(z),$$

где $q(z)$ — так называемый фактор неоднородности слоя, z — высота, отсчитанная от поверхности подложки.

Для фактора неоднородности слоя можно ввести простое параметрическое представление, исходя из предположения Шрёдера [56] о том, что показатель преломления неоднородной плёнки является гладкой функцией и незначительно отличается от своего среднего значения. При таких условиях все интерференционные эффекты, связанные с неоднородностью показателя преломления внутри плёнки, можно игнорировать и учитывать только те интерференционные эффекты, которые связаны с резкими изменениями показателя преломления на границах плёнки. В рамках предположения Шрёдера конкретный тип отклонения показателя преломления от его среднего значения n_{mean} не является существенным. Исходя из этого, можно считать, что показатель преломления слоя линейно изменяется от значения n_{int} на внутренней границе плёнки с подложкой до значения n_{out} на внешней границе плёнки. При этом фактор неоднородности плёнки описывается формулой

$$q(z) = 1 + \frac{\delta}{100\%} \left(\frac{z}{d} - \frac{1}{2} \right),$$

где d — толщина плёнки. Входящий в эту формулу параметр δ называется степенью неоднородности плёнки. Он обычно выражается в процентах, и связь с введёнными выше значениями показателя преломления плёнки описывается формулой

$$\delta = \frac{n_{out} - n_{int}}{n_{mean}} \cdot 100\%.$$

Для повышения устойчивости решения обратной задачи желательно использовать модели с ограниченным числом наиболее существенных с физической точки зрения параметров [44]. Поскольку дисперсионная зависимость показателя преломления Nb_2O_5 была надёжно определена заранее, будем рассматривать только возможность вариации $n(\lambda)$ вверх или вниз в целом, то есть будем включать в число искомых параметров модели только коэффициент A из формулы (3.21).

Далее будут рассмотрены результаты вычислительных экспериментов для двух- и трёхпараметрических моделей первого слоя. В случае двухпараметрической модели параметрами являются толщина d напылённого слоя и коэффициент A в формуле (3.21). В случае трёхпараметрической модели дополнительно учитывается также степень неоднородности слоя δ .

Для построения устойчивых алгоритмов решения обратной задачи большое значение имеет эффективное использование всех имеющихся экспериментальных данных. В настоящее время для определения параметров напылённых слоёв покрытий широко используются алгоритмы, которые в диссертационном исследовании будут называться локальными. Они основываются на минимизации функционалов невязки между экспериментальными данными, полученными в конце напыления слоёв, и соответствующими теоретическими спектрами коэффициентов пропускания, рассчитанными на основе выбранной модели слоя или покрытия. В случае первого слоя покрытия минимизируемый функционал, который будет называться *локальным функционалом невязки*, вводится как

$$F_{loc}(p) = \sqrt{\frac{1}{|\{\lambda\}|} \sum_{\{\lambda\}} (T_{end}(\lambda, p) - T_{end}^{meas}(\lambda))^2}, \quad (3.22)$$

где $T_{end}^{meas}(\lambda)$ — измеренный в конце напыления первого слоя спектр, $T_{end}(\lambda, p)$ — теоретически рассчитанный на основании выбранной модели спектр напылённого слоя в диапазоне значений $\{\lambda\}$ (см. параграф 1.3), а p — набор параметров модели.

Видно, что локальный алгоритм анализирует лишь малую часть представленных на рисунке 3.9 экспериментальных данных, а именно только последний из измеренных спектров. Далее также вводится нелокальный алгоритм решения обратной задачи, который анализирует все имеющиеся данные и основывается на минимизации *нелокального функционала невязки*, определяемого выражением

$$F_{nonloc}(p) = \sqrt{\frac{1}{|\{\lambda\}|N} \sum_{i=1}^N \sum_{\{\lambda\}} (T_i(\lambda, p) - T_i^{meas}(\lambda))^2}. \quad (3.23)$$

Здесь $T_i^{meas}(\lambda)$, $i = 1, \dots, N$ — все спектры, измеренные в течение времени напыления слоя, $T_i(\lambda, p)$ — теоретически рассчитанные спектры напыляемого слоя, соответствующие i -му экспериментальному спектру (см. параграф 1.3), p — набор параметров модели.

В следующем подпараграфе 3.3.2 проводится сравнение результатов решения обратной задачи с помощью локального и нелокального алгоритмов анализа данных. Для проведения этого сравнения понадобятся функционалы невязки, которые строятся аналогично функционалу (3.22) на основе i -го экспериментального спектра. Заметим, что в соответствии с выражением (3.23) квадрат нелокального функционала невязки совпадает с усреднённым значением квадратов всех функционалов невязки 3.22.

Ещё одним важным фактором, который необходимо учитывать при решении обратной задачи, является возможность наличия систематических ошибок в данных измерений. Такие ошибки связаны с неточностью калибровки спектрофотометрической аппаратуры. Они оказывают сильное негативное влияние на определение параметров тонких слоёв [53]. На рисунке 3.10 показана разность между первым измеренным спектром коэффициента пропускания слоя (это первый спектр на рисунке 3.9) и теоретически рассчитанным коэффициентом пропускания в начале напыления слоя. Первое измерение спектра производится непосредственно перед началом напыления, и поэтому теоретический коэффициент пропускания совпадает с коэффициентом пропускания чистой подложки, параметры которой известны с очень высокой точностью. Рисунок 3.10 показывает, что в измеренных данных, наряду со случайной ошибкой измерений, вызывающей осцилляции кривой на этом рисунке, присутствует также систематическая ошибка измерений. Последняя может быть представлена как гладкая аппроксимация найденной разности.

