

光学表面功率谱密度的表征

张磊^{1,2}, 程鑫彬^{1,2}, 张锦龙^{1,2}, 王占山^{1,2}

- (1. 同济大学先进微结构材料教育部重点实验室, 上海 200092;
2. 同济大学物理科学与工程学院精密光学工程技术研究所, 上海 200092)

摘要: 以硅基板镀制单层 HfO_2 薄膜前后的表面微观形貌的变化为例, 开展了光学表面功率谱密度的计算及表征研究。首先给出了一维功率谱密度($\text{PSD}_{1\text{D}}$)、二维功率谱密度($\text{PSD}_{2\text{D}}$)以及各向同性功率谱密度(PSD_{ISO})的计算方法和具体步骤。然后使用原子力显微镜测量了硅基板镀膜前后在 $1\ \mu\text{m}\times 1\ \mu\text{m}$ 、 $5\ \mu\text{m}\times 5\ \mu\text{m}$ 、 $10\ \mu\text{m}\times 10\ \mu\text{m}$ 、 $20\ \mu\text{m}\times 20\ \mu\text{m}$ 四种扫描尺寸下的表面轮廓。在此基础上使用 MATLAB 编程计算得到这四种扫描尺寸下的 PSD_{ISO} , 对这些 PSD_{ISO} 使用几何平均算法拼接得到具有足够大频率范围的 $\text{PSD}_{\text{ISO-Combined}}$ 。结果显示, 硅基板镀膜前后的 $\text{PSD}_{\text{ISO-Combined}}$ 在低频段基本相同, 中高频段出现了明显差异。分析指出这是由镀膜后表面柱状晶体结构引起的。提出了对 PSD_{ISO} 在频域上积分得到表面均方根粗糙度 σ_{ISO} , 再同由定义式计算得到的 σ_{STD} 作对比的方法。计算得到的 σ_{ISO} 与 σ_{STD} 基本相同, 验证了 PSD_{ISO} 计算方法的准确性。

关键词: 表面微观形貌; 功率谱密度; 原子力显微镜

中图分类号: O436 **文献标志码:** A **文章编号:** 1007-2276(2015)12-3707-06

Characterization of power spectral density of optical surface

Zhang Lei^{1,2}, Cheng Xinbin^{1,2}, Zhang Jinlong^{1,2}, Wang Zhanshan^{1,2}

- (1. MOE Key Laboratory of Advanced Micro-Structured Materials, Shanghai 200092, China;
2. Institute of Precision Optical Engineering, School of Physics Science and Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, China)

Abstract: Using the Si substrate and the HfO_2 single layer as the examples, the power spectral density (PSD) of the optical surface was calculated and characterized. First, the method that calculates the 1D power spectral density ($\text{PSD}_{1\text{D}}$), 2D power spectral density ($\text{PSD}_{2\text{D}}$) and isotropic power spectral density (PSD_{ISO}) was introduced. Then, the surface morphologies of the Si substrate and the HfO_2 single layer were measured using atomic force microscopy with four scan areas, for example, $1\ \mu\text{m}\times 1\ \mu\text{m}$, $5\ \mu\text{m}\times 5\ \mu\text{m}$, $10\ \mu\text{m}\times 10\ \mu\text{m}$, $20\ \mu\text{m}\times 20\ \mu\text{m}$. Using a MATLAB program, the PSD_{ISO} s of the different scan area were calculated. And the $\text{PSD}_{\text{ISO-Combined}}$ over a larger spatial frequency range was given using the geometric mean of these PSD_{ISO} s. The result shows that the $\text{PSD}_{\text{ISO-Combined}}$ of Si substrate before and after HfO_2 coating were similar for the low spatial frequency region but quite different for the middle and high

收稿日期: 2015-04-10; 修订日期: 2015-05-13

基金项目: 国家自然科学基金(61522506, 61235011, 51475335); 国家重大科研装备研制项目(ZDYZ2013-2);

国家重大科学仪器设备开发专项(2014YQ090709)

作者简介: 张磊(1983-), 男, 硕士生, 主要从事光学表面散射研究。Email: 7suceden@tongji.edu.cn

导师简介: 程鑫彬(1980-), 男, 副教授, 主要从事光学薄膜和光学计量研究。Email: chengxb@tongji.edu.cn

frequency region. The poly-crystallized microstructure of the HfO_2 coating is the main reason for the observed PSD difference between the Si substrate and the HfO_2 coating. The σ_{ISO} and σ_{STD} were calculated and compared. The results are quite similar, which proves the correctness of the proposed method for the PSD calculation.

