

**Національна академія наук України  
Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова**

**МіЩА Олександр Володимирович**

**УДК 519.87; 535.345.67**

**МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОПТИМІЗАЦІЯ СПЕКТРАЛЬНИХ  
КОЕФІЦІЄНТІВ ШАРУВАТИХ ОПТИЧНИХ СИСТЕМ  
З НЕОДНОРІДНИМИ ГРАНИЦЯМИ**

**01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи**

**Автореферат  
дисертації на здобуття наукового ступеня  
доктора технічних наук**

**Київ – 2021**

Дисертацією є рукопис.

Дисертаційна робота виконана на кафедрі інформаційних управляючих систем та технологій ДВНЗ “Ужгородський національний університет” Міністерства освіти і науки України.

**Науковий консультант:** доктор фізико-математичних наук,  
старший науковий співробітник  
**Стецюк Петро Іванович,**  
Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України,  
завідувач відділу методів негладкої оптимізації

**Офіційні опоненти:** доктор технічних наук, професор,  
член-кореспондент НАН України  
**Крючин Андрій Андрійович,**  
Інститут проблем реєстрації інформації НАН України,  
заступник директора з наукової роботи;

доктор технічних наук, професор  
**Гребеннік Ігор Валерійович,**  
Харківський національний університет  
радіоелектроніки МОН України,  
завідувач кафедри системотехніки;

доктор фізико-математичних наук,  
старший науковий співробітник  
**Стронський Олександр Володимирович,**  
Інститут фізики напівпровідників  
ім. В. Є. Лашкарьова НАН України,  
завідувач відділу фізики оптоелектронних приладів.

Захист відбудеться “ 27 ” квітня 2021 р. о 11:00 годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 26.194.02 в Інституті кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України за адресою: 03187, Київ-187, проспект Академіка Глушкова, 40.

З дисертацією можна ознайомитися в науково-технічному архіві Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України за адресою: 03187, Київ-187, проспект Академіка Глушкова, 40.

Автореферат розісланий “ 26 ” березня 2021 р.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради



О.А. ВАГІС

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність роботи.** В останні роки досягнуто значного прогресу в області технологій нанесення багатошарових оптичних покриттів. З огляду на це зростають вимоги до точності моделей, що використовуються для аналізу властивостей шаруватих структур. Істотно зросла також якість експериментального обладнання, що використовується для дослідження параметрів окремих тонких шарів. У зв'язку з цим є реальна можливість підвищення точності визначення оптичних параметрів шарів, у тому числі частково та повністю неоднорідних, що вимагає використання більш досконалих, ніж раніше, математичних моделей. Часткові неоднорідності показника заломлення у високозаломлюючих та низькозаломлюючих шарах нового класу плівкоутворюючих матеріалів для оптики покриттів і халькогенідної фотоніки, одночасна зміна показників заломлення і товщини таких плівок при опроміненні можуть впливати на спектри пропускання одиночних шарів і багатошарових структур як при нормальному падінні світлових пучків, так і при падінні світла під кутом до поверхні оптичної структури. Для ряду задач в оптоелектроніці потрібні оптичні структури, які мають високі коефіцієнти відбивання в заданій спектральній області і в усьому діапазоні кутів падіння для довільної поляризації. Тому виникла необхідність у нових моделях, у яких потрібно врахувати неоднорідність меж між тонкими шарами і наявність приповерхневого шару, фотовидовження і зміну показника заломлення в опромінених плівках для халькогенідної фотоніки. При цьому нові моделі повинні забезпечувати можливість побудови ефективних алгоритмів, призначених для чисельного аналізу такого впливу.

Одне з основних завдань дисертаційної роботи – моделювання оптичних покриттів з необхідними спектральними характеристиками – базується на задачах оптимізації оціночних функцій (функцій якості) і стійких до помилок оптичних параметрах шарів, що неминучі в процесі виготовлення. При виготовленні покриття не завжди вдається точно отримати обчислені значення показників заломлення і товщини шарів. Тому важливо оцінити, при якому розкиді цих значень характеристики покриття виявляються нечутливими або малочутливими до відхилень параметрів шарів від номінальних. Уведення критеріїв стійкості і їх порівняльний аналіз створить можливість їх практичного застосування при виготовленні структур. Для спрощення завдання, як правило, вважають, що оптична структура складається зі слабопоглинаючих шарів.

Загальні принципи розрахунку оптичних властивостей багатошарових інтерференційних структур з ідеальними межами в Україні були закладені М.П. Лисицею, Ю.О. Перваком, І.В. Фекешгазі. Чутливість до фотоіндукованих змін та мас-транспорт в одиночних плівках та наноструктурах для халькогенідної фотоніки вперше досліджено й описано в роботах А.А. Крючина, В.М. Рубіша, О.В. Стронського та ін. У провідних зарубіжних наукових журналах періодично виходять роботи з оптичним покриттів різних шкіл, необхідно відзначити праці П.Г. Карда, Ш.А. Фурмана, П.П. Яковлева, А. MacLeod, J.D. Rancourt, R.R. Willey та ін. Однак розрахунки оптичних коефіцієнтів для частково неоднорідних плівок із

загальних принципів виявилися недостатніми. Найбільш вагомими результатами в цьому напрямку одержані О.В. Тихонравовим, М.К. Трубецьковим, J.A. Dobrowolski, R. Jacobsson, B.T. Sullivan, Zhang Jinlong, Liu Yongli та ін. Бібліографічний список робіт вищеперерахованих авторів наведений у дисертації.

Таким чином, перелічений комплекс актуальних проблем стимулює вироблення нових підходів до їх вирішення, а аналіз і узагальнення впливу неоднорідностей в оптичних структурах, зокрема й індукованих світлом, дасть можливість розробити рекомендації для побудови оптимальних алгоритмів розв'язання задач діагностики й управління параметрами і станом шарувато-неоднорідних середовищ.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Дисертаційна робота виконувалась на кафедрі інформаційних управляючих систем та технологій ДВНЗ "Ужгородський національний університет" за такими темами:

1. грант Президента України для обдарованої молоді «Синтез багатокомпонентних та неоднорідних плівкових систем та їх впровадження для контролю газів, що забруднюють атмосферу» (розпорядження Президента України від 12.01.2004 р. №6/2004-рп), 2004-2006 рр.;

2. грант Президента України для молодих вчених, тема: «Нанорозмірне моделювання структури та характеристик однорідних та неоднорідних променевостійких оптичних покриттів для високозаломлюючих та наноструктурованих матеріалів» (розпорядження Президента України від 14.12.2005 р. №1279/2005-рп), 2006 р.;

3. проєкт МОН України ДБ-702 «Першопринципні розрахунки та спектроскопічні дослідження поліморфних перетворень у наноструктурованих некристалічних напівпровідниках при формуванні елементів нанооптики» (номер держреєстрації 0109U000860), 2009-2011 рр.;

4. українсько-турецький проєкт науково-технічного співробітництва М85-2010 «Першопринципні розрахунки, ІЧ та Раман дослідження формування високозаломлюючих наноструктурованих аморфних шарів для розробки інтерференційних фільтрів контролю газів, забруднюючих атмосферу» (номер держреєстрації 0110U007287), 2010-2011 рр.;

5. проєкт МОН України ДБ-842 «Процеси формування моношарів та нанофазне структурування в склоподібній матриці графеноподібних двохвимірних халькогенідів миш'яку та германію» (номер держреєстрації 0115U001094), 2013-2015 рр.;

6. проєкт МОН України ДБ-843 «Емісійна спектроскопія стимульованих поліморфних перетворень і приповерхневого окиснення в матеріалах халькогенідної фотоніки» (номер держреєстрації 0115U001095), 2015-2017 рр.;

7. науково-дослідна робота «Моделювання та оптимізація складних об'єктів, які мають шарувату структуру» (номер держреєстрації 115U001907), 2017-2019 рр.

У проєктах 1, 2 та 7 автор дисертації був керівником, а в проєктах 3-6 був виконавцем.

**Мета та завдання дослідження.** Метою роботи є моделювання властивостей та оптимізація спектральних характеристик оптичних шарувато-неоднорідних структур, дослідження їх стійкості до технологічних похибок.

Для досягнення вказаної мети необхідно було вирішити такі основні завдання:

– розробка узагальненої моделі оптичних структур з неоднорідністю на межах розділу із довільним розподілом показника заломлення та математичного методу аналізу формування їх хвильових властивостей при взаємодії з електромагнітним випромінюванням у різних ділянках спектру;

– знаходження й аналіз зв'язку структурних параметрів шаруватих структур з неоднорідністю на межах розділу при зміні кута падіння;

– узагальнення отриманих результатів і розробка нових алгоритмів синтезу та аналізу шарувато-неоднорідних структур;

– проведення досліджень стійкості аналітичних результатів та вироблення конкретних рекомендацій для їх практичної реалізації.

*Об'єктом дослідження* є явища взаємодії електромагнітного випромінювання з оптичними шарувато-неоднорідними структурами та світлочутливими оптичними середовищами.

*Предметом дослідження* є моделювання властивостей шаруватих структур з неоднорідністю меж між тонкими шарами. Враховуються довільний кут падіння світла, нанодефекти, дисперсія показника заломлення, визначається стійкість до технологічних похибок.

*Методи дослідження.* Для обчислення спектральних характеристик використовувався матричний метод Абеле.

Для визначення оптимальних параметрів оптичних структур використовувалися методи: Хука-Дживса, Розенброка, найшвидшого спуску, спряжених градієнтів (Флетчера-Рівса, Поллака-Рібб'єра), змінної метрики (Давідона-Флетчера-Пауелла, Гольдфарба, Фіакко-Мак-Кормика, Грінстадта),  $g$ -алгоритми Шора (у випадку, коли цільова функція є негладкою).

При моделюванні дисперсії показника заломлення використано модель Зельмеєра.

Для дослідження стійкості спектральних характеристик використовувався метод Монте-Карло.

**Наукову новизну отриманих результатів** визначають нові результати, вперше отримані в процесі виконання досліджень:

1. Запропоновано узагальнену модель шаруватих структур з неоднорідностями на межах розділу. Побудовано математичні моделі для різних варіантів неоднорідностей між високозаломлюючим та низькозаломлюючим шарами оптичних фільтрів.
2. Проведено аналіз впливу параметрів шарувато-неоднорідних середовищ на характеристики вузькосмугових, відрізаючих та широкосмугових оптичних фільтрів; отримані аналітичні співвідношення, що дозволяють знаходити оптимальні розв'язки задач визначення стану та параметрів шарувато-неоднорідних середовищ.
3. Досліджено динаміку зміни просторово-поляризаційних параметрів для

- вузькосмугових, відрізаючих та широкосмугових оптичних фільтрів з неоднорідностями на межах розділу при падінні світла під кутом.
4. Промодельовано та досліджено вплив оксидації на спектральні характеристики некристалічної плівки сульфїду миш'яка.
  5. Запропоновано модель структури дефектного шару для оцінок впливу параметрів дефектів у плівках на рівень пропускання світла, за якою встановлено взаємозв'язок між геометричними та оптичними товщинами суміжних шарів залежно від природи дефектів, їх розмірів і положень щодо границь розділу дефектного шару й суміжних середовищ.
  6. Проведено дослідження впливу технологічних похибок з нормальним законом розподілу на спектральні характеристики широкосмугових фільтрів за допомогою методу Монте-Карло.
  7. Розроблено методи розв'язання задач синтезу оптичних покриттів, які базуються на градієнтних та квазіньютонівських методах, r-алгоритмах Шора, методах нульового порядку. Досліджено їх особливості, значну увагу приділено вибору початкових наближень.
  8. Запропоновано двоетапний метод синтезу оптичних фільтрів, який дозволяє враховувати часткову неоднорідність, дисперсію показника заломлення, мас-транспорт, нанодефекти, оксидацію та стійкість до технологічних похибок.
  9. Запропоновано підходи, які дозволяють пришвидшити знаходження розв'язків у задачах синтезу оптичних фільтрів: використання аналітичної похідної (пришвидшений варіант), табуляція значень тригонометричних функцій, швидке множення матриць.
  10. Запропоноване нове розв'язання задачі розпізнавання профілю показника заломлення плівки після опромінення, яке базується на розроблених моделях шаруватих структур та методах розв'язання задач синтезу оптичних покриттів.

**Практичне значення отриманих результатів.** Сукупність отриманих у дисертації результатів дозволяє ставити і розв'язувати практично важливі задачі з дослідження та конструювання оптичних шаруватих покриттів. Розроблені підходи, числово-аналітичні методики і програми дають змогу робити діагностику та оптимізувати характеристики оптичних покриттів при виготовленні оптичних елементів халькогенідної фотоніки та створенні аморфних надґраток на основі халькогенідних плівок (акт впровадження від 02 березня 2020 року, Інститут електронної фізики НАНУ).

Моделі, алгоритми, методи та програмне забезпечення впроваджені в навчальний процес факультету інформаційних технологій ДВНЗ «Ужгородський національний університет». Зокрема, при підготовці навчально-методичних комплексів з дисциплін «Комп'ютерне моделювання», «Сучасні методи розв'язання складних оптимізаційних задач», «Моделювання систем» та «Пакети прикладних програм» спеціальностей 121 «Інженерія програмного забезпечення» та 122 «Комп'ютерні науки». Також результати досліджень використовуються при виконанні комплексу курсових, дипломних робіт здобувачами освітніх ступенів «бакалавр» та «магістр» (акт впровадження від 24 листопада 2020 року).

**Особистий внесок здобувача.** Основні наукові, теоретичні та практичні результати отримані автором самостійно і виносяться на захист вперше. У працях, опублікованих у співавторстві, дисертанту належать такі результати: у колективній монографії [18] – розділ 5, [1, 5] – алгоритмічне та програмне забезпечення, [2, 3, 6, 54, 60, 62, 65] – розробка та дослідження математичної моделі, [4, 26] – розробка математичного, алгоритмічного та програмного забезпечення, проведення обчислювального експерименту, [7, 25, 28-32, 47] – розробка математичної моделі, розробка програмного забезпечення, проведення обчислювального експерименту, [8 – 13] – постановка задачі, розробка математичної моделі, [16, 24, 55, 56, 61, 64] – постановка задачі, розробка математичної моделі, загальна концепція статті, [17, 63] – алгоритмічне забезпечення, [14, 15, 21, 23] – розробка математичної моделі, розробка програмного забезпечення, [19, 23, 46, 50, 51, 53] – розробка математичного та алгоритмічного забезпечення, [24] – швидке множення матриць, загальна концепція статті, [27, 34, 35, 36, 38, 41] – розробка математичної моделі, проведення експерименту, [33, 37, 39, 45, 48] – постановка задачі, розробка математичної моделі та алгоритму розв’язку, [42, 58] – постановка задачі, розробка математичної моделі, [44, 49, 52, 57, 59] – постановка задачі, розробка математичного та алгоритмічного забезпечення.

