Math-Net.Ru

All Russian mathematical portal

I. V. Kochikov, Yu. S. Lagutin, A. A. Lagutina, D. V. Lukyanenko, A. V. Tikhonravov, A. G. Yagola, Raising the accuracy of monitoring the optical coating deposition by application of a nonlocal algorithm of data analysis, *Sib. Zh. Ind. Mat.*, 2020, Volume 23, Number 2, 93–105

DOI: <https://doi.org/10.33048/SIBJIM.2020.23.207>

Use of the all-Russian mathematical portal Math-Net.Ru implies that you have read and agreed to these terms of use

<http://www.mathnet.ru/eng/agreement>

Download details:

IP: 34.229.45.116

April 26, 2023, 12:49:16

УДК 519.6

ПОВЫШЕНИЕ ТОЧНОСТИ КОНТРОЛЯ НАПЫЛЕНИЯ ОПТИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЙ ЗА СЧЁТ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ НЕЛОКАЛЬНОГО АЛГОРИТМА АНАЛИЗА ДАННЫХ

© 2020 И. В. Кочиков^{1a}, Ю. С. Лагутин^{2b}, А. А. Лагутина^{2c},
Д. В. Лукьяненко^{2d}, А. В. Тихонравов^{1e}, А. Г. Ягола^{2f}

¹ Научно-исследовательский вычислительный центр
Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова,
Ленинские горы, 1, стр. 4, г. Москва 119234, Россия,

² Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,
ул. Ленинские горы, д. 1, стр. 2, г. Москва 119991, Россия

E-mails: ^aigor@kochikov.ru, ^blagutin.math@gmail.com, ^clagutina.math@gmail.com,
^dlukyanenko@physics.msu.ru, ^etikh@srcc.msu.ru, ^fyagola@physics.msu.ru

Поступила в редакцию 13.12.2019 г.; после доработки 03.02.2020 г.;
принята к публикации 09.04.2020 г.

Рассматривается обратная задача контроля процесса напыления многослойных покрытий с использованием оптических измерений. Вводится новый нелокальный алгоритм обработки данных измерений. На основе симуляции процесса напыления сравниваются ошибки, возникающие в случае использования традиционного локального и предложенного нелокального алгоритмов. Рассматривается схема коррекции уровней останковки напыления слоёв оптических покрытий, позволяющая повысить точность контроля напыления. Показывается, что нелокальный алгоритм оказывается более эффективным как в случае напыления без коррекции уровня сигнала прерывания напыления, так и с коррекцией этого уровня.

Ключевые слова: обратные задачи, анализ экспериментальных данных, вычислительные алгоритмы, тонкослойные покрытия.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2020.23.207

ВВЕДЕНИЕ

Надёжное решение обратной задачи контроля процесса напыления оптических покрытий является ключевым элементом, позволяющим получать высококачественные покрытия с заданными спектральными характеристиками. Особый интерес представляет повышение точности решения обратной задачи в случае оптического контроля процесса напыления, поскольку при нём непосредственно контролируются оптические толщины слоёв покрытия, которые наиболее надёжно описывают оптические свойства напыляемого изделия [1]. Обычно оптический контроль разделяют на монохроматический и широкополосный. При монохроматическом контроле процесса напыления измерения спектральных характеристик покрытия (в дальнейшем для определённости мы будем говорить об измерении коэффициента отражения покрытия) производятся на одной длине волны, а при широкополосном — в некотором интервале длин волн. Также различают прямой и непрямой контроли. При прямом контроле измерения проводятся непосредственно на одном из образцов покрытия, в то время как при непрямом контроле толщины слоёв определяются по данным измерений на одной или нескольких дополнительных сменных пластинах (свидетелях).

Любой вид оптического контроля имеет свои преимущества и недостатки. Достоинством прямого оптического контроля процесса напыления является возможное проявление эффекта самокомпенсации ошибок [2, 3, 4]. Наравне с достоинством прямой оптический контроль имеет и серьёзный недостаток. Он связан с эффектом кумулятивного накопления ошибок в толщинах напыляемых слоёв [5, 6]. Этот эффект проявляется в том, что с ростом числа слоёв уменьшается точность, с которой определяются толщины очередных напыляемых слоёв.

В большинстве случаев при монохроматическом контроле используется так называемый контроль по уровню остановки, при котором напыление слоя прекращается в тот момент, когда значения коэффициента отражения на специально выбранной длине волны достигает теоретически рассчитанного значения, называемого уровнем остановки для текущего слоя [1, 7]. Такой вид мониторинга разделяют на активный и пассивный [6]. При пассивном контроле последовательность длин волн и уровни остановки (каждому напыляемому слою соответствует своя пара «длина волны + уровень остановки») выбираются до начала процесса напыления и не меняются в его процессе. При активном контроле информация, получаемая в процессе напыления, используется для коррекции параметров контроля.

Активный монохроматический контроль использует для коррекции контроля экстремальные значения коэффициента отражения, зарегистрированные в процессе напыления слоя. Одной из форм активного контроля является контроль по свингу измеряемого сигнала, который вводится с использованием экстремумов коэффициента отражения. Этот тип контроля обладает такими преимуществами, как нечувствительность к аддитивным и мультипликативным ошибкам измеряемого сигнала [8]. Но есть одно важное требование для применения этой техники — наличие толстых слоёв, при напылении которых регистрируется хотя бы один экстремум измеряемого сигнала.

