

材料与器件

红外增透保护膜系软件设计及应用*

宋建全, 刘正堂, 耿东生, 郑修麟

(西北工业大学 材料科学与工程学院 陕西 西安 710072)

摘要: 根据制备红外增透保护膜系需要, 编制了一个红外增透保护膜系软件。该软件可以设计、计算多层红外均匀增透保护膜系和非均匀增透保护膜系, 更有强大多层膜系结构分析功能, 不仅可以对设计的膜系进行综合评价, 而且能对制备的膜系结构进行分析。实验结果表明, 该软件对膜系设计和为制备工艺的改进能提供良好的指导。

关键词: 红外; 增透保护膜系; 膜系设计; 膜系结构

中图分类号: TN213 文献标识码: A 文章编号: 1001-8891(2001)

1 引言

ZnS、ZnSe 和 Ge 是目前广泛用于 $8 \sim 11.5 \mu\text{m}$ 波段的红外窗口和头罩材料。但随着飞行器(如高速、全天候的战斗机、导弹等)的速度越来越高, 服役条件越来越苛刻, 这些窗口和头罩材料的性能已经不能满足使用要求。近年来发展了多种耐久性薄膜材料, 如类金刚石(DLC)^[1]、碳化锆($\text{Ge}_x\text{C}_{1-x}$)^[2]、磷化硼(BP)、磷化镓(GaP)^[3]和金刚石(Diamond)^[4]等, 其中金刚石是在极端服役条件下最有前景的材料。由它们构成的复合增透保护膜系可以给 ZnS、ZnSe 和 Ge 的窗口、头罩提供增透和保护功能。

本文就是根据红外窗口和头罩上制备增透保护膜系的需要, 从薄膜光学的干涉矩阵出发, 利用计算机进行膜系自动设计。增透保护膜系一般都采用化学气相沉积法(CVD)和物理气相沉积法(PVD)制备, 这些薄膜的折射率一般都在一个范围内变化, 在制备过程中工艺参数的变化都会导致薄膜的折射率以及沉积速率的波动, 从而导致制备膜系结构偏离理想的设计膜系结构。一个较好设计的膜系结构应该是当结构参数在一定范围内变化时, 仍有满足使用要求的光谱性能, 所以要求膜系设计软件能够对膜系结构的偏差或者敏感因子进行分析; 由于制备工艺的复杂性, 往往不能按预期要求一次制备出符合光谱性能要求的多层增透保护膜系, 因此要求膜系软件能对制备的不合格膜系进行分析, 从而对制备工艺进行调整。

2 膜系软件的基本原理

根据薄膜光学原理, 对一个由 k 层薄膜组成的多

层膜系, 膜系的干涉矩阵^[5](特征矩阵)为:

$$M_k = \left\{ \prod_{r=1}^k \begin{bmatrix} \cos\delta_r & j\sin\delta_r/n_r \\ jn_r\sin\delta_r & \cos\delta_r \end{bmatrix} \right\} = \begin{bmatrix} A_k & jB_k \\ jC_k & D_k \end{bmatrix} \quad (1)$$

其中: $\delta_r = 2\pi n_r d_r \cos\theta_r/\lambda$, 称为第 r 层膜的位相厚度。

入射和出射媒质的折射率分别为 n_0 、 n_s , 则反射率 R 为:

$$R = \frac{(n_0 A_k - n_s D_k)^2 + (n_0 n_s B_k - C_k)^2}{(n_0 A_k + n_s D_k)^2 + (n_0 n_s B_k + C_k)^2} \quad (2)$$