Очевидно, что систематическая ошибка может зависеть от длины волны и изменяться в процессе измерений. Однако попытка описания её многопараметрической зависимостью может привести к дополнительной неустойчивости решения обратной задачи. Поэтому рассматриваются два простейших подхода к её учёту. Первый из них состоит в коррекции всех измеренных данных на основе сравнения первого спектра с теоретически рассчитанным коэффициентом пропускания подложки. Проведём аппроксимацию представленной на рисунке 3.10 разности полиномом второй степени и используем полученную предрассчитанную зависимость $\sigma_{pre}^{syst}(\lambda)$ как систематическую ошибку (обозначаемую нижним индексом «pre» от слова **precalculated**). Далее проведём корректировку всех

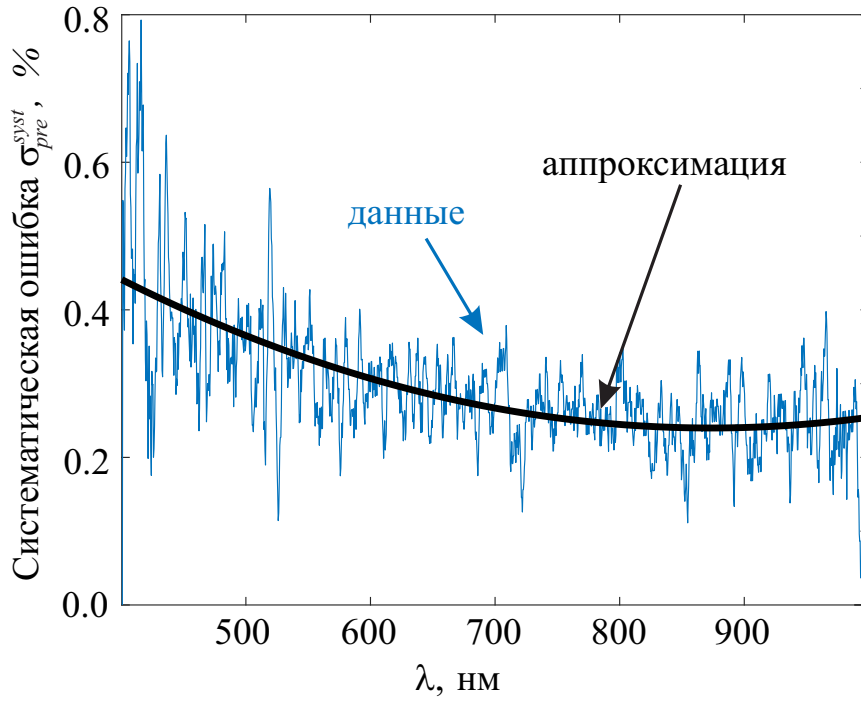


Рисунок 3.10 — Разность между измеренным и теоретически рассчитанным коэффициентами пропускания в начале напыления первого слоя, сплошная кривая — гладкая аппроксимация данной разности (систематическая ошибка измерений)

измеренных данных для локального и нелокального алгоритмов, как

$$\begin{aligned} T_{end}^{meas}(\lambda) &\rightarrow T_{end}^{meas}(\lambda) + \sigma_{pre}^{syst}(\lambda), \\ T_i^{meas}(\lambda) &\rightarrow T_i^{meas}(\lambda) + \sigma_{pre}^{syst}(\lambda). \end{aligned}$$

Второй подход заключается во введении дополнительного неизвестного параметра σ^{syst} в оба алгоритма. При этом измеренные спектры в выражениях (3.22) и (3.23) изменяются следующим образом:

$$\begin{aligned} T_{end}^{meas}(\lambda) &\rightarrow T_{end}^{meas}(\lambda) + \sigma^{syst}, \\ T_i^{meas}(\lambda) &\rightarrow T_i^{meas}(\lambda) + \sigma^{syst}. \end{aligned}$$

В соответствии с этим в функционалах невязки появляется дополнительный неизвестный параметр:

$$\begin{aligned} F_{loc}(p) &\rightarrow F_{loc}(p, \sigma^{syst}), \\ F_{nonloc}(p) &\rightarrow F_{nonloc}(p, \sigma^{syst}). \end{aligned}$$

3.3.2 Результаты вычислительных экспериментов и верификация полученных результатов

В данном подпараграфе подробно рассмотрена только та часть полученных результатов, которая является наиболее важной для понимания связи между выбором модели слоя и используемыми для определения параметров слоя экспериментальными данными и алгоритмами их обработки. Остальные результаты кратко характеризуются при обсуждении данных, представленных в таблицах 10 и 11. В таблице 10 приведены данные, полученные с помощью локального алгоритма для двух- и трёхпараметрических моделей слоя с использованием дополнительного неизвестного параметра σ^{syst} . В таблице 10 приведены данные, полученные при использовании нелокального алгоритма. Помимо полученных значений параметров модели, в таблицах приведены также найденные значения параметра σ^{syst} и достигнутые при минимизации значения соответствующих функционалов невязки.

Таблица 10 — Параметры моделей, найденная систематическая ошибка измерений и значение локального функционала невязки, полученные с использованием **локального алгоритма**

Число параметров модели	A	$\delta, \%$	$d, \text{нм}$	$\sigma^{syst}, \%$	$F_{loc}, \%$
2	2.072	0.00	70.04	-0.13	0.0799
3	2.120	-29.76	68.46	-1.34	0.0491

Таблица 11 — Параметры моделей, найденная систематическая ошибка измерений и значение нелокального функционала невязки, полученные с использованием **нелокального алгоритма**

Число параметров модели	A	$\delta, \%$	$d, \text{нм}$	$\sigma^{syst}, \%$	$F_{nonloc}, \%$
2	2.051	0.00	72.18	0.8015	0.3998
3	2.044	-3.84	70.97	0.5111	0.2263

Обсуждение результатов начнем с данных, полученных при использовании трёхпараметрических моделей слоя. При этом для оценки достоверности

найденных значений параметров необходимо, в первую очередь, использовать имеющуюся априорную информацию об искомым параметрах модели.

