

基底微缺陷对介质薄膜光学性能影响的理论研究

沈 健¹⁾²⁾ 刘守华³⁾ 沈自才¹⁾²⁾ 孔伟金¹⁾²⁾ 黄建兵¹⁾²⁾ 邵建达¹⁾ 范正修¹⁾

¹⁾中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800)

²⁾中国科学院研究生院, 北京 100039)

³⁾陕西科技大学材料科学与工程学院, 咸阳 712081)

(2004 年 11 月 8 日收到, 2005 年 1 月 31 日收到修改稿)

基于非均匀膜理论提出一种存在微缺陷的介质基底的折射率分层模型, 将基底依次分为表面层、亚表面层和体材料层, 其中表面层和亚表面层分别等效为折射率服从统计分布的非均匀膜, 将它们分别再次细分为 N_1 和 N_2 个子层, 每一子层均视为均匀介质膜. 应用光学薄膜特征矩阵法对其进行理论分析, 并对单层介质膜的光学性能进行数值计算. 研究表明: 基底的表面和亚表面微缺陷改变了薄膜和基底的等效折射率, 导致了准 Brewster 角和组合反射率与理想情形的偏离. 同时这些微缺陷也改变了光在薄膜和基底中的传播特性, 因此反射相移和相位差均偏离理想情形. 在研究基底的微缺陷对多层介质膜光学性能影响的分析和计算时, 该模型同样适用.

关键词: 微缺陷, 介质薄膜, 非均匀膜, 光学性能

PACC: 7755, 4285D, 7820

1. 引言

基底的表面缺陷和亚表面缺陷已成为高功率激光系统灾难性破坏的来源之一, 引起诸如美国 California 大学劳伦斯利弗莫尔国家实验室(LLNL)、美国 Rochester 大学激光能量实验室(LLE)、日本 Osaka 大学电子工程系等国际著名研究机构的高度关注^[1-3]. 国外研究主要致力于亚表面缺陷(Subsurface Defect)的检测和消除、探索亚表面缺陷降低基底(或薄膜材料)抗激光损伤阈值的机理^[3-5], 但关于亚表面缺陷影响介质薄膜光学性能的研究却鲜见报道^[6,7].

非均匀膜通常指薄膜折射率沿膜层表面的法线方向逐渐变化, 但在垂直于法线的水平方向保持不变^[8]. 计算非均匀膜光学性能的一种典型近似方法^[9]是把它分成若干层很薄的均匀膜, 将每层的特征矩阵相乘得到一总特征矩阵, 反射系数和透射系数可以用相应的总特征矩阵元来计算, 最终可获得薄膜和基底的总反射率、反射相移等重要光学性能.

本文基于非均匀膜理论提出一种存在微缺陷的介质基底的折射率分层模型, 将其依次划分为表面层、亚表面层和体材料层, 其中将表面层、亚表面层

等效为非均匀介质膜. 应用光学薄膜特征矩阵法进行理论分析, 给出单层介质膜光学特性的数值计算结果, 讨论了基底的微缺陷对介质薄膜光学性能的影响.

2. 理论分析

基底经过机械抛光、化学抛光等冷加工后, 其表面层和亚表面层不可避免的会出现微缺陷, 如杂质缺陷、微裂纹、残余应力、位错等^[1], 因此基底的折射率将表现出非均匀性(本文考察基底表面法线方向的非均匀性). 在有微缺陷的基底上沉积薄膜后, 建立如图 1 所示的坐标系, 假设沿 z 正向依次可分为介质膜层(折射率均匀且无缺陷)、基底表面层、基底亚表面层和基底体材料层(折射率均匀且无缺陷), 以下分别简称薄膜层(与空气界面处 $z=0$)、表面层、亚表面层和体层. 表面层折射率 $n_{\text{sur}}(z)$ 和亚表面层折射率 $n_{\text{sub}}(z)$ 沿 z 方向将呈现不同统计分布的非均匀性. 本文认为表面层是由于膜料填充基底的表面起伏后所形成的过渡层, 取表面高度变化的峰和谷的极值处分别为表面层的起始界面和终止界面, 如图 2 所示. 因此 $n_{\text{sur}}(z)$ 由薄膜层折射率渐变为亚表面层的初始折射率, 沿 z 正向服从一定的统