Данная работа посвящена проблеме повышения точности активного монохроматического контроля процесса напыления многослойных оптических покрытий. Работа построена следующим образом. В разд. 1 описывается обратная задача определения толщины напылённого слоя и ставится задача определения оптимального времени прекращения процесса напыления. В разд. 2 вводятся основные понятия, связанные с рассматриваемым подходом к активному монохроматическому контролю, и описывается нелокальный алгоритм анализа данных измерений, использующий всю экспериментальную информацию, накапливаемую по мере напыления слоя покрытия. В разд. 3 описывается принцип работы и особенности используемого для обработки алгоритма симулятора процесса напыления многослойных покрытий. В разд. 4 сравнивается эффективность работы нелокального и традиционного локального алгоритмов анализа экспериментальных данных. Показывается высокая точность нелокального алгоритма.

1. ЗАДАЧА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВРЕМЕНИ ОКОНЧАНИЯ НАПЫЛЕНИЯ СЛОЁВ ПОКРЫТИЯ

Решение прямой задачи определения спектральных характеристик покрытия с заданными толщинами слоёв хорошо известно и может быть найдено, например, в [9]. Рассмотрим контроль процесса напыления j -го слоя покрытия с целевой теоретической толщиной d_j^{theor} . Измерение текущей толщины $d_j(t)$ проводится в дискретный набор времён $\{t_m\}$, $m \in \mathbb{N}$, $t_m = \tau m$, где τ — шаг по времени между измерениями коэффициента отражения $R^{\text{meas}}(t_m, \lambda_j)$, λ_j — заранее выбранная длина волны контроля процесса напыления j -го слоя. Предполагается, что $j - 1$ слоёв с реальными толщинами $d_1^a, \dots, d_{j-1}^a$ уже напылены. Эти толщины отличаются от теоретических значений $\{d_i^{\text{theor}}\}$, $i = \overline{1, j-1}$, которые соответствуют теоретической конструкции покрытия.

В каждый момент времени t_m мы оцениваем текущую толщину $d^{\text{est}}(t_m)$ напыляемого слоя j как

$$d^{\text{est}}(t_m) = \operatorname{argmin}_{d \in \mathbb{R}^+} [R(d_{\overline{1, j-1}}^{\text{theor}}, d, \lambda_j) - R^{\text{meas}}(t_m, \lambda_j)]^2,$$

где коэффициент отражения $R(d_{1,j-1}^{\text{theor}}, d, \lambda_j)$ вычисляется по широко известным формулам (см., например, [10]).

В каждый момент времени t_m набор точек $(t_i, d^{\text{est}}(t_i))$, $i = \overline{1, m}$, может быть аппроксимирован линейной функцией $d = r_m^{\text{est}} t + d_m^{\text{shift}}$, и найдены коэффициенты r_m^{est} и d_m^{shift} .

В результате мы можем оценить время Δt_m , которое остаётся до напыления слоя с желаемой толщиной d_j^{theor} , как [10]

$$\Delta t_m = \frac{d_j^{\text{theor}} - (r_m^{\text{est}} t_m + d_m^{\text{shift}})}{r_m^{\text{est}}}.$$

Если $\Delta t_m \leq \tau$, то момент прекращения напыления может быть вычислен как $t_m + \Delta t_m$.

Основная проблема этого подхода к предсказанию времени прекращения процесса напыления состоит в том, что оценённая толщина $d^{\text{est}}(t_m)$ зачастую оказывается неустойчивой по причине эффекта кумулятивного накопления ошибок и ошибок в измерениях коэффициента отражения $R^{\text{meas}}(t_m, \lambda_j)$ (см. подробности в [10]). Это приводит к существенному увеличению r_m^{est} , которое, в свою очередь, приводит к недооцениваю Δt . В результате процесс напыления может быть прекращён досрочно, в результате чего полученная толщина d_j^a напыляемого слоя j может быть значительно ниже желаемой толщины d_j^{theor} .

С целью решения этой проблемы предлагается реализовать алгоритм, использующий для контроля толщины напыляемого слоя максимально возможную накопленную во время напыления текущего слоя информацию. В случае напыления оптического покрытия, исходя из физической модели этого процесса, можно вывести аналитическое выражение для зависимости измеряемого в процессе напыления коэффициента отражения от толщины текущего напыляемого слоя.

Рассмотрим процесс напыления N -слойного покрытия с толщинами $\{d_1^{\text{theor}}, \dots, d_N^{\text{theor}}\}$ с соответствующими показателями преломления $\{n_1, \dots, n_N\}$. Напыление происходит на подложку толщины d_s с показателем преломления n_s и коэффициентом экстинкции χ . Окружающая среда имеет показатель преломления $n_a = 1$. Измерение коэффициента отражения $R^{\text{meas}}(t, \lambda_j)$ производится под нормальным углом падения на измерительный прибор при длине излучения λ_j . Скорость напыления стабильна и равна r . Для этого случая в работе [11] была найдена явная зависимость коэффициента отражения $R^{\text{theor}}(t, \lambda_j)$ от времени t , отсчитываемого с начала напыления j -го слоя покрытия:

$$R^{\text{theor}}(t, r, \lambda_j) = 100 + \frac{1}{\alpha \cos\left(\frac{4\pi}{\lambda_j} n_j r t\right) + \beta \sin\left(\frac{4\pi}{\lambda_j} n_j r t\right) + \gamma}. \quad (1)$$

В качестве единиц измерения коэффициентов отражения R^{theor} и R^{meas} используются проценты. В формуле (1) коэффициенты α , β и γ вычисляются по следующему алгоритму.