Напомним, что теоретическая толщина планируемого слоя равна 68.11 нм. Наиболее близкой к этому значению является толщина слоя, найденная с помощью локального алгоритма в рамках трёхпараметрической модели. Однако значения двух других параметров полностью противоречат априорной информации. Найденное значение систематической ошибки имеет противоположный знак по сравнению с тем, который следует ожидать, исходя из рисунка 3.10. Полученное значение степени неоднородности на порядок превышает типичные значения этого параметра, получаемые при напылении Nb_2O_5 [55]. Вместе с тем значения параметров σ^{syst} и δ , найденные в рамках трёхпараметрической модели с помощью нелокального алгоритма, находятся в хорошем соответствии с имеющимися данными.

Дополнительная проверка достоверности результатов, получаемых в рамках трёхпараметрической модели слоя с помощью локального и нелокального алгоритмов, может быть проведена путём сравнения соответствующих значений функционала невязки, рассчитанного на основании данных о найденных параметрах слоя. Красные кривые на рисунке 3.11 показывают эти значения, рассчитанные в рамках данной модели. В случае локального алгоритма наблюдаются (см. рисунок 3.11 а)) очень большие значения невязки между измеренными и теоретическими спектрами для большинства измерений, полученных во время напыления слоя, что свидетельствует о неадекватности итоговых результатов.

Ещё одна физически обоснованная проверка достоверности результатов может быть проведена путём исследования соответствия положений экстремумов измеренных и расчётных спектров коэффициента пропускания растущего слоя. Экстремумы измеряемого спектра появляются в рассматриваемой спектральной области от 400 до 1000 нм только при достаточной толщине напыляемого слоя. В нашем случае следует проводить сравнение положений экстремумов только начиная с 135-го номера измерений (см. рисунок 3.12). Положения экстремумов на волновой шкале определяются оптической толщиной слоя, и если параметры слоя определены верно, то следует ожидать совпадения положений экстремумов измеренных и расчётных кривых. Как следует из рисунка 3.12, соответствие экстремумов в случае нелокального алгоритма гораздо лучше, чем в случае локального алгоритма. При этом наблюдаемое на рисунке 3.12 б) относительно небольшое несовпадение экстремумов в значи-

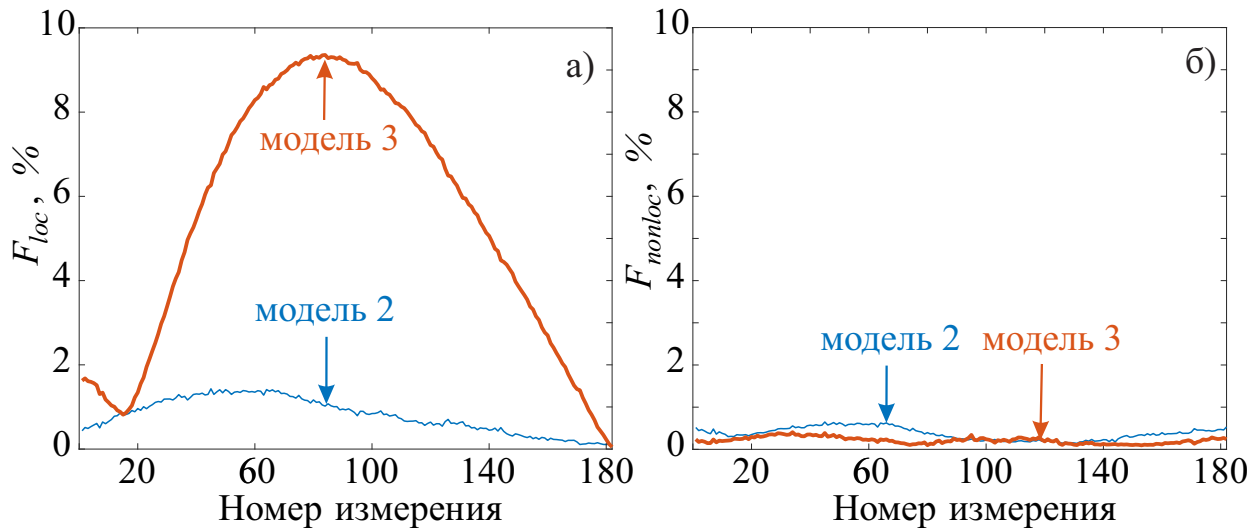


Рисунок 3.11 — Значения функционалов невязки в процессе напыления слоя, рассчитанные в рамках двухпараметрической (синие кривые) и трёхпараметрической (красные кривые) моделей с использованием: а) — локального алгоритма; б) — нелокального алгоритма