如果不考虑膜系的吸收损失, 则透射率 T 为:

$$T = \frac{4n_0 n_s}{(n_0 A_k + n_s D_k)^2 + (n_0 n_s B_k + C_k)^2} \quad (3)$$

增透保护膜系设计的就是要在膜系各膜层所允许的折射率和厚度范围内, 找出在某个波段范围内(如 $8 \sim 11.5 \mu\text{m}$)平均透过率为极大值的膜系结构; 而对于膜系透射光谱的计算, 把一个已知膜系结构带入(3)式就可以求出; 对于设计出膜系的偏差对透射光谱的影响, 也可以将发生偏差后的膜系结构带入(3)式求出; 膜系结构的敏感程度只要将(3)式对膜系结构参数求偏导数就可以分析; 至于已知光谱曲线分析膜系结构参数, 实质就是膜系设计的一个可逆过程。

2.1 膜系设计与计算

设计某个波段范围内($8 \sim 11.5 \mu\text{m}$)的增透保护膜系, 实际就是求平均透射率在该波段范围内的极大值。对一个单层膜, 膜层结构参数包括折射率、消光系数和厚度 3 个参数; 对一个 n 层膜系, 其膜系结构参数为 $3n$ 个。膜系自动设计的方法有很多种, 这些方法大都从一个初始的膜系结构出发, 采用数据优化方法, 找到最佳的膜系结构, 但优化的膜系结构往往与所取的初始结构有关, 而且容易陷于局部极小值^[6]。“彻底搜索

* 收稿日期 2000-12-15; 修订日期 2000-02-21 航空基础科学基金(编号 98G53104) 陕西省自然科学基金(编号 99C29) 资助项目
万方数据

法”和“蒙特卡罗法”不涉及膜系初始结构,可以实现膜系结构参数的全局优化,而且也容易通过计算机编程实现。“彻底搜索法”就是在膜系结构参数所构成的 $3n$ 维空间中,根据各个结构参数的步长将该空间划分为无穷个空间格点,每一个空间格点对应着一个膜系结构参数,计算每一个空间格点的光谱曲线,就可以找出平均透过率最高的空间格点。该方法的缺点是随着膜系中膜层数目的增加,计算量会呈几何级数增加。但对红外增透膜系而言,由于膜系的层数一般小于 4 层,而且膜层的折射率和厚度都在一个有限的范围内变化,所以这种方法还是可取的。“蒙特卡罗法”是每次计算机产生的一组随机数,将这组随机数经过变换对应膜系结构的一组参数,再计算膜系的光谱曲线,最后将平均透过率最高的光谱曲线所对应的膜系结构参数保留下来作为膜系设计的结果。该方法的优点是很容易实现多层增透保护膜系的设计。

由于增透保护薄膜材料中 Ge_xC_{1-x} 具有在较大范围内折射率可变的特点,因此在制备过程中很容易制备 Ge_xC_{1-x} 非均匀膜系,非均匀膜系具有宽波段增透的优点。对非均匀膜系的处理,可以将非均匀膜层按光学厚度划分为 m 层,就可以按照 m 层膜系进行处理,当 m 大于一定值时^[7],按(3)式计算所得到的透射光谱曲线基本不发生改变。

对一个已知结构参数的膜系,则可以直接根据(3)式计算出它的光谱曲线。对于非均匀膜,与膜系设计中一样,将它处理成 m 层均匀膜系,计算它的光谱曲线。

2.2 膜系结构分析

2.2.1 膜系结构敏感因子分析

膜系分析的目的之一就是要对一个设计出的膜系进行评价,由于制备多层增透保护膜系工艺的复杂性,制备出膜系总会与设计膜系结构有一定的偏差,因此需要知道膜系结构诸多参数中,那一个的偏差对膜系光谱曲线影响最大;由(3)式对膜系结构的每一个结构参数求偏导数^[8],比较每个结构参数的偏导数随波数的变化,就可以知道哪一个结构参数的变化以及它的变化方向对膜系光谱曲线影响最大,从而在制备过程中在工艺上采取一定措施,提高它的控制精度,减小它的变化对膜系透射光谱的影响。

2.2.2 膜系光谱曲线偏差分析

除了在膜系结构敏感因子分析中知道对膜系透射光谱影响最大的结构参数外,也需要知道膜系所有结构参数在哪个范围内偏差时,光谱曲线仍能够满足使用要求,因为实际制备出来的膜系的结构参数几乎都会或多或少偏离理想的设计值。如果说膜系设计是在