1. Вычисляется адмиттанс A_{j-1} на границе $(j-1)$ -го и j -го слоёв по рекуррентной формуле

$$A_0 = n_s, \quad A_j = \frac{i n_j \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_j} n_j d_j^{\text{theor}}\right) + A_{j-1} \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_j} n_j d_j^{\text{theor}}\right)}{\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_j} n_j d_j^{\text{theor}}\right) + (i/n_j) A_{j-1} \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_j} n_j d_j^{\text{theor}}\right)},$$

где i — мнимая единица.

2. Вычисляются значения вспомогательных переменных k_R , a , b , C_1 , C_2 :

$$k_R = \left| \frac{n_s - 1}{n_s + 1} \right|^2 \exp\left(-\frac{8\pi d_s \chi}{\lambda}\right),$$

$$C_1 = ((\text{Re}(A_{j-1}))^2 + \text{Im}(A_{j-1})^2 + n_j^2)(n_j^2 + 1) - 4n_j^2 \text{Re}(A_{j-1}),$$

$$C_2 = (\operatorname{Re}(A_{j-1})^2 + \operatorname{Im}(A_{j-1})^2 + n_j^2)(n_j^2 + 1) + 4n_j^2 \operatorname{Re}(A_{j-1}),$$

$$a = (\operatorname{Re}(A_{j-1})^2 + \operatorname{Im}(A_{j-1})^2 - n_j^2)(n_j^2 - 1), \quad b = 2n_j(n_j^2 - 1) \operatorname{Im}(A_{j-1}).$$

3. Вычисляются a' , b' , C'_1 , C'_2 :

$$C'_1 = C_1(2k_R - 1) - C_2 k_R, \quad C'_2 = C_1 k_R - C_2, \quad a' = a(k_R - 1), \quad b' = b(k_R - 1).$$

4. Наконец, вычисляются коэффициенты α , β , γ :

$$\alpha = \frac{1}{100} \frac{a'}{C'_1 - C'_2}, \quad \beta = \frac{1}{100} \frac{b'}{C'_1 - C'_2}, \quad \gamma = \frac{1}{100} \frac{C'_2}{C'_1 - C'_2}.$$

Таким образом, физические параметры уже напылённой системы из $(j - 1)$ слоёв единственным образом определяют коэффициенты α , β , γ , которым соответствует функция $R^{\text{theor}}(t, \lambda_j)$ для j -слоя.

Пусть для текущего слоя j имеется m измерений коэффициента отражения $R^{\text{meas}}(t_i, \lambda_j)$ в моменты времени t_i , $i = \overline{1, m}$, причём $m > 3$. Каждому результату измерений $(t_i, R^{\text{meas}}(t_i, \lambda_j))$, $i = \overline{1, m}$, сопоставим набор значений $(x_i, y_i, z_i(w_i))$, который вычисляется по формулам

$$x_i = \cos\left(\frac{4\pi}{\lambda_j} n_j r t_i\right), \quad y_i = \sin\left(\frac{4\pi}{\lambda_j} n_j r t_i\right), \quad w_i = 100 - R^{\text{meas}}(t_i, \lambda_j), \quad z_i(w_i) = -\frac{1}{w_i}.$$

Преобразуем уравнение (1) с использованием обозначений x_i , y_i , z_i и запишем его для каждого $i = \overline{1, m}$. В результате получим переопределённую систему уравнений относительно неизвестных коэффициентов α , β , γ : $z_i = \alpha x_i + \beta y_i + \gamma$, $i = \overline{1, m}$.

Так как коэффициент $R^{\text{meas}}(t_i, \lambda_j)$ измеряется в эксперименте с ошибкой, то имеет смысл искать только псевдорешение этой системы, а именно, набор коэффициентов α^* , β^* и γ^* , который будет реализовывать минимум функционала:

$$F(\alpha, \beta, \gamma) = \sum_{i=1}^m \left(\frac{z_i - (\alpha x_i + \beta y_i + \gamma)}{\sigma_{z_i}} \right)^2.$$

Здесь в качестве весовых коэффициентов используются стандартные отклонения σ_{z_i} случайной величины z_i , вообще говоря, разные для каждого i . С отклонением σ_R они связаны соотношением

$$\sigma_{z_i} = \frac{\sigma_R}{(100 - R(t_i))^2} \approx \frac{\sigma_R}{(100 - R^{\text{meas}}(t_i, \lambda_j))^2} = \frac{\sigma_R}{w_i^2}.$$

Вектор $X^{\text{nonloc}} = (\alpha^* \beta^* \gamma^*)^T$, компонентами которого являются искомые коэффициенты, реализующие минимум указанного функционала, может быть найден аналитически:

$$X^{\text{nonloc}} = (L^{\text{nonloc}})^{-1} f^{\text{nonloc}},$$

где

$$L^{\text{nonloc}} = \sum_{i=1}^m w_i^4 \begin{pmatrix} x_i^2 & x_i y_i & x_i \\ x_i y_i & y_i^2 & y_i \\ x_i & y_i & 1 \end{pmatrix}, \quad f^{\text{nonloc}} = \sum_{i=1}^m (-w_i^3) \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \\ 1 \end{pmatrix}.$$

