

文章编号: 1001-4322(2009)01-0139-04

光学元件亚表面缺陷偏振双向反射分布函数*

潘永强^{1,2}, 吴振森², 杭凌侠¹

(1. 西安工业大学 光电工程学院, 西安 710032; 2. 西安电子科技大学 理学院, 西安 710071)

摘 要: 利用琼斯散射矩阵,借助右手正交基组来表示入射场和散射场,推导出光学元件亚表面缺陷或微粒在不同偏振状态下的双向反射分布函数的表达式。给出了亚表面缺陷在不同入射角条件下,不同偏振状态下的双向反射分布函数与散射方位角之间的关系,以及不同入射角下 p 偏振入射产生的 p 偏振双向反射分布函数的 3 维散射图。结果表明:p 偏振入射产生的 p 偏振双向反射分布函数强烈依赖于入射角、散射角和方位角,且随着入射角的增加,其最小值点所对应的方位角逐渐减小。

关键词: 亚表面缺陷; 光散射; 偏振双向反射分布函数

中图分类号: O484 **文献标志码:** A

光学元件的损伤问题已成为高功率固体激光装置研制的核心问题,而紫外光对元件的损伤尤为严重。国内外研究表明,光学元件在其制造过程中形成的元件表面污染、亚表面缺陷(SSD)和微粒是导致损伤的主要根源^[1-3]。光散射是一种非接触测量方法,且便于应用,因此成为光学元件检测的有效方法^[4-6]。然而,光学元件同时存在表面粗糙度和亚表面缺陷等问题,使表面微粗糙度引起的光散射影响到亚表面缺陷散射的研究和应用,从而阻止了散射光测试技术的进一步广泛应用。沈健^[7]等人采用蒙卡的方法模拟了偏振光入射时的双向反射分布函数,T. A. Germer^[8]等人采用偏振度研究了表面微粗糙度和亚表面缺陷的散射机理,将表面微粗糙度和亚表面缺陷的散射进行了有效区分。本文依据琼斯散射矩阵,借助右手正交基组来表示入射场和散射场,推导出不同偏振状态下亚表面缺陷双向反射分布函数(BRDF)的表达式;模拟计算了不同入射角条件下,亚表面缺陷的偏振双向反射分布函数(PBRDF)与散射方位角之间的变化关系,以及不同入射角下,p 偏振入射光产生的 p 偏振散射的双向反射分布函数随散射角和方位角变化的关系曲线。

1 基础理论

设一球形微粒,其折射率为 n_{sph} ,半径为 a ,距离折射率为 n_{mat} 的介质表面距离为 d 。由于我们讨论的微粒直径小于入射波长,因此,可以用 Rayleigh 近似理论来处理并忽略微粒之间的多重散射效应。

图 1 为散射光几何关系的示意图。波长为 λ 的偏振入射光以入射角 θ_i 入射到平面和微粒上,其散射角为 θ_s ,入射面外的方位角为 ϕ_s ,散射琼斯矩阵 S 可用入射电场和散射电场表示为

$$\begin{pmatrix} E_p^{scat} \\ E_s^{scat} \end{pmatrix} = \frac{e^{iR}}{R} \begin{pmatrix} S_{pp} & S_{sp} \\ S_{ps} & S_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_p^{inc} \\ E_s^{inc} \end{pmatrix} \quad (1)$$

式中: E_p^{inc} 和 E_s^{inc} 分别是 p 偏振和 s 偏振的入射电场; E_p^{scat} 和 E_s^{scat} 分别是 p 偏振和 s 偏振的散射电场; R 为样片散射点到探测器的距离; $k=2\pi/\lambda$ 。为了计算散射矩阵 S ,引入双向反射分布函数,那么,单个微粒的散射场的双向反射分布函数可定义为^[9]

$$\Gamma_{BRDF} = \frac{N}{A} \frac{|S \cdot e|^2}{\cos\theta_s \cos\theta_i} F \quad (2)$$

式中: N/A 是照明区域内微粒或缺陷等散射体的密度, e 是平行于入射电场的单位矢量; F 是依赖于不同散射体中心相关性的结构因子,对于随机的非相关微粒, $F=1$ 。

首先,计算微粒所在位置处的电场 E ;然后,假设微粒为球形微粒的情况下,确定微粒的偶极矩 P_{sph} 。这样,微粒偶极矩可表示为^[10]

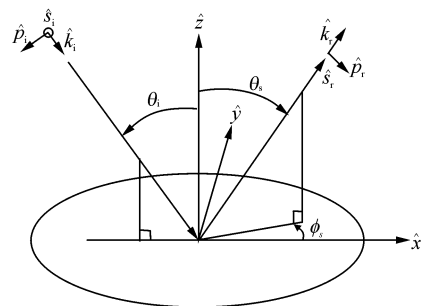


Fig. 1 Schematic diagram of light scattering geometry
图 1 散射光几何关系示意图

* 收稿日期:2008-04-29; 修订日期:2008-09-05

基金项目:国家自然科学基金项目(60771038)

作者简介:潘永强(1974—),男,副教授,博士研究生,主要从事薄膜工艺和测试技术研究;pansir74@163.com。

$$\mathbf{P}_{\text{sph}} = 4\pi\epsilon_0 \frac{n_{\text{sph}}^2 - n_0^2}{n_{\text{sph}}^2 + 2n_0^2} a^3 \mathbf{E} \quad (3)$$

式中: n_0 是周围介质的折射率; ϵ_0 为周围介质的介电常数。这样诱导偶极矩就会按照以下形式向外辐射^[11]

$$\mathbf{E}^{\text{scat}} = -\frac{n_0^2 k_n^2 e^{in_0 k_n R}}{4\pi\epsilon_0 R} \hat{\mathbf{k}} \times (\hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{P}_{\text{sph}}) \quad (4)$$

式中: \mathbf{E}^{scat} 是散射电场强度; $\hat{\mathbf{k}}$ 为散射方向上的单位矢量; k 为波数, $k = 2\pi/\lambda$ 。为了方便地将 p 偏振光和 s 偏振光分离开, 本文在研究散射电场时, 采用 $\{\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{k}}\}$ 正交基组确定的右手坐标系来表示散射电场。其中, $\hat{\mathbf{k}}$ 是散射光传播方向上的单位矢量, $\hat{\mathbf{s}}$ 是垂直于 $\hat{\mathbf{k}}$ 并平行于样品表面平面的单位矢量, $\hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{s}}$ 。从而可得

$$\mathbf{E}^{\text{scat}} = \frac{n_0^2 k_n^2 e^{in_0 k_n R}}{2\pi\epsilon_0 R} (\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{s}}) \cdot \mathbf{P}_{\text{sph}} \quad (5)$$

散射电场和平面的相互作用可通过引入适当算子来进行计算。对于从介质 j 到介质 k 传播的平面波, 其折射算子为

$$t_p^{jk}(\theta_i) \hat{\mathbf{p}}_k \hat{\mathbf{p}}_j + t_s^{jk}(\theta_i) \hat{\mathbf{s}}_k \hat{\mathbf{s}}_j \quad (6)$$

式中: $\hat{\mathbf{p}}_j$ 和 $\hat{\mathbf{s}}_j$ 表示光折射前的单位矢量, $\hat{\mathbf{p}}_k$ 和 $\hat{\mathbf{s}}_k$ 表示光折射后的单位矢量。折射率分别为 n_j 和 n_k 的两种材料的界面菲涅耳透射系数 $t_s^{jk}(\theta_i)$, $t_p^{jk}(\theta_i)$ 可分别表示为

$$t_s^{jk}(\theta_i) = \frac{2\cos\theta_i}{\cos\theta_i + \sqrt{(n_k/n_j)^2 - \sin^2\theta_i}} \quad (7)$$

$$t_p^{jk}(\theta_i) = \frac{2(n_k/n_j)\cos\theta_i}{(n_k/n_j)^2 \cos\theta_i + \sqrt{(n_k/n_j)^2 - \sin^2\theta_i}}$$

对于远场散射的球面波, 折射算子则可写成

$$(n_j/n_k) (\cos\theta_i/\cos\theta_r) [t_p^{jk}(\theta_i) \hat{\mathbf{p}}_k \hat{\mathbf{p}}_j + t_s^{jk}(\theta_i) \hat{\mathbf{s}}_k \hat{\mathbf{s}}_j] \quad (8)$$

式中: θ_r 为光在折射率分别为 n_j , n_k 两种材料界面的折射角, 假设波在介质内的传播因子为 $\exp(in_j k_n R)/R$ 。本文在研究时, 为了将问题简化, 假设入射光仅从微粒散射一次。

2 表面缺陷的散射

图 2 是入射光只作用一次元件表面下方的微粒或缺陷示意图。当位于平面下方距平面距离为 d 的微粒或缺陷仅受到一个光源照明时, 也仅能从一个方向上探测到微粒或缺陷。然而, 由于发生了折射, 使得缺陷或微粒的照明方向不同于入射光的方向, 而且对于辐射光的探测坐标系也必须进行适当的调整。此时, 微粒或缺陷处的电场可表示为

$$\mathbf{E} = E_p^{\text{inc}} \gamma t_p^{12}(\theta_i) \cos\theta'_i \hat{\mathbf{x}} + E_s^{\text{inc}} \gamma t_s^{12}(\theta_i) \hat{\mathbf{y}} + E_p^{\text{inc}} \gamma t_p^{12}(\theta_i) \sin\theta'_i \hat{\mathbf{z}} \quad (9)$$

式中: θ'_i 和 ϕ'_i 是由于折射而产生的散射入射角, 且有 $\sin\theta'_i = \sin\theta_i/n_{\text{mat}}$, $\cos\theta'_i = \sqrt{n_{\text{mat}}^2 - \sin^2\theta_i}/n_{\text{mat}}$, 并且有 $\phi'_i = \phi_i$, $\gamma = \exp(in_{\text{mat}} k_n d \cos\theta'_i)$ 是相位因子, 表示光从界面到缺陷的传播和吸收。此时, 表面下方微粒或亚表面缺陷的偶极矩可通过令 $n_0 = n_{\text{mat}}$ 而求出。用上述的右手正交矢量基组可将散射电场可表示为

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{s}}_{\text{sub}} &= -\sin\phi'_s \hat{\mathbf{x}} + \cos\phi'_s \hat{\mathbf{y}} \\ \hat{\mathbf{p}}_{\text{sub}} &= -\cos\theta'_s \cos\phi'_s \hat{\mathbf{x}} - \cos\theta'_s \sin\phi'_s \hat{\mathbf{y}} + \sin\theta'_s \hat{\mathbf{z}} \\ \hat{\mathbf{k}}_{\text{sub}} &= \sin\theta'_s \cos\phi'_s \hat{\mathbf{x}} + \sin\theta'_s \sin\phi'_s \hat{\mathbf{y}} + \cos\theta'_s \hat{\mathbf{z}} \end{aligned} \quad (10)$$

同样, θ'_s 和 ϕ'_s 也是由于折射引起的散射折射角, 可表示为: $\sin\theta'_s = \sin\theta_s/n_{\text{mat}}$, $\cos\theta'_s = \sqrt{n_{\text{mat}}^2 - \sin^2\theta_s}/n_{\text{mat}}$, 并且有 $\phi'_s = \phi_s$ 。应用公式(5)和公式(8), 光学元件表面外远场散射的表达式为

$$\mathbf{E}^{\text{scat}} = \frac{n_{\text{mat}} k^2 e^{ikR}}{4\pi\epsilon_0 R} \left(\frac{\cos\theta_s}{\cos\theta'_s} \right)^{1/2} [\delta t_p^{21}(\theta'_s) \hat{\mathbf{p}}_{\text{sca}} \hat{\mathbf{p}}_{\text{sub}} + \delta t_s^{21}(\theta'_s) \hat{\mathbf{s}}_{\text{sca}} \hat{\mathbf{s}}_{\text{sub}}] \cdot \mathbf{P}_{\text{sph}} \quad (11)$$

式中: $\delta = e^{in_{\text{mat}} k d \cos\theta'_s}$ 。简化上面的表达式, 可得到亚表面散射矩阵元素为 $S_{jk}^{\text{sub}} = q_{jk}^{\text{sub}} S_0^{\text{sub}}$, 其中

$$S_0^{\text{sub}} = 4\delta\gamma \left(\frac{n_{\text{sph}}^2 - n_{\text{mat}}^2}{n_{\text{sph}}^2 + 2n_{\text{mat}}^2} \right) \cos\theta_s \cos\theta_i a^3 k_n^2 n_{\text{mat}}^{3/2} \left(\frac{\sqrt{n_{\text{mat}}^2 - \sin^2\theta_s}}{\cos\theta_s} \right)^{1/2} \quad (12)$$

q_{jk}^{sub} 的四种偏振形式为

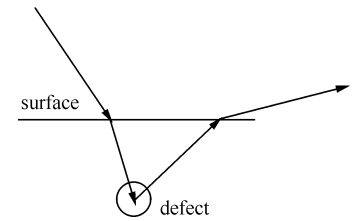


Fig. 2 Schematic diagram of the first-order interactions between light and defect below a surface

表面下方微粒或缺陷

与光作用一次示意图

$$\begin{cases} q_{ss}^{\text{sub}} = \frac{\cos\phi_s}{(\cos\theta_i + \sqrt{n_{\text{mat}}^2 - \sin^2\theta_i})(\cos\theta_s + \sqrt{n_{\text{mat}}^2 - \sin^2\theta_s})} \\ q_{sp}^{\text{sub}} = \frac{-\sin\phi_s \sqrt{n_{\text{mat}}^2 - \sin^2\theta_s}}{(\cos\theta_i + \sqrt{n_{\text{mat}}^2 - \sin^2\theta_i})(n_{\text{mat}}^2 \cos\theta_s + \sqrt{n_{\text{mat}}^2 - \sin^2\theta_s})} \\ q_{ps}^{\text{sub}} = \frac{-\sin\phi_s \sqrt{n_{\text{mat}}^2 - \sin^2\theta_i}}{(n_{\text{mat}}^2 \cos\theta_i + \sqrt{n_{\text{mat}}^2 - \sin^2\theta_i})(\cos\theta_s + \sqrt{n_{\text{mat}}^2 - \sin^2\theta_s})} \\ q_{pp}^{\text{sub}} = \frac{\sin\theta_i \sin\theta_s - \sqrt{n_{\text{mat}}^2 - \sin^2\theta_i} \sqrt{n_{\text{mat}}^2 - \sin^2\theta_s} \cos\phi_s}{(n_{\text{mat}}^2 \cos\theta_i + \sqrt{n_{\text{mat}}^2 - \sin^2\theta_i})(n_{\text{mat}}^2 \cos\theta_s + \sqrt{n_{\text{mat}}^2 - \sin^2\theta_s})} \end{cases} \quad (13)$$

将式(12)代入到 $S_{jk}^{\text{sub}} = q_{jk}^{\text{sub}} S_0^{\text{sub}}$, 再将得到的 S_{jk}^{sub} 代入到(2)式中, 即可得到亚表面缺陷或表面下微粒的双向反射分布函数(BRDF_{sub})的表达式为

$$\Gamma_{\text{BRDF}} = \frac{256\pi^4}{\lambda^4} \left(\frac{n_{\text{sph}}^2 - n_{\text{mat}}^2}{n_{\text{sph}}^2 + 2n_{\text{mat}}^2} \right)^2 a^6 \cos\theta_i \sqrt{n_{\text{mat}}^2 - \sin^2\theta_s} |\gamma\delta|^2 n_{\text{mat}}^3 \frac{NF}{A} |q_{jk}^{\text{sub}} \hat{e}|^2 \quad (14)$$

式中: $|\gamma\delta|^2$ 表示光在材料中所能穿透的深度。对于吸收材料由于材料的吸收会使距离表面较远的缺陷或微粒将无法被探测, 因此, 本文的研究对象为无吸收的透明基底。

3 理论结果及讨论

依据上面的理论模型, 利用计算机编程计算了不同偏振状态下的双向反射分布函数。图 3 给出了入射角分别为 30, 45 和 60°, 散射角均为 45° 时, 不同偏振状态下双向反射分布函数随散射方位角的变化关系, 其中光学元件为 K9 玻璃, 其折射率 $n_{\text{mat}} = 1.52$; 亚表面缺陷为半径为 5 nm 的球形气泡缺陷, 位于表面下 100 nm, 环形气泡折射率为 1.0, 照明面内微粒的密度 $1 \mu\text{m}^{-2}$, 入射波长 $\lambda = 633 \text{ nm}$ 。从图 3 可以看出, 在入射角相同的条件下, s 偏振光入射产生的 p 偏振的双向反射分布函数 BRDF_{sp} 和 p 偏振光入射产生的 s 偏振的双向反射分布函数 BRDF_{ps} 的变化趋势一致, 几乎没有任何差别, 而 p 偏振光入射产生的 p 偏振的双向反射分布函数 BRDF_{pp} 和 s 偏振光入射产生的 s 偏振的双向反射分布函数 BRDF_{ss} 虽然有相同的变化趋势, 且对应于不同散射方位角都存在一个散射的最小值, 但随着入射角的变化 BRDF_{ss} 的最小值所对应的散射方位角位置不变, 都为 90°, 而 BRDF_{pp} 却随着入射角的增加, 其最小值所对应的散射方位角逐渐减小, 即不同的 p 偏振光入射角对应一个方位角 ϕ_s , 使亚表面缺陷引起的 BRDF_{pp} 项完全消失。

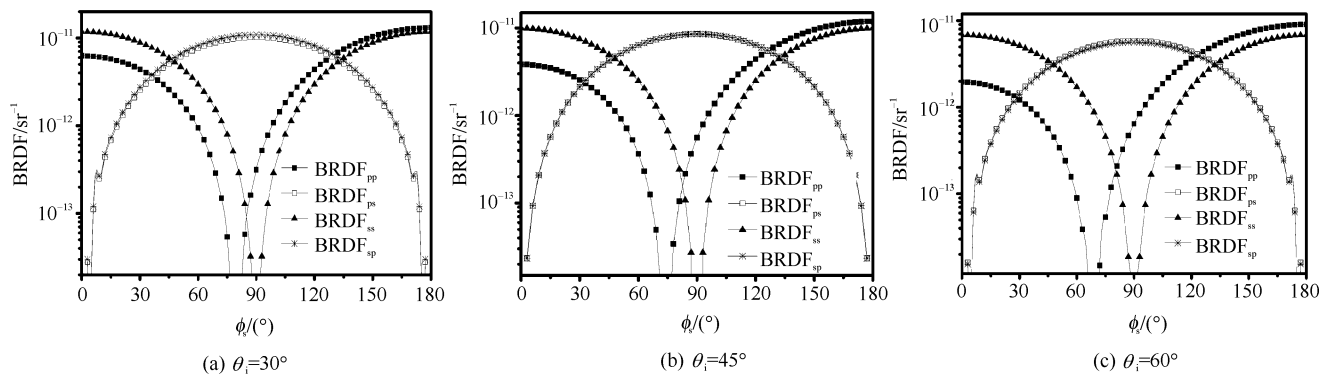


Fig. 3 Calculated polarized BRDF of subsurface defect vs azimuth angle at different incident angle

图 3 入射角分别为 30, 45 和 60° 时, 计算的亚表面缺陷的 4 种不同偏振状态下的 BDDF 与方位角的变化关系

图 4 给出了入射角分别为 30, 45 和 60° 时, p 偏振光入射产生的 p 偏振散射, 即 BRDF_{pp} 与散射角和散射方位角之间变化关系的 3 维散射轮廓图。从图 4 可以看出: 对于同一入射角, 随着散射方位角的变化 BRDF_{pp} 的 3 维图中存在一个沟谷, 并且此沟谷随着散射角的增加, 其所对应的散射方位角在逐渐减小; 随着 p 偏振光入射角的逐渐增加, BRDF_{pp} 3 维散射图中的最小值沟谷, 随着散射角的增加逐渐向散射方位角小的方向移动。

4 结论

本文利用琼斯散射矩阵, 采用右手正交基组来表示入射场和散射场, 保证了入射场坐标和散射场坐标的一致性。研究了亚表面缺陷或表面下方微粒的偏振 BRDF, 给出了不同偏振下亚表面缺陷双向反射函数的表达

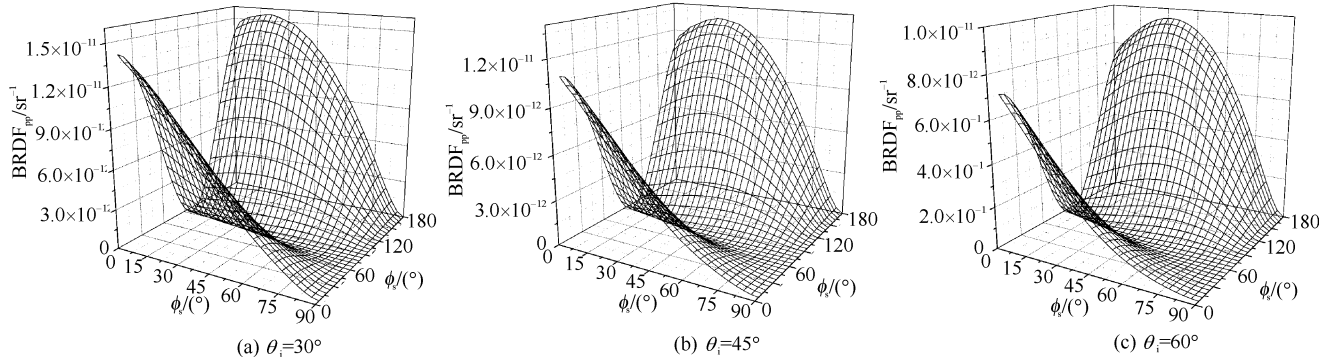


Fig. 4 Calculated BRDF_{pp} of subsurface defect vs scattering angle and azimuth angle at different incident angle

图4 入射角分别为30, 45和60°时, 理论计算的亚表面缺陷的BRDF_{pp}与散射角和方位变化的关系

式。模拟计算了K9玻璃亚表面气泡缺陷的偏振双向反射分布函数,通过对不同入射角条件下,不同偏振状态下的双向反射分布函数的模拟计算发现,亚表面的BRDF_{sp}和BRDF_{ps}随散射方位角的变化趋势一致,BRDF_{pp}和BRDF_{ss}随散射方位角的变化趋势一致,但随着入射角的变化BRDF_{ss}最小值所对应的散射方位角不变,而BRDF_{pp}随着入射角的增加,其最小值所对应的散射方位角逐渐减小。通过进一步对p偏振光入射产生的p偏振散射光即BRDF_{pp}的模拟计算,给出了其随散射角和散射方位角变化的3维散射图。

参考文献:

- [1] 陈宁, 张清华, 许乔, 等. K9基片的亚表面损伤探测及化学腐蚀处理技术[J]. 强激光与粒子束, 2005, **17**(9):1289-1293. (Chen Ning, Zhang Qinghua, Xu Qiao, et al. Studies on subsurface damage detection and wet-etching process of K9 optics. *High Power Laser and Particle Beams*, 2005, **17**(9):1289-1293)
- [2] Burnham A K, Hackel L A, Wegner P J, et al. Improving 351 nm damage performance of large-aperture fused silica and DKDP optics[C]//Proc of SPIE. 2002, **4679**:173-185.
- [3] 田东斌, 祖小涛, 袁晓东, 等. 熔石英亚表面划痕激光诱导损伤阈值实验研究[J]. 强激光与粒子束, 2007, **19**(9):1547-1550. (Tian Dongbin, Zu Xiaotao, Yuan Xiaodong, et al. Experiment of laser induced damage threshold for different sub-surface cracks on fused silica. *High Power Laser and Particle Beams*, 2007, **19**(9):1547-1550)
- [4] 尼启良, 陈波. 散射法表面粗糙度测量[J]. 光学精密工程, 2001, **9**(2):151-154. (Ni Qiliang, Chen Bo. Measurement of surface roughness by scattering method. *Optics and Precision Engineering*, 2001, **9**(2):151-154)
- [5] Bernt M, Stover J C. Roughness measurements of dielectrics with light scatter[C]//Proc of SPIE. 1995, **2541**:36-44.
- [6] 张向东, 吴振森, 吴成柯. 相位微扰法在粗糙面光散射中的应用[J]. 光学学报, 1997, **17**(9):1242-1246. (Zhang Xiangdong, Wu Zhensen, Wu Chengke. Application of the phase perturbation method to rough surfaces scattering. *Acta Optica Sinica*, 1997, **17**(9):1242-1246)
- [7] Shen J, Liu S J, Kong W J, et al. Extended bidirectional reflectance distribution function for subsurface defects scattering[J]. *Microelectronic Engineering*, 2006, **83**(4-9):1047-1050.
- [8] Germer T A, Asmail C C. Polarization of light scattered by microrough surfaces and subsurface defects[J]. *J Opt Soc Am*, 1999, **16**(6):1326-1332.
- [9] Flynn D S, Alexander C. Polarized surface scattering expressed in terms of a bidirectional reflectance distribution function matrix[J]. *Opt Eng*, 1995, **34**(6):1646-1650.
- [10] 玻恩 M, 沃耳夫 E. 光学原理[M]. 北京:电子工业出版社, 2007:651. (Born M, Wolf E. Principles of optics. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2007: 651)

Polarized bidirectional reflectance distribution function by subsurface defects of optical component

Pan Yongqiang^{1,2}, Wu Zhensen², Hang Lingxia¹

(1. School of Photoelectric Engineering, Xi'an technological University, Xi'an 710032, China;

2. School of Science, Xidian University, Xi'an 710071, China)

Abstract: Polarized bidirectional reflectance distribution function(PBRDF) of light scattered by subsurface defect(SSD) was derived on the foundation of Jones scattering matrix by use of right handed basis set. Four kinds of PBRDF changing with azimuth angle were calculated and compared at different incident angles, and three-dimensional BRDF_{pp} which indicates p polarized scattered light due to p polarized incident light were obtained at different incident angles. The results show that BRDF_{pp} by SSD depends strongly on incident angle, scattering angle and azimuth angle. The azimuth angle of minimal BRDF_{pp} decreases with the increase of incident angle.

Key words: subsurface defect; light scattering; polarized bidirectional reflectance distribution function