渐变折射率薄膜的分层评价探讨

沈自 τ^{1} ²) 沈 建¹²) 刘世杰¹²) 孔伟金¹²) 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 100049)
 (2006年7月7日收到,2006年8月16日收到修改稿)

首先阐述了将渐变折射率薄膜细分为多层均匀薄膜的分层介质理论 接着给出了一种获得最佳分层数目的分 层评价方法,最后以线性变化渐变折射率薄膜为例说明了如何优化获得渐变折射率薄膜的分层数目.研究发现 渐 变折射率薄膜的分层数目与薄膜的厚度和薄膜的折射率变化快慢有关,在一定的折射率变化范围内,渐变折射率 薄膜的分层数目随着薄膜厚度的增加先减小后增大.

关键词:渐变折射率,分层介质理论,分层评价 PACC:2100M,6855,8115G

1.引 言

渐变折射率薄膜是指薄膜的折射率沿膜层表面 的法线方向逐渐变化,但在垂直于法线的水平方向 上保持不变¹¹,通常又被称为非均匀薄膜,由于其独 特的折射率逐渐变化特性,消除了界面,增加了薄膜 的设计灵敏度,因此渐变折射率薄膜可以实现传统 分层介质膜无法实现的性能,如获得较好的附着力, 较小的应力,较理想的光学特性和提高薄膜的抗激 光损伤阈值.

从理论上讲,研究渐变折射率薄膜系统的光学 性质同均匀薄膜系统一样都是研究平面电磁波通过 非均匀介质的传播问题,也就是求解从麦克斯韦方 程导出的微分方程,得到电磁波在非均匀介质情况 下的位相函数.但是由于波动方程在折射率不均匀 变化的条件下只有少数特殊情况才能从已知膜层在 法向上折射率分布函数中得到明确的解,而且解的 表达式对于直接的数值计算很复杂,因此在实际分 析渐变折射率薄膜的时候是很困难的.

当膜层的折射率只沿着薄膜的法线方向逐渐变 化,并且其变化量与波长相比很小时,可以采用分层 介质理论来近似分析渐变折射率薄膜的光学性质, 其方法是用足够多的均匀膜层来代替一个渐变折射 率膜层,这些均匀膜层的折射率分布勾划出了渐变 折射率薄膜的分布函数.另一方面,虽然制备渐变折 射率薄膜的方法很多^[2-4],但是由于薄膜折射率的 逐渐变化特性而制备工艺非常复杂,因此可采用多 层均匀薄膜来近似等效渐变折射率薄膜.但是如何 用均匀介质膜层来等效渐变折射率薄膜,将渐变折 射率薄膜细分为多少层均匀薄膜才比较合理是关键 的问题.这是因为当分层数目较多时将增加分析计 算的难度和近似制备的复杂性,而分层数目较少时 将会增加渐变折射率薄膜的光学特性误差和影响其 他性能.

本文首先介绍了渐变折射率薄膜的分层介质理 论,接着对如何利用分层介质理论来获得最佳的分 层数目进行了探讨,最后举例说明获得最佳分层数 目的方法以及分层数目与渐变折射率薄膜厚度的关 系,这将对渐变折射率薄膜的光学特性分析及其近 似制备具有重要的理论指导意义.

2. 分层介质理论

分析渐变折射率薄膜的光学性能的一种典型近 似方法是将它分成若干层很薄的均匀薄膜,如图1 为线性渐变折射率薄膜分层示意图。

将每层薄膜的特征矩阵相乘得到一个总特征矩阵 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、总透 射率和反射相移等重要光学性能^[5,6].

根据分层介质理论,可将渐变折射率膜层沿膜 层法线方向划分成 N 个子层,每个子层的几何厚度 分别相等且折射率均匀⁷¹.令空气、基底和薄膜子层 的折射率分别为 n_0 , n_s , n_j (j = 0, 1, 2, ..., N), 渐变 折射率薄膜的折射率在 n_1 和 n_2 之间变化, 薄膜的 总厚度为 H, 则每个子层的厚度为 $h_i = H/N$.