**Апробація результатів дисертації.** Основні результати роботи обговорювалися та доповідались на міжнародних конференціях: VIII World Multiconference on Systemics, Cybernetics and Informatics (Orlando, USA, 2004); Міжнародних школах-семінарах «Теорія прийняття рішень» (Ужгород, 2004, 2006, 2008, 2010, 2012, 2014, 2016); Fifth International Young Scientists Conference «Problems of Optics & High Technology Material Science SPO 2004» (Київ, 2004); Міжнародній конференції «Сучасне матеріалознавство: досягнення і проблеми MMS-2005» (Київ, 2005); Міжнародній науковій конференції «Актуальные проблемы физики твердого тела ФТТ-2005» (Мінськ, 2005); Third International Scientific Conference «Physical and. chemical principles of formation and modification of micro- and nanostructures» (Харків, 2009); II, III, V, VI Міжнародних конференціях «Modelare matematica, optimizare si tehnologii informationale» (Кишинев, 2010, 2012, 2016, 2018); I міжнародній науково-технічній конференції «Обчислювальний інтелект» (Черкаси, 2011); I Міжнародній науково-практичній конференції молодих науковців «Інформаційні технології як інноваційний шлях розвитку України у XXI столітті» (Ужгород, 2013); IX, XI International Conference on Applied Informatics (Eger, Hungary, 2014, 2020); Науково-професійній конференції «Nature science, the driving force of development» (Budapest, Hungary, 2014); IV Міжнародній самсонівській конференції (Київ, 2014); III Міжнародній практичній конференції «Напівпровідникові матеріали, інформаційні технології та фотовольтаїка» (Кременчук, 2014); VI Міжнародній науково-технічній конференції «Сенсорна електроніка та мікросистемні технології» (Одеса, 2014); Науково-професійній конференції «Advances in the natural science and engineering» (Budapest, Hungary, 2015); The 1th IEEE International Conference on Data Stream Mining & Processing (Львів, 2016); IV, V, VIII International research and practice conference «Nanotechnology and nanomaterials» (Львів, 2016, Чернівці, 2017, Львів, 2020); Міжнародній

конференції «Сучасна інформатика: проблеми, досягнення та перспективи розвитку», присвяченій 60-річчю заснування Інституту кібернетики ім. В.М.Глушкова НАН України (Київ, 2017).

**Публікації.** Основні результати дисертації опубліковані в 2 монографіях [18, 20], 22 статтях та 41 тезах конференцій. Серед них: 10 [1, 4, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 16, 17] опубліковано у наукових виданнях з Переліку фахових видань України, 10 [2, 3, 6, 8, 14, 19, 21, 22, 23, 24] опубліковано у періодичних наукових виданнях інших держав, які входять до Організації економічного співробітництва та розвитку та/або Європейського Союзу, серед них 6 [1, 2, 3, 7, 19, 23] включених до міжнародних наукометричних баз Scopus та Web of Science Core Collection. Робота [5] входить до Переліку фахових видань України з цієї спеціальності, але відповідає фізико-математичним наукам. Крім того, 41 роботу [25–65] опубліковано в збірниках матеріалів міжнародних і всеукраїнських наукових конференцій.

**Структура та обсяг дисертації.** Дисертація складається зі вступу, п'яти розділів, висновків, списку використаних джерел та додатків. Перелік використаних джерел нараховує 203 посилання. Загальний обсяг дисертації складає 296 сторінок. Основний текст викладено на 276 сторінках. Робота містить 96 рисунків та 46 таблиць.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

**У вступі** обґрунтовано актуальність дисертаційної роботи, сформульовано мету та завдання дослідження, визначені об'єкт та предмет дослідження, встановлено зв'язок з науковими програмами, сформульовано наукову новизну та практичне значення отриманих результатів, зазначено особистий внесок здобувача, наведено дані про апробацію результатів дисертаційних досліджень і публікації за матеріалами дисертації, подано короткий опис структури й обсягу дисертації.

**У першому розділі** наведено загальну інформацію про використання оптичних покриттів при створенні високотехнологічної продукції та про задачі, які при цьому виникають; описано методи розв'язання прямої задачі (задачі аналізу), коли за заданими параметрами багат шарового оптичного покриття потрібно визначити спектральні характеристики; наведено підходи до розв'язання оберненої задачі (задачі синтезу), коли потрібно визначити параметри покриття, які б відтворювали наперед задані характеристики; наведено необхідну інформацію про  $r$ -алгоритми, з метою подальшого їх застосування для розв'язання задачі синтезу оптичних покриттів (СОП).

**У підрозділі 1.1** проаналізовано сучасний стан проблеми. **У підрозділі 1.2** розглянуто рекурентний, адмітансний та матричний методи розв'язання задачі аналізу. **У підрозділі 1.3** розглянуто наявні аналітичні та чисельні методи розв'язання задачі СОП – діаграм Шустера, Карда, ефективних границь, еквівалентних меж, методи, що базуються на моделі фільтра Фабрі-П'єро, послідовного синтезу, перебору на сітці, «голчастого» синтезу та генетичні алгоритми. Відзначено особливості та недоліки кожного. Наведено загальну інформацію про такі оптимізаційні методи, як покоординатного спуску, випадкового (стохастичного) пошуку, нульового порядку та градієнтні. **У підрозділі 1.4** наведено



конспективний огляд  $r$ -алгоритмів Шора, які використовуються при розв'язанні задач СОП.

У другому розділі описано універсальну модель багатошарової структури, яка має неоднорідності на межах розділу. Розроблено математичні моделі для різних варіантів багатошарових структур із частковими неоднорідностями. Проведено моделювання впливу неоднорідностей на межах розділу для вузькосмугових, відрізаючих та широкосмугових оптичних систем. У підрозділі 2.1 описано фактори, які потрібно враховувати при математичному моделюванні спектральних характеристик оптичного шаруватого покриття, наведено види моделей з неоднорідностями на межах розділу та описано для них необхідний математичний апарат.

При розробці моделей для багатошарових оптичних систем виникає необхідність враховувати фактори, які невід'ємно пов'язані з їх виготовленням. Це часткова неоднорідність на межах розділу, дисперсія показника заломлення, мас-транспорт, нанодфекти та оксидация. Без врахування цих факторів (рис. 2.1) та врахування стійкості до технологічних похибок неможливо проєктувати та розробляти оптимальні моделі оптичного шаруватого покриття, які повинні задовольняти наперед задані характеристики.

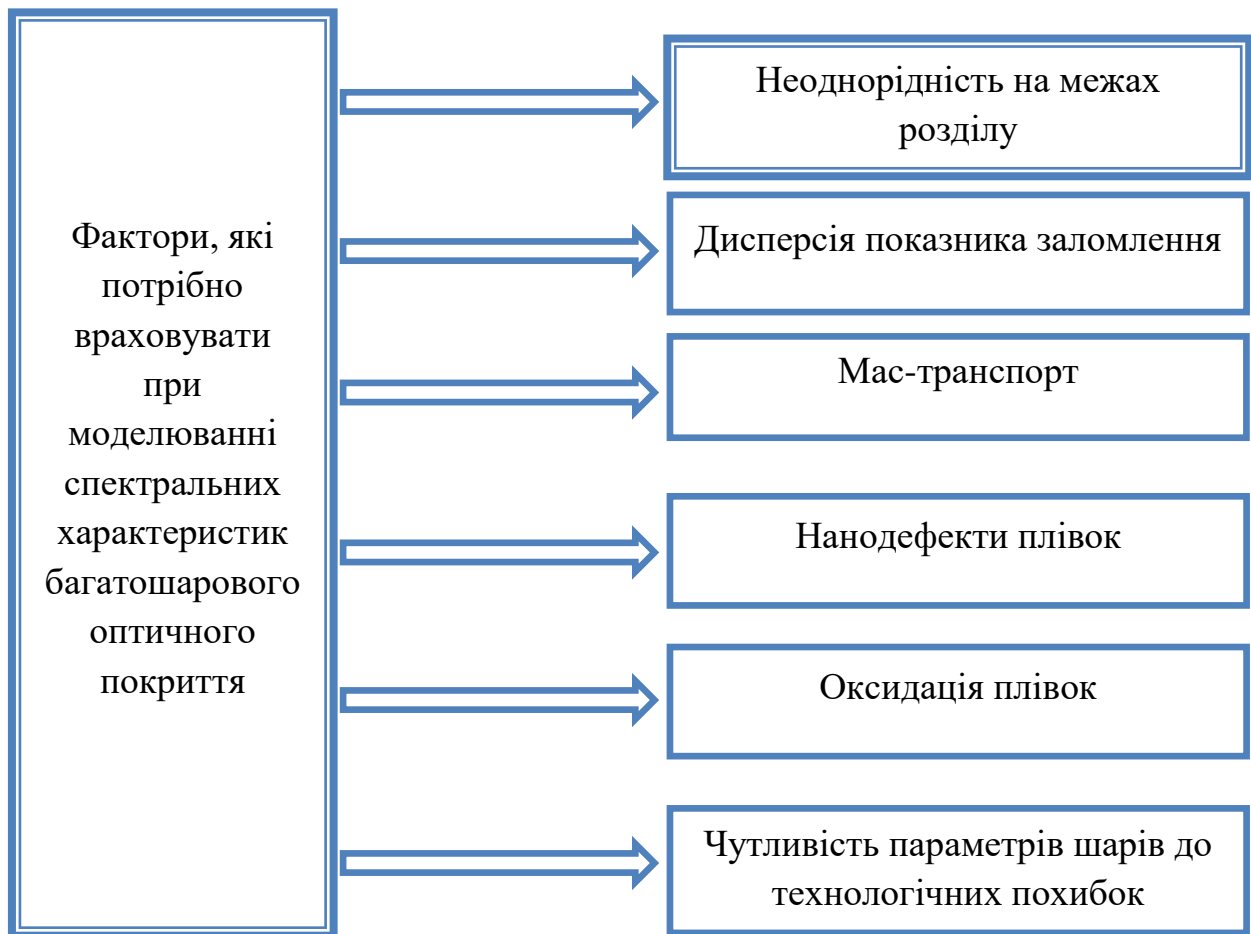


Рисунок 2.1. Фактори, які потрібно враховувати при побудові математичної моделі оптичного шаруватого покриття

Найчастіше при моделюванні спектральних характеристик багатошарових оптичних покриттів потрібно враховувати неоднорідність на межах розділу. У цьому підрозділі розглянуто різні моделі багатошарових структур із частковими неоднорідностями. Усіх їх можна поєднати в одну універсальну модель багатошарової оптичної структури, що має неоднорідності на межах розділу (рис. 2.2). Математичний апарат, необхідний для проведення моделювання спектральних характеристик, наведемо для кожної моделі окремо.

Оптичні товщини багатошарових оптичних систем прив'язані до довжини хвилі  $\lambda_0$ . Наприклад, «етвертьхвильовий шар» означає, що цей шар має оптичну товщину  $nd = \frac{\lambda_0}{4}$ , а «напівхвильовий шар» – має оптичну товщину  $nd = \frac{\lambda_0}{2}$ .

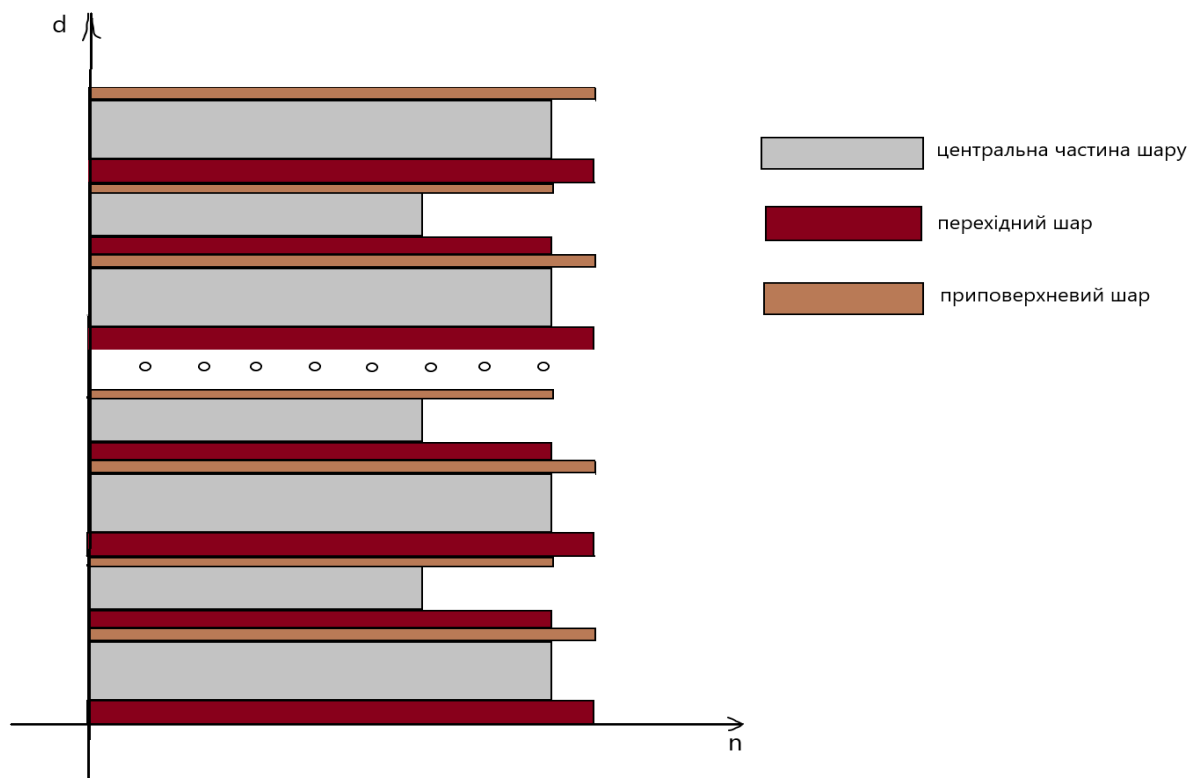
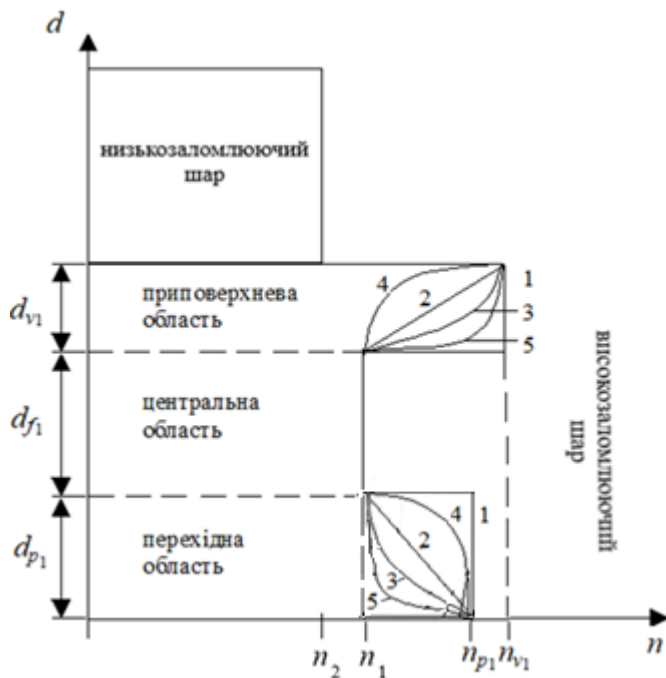