В результате формула (1) для $R^{\text{theor}}(t, r, \lambda_j)$ может быть переписана в виде

$$R^{\text{theor}}(t, r, \lambda_j) = 100 + \frac{1}{\alpha^* \cos\left(\frac{4\pi}{\lambda_j} n_j r t\right) + \beta^* \sin\left(\frac{4\pi}{\lambda_j} n_j r t\right) + \gamma^*}.$$

Таким образом, исходя из предположения, что $R^{\text{theor}}(t_i, r, \lambda_j) \approx R^{\text{meas}}(t_i, \lambda_j)$, мы можем оценить эффективную скорость напыления r_m^{est} :

$$r_m^{\text{est}} = \underset{r \in \mathbb{R}^+}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^m [R^{\text{theor}}(t_i, r, \lambda_j) - R^{\text{meas}}(t_i, \lambda_j)]^2.$$

В результате мы можем оценить время Δt_m , которое остаётся до напыления слоя j с желаемой толщиной d_j^{theor} с соответствующим заранее вычисленным уровнем остановки/прекращения напыления $R_j^{\text{theor, term}}$ (индекс term является сокращением от termination — прекращение) на длине волны контроля λ_j :

$$\Delta t_m = \underset{t \in \mathbb{R}^+}{\operatorname{argmin}} (R_j^{\text{theor, term}} - R^{\text{theor}}(t_m + t, r_m^{\text{est}}, \lambda_j))^2.$$

Если $\Delta t_m \leq \tau$, то момент прекращения напыления может быть вычислен как $t_m + \Delta t_m$.

2. НЕЛОКАЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ АНАЛИЗА ДАННЫХ ОПТИЧЕСКОГО КОНТРОЛЯ

Будем предполагать, что для каждого слоя j в соответствии с выбранным алгоритмом коррекции вычислено значение для уровня остановки $R_j^{a, \text{term}}$ (индекс a является сокращением от actual — реальное), который может отличаться от $R_j^{\text{theor, term}}$, и число экстремумов функции $R^{\text{meas}}(t, \lambda_j)$ на множестве $t \in (0, t_j^{\text{term}})$, где t_j^{term} — теоретически вычисленное время прекращения напыления.

Рассматриваются два алгоритма коррекции. Первым рассмотрим оптический контроль без коррекции. Он принадлежит к типу пассивных алгоритмов, т. е. для него уровни остановки вычисляются заранее и принимаются равными $R_j^{a, \text{term}} = R_j^{\text{theor, term}}$, где $R_j^{\text{theor, term}}$ — заранее вычисленная величина, равная ожидаемому теоретическому коэффициенту отражения в конце напыления j -го слоя, если он и предыдущие слои напылены без ошибок. Как отмечалось во введении, при реализации данного подхода возможно возникновение сильного кумулятивного эффекта накопления ошибок.

Второй алгоритм коррекции мы выведем, используя понятие свинга. Свингом S для значения коэффициента отражения R напыляемого слоя является величина

$$S(R) = \frac{R - R_{\min}}{R_{\max} - R_{\min}},$$

где $R_{\min}$ и $R_{\max}$ — минимальный и максимальный коэффициент отражения, которые потенциально могут быть зарегистрированы во время напыления слоя.

Пусть напыляемый j -слой достаточно толстый, и в течение времени его напыления функция $R^{\text{theor}}(t, \lambda_j)$ достигает не менее двух экстремумов. Тогда последний зарегистрированный экстремум обозначим $R_j^{a, \text{extr. last}}$, а предыдущий по отношению к нему $R_j^{a, \text{extr. prev}}$. Обратим внимание на то, что величины $R_j^{a, \text{extr. last}}$ и $R_j^{a, \text{extr. prev}}$ соответствуют значениям коэффициента отражения с уже допущенными ошибками в толщинах предыдущих $(j - 1)$ слоёв. Величины коэффициентов отражения, которые вычислены с учётом толщины слоёв, в которых отсутствуют ошибки, обозначим $R_j^{\text{theor, extr. last}}$ и $R_j^{\text{theor, extr. prev}}$. Потребуем, чтобы величина свинга для фактического уровня остановки $S_j^{a, \text{term}} = S(R_j^{a, \text{term}})$ совпадала с теоретической величиной свинга для уровня остановки $S_j^{\text{theor, term}} = S(R_j^{\text{theor, term}})$, т. е. потребуем удовлетворения равенства

$$S_j^{a, \text{term}} = S_j^{\text{theor, term}}. \quad (2)$$

Подставим в (2) значения свингов в соответствии с введёнными обозначениями и выразим значение для фактического уровня остановки напыления $R_j^{a, \text{term}}$:

$$R_j^{a, \text{term}} = R_j^{a, \text{extr. last}} - (R_j^{\text{theor, extr. last}} - R_j^{\text{theor, term}}) \frac{A_j^a}{A_j^{\text{theor}}}, \quad (3)$$

где

$$\frac{A_j^a}{A_j^{\text{theor}}} = \frac{R_j^{a, \text{extr. last}} - R_j^{a, \text{extr. prev}}}{R_j^{\text{theor, extr. last}} - R_j^{\text{theor, extr. prev}}}.$$

Значения, используемые во введённой схеме коррекции, поясняются на рис. 1. На этом рисунке изображён случай, когда ошибки, допущенные в толщинах предыдущих слоёв, привели к сдвигу фактически наблюдаемой кривой коэффициента отражения по отношению к теоретической кривой. На рис. 1 отражены все величины из формулы (3). Рисунок демонстрирует, как коррекция сдвигает уровень остановки на основании зафиксированного отклонения фактической кривой от теоретически ожидаемой.