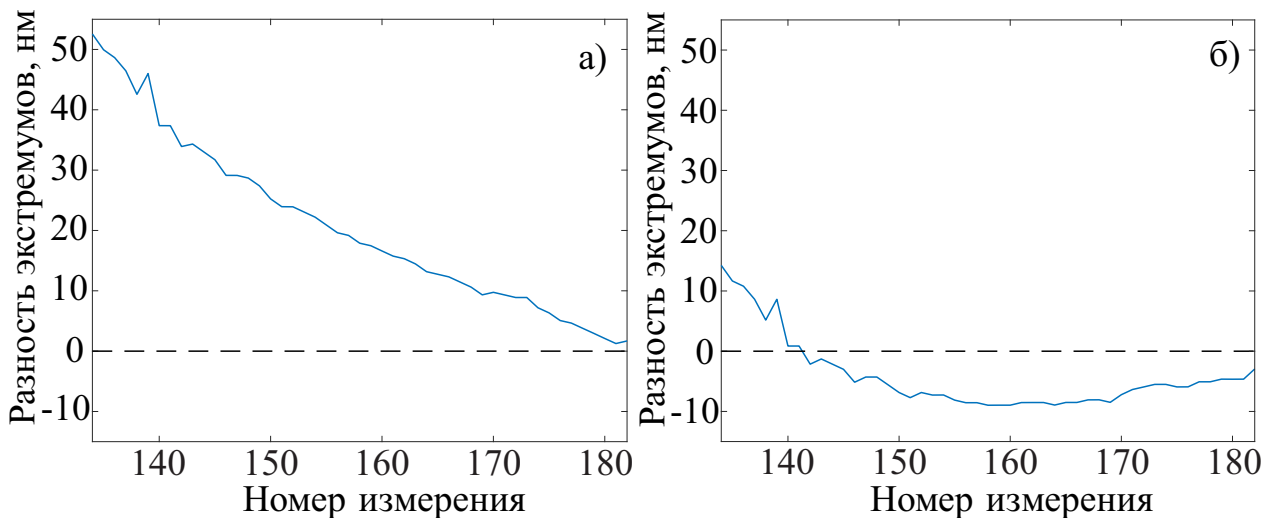


Рисунок 3.12 — Разность между положениями экстремумов измеренного коэффициента пропускания и теоретически рассчитанного в рамках трёхпараметрической модели слоя коэффициента пропускания в случае использования: а) — локального алгоритма; б) — нелокального алгоритма

тельной степени связано с неточностью определения положения экстремума для зашумлённых измеренных данных. Таким образом, всё проведённое выше обсуждение однозначно свидетельствует о достоверности данных, получаемых в рамках трёхпараметрической модели с помощью нелокального алгоритма, и о неправомерности использования данной модели в случае локального алгоритма.

Проведём теперь сравнение результатов, полученных с помощью нелокального алгоритма в рамках двух- и трёхпараметрических моделей слоя.

Сравнение кривых, описывающих изменения функционалов невязки на рисунке 3.11 б), свидетельствует о том, что результаты трёхпараметрической модели более точно соответствуют измеренным данным на протяжении всего процесса напыления. Несомненно, это связано с включением в число искомых параметров модели степени неоднородности, учитывающей изменение показателя преломления в ходе напыления слоя. О важности включения данного параметра говорит и резкое уменьшение значения нелокального функционала при переходе от двухпараметрической модели к трёхпараметрической модели (см. последний столбец таблицы 11). Ещё одним свидетельством в пользу трёхпараметрической модели является лучшее соответствие найденной систематической ошибки её априорной оценке на рисунке 3.10.

Для проверки необходимости учёта систематической ошибки в данных измерений в случае нелокального алгоритма были проведены расчёты без её учёта и с предварительной коррекцией измерений с помощью априорно рассчитанной зависимости $\sigma_{pre}^{syst}(\lambda)$ (см. конец предыдущего подпараграфа). В первом случае полученные значения нелокального функционала невязки почти в два раза выше, чем приведённые в таблице 11, что свидетельствует о важности учёта систематической ошибки. Во втором случае полученные результаты оказываются очень близкими к результатам таблицы 11.

В заключении рассмотрения полученных результатов вернёмся ещё раз к обсуждению результатов локального алгоритма. Рисунок 3.11 а) показывает, что при использовании двухпараметрической модели слоя значения функционала невязки в процессе напыления слоя существенно меньше, чем в случае трёхпараметрической модели. Это — свидетельство существенной адекватности двухпараметрической модели. Отметим, что параметры A и d , найденные с помощью локального алгоритма в рамках двухпараметрической модели, находятся в лучшем соответствии с результатами, полученными с помощью нелокального алгоритма. В случае использования локального алгоритма без коррекции измеренных данных в рамках двухпараметрической модели получаются следующие результаты: $A = 2.067$, $d = 70.21$ нм, то есть соответствие с результатами последней строки таблицы 11 улучшается. Таким образом, при использовании локального алгоритма и ограниченного набора входных данных оправданным является применение лишь простейшей двухпараметрической модели слоя. Увеличение числа искомых параметров приводит к ухудшению результатов для основных, наиболее значимых параметров.

Глава 4. Комплекс программ

Для практической реализации разработанного в главе 2 метода высокоэффективного математического моделирования ошибок напыления был создан специализированный комплекс проблемно-ориентированных программ (см. приложение А). Комплекс ориентирован на математическое моделирование большого количества коррелированных ошибок напыления, которые могут возникать в процессе напыления многослойного покрытия с широкополосным оптическим контролем толщин слоёв (см. работы автора [3—5]). Архитектура комплекса предусматривает возможность его использования как в исследовательской, так и в производственной среде на персональных домашних компьютерах.

4.1 Описание программного комплекса метода высокоэффективного математического моделирования ошибок напыления

Разработанный комплекс программ для высокоэффективного математического моделирования ошибок напыления реализован на базе прикладного пакета MATLAB. Выбор данной среды обусловлен совокупностью методологических, вычислительных и практических факторов, напрямую связанных со спецификой решаемой научно-технической задачи. MATLAB представляет собой интегрированную вычислительную среду, ориентированную на численные методы, линейную алгебру, обработку сигналов и моделирование сложных физико-математических процессов. В контексте математического моделирования ошибок напыления ключевое значение имеют операции над матрицами и многомерными массивами, статистический анализ, реализация численных методов и визуализация результатов, все из которых являются внутренне поддерживаемыми и оптимизированными возможностями MATLAB.

В рамках разрабатываемого комплекса программ MATLAB использовался как единая платформа, объединяющая реализацию математических моделей, методов математического моделирования и численных методов. Также MATLAB использовался в качестве инструмента анализа и представления ре-

зультатов. Это позволило обеспечить целостность программного решения и существенно сократить накладные расходы на интеграцию разнородных программных компонентов.