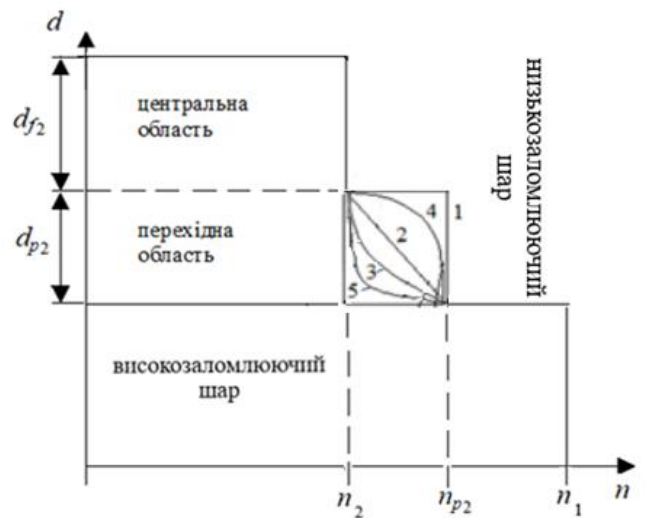
Рисунок 2.2. Універсальна модель багатошарової оптичної структури, що має неоднорідності на межах розділу

Розглянемо зв'язок робочої довжини хвилі  $\lambda_0$  з оптичними товщинами вузькосмугових, відрізаючих та широкосмугових оптичних фільтрів. Для вузькосмугових фільтрів типу S-BНВ..2В..ВНВ окіл робочої довжини хвилі  $\lambda_0$  буде вузьким діапазоном пропускання, а максимум пропускання буде досягатись при довжині хвилі  $\lambda_0$ . Значення В та Н означають, що це високо- та низькозаломлюючі шари і  $n_B d_B = n_H d_H = \frac{\lambda_0}{4}$ , позначення 2В означає, що цей шар має оптичну товщину, яка рівна  $n_B d_B = \frac{\lambda_0}{2}$ . Суміжний спектральний діапазон до околу робочої довжини хвилі  $\lambda_0$  для вузькосмугових фільтрів є діапазоном відбивання. Для відрізаючих фільтрів типу S-BНВ..ВНВ коефіцієнт пропускання при робочій довжині хвилі  $\lambda_0$  має мінімум. Для широкосмугових фільтрів типу S-2ВН2В..2ВН2В

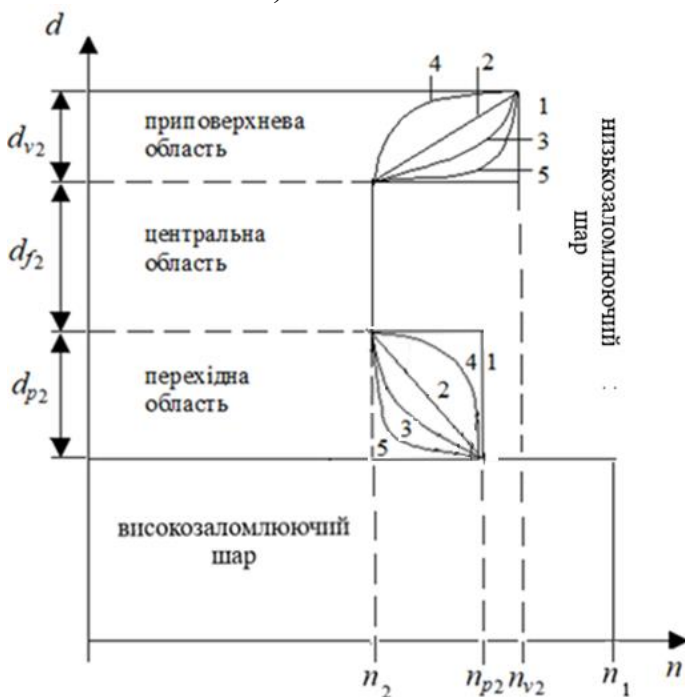
отримаємо широкий діапазон пропускання з максимумом при робочій довжині хвилі  $\lambda_0$ .



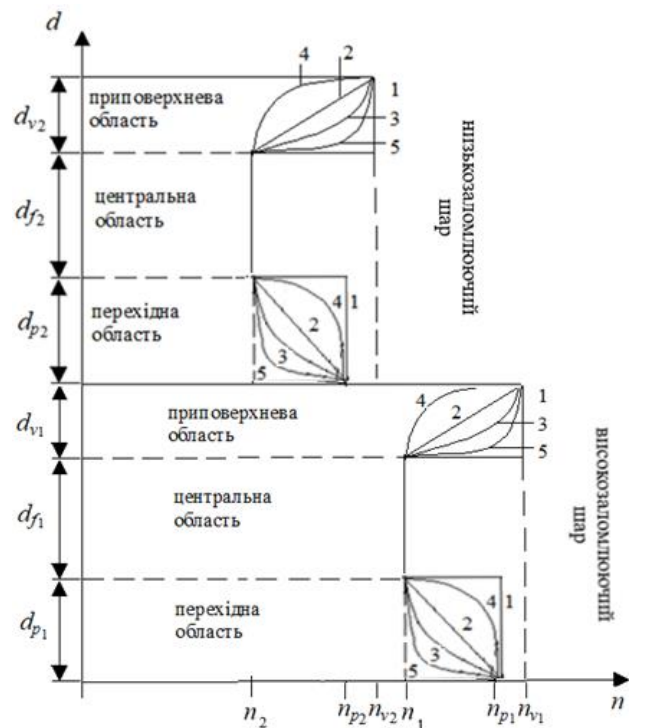
а) Модель 1



б) Модель 2



в) Модель 3



г) Модель 4

Рисунок 2.3. Моделі високозаломлюючого та низькозаломлюючого шарів, які мають неоднорідності на межі розділу з розподілами показника заломлення:

- 1 – ступінчастий; 2 – лінійний; 3 – квадратичний;
- 4 – логарифмічний; 5 – експоненціальний

Будемо моделювати неоднорідну область розбиття її на рівні за товщиною зони. Уведемо позначення:  $m_v$ ,  $m_p$  – кількість зон розбиття приповерхневої та

перехідної областей відповідно;  $nf$  – показник заломлення центральної частини плівки. У приповерхневій області показник заломлення буде змінюватись від  $nf$  до  $nv$ , а в перехідній області – від  $nf$  до  $np$  за певним законом розподілу.

Таблиця 2.1. Розглянуті розподіли показників заломлення неоднорідних областей

Розподіли	Показник заломлення $j$ -ої зони перехідної області, $np_j$	Показник заломлення $j$ -ої зони приповерхневої області, $nv_j$
Ступінчастий	$np$	$nv$
Лінійний	$nf + \frac{np - nf}{mp - 1}(j - 1)$	$nv - \frac{nv - nf}{mv - 1}(j - 1)$
Квадратичний	$nf + \frac{np - nf}{(mp - 1)^2}(j - 1)^2$	$nv - \frac{nv - nf}{(mv - 1)^2}(j - 1)^2$
Логарифмічний	$nf + \frac{np - nf}{\ln(mp)} \ln(j)$	$nv - \frac{nv - nf}{\ln(mv)} \ln(j)$
Експоненціальний	$nf + \frac{np - nf}{e^{mp-1} - 1}(e^{j-1} - 1)$	$nv - \frac{nv - nf}{e^{mv-1} - 1}(e^{j-1} - 1)$

Значення показника заломлення в перехідному шарі за законом  $n(z)$  буде змінюватись від  $nf$  до  $np$ , а в приповерхневому – від  $nv$  до  $nf$ . Геометрична товщина центральної частини плівки за наявності перехідної області буде визначатись за формулою

$$\hat{d}\left(nf, np, \frac{\lambda_0}{k}, dp\right) = \frac{1}{nf} \left( \frac{\lambda_0}{k} - \frac{dp}{mp} \cdot \sum_{j=1}^{mp} np_j \right), \quad (2.1)$$

а за наявності перехідної та приповерхневої областей

$$\tilde{d}\left(nf, nv, np, \frac{\lambda_0}{k}, dv, dp\right) = \frac{1}{nf} \left( \frac{\lambda_0}{k} - \frac{dp}{mp} \cdot \sum_{j=1}^{mp} np_j - \frac{dv}{mv} \cdot \sum_{j=1}^{mv} nv_j \right), \quad (2.2)$$

де  $dp$  і  $dv$  – геометричні товщини перехідної і приповерхневої областей відповідно;  $k=2$  – коли оптична товщина шару рівна  $\frac{\lambda_0}{2}$  і  $k=4$  – коли оптична товщина шару рівна  $\frac{\lambda_0}{4}$ ;  $nv_j$  і  $np_j$  – показники заломлення  $j$ -тої зони при розбитті приповерхневої і перехідної області відповідно (табл.2.1).

У цьому розділі будемо проводити дослідження впливу неоднорідностей на межах розділу для різних оптичних систем, вважаючи, що кут падіння збігається з нормаллю до площини падіння. Тоді характеристичну матрицю одного шару можна знаходити за формулою

$$M(n, d, \lambda) = \left\| \begin{array}{cc} \cos \frac{2\pi nd}{\lambda} & -\frac{i}{n} \cdot \sin \frac{2\pi nd}{\lambda} \\ -i \cdot n \cdot \sin \frac{2\pi nd}{\lambda} & \cos \frac{2\pi nd}{\lambda} \end{array} \right\|,$$

а характеристичні матриці приповерхневої та перехідної областей будуть мати вигляд

$$Mv(\lambda) = \prod_{j=0}^{mv-1} M\left(nv_j, \frac{dv}{mv}, \lambda\right), Mp(\lambda) = \prod_{j=0}^{mp-1} M\left(np_j, \frac{dp}{mp}, \lambda\right).$$

Відповідно, беручи це до уваги, а також використовуючи формули (2.1) та (2.2), можемо знайти характеристичну матрицю для шару, який має перехідну область

$$\widehat{M}\left(nf, np, \frac{\lambda_0}{k}, dp, \lambda\right) = M\left(nf, \hat{d}\left(nf, np, \frac{\lambda_0}{k}, dp\right), \lambda\right) \cdot \prod_{j=0}^{mp-1} M\left(np_j, \frac{dp}{mp}, \lambda\right). \quad (2.3)$$

Характеристична матриця для шару, який має приповерхневу та перехідну області

$$\begin{aligned} & \widetilde{M}\left(nf, nv, np, \frac{\lambda_0}{k}, dv, dp, \lambda\right) = \\ & = \prod_{j=0}^{mv-1} M\left(nv_j, \frac{dv}{mv}, \lambda\right) \cdot M\left(nf, \widetilde{d}\left(nf, nv, np, \frac{\lambda_0}{k}, dv, dp\right), \lambda\right) \\ & \cdot \prod_{j=0}^{mp-1} M\left(np_j, \frac{dp}{mp}, \lambda\right). \end{aligned} \quad (2.4)$$

Вузькосмуговий фільтр конструкції S-ВНВ..2В..ВНВ створюється з двох матеріалів – низькозаломлюючого та високозаломлюючого. Високозаломлюючий шар наноситься першим на підкладинку, тому позначимо його через  $n_1$ , а показник заломлення низькозаломлюючого шару – через  $n_2$ . Формули (2.3) та (2.4) будемо використовувати при знаходженні загальної характеристичної матриці для вузькосмугового, відрізаючого та ширококутового фільтрів. Спочатку знайдемо характеристичну матрицю  $(2m + 1)$ -шарового вузькосмугового фільтра для кожної з моделей:

– модель 1 (рис. 2.3а)

$$\begin{aligned} \bar{M}(n_1, n_2, nv, np, dv, dp, \lambda) & = \\ & = \prod_{j=1}^m \left( \widetilde{M}\left(n_1, nv, np, \frac{\lambda_0}{4}, dv, dp, \lambda\right) \cdot M\left(n_2, \frac{\lambda_0}{4n_2}, \lambda\right) \right) \\ & \cdot \widetilde{M}\left(\frac{\lambda_0}{2}, n_1, nv, np, dv, dp, \lambda\right) \cdot \\ & \cdot \prod_{j=1}^m \left( \widetilde{M}\left(n_1, nv, np, \frac{\lambda_0}{4}, dv, dp, \lambda\right) \cdot M\left(n_2, \frac{\lambda_0}{4n_2}, \lambda\right) \right); \end{aligned}$$

– модель 2 (рис. 2.3б)

$$\begin{aligned}\bar{M}(n_1, n_2, np, dp, \lambda) &= \\ &= \prod_{j=1}^m \left( M \left( n_1, \frac{\lambda_0}{4n_1}, \lambda \right) \cdot \hat{M} \left( n_2, np, \frac{\lambda_0}{4}, dp, \lambda \right) \right) \cdot M \left( n_1, \frac{\lambda_0}{2n_1}, \lambda \right) \\ &\cdot \prod_{j=1}^m \left( M \left( n_1, \frac{\lambda_0}{4n_1}, \lambda \right) \cdot \hat{M} \left( n_2, np, \frac{\lambda_0}{4}, dp, \lambda \right) \right);\end{aligned}$$

– модель 3 (рис. 2.3в)

$$\begin{aligned}\bar{M}(n_1, n_2, nv, np, dv, dp, \lambda) &= \\ &= \prod_{j=1}^m \left( M \left( n_1, \frac{\lambda_0}{4n_1}, \lambda \right) \cdot \tilde{M} \left( n_2, nv, np, \frac{\lambda_0}{4}, dv, dp, \lambda \right) \right) \cdot M \left( n_1, \frac{\lambda_0}{2n_1}, \lambda \right) \cdot \\ &\cdot \prod_{j=1}^m \left( M \left( n_1, \frac{\lambda_0}{4n_1}, \lambda \right) \cdot \tilde{M} \left( n_2, nv, np, \frac{\lambda_0}{4}, dv, dp, \lambda \right) \right);\end{aligned}$$