图 1 线性渐变折射率薄膜分层示意图

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 ($0 \le \theta_0 < \pi/2$)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,由 $n_0 \sin \theta_0 = n_i \sin \theta_i = n_s \sin \theta_s$ 得

$$\theta_i = \sin^{-1}(n_0 \sin \theta_0 / n_i), \qquad (1)$$

$$\theta_{\rm s} = \sin^{-1}(n_0 \sin\theta_0/n_{\rm s}). \tag{2}$$

对 s 偏振和 p 偏振 為子层的位相厚度为

$$\delta_j = \frac{2\pi}{\lambda} n_j h_j \cos\theta_j , \qquad (3)$$

空气导纳为

$$\eta_{0} = \begin{cases} n_{0}/\cos\theta_{0}(\mathbf{p} \ \mathbf{fm} \mathbf{k}), \\ n_{0}\cos\theta_{0}(\mathbf{s} \ \mathbf{fm} \mathbf{k}), \end{cases}$$
(4)

其他各层导纳为

$$\eta_{j} = \begin{cases} n_{j}/\cos\theta_{j}(\mathbf{p} \ \mathbf{fm}, \mathbf{k}), \\ n_{j}\cos\theta_{j}(\mathbf{s} \ \mathbf{fm}, \mathbf{k}), \end{cases}$$
(5)

基底的导纳为

$$\eta_{s} = \begin{cases} n_{s}/\cos\theta_{s}(\mathbf{p} \ \mathbf{fm}_{k}), \\ n_{s}\cos\theta_{s}(\mathbf{s} \ \mathbf{fm}_{k}). \end{cases}$$
(6)

引入下标 m(m = s, p)分别表示 s 偏振和 p 偏振. 令各子层的特征矩阵表示为 $M_{i,m}$ 则有

$$\boldsymbol{M}_{j,m} = \begin{pmatrix} \cos \delta_{j} & \frac{\mathrm{i}}{\eta_{j,m}} \sin \delta_{j} \\ \mathrm{i} \eta_{j,m} \sin \delta_{j} & \cos \delta_{j} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

则各个子层的特征组合矩阵 M_{f,m}为

$$\boldsymbol{M}_{f,m} = \prod_{j=1}^{N} \begin{pmatrix} \cos \delta_{j} & \frac{\mathrm{i}}{\eta_{j,m}} \sin \delta_{j} \\ \mathrm{i} \eta_{j,m} \sin \delta_{j} & \cos \delta_{j} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

基底的特征矩阵为

$$\boldsymbol{M}_{\mathrm{s},m} = \begin{pmatrix} 1 \\ \eta_{\mathrm{s},m} \end{pmatrix}. \tag{9}$$

假设薄膜与基底的组合特征矩阵^[8]为,

$$\boldsymbol{M}_{m} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{B}_{m} \\ \boldsymbol{C}_{m} \end{pmatrix} , \qquad (10)$$

则有

$$\boldsymbol{M}_{m} = \begin{pmatrix} B_{m} \\ C_{m} \end{pmatrix} = \boldsymbol{M}_{j,m} \cdot \boldsymbol{M}_{s,m}$$
 , (11)

组合导纳为

$$Y_m = C_m / B_m . \tag{12}$$

各层的组合 Fresnel 反射系数为

$$F_m = \frac{\eta_{0,m} B_m - C_m}{\eta_{0,m} B_m + C_m}.$$
 (13)

各层的组合 Fresnel 透射系数为

$$t_m = \frac{2\sqrt{\eta_{0,m}\eta_{s,m}}}{\eta_{0,m}B_m + C_m}.$$
 (14)

总反射率为

$$R_m = r_m r_m^* . \tag{15}$$

总透过率为

$$T_m = t_m t_m^* . \qquad (16)$$

反射相移则为

$$\phi_m = \operatorname{atan} \left\{ \frac{i \eta_{0,m} (C_m B_m^* - B_m C_m^*)}{\eta_{0,m}^2 B_m B_m^* - C_m C_m^*} \right\}. \quad (17)$$

相位差为

$$\Delta_{\text{phase}} = \phi_{s} - \phi_{p}. \qquad (18)$$

应用上述模型可近似计算理想条件下渐变折射 率薄膜的光学性能,并对渐变折射率薄膜的制备提 供一定的理论依据.