Основной целью разработки программного комплекса является математическое моделирование ошибок, возникающих в процессе напыления многослойного покрытия с широкополосным оптическим контролем за приемлемое время в большом количестве. Проблема использования полноценного метода математического моделирования процесса напыления многослойных покрытий (см. параграф 2.1) заключается в скорости его работы. Время, которое потребуется для математического моделирования хотя бы нескольких тысяч наборов ошибок напыления, составляет порядка нескольких десятков часов. Для статистического анализа корреляции и эффекта самокомпенсации ошибок напыления необходимо иметь в наличии от сотен тысяч до миллиона наборов таких ошибок. Метод высокоэффективного математического моделирования ошибок напыления, описанный в параграфе 2.3 второй главы, позволяет достичь этой цели.

Для высокоэффективного математического моделирования ошибок напыления программный комплекс принимает на вход следующую информацию:

- набор толщин слоёв многослойного оптического покрытия;
- показатели преломления материалов, из которых состоят подложка и слои покрытия;
- набор длин волн, на котором проводится широкополосный контроль напыления покрытия;
- величины случайных ошибок толщин для каждого слоя, моделирующие случайные факторы производственных экспериментов.

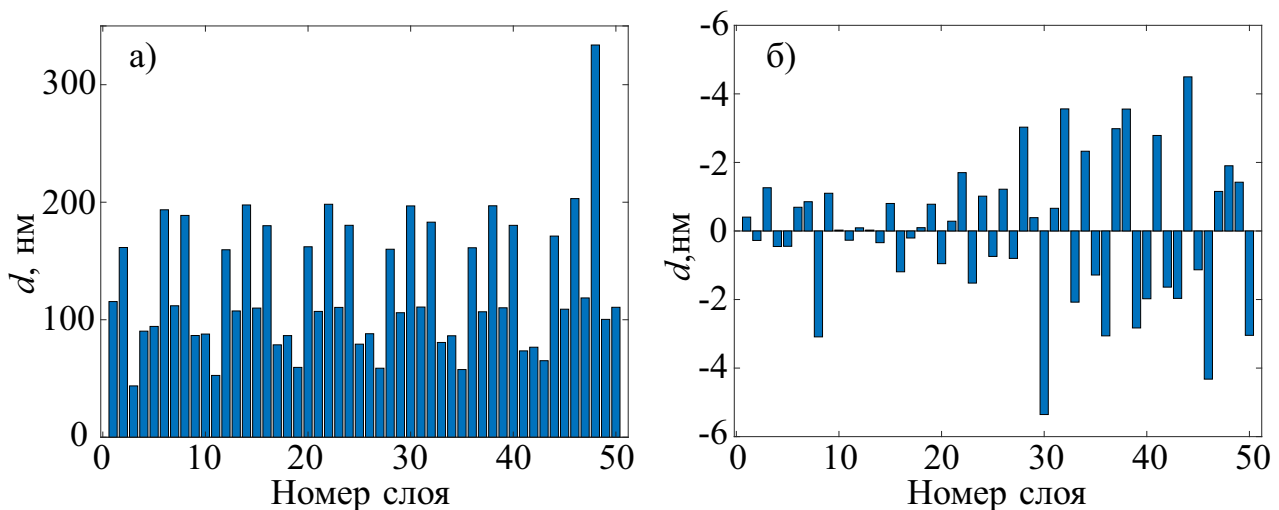
Типичный пример входных данных программного комплекса представлен на рисунке 4.1 а) в виде конструкции рассматриваемого многослойного покрытия, для которого необходимо смоделировать ошибки напыления. В результате работы программного комплекса получаются ошибки напыления, представленные на рисунке 4.1 б).

Архитектурно программный комплекс построен по модульному принципу и включает следующие функциональные блоки:

1. **Модуль вычисления спектральных характеристик** — отвечает за вычисление спектральных характеристик пропускания оптического покрытия, которые описаны в главе 1.

2. **Модуль вычисления производных спектральных характеристик** — отвечает за предварительный расчёт всех производных, которые используются в формулах (2.5), (2.6).
3. **Модуль моделирования ошибок напыления** — реализует рекуррентный алгоритм моделирования ошибок толщин слоёв многослойного оптического покрытия, представленный в параграфе 2.3.

По итогам завершения работы алгоритма математического моделирования программный комплекс выдает набор ошибок, которые соответствуют ошибкам, получаемым в процессе напыления многослойных покрытий с широкополосным оптическим контролем толщин слоёв. Смоделированные ошибки оказываются скоррелированными за счёт широкополосного контроля, а также содержат случайную составляющую.



а) — теоретическая конструкция толщин слоёв;

б) — ошибки напыления, полученные методом высокоэффективного математического моделирования (см. параграф 2.3)

Рисунок 4.1 — 50-слойный неполяризующий крайевой фильтр

Заключение

Основные результаты работы заключаются в следующем.

1. Разработаны методы математического моделирования процесса напыления многослойных покрытий с широкополосным оптическим контролем толщин слоёв, с помощью которых предложены новые подходы, направленные на повышение качества широкополосного контроля.
2. Разработаны численные методы для определения времени окончания напыления слоя многослойного покрытия и для решения обратной задачи определения толщин напылённых слоёв по измеренным спектральным характеристикам многослойного покрытия с целью повышения качества широкополосного оптического контроля.
3. Создан комплекс проблемно-ориентированных программ, реализующий метод математического моделирования ошибок, получаемых в процессе напыления многослойных покрытий с широкополосным оптическим контролем толщин слоёв, который позволяет эффективно проводить исследование корреляции и эффекта самокомпенсации ошибок напыления для определения наиболее оптимальной стратегии широкополосного оптического контроля с целью создания высококачественных многослойных покрытий.

Благодарности

Автор благодарит своего научного руководителя, доктора физико-математических наук, доцента Дмитрия Витальевича Лукьяненко, за предоставленную возможность участвовать в научном исследовании фундаментальных проблем создания многослойных оптических покрытий и за сопутствующую всестороннюю помощь, включая продуктивные обсуждения научной проблематики темы диссертационного исследования. Автор также выражает свою огромную благодарность доктору физико-математических наук, профессору Анатолию Григорьевичу Яголе и доктору физико-математических наук, профессору Александру Владимировичу Тихонравову за постоянную научную консультацию, позволившую получить результаты, выносимые на защиту в данном диссертационном исследовании.