– модель 4 (рис. 2.3г)

$$\begin{aligned}\bar{M}(n_1, n_2, nv_1, nv_2, np_1, np_2, dv_1, dv_2, dp_1, dp_2, \lambda) &= \\ &= \prod_{j=1}^m \left( \tilde{M} \left( n_1, nv_1, np_1, \frac{\lambda_0}{4}, dv_1, dp_1, \lambda \right) \cdot \tilde{M} \left( n_2, nv_2, np_2, \frac{\lambda_0}{4}, dv_2, dp_2, \lambda \right) \right) \\ &\cdot \tilde{M} \left( n_1, nv_1, np_1, \frac{\lambda_0}{2}, dv_1, dp_1, \lambda \right) \\ &\cdot \prod_{j=1}^m \left( \tilde{M} \left( n_1, nv_1, np_1, \frac{\lambda_0}{4}, dv_1, dp_1, \lambda \right) \cdot \tilde{M} \left( n_2, nv_2, np_2, \frac{\lambda_0}{4}, dv_2, dp_2, \lambda \right) \right).\end{aligned}$$

Відрізаючий фільтр конструкції S-ВНВ..ВНВ має всі шари з оптичними товщинами, рівними  $\frac{\lambda_0}{4}$ . Відповідно, характеристична матриця  $m$ -шарового відрізаючого фільтра для кожної з моделей буде мати вигляд:

– модель 1 (рис. 2.3а)

$$\bar{M}(n_1, n_2, nv, np, dv, dp, \lambda) = \prod_{j=1}^m \left( \tilde{M} \left( n_1, nv, np, \frac{\lambda_0}{4}, dv, dp, \lambda \right) \cdot M \left( n_2, \frac{\lambda_0}{4n_2}, \lambda \right) \right);$$

– модель 2 (рис. 2.3б)

$$\bar{M}(n_1, n_2, np, dp, \lambda) = \prod_{j=1}^m \left( M \left( n_1, \frac{\lambda_0}{4n_1}, \lambda \right) \cdot \hat{M} \left( n_2, np, \frac{\lambda_0}{4}, dp, \lambda \right) \right);$$

– модель 3 (рис. 2.3в)

$$\bar{M}(n_1, n_2, nv, np, dv, dp, \lambda) = \prod_{j=1}^m \left( M \left( n_1, \frac{\lambda_0}{4n_1}, \lambda \right) \cdot \tilde{M} \left( n_2, nv, np, \frac{\lambda_0}{4}, dv, dp, \lambda \right) \right);$$

– модель 4 (рис. 2.3Г)

$$\begin{aligned} \bar{M}(n_1, n_2, nv_1, nv_2, np_1, np_2, dv_1, dv_2, dp_1, dp_2, \lambda) = \\ = \prod_{j=1}^m \left( \tilde{M} \left( n_1, nv_1, np_1, \frac{\lambda_0}{4}, dv_1, dp_1, \lambda \right) \cdot \tilde{M} \left( n_2, nv_2, np_2, \frac{\lambda_0}{4}, dv_2, dp_2, \lambda \right) \right). \end{aligned}$$

Широкопasmовий фільтр конструкції S-2ВН2В..2ВН2В має оптичну товщину високозаломлюючого шару, рівну  $\frac{\lambda_0}{2}$ , а низькозаломлюючого шару –  $\frac{\lambda_0}{4}$ . Відповідно, характеристична матриця  $m$ -шарового широкопasmового фільтра для кожної з моделей буде мати вигляд:

– модель 1 (рис. 2.3а)

$$\bar{M}(n_1, n_2, nv, np, dv, dp, \lambda) = \prod_{j=1}^m \left( \tilde{M} \left( n_1, nv, np, \frac{\lambda_0}{2}, dv, dp, \lambda \right) \cdot M \left( n_2, \frac{\lambda_0}{4n_2}, \lambda \right) \right);$$

– модель 2 (рис. 2.3б)

$$\bar{M}(n_1, n_2, np, dp, \lambda) = \prod_{j=1}^m \left( M \left( n_1, \frac{\lambda_0}{2n_1}, \lambda \right) \cdot \hat{M} \left( n_2, np, \frac{\lambda_0}{4}, dp, \lambda \right) \right);$$

– модель 3 (рис. 2.3в)

$$\bar{M}(n_1, n_2, nv, np, dv, dp, \lambda) = \prod_{j=1}^m \left( M \left( n_1, \frac{\lambda_0}{2n_1}, \lambda \right) \cdot \tilde{M} \left( n_2, nv, np, \frac{\lambda_0}{4}, dv, dp, \lambda \right) \right);$$

– модель 4 (рис. 2.3Г)

$$\begin{aligned} \bar{M}(n_1, n_2, nv_1, nv_2, np_1, np_2, dv_1, dv_2, dp_1, dp_2, \lambda) = \\ = \prod_{j=1}^m \left( \tilde{M} \left( n_1, nv_1, np_1, \frac{\lambda_0}{2}, dv_1, dp_1, \lambda \right) \cdot \tilde{M} \left( n_2, nv_2, np_2, \frac{\lambda_0}{4}, dv_2, dp_2, \lambda \right) \right). \end{aligned}$$

Знаючи загальну характеристичну матрицю всієї структури, легко знайти коефіцієнт пропускання для заданої довжини хвилі.

У підрозділі 2.2 проведено математичне моделювання впливу неоднорідностей на спектральні характеристики вузькопasmових фільтрів (модель 2, рис. 2.3б). Як високозаломлюючий матеріал було взято GeTe, який має показник заломлення, рівний 5. Як низькозаломлюючий матеріал взято GeS<sub>2</sub>, який має показник заломлення, рівний 2.1, а також має перехідну область з показником заломлення 2.6 та геометричною товщиною 30 нм. Обчислювальний експеримент проведено для двох робочих довжин хвиль  $\lambda_0=3000$  нм та  $\lambda_0=5000$  нм.

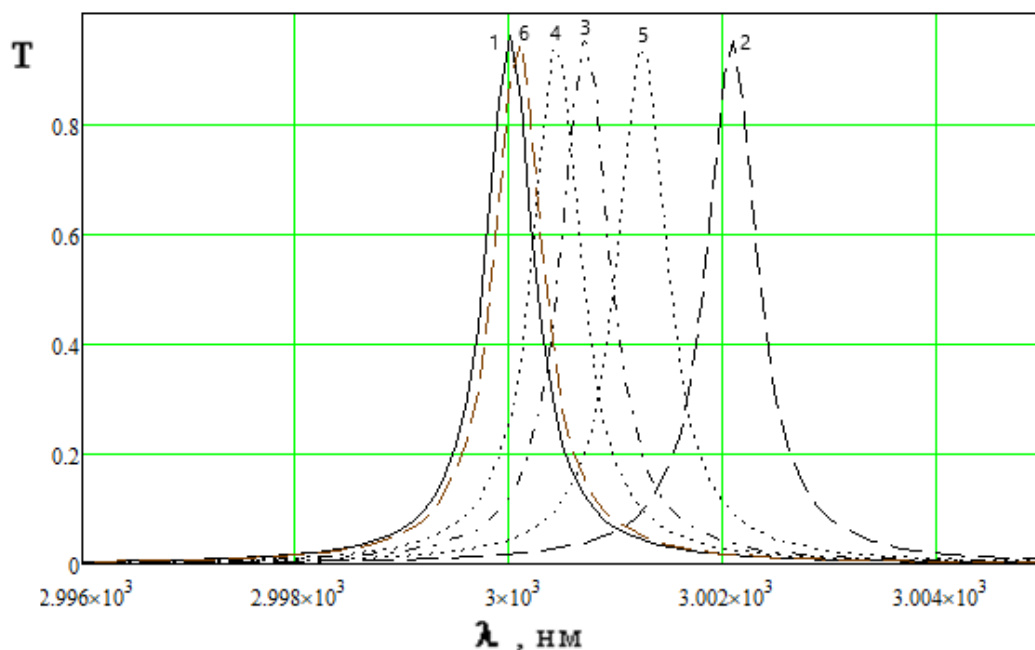


Рисунок 2.4. Спектральні характеристики 17-шарового вузькосмугового оптичного фільтра типу S-ВНВ..2В..ВНВ ( $\lambda_0=3000$  нм) за наявності перехідної області низькозаломлюючого шару з різними розподілами показника заломлення: 1 – ідеальний випадок; 2 – зі ступінчастим; 3 – з лінійним; 4 – з квадратичним; 5 – з логарифмічним; 6 – з експоненціальним

Наявність неоднорідної області зумовлює зсув положення довжини хвилі при максимумі пропускання  $\lambda_{\max}$  в сторону довгих хвиль. При цьому збільшується напівширина пропускання  $\Delta\lambda_{0,5}$  та ширина смуги  $\Delta\lambda_{0,1}$  (рис. 2.4).

У підрозділі 2.3 промодельовано вплив неоднорідності на межах розділу на спектральні характеристики відрізаючих фільтрів, які мають частково неоднорідні і високозаломлюючий, і низькозаломлюючий шари (модель 4, рис. 2.3г). Як високозаломлюючий матеріал було взято  $As_2S_3$ , після опромінення він має показник заломлення центральної частини, рівний 2.4, має приповерхневу й перехідну області із показником заломлення 2.3. Геометрична товщина приповерхневої області рівна 10 нм, а перехідної – 5 нм. Як низькозаломлюючий матеріал візьмемо  $GeS_2$ , який має показник заломлення, рівний 2.1, має приповерхневу і перехідну область з показником заломлення 2.6. Геометрична товщина приповерхневої області рівна 10 нм, а перехідної – 30 нм.

Наявність неоднорідностей на межах розділу між шарами зменшує діапазон відбивання. Так, зокрема, 17-шарова структура при ідеальному випадку має діапазон відбивання 68.03 нм на рівні  $T < 0.2$ . А при ступінчастому розподілі показників заломлення приповерхневої і перехідної областей мінімум пропускання є вищий значення 0.2 (рис. 2.5). При збільшенні кількості шарів діапазон відбивання буде зростати. Уже 25-шарова структура і при ступінчастому розподілі показників заломлення приграничних областей має діапазон відбивання, рівний 24.97 нм.



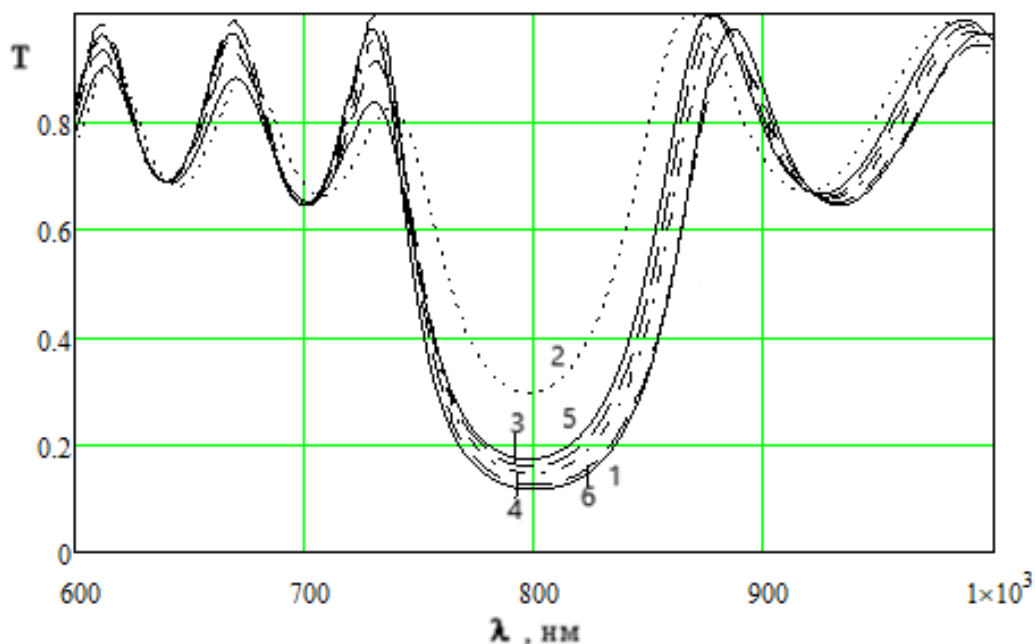


Рисунок 2.5. Спектральні характеристики 17-шарового відрізаючого оптичного фільтра типу S-2ВН2В..2ВН2В при робочій довжині хвилі  $\lambda_0=800$  нм за наявності приповерхневої та перехідної областей високозаломлюючого та низькозаломлюючого шарів з різними розподілами показника заломлення: 1 – ідеальний випадок; 2 – зі ступінчастим; 3 – з лінійним; 4 – з квадратичним; 5 – з логарифмічним; 6 – з експоненціальним

У підрозділі 2.4 промодельовано вплив неоднорідності на межах розділу на спектральні характеристики широкосмугових фільтрів, які мають частково неоднорідний низькозаломлюючий шар (модель 3, рис. 2.3в). Як високозаломлюючий матеріал візьмемо GeTe, він має показник заломлення, рівний 5. Як низькозаломлюючий матеріал візьмемо GeS<sub>2</sub>, який має показник заломлення, рівний 2.1, а також має приповерхневу і перехідну області з показником заломлення 2.6. Геометрична товщина приповерхневої області рівна 10 нм, а перехідної – 30 нм. Обчислювальний експеримент проведено для двох робочих довжин хвиль  $\lambda_0=3000$  нм та  $\lambda_0=5000$  нм.

Найбільше відхилення від ідеального випадку спостерігається при ступінчастому розподілі показника заломлення. При кількості шарів, рівній 17, та при робочій довжині хвилі  $\lambda_0=3000$  нм відхилення від ідеального випадку для середини діапазону пропускання  $\lambda_{cp}$  становило 0,25%, для ширини смуги  $\Delta\lambda_{0,5} - 0.66\%$ , а для ширини смуги  $\Delta\lambda_{0,1} - 0.68\%$ . Відзначимо, що зсув цих параметрів відбувався у довгохвильову область. При збільшенні робочої довжини хвилі відносні відхилення від ідеального випадку розглядуваних основних характеристик широкосмугових фільтрів зменшуються. Це можна пояснити тим, що при збільшенні робочої довжини хвилі відношення приповерхневої та перехідної областей до центральної частини плівки зменшується, відповідно їх вплив стає меншим. Із ростом числа шарів зростають значення ширин смуг  $\Delta\lambda_{0,5}$  та  $\Delta\lambda_{0,1}$ , значення середини діапазону пропускання  $\lambda_{cp}$  при робочій довжині хвилі  $\lambda_0$

$\approx 3000$  нм зсувається в довгохвильову область, а при  $\lambda_0 = 5000$  нм – у короткохвильову.