膜系结构空间的网格点搜索最佳结构参数的话,那么这里的偏差分析,就是在设计膜系的理想结构偏差所构成的膜系结构空间的网格点内搜索平均透过率最低的光谱曲线所对应的膜系结构参数。并且,在偏差分析过程中,会发现某些结构参数的正负偏差对膜系光谱曲线的影响不一致(这也可以在前面敏感因子分析中所求偏导数体现出来),所以在制备过程中可以采取适当措施控制某些结构参数的偏差方向来降低偏差对膜系透射光谱的不利影响。

2.2.3 膜系结构参数

在制备增透保护膜系中,一般不容易一次制出满足透射光谱曲线要求的膜系结构,因此需要对光谱曲线不满足要求的膜系能够分析出它的结构参数,以便改进工艺参数。与膜系设计是在膜系结构空间的网格点搜索最佳结构参数不同的是,膜系结构参数分析则是在膜系结构空间的网格点搜索与已知透射光谱曲线最匹配的膜系结构参数。

3 软件的编制与应用

根据膜系软件的原理,用面向对象的可视化编程语言 delphi 编写了红外增透保护膜系软件。为简化膜系软件的编写,在软件的膜系设计部分没有考虑基片、膜系的吸收与色散;在膜系结构分析部分则根据实际测试的透射光谱曲线作了不同程度的考虑。以下是该软件用于增透保护膜系设计与制备过程中的两个实例。

3.1 膜系设计

由于 DLC、 Ge_xC_{1-x} 和 GaP 等都是良好的耐久性薄膜,故在设计中选用它们进行增透保护膜系的设计,通常, DLC 膜用作膜系的最外层。图 1 是在 ZnS 基片上设计的 DLC/GaP 双层增透(用于 $8 \sim 11.5 \mu m$ 波段增透)

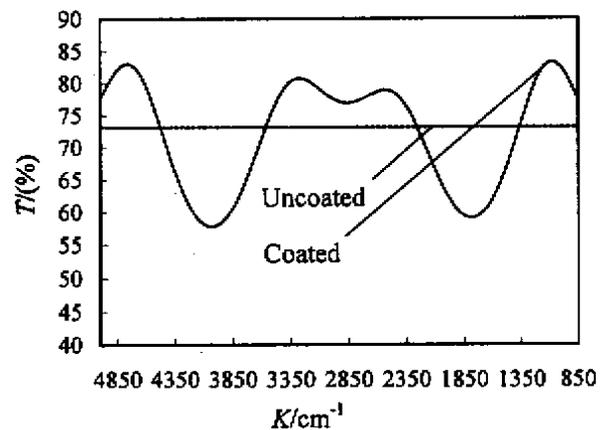


图 1 ZnS 基片上设计的 DL/GaP 双层增透保护膜系的透射光谱曲线

Fig. 1 Spectral transmittance of ZnS substrate with designed DLC/GaP as antireflective and protective films

保护膜系的透射光谱曲线,图2是在 ZnS 基片上设计的厚度分别为 1.0 μm、12.0 μm 的 Ge_xC_{1-x} 非均匀增透保护膜系透射光谱曲线。从图1与图2比较可以看出,非均匀增透膜系可以实现宽波段增透。

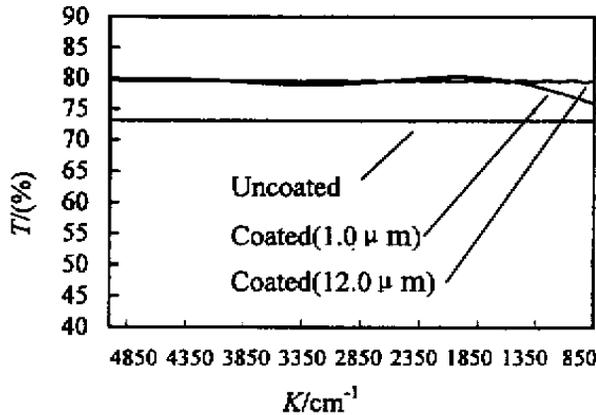


图2 ZnS基片上设计的 Ge_xC_{1-x}非均匀增透保护膜系的透射光谱曲线

Fig.2 Spectral transmittance of ZnS substrate with designed Ge_xC_{1-x} as inhomogeneous antireflective and protective films