3. 渐变折射率薄膜的分层评价

在利用分层介质理论模型分析渐变折射率薄膜 的光学性能时,关键是要在折射率变化剧烈的地方, 将膜层多分几层,以使其光学特性与实际值尽量接 近.为简单考虑,通常将渐变折射率薄膜细分成具有 等几何厚度的多层均匀薄膜.

假设当渐变折射率薄膜的细分层数为 *N* 时,在 波长 λ 处的透射率为 $T_{\lambda}(N)$;当细分为 *N*+1 层时, 其在波长 λ 处的透射率为 $T_{\lambda}(N+1)$.随着 *N* 的逐 渐增大, $T_{\lambda}(N)$ 的值将逐渐接近于 $T_{\lambda}(N+1)$ 的值. 当 $T_{\lambda}(N+1) - T_{\lambda}(N) \le f$ 时,可以认为此时的 *N* 为最佳分层数目. f 为一极小值,它的大小直接决 定了 *N* 的取值大小,进而决定了薄膜光学特性的误

56 卷

差大小.

在实际应用过程中,可以用计算机来分析 N 取 值的大小,其分析原理如图 2.由于人们通常是关心 某一个波长或几个波长处的薄膜光学特性,因此只 对不同波长处的光学特性进行评价分析即可.输入 所关心的波长 λ , *N* 的初始值 N_0 ,评价函数或者评价值 *f* ,将分别细分为 *N* 层和 *N* + 1 层时的透射率进行对比,若二者的绝对值之差小于或者等于评价值 , 此时的 *N* 就是所要求得的最佳分层数目,若仍然大于评价值 ,则将 *N* 的取值加一之后,再次循环运算 ,



图 2 渐变折射率薄膜分层优化原理图

直到得到最佳 N 值为止.

4.举例分析与讨论

下面以折射率线性变化的渐变折射率薄膜为例 来说明如何优化其分层数目.假设基底的折射率 n_s 为 1.52 周围介质的折射率 n_0 为 1.0 ,渐变折射率 薄膜的折射率由 $n_1 = 1.92$ 随着厚度的增加逐渐递 减为 $n_2 = 1.46$ 如图 1.

当薄膜的厚度 h 为 900 nm 时,在波长 $\lambda = 997$ nm 处透射率取得极小值,取 f = 0.0001,由计算机优化分析可以得到, N 值为 297.同理可以得到 h 分别为 800 nm,700 nm,600 nm 和 500 nm 时的对应级数参考波长依次为 886 nm,775 nm,664 nm 和 554 nm, 见图 3.当 f = 0.0001时,计算机优化得到的最佳分层数目分别为 223,79,126 和 140.具体数值详见表 1.



图 3 不同厚度的线性渐变折射率薄膜透射光谱示意图

表 1 不同厚度下的线性变化渐变折射率薄膜 的分层数 $D(f_{-0}, 0, 0001)$

$1373 \times 10^{-10} \times 10$					
h/nm	500	600	700	800	900
λ/nm	554	664	775	886	997
N	140	126	79	233	297