Рис. 1. Теоретический и фактический коэффициенты отражения R во время напыления толстого слоя покрытия

Однако в большинстве случаев слои не являются настолько толстыми, чтобы за время напыления слоя было зарегистрировано два или более экстремумов. Численные эксперименты показывают, что на практике можно в качестве $R_j^{a, \text{extr. prev}}$ взять и предыдущий экстремум, но принадлежащий не j -му, а $(j - 1)$ -му слою, т. е. $R_j^{a, \text{extr. prev}} = R_{j-1}^{a, \text{extr. last}}$. Такая коррекция, вообще говоря, уже не будет коррекцией по свингу. Чтобы подчеркнуть это различие, мы назовём эту коррекцию коррекцией по псевдосвингу.

Для использования введённой схемы коррекции нужно находить фактический уровень остановки напыления $R_j^{a, \text{term}}$, а для этого нужно с высокой точностью находить экстремумы, зарегистрированные в течение напыления слоя. Для этого будем пользоваться нелокальным алгоритмом, описанным в работе [11].

С помощью найденных экстремальных значений происходит корректировка фактического уровня остановки напыления $R_j^{a, \text{term}}$. Далее зависимость $R^{\text{theor}}(t, \lambda_j)$, получаемая на осно-

вании данных измерений, используется для определения значения t_j^{term} , при котором будет происходить остановка напыления слоя (см. рис. 2).

Рис. 2. Аппроксимация данных измерений с помощью функции (1), используемой нелокальным алгоритмом, и вычисляемые по этой функции значения; измерения (—); аппроксимация (---)

3. СИМУЛЯТОР ПРОЦЕССА НАПЫЛЕНИЯ ПОКРЫТИЯ

Для разработки, отладки и сравнения алгоритмов анализа данных целесообразно применение компьютерного моделирования. В [12] описан симулятор для широкополосного контроля напыления покрытий. Этот симулятор был изменён для монохроматического контроля напыления покрытий. В этом разделе мы рассматриваем алгоритм работы симулятора, моделирующего процесс напыления оптических покрытий.

Рассматривается модель, в которой на подложку напыляется покрытие, состоящее из N слоёв с толщинами $\{d_1^{\text{theor}}, \dots, d_N^{\text{theor}}\}$. Показатель преломления подложки n_s . Слои покрытия получены напылением двух материалов с разными показателями преломления: нечётные слои — с высоким n_H , чётные — с низким n_L показателями преломления. Предполагается, что монохроматический контроль процесса напыления производится на длине волны λ_j . Средняя скорость напыления материалов в камере известна и равна r . Скорость напыления флуктуирует. Флуктуации скорости напыления учитываются заданием их с помощью нормального распределения с нулевым математическим ожиданием и стандартным отклонением σ_r . В процессе напыления через равные промежутки времени τ_{com} измеряется коэффициент отражения R^{meas} на длине волны мониторинга λ_j . Измерения R^{meas} происходят со случайной нормальной ошибкой δR со стандартным отклонением σ_R . Получаемые в процессе симуляции зашумлённые данные далее обрабатываются одним из рассматриваемых алгоритмов обработки данных. Условия прекращения напыления слоя определяются типом используемого метода коррекции измерений.

1. Вычисление теоретических характеристик процесса контроля. Для каждого слоя j вычисляются теоретические величины: последний, достигаемый в течение напыления слоя экстремум $R_j^{\text{theor, extr. last}}$, предшествующий ему экстремум $R_j^{\text{theor, extr. prev}}$, а также уровень остановки для текущего слоя $R_j^{\text{theor, term}}$. Если слой достаточно толстый и у него более одного экстремума, то $R_j^{\text{theor, extr. prev}}$ является предпоследним экстремумом, фиксируемым во время напыления j -го слоя, в противном случае $R_j^{\text{theor, extr. prev}}$ — последний экстремум предыдущего слоя.

2. Симуляция одного шага измерений.

2.1. Установим $j := 1$, где под j подразумеваем номер слоя.

2.2. Установим $m := 0$, $t_m = 0$, $d_{\text{cur}} := 0$, $\tau := \tau_{\text{com}}$.

2.3. Совершим один шаг напыления $m := m + 1$. Сгенерируем случайные величины δr , δR . Увеличим текущее время $t_m := t_{m-1} + \tau$ и толщину слоя $d_{\text{cur}} := d_{\text{cur}} + \tau(r + \delta r)$.

2.4. Произведём «измерения». Вычислим коэффициент отражения на длине волны λ_j от уже напылённых к текущему моменту слоёв $R := R(d_1, d_2, \dots, d_{j-1}, d_{\text{cur}})$. Коэффициентом отражения, «измеренным» на текущем шаге, считаем величину $R_m^{\text{meas}} := R + \delta R$.