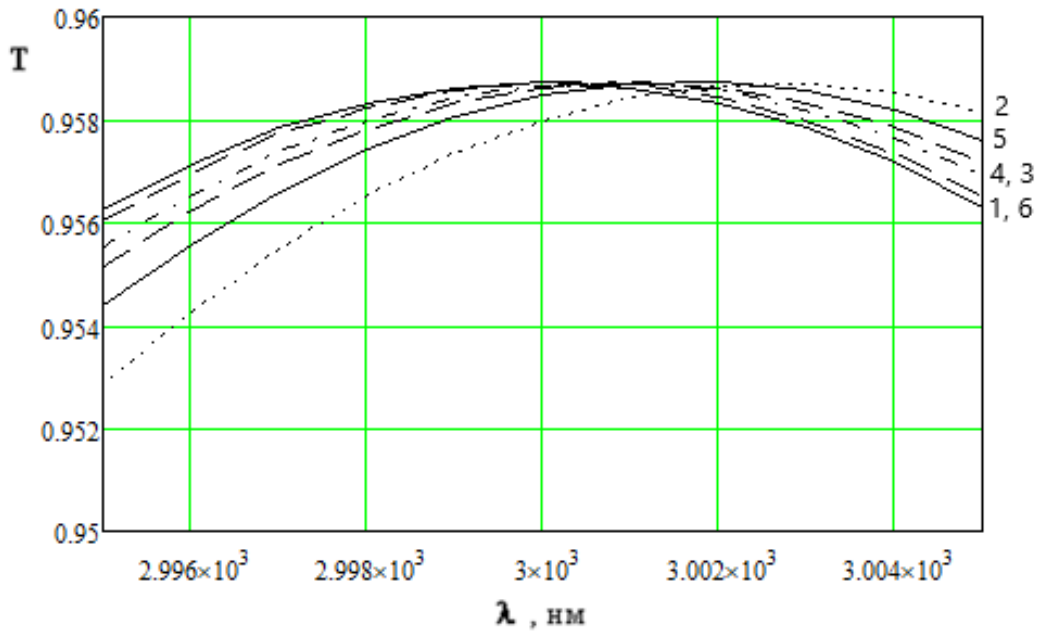


Рисунок 2.5. Спектральні характеристики 17-шарового широкопasmового оптичного фільтра типу S-2ВН2В..2ВН2В в околі робочої довжини хвилі  $\lambda_0=3000$  нм за наявності приповерхневої та перехідної областей низькозаломлюючого шару з різними розподілами показника заломлення: 1 – ідеальний випадок; 2 – зі ступінчастим; 3 – з лінійним; 4 – з квадратичним; 5 – з логарифмічним; 6 – з експоненціальним

Найбільше на розглядувані характеристики вузькосмугових, відрізаючих та широкопasmових фільтрів впливає ступінчастий розподіл, далі йдуть логарифмічний, лінійний, квадратичний та експоненціальний розподіли показника заломлення перехідної області низькозаломлюючого шару. Якщо розглядати розподіли показника заломлення за середнім значенням показника заломлення, то, виходячи з отриманих результатів, можна стверджувати, що розглядувані розподіли збільшують відхилення від ідеального випадку з ростом середнього значення.

**У підрозділі 2.5** досліджено вплив оксидзації на спектральні характеристики плівки  $As_2S_3$ . Показник заломлення неопроміненої плівки  $As_2S_3$  рівний 2.6, а наявного шару-окислу 1.8. Виявилось, що наявність окисного шару призводить до збільшення пропускання та відбувається зсув в область довгих хвиль. Додаткові дослідження показали, що чим більше середнє значення показника заломлення неоднорідного шару-окислу, тим більше відхилення спектральних характеристик від випадку, коли не враховується наявність окисного шару на поверхні підкладинки. Наявність окисного шару на поверхні плівки при дзеркальному відбиванні завжди «просвітлює» структуру (рис.2.7).

Зростання товщини окисного шару призводить до збільшення пропускання та зсуву спектральних характеристик в область довгих хвиль. Причому відхилення спектральних характеристик від випадку, коли не враховується окисний шар,

залежить не лінійно від товщини шару-окислу, а квадратично. При товщині окисного шару  $d=30$  нм відхилення становлять 5–8% залежно від довжини хвилі.

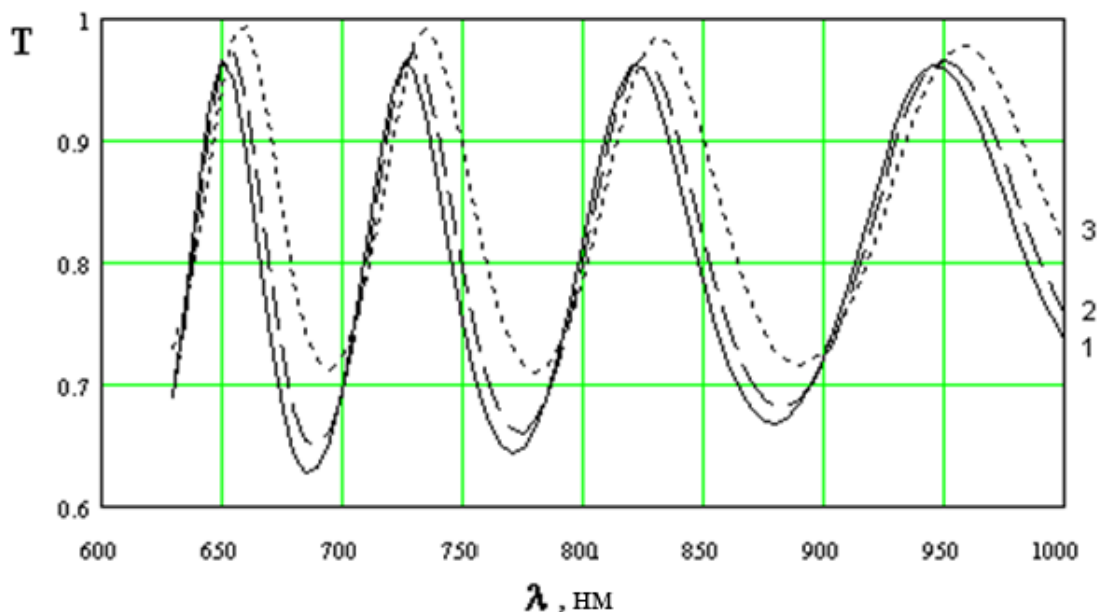


Рисунок 2.7. Криві пропускання при різних товщинах  $d$  окисного шару:  
1 –  $d=10$  нм, 2 –  $d=20$  нм, 3 –  $d=30$  нм

У третьому розділі представлена розроблена математична модель, яка дозволяє дослідити вплив нанодфектів на спектральні характеристики; описано дослідження найбільш ефективних моделей апроксимації дисперсії показника заломлення; описано та наведено приклади застосування методу Монте-Карло для дослідження стійкості спектральних характеристик різних просвітлюючих фільтрів.

У підрозділі 3.1 наведено опис математичної моделі, яка враховує наявність нанодфектів. Проведено детальний аналіз впливу нанодфектів на спектральні характеристики, на прикладі чотиришарового оптичного покриття. Розглядаються різні моделі нанодфектів – різного складу та різних розмірів, положень щодо границь розділу дефектного шару й суміжних середовищ.

Усі виміри були виконані на зразках багатошарових систем (БШС), у яких на прозорі підкладки з показником заломлення 1.9 було осаджено чотири нанорозмірних шари з різними геометричними товщинами (рис. 3.1). За відсутності дефектів БШС складалася з чотирьох шарів (МС-0 на рис. 3.1а, 3.1б), а за наявності дефектів – із шести (МС-1, МС-2 і МС-3 на мал. 3.1б). Перший і третій шари системи були виготовлені з  $ZrO_2$  ( $n_e = 2.11$ ), другий, четвертий і шостий – із  $MgF_2$  ( $n_n = 1.38$ ).

Шар, у якому є відповідний дефект (рис. 3.1), буде задаватись характеристичною матрицею у такому вигляді:

$$M_i(n_i, d_i, \lambda) = M_i(n_i, d_{i1}, \lambda) \cdot M_i(n_D, d_{i2}, \lambda) \cdot M_i(n_i, d_{i3}, \lambda),$$

де  $d_i = d_{i1} + d_{i2} + d_{i3}$ ,  $d_{i1}, d_{i2}, d_{i3}$  – геометричні товщини утворених частин дефектного шару,  $n_D$  – показник заломлення дефектного шару.

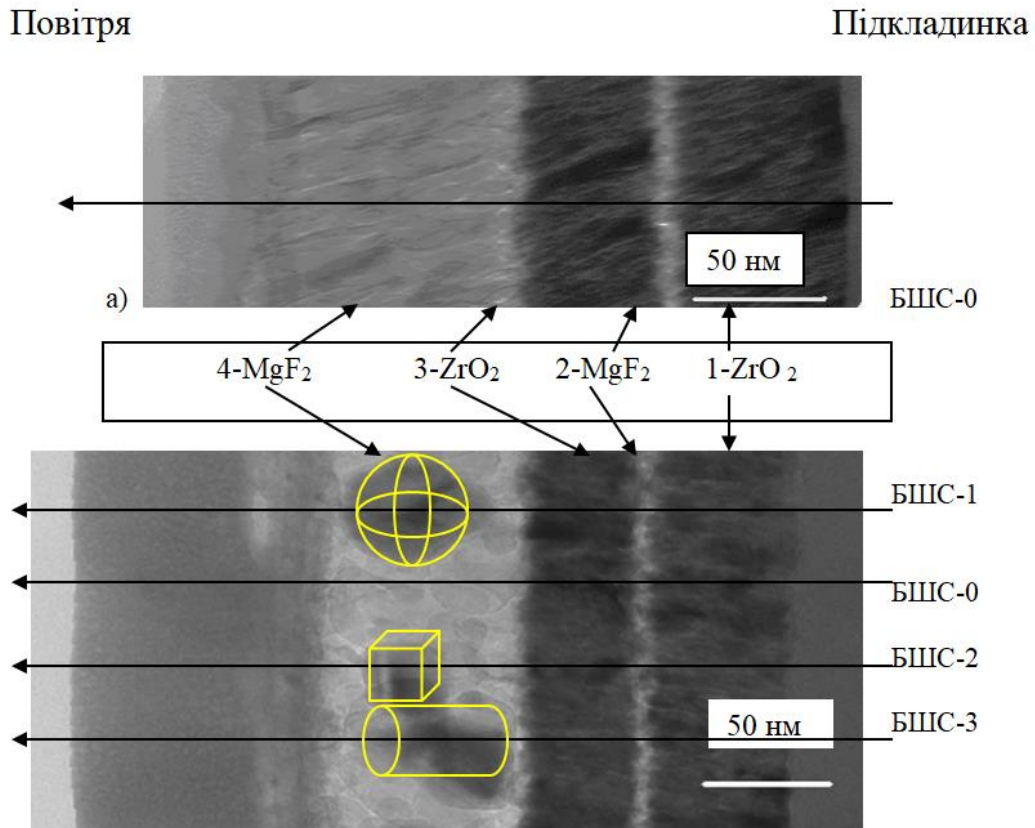


Рисунок 3.1. Поперечний переріз БШС структур без дефектів (3.1а, система БШС-0) і з дефектами (3.1б, системи БШС-1, БШС-2, БШС-3)

Встановлено, що максимуми пропускання оптичних елементів з реальними дефектними покриттями знижуються зі зростанням показників заломлення речовин дефектів, а їх спектральне положення й форма кривих істотно залежать від розмірів дефектів уздовж напрямку поширення світла та їх положення в об'ємі дефектного шару. Зокрема для чотиришарової оптичної системи, перший і третій шари якої виготовлені з  $ZrO_2$ , а другий та четвертий – із  $MgF_2$ , дефект розміром 20 нм, який містить речовину з показником заломлення 3, зменшує пропускання світла на 25%, а з показником заломлення 4 – на 50%.

У підрозділі 3.2 описано дослідження ефективності різних моделей апроксимації дисперсії показника заломлення на прикладі матеріалів  $CdP_2$ ,  $As_2S_3$ ,  $As_2S_5$  та  $As_2Se_3$ . Найбільш ефективною виявилась модель Зельмеєра.

У підрозділі 3.3 наведено дослідження стійкості спектральних характеристик до технологічних похибок, на прикладі 9-, 17- та 25-шарових ширококутних фільтрів типу S-2ВН2В..2ВН2В, а також просвітлюючих оптичних покриттів, розроблених у роботі.

За допомогою методу Монте-Карло було проведено обчислювальні експерименти, які показали, що спектральні характеристики є найбільш чутливі до похибок показників заломлення низькозаломлюючих шарів (рис. 3.2). Особливо чутливим виявився другий за порядком нанесення шар, діапазон розсіювання для якого суттєво вищий за діапазони розсіювання інших параметрів. Для розроблених у

роботі просвітлюючих покриттів також було досліджено стійкість до технологічних похибок.

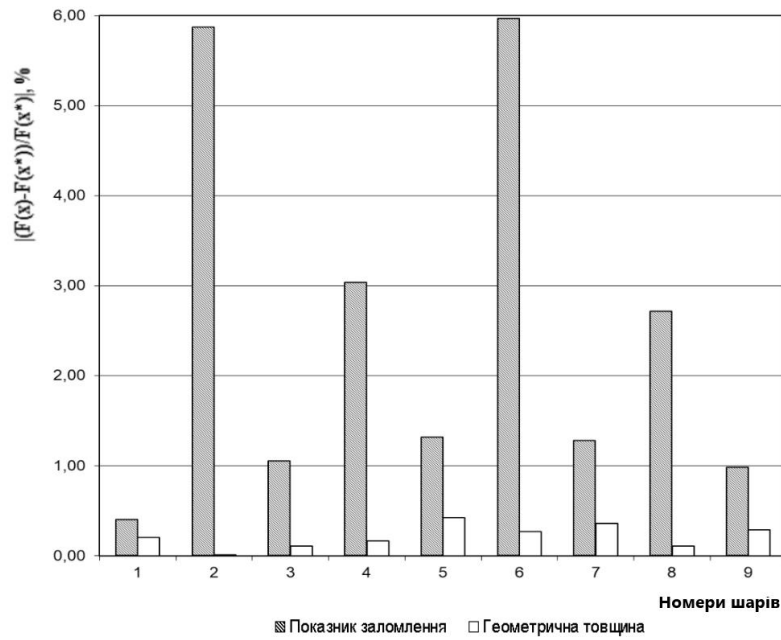


Рисунок 3.2. Діаграма розсіювання функції якості покриття для 9-шарового широкопasmового фільтра

У четвертому розділі досліджується вплив неоднорідностей на межах розділу на просторово-поляризаційні параметри спектральних характеристик вузькосмугових, відрізаючих та широкопasmових оптичних фільтрів при падінні світла під кутом.

У підрозділі 4.1 наведено необхідні теоретичні відомості. Характеристичну матрицю  $N$ -шарової структури при падінні світла під кутом зручно представити через такі чотири параметри:

$$M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda, \theta_0) =$$

$$= M(n_N, d_N, \lambda, \theta_N) \cdot M(n_{N-1}, d_{N-1}, \lambda, \theta_{N-1}) \cdots M(n_2, d_2, \lambda, \theta_2) \cdot M(n_1, d_1, \lambda, \theta_1),$$

де  $(n_j, d_j, \theta_j)$  – показник заломлення, геометрична товщина та кут падіння, які характеризують  $j$ -ий шар,  $\lambda$  – довжина хвилі.