Key words: surface morphology; power spectral density; atomic force microscopy

0 引言

表面微观形貌通常使用均方根粗糙度(σ)进行表征,但是 σ 仅包含表面垂直方向的高度信息,没有重要的横向空间频率分布,这导致某些微观形貌明显不同的表面却有着相同的 σ ^[1];不同测量设备之间或者同一设备、不同测量条件下,得到的 σ 都有着相应的空间频率范围限制,无法全面表征表面微观形貌^[2]。表面功率谱密度(Power Spectral Density, PSD)不仅包含表面垂直方向的高度信息,同时包含重要的横向空间频率分布。ISO10110 标准中提出使用 PSD 评价光学元件质量的方法^[3];NIF 的光学元件波面误差评定中也同样使用 PSD 限定表面波纹度和光洁度^[4];在光学散射研究中,表面 PSD 与角分辨散射(Angular Resolved Scattering, ARS)之间存在函数关系^[5],总积分散射(Total Integrated Scattering, TIS)中的相关粗糙度也需要 PSD 在一定频率范围内积分得到^[6]。此外,PSD 最大的优势在于能把不同测量设备或者同一设备、不同测量条件下得到的结果选择适当的平均算法拼接起来,得到具有足够大频率范围的 PSD^[7-8],全面表征表面微观形貌,满足上述应用要求。

参考文献[9-10]介绍了功率谱密度的定义与计算方法,但未给出具体步骤。文中首先给出一维功率谱密度($\text{PSD}_{1\text{D}}$)、二维功率谱密度($\text{PSD}_{2\text{D}}$)以及各向同性功率谱密度(PSD_{ISO})的计算方法以及具体步骤,然后在这个基础上使用原子力显微镜分别测量得到镀膜前后硅基板在 $1\ \mu\text{m}\times 1\ \mu\text{m}$ 、 $5\ \mu\text{m}\times 5\ \mu\text{m}$ 、 $10\ \mu\text{m}\times 10\ \mu\text{m}$ 、 $20\ \mu\text{m}\times 20\ \mu\text{m}$ 四种扫描尺寸下的表面轮廓,以及 MATLAB 编程计算得到这四种扫描尺寸下的 PSD_{ISO} ,最后对这些 PSD_{ISO} 使用几何平均算法拼接得到具有足够大频率范围的 $\text{PSD}_{\text{ISO-Combined}}$ 。通过对比

硅基板镀膜前后的 $\text{PSD}_{\text{ISO-Combined}}$,并结合其二维和三维形貌图分析了 $\text{PSD}_{\text{ISO-Combined}}$ 发生明显改变的原因;对 PSD_{ISO} 在频域上积分得到 σ_{ISO} ,与定义式计算得到的 σ_{STD} 作对比,分析了产生差异的原因,为进一步改进 PSD_{ISO} 计算方法提供了思路。

1 PSD 计算方法

功率谱密度的实质是表面轮廓高度的傅里叶变换,需要强调的是,表面轮廓高度 $z(x,y)$ ($0\leq x,y\leq L$, L 为轮廓长度)需要通过最小二乘法修正,去除表面偏移、倾斜和曲率,具体方法可详见参考文献[11]。此外, $z(x,y)$ 是分立值,为 $m\times n=N^2$ 阵列,间隔为 $d=L/N$ 。

1.1 $\text{PSD}_{1\text{D}}$

$\text{PSD}_{1\text{D}}$ 是对表面轮廓逐行做一维傅里叶变换,最后再求取所有行的平均得到的,第 m 行的计算公式为:

$$\text{PSD}_{1\text{D}m}(k_x) = \frac{d}{N} \left| \sum_{n=0}^{N-1} e^{-2\pi i \frac{k_x n}{N}} z_m(n) w(n) \right|^2, \quad k_x=0, 1, \dots, N-1, f_x = \frac{k_x}{Nd} \quad (1)$$

由公式(1)得到 $\text{PSD}_{1\text{D}m}$ 序列,傅里叶变换的性质决定了该序列以 $k_x=N/2$ 为中心对称。考虑到奈奎斯特定理^[12]: $1/L\leq f_x\leq 1/2d$, $1\leq k_x\leq N/2$,可以将该序列按照图 1(图中灰阶代表 PSD 值的大小)所示的方法