3. Обработка данных. В зависимости от выбранного алгоритма обработки данных по полученным «измеренным» данным $(t_i, R^{\text{meas}}(t_i, \lambda_j))$, $i = \overline{1, m}$, восстановим функцию $R_{\text{app}}(t)$. По этой функции определим, пройден ли к текущему моменту времени t_m последний ожидаемый экстремум для j -го слоя. Также определим фактические значения экстремумов $R^{a, \text{extr. prev}}$ и $R^{a, \text{extr. last}}$.

4. Коррекция уровня остановки для текущего слоя. В зависимости от выбранного алгоритма коррекции определим или переопределим значение фактического уровня остановки $R_j^{a, \text{term}}$. Рассмотрим два случая.

БЕЗ КОРРЕКЦИИ. В этом случае для каждого слоя фактический уровень остановки всегда совпадает с теоретическим: $R_j^{a, \text{term}} := R_j^{\text{theor, term}}$.

КОРРЕКЦИЯ ПО СВИНГУ ИЛИ ПСЕВДОСВИНГУ. Слои, у которых два и более экстремума, будем называть толстыми. Уровень остановки для них корректируется таким образом, чтобы значение свинга фактического уровня остановки совпадало со значением свинга теоретического уровня остановки. Если у слоя экстремум только один, то мы не можем рассчитать фактическое значение свинга. Вместо этого считается псевдосвинг по формуле (3), в котором используется значение последнего экстремума предыдущего слоя.

5. Остановка напыления слоя В условии 3 определено, пройден ли последний экстремум при напылении текущего слоя. Если не пройден, то возвращаемся к п. 2.3, в ином случае проверяем описанные далее условия остановки. Остановка напыления слоя происходит, если выполнено хотя бы одно из условий.

УСЛОВИЕ I (ТОЧНАЯ ОСТАНОВКА). С помощью функции $R_{\text{app}}(t)$ пытаемся предсказать, пересечём ли мы уровень остановки, если совершим ещё один шаг напыления, т. е. проверяем выполнение условия

$$(R_{\text{app}}(t_m) - R_j^{a, \text{term}})(R_{\text{app}}(t_m + \tau) - R_j^{a, \text{term}}) < 0.$$

Если это условие выполняется, то из уравнения $R_{\text{app}}(t) - R_j^{a, \text{term}} = 0$ находим $t_j^{\text{term}} \in [t_m, t_m + \tau]$. Положим последний шаг по времени $\tau := t_j^{\text{term}} - t_m$ и сделаем новый шаг напыления (п. 2.3). Затем положим $j := j + 1$, и если $j \leq N$, то продолжим выполнение программы с пункта 2.2.

УСЛОВИЕ II (ОСТАНОВКА С ОПОЗДАНИЕМ). В некоторых случаях может произойти так, что после уточнения на новом шаге $R_{\text{app}}(t)$ обнаружится, что уровень остановки $R_j^{a, \text{term}}$ уже пройден. В этом случае напыление слоя завершается, и происходит переход к напылению нового слоя, т. е. меняем значение $j := j + 1$, и если $j \leq N$, то возвращаемся к пункту 2.2.

УСЛОВИЕ III (ОСТАНОВКА ПО ВРЕМЕНИ). При использовании некоторых типов коррекции и особенно в случае, когда коррекция не используется, вследствие накопления ошибок может случиться, что ни условие I, ни условие II не могут быть выполнены. В этом случае разумно остановить процесс напыления, если время напыления начинает заметно превышать время, за которое в соответствии с оценкой скорости напыления должно было закончиться напыление текущего слоя. Мы задаём такую остановку процесса напыления условием $t_m r > 1, 25d_j$. Если выполнено это условие, то $j := j + 1$, и если $j \leq N$, то возвращаемся к пункту 2.2.

4. СРАВНЕНИЕ ЛОКАЛЬНОГО И НЕЛОКАЛЬНОГО АЛГОРИТМОВ

В разд. 2 был описан нелокальный алгоритм обработки данных. Далее мы будем его сравнивать с локальным алгоритмом. Опишем локальный алгоритм обработки данных, используемый в симуляторе.

Локальным алгоритмом аппроксимации данных измерений будем называть процедуру отыскания коэффициентов a_1 , a_2 и a_3 функции

$$R_{\text{app}}^{\text{loc}}(t) = a_1 t^2 + a_2 t + a_3,$$

которые являются псевдорешением системы уравнений:

$$L^{\text{loc}} X^{\text{loc}} = f^{\text{loc}},$$

где

$$L^{\text{loc}} = \begin{pmatrix} t_{m-n_2+1}^2 & t_{m-n_w+1} & 1 \\ t_{m-n_2+2}^2 & t_{m-n_w+2} & 1 \\ \dots & \dots & \dots \\ t_m^2 & t_m & 1 \end{pmatrix}, \quad x^{\text{loc}} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}, \quad f^{\text{loc}} = \begin{pmatrix} R_{m-n_w+1}^{\text{meas}} \\ R_{m-n_w+2}^{\text{meas}} \\ \dots \\ R_m^{\text{meas}} \end{pmatrix}.$$

Число аппроксимируемых точек n_w назовём шириной «окна» локального алгоритма. Очевидно, что $n_w \geq 3$. Значение n_w зависит от размера области, в которой данные измерений хорошо аппроксимируется параболой. В результате проведённых численных экспериментов в симуляторе было выбрано значение $n_w = 15$. Именно из-за наличия «окна», вырезающего только часть полученных экспериментальных данных, алгоритм назван локальным, так как в отличие от нелокального в нём используется не вся информация, собранная в течение напыления слоя.