При цьому характеристичну матрицю  $j$ -го шару можна записати у вигляді:

– для  $s$ -поляризації

$$M(n_j, d_j, \lambda, \theta_j) = \begin{vmatrix} \cos \frac{2\pi n_j d_j \cdot \cos \theta_j}{\lambda} & -\frac{i}{n_j \cdot \cos \theta_j} \cdot \sin \frac{2\pi n_j d_j \cdot \cos \theta_j}{\lambda} \\ -i \cdot n_j \cdot \cos \theta_j \cdot \sin \frac{2\pi n_j d_j \cdot \cos \theta_j}{\lambda} & \cos \frac{2\pi n_j d_j \cdot \cos \theta_j}{\lambda} \end{vmatrix},$$

– для  $p$ -поляризації

$$M(n_j, d_j, \lambda, \theta_j) = \begin{vmatrix} \cos \frac{2\pi n_j d_j \cdot \cos \theta_j}{\lambda} & -\frac{i \cdot \cos \theta_j}{n_j} \cdot \sin \frac{2\pi n_j d_j \cdot \cos \theta_j}{\lambda} \\ -i \cdot \frac{n_j}{\cos \theta_j} \cdot \sin \frac{2\pi n_j d_j \cdot \cos \theta_j}{\lambda} & \cos \frac{2\pi n_j d_j \cdot \cos \theta_j}{\lambda} \end{vmatrix},$$

де  $\theta_j$  – кут між променем і нормаллю до площини падіння,  $i = \sqrt{-1}$ . Співвідношення між кутами суміжних середовищ пов'язані законом Снеліуса  $n_{j+1} \sin \theta_{j+1} = n_j \sin \theta_j$ .

Значення коефіцієнта пропускання при падінні світла на багатошарову оптичну структуру під кутом  $\theta_0$  при показниках заломлення зовнішнього середовища  $n_0$  та підкладки  $n_s$  для довжини хвилі  $\lambda$  обчислюється окремо для  $s$ - та  $p$ -поляризацій:

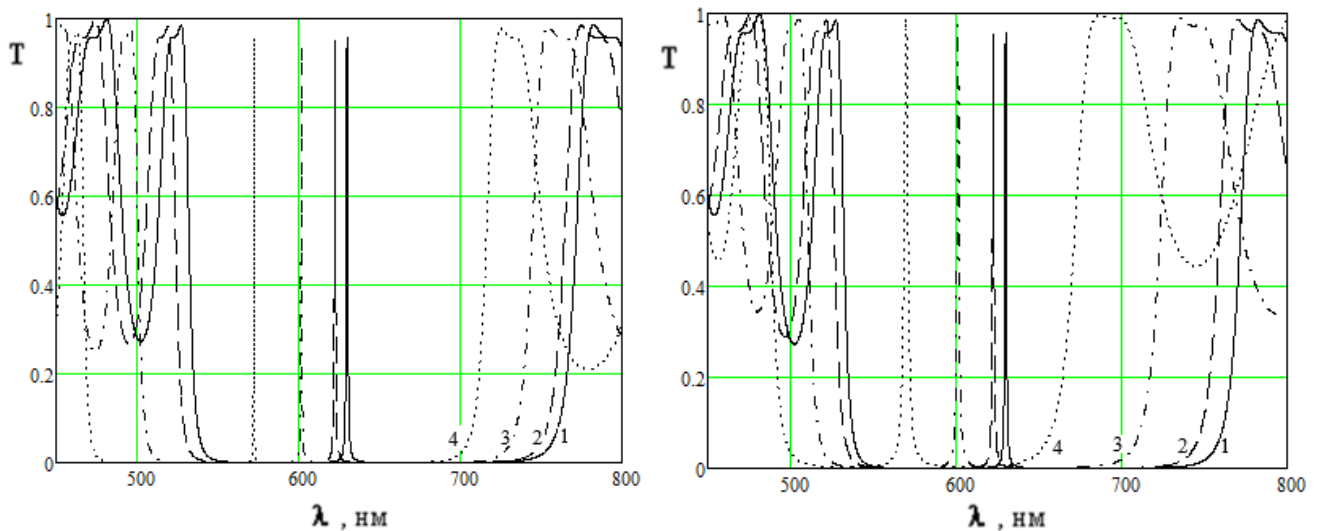
$$T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda, \theta_0) =$$

$$= \frac{2 + \frac{p_0}{p_s} M_{11}^2(\vec{n}, \vec{d}, \lambda, \theta_0) + \frac{p_s}{p_0} M_{22}^2(\vec{n}, \vec{d}, \lambda, \theta_0) + p_0 p_s M_{12}^2(\vec{n}, \vec{d}, \lambda, \theta_0) + \frac{1}{p_0 p_s} M_{21}^2(\vec{n}, \vec{d}, \lambda, \theta_0)}{4},$$

де  $p_0 = n_0 \cos \theta_0$  і  $p_s = n_s \cos \theta_s$  – для ТЕ хвилі ( $s$ -поляризація);

$p_0 = \frac{n_0}{\cos \theta_0}$  і  $p_s = \frac{n_s}{\cos \theta_s}$  – для ТМ хвилі ( $p$ -поляризація).

На основі розроблених у розділі 2 моделей у **підрозділі 4.2** встановлено основні залежності просторово-поляризаційних параметрів спектральних характеристик вузькосмугових фільтрів від поляризації та кута падіння (рис. 4.1). Розглядався вузькосмуговий оптичний фільтр, який складається із двох матеріалів: високозаломлюючого –  $\text{GeS}_2$  та низькозаломлюючого –  $\text{MgF}_2$ . Високозаломлюючий шар має неоднорідні приповерхневу та перехідну області. Показник заломлення центральної частини високозаломлюючого шару рівний 2.1. Приповерхнева область має геометричну товщину 10 нм, а перехідна – 30 нм. Показники заломлення обох областей можуть досягати 2.6. Низькозаломлюючий шар має показник заломлення, рівний 1.35.



а)  $s$ -поляризація

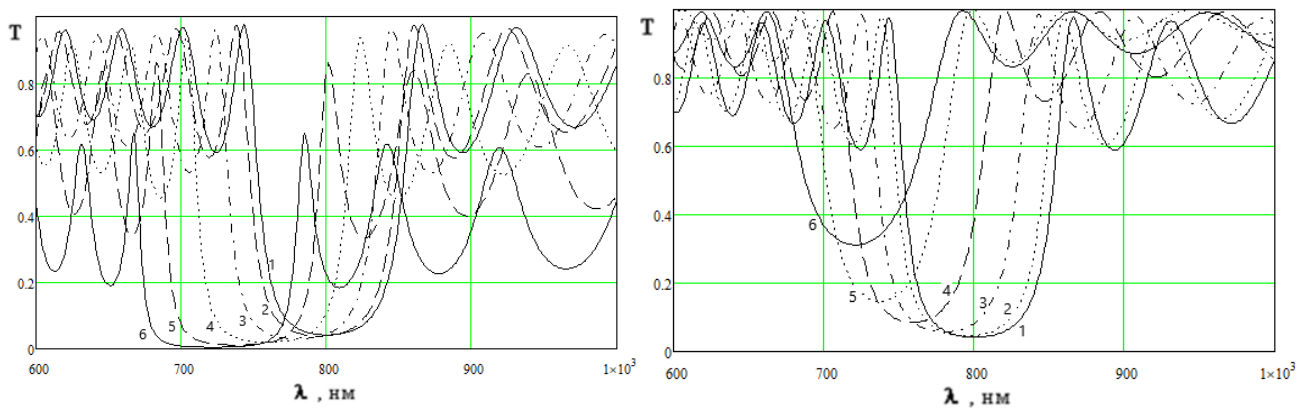
б)  $p$ -поляризація

Рисунок 4.1. Трансформація спектрів пропускання 25-шарового вузькосмугового фільтра з робочою довжиною хвилі  $\lambda_0 = 630$  нм для  $s$ -поляризації при зміні кута падіння: 1 –  $\theta_0 = 0^\circ$ ; 2 –  $\theta_0 = 15^\circ$ ; 3 –  $\theta_0 = 30^\circ$ ; 4 –  $\theta_0 = 45^\circ$

**Твердження 4.1.** Для обох поляризацій наявність неоднорідних областей у високозаломлюючому шарі вузькосмугових оптичних фільтрів призводить до

збільшення  $T_{max}$  – значення максимуму коефіцієнта пропускання, якщо кут падіння менший за кут Брюстера, та до зменшення  $T_{max}$  в протилежному випадку; зсуву довжини хвилі в положенні максимуму пропускання  $\lambda_{max}$  в довгохвильову область; зменшення напівширини  $\Delta\lambda_{0.5}$  та десятичної ширини  $\Delta\lambda_{0.1}$ ; збільшення ширини спектральних інтервалів  $\Delta\lambda_K$  та  $\Delta\lambda_D$ . Зі збільшенням кута падіння значення  $T_{max}$  для  $s$ -поляризованого світла зменшується, а для  $p$ -поляризованого – зростає до кута Брюстера, а потім зменшується; довжина хвилі в положенні максимуму пропускання  $\lambda_{max}$  зміщується в короткохвильову область; напівширина  $\Delta\lambda_{0.5}$  та десятинна ширина  $\Delta\lambda_{0.1}$  смуг пропускання для  $s$ -поляризованого світла зменшуються, а для  $p$ -поляризованого – зростають; ширини спектральних інтервалів  $\Delta\lambda_K$  та  $\Delta\lambda_D$  низького пропускання для  $s$ -поляризованого світла зростають, а для  $p$ -поляризованого – спадають.

У підрозділі 4.3 встановлено основні залежності просторово-поляризаційних параметрів спектральних характеристик відрізаючих фільтрів від поляризації та кута падіння (рис. 4.2). Як високозаломлюючий матеріал було взято  $As_2S_3$  з показником заломлення після опромінення, що дорівнює 2.4. Як низькозаломлюючий матеріал було взято  $GeS_2$  з параметрами, як у попередньому підрозділі.



а)  $s$ -поляризація

б)  $p$ -поляризація

Рисунок 4.2. Трансформація спектрів пропускання 25-шарового відрізаючого оптичного фільтра з робочою довжиною хвилі  $\lambda_0 = 800$  нм

для  $p$ -поляризації при зміні кута падіння:

$$1 - \theta_0 = 0^\circ; 2 - \theta_0 = 15^\circ; 3 - \theta_0 = 30^\circ; 4 - \theta_0 = 45^\circ; 5 - \theta_0 = 60^\circ; 6 - \theta_0 = 75^\circ$$

**Твердження 4.2.** Для обох поляризацій наявність неоднорідних областей у низькозаломлюючому шарі відрізаючих оптичних фільтрів призводить до збільшення  $T_{min}$  – значення мінімуму коефіцієнта пропускання; положення мінімуму пропускання  $\lambda_{min}$  при кутах падіння, не більших за  $15^\circ$ , незначно зсувається в короткохвильову, а при більших – у довгохвильову область; ширини області мінімального пропускання  $\Delta\lambda_{0.1}$  та  $\Delta\lambda_{0.5}$  зменшуються, а довжини хвиль  $\lambda_{0.1}$  та  $\lambda_{0.5}$ , які їм відповідають, зсуваються в область коротких хвиль; значення  $T_{max}$  збільшується для  $s$ -поляризації, а для  $p$ -поляризації збільшується при кутах, менших за кут Брюстера, та зменшується в іншому випадку; для  $s$ -поляризації положення  $\lambda_{max}$  зсувається в короткохвильову область, а для  $p$ -поляризації при кутах падіння, менших за  $75^\circ$ , зсувається в короткохвильову, а при більших – у довгохвильову

область. Зі збільшенням кута падіння значення  $T_{min}$  для  $s$ -поляризованого світла зменшується, а для  $p$ -поляризованого – зростає; положення мінімуму пропускання  $\lambda_{min}$  та максимуму пропускання  $\lambda_{max}$ , довжина хвилі  $\lambda_{0,1}$ , довжина хвилі  $\lambda_{0,1}$  зміщуються в короткохвильову область для обох поляризацій; ширини області мінімального пропускання  $\Delta\lambda_{0,1}$  та  $\Delta\lambda_{0,5}$  збільшуються для  $s$ -поляризованого світла, а для  $p$ -поляризованого – зменшуються; значення  $T_{max}$  для  $s$ -поляризованого світла зменшується, а для  $p$ -поляризованого – зростає до кута Брюстера, а потім спадає.

У підрозділі 4.4 встановлено основні залежності просторово-поляризаційних параметрів спектральних характеристик широкосмугових фільтрів від поляризації та кута падіння (рис. 4.3). Як високозаломлюючий матеріал було взято GeTe, він має показник заломлення, рівний 5. Як низькозаломлюючий матеріал було взято GeS<sub>2</sub> з параметрами, як у підрозділі 4.2.

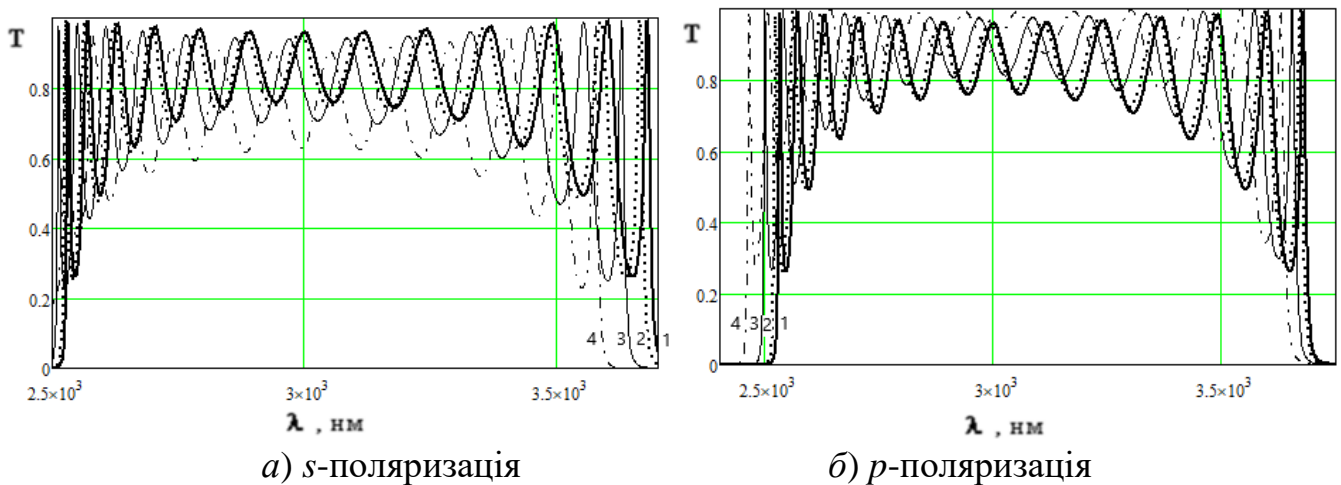


Рисунок 4.3. Трансформація спектрів пропускання 25-шарового широкосмугового оптичного фільтра з робочою довжиною хвилі  $\lambda_0 = 3000$  нм для  $p$ -поляризації при зміні кута падіння: 1 –  $\theta_0 = 0^\circ$ ; 2 –  $\theta_0 = 15^\circ$ ; 3 –  $\theta_0 = 30^\circ$ ; 4 –  $\theta_0 = 45^\circ$

**Твердження 4.3.** Наявність неоднорідних областей у низькозаломлюючому шарі широкосмугових оптичних фільтрів призводить для  $s$ -поляризації до зменшення середнього значення пропускання  $T_{сер}$ , десятичної та напівширини смуг пропускання  $\Delta\lambda_{0,5}$  та  $\Delta\lambda_{0,1}$  відносно ідеального випадку; для  $p$ -поляризації зменшення середнього значення пропускання  $T_{сер}$  при куті падіння від  $0^\circ$  до кута Брюстера, а при куті падіння, більшому за кут Брюстера, – ця характеристика збільшується; десятична та напівширини смуг пропускання  $\Delta\lambda_{0,5}$  та  $\Delta\lambda_{0,1}$  збільшуються відносно ідеального випадку при будь-якому куті падіння. Зі збільшенням кута падіння значення  $T_{сер}$ , десятичної та напівширини смуг пропускання  $\Delta\lambda_{0,5}$  та  $\Delta\lambda_{0,1}$  зменшуються для  $s$ -поляризованого світла, а для  $p$ -поляризованого – зростають до кута Брюстера, а потім спадають.