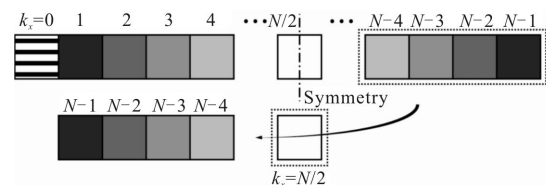


图 1 $\text{PSD}_{1\text{D}}$ 计算方法示意图

Fig.1 $\text{PSD}_{1\text{D}}$ arithmetic diagram

先去掉 $k_x=0$ 项,再将右边部分移动到左边对应项求和,这样序列就只包含 $k_x=1, 2, \dots, N/2$ 项,其中 $k_x=$

$N/2$ 重复一次,但由于 $PSD_{1Dm}(N/2)$ 非常小,影响可忽略不计。最后对求得的 N 行序列做平均:

$$PSD_{1D}(k_x) = \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N PSD_{1Dm} \quad (2)$$

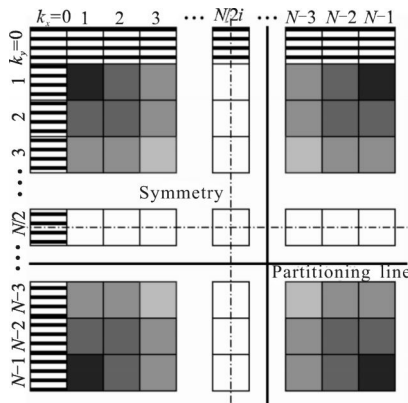
1.2 PSD_{2D}

PSD_{2D} 是对表面轮廓直接做二维傅里叶变换得到的,计算公式为:

$$PSD_{2D}(k_x, k_y) = \frac{d^2}{N^2} \left| \sum_{m=0}^{N-1} \sum_{n=0}^{N-1} e^{-2\pi i \left(\frac{k_x n + k_y m}{N} \right)} z(m, n) w(m, n) \right|^2$$

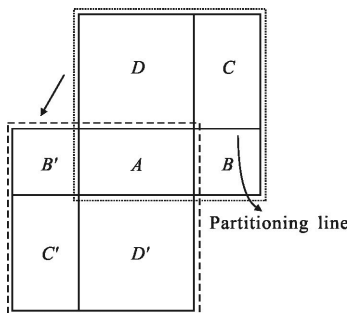
$$k_x, k_y = 0, 1, \dots, N-1, f_x = f_y = \frac{k_x}{Nd} = \frac{k_y}{Nd} \quad (3)$$

同计算 PSD_{1D} 的方法类似,将得到的 PSD_{2D} 阵列按照图 2(a)所示的方法先去掉 $k_x=0$ 列, $k_y=0$ 行,由分割线将阵列分为四个区域,再按照图 2(b)所示的方式移动相应区域,最后得到图 2(c)所示阵列,其中 $k_x=N/2$ 列, $k_y=-N/2$ 行, $k_x=N/2, k_y=-N/2$ 项各重复一次。