† 通讯联系人, E-mail: shj@siom.ac.cn

计分布.亚表面缺陷沿 z 正向逐渐减少,可认为服从统计分布.若亚表面缺陷的折射率小于体层的折射率,则 $n_{\text{sub}}(z)$ 沿 z 正向逐渐增大至体层折射率 n_b ; 反之, $n_{\text{sub}}(z)$ 沿 z 正向逐渐减小至体层折射率 n_b .

根据非均匀膜理论,可将表面层和亚表面层沿 z 正向分别划分成 N_1, N_2 个子层,表面子层、亚表面子层的厚度分别相等且折射率均匀.令空气、薄膜、表面子层、亚表面子层、表面层与亚表面层界面及其亚表面层与体材料层界面的折射率分别为 $n_0, n_f, n_j(j = 0, 1, 2, \dots, N_1), n_k(k = 0, 1, 2, 3, \dots, N_2), n_{\text{sub}0}$ 和 n_b ,薄膜、基底总体、表面层、亚表面层和体材料层的厚度则分别为 h_f, h, h_1, h_2 和 h_b ,并作如下定义:

$$n_j = F_1(j), \tag{1}$$

$$n_k = F_2(k), \tag{2}$$

$$\Delta_1 = n_f - n_{\text{sub}0}, \tag{3}$$

$$\Delta_2 = n_{\text{sub}0} - n_b, \tag{4}$$

$$h_b = h - h_1 - h_2, \tag{5}$$

(1)(2)式中 $F_1(j), F_2(k)$ 分别为 n_j 和 n_k 关于 j, k 的统计分布函数.

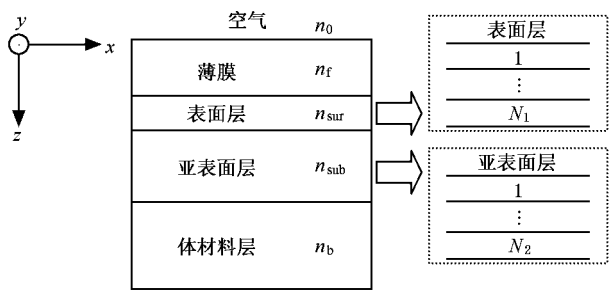


图1 折射率分层模型

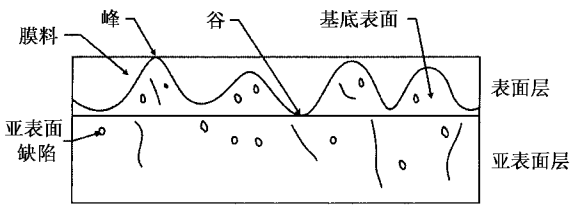


图2 基底表面层和亚表面层微结构示意图

由于基底表面高度变化的典型分布为高斯分布^[10] 根据上述折射率渐变规律考虑这种典型情形,可进一步作如下定义:

$$n_j = \frac{A_1}{\sigma_1 \sqrt{2\pi}} e^{\pm \frac{j^2}{\sigma_1^2}}, \tag{6}$$

$$n_k = \frac{A_2}{\sigma_2 \sqrt{2\pi}} e^{\pm \frac{k^2}{\sigma_2^2}}, \tag{7}$$

上式中 A_1, A_2 均为正常数, σ_1, σ_2 为标准偏差,与 N_1, N_2 有关.指数项分别与 Δ_1, Δ_2 异号,其中表面层初始和终止折射率满足(6)式,亚表面层初始和终止折射率则满足(7)式.例如 $n_f = 1.92, n_b = 1.52, \Delta_2 = -0.04$ (假设基底微缺陷较多), $n_{\text{sub}0} = n_b + \Delta_2 = 1.48, \Delta_1 = n_f - n_{\text{sub}0} = 0.44, N_1 = 50, N_2 = 200$,则由(6)(7)式分别有

$$1.92 = \frac{A_1}{\sigma_1 \sqrt{2\pi}}, 1.48 = \frac{A_1}{\sigma_1 \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{50^2}{\sigma_1^2}};$$

$$1.48 = \frac{A_2}{\sigma_2 \sqrt{2\pi}}, 1.52 = \frac{A_2}{\sigma_2 \sqrt{2\pi}} e^{\frac{200^2}{\sigma_2^2}}.$$