Публикации автора по теме диссертации

Научные статьи, опубликованные в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности и отрасли наук:

1. Исаев Т. Ф., Кочкиков И. В., Лукьяненко Д. В., Тихонравов А. В., Ягола А. Г. Повышение точности широкополосного контроля процесса напыления оптических покрытий // Вестник Московского университета. Серия 3: Физика, астрономия. — 2018. — № 4. — С. 45—50. EDN: YXERBR. Импакт-фактор 0,125 (РИНЦ). 0,35 из 0,43 п.л.

Перевод: T. F. Isaev, I. V. Kochikov, D. V. Lukyanenko, A. V. Tikhonravov, A. G. Yagola. Improving the accuracy of broad-band monitoring of optical coating deposition // Moscow University Physics Bulletin. — 2018. — vol. 73., no. 4. — pp. 382–387. EDN: TBFWZL. Импакт-фактор 0,4 (JIF). 0,43 / 0,34 п.л.
2. Isaev T. F., Kochikov I. V., Lukyanenko D. V., Tikhonravov A. V., Yagola A. G. Regularizing algorithms for the determination of thickness of deposited layers in optical coating production // Eurasian Journal of Mathematical and Computer Applications. — 2018. — vol. 6., no. 4. — pp. 38—47. EDN: COOTRI. Импакт-фактор 0,4 (JIF). 0,71 / 0,65 п.л.
3. Тихонравов А. В., Кочкиков И. В., Матвиенко И. А., Исаев Т. Ф., Лукьяненко Д. В., Шарапова С. А., Ягола А. Г. Корреляция ошибок при напылении оптических покрытий с широкополосным оптическим контролем // Вычислительные методы и программирование. — 2018. — Т. 19. — № 4. — С. 439—448. EDN: VQSWKB. Импакт-фактор 0,737 (РИНЦ). 0,35 из 0,71 п.л.
4. Tikhonravov A., Kochikov I., Matvienko I., Isaev T., Yagola A. Strategies of broadband monitoring aimed at minimizing deposition errors // Coatings. — 2019. — vol. 9., no. 12. — p. 809. EDN: NPQCSK. Импакт-фактор 2,8 (JIF). 0,71 / 0,32 п.л.

5. Исаев Т. Ф., Тихонравов А. В., Ягола А. Г. О выборе стратегий широкополосного оптического контроля напыления многослойных покрытий // Вестник Московского университета. Серия 3: Физика, астрономия. — 2021. — № 1. — С. 30—35. EDN: MTTVTF. Импакт-фактор 0,125 (РИНЦ). 0,37 из 0,43 п.л.

Перевод: T. F. Isaev, A. V. Tikhonravov, A. G. Yagola. On the choice of a strategy for broadband optical monitoring of the deposition of multilayer coatings // Moscow University Physics Bulletin. — 2021. — vol. 76., no. 1. — pp. 36–41. EDN: WUXKDA. Импакт-фактор 0,4 (JIF). 0,43 / 0,34 п.л.

6. Исаев Т. Ф., Кочиков И. В., Лукьяненко Д. В., Тихонравов А. В., Ягола А. Г. Сравнение алгоритмов решения задачи определения толщин слоев оптических покрытий в режиме “on-line” // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2019. — Т. 59. — № 3. — С. 494—504. EDN: YZRAPJ. Импакт-фактор 0,522 (РИНЦ). 0,67 из 0,78 п.л.

Перевод: T. F. Isaev, I. V. Kochikov, D. V. Lukyanenko, A. V. Tikhonravov, A. G. Yagola. Comparison of algorithms for determining the thickness of optical coatings online // Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 2019. — vol. 59, no. 3. — pp. 465–474. EDN: HEDOHF. Импакт-фактор 0,7 (JIF). 0,71 / 0,62 п.л.

7. Tikhonravov A., Kochikov I., Isaev T., Lukyanenko D., Yagola A. On-line characterization algorithms for optical coating production with broadband monitoring // Coatings. — 2018. — vol. 8., no. 9. — p. 323. EDN: CFXKRK. Импакт-фактор 2,8 (JIF). 0,71 / 0,38 п.л.

8. Исаев Т. Ф., Лукьяненко Д. В., Тихонравов А. В., Ягола А. Г. Алгоритмы решения обратных задач оптики слоистых сред на основе сравнения экстремумов спектральных характеристик // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2017. — Т. 57. — № 5. — С. 867—875. EDN: YRWNMB. Импакт-фактор 0,522 (РИНЦ). 0,5 из 0,64 п.л.

Перевод: T. F. Isaev, D. V. Lukyanenko, A. V. Tikhonravov, A. G. Yagola. Algorithms for Solving Inverse Problems in the Optics of Layered Media Based on Comparing the Extrema of Spectral Characteristics // Computational

Mathematics and Mathematical Physics. — 2017. — vol. 57., no. 5. — pp. 867—875. EDN: XNJJKT. Импакт-фактор 0,7 (JIF). 0,64 / 0,5 п.л.

9. Исаев Т. Ф., Лагутин Ю. С., Лагутина А. А., Лукьяненко Д. В., Просовский О. Ф., Тихонравов А. В., Ягола А. Г. Определение параметров первого слоя покрытия при широкополосном оптическом контроле процесса напыления // Вестник Московского университета. Серия 3: Физика, астрономия. — 2021. — № 5. — С. 91—97. EDN: PXBYZN. Импакт-фактор 0,125 (РИНЦ). 0,43 из 0,5 п.л.