Для сравнения эффективности локального и нелокального алгоритмов была проведена серия численных экспериментов на симуляторе с напылением так называемого четвертьволнового зеркала. Это покрытие состоит из 20-ти чередующихся слоёв с показателями преломления нечётных и чётных слоёв $n_H = 2,38$ и $n_L = 1,46$ соответственно. Подложка, на которую производится напыление, имеет показатель преломления $n_s = 1,46$. Оптические толщины h_j одинаковы для всех слоёв и равны $h_j = d_j n_j = \lambda_0/4 = 150$ нм. Напыление начинается со слоя с высоким показателем преломления n_H . Внешняя среда — воздух с показателем преломления $n_a = 1$.

При сравнении использовались следующие параметры симуляции:

$$r = 0,25 \text{ нм/с}; \quad \sigma_r = 0,0125 \text{ нм/с}; \quad \sigma_R = 0,1 \%; \quad \tau_{\text{com}} = 2 \text{ с}; \quad \lambda_j = 510 \text{ нм}.$$

В результате проведения каждой симуляции процесса напыления получаем набор толщин «напылённого» покрытия $\{d_1, d_2, \dots, d_N\}$. Поскольку результаты напыления зависят от большого числа случайных факторов, целесообразно проводить сравнение алгоритмов, используя серии симуляционных экспериментов. Мы проводим серии из $N_s = 100$ симуляций и рассчитываем по результатам этих симуляций среднеквадратичные ошибки толщин слоёв Δd_j^{err} для каждого слоя:

$$\Delta d_j^{\text{err}} = \sqrt{\frac{1}{N_s} \sum_{s=1}^{N_s} (d_j - d_j^{\text{theor}})^2}.$$

Результат сравнения работы локального и нелокального алгоритмов в случае отсутствия коррекции уровня остановки напыления приведён на рис. 3, а, с коррекцией уровня остановки напыления по псевдосвингу — на рис. 3, б. Видно, что в обоих случаях нелокальная аппроксимация для всех слоёв даёт меньшую ошибку. Также на рис. 3 отчётливо виден кумулятивный эффект роста ошибок с увеличением номера напыляемого слоя.

Рис. 3. Среднеквадратичные ошибки в толщинах слоёв для локального ($\square$) и нелокального ($\blacksquare$) алгоритмов: (а) в случае напыления без коррекции; (б) в случае напыления с коррекцией по псевдосвингу

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Введённый в работе нелокальный алгоритм анализа данных измерений оказывается более точным и эффективным, чем локальный алгоритм, как в случае с коррекцией по псевдосвингу, так и в случае без коррекции. Нелокальный алгоритм позволяет заранее и с высокой точностью предсказывать экстремальные значения коэффициента отражения, находить фактический уровень остановки напыления, а также время остановки напыления текущего слоя. Продемонстрировано, что коррекция по псевдосвингу позволяет существенно уменьшить ошибки при напылении по сравнению с напылением без коррекции.

ЛИТЕРАТУРА

1. Macleod A. Monitoring of optical coatings // Appl. Opt. 1981. V. 20. P. 82–89.
2. Tikhonravov A. V., Trubetskov M. K., Amotchkina T. V. Investigation of the error selfcompensation effect associated with broadband optical monitoring // Appl. Opt. 2011. V. 50. P. C111–C116.
3. Zhupanov V., Kozlov I., Fedoseev V., Konotopov P., Trubetskov M., Tikhonravov A. Production of Brewster angle thin film polarizers using a $\text{ZrO}_2/\text{SiO}_2$ pair of materials // Appl. Opt. 2017. V. 56. P. C30–C34.
4. Zöller A., Boos M., Goetzelmann R., Hagedorn H., Romanov B., Viet M. Accuracy and error compensation with direct monochromatic monitoring // Optical Interference Coatings. 2013. P. WB5. (OSA Technical Digest Series).
5. Tikhonravov A. V., Trubetskov M. K., Amotchkina T. V. Investigation of the effect of accumulation of thickness errors in optical coating production using broadband optical monitoring // Appl. Opt. 2006. V. 45. P. 7026–7034.
6. Tikhonravov A. V., Trubetskov M. K., Amotchkina T. V. Statistical approach to choosing a strategy of monochromatic monitoring of optical coating production // Appl. Opt. 2006. V. 45. P. 7863–7870.
7. Zhao F. Monitoring of periodic multilayers by the level method // Appl. Opt. 1985. V. 24. P. 3339–3342.
8. Tikhonravov A. V., Trubetskov M. K., Amotchkina T. V. Optical monitoring strategies for optical coating manufacturing // Optical thin films and coatings: from materials to applications. Philadelphia: Woodhead Pub., 2018. P. 65–101. (Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials).
9. Born M., Wolf E. Principles of optics: electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light. Cambridge: Univ. Press, 2013.
10. 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 J. Math. Comput. Appl. 2018. V. 6, N 4. P. 38–47.