解得 $A_1 = 333.5210, \sigma_1 = 69.2998; A_2 = 3212.6944, \sigma_2 = 865.9997$,因此表面层和亚表面层折射率随子层数 j, k 的渐变折射率曲线如图3(a)和3(b)所示.

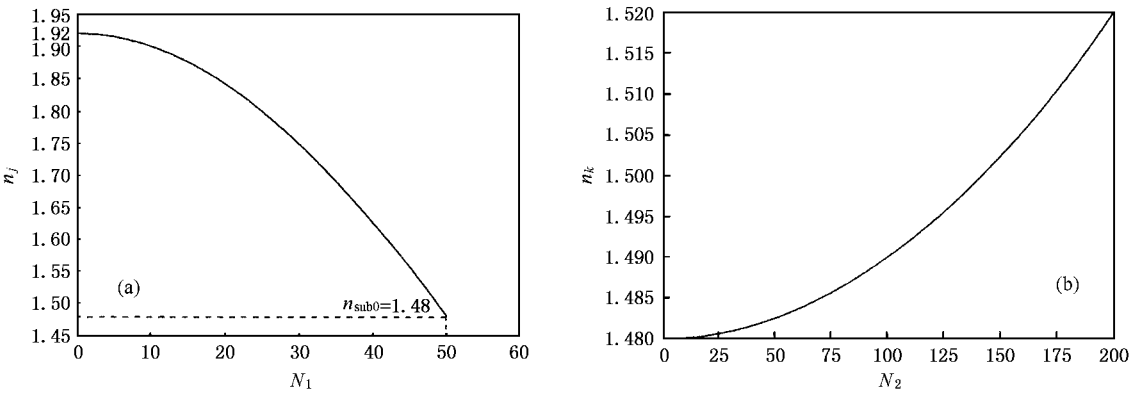


图3 折射率随子层数的统计分布示例

不失一般性,考虑空气中波长为 λ 的单色光以任意角度 θ_0 ($0 \leq \theta_0 < \pi/2$) 入射至介质膜层. 将各子层视作均匀介质膜,由 Snell 定律确定折射角 θ_l ($l = f, j, k, b$):

$$\theta_l = \arcsin(n_0 \sin \theta_0 / n_l). \quad (8)$$

引入下标 m ($m = S, P$) 分别表示 S 偏振和 P 偏振,上标'表示理想情况. 令各层的特征矩阵分别为 $M_{f,m}$, $M_{sur,m}$, $M_{sub,m}$ 和 $M_{b,m}$,薄膜与基底的组合特征矩阵^[11]为 $M_m = \begin{pmatrix} B_m \\ C_m \end{pmatrix}$, 则有下列式成立:

$$\begin{aligned} M_m &= \begin{pmatrix} B_m \\ C_m \end{pmatrix} = M_{f,m} \cdot M_{sur,m} \cdot M_{sub,m} \cdot M_{b,m} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \delta_f & \frac{i}{\eta_{f,m}} \sin \delta_f \\ i \eta_{f,m} \sin \delta_f & \cos \delta_f \end{pmatrix} \\ &\times \prod_{j=1}^{N_1} \begin{pmatrix} \cos \delta_j & \frac{i}{\eta_{j,m}} \sin \delta_j \\ i \eta_{j,m} \sin \delta_j & \cos \delta_j \end{pmatrix} \\ &\times \prod_{k=1}^{N_2} \begin{pmatrix} \cos \delta_k & \frac{i}{\eta_{k,m}} \sin \delta_k \\ i \eta_{k,m} \sin \delta_k & \cos \delta_k \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ \eta_{b,m} \end{pmatrix} \quad (9) \end{aligned}$$

式中 $\delta_l = \frac{2\pi}{\lambda} n_l d_l \cos \theta_l$ (其中 $d_f = h_f$, $d_j = h_1 / N_1$, $d_k = h_2 / N_2$, $d_b = h_b$), 各层导纳 $\eta_{l,p} = n_l / \cos \theta_l$ (P 偏振), $\eta_{l,s} = n_l \cos \theta_l$ (S 偏振).