3.2 膜系结构分析

图3~5是膜系软件中膜系结构分析功能指导一个实际镀膜的过程。膜系软件设计的 ZnS 基片上双层增透保护膜系(用于 8~11.5 μm 波段增透)为 DLC/GaP/ZnS,其对应的膜系结构参数(即每一层薄膜的折射率与厚度)为:2.00,1270 nm(DLC)/2.90,610 nm(GaP)/ZnS。图3是在基片上采用磁控溅射法制备第一层 GaP 膜后的透射光谱曲线,膜系结构分析该膜层实际结构参数为 2.91,687 nm。根据制备第一层膜的实际结构参数重新设计的双层膜系结构为:2.00,1230 nm/2.91,687 nm/ZnS。图4在基片采用磁控反应溅射法制备第二层 DLC 膜后的透射光谱曲线,它并没有在预期的 8~11.5 μm 波段(1250~870 cm⁻¹)出现增透,膜系结构分析实际制备的膜系结构参数为:1.88,876 nm/2.91,687 nm/ZnS。根据制备的第二层膜的实际结构参数重新设计的双层膜系结构参数为:1.88,1300 nm/2.91,687 nm/ZnS。图5是最后制备出的双层增透膜系透射光谱曲线,从图中可以看出,它满足了在 8~11.5 μm 波段(1250~870 cm⁻¹)增透的要求。

4 结论

从膜系干涉矩阵出发,编制的膜系软件用“彻底搜索法”和“蒙特卡罗法”实现增透保护膜系的设计,具有的膜系分析功能不仅能对设计的膜系进行评价,而且对指导实际镀膜有重要意义。在实际镀膜过程中,在万方数据