Перевод: T. F. Isaev, I. S. Lagutin, A. A. Lagutina, D. V. Lukyanenko, O. F. Prosovskiy, A. V. Tikhonravov, A. G. Yagola. Determination of the parameters of the first coating layer using broadband optical monitoring of the deposition process // Moscow University Physics Bulletin. — 2021. — vol. 76., no. 5. — pp. 356—362. EDN: VASTJR. Импакт-фактор 0,4 (JIF). 0,5 / 0,4 п.л.

Список литературы

10. *Kaiser N., P. H. K.* Optical Interference Coatings [Текст] / P. H. K. Kaiser N. — Springer Berlin, Heidelberg, 2003.
11. *Sh. Furman, A. T.* Basics of optics of multilayer systems [Текст] / A. T. Sh. Furman. — Editions Frontiers, 1992.
12. *Tikhonravov, A. V.* Chapter 3 - Optical monitoring strategies for optical coating manufacturing [Текст] / A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov, T. V. Amotchkina ; под ред. A. Piegari, F. Flory. — Second Edition. — Woodhead Publishing, 2018. — С. 65—101. — (Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials).
13. *Tikhonravov, A.* Error self-compensation mechanism in the optical coating production with direct broad band monitoring [Текст] / A. Tikhonravov, I. Kochikov, A. Yagola // Optics Express. — 2017. — Т. 25. — С. 27225.
14. *Alexander Tikhonravov, I. K.* Mathematical investigation of the error self-compensation mechanism in optical coating technology [Текст] / I. K. Alexander Tikhonravov, A. Yagola // Inverse Problems in Science and Engineering. — 2018. — Т. 26, № 8. — С. 1214—1229.
15. Estimates Related to the Error Self-Compensation Mechanism in Optical Coatings Deposition [Текст] / A. Tikhonravov [и др.] // Moscow University Physics Bulletin. — 2018. — Т. 73. — С. 627—631.
16. *Tikhonravov, A. V.* Online characterization and reoptimization of optical coatings [Текст] / A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov. — 2004.
17. In situ optical characterization and reengineering of interference coatings [Текст] / S. Wilbrandt [и др.] // Applied Optics. — 2008. — Т. 47. — С. 49—54.
18. Comparison of algorithms used for optical characterization of multilayer optical coatings [Текст] / T. V. Amotchkina [и др.] // Applied Optics. — 2011. — Т. 50. — С. 3389—3395.
19. *Abeles, F.* La théorie générale des couches minces [Текст] / F. Abeles // Le Journal de Physique et le Radium. — 1950. — Т. 11. — С. 307—310.

20. *MacLeod, H. A.* Thin-Film Optical Filters [Текст] / H. A. MacLeod. — CRC Press, 2010.
21. *Tikhonravov, A.* Optical monitoring strategies for optical coating manufacturing [Текст] / A. Tikhonravov, M. Trubetskov, T. Amotchkina // Optical Thin Films and Coatings. — Woodhead Publishing, 2013. — С. 62—93. — (Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials).
22. *Tikhonravov, A. V.* Automated design and sensitivity analysis of wavelength-division multiplexing filters [Текст] / A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov // Appl. Opt. — 2002. — Т. 41, № 16. — С. 3176—3182.
23. *Tikhonravov, A.* Investigation of the error self-compensation effect associated with broadband optical monitoring [Текст] / A. Tikhonravov, M. Trubetskov, T. Amotchkina // Applied optics. — 2011. — Т. 50. — С. C111—6.
24. *A.V. Tikhonravov I.V. Kochikov, M. T.* An error self-compensation mechanism for deposition of optical coatings with broadband optical monitoring [Текст] / M. T. A.V. Tikhonravov I.V. Kochikov // Moscow University Physics Bulletin. — 2017. — Т. 72, № 3. — С. 274—278.
25. *Macleod, H. A.* Monitoring of optical coatings [Текст] / H. A. Macleod // Appl. Opt. — 1981. — Т. 20, № 1. — С. 82—89.
26. *Tikhonravov, A.* Computational manufacturing as a bridge between design and production [Текст] / A. Tikhonravov, M. Trubetskov // Applied optics. — 2005. — Т. 44. — С. 6877—84.
27. Correlation of errors in inverse problems of optical coatings monitoring [Текст] / I. V. Kochikov [и др.] // Journal of Inverse and Ill-posed Problems. — 2020. — Т. 28, № 6. — С. 915—921.
28. *Sullivan, B. T.* Deposition error compensation for optical multilayer coatings. I. Theoretical description [Текст] / B. T. Sullivan, J. A. Dobrowolski // Appl. Opt. — 1992. — Т. 31, № 19. — С. 3821—3835.
29. *Sullivan, B. T.* Deposition error compensation for optical multilayer coatings. II. Experimental results—sputtering system [Текст] / B. T. Sullivan, J. A. Dobrowolski // Appl. Opt. — 1993. — Т. 32, № 13. — С. 2351—2360.
30. Real-Time Characterization and Optimization of E-Beam Evaporated Optical Coatings [Текст] / A. V. Tikhonravov [и др.] // Optical Interference Coatings. — Optica Publishing Group, 2001. — ME8.