各层的组合 Fresnel 反射系数可直接写为:

$$r_m = \frac{\eta_{0,m} B_m - C_m}{\eta_{0,m} B_m + C_m}, \quad (10)$$

式中空气导纳 $\eta_{0,p} = n_0 / \cos \theta_0$ (P 偏振), $\eta_{0,s} = n_0 \cos \theta_0$ (S 偏振), 由此可得总反射率 $R_m = r_m r_m^*$, 自然光总反射率 $R_{ave} = \frac{R_s + R_p}{2}$.

反射相移为:

$$\phi_m = \arctan \left\{ \frac{i \eta_{0,m} (C_m B_m^* - B_m C_m^*)}{\eta_{0,m}^2 B_m B_m^* - C_m C_m^*} \right\}, \quad (11)$$

则相位差 $\Delta_{phase} = \phi_s - \phi_p$.

理想情形下表面层和亚表面层均不存在,其组合特征矩阵转变为:

$$\begin{aligned} M'_m &= \begin{pmatrix} B'_m \\ C'_m \end{pmatrix} = M_{f,m} \cdot M_{b,m} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \delta_f & \frac{i}{\eta_{f,m}} \sin \delta_f \\ i \eta_{f,m} \sin \delta_f & \cos \delta_f \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ \eta_{b,m} \end{pmatrix}. \quad (12) \end{aligned}$$

依据(10)–(12)式可方便的计算理想情形下的 S 偏振、P 偏振和自然光的反射率, S 偏振、P 偏振光的反射相移和位相差.

应用上述模型可分别计算基底有微缺陷和理想条件下介质薄膜的光学性能,能够分析基底的微缺陷对介质膜光学特性的影响,为有效消除或减少基底的微缺陷、改善薄膜光学性能提供一定的理论依据.

若 n_f 取薄膜的等效折射率,则该模型也适用于分析微缺陷对多层介质膜光学特性的影响. 关于表面层和亚表面层折射率统计分布特性对介质膜光学特性的影响规律,有待于进一步研究.

3. 数值计算与讨论

选取入射光波长 $\lambda = 550 \text{ nm}$, 入射角 θ_0 ($0 \leq \theta_0 < \pi/2$). 单层非规整膜系介质膜, 折射率 $n_f = 1.92$ ($n_f > n_b$) 及 1.38 ($n_f < n_b$), 膜厚 $h_f = 80 \text{ nm}$, 基底折射率 $n_b = 1.52$, $\Delta_2 = -0.04$, 总厚度 $h = 3 \text{ mm}$, 表面层厚度 $h_1 = 10 \text{ nm}$ (相当于基底的 PV 表面粗糙度)^[6], 亚表面层厚度 $h_2 = 50 \text{ nm}$ (熔石英基底亚表面层深度一般小于 100 nm)^[6,12]. 取 $N_1 = 50$, $N_2 = 200$, 计算薄膜和基底的组合反射率及反射相移、相位差,在此不考虑薄膜和基底的吸收. 以下计算实例仅以 $n_f > n_b$ 的情形作详细分析,而 $n_f < n_b$ 的情形可类似计算得到.