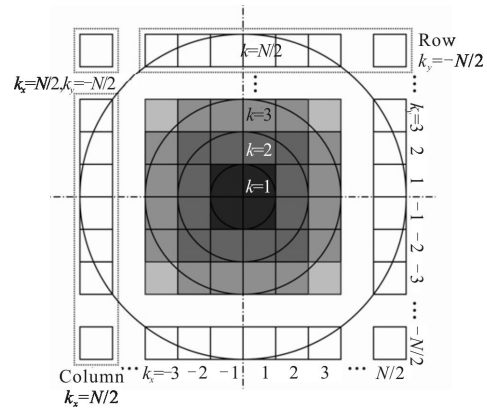
(a) 第一步

(a) First step



(b) 第二步

(b) Second Step



(c) 第三步

(c) Last step

图 2 PSD_{2D} 计算方法示意图

Fig.2 PSD_{2D} arithmetic diagrams

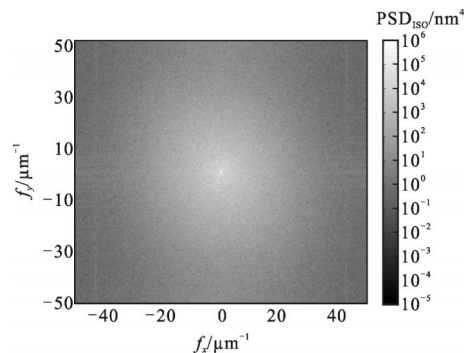
1.3 PSD_{ISO}

对于各向同性的表面,理论上得到的 PSD_{2D} 阵列应该是圆对称的^[8],但由于测量设备的误差或扫描区域选择不佳,并不总能保证这一点,产生测量误差。这种情况下可以用 PSD_{ISO} 代替 PSD_{2D} ,由于在计算 PSD_{ISO} 的过程中会用到圆对称这一预知条件,从而减小测量误差,此外由于 PSD_{ISO} 是一维的,形式上也较为简单,方便使用。

计算 PSD_{ISO} 的具体步骤如下。首先将 PSD_{2D} 从直角坐标系变换到极坐标系,然后以规则

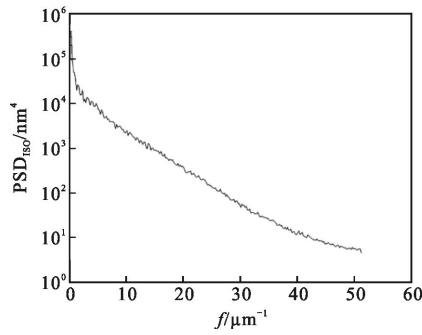
$$k \leq \sqrt{k_x^2 + k_y^2} < k+1, k=1, 2, \dots, \frac{N}{2}, f = \frac{k}{Nd} \quad (4)$$

取环带(图 2(c)),再对每一环带做平均,即得到 $PSD_{ISO}(k)$ 。图 3 为典型的各向同性表面的 PSD_{2D} 和 PSD_{ISO} ,图 3(a)中很多值非常小的噪点在图 3(b)中得到消除。



(a) PSD_{2D} 图像

(a) PSD_{2D} image



(b) PSD_{ISO} 曲线
(b) PSD_{ISO} Curve

图 3 PSD_{2D} 图像和 PSD_{ISO} 曲线
Fig.3 PSD_{2D} image and PSD_{ISO} curve

由于在计算 PSD_{ISO} 的过程中涉及到窗口函数及环带的选择等,且这些又较为复杂,需要一种方法判断计算得到的 PSD_{ISO} 的准确性。提出了对 PSD_{ISO} 在频域上积分得到 σ_{ISO} , 与由定义式计算得到的 σ_{STD} 作对比的方法。 σ_{ISO} 和 σ_{STD} 的计算公式分别为:

$$\sigma_{ISO} = \frac{1}{L} \sqrt{2\pi \sum_{k=1}^{N/2} PSD_{ISO}(k)k} \quad (5)$$

$$\sigma_{STD} = \frac{1}{N} \sqrt{\sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N z^2(m,n)} \quad (6)$$

2 硅基板镀膜前后的 PSD 计算与表征

结合原子力显微镜和上述计算方法表征了硅片和硅片上镀制 HfO₂ 薄膜的 PSD 特性。使用 Bruker-Dimensional Edge 原子力显微镜测量了硅基板 1 μm×1 μm、5 μm×5 μm、10 μm×10 μm、20 μm×20 μm 四种扫描尺寸下的表面轮廓(如图 4 所示), 后使用离子束辅助沉积(Ion Assisted Deposition, IAD)工艺在基板上镀制单层 HfO₂ 薄膜^[13], 再在同样的条件下测量得到镀膜后的表面轮廓(如图 5 所示)。图 6 为 1 μm×1 μm 下镀膜前后的表面三维轮廓。

使用上文所述的方法计算得到镀膜前后的 PSD_{ISO}, 选择几何平均拼接算法:

$$PSD_{ISO-Combined}(k) = \left[\prod_{i=1}^N PSD_{ISO_i}(k) \right]^{\frac{1}{N}} \quad (7)$$

选择几何平均而不是传统的算术平均的原因是: 当 PSD_{ISO_i} 之间的大小差异超过一个数量级时, 由几何平均得到的结果更接近最小值, 有助于提高高频分辨率^[8]。图 7 为镀膜前后 PSD_{ISO} 以及 PSD_{ISO-Combined}, 两