31. Hybrid Process Control for Precision Optics Enhanced by Computational Manufacturing [Текст] / Н. Ehlers [и др.] // Optical Interference Coatings. — Optica Publishing Group, 2010. — TuC6.
32. Photometric calibration of an in situ broadband optical thickness monitoring of thin films in a large vacuum chamber [Текст] / D. Hofman [и др.] // Appl. Opt. — 2017. — Т. 56, № 3. — С. 409—416.
33. *Tikhonravov, A.* The accuracy obtainable in principle when solving synthesis problems [Текст] / A. Tikhonravov // USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 1982. — Т. 22, № 6. — С. 143—157.
34. *Тихонравов, А.* О методе синтеза оптических покрытий, использующим необходимые условия оптимальности [Текст] / А. Тихонравов // Вестник МГУ. — 1982. — Т. 23. — С. 91—93.
35. *A.V. Tikhonravov M.K. Trubetskov, G. D.* Application of the needle optimization technique to the design of optical coatings [Текст] / G. D. A.V. Tikhonravov M.K. Trubetskov // Applied Optics. — 1996. — Т. 51, № 30. — С. 5493—5508.
36. *A.V. Tikhonravov M.K. Trubetskov, G. D.* Optical coating design approaches based on the needle optimization technique [Текст] / G. D. A.V. Tikhonravov M.K. Trubetskov // Applied Optics. — 2007. — Т. 46, № 5. — С. 704—710.
37. *A.M. Khludnev, J. S.* Modelling and control in solid mechanics [Текст] / J. S. A.M. Khludnev. — Birkhauser Basel, 1997.
38. *Khludnev, A.* Problems of the elasticity theory in nonsmooth space [Текст] / A. Khludnev. — Moscow: Fizmatlit, 2010.
39. *Karchevsky, A.* Reconstruction of pressure velocities and boundaries of thin layers in thinly-stratified layers [Текст] / A. Karchevsky // J. Inv. Ill-Posed Problems. — 2010. — Т. 18, № 4. — С. 371—388.
40. *Zh.O. Oralbekova K.T. Iskakov, A. K.* Existence of the residual functional derivative with respect to a coordinate of gap point of medium [Текст] / A. K. Zh.O. Oralbekova K.T. Iskakov // Applied and Computational Mathematics. — 2013. — Т. 12, № 2. — С. 222—233.

41. *A. Tikhonravov, M. T.* Modern design tools and a new paradigm in optical coating design [Текст] / М. Т. А. Tikhonravov // Applied Optics. — 2012. — Т. 51, № 30. — С. 7319—7332.
42. *A.V. Tikhonravov M.K. Trubetskov, T. A.* Investigation of the effect of accumulation of thickness errors in optical coating production by broadband optical monitoring [Текст] / Т. А. А.В. Tikhonravov M.K. Trubetskov // Applied Optics. — 2006. — Т. 45, № 27. — С. 7026—7034.
43. *A.V. Tikhonravov, M. T.* Stabilization of computational algorithms for the characterization of thin film coatings [Текст] / М. Т. А.В. Tikhonravov // Numerical Methods and Programming. — 2005. — Т. 6. — С. 96—104.
44. Numerical Methods for the Solution of Ill-Posed Problems [Текст] / А. Tikhonov [и др.]. — Springer Dordrecht, 1995.
45. *Morozov, V.* Regularization of incorrectly posed problems and the choice of regularization parameter [Текст] / V. Morozov // USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 1966. — Т. 6. — С. 242—251.
46. *Tikhonravov, A.* Investigation of the error self-compensation effect associated with direct broad band monitoring of coating production [Текст] / А. Tikhonravov, I. Kochikov, A. Yagola // Optics Express. — 2018. — Т. 26. — С. 24964—24972.
47. *Zöller, A.* Precision Filter Manufacture Using Direct Optical Monitoring [Текст] / А. Zöller, J. Williams, S. Hartlaub // Optical Interference Coatings. — Optica Publishing Group, 2010. — TuC8.
48. Testglass changer for direct optical monitoring [Текст] / А. Zoeller [и др.] // Advances in Optical Thin Films IV. Т. 8168 / под ред. М. Lequime, Н. А. Macleod, D. Ristau. — SPIE, 2011. — 81681J.
49. Production of Brewster angle thin film polarizers using a ZrO₂/SiO₂ pair of materials [Текст] / V. Zhupanov [и др.] // Appl. Opt. — 2017. — Т. 56, № 4. — С. C30—C34.
50. Correlation of errors in inverse problems of optical coatings monitoring [Текст] / I. V. Kochikov [и др.] // Journal of Inverse and Ill-posed Problems. — 2020. — Т. 28, № 6. — С. 915—921.

51. *Tikhonravov, A.* Modified sequential algorithm for the on-line characterization of optical coatings [Текст] / A. Tikhonravov, A. Gorokh // Optics Express. — 2015. — Т. 23. — С. 23561—9.
52. *Tikhonravov, A.* On the accuracy of optical thin film parameter determination based on spectrophotometric data [Текст] / A. Tikhonravov, M. Trubetskov, G. DeBell // Proceedings of SPIE. — 2003. — Т. 5188. — С. 190—199.
53. Effect of systematic errors in spectral photometric data on the accuracy of determination of optical parameters of dielectric thin films [Текст] / A. V. Tikhonravov [и др.] // Appl. Opt. — 2002. — Т. 41, № 13. — С. 2555—2560.
54. Design and production of antireflection coating for the 8-10 μm spectral region [Текст] / A. V. Tikhonravov [и др.] // Optics Express. — 2014. — Т. 22, № 26. — С. 32174—32179.
55. Optical parameters of oxide films typically used in optical coating production [Текст] / A. V. Tikhonravov [и др.] // Appl. Opt. — 2011. — Т. 50, № 9. — С. C75—C85.
56. *Schröder, H.* Bemerkung zur Theorie des Lichtdurchgangs durch inhomogene durchsichtige Schichten [Текст] / H. Schröder // Annalen der Physik. — 1941. — Т. 431. — С. 55—58.

Приложение А

Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2025692914

Программа для математического моделирования
ошибок напыления, получаемых в процессе создания
многослойных покрытий с широкополосным
оптическим контролем толщин слоёв

Правообладатель: *Исаев Тему́р Фу́ркатович (RU)*Автор(ы): *Исаев Тему́р Фу́ркатович (RU)*

Заявка № 2025691734

Дата поступления 12 ноября 2025 г.

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ 25 ноября 2025 г.

Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ
Сертификат 00a570e4f7ad48d531b4b8818a75f29506
Владелец **Зубов Юрий Сергеевич**
Действителен с 04.09.2025 по 28.11.2026

Ю.С. Зубов