У п'ятому розділі розроблені моделі оптимізаційних задач СОП та методи їх розв'язання. Цільові функції визначають якість покриття, яке оцінюється відхиленням спектральних характеристик від тих, які потрібно досягти, за критеріями найменших квадратів, найменших модулів та мінімаксім. Наведено зведення задач СОП до задач безумовної мінімізації гладких та негладких функцій,



для розв'язання яких використовуються градієнтні та квазіньютонівські методи,  $r$ -алгоритми Шора, методи нульового порядку. Розроблено пришвидшений спосіб знаходження градієнта цільової функції. Запропоновано комп'ютерні реалізації для пришвидшеного розв'язання задач СОП. Розроблено двоетапний метод, який дозволяє компоувати покриття з уже наявних матеріалів з реальними показниками заломлення. За його допомогою покращено спектральні характеристики трьох існуючих ширококутових інтерференційних фільтрів.

У **підрозділі 5.1** наведено оптимізаційну постановку задачі, характеристики трьох функцій якості покриття, запропоновано функції якості для задачі синтезу ширококутових оптичних покриттів.

Задача синтезу полягає в знаходженні таких параметрів багат шарового оптичного покриття – показників заломлення  $\vec{n} = (n_1, n_2, \dots, n_N)$  та геометричних товщин шарів  $\vec{d} = (d_1, d_2, \dots, d_N)$  ( $N$  – кількість шарів), – щоб функціонал, який уведений для оцінки якості коефіцієнтів пропускання, був мінімальним на заданому спектральному діапазоні  $[\lambda_1, \lambda_2]$ :

$$F^* = F(\vec{n}^*, \vec{d}^*) = \min_{\vec{n}, \vec{d}} F(\vec{n}, \vec{d}), \quad (5.1)$$

при обмеженнях

$$n_{imin} \leq n_i \leq n_{imax}, i = 1, 2, \dots, N, \quad (5.2)$$

$$d_{imin} \leq d_i \leq d_{imax}, i = 1, 2, \dots, N, \quad (5.3)$$

де  $F^*$  – мінімальне значення функції якості покриття.

Функціями якості покриття в задачі (5.1)–(5.3) можуть бути наступні

$$F_1(\vec{n}, \vec{d}) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L w_i \left( T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_i) - T_{ideal}(\lambda_i) \right)^2,$$

$$F_2(\vec{n}, \vec{d}) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L w_i |T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_i) - T_{ideal}(\lambda_i)|,$$

$$F_3(\vec{n}, \vec{d}) = \max_{i=1, \dots, L} w_i |T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_i) - T_{ideal}(\lambda_i)|,$$

де  $w_i$  – вагові коефіцієнти, які визначають внесок у цільову функцію при довжині хвилі  $\lambda_i$ ,  $L$  – число точок сітки спектрального інтервалу від  $\lambda_1$  до  $\lambda_2$ ,  $T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_i)$  – значення коефіцієнта пропускання для параметрів  $(\vec{n}, \vec{d})$  та довжини хвилі  $\lambda_i$ ,  $T_{ideal}(\lambda_i)$  – значення коефіцієнта пропускання, який потрібно досягнути при довжині хвилі  $\lambda_i$ .

У **підрозділі 5.2** описано особливості використання задач безумовної мінімізації гладких та негладких функцій градієнтних і квазіньютонівських методів,  $r$ -алгоритмів та методів нульового порядку, висвітлено питання вибору початкових наближень для кожного типу задач. При переході до задач безумовної оптимізації використані дві заміни змінних

$$x_j = x_{j \min} + (x_{j \max} - x_{j \min}) \sin^2 z_j, j = 1, \dots, N; \quad x_j = \frac{x_{j \max} z_j^2 + x_{j \min}}{z_j^2 + 1}, \quad j = 1, \dots, N.$$

Змінні за першою формулою забезпечують більш плавну зміну поверхні цільової функції, ніж змінні за другою формулою. З іншого боку, перехід до безумовної оптимізації за першою формулою потребує обчислення значення  $\arcsin(x)$ , що є досить затратною операцією за часом.

У **підрозділі 5.3** описано скінченно-різницевий та аналітичний способи знаходження градієнта для гладкої цільової функції та узагальнених градієнтів для негладких цільових функцій. Аналітичний спосіб обчислення градієнта функції  $F_1(\vec{n}, \vec{d})$  та узагальнених градієнтів функцій  $F_2(\vec{n}, \vec{d})$  та  $F_3(\vec{n}, \vec{d})$  базується на аналітичних виразах для похідних  $\frac{\partial T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial n_i}$  та  $\frac{\partial T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_i}$  при фіксованому значенні

$\lambda$ . Похідні  $\frac{\partial T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial n_i}$  знаходимо за формулою:

$$\frac{\partial T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial n_i} = \frac{8 \left( \frac{n_0}{n_s} m_{11} \frac{\partial m_{11}}{\partial n_i} + \frac{n_s}{n_0} m_{22} \frac{\partial m_{22}}{\partial n_i} + n_0 n_s m_{12} \frac{\partial m_{12}}{\partial n_i} + \frac{1}{n_0 n_s} m_{21} \frac{\partial m_{21}}{\partial n_i} \right)}{\left( 2 + \frac{n_0}{n_s} m_{11}^2 + \frac{n_s}{n_0} m_{22}^2 + n_0 n_s m_{12}^2 + \frac{1}{n_0 n_s} m_{21}^2 \right)^2},$$

де  $\frac{\partial m_{11}}{\partial n_i}$ ,  $\frac{\partial m_{12}}{\partial n_i}$ ,  $\frac{\partial m_{22}}{\partial n_i}$ ,  $\frac{\partial m_{21}}{\partial n_i}$  – коефіцієнти наступних (2x2)-матриць:

$$\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial n_i} = \begin{vmatrix} \frac{\partial m_{11}}{\partial n_i} & i \frac{\partial m_{12}}{\partial n_i} \\ i \frac{\partial m_{21}}{\partial n_i} & \frac{\partial m_{22}}{\partial n_i} \end{vmatrix}.$$

Матриці  $\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial n_i}$  легко розрахувати за формулами:

$$\begin{aligned} \frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial n_1} &= \frac{\partial M(n_1, d_1, \lambda)}{\partial n_1} \prod_{k=2}^N M(n_k, d_k, \lambda), \\ \frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial n_i} &= \prod_{k=1}^{i-1} M(n_k, d_k, \lambda) \frac{\partial M(n_i, d_i, \lambda)}{\partial n_i} \prod_{k=i+1}^N M(n_k, d_k, \lambda), \quad i = 2, \dots, N-1, \\ \frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial n_N} &= \prod_{k=1}^{N-1} M(n_k, d_k, \lambda) \frac{\partial M(n_N, d_N, \lambda)}{\partial n_N}, \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} \frac{\partial M(n_i, d_i, \lambda)}{\partial n_i} &= \begin{vmatrix} \frac{\partial}{\partial n_k} \left( \cos \left( \frac{2\pi n_k d_k}{\lambda_j} \right) \right) & -i \frac{\partial}{\partial n_k} \left( \frac{1}{n_k} \sin \left( \frac{2\pi n_k d_k}{\lambda_j} \right) \right) \\ -i \frac{\partial}{\partial n_k} \left( n_k \sin \left( \frac{2\pi n_k d_k}{\lambda_j} \right) \right) & \frac{\partial}{\partial n_k} \left( \cos \left( \frac{2\pi n_k d_k}{\lambda_j} \right) \right) \end{vmatrix} = \\ &= \begin{vmatrix} -\frac{2\pi d_i}{\lambda_j} \sin \left( \frac{2\pi n_i d_i}{\lambda_j} \right) & -\frac{i}{n_i} \frac{2\pi d_i}{\lambda_j} \cos \left( \frac{2\pi n_i d_i}{\lambda_j} \right) \\ -i n_i \frac{2\pi d_i}{\lambda_j} \cos \left( \frac{2\pi n_i d_i}{\lambda_j} \right) & -\frac{2\pi d_i}{\lambda_j} \sin \left( \frac{2\pi n_i d_i}{\lambda_j} \right) \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

За аналогічним способом знаходимо похідні  $\frac{\partial T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_i}$ .

Для обчислення градієнта функції  $F_1(\vec{n}, \vec{d})$  та узагальнених градієнтів функцій  $F_2(\vec{n}, \vec{d})$  та  $F_3(\vec{n}, \vec{d})$  скінченно-різницевий метод вимагає  $N_0^* = (2N + 1)(N - 1)L$ , а аналітичний спосіб –  $N_1^* = 2N(N - 1)L$  множень характеристичних матриць.

У підрозділі 5.4 описано підходи, які дозволяють пришвидшити роботу методів знаходження розв'язків у задачах СОП. Тут описано пришвидшення скінченно-різницевого та аналітичного способів знаходження градієнта за допомогою техніки префікс- та суфікс-масивів. У пришвидшеній реалізації не використовується повторюване множення матриць, властиве прямолінійній реалізації. Для цього обчислюємо префікс-матриці та суфікс-матриці за формулами:

$$M_i^+ = \prod_{k=1}^i M(n_k, d_k, \lambda_j), i = 1, \dots, N - 1, \quad M_i^- = \prod_{k=1}^N M(n_k, d_k, \lambda_j), i = 2, \dots, N.$$

Після цього використаємо їх для знаходження матриць  $\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial n_i}$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_j)}{\partial n_1} &= \frac{\partial M(n_1, d_1, \lambda_j)}{\partial n_1} * M_2^-, \\ \frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_j)}{\partial n_i} &= M_{i-1}^+ * \frac{\partial M(n_i, d_i, \lambda_j)}{\partial n_i} * M_{i+1}^-, i = 2, \dots, N - 1, \\ \frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_j)}{\partial n_N} &= M_{N-1}^- * \frac{\partial M(n_N, d_N, \lambda_j)}{\partial n_N}. \end{aligned}$$

Аналогічно знаходяться значення  $\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_i}$ .

Для обчислення градієнта функції  $F_1(\vec{n}, \vec{d})$  та узагальнених градієнтів функцій  $F_2(\vec{n}, \vec{d})$  та  $F_3(\vec{n}, \vec{d})$  пришвидшеним аналітичним способом потрібно  $N_2^* = 2(3N - 4)L$  множень характеристичних матриць.

**Твердження 5.1.** Пришвидшений варіант аналітичного способу обчислення градієнта функції  $F_1(\vec{n}, \vec{d})$  та узагальнених градієнтів функцій  $F_2(\vec{n}, \vec{d})$  та  $F_3(\vec{n}, \vec{d})$  виграє у прямолінійної реалізації, і цей виграш буде характеризуватися такою величиною:  $q(N) = \frac{3}{N} - \frac{1}{N(N-1)}$ .

Для пришвидшення методів розв'язання задач СОП використано табуляцію значень тригонометричних функцій ( $\sin(x)$  та  $\cos(x)$ ) та швидке множення матриць. З таблиці 5.1 бачимо, що швидкість виконання суттєво збільшилась. Для комп'ютера з процесором AMD Ryzen 3 3250U with Radeon Graphics 2.60 ГГц ОЗУ 8 ГБайт час виконання зменшився приблизно у 85 разів, а для комп'ютера з процесором Intel(R) Core(TM) i3-3250 3.50 ГГц ОЗУ 4 ГБайт процес множення характеристичних матриць прискорився більше ніж у 140 разів.

Таблиця 5.1. Дослідження впливу табуляції на час виконання при виконанні  $10^9$  операцій множення характеристичних матриць

№	Характеристики комп'ютера	Час виконання без табуляції, секунди	Час виконання з використанням табуляції, секунди
1	Intel(R) Core(TM) i3-3220 3.30 ГГц ОЗУ 8 ГБайт	742,22	7,98
2	AMD Ryzen 3 3250U with Radeon Graphics 2.60 ГГц ОЗУ 8 ГБайт	853,74	10,04
3	Intel(R) Core(TM) i3-3250 3.50 ГГц ОЗУ 4 ГБайт	1008,85	6,94
4	Intel(R) Pentium(R) CPU 2.2 ГГц ОЗУ 4 ГБайт	4253,16	31,74

**Твердження 5.2.** Табуляція тригонометричних функцій для операцій множення характеристичних матриць для задачі (5.1)–(5.3) зменшує час виконання у 80-140 разів залежно від характеристик комп'ютера.

У підрозділі 5.5 описано двоетапний метод, який дозволяє компоувати покриття з уже наявних матеріалів з реальними показниками заломлення. За допомогою запропонованого методу покращено спектральні характеристики трьох існуючих широкосмугових інтерференційних фільтрів.

Двоетапний метод реалізується такими двома етапами:

**Етап 1.** Генеруємо початкове наближення і шукаємо локально-оптимальний розв'язок задачі (5.1)–(5.3) за допомогою одного з методів багатовимірної пошуку (спряжених градієнтів (Флетчера-Рівса, Поллака-Рібб'єра), змінної метрики (Девідона-Флетчера-Пауелла, Гольдфарба, Фіакко–Мак-Кормика, Грінстадта),  $r$ -алгоритму Шора).