者的 PSD_{ISO-Combined} 比较如图 8 所示。

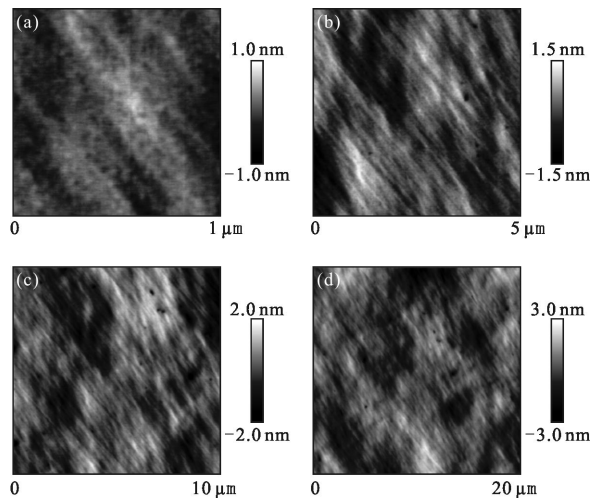


图 4 镀膜前原子力二维形貌图

Fig.4 AFM 2D images before coating

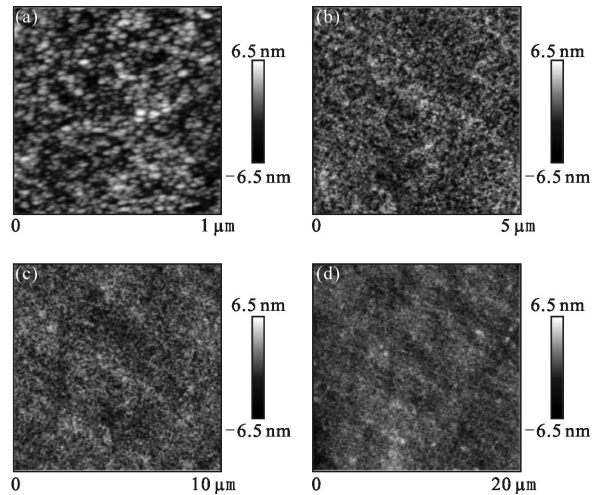
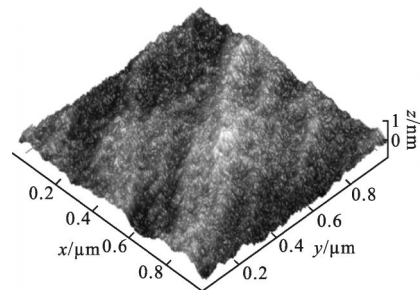


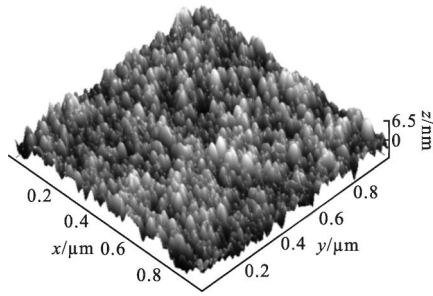
图 5 镀膜后原子力二维形貌图

Fig.5 AFM 2D images after coating



(a) 镀膜前

(a) Before coating

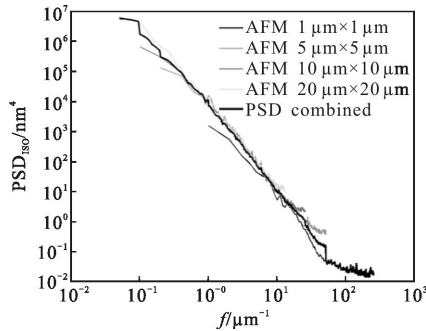


(b) 镀膜后

(b) After coating

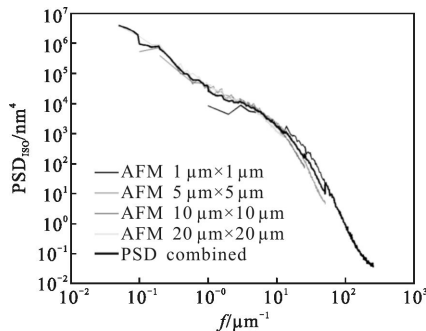
图 6 原子力 $1\ \mu\text{m}\times 1\ \mu\text{m}$ 三维形貌图