3.1. 反射率分析

由(6)–(10)和(12)式并利用 Matlab 数学软件实现数值计算,得到反射率随入射角的变化关系曲线如图 4 和图 5 所示. 与理想情形相比,当 $0 \leq \theta_0 < \pi/2$ 和 $n_f > n_b$ 时 R_s, R_p (小于准 Brewster 角增大较明显) 和 R_{ave} 发生改变,令 $\Delta R_s = R_s - R'_s$ 和 $\Delta R_p = R_p - R'_p$ 和 $\Delta R_{ave} = R_{ave} - R'_{ave}$, 则其取值范围分别为 $0-0.3398\%$, $-0.011\%-0.1832\%$ 和 $0-0.2386\%$. 这些反射率与理想情形的偏离均可归咎为表面和亚表面微缺陷产生的散射.

图 4(a)表明对 P 偏振光存在准 Brewster 角 θ_B , 即 P 偏振光反射率出现最小值. 与理想情形对比, 准 Brewster 角的变化为 $\Delta \theta_B = \theta_B - \theta'_B = 67.8288 - 67.5524 = 0.2764^\circ$, 等效折射率变化为 $\Delta n = n - n' = 2.4539 - 2.419 = 0.0349 > 0$, 即等效折射率增大, 准 Brewster 角增大.

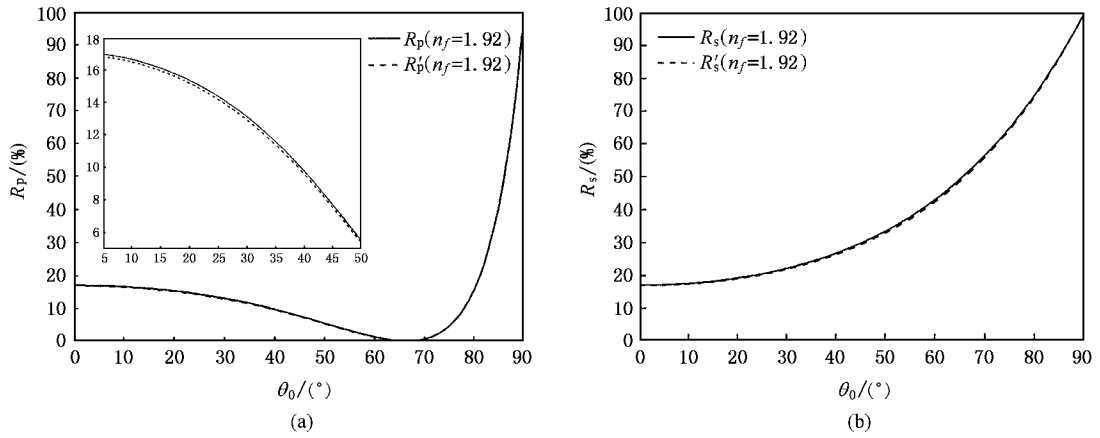


图 4 s 偏振光和 p 偏振光的反射率

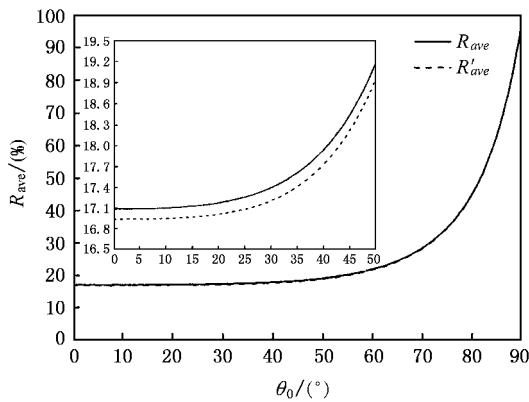


图 5 自然光反射率($n_f=1.92$)

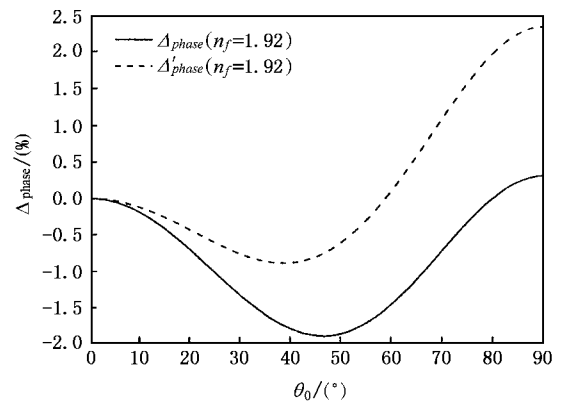


图 6 s 偏振光和 p 偏振光的相位差

3.2. 反射相移及相位差

由(6)–(9)(11)和(12)式进行数值计算,得到反射相移和相位差与入射角的关系如图6和图7所示.与理想情形对比,当 $n_f > n_b$ 时 ϕ_s , ϕ_p 及 Δ_{phase} 也

偏离了理想情形.令 $\Delta\Phi_p = \Phi_p - \Phi'_p$, $\Delta\Phi_s = \Phi_s - \Phi'_s$ 和 $\Delta(\Delta_{phase}) = \Delta_{phase} - \Delta'_{phase}$,则 $\Delta\phi_s$, $\Delta\phi_p$ 和 $\Delta(\Delta_{phase})$ 的取值范围分别为 $-3.0205^\circ \sim 2.7755^\circ$, $-2.7755^\circ \sim -0.9947^\circ$ 和 $-2.0258^\circ \sim 0^\circ$;上述相位变化可认为是微缺陷改变了光在薄膜和基底中的传播特性.

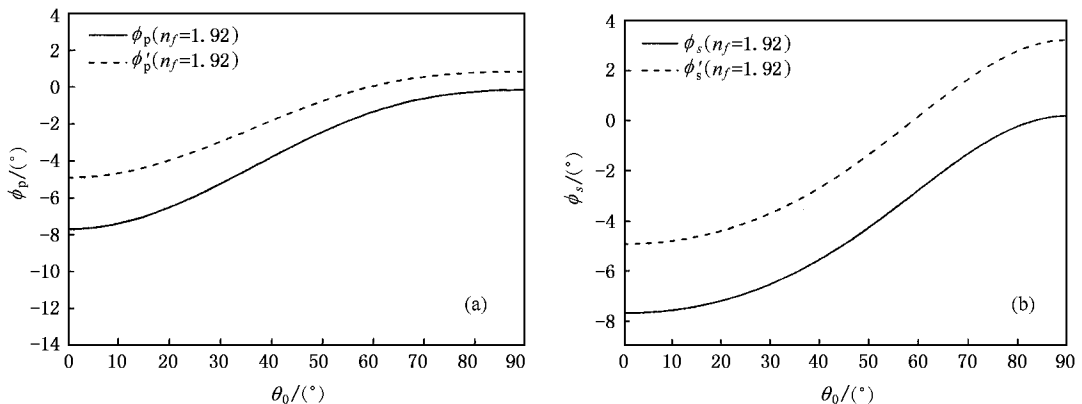


图 7 s 偏振和 p 偏振光反射相移

同理,可以对 $n_f = 1.38$ ($n_f < n_b$) 的情形进行类似计算. 结果表明与理想情形比, R_s, R_p (小于准 Brewster 角时减小较明显) 同时 R_{ave} 也均偏离理想情形. $\Delta R_s, \Delta R_p$ 和 ΔR_{ave} 的取值范围分别为 $-0.7816\% \sim 0\%, -0.1103\% \sim -0.2994\%, -0.265\% \sim 0\%$; $\Delta\theta_B = -0.8493^\circ$, $\Delta n = -0.0395 < 0$, 可见等效折射率降低, 因此准 Brewster 角减小; $\Delta\phi_s, \Delta\phi_p$ 和 $\Delta(\Delta_{phase})$ 的取值范围则分别为 $-22.6197^\circ \sim 163.5239^\circ$, $0.2955^\circ \sim 10.6161^\circ$ 和 $-23.5808^\circ \sim 161.8648^\circ$, 其中 Δ_{phase} 出现相位由负变正的跃变, 这是由 S 偏振光的 Fresnel 反射系数由负值跃变为正值而引起.

4. 结 论

本文应用非均匀膜理论建立了微缺陷存在时介

质基底的折射率模型, 将其依次划分为表面层、亚表面层和体材料层. 其中表面层及亚表面层的折射率沿 z 正向呈现不同的统计分布, 可分别等效为非均匀介质膜, 利用特征矩阵法实现基底存在微缺陷条件下的介质膜光学性能的分析与计算.