对表 1 的数据进行分析可以发现,在相同的折 射率变化范围内,线性变化渐变折射率薄膜的优化 分层数目随着薄膜厚度的增加先减小后增大.这说 明渐变折射率薄膜的细分层数既和薄膜的厚度有关 又和薄膜的折射率变化快慢有关.在相同的折射率 变化范围内,当渐变折射率薄膜的厚度小于某一数 值时,薄膜的细分层数主要与薄膜折射率的变化快 慢有关,薄膜的厚度越小,薄膜的折射率变化越剧 烈,需要的细分层数越多;当渐变折射率薄膜的厚度 大于某一数值时,随着薄膜厚度的增加,薄膜的折射 率变化逐渐缓慢,此时薄膜的细分层数主要与薄膜 的厚度有关,薄膜的厚度越大,需要的细分层数越 多.因此在对渐变折射率薄膜进行分层数目评价时 要综合考虑到薄膜的厚度和薄膜的折射率变化快慢 两个方面的因素.

5.结 论

渐变折射率薄膜的光学特性计算与制备可以通 过将其细分成多层均匀薄膜来近似实现.它的分层 数目可以按照以下方法得到:首先分析得到所关注 的光学特性处的波长,然后将薄膜分别分为 N 层和 N+1 层时的光学特性进行对比,当其差值小于或等 于某一评价值时,即可认为此时的 N 值为最佳分层 数目,若其差值仍大于这一评价值,则将 N 值递加, 直到获得其差值小于这一评价值为止.

在取相同的折射率变化范围和相同的评价值 时,渐变折射率薄膜的分层数目与薄膜的厚度和薄 膜的折射率变化快慢有关:当薄膜的厚度小于某一 个值时,其分层数目主要受其折射率变化快慢影响, 薄膜的厚度越薄,其折射率变化越剧烈,需要的细分 层数越多;当薄膜的厚度大于某一个值时,其分层数 目主要受其厚度的影响,厚度越大,需要细分的层数 就越多.

- [1] Jacobsson J R 1993 SPIE 2046 2
- [2] Bartzsch H , Lange S , Frach P et al 2004 Surf. Coat . Technol . 180-181 616
- [3] Shen Z C, Wang Y J, Fan Z X *et al* 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 295 (in Chinese)[沈自才、王英剑、范正修等 2005 物理学报 **54** 295]
- [4] Shen Z C, Shao J D, Wang Y J et al 2005 Acta Phys. Sin. 54 3069 (in Chinese)[沈自才、邵建达、王英剑等 2005 物理学报 54 3069]
- [5] Born M , Wolf E 1999 Principle of optics (7th expanded edition)
 (London : Cambridge University) p62
- [6] Shen J, Liu SH, Shen ZC *et al* 2005 Acta Phys. Sin. **54** 4920(in Chinese)[沈 健、刘守华、沈自才等 2005 物理学报 **54** 4920]
- [7] Hass G 1975 physics of thin films (Academic press, New York) Vol.8, 79
- [8] Macleod H A 2001 Thin-film optical filters (third edition) (London : IOP) p49

Discussion on the stratified merit of graded index coatings

Shen Zi-Cai^{1,2}) Shen Jian^{1,2}) Liu Shi-Jie^{1,2}) Kong Wei-Jin^{1,2}) Shao Jian-Da¹) Fan Zheng-Xiu¹)

1) (Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics , Shanghai 201800 , China)

2) (Graduate School of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

(Received 7 July 2006; revised manuscript received 16 August 2006)

Abstract

Optical property analysis and preparation of graded index coatings can be approximated by subdividing it into a stack of many homogeneous layers. In this paper, layered medium theory is introduced firstly, which clarifies how to subdivide graded index coatings into homogeneous layers. Then a stratification merit method to get optimal layered number is put forward. At last, linear graded index coatings is taken as an example to illustrate how to obtain the optimal layer number of graded index coatings. Our discussion shows that the optimal layer number of graded index coatings depends on the coating thickness and changing speed of refractive index. When refractive index changes in given range, the layer number of graded index coatings decreases firstly and then increases with the increasing coating thickness.

Keywords : graded index , layered medium theory , stratification merit PACC : 2100M , 6855 , 8115G