Fig.6 AFM 3D images over $1\ \mu\text{m}\times 1\ \mu\text{m}$



(a) 镀膜前

(a) Before coating



(b) 镀膜后

(b) After coating

图 7 镀膜前后的 PSD_{ISO} 和 $\text{PSD}_{\text{ISO-Combined}}$ 曲线

Fig.7 PSD_{ISO} and $\text{PSD}_{\text{ISO-Combined}}$ curves before and after coating

从图 8 中可以看到,硅基板镀膜前的 $\text{PSD}_{\text{ISO-Combined}}$ 符合分形理论的描述^[14],在对数坐标系下,PSD 曲线接近一条直线。镀膜后的 $\text{PSD}_{\text{ISO-Combined}}$ 在低频段基本相同,中、高频段出现了明显的差异。可见薄膜生长过程基本上复制了基板的低频信息,主要改变了基板的中、高频特征。这主要是由制备 HfO_2 薄膜的多晶微观结构引起的。使用 X 射线衍射仪测量了超光

滑熔石英基板上镀制 HfO_2 薄膜的结晶状态,结果发现其具有多晶的结构。根据对 X 射线衍射峰特征的分析 and 拟合(如图 9 所示),可以得到平均晶粒的尺寸为数十纳米。可以认为在硅基板上镀制 HfO_2 薄膜的平均晶粒尺寸也在数十纳米左右。这些横向尺寸在数十纳米的晶体结构对应的空间频率范围为 $15\sim 25\ \mu\text{m}^{-1}$,这也正好对应了镀膜前后 $\text{PSD}_{\text{ISO-Combined}}$ 差异较大处的空间频率范围。由此可以认为横向尺寸大概在几十个纳米的表面柱状晶体结构对 PSD 的特性产生了重要影响,改变了中、高频的特征。

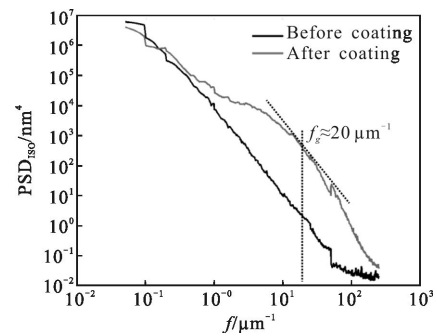


图 8 镀膜前后的 $\text{PSD}_{\text{ISO-Combined}}$ 曲线对比

Fig.8 Comparison between $\text{PSD}_{\text{ISO-Combined}}$ curve before and after coating

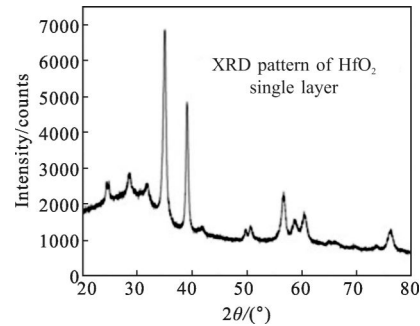


图 9 XRD 图谱

Fig.9 XRD pattern

硅基板镀膜前后,四种扫描尺寸下的 σ_{ISO} 和 σ_{STD} 如表 1 和表 2 所示。可以看出两者是基本相同的,这与前文所述 $\text{PSD}_{\text{ISO-Combined}}$ 符合分形理论的描述一同验证了 PSD_{ISO} 计算方法的准确性。至于两者之间的差异特别是镀膜前差异较大,考虑是由于硅基板抛光工艺带来的局部各向异性引起的,镀膜后局部的各向异性得到消除。此外,由于计算 PSD_{ISO} 过程中选择的窗口函数、环带等也同样会引起两者之间的差异,这是进一步改进计算方法时需要考虑的问题。

表 1 硅基板镀膜前四种扫描尺寸下的 σ_{ISO} 和 σ_{STD} Tab.1 σ_{ISO} and σ_{STD} of Si Substrate before coating over four scan areas

	$\sigma_{\text{ISO}}/\text{nm}$	$\sigma_{\text{STD}}/\text{nm}$	Δ
1 $\mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$	0.19	0.22	-13.64%
5 $\mu\text{m} \times 5 \mu\text{m}$	0.42	0.43	-2.33%
10 $\mu\text{m} \times 10 \mu\text{m}$	0.51	0.57	-10.53%
20 $\mu\text{m} \times 20 \mu\text{m}$	0.77	0.77	0