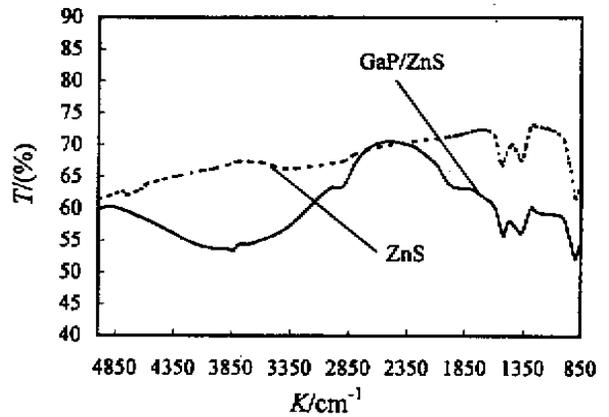


图3 ZnS基片上制备第一层膜后的透射光谱曲线

Fig.3 Spectral transmittance of ZnS substrate coated with GaP films

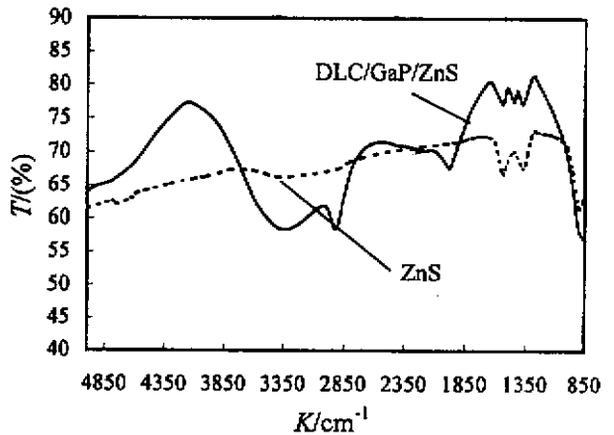


图4 ZnS基片上制备第二层膜后的透射光谱曲线

Fig.4 Spectral transmittance of ZnS substrate coated with DLC/GaP films

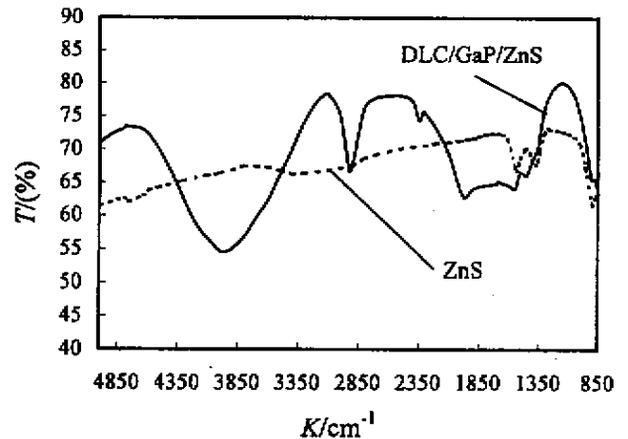


图5 ZnS基片上第二层膜补镀后的透射光谱曲线

Fig.5 Spectral transmittance of ZnS substrate coated with DLC/GaP films

膜系软件中膜系结构分析功能的指导下,成功制备出膜系软件设计出的增透保护膜系。(下转第7页)

参 考 文 献

- [1] Swec D. M. , Mirtich M. J. Diamonlike Carbon Protective Coatings for Optical Windows[C],*SPIE*. 1989. **1112** :162 ~ 173.
- [2] LIU Zheng-Tang , ZHU Jing-Zhi , XU Nian-Kan , et al. Structure and Properties of Germanium Carbide Films Prepared by RF Reactive Sputtering in Ar/CH₄[J], *J. Appl. Phys.* , 1997, **36(6A)** : 3625 ~ 3628.
- [3] Gibson D. R. , Waddell E. M. , Wilson A. D. et al. Ultradurable phoshide-based antireflection coatings for sand and rain erosion protection[J],*Opt Eng.* , 1994. **33(3)** 957 ~ 966.
- [4] Korenstein R. , Goldman L. , Hallock R. , et al. Diamond coated ZnS for improved erosion restistance[C],*SPIE*. 1997. **3060** :181 ~ 195.
- [5] 康晋发 , 顾培夫. 薄膜光学与技术[M]. 北京 : 机械工业出版社 , 1989 :18 ~ 24.
- [6] 林永昌 , 卢维强. 光学薄膜原理[M]. 北京 : 国防工业出版社 , 1990 :2171 ~ 237.
- [7] 尹树百. 薄膜光学—理论与实践[M]. 北京 : 科学出版社 , 1987 :295 ~ 296.
- [8] 范志刚 , 张伟 , 李以贵等. 激光技术[J], 1996. **20(4)** 236 ~ 240.

作者简介： 宋建全 ,男 ,1973 年生 ,主要从事功能薄膜及其相关技术的研究 ,现为西北工业大学博士生。

Design and Application of Antireflective and Protective Films Software

SONG Jian-quan , LIU Zheng-tang , GENG Dong-sheng , ZHENG Xiu-lin

(*College of Materials Science and Engineering , Northwestern Polytechnical University , Xi 'an 710072 , China*)

Abstract : In this paper , an optical software which can be satisfied the requirements in application on antireflective and protective films in infrared waveband are programmed. The basic functions of this software are design and calculation of the homogeneous and inhomogeneous antireflective and protective films. And it has powerful function is films structure analysis. It not only can evaluate the structure of design films , but also can analyze the structure of deposited films. Experiments results show that the optical software can give some suggestion in films design and preparation.

Key words : infrared ; antireflective and protective films ; films design ; films structure