**Етап 2.** Визначаємо матеріали, найближчі до отриманих теоретичних показників заломлення. Фіксуємо визначені показники заломлення. При фіксації показника заломлення враховуємо в моделі особливості матеріалу: часткову неоднорідність, дисперсію показника заломлення, мас-транспорт, нанодефекти, оксидацію.

Розроблена методика застосована до покращення характеристик існуючих широкосмугових оптичних покриттів. Для цього використано  $r$ -алгоритм Шора для мінімізації такої функції якості

$$F(\vec{n}, \vec{d}) = \min_{\lambda_1 \leq \lambda \leq \lambda_2} \sum_{i=1}^L |1 - T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_{(i)})|, \quad (5.4)$$

де  $[\lambda_1, \lambda_2]$  – розглядуваний спектральний діапазон,  $L$  – число точок сітки спектрального інтервалу від  $\lambda_1$  до  $\lambda_2$ . Значення  $L$  вибиралось рівним  $\lambda_2 - \lambda_1 + 1$ , тобто для цільової функції (5.4) враховувалось кожне цілочислове значення довжини хвилі із проміжку  $[\lambda_1, \lambda_2]$ .

На рис. 5.1-5.3 показана робота запропонованого двоетапного методу. За його допомогою покращено спектральні характеристики для трьох існуючих широкосмугових інтерференційних фільтрів. Зокрема, для широкосмугового просвітлюючого покриття (а.с. №1083144) цільова функція (5.4) покращена на 40%, а для двох інших (а.с. №934429 та а.с. №838629) – покращена на 50%.

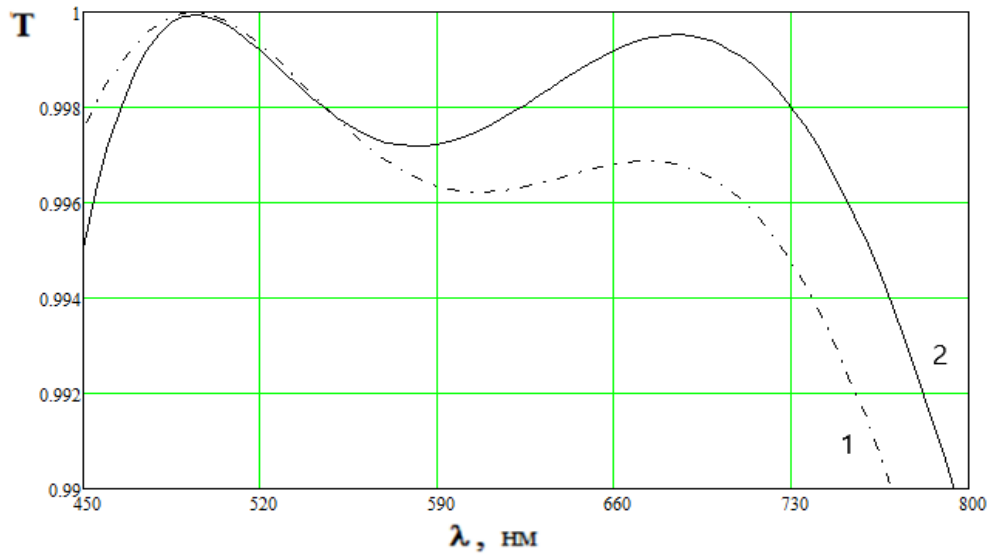


Рисунок 5.1. Криві коефіцієнта пропускання широкосмугового фільтра при просвітленні підкладинки з показником заломлення  $n_s=1.51$ : 1 – параметри, взяті з авторського свідоцтва №1083144  $3.76 \cdot n_1 d_1 = 3.76 \cdot n_2 d_2 = 0.455 \cdot n_3 d_3 = n_4 d_4 = 0.25 \cdot \lambda_0$ ,  $n_1=2.0$ ,  $n_2=1.37$ ,  $n_3=2.0$ ,  $n_4=1.37$ ; 2 – параметри, визначені в цій роботі  $6.58 \cdot n_1 d_1 = 4.06 \cdot n_2 d_2 = 0.441 \cdot n_3 d_3 = 0.944 \cdot n_4 d_4 = 0.25 \cdot \lambda_0$ ,  $n_1=2.1$ ,  $n_2=1.35$ ,  $n_3=1.9$ ,  $n_4=1.35$

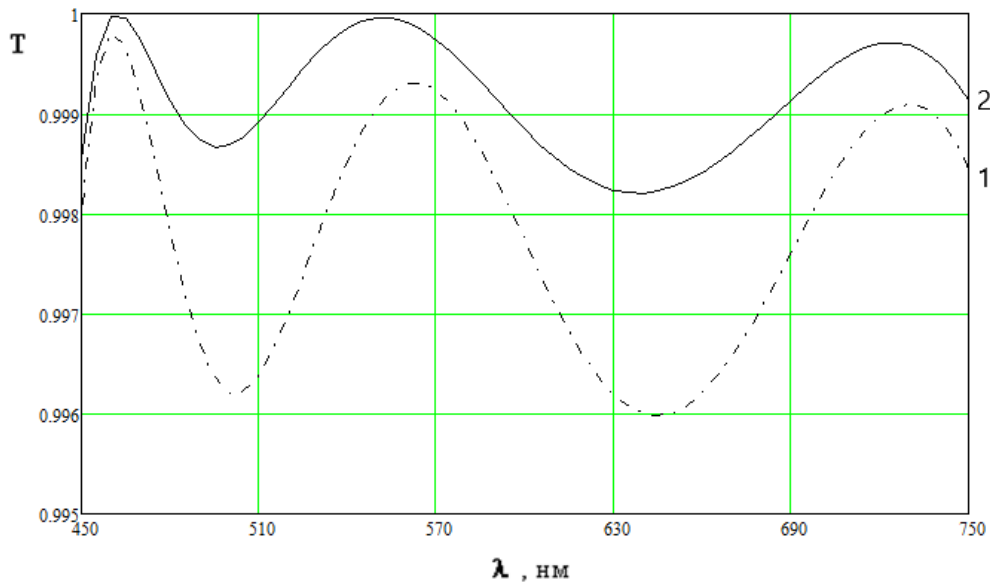


Рисунок 5.2. Криві коефіцієнта пропускання при просвітленні 7-шаровою структурою з шарами, що чергуються, (1.35 та 2.1) підкладинки з показником заломлення  $n_s=1.52$ : 1 – параметри, узяті з авторського свідоцтва №934429 (оптичні товщини шарів відносно  $\lambda_0$  становлять 0.064 : 0.038 : 0.401 : 0.032 : 0.084 : 0.459 : 0.229); 2 – параметри, визначені в цій роботі при розв'язанні оптимізаційної задачі (5.1-5.5) (оптичні товщини шарів відносно  $\lambda_0$  становлять 0.087 : 0.03 : 0.315 : 0.043 : 0.113 : 0.48 : 0.22)

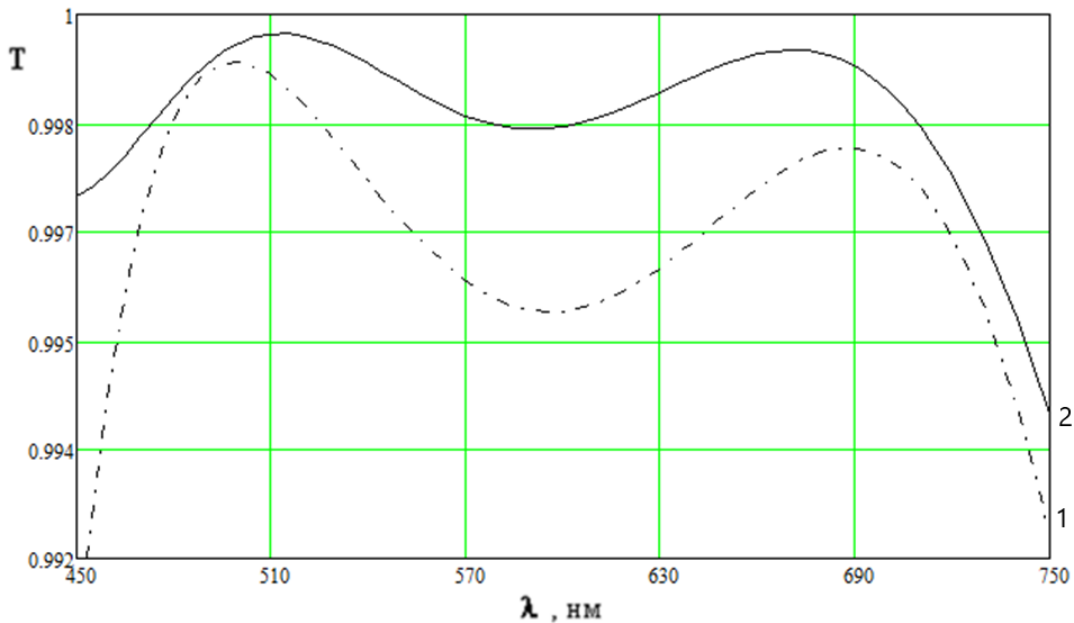


Рисунок 5.3. Криві коефіцієнта пропускання при просвітленні 7-шаровою структурою з шарами, що чергуються, (1.35 та 2.1) підкладинки з показником заломлення  $n_s=1.52$ : 1 – параметри, узяті з авторського свідоцтва №838629 (оптичні товщини шарів відносно  $\lambda_0$  становлять 0.06 : 0.02 : 0.35 : 0.02 : 0.07 : 0.42 : 0.21); 2 – параметри, визначені в цій роботі (оптичні товщини шарів відносно  $\lambda_0$  становлять 0.05 : 0.071 : 0.062 : 0.257 : 0.018 : 0.12 : 0.2)

У шостому розділі розглядається використання розроблених у розділах 2 і 5 моделей та методів до задач розпізнавання профілів показників заломлення халькогенідних плівок  $As_2S_3$  та  $GeS_2$  та росту їх товщини в результаті опромінення.

У підрозділі 6.1 узагальнено літературні джерела, які стосуються інформації про індуковану світлом зміну показника заломлення халькогенідних плівок.

У підрозділі 6.2 обґрунтовується необхідність використання в плівці індукованої світлом перехідної області плівка-підкладинка, формування якої в модельних задачах забезпечує зменшення розмаху коливань спектральних коефіцієнтів і веде до узгодження експериментальних та розрахованих величин спектральних коефіцієнтів. Для розрахунку спектральних характеристик плівки використано математичну модель (розділ 2) до побудови профілю показника заломлення плівки, що передбачає формування приповерхневої та перехідної областей. За допомогою оптимізаційних методів нульового порядку визначено розміри приповерхневої та перехідної областей та величину росту центральної частини плівки. Для розв'язання оптимізаційної задачі був адаптований один із методів розв'язання задач СОП (розділ 5).

При побудові моделі профілю показника заломлення миш'яковмісної халькогенідної плівки після опромінення розглядалися зміни таких спектральних характеристик: 1) зменшення розмаху коливання; 2) зсув максимумів в область довгих хвиль (рис. 6.1). Потрібно було визначити, якою буде структура плівки, яка призводить до цих змін.

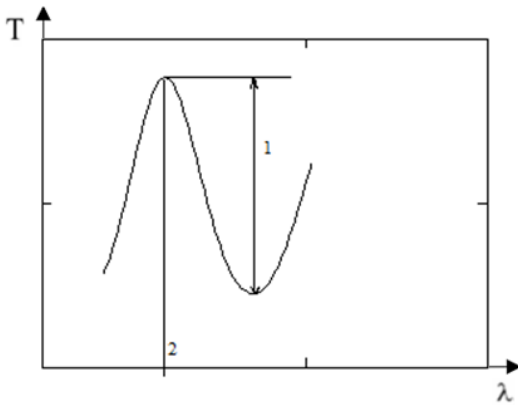


Рисунок 6.1. Два основні показники (1 – розмах коливання; 2 – положення максимуму), які вплинули на побудову моделі-розв'язку задачі розпізнавання

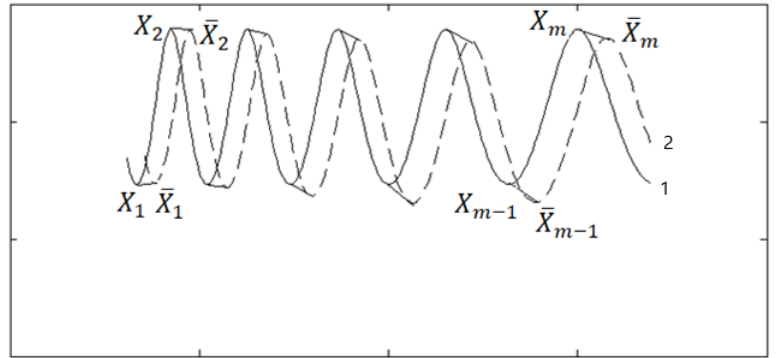


Рисунок 6.2. Схематична модель зв'язування відповідних точок максимумів і мінімумів, сумарна відстань між якими і є значенням побудованої цільової функції, спектральних характеристик: 1 – шукані значення розробленої моделі; 2 – взяті з експериментальних даних

В результаті обчислювальних експериментів отримано наступний результат.

**Твердження 6.1.** Збільшення часу експонування плівки  $As_2S_3$  призводить до зростання розміру приповерхневої області, показник заломлення якої більший, ніж у центральній частині плівки.

**Твердження 6.2.** Збільшення розмірів плівки  $As_2S_3$  та наявність приповерхневої області з високим показником заломлення, пов'язаних тривалим експонуванням, не призводить до зменшення розмаху коливання.

**Твердження 6.3.** Для плівки  $As_2S_3$  збільшення її розмірів, наявність перехідної області з більшим показником заломлення та приповерхневої області з меншим показником заломлення, ніж показник заломлення у центральній частині плівки, призводить до зменшення розміру розмаху коливання, що пов'язане з тривалим експонуванням.

Для визначення, чи може модель, яка складається з приповерхневої та перехідної областей з урахуванням незначного збільшення розмірів плівки забезпечити спектральні характеристики, які отримані після опромінення, потрібно було розв'язати відповідну оптимізаційну задачу. Цільова функція побудована, виходячи з позицій мінімумів і максимумів спектральних характеристик. Позначимо в порядку зростання довжини хвилі точки мінімумів і максимумів для халькогенідної плівки до опромінення –  $X_1(T_1, \lambda_1), X_2(T_2, \lambda_2), \dots, X_m(T_m, \lambda_m)$ , а також відзначимо положення точок мінімумів і максимумів для експериментальних даних –  $\bar{X}_1(\bar{T}_1, \bar{\lambda}_1), \bar{X}_2(\bar{T}_2, \bar{\lambda}_2), \dots, \bar{X}_m(\bar{T}_m, \bar{\lambda}_m)$ , ( $m$  – кількість таких точок). Задача полягає у наступному: визначