

광 다층박막의 층간확산 효과

이영재 · 김영식
단국대학교 물리학과

(1998년 4월 2일 받음, 1998년 9월 22일 수정본 받음)

광학용 유전체 다층박막의 증착시 높은 열로 인해 형성되는 층간확산의 광학적 효과를 연구하였다. 연속적으로 변하는 굴절률 분포함수를 갖고 하나의 부분구조가 주기적으로 반복되는, 다층박막의 광특성 계산방법을 제시한다. 이 방법을 이용하여 Fabry-Perot형 여과막, 넓은 영역에 걸쳐 높은 반사율을 갖는 전반사경 및 반사 방지막에 대해 층간확산이 미치는 영향을 계산하여 투과 및 반사 스펙트럼을 얻었다. 층간확산으로 인하여 전반사경의 스펙트럼 대역폭이 줄어들었으며 다층 반사방지막의 경우층의 수가 많을 때 특성이 악화되고 파장에 따른 반사율의 변화가 크게 되었다.

I. 서 론

유전체 박막증착의 광학적인 응용은 카메라 렌즈 시스템의 반사 방지막과 같은 간단한 것으로부터 레이저용 반사경, 광속 분할기, 이색거울, 적외선 투과기등과 같은 복잡한 형태에 이르기까지 매우 다양하다.^[1] 특히 광소자의 표면에서 반사율을 최소로 줄이는 반사방지막은 광학 시스템의 효율을 증대시키기 때문에 그 수요는 어느 것보다 크며 그 분야의 연구 및 응용이 활발하다.^[2-7] 4분파층의 교대증착으로 제작되는 넓은 대역의 전반사경도 레이저 반사경에 쓰이므로 그 응용도가 대단히 크다. 또한 현재의 광학산업이 빠르게 발전하고 있는 추세이므로 이 분야의 응용 및 개발이 더욱 가속화 될 전망이다.

대부분의 유전체 박막은 높은 굴절률과 낮은 굴절률을 가진 물질을 사용하며 파장의 범위에 맞추어 교대로 적절히 쌓아 올리는 형태로 이루어진다. 이러한 유전체 박막의 응용을 위한 설계에 있어서도 다층박막의 형태에 대한 계산이 이상적인 형태, 즉 정확한 계단식 형태를 고려하고 있다.^[8,9] 그러나 실제로는 유전체 박막에 있어서 여러가지 오차나 불완전성에 대한 문제점들을 고려해야만 한다. 두께의 오차,^[10-12] 광흡수,^[13] 표면의 불균일성, 불필요한 비등방성등 때문에 유전체 박막의 특성이 나쁘게 된다. 특히 유전체 박막의 제작시 높은 에너지를 갖고 증착되는 유전물질에 의해 박막의 온도가 매우 높게 가열되므로 서로 다른 유전 물질층 사이의 경계면에서는 열로 인한 물질확산이 생긴다. 설계와 제작된 박막의 스펙트럼 차이는 박막의 미세구조가 불완전하므로 생기게 되는데 그것보다 층간확산 효과로 인한 스펙트럼의 차이가 상당히 작지만 층간확산에 대한 분석은 별도로 고려할 필요성이 있다. 따라서 확산 영역에서 확산에 의한 물질분포 비율을 정량적으로 계산하고 이 분포에 따르는 굴절률 단면을 알고 그것으로부터 유전체 박막에 미치는 광학적 특성 변화를 정확히 평가하고자 한다.

현재까지의 연구결과에 의하면 Fabry-Perot 여과막과 같은 특정한 주파수만을 통과시키는 광박막의 경우 층간확산을 고려한 계산에 의하여 광학적 특성 변화를 정확히 예견할 수 있게 되었다.^[14] 이 연구에서는 Fabry-Perot형 여과막 뿐 아니라, 전반사경 및 반사방지막에 층간확산을 고려하여 그것이 미치는 효과를 수치해석적으로 분석하였고 이 분석없이 설계할 때의 부정확성을 양적으로 취급하고자 한다. 이 연구의 광 다층박막의 층간확산에 대한 분석은 광범위한 광 다층박막은 물론, 반도체등의 많은 박막의 층간확산에 관한 연구와 관련시킬 수 있을 것이다.

이 논문을 요약하면 제 II절에서는 층간확산을 해석하여 굴절률 단면을 계산하는 방법을 논하였고 제 III절에서는 연속적으로 변하는 굴절률 단면으로부터 다층박막의 광특성을 계산하는 과정을 묘사하였으며 제IV절에서는 수치해석적 방법과 다층박막의 특성의 계산결과를 논의하였다. 마지막 절에서 결론이 주어진다.

II. 층간확산에 의한 굴절률 변화

다층박막의 설계에서는 많은 경우 층간확산으로 인한 결함을 고려하지 않는 것이 보통이다. 그러나 박막증착시 가열에 의해 발생하는 층간확산은 작던지 크던지 피할 수 없다. 이러한 확산의 영향에 대한 지식이 있어야만 보다 정확한 설계가 가능할 것이다. 따라서 이 연구에서는 확산의 지식을 위하여 가장 많이 쓰이는 다층박막 형태의 경우에 대하여 확산효과를 계산하고자 한다. 실제로 확산은 복잡한 과정을 거쳐 일어나지만 여기에서는 확산 방정식에 따른 1차원적 확산을 취급하겠다.

굴절률이 다른 두 유전물질층 사이에서 확산이 일어나면 서로 섞인 불균일한 전이층이 형성되는데 이 전이층에서 굴절률 분포는 연속적으로 변하게 된다. 전이층의 굴절률은 두 물질의 밀도분포에 의존되므로 밀도분포를 계산할 필요가 있다. 인접한 두 물질층(고굴절 물질층 및 저굴절 물질층) 사이의 확산으로 인한 밀도분포 함수는 다음 확산 방정식을 풀어

본 연구는 단국대학교 대학연구비 지원에 의해 이루어짐.

서 구할 수 있다.^[14, 15]

$$\frac{\partial f_H(z, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f_H(z, t)}{\partial z^2} \quad (1)$$

여기에서 D 는 확산상수, t 는 확산시간, z 는 박막의 경계면에 수직한 선상에서 위치를 나타낸다. $f_H(z, t)$ 는 규격화된 밀도함수로서 $\rho_H(z, t)/\rho_H^0$ 이며, 여기서 $\rho_H(z, t)$ 는 전이층의 위치 z 에서 고굴절 물질의 밀도, ρ_H^0 는 확산되지 않은 상태에서 고굴절 물질의 밀도이다. 식 (1)의 해가 밀도함수로 쓰이기 위해서는 z_0 를 경계로 한 단위 계단함수 $f_H(z, 0) = \theta(z - z_0)$ 를 초기함수로 하는 해를 구해야 한다. 저굴절 물질의 밀도함수 $f_L(z, t)$ 도 마찬가지로 정의할 수 있으며 확산 방정식 (1)의 해가 된다. 또한 $t=0$ 에서와 마찬가지로 임의의 확산시간 t 에도 연속성에 의해 $f_L = 1 - f_H$ 가 성립된다.

초기의 (아직 확산되지 않은) 규격화 밀도함수 $f_H(z, 0)$ 및 $f_L(z, 0)$ 가 각각 증가 계단함수 및 감소 계단함수인데 이 함수들은 Fourier 전개식으로 표현되어^[14, 15]

$$f_H(z, 0) = \theta(z - z_0) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{k - i\varepsilon} e^{ik(z-z_0)} dk \quad (2)$$

$$f_L(z, 0) = 1 - \theta(z - z_0) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{k - i\varepsilon} e^{ik(z-z_0)} dk \quad (3)$$

로 주어지며 여기에서 ε 는 극한 $\varepsilon \rightarrow +0$ 으로 이해된다. 식 (1)의 일반해는

$$f_H(z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikz - k^2 Dt} dk \quad (4)$$

이므로 시간 $t=0$ 에 식 (2)와 식 (4)를 비교하여

$$g(k) = \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{k - i\varepsilon} \quad (5)$$

임을 알 수 있다.

$$f_H = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{k - i\varepsilon} e^{ik(z-z_0) - k^2 Dt} dk \quad (6)$$

이다. 항등식

$$\frac{1}{k - i\varepsilon} = \frac{i\varepsilon}{k^2 + \varepsilon^2} + \frac{k}{k^2 + \varepsilon^2} = i\pi\delta(k) + P\frac{1}{k} \quad (7)$$

을 이용하여 $f_H(z, t)$ 를 계산하면(여기에서 P 는 Cauchy principal value를 뜻함)

$$\begin{aligned} f_H(z, t) &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i \sin(z - z_0)}{k} e^{-k^2 Dt} dk \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-)^l}{(2l+1)!} [k(z - z_0)]^{2l+1} e^{-k^2 Dt} dk \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-)^l (z - z_0)^{2l+1}}{(2l+1)!} \int_{-\infty}^{\infty} k^{2l} e^{-k^2 Dt} dk \end{aligned} \quad (8)$$

부분적분을 계속 반복하여 다음 결과를 얻을 수 있다.

$$\begin{aligned} f_H(z, t) &= \frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-)^l}{l!(2l+1)} \left(\frac{z - z_0}{2\sqrt{Dt}} \right)^{2l+1} \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_{z_0}^z \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-)^l}{l!} \left(\frac{z' - z_0}{4Dt} \right)^l dz' \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \int_{z_0}^z \frac{1}{\sqrt{\pi Dt}} \exp \left[\frac{-(z' - z_0)^2}{4Dt} \right] dz' \\ f_L(z, t) &= 1 - f_H(z, t) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \int_{z_0}^z \frac{1}{\sqrt{\pi Dt}} \exp \left[\frac{-(z' - z_0)^2}{4Dt} \right] dz' \end{aligned} \quad (10)$$

가 된다. 식 (9)와 (10)에서 두 물질의 밀도함수는 시간 $t=0$ 에 경계면에서 경사가 급격히 큰 계단함수로 부터 시작하여, 시간이 지남에 따라 두 물질이 서로 섞여 경사가 완만한 연속함수로 변해가는 것을 볼 수 있다. 확산두께(diffusion length)로 정의되는

$$l_D \equiv 2\sqrt{Dt} \quad (11)$$

가 작으면 경계가 뚜렷하고, l_D 가 커짐에 따라 확산이 발전되어 f_H 및 f_L 의 경사가 완만해지는 것을 볼 수 있다.

확산으로 인한 굴절률 분포를 결정하기 위해서 굴절률이 서로 다른 두 물질이 인접하고 확산이 일어날 때 다음의 간단한 굴절률의 혼합법칙에 따라 경우를 고려하기로 한다.^[6]

$$n(z) = n_H f_H + n_L f_L \quad (12)$$

두 물질의 밀도 분포가 주어지면 이 혼합법칙에 따라 굴절률 분포가 계산될 수 있으며 z 에 따른 굴절률이 결정되면 다음절에서 묘사되는 방법에 의하여 다층박막의 광학적 성질을 알 수 있게 된다.

그림 1은 두 물질층 사이의 하나의 경계면에서 층간확산의 확산두께(l_D)에 따른 굴절률 단면을 보여주고 있다.

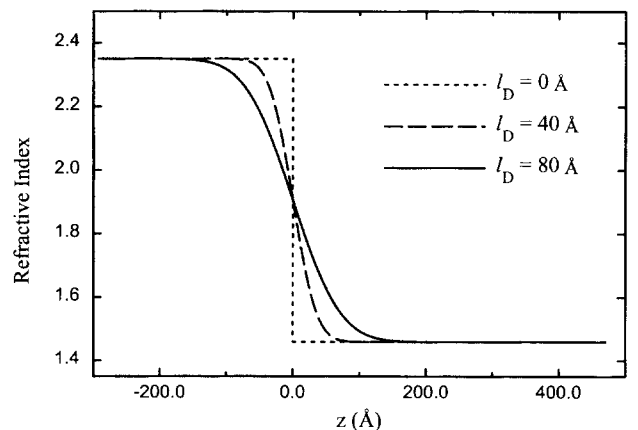


그림 1. 인접한 고굴절($n_H=2.35$) 물질층 및 저굴절 물질층($n_L=1.46$) 사이의 경계면에서 층간확산으로 인한 굴절률 단면. 점선: 층간확산이 없는 이상적인 계단식 굴절률 단면, 대시선: 확산두께(l_D)가 40Å일 때 층간확산의 전이층의 굴절률 단면, 실선: 확산두께(l_D)가 80Å일 때 층간확산의 전이층의 굴절률 단면.

이 굴절을 단면은 식 (9) 및 (10)을 식 (12)에 대입하여 계산한 것이다. 이 연구에서 선택한 고굴절 및 저굴절 증착물질의 굴절률은 각각 $n_H=2.35$ 와 $n_L=1.46$ 이다. 층간확산 두께 40 Å과 80 Å의 경우에 대하여 굴절률 분포를 보여 주고 있다. 그림 1의 점선으로 표시된 바와 같이 이상적인 굴절률 분포는 정확한 계단함수로 되어있다. 그러나 두 증착물질의 경계면에서 고굴절 물질과 저굴절 물질이 서로 확산하여 섞이게 되므로 굴절률 분포는 대시선(dashed line) 또는 실선으로 표시된 바와 같이 확산 두께에 따라 연속적으로 변화하는 모양을 갖게 된다.

III. 층간확산된 다층박막의 특성 계산

층간확산이 없을 경우에는 각 경계면 근처에서 규격화 밀도분포 f_H 또는 f_L 가 이상적인 계단함수를 갖게 된다. 그러나 층간확산을 고려할 때는 경계면 근처에서 고굴절 물질의 규격화 밀도함수가 식 (9)의 f_H 를 갖고 저굴절 물질의 함수가 식 (10)의 f_L 을 갖거나, 서로 뒤바뀐 밀도함수를 갖는다.

이들 밀도 함수와 식 (12)를 결합하여 경계면 근처에서 굴절률이 연속적으로 변하는 굴절을 단면을 얻을 수 있다. 층간확산이 없는 하나의 주어진 다층박막의 구조로 부터 층간확산이 생긴다고 하자. 그것에 해당되는 계단식 굴절을 단면(확산이 없는 단면)을 대치하는 다층박막의 확산구조를 얻을 수 있다.

이 확산구조는 균일한 굴절률의 층들로 이루어져 있지 않으므로 광박막의 특성을 알기 위해서는 연속적으로 변하는 굴절을 단면의 광박막에 대하여 계산해야 한다. 이 광박막의 특성계산을 위해 Walker와 Wax^[17] 및 Kofink^[18] 등에 의해 얻어진 다음의 식을 풀어 연속적으로 변하는 굴절을 함수가 $n(z)$ 일때 반사계수 $r(z)$ 을 계산하여 다층박막 구조의 반사계수 r 을 구할 수 있다.

$$\frac{dr}{dz} = 2ik_0 n(z)r + \frac{\gamma}{2n(z)} \frac{dn}{dz} (1-r^2) \tag{13}$$

여기에서 k_0 는 진공에서 빛의 파수이고 γ 는 TE파의 경우 1이며 TM파의 경우 -1인 상수이고, 빛의 진행방향인 z 축은 다층박막과 직각을 이루는 축이다. TE파 및 TM파의 반사진폭과 굴절진폭(또는 투과진폭)의 부호는 참고문헌^[8,19]을 따르기로 한다. 반사계수 $r(z)$ 는 위치 z 에서 입사방향의 빛의 진폭에 대한 반사방향의 진폭의 비인데, 다층박막의 표면(공기 또는 진공과의 경계면)에서 반사계수를 구하면 그 구조의 반사율을 알 수 있게된다. 이 논문에서는 다층박막에 수직으로 입사하는 빛만을 취급한다. 이 때 수직입사광의 TE파 및 TM파에 대한 반사계수가 같게되어 어느 하나만 생각하면 된다.

다층박막이 주기적으로 반복되는 경우 전체 특성행렬 계산을 위해서는 아래에서 예를 들어 설명하는 바와 같이 한 주기 구조의 특성행렬을 알면 반복되는 수만큼 그 한주기의 행렬을 반복하여 곱하는 것이 편리하다. 그렇게하여 다층박막의 전체행렬을 계산하여 얻으면 그 박막의 광특성을 알 수 있게 된다.

우선 $z_a \leq z \leq z_b$ 구간의 부분구조(substructure)의 특성행렬 $M(z_a, z_b)$ 을 구하는 방법을 생각하자. 한쪽 경계 $z=z_b$ 에서 $r(z_b)$ 값이 주어지면, 그것을 경계조건으로 1차 미분방정식인 식 (13)의 해를 수치해석적으로 풀어서 반사계수 함수 $r(z)$ 를 결정할 수 있다. $z > z_b$ 영역의 구조에 따라 $z=z_b$ 에서의 반사계수 $r(z_b)$ 는 복소수 평면에서 원점을 중심으로 반경이 1인 원안의 어떤 값을 갖게 된다. 그것은 반사계수의 절대치가 1을 넘을 수 없기 때문이다. 반사계수 $r(z_b)$ 값이 그 원안의 한점으로 선택되면 그 값을 출발점으로 역 z 방향에 따라 수치해석 방법 Runge-Kutta법^[20]을 이용하여 1차 미분방정식(13)을 풀 수 있다. 하나의 $r(z_b)$ 값이 주어지면 이렇게 $r(z)$ 를 풀어서 $r(z_a)$ 값을 얻을 수 있게 된다.

한편 수직입사광의 경우 위치 $z=z_a$ 및 $z=z_b$ 에 대한 전기장의 진폭 $V(z)$ 와 자기장 진폭 $U(z)$ 의 관계식은

$$\begin{pmatrix} U(z_a) \\ V(z_a) \end{pmatrix} = M(z_a, z_b) \begin{pmatrix} U(z_b) \\ V(z_b) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U(z_b) \\ V(z_b) \end{pmatrix}$$

로 주어진다. 여기에서 $U(z)=A(z)+R(z)$, $V(z)=n(z)[A(z)-R(z)]$ 이며, $A(z)$ 는 z 에서 진행하는 방향의 빛의 전기장 진폭이며 $R(z)$ 는 역 방향의 빛의 전기장 진폭이다.^[8] 위치 z 에서 반사계수 $r(z)=R(z)/A(z)$ 이므로 식 (14)로부터 다음식을 얻을 수 있다.

$$\frac{U(z_a)}{V(z_a)} = \frac{1+r(z_a)}{n(z_a)[1-r(z_a)]} = \frac{m_{11}[1+r(z_b)]+m_{12}n(z_b)[1-r(z_b)]}{m_{21}[1+r(z_b)]+m_{22}n(z_b)[1-r(z_b)]} \tag{15}$$

반사계수 $r(z_b)$ 를 복소수 평면에서 반경 1보다 크지 않은 임의의 3가지 값 $r(z_b)=r_{b,l}$ ($l=1,2,3$)을 선택하여 각 $r_{b,l}$ 에 대해 위에서 묘사한 바와 같이 구한 값 $r(z_a)$ 를 각각 $r_{a,l}$ 이라고 하면 식 (15)로부터

$$\begin{aligned} (1+r_{b,l})m_{11}+n(z_b)(1-r_{b,l})m_{12} - \frac{(1+r_{a,l})(1+r_{b,l})}{n(z_a)(1-r_{a,l})}m_{21} \\ - \frac{n(z_b)(1+r_{a,l})(1-r_{b,l})}{n(z_a)(1-r_{a,l})}m_{22} = 0 \end{aligned} \tag{16}$$

이 성립한다.

또한 특성행렬 M 의 성질

$$\det M = m_{11}m_{22} - m_{12}m_{21} = 1 \tag{17}$$

과 식 (16)에서 $l=1, 2, 3$ 각각에 해당하는 3가지 관계식을 연립하여 미지수 m_{11} , m_{12} , m_{21} 와 m_{22} 를 구할 수 있다.

다층박막에서 한 구조가 주기적으로 반복될 경우 그 구조의 특성행렬 $M(z_a, z_b)$ 를 구하고 행렬 M 을 주기 수 만큼 거듭 곱하여 반복된 구조에 대한 특성행렬을 얻을 수 있다. 예를 들면 $(HL)^n H$ 구조의 전반사경에서 층간확산이 있을 때 이 다층박막의 구조를

$$\frac{H}{1} \left(\frac{HL}{2} \right)^n \frac{H}{2} \tag{18}$$

로 표시할 수 있고 $\frac{HL}{2}$ 의 두 경계면을 통해 층간확산된 구조 $\frac{H_D}{2} L_D \frac{H_D}{2}$ 에 대한 특성행렬 $M_1 = M(z_a, z_b)$ 를 구하여 $\frac{H}{2}$ 에

대한 특성행렬 $M_{\frac{H}{2}}$ 와 결합하여 이 반사경의 전체 특성행렬

$$P = M_{\frac{H}{2}} M_1^n M_{\frac{H}{2}} \quad (19)$$

를 구하게 되는 것이다. 여기에서 H 와 L 은 각각 고굴절 물질 및 저굴절 물질의 4분파층(quarterwave layer)을 의미한다.

일반적으로 진공 또는 공기와의 경계면($z=z_0$)으로부터 유리와의 경계면($z=z_1$)까지 걸쳐 있는 다층박막의 전체 특성행렬 $P=M(z_0, z_1)$ 를 구하였을 때 빛의 특정한 파장에 대한 반사계수 r 은

$$\begin{pmatrix} A_0+R_0 \\ n_0(A_0-R_0) \end{pmatrix} = P \begin{pmatrix} T \\ n_s T \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} \\ p_{21} & p_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T \\ n_s T \end{pmatrix} \quad (20)$$

로부터 얻을 수 있다. 여기에서 n_s 는 유리의 굴절률을 뜻하며, A_0 은 다층박막 표면(진공 또는 공기와의 경계면)에서 입사방향으로 향하는 빛의 전기장 진폭이고 R_0 은 역 방향(반사방향)으로 향하는 빛의 전기장 진폭이며, 유리에서 T 는 진행하는 빛의 전기장 진폭이다. 다층박막의 반사계수는 $r=R_0/A_0$ 이므로 식 (20)으로부터

$$\frac{1+r}{n_0(1-r)} = \frac{p_{11}+n_s p_{12}}{p_{21}+n_s p_{22}} \quad (21)$$

이 되어 반사율 R 은

$$R = |r|^2 = \left| \frac{(p_{11}+n_s p_{12})n_0 - p_{21} - n_s p_{22}}{(p_{11}+n_s p_{12})n_0 + p_{21} + n_s p_{22}} \right|^2 \quad (22)$$

이며, 다층박막의 광흡수를 무시한다면 투과율 T 는

$$T = 1 - R = 1 - \left| \frac{(p_{11}+n_s p_{12})n_0 - p_{21} - n_s p_{22}}{(p_{11}+n_s p_{12})n_0 + p_{21} + n_s p_{22}} \right|^2 \quad (23)$$

이 된다.

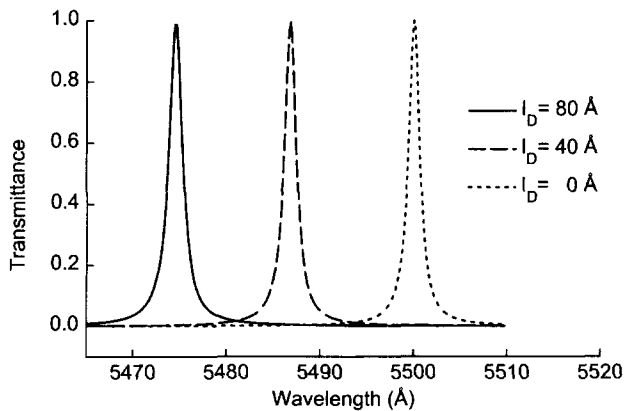


그림 2. [공기-(HL)⁷H²(LH)⁷-공기] 구조의 Fabry-Perot형 여과막의 투과 스펙트럼($n_H=2.35, n_L=1.46$). 1) 점선: 층간확산이 없을 때, 2) 대시선: 확산두께(l_D)가 40Å일 때, 3) 실선: 확산두께(l_D)가 80Å일 때.

IV. 계산결과 및 확산효과

다층박막의 층간확산 효과가 가장 민감한 Fabry-Perot형 여과막을 먼저 생각하기로 하자. 여과막의 구조가 $(HL)^n(2H)(LH)^n$ 로 부터 확산될 경우 그 구조를

$$\frac{H}{2} \left(\frac{H}{2} L \frac{H}{2} \right)^n H \left(\frac{H}{2} L \frac{H}{2} \right)^n \frac{H}{2} \quad (24)$$

로 생각하여 부분구조 $\frac{H}{2} L \frac{H}{2}$ 가 층간확산된 구조 $\frac{H_D}{2} L_D \frac{H_D}{2}$ 의 특성행렬 M_1 을 앞에서 언급한 방법으로 계산한다. 여기에서 $\frac{H_D}{2}$ 와 L_D 는 고굴절 및 저굴절 물질의 경계면에서 층간확산된 $\frac{H}{2}$ 와 L 에 해당하는 구조인데 $\frac{H_D}{2}$ 는 L 과 접한 한쪽 경계면이 확산 전이층을 갖고 L_D 는 양쪽 경계면이 모두 확산된 굴절률 분포를 갖는다. 여과막의 전체 특성행렬 P 는

$$P = \frac{M_H}{2} M_1^n M_H M_1^n \frac{M_H}{2} \quad (25)$$

이다. 여기에서 빛의 파장 λ 에 대한 특성행렬 $M_{\frac{H}{2}}$ 는

$$M_{\frac{H}{2}} = \begin{pmatrix} \cos \phi & i \sin \phi / n_H \\ i n_H \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \quad (26)$$

이며 $M_H = (M_{\frac{H}{2}})^2$ 이다. 중심파장(target wavelength) λ_0 에 대한 $\frac{H}{2}$ 의 위상두께(phase thickness) ϕ 는

$$\phi = \frac{\pi \lambda_0}{4\lambda} \quad (27)$$

로 주어진다. 식 (25)로 계산된 특성행렬 P 와 식 (23)를 이용하여 투과율을 얻을 수 있다.

그림 2는 확산 두께 l_D 에 따른 층간확산된 구조[공기-(HL)⁷2H(LH)⁷-공기]의 투과 스펙트럼을 보인 것으로 최대 투과파장(λ_{max})의 변화가 작은 l_D 의 영역에서 대략 선형적으로 나타

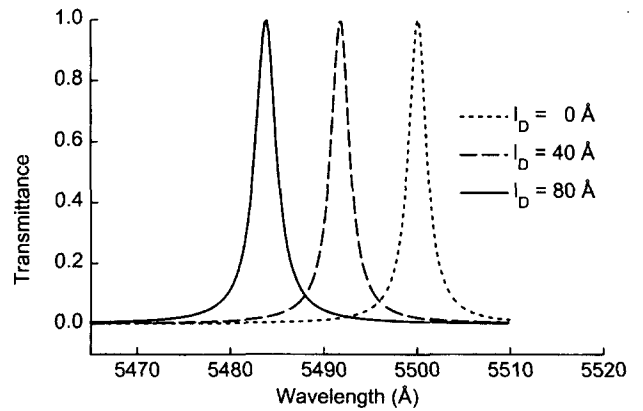


그림 3. [공기-(HL)⁷(LH)⁷-공기] 구조의 Fabry-Perot형 여과막의 투과 스펙트럼($n_H=2.35, n_L=1.46$). 1) 점선: 층간확산이 없을 때, 2) 대시선: 확산두께(l_D)가 40Å일 때, 3) 실선: 확산두께(l_D)가 80Å일 때.

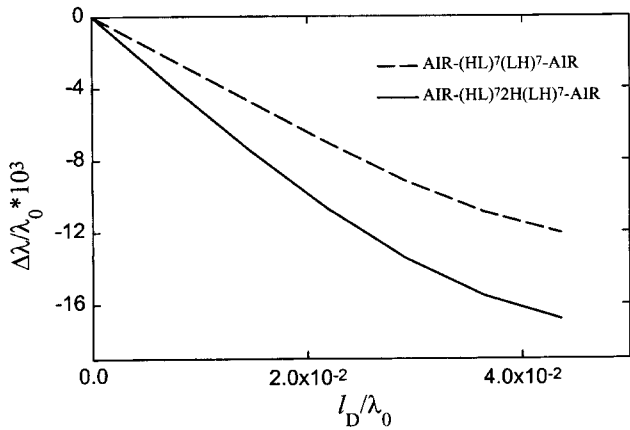


그림 4. [공기-(HL)⁷H²(LH)⁷-공기] 구조 및 [공기(HL)⁷(LH)⁷-공기] 구조의 Fabry-Perot형 여과막의 층간확산으로 인한 최대 투과파장의 변화의 비교($n_H=2.35, n_L=1.46$).

난다. 이 여과막의 간격층(spacer)은 고굴절 물질층(2H)인데 확산두께가 커질 수록 최대 투과파장은 짧은 파장쪽으로 이동한다. 간격층이 저굴절 물질층(2L)으로 되어 있을 때에도 마찬가지로, 그림 3에서 보는 바와 같이 확산두께의 증가에 따라 최대 투과파장이 짧은 파장쪽으로 이동한다. 이러한 현상은 층간확산시 고굴절 물질층은 효과적인 두께가 얇아지고 저굴절 물질층은 효과적인 두께가 두꺼워지는 것으로 해석된다.^[14,15] 그림 4에서는 간격층이 고굴절 물질층 및 저굴절 물질층의 경우 확산두께 l_D 에 따라 최대 투과파장의 변화를 보여주고 있다. 간격층이 고굴절 물질층(2H)으로 되어 있을 때 저굴절 물질층(2L)으로 되어 있을 때보다 최대 투과파장의 변화가 더 크게 나타났다.

그림 5 및 그림 6은 파장 4700-6500 Å 영역에서 전반사경의 반사 스펙트럼을 계산한 결과이다. 그림 5에 해당하는 전반사경은 유리 기판 위에 $n_H=2.35, n_L=1.46$ 인 증착물질을 $\lambda/4$ 의 광학 두께만큼 교대로 41층 (공기-(HL)²⁰H-유리)을, 그림 6의 전반사경은 81층 (공기-(HL)⁴⁰H-유리)을 증착한 것이다.

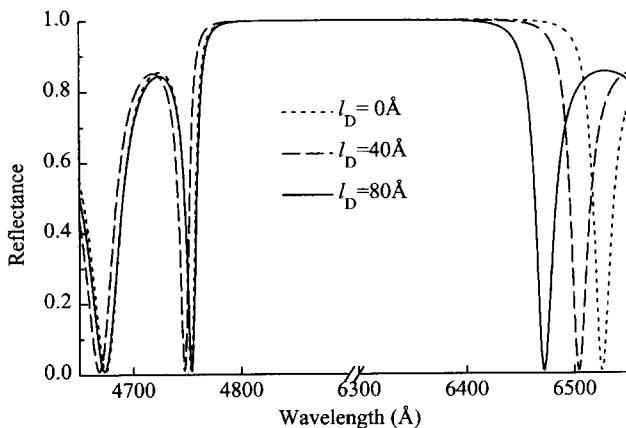


그림 5. 구조 [공기-(HL)⁴⁰H-유리]의 전반사경의 반사 스펙트럼($n_H=2.35, n_L=1.46, n_s=1.52$). 1) 점선: 층간확산이 없을 때, 2) 대시선: 확산두께(l_D)가 40Å일 때, 3) 실선: 확산두께(l_D)가 80 Å일 때.

본 논문에서 사용한 공기와 유리의 굴절률은 각각 $n_0=1.0$ 및 $n_s=1.52$ 이다. 그림 5 및 그림 6에서 높은 반사율을 갖는 파장 영역(4900-6300 Å)은 편의상 생략하였다. 확산된 반사경의 스펙트럼과 확산이 없는 이상적인 전반사경의 스펙트럼에 차이가 있는데 확산두께가 클 수록 전반적인 스펙트럼의 대역폭이 줄어드는 결과가 되었다. 특히 스펙트럼의 단파장쪽은 거의 변동이 없으나 장파장쪽은 확산두께에 비례하여 왼쪽(단파장쪽)으로 이동하고 있다. 따라서 전반사경에 대하여 확산이 미치는 효과는 반사 스펙트럼의 중심을 진동수가 높은 영역으로 이동시키는 것임을 알 수 있다. 이러한 효과는 투과 주파수 대역이 단파장쪽으로 이동한 Fabry-Perot형 여과막의 경우와 유사하다.

그림 7, 8, 9 및 10에서 여러가지 반사방지막에 대하여 굴절률 혼합법칙 식 (12)에 확산으로 인한 밀도함수 식 (9) 및 식 (10)을 적용할 때 확산두께($l_D = 2\sqrt{D}t$)가 0, 40, 및 80 Å일 경우 반사율 스펙트럼을 계산해 보았다. 각 층간 확산층의 굴절률 분포는 두 인접한 물질층의 굴절률 확산두께에 따라 다르지만 그 모양은 그림 1과 비슷하다. 그림 7은 2층[공기-L(2H)-유리]으로 된 반사방지막의 반사율 스펙트럼인데 L과 H의 반사율은 각각 $n_L=1.38$ 및 $n_H=1.90$ 이다. 그림 8은 3층 [공기-(0.9L) (1.436H) (0.608K)-유리]의 반사방지막에 대한 스펙트럼인데 L, H 및 K는 각각 굴절률이 1.38, 2.1 및 1.8이고 4분파의 광학적 두께를 갖는 층을 말하며, 여기에서 L과 H, H와 K사이의 각 경계면에서 확산된 경우를 계산하였다.

그림 9는 4층[공기-LHK(2L)-유리]의 반사 방지막에 대한 계산 스펙트럼이며 여기서 L, H와 K는 각각 굴절률이 $n_L=1.38, n_H=1.905, n_K=1.76$ 인 4분파 광학두께($0.25\lambda_0$)의 물질층을 뜻한다. L, H, K와 L 사이의 3개의 경계면에서 생기는 층간확산을 계산에 포함시켰다. 또한 반사율이 작고 대역폭이 큰 5층의 반사방지막 [공기-(1.1892L) (0.5008H) (0.4976L) (0.3496H) (2.2388L)-유리]이 층간 확산되었을 때 그것의 반사 스펙트럼을 보인 것인데 H 및 L의 굴절률은 각각 $n_H=2.30$ 및 $n_L=1.38$ 이다.

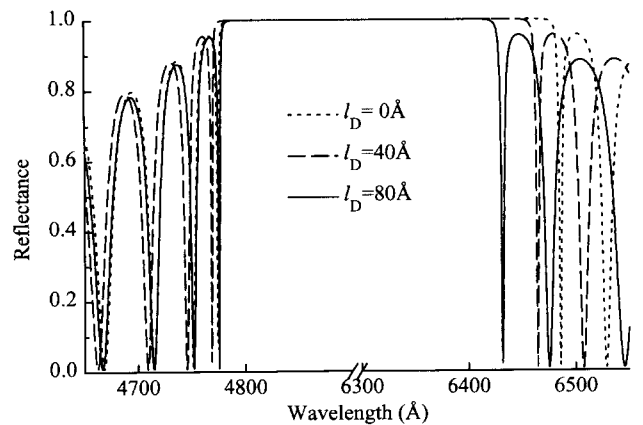


그림 6. 구조 [공기-(HL)⁸⁰H-유리]의 전반사경의 반사 스펙트럼($n_H=2.35, n_L=1.46, n_s=1.52$). 1) 점선: 층간확산이 없을 때, 2) 대시선: 확산두께(l_D)가 40Å일 때, 3) 실선: 확산두께(l_D)가 80Å일 때.

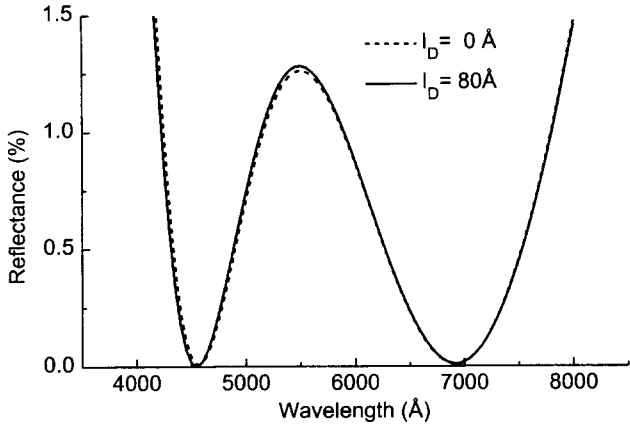


그림 7. 구조[공기-L(2H)-유리]를 갖는 반사방지막의 반사율 스펙트럼($n_L=1.38$, $n_H=1.90$, $n_s=1.52$). 1) 점선: 증간확산이 없을 때, 2) 실선: 확산두께(l_D)가 80Å일 때.

증간확산에 의해 반사방지막 대역의 범위는 크게 변하지 않지만 층수가 많아질 수록 그 대역에서 반사율의 변화폭이 커지며 악화되고 있는 것으로 관찰된다. 실제로 제작한 반사방지막의 악화가 이러한 반사율 형태일 때는 증간확산의 효과로 해석할 수 있을 것이다.

V. 논의 및 결론

두 물질층 사이에서 확산은 미시적으로 분자들 사이의 상호관계, 분자크기, 온도, 밀도 및 확산시간등 여러가지 인자에 의존되며, 그 과정이 복잡하다. 이 연구에서는 이러한 미시적인 현상을 모형화하여 거시적으로 1차원적 확산방정식으로부터 증간확산을 분석하였다. 정확하게 확산방정식의 해를 구하여 미시적인 현상들을 하나의 매개변수인 확산두께에 포함시켰다. 광박막용 유전물질 사이의 확산계수 D 에 대한 측정 데이터는 거의 알려지지 않았고 D 는 물질과 증착조건에 따라 상당히 다를 것으로 추정된다. 보통 증착물질의 증발온도는

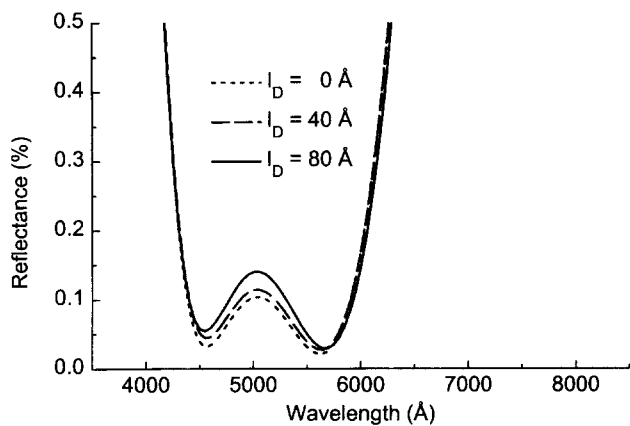


그림 8. 구조[공기-(0.9L) (1.4364 H) (0.608 K)-유리]를 갖는 반사방지막의 반사율 스펙트럼($n_L=1.38$, $n_H=2.10$, $n_K=1.80$, $n_s=1.52$). 1) 점선: 증간확산이 없을 때, 2) 대시선: 확산두께(l_D)가 40Å일 때, 3) 실선: 확산두께(l_D)가 80Å일 때.

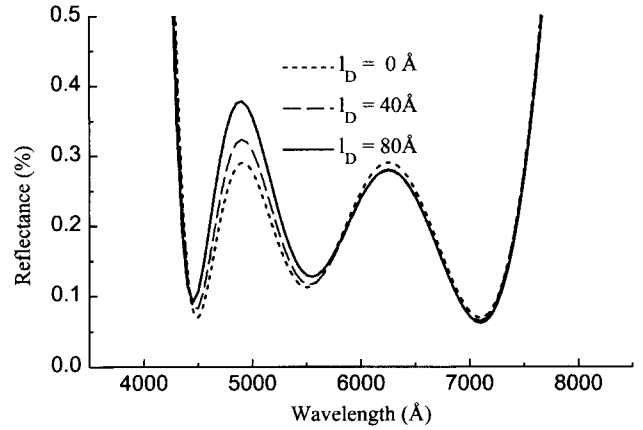


그림 9. 구조[공기-LHK(2L)-유리]를 갖는 반사방지막의 반사율 스펙트럼($n_L=1.38$, $n_H=1.905$, $n_K=1.76$, $n_s=1.52$). 1) 점선: 증간확산이 없을 때, 2) 대시선: 확산두께(l_D)가 40Å일 때, 3) 실선: 확산두께(l_D)가 80Å일 때.

1000~3000°C 사이에 있으며 기판의 온도는 300°C 이상이다. 증발된 물질이 이미 증착된 다른 물질층을 때리며 새 증착층을 형성할 때 온도가 500~1000°C로 가정하자. 온도 750°C에서 SiO_2 에 Al^{3+} , Fe^{3+} 및 Ni^{2+} 이온의 확산계수는 대략 $10^{-17} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ 정도인데,^[14,21] 증착시간은 3600 s로 잡을 경우 확산두께는 40 Å 정도가 된다. 이 연구에서는 확산두께를 80 Å까지 변화시켜 가며 광학적 효과를 분석할 수 있었다.

증간확산으로 인하여 광박막의 굴절률은 균일하지 못하고 연속적으로 변하게 되는데 광박막의 반사율은 비선형 미분방정식 (13)을 수치적으로 풀어 계산할 수 있다. 부분구조가 여러번 반복되는 다층박막 전체에 대하여 식 (13)을 푸는 것은 z 의 범위가 크기 때문에 계산시간이 많이 소모된다. 따라서 주기적인 구조를 가진 다층박막의 계산시간을 줄이기 위해 한 주기에 대해 계산한 반사계수로부터 그 주기의 특성행렬을 구한 후 해당되는 행렬곱을 반복함으로써 전체 광박막의

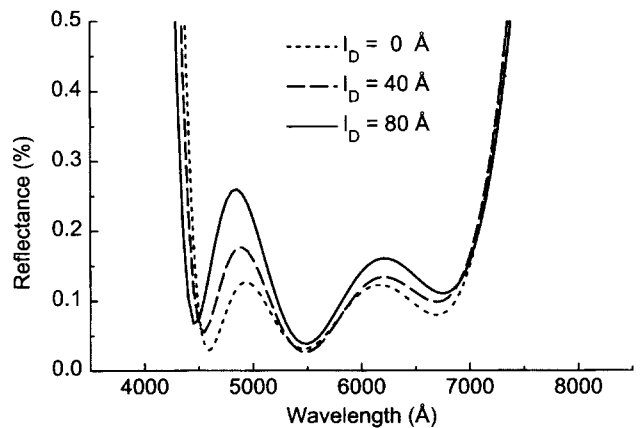


그림 10. 구조[공기-(1.1892L) (0.5008H) (0.4976L) (0.2388L)-유리]를 갖는 반사방지막의 반사율 스펙트럼($n_L=1.35$, $n_H=2.30$, $n_s=1.52$). 1) 점선: 증간확산이 없을 때, 2) 대시선: 확산두께(l_D)가 40Å일 때, 3) 실선: 확산두께(l_D)가 80Å일 때.

특성을 계산할 수 있었다. 이 때 하나의 부분구조에 대한 굴절분포 및 그것의 특성행렬을 구하는 시간이 소모되는 대부분의 계산시간이며 행렬곱 및 전체 박막의 특성계산은 빠른 시간안에 얻어진다. 그러므로 이 연구에서 제시하는 계산방법은 굴절률이 연속적으로 변화하고 주기적인 다른 형태의 다층박막에 대한 응용에도 편리할 것이다.

층간확산은 Fabry-Perot형 여과막에서 설계시 목표로 했던 파장과 정확히 일치해야 하는 최대 투과파장의 위치를 이동시키는 효과를 주었다. 그림 2, 3 및 4에서 보여주는 바와 같이 층간확산이 커질 수록 최대 투과파장이 짧은 파장쪽으로 현저히 이동하였다. 그림 2와 3에서는 잘 나타나지는 않지만 실제적인 계산에 의하면 층간확산은 확산두께(l_d)가 두꺼울 수록 Fabry-Perot 여과막의 투과띠의 폭을 넓게 하는 것을 관찰할 수 있었다.^[4] 한편 그림 5와 그림 6에서 보는 바와 같이 전반사경의 반사 대역폭이 반사경의 층수에는 별로 관계없이 층간확산으로 인하여 줄어든다. 대역폭의 양쪽 경계선을 비교해 볼 때 짧은 파장영역에서는 경계선의 변화가 거의 없으나 긴 파장영역에서는 경계선이 왼쪽(단파장쪽)으로 이동하였다.

저반사율의 영역을 넓히고 그 영역의 반사율을 낮게 하는데 반사방지막 설계의 목표가 있는 데 일반적으로 이것을 위하여 반사방지막의 층수를 늘린다. 이 연구에서는 층간확산으로 인하여 여러층의 반사방지막의 특성을 계산하였다. 그림 7, 8, 9와 10에서 보는 바와 같이 층수가 증가함에 따라 저반사율 영역의 최대값이 더욱 커져서 특성이 악화되는 것을 볼 수 있다. 결론적으로 이 연구에서 굴절률이 여러 주기를 갖고 연속적으로 변하는 다층박막의 특성계산을 위한 유용한 방법을 제시하였으며 층간확산에 의한 효과를 계산하는데 이 방법을 이용하였다. 이 계산 방법은 신뢰성이 있었고 여러가지 광다층박막에 대하여 미치는 부정적인 영향을 각각 정량적으로 분석할 수 있었다.

참고문헌

[1] E. Hecht, *Optics*, 2nd Ed. (Addison-Wesley, Massachusetts, 1987), chap. 9.

- [2] W. A. Faber, P. W. Kruse, and W. D. Saur, *J. Opt. Soc. Am.* **51**, 115 (1961).
- [3] P. H. Berning, *J. Opt. Soc. Am.* **52**, 431 (1962).
- [4] P. B. Clapham and M. C. Hutley, *Opt. Acta* **29**, 993 (1973).
- [5] M. J. Minot, *J. Opt. Soc. Am.* **66** 515 (1976); *J. Opt. Soc. Am.* **67** 1046 (1977).
- [6] J. C. Monga, *J. Modern Optics* **36**, 381 (1989); *J. C. Monga, Appl. Opt.* **31**, 546 (1992).
- [7] A.V. Tikhonravov and J.A. Kobrowolski, *Appl. Opt.* **32**, 4265 (1993).
- [8] M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics*, 5th Ed. (Pergamon Press, Oxford, 1975) pp. 36-60.
- [9] H. A. Macleod, *Thin-Film Optical Filters*, 2nd Ed. (Macmillan Publishing Co., New York, 1986).
- [10] O. S. Heavens, *J. Opt. Soc. Am.* **44**, 371 (1954).
- [11] D. H. Rank and H. E. Bennett, *J. Opt. Soc. Am.* **45**, 69 (1955).
- [12] J. V. Ramsay and P. E. Ciddor, *Appl. Opt.* **6**, 2003 (1967).
- [13] D. J. Hemingway and P. H. Lissberger, *Opt. Acta* **20**, 85 (1973).
- [14] Y. J. Lee, J. H. Lee and Y. S. Kim, *J. Kor. Phys. Soc.* **30**, 550 (1997).
- [15] Y. J. Lee, S. I. Park, to be Published.
- [16] M. Harris, H. A. Macleod, and S. Oura, *Thin Solid Films* **30**, 550 (1979).
- [17] L. R. Walker and N. Wax, *J. Appl. Phys.* **17**, 1043 (1946).
- [18] W. Kofink, *Ann. Physik* **1**, 119 (1947).
- [19] Y. J. Lee, J. H. Lee and Y. S. Kim, *J. Kor. Phys. Soc.* **27**, 625 (1994).
- [20] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran*, 2nd ed. (Cambridge University Press, 1992), Chap. 16.
- [21] D. Gupta and P. S. Ho, *Diffusion Phenomena in Thin Film and Microelectronic Materials* (Noyes Publication, New Jersey, 1988) p. 218, and references therein.

Interdiffusion effects in optical multilayer thinfilms

Y. J. Lee and Y. S. Kim

Department of Physics, Dankook University, Cheonan 330-714, Korea

(Recived April 2, 1998, Revised manuscript received September 22, 1998)

We have studied the optical effects in dielectric multilayer due to the interdiffusion formed during the deposition process. We suggest a numerical method to calculate the optical properties of periodical multilayer thin-films with gradient-index profiles. Using this method the spectral transmittance and reflectance were obtained for Fabry-Perot type filters, broad-band total reflectors and antireflection filters with interdiffusion layers. Interdiffusion reduced the spectral band width of high reflectance in total reflectors, and deteriorated the characteristics of multilayer AR-coatings leading to a large variation of reflectance if the number of the layers is large.