表 2 硅基板镀膜后四种扫描尺寸下的 σ_{ISO} 和 σ_{STD} Tab.2 σ_{ISO} and σ_{STD} of Si substrate after coating over four scan areas

	$\sigma_{\text{ISO}}/\text{nm}$	$\sigma_{\text{STD}}/\text{nm}$	Δ
1 $\mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$	1.87	1.89	-1.06%
5 $\mu\text{m} \times 5 \mu\text{m}$	1.81	1.81	0
10 $\mu\text{m} \times 10 \mu\text{m}$	1.65	1.66	-0.60%
20 $\mu\text{m} \times 20 \mu\text{m}$	1.47	1.51	-2.65%

3 结 论

文中给出了一维功率谱密度($\text{PSD}_{1\text{D}}$)、二维功率谱密度($\text{PSD}_{2\text{D}}$)以及各向同性功率谱密度(PSD_{ISO})的计算方法和具体步骤,确定了硅基板单层 HfO_2 镀膜前后的 $\text{PSD}_{\text{ISO-Combined}}$ 出现明显差异。通过 X 射线衍射仪得到了 HfO_2 薄膜的平均晶粒尺寸为数十纳米,这与 $\text{PSD}_{\text{ISO-Combined}}$ 曲线中差异较大处的空间频率范围吻合。明确了 HfO_2 薄膜的多晶微观结构是改变 PSD 曲线中高频特征的主要原因。还通过对比 σ_{ISO} 和 σ_{STD} 的方式验证了 PSD_{ISO} 计算方法的准确性。

参考文献:

- [1] Fang S J, Haplepete S, Chen W, et al. Analyzing atomic force microscopy images using spectral methods [J]. *Journal of Applied Physics*, 1997, 82(12): 5891-5898.
- [2] Xu Deyan, Shen Weixing, Lin Zunqi. Response of optic profiler to spatial wavelength of optical element surface [J].

Acta Optica Sinica, 1998, 18(12): 1721-1726. (in Chinese) 徐德衍, 沈卫星, 林尊琪. 光学轮廓仪对光学元件表面空间波长回应的研究[J]. *光学学报*, 1998, 18(12): 1721-1726.

- [3] ISO10110. Optics and optical instruments -Preparation of drawings for optical elements and systems -Part8: Surface Texture[S]. 1997.
- [4] English R E, Laumann C W, Miller J L, et al. Optical system design of the national ignition facility [C]//SPIE, 1998, 3482: 726-736.
- [5] Duparre A, Ferre-Borrull J, Gliach S, et al. Surface characterization techniques for determining the root-mean-square roughness and power spectral densities of optical components[J]. *Applied Optics*, 2002, 41(1): 154-171.
- [6] Harvey J E, Schroder S, Choi N, et al. Total integrated scatter from surfaces with arbitrary roughness correlation widths and incident angles[J]. *Optical Engineering*, 2012, 51(1): 013402.
- [7] Ferre-Borrull J, Steinert J, Duparre A. Extending the capabilities of scanning probe microscopy engineering microroughness analysis in surface engineering [J]. *Surface and Interface Analysis*, 2002, 33: 92-95.
- [8] Duparre A, Jakobs S. Combination of surface characterization techniques for investigating optical thin-film components[J]. *Applied Optics*, 1996, 35(25): 5052-5058.
- [9] Church E L. The optimal estimation of finish parameters[C]//SPIE, 1991, 1530: 71-85.
- [10] Elson J M, Bennett J M. Calculation of the power spectral density from surface profile data [J]. *Applied Optics*, 1995, 34(1): 201-208.
- [11] Church E L, Takacs P Z. Instrumental effects in surface finish measurement[C]//SPIE, 1988, 1009: 46-55.
- [12] Stover J C. Optical Scattering: Measurement and Analysis [M]. 2nd ed. Washington: SPIE Optical Engineering Press, 1995: 48.
- [13] Cheng X B, Zhang J L, Ding T, et al. The effect of an electric field on the thermomechanical damage of nodular defects in dielectric multilayer coatings irradiated by nanosecond laser pulses [J]. *Light Science & Applications*, 2013, 2(6): e80.
- [14] Church E L. Fractal surface finish[C]//SPIE, 1987, 830: 75-83.