由理论分析和数值计算可知, 与理想情形相比, 当 $n_f > n_b$ 时基底的表面和亚表面缺陷使薄膜和基底的等效折射率增大, 准 Brewster 角增大, 反射率总体上略微增大 (P 偏振光小于准 Brewster 角时较明显); 当 $n_f < n_b$ 时这些微缺陷造成了薄膜和基底的等效折射率减小, 准 Brewster 角减小, 反射率总体上略微减小.

基底的表面和亚表面微缺陷改变了光在介质薄膜和基底中的传播特性, 最终导致薄膜和基底的组合相位发生变化.

- [1] Camp D W, Kozlowski M R, Sheehan L M *et al* 1998 *SPIE* **3244** 356
- [2] Randi J A, Lambropoulos J C, Jacobs S D *et al* 2003 *SPIE* **TD02** 84
- [3] Kamimura T, Fukumoto S, Ono R *et al* 2002 *Optics Letters* **27** 616
- [4] Kromine A K, Fomitchov P A, Krishnaswamy S *et al* 2001 *Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation* **20** 1612
- [5] Kamimura T, Mori Y, Sasaki T *et al* 1998 *Jpn. J. Appl. Phys* **37** 4840
- [6] Laboratory for Laser Energetics 1997 *LLE Review* **73** 45
- [7] Yao H, Erickson J C, Lim L A *et al* *Thin Solid Films* 1998 **313**—

314 351

- [8] Jacobsson J R 1993 *SPIE* **2046** 2
- [9] Born M and Wolf E 1999 *Principle of Optics* (7th expanded edition) (London: Cambridge University) p62
- [10] Zhao Y, Wang G and Lu T 2001 *Characterization of Amorphous and Crystalline Rough Surface: Principles and Applications* (New York: Academic) p45
- [11] Macleod H A 2001 *Thin-Film Optical Filters* (third edition) (London: IOP) p49
- [12] Yoshida K, Hirao T and Kamimura T 1996 *SPIE* **2714** 340

Theoretical study of influence of substrate microdefects on optical properties of dielectric thin films

Shen Jian¹⁾²⁾† Liu Shou-Hua³⁾ Shen Zi-Cai¹⁾²⁾ Kong Wei-Jin¹⁾²⁾

Huang Jian-Bing¹⁾²⁾ Shao Jian-Da¹⁾ Fan Zheng-Xiu¹⁾

¹⁾ *Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China*

²⁾ *Graduate School of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China*

³⁾ *School of Material Science and Engineering, Shaanxi University of Science and Technology, Xianyang 712081, China*

(Received 8 November 2004 ; revised manuscript received 31 January 2005)

Abstract

Based on the theory of inhomogeneous thin films, a model for refractive index of stratified dielectric substrate is firstly put forward. The substrate can be divided into surface layer, subsurface layer and bulk layer in turn. Both the surface layer and subsurface layer, whose refractive indices obey statistical distributions, are equivalent to inhomogeneous thin films. They can be separated into N_1 and N_2 sublayers respectively which are regarded as homogenous thin films. Subsequently, theoretical analysis was carried out utilizing the characteristic matrix method of optical thin films. Numerical calculation for optical properties of single layer dielectric thin films was carried out. The computing results indicate that microdefects in surface layer and subsurface layer of the substrate alter the equivalent refractive indices of the thin film and the substrate, which leads to the deviation of pseudo-Brewster angles and assembling reflectance from ideal conditions. Meanwhile, these microdefects change the propagation characteristics in thin film and substrate, as a result the phase shift of reflection and phase difference deviate from ideal conditions. In addition, this model is also suitable for calculating the influence of microdefects in the substrate on optical properties of multilayer dielectric thin films.

Keywords : microdefect, optical thin film, inhomogeneous coating, optical property

PACC : 7755, 4258D, 7820

† Corresponding author E-mail : shj@siom.ac.cn