11. Кочкиков И. В., Лагутин Ю. С., Лагутина А. А., Лукьяненко Д. В., Тихонравов А. В., Ягола А. Г. Нелокальный алгоритм анализа данных монохроматического контроля процесса напыления многослойных покрытий // Вычислительные методы и программирование. 2019. Т. 20. С. 471–480. (Новые вычислительные технологии).
12. Isaev T. F., Lukyanenko D. V., Tikhonravov A. V., Yagola A. G. Algorithms for solving inverse problems in the optics of layered media based on comparing the extrema of spectral characteristics // Comput. Math. Math. Physics. 2017. V. 57, N 5, P. 867–875.

UDC 519.6

RAISING THE ACCURACY OF MONITORING THE OPTICAL COATING DEPOSITION BY APPLICATION OF A NONLOCAL ALGORITHM OF DATA ANALYSIS

© 2020 I. V. Kochikov^{1a}, Yu. S. Lagutin^{2b}, A. A. Lagutina^{2c},
D. V. Lukyanenko^{2d}, A. V. Tikhonravov^{1e}, A. G. Yagola^{2f}

¹*Research Computing Center, Lomonosov Moscow State University,
Leninskie gory 1, korp. 4, Moscow 119234, Russia,*

²*Lomonosov Moscow State University,
Leninskie gory 1, korp. 2, Moscow 119991, Russia*

E-mails: ^aigor@kochikov.ru, ^blagutin.math@gmail.com, ^clagutina.math@gmail.com,
^dlukyanenko@physics.msu.ru, ^etikh@srcc.msu.ru, ^fyagola@physics.msu.ru

Received 13.12.2019, revised 03.02.2020, accepted 09.04.2020

Abstract. Under consideration is the inverse problem of controlling the deposition of a multilayer coating using optical monitoring. Some new nonlocal algorithm is introduced for data analysis. Using the simulation of deposition process, the errors are compared of the proposed nonlocal algorithm and the traditional local algorithm. A scheme of correction of the levels of the deposition process termination is considered which allows us to improve the accuracy of deposition monitoring. We show that the introduced nonlocal algorithm is more efficient both for the deposition without correction of the signal level for the deposition interruption and with correction of this level.

Keywords: inverse problem, analysis of experimental data, computational algorithm, thin film coating.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2020.23.207

REFERENCES

1. Macleod A. Monitoring of optical coatings. *Appl. Opt.*, 1981, Vol. 20, pp. 82–89.
2. Tikhonravov A.V., Trubetskov M.K., Amotchkina T.V. Investigation of the error selfcompensation effect associated with broadband optical monitoring. *Appl. Opt.*, 2011, Vol. 50, pp. C111–C116.
3. Zhupanov V., Kozlov I., Fedoseev V., Konotopov P., Trubetskov M., Tikhonravov A. Production of Brewster angle thin film polarizers using a ZrO₂/SiO₂ pair of materials. *Appl. Opt.*, 2017, Vol. 56, pp. C30–C34.
4. Zöller A., Boos M., Goetzelmann R., Hagedorn H., Romanov B., Viet M. Accuracy and error compensation with direct monochromatic monitoring. *Optical Interference Coatings*, 2013, p. WB5. (OSA Technical Digest Series).
5. Tikhonravov A.V., Trubetskov M.K., Amotchkina T.V. Investigation of the effect of accumulation of thickness errors in optical coating production using broadband optical monitoring. *Appl. Opt.*, 2006, Vol. 45, pp. 7026–7034.
6. Tikhonravov A.V., Trubetskov M.K., Amotchkina T.V. Statistical approach to choosing a strategy of monochromatic monitoring of optical coating production. *Appl. Opt.*, 2006, Vol. 45, pp. 7863–7870.
7. Zhao F. Monitoring of periodic multilayers by the level method. *Appl. Opt.*, 1985, Vol. 24, pp. 3339–3342.

8. Tikhonravov A.V., Trubetskov M.K., Amotchkina T.V. Optical monitoring strategies for optical coating manufacturing. *Optical thin films and coatings: from materials to applications*. Philadelphia: Woodhead Publ., 2018, pp. 65–101. (Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials).
9. Born M., Wolf E. Principles of optics: electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light. Cambridge: Univ. Press, 2013.
10. 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 J. Math. Comput. Appl.*, 2018, Vol. 6, No. 4, pp. 38–47.
11. Kochikov I.V., Lagutin Yu.S., Lagutina A.A., Luk'yanenko D.V., Tikhonravov A.V., Yagola A.G. Nelokal'nyi algoritm analiza dannykh monokhromaticheskogo kontrolya protsessa napyleniya mnogosloinykh pokrytii [A Nonlocal Algorithm for Data Analysis of Monochromatic Control of the Process of Multilayered Coating Production]. *Vychisl. Metody i Programirovanie*, 2019, Vol. 20, pp. 471–480 (in Russian).
12. Isaev T.F., Lukyanenko D.V., Tikhonravov A.V., Yagola A.G. Algorithms for solving inverse problems in the optics of layered media based on comparing the extrema of spectral characteristics. *Comput. Math. Math. Physics*, 2017, Vol. 57, No. 5, pp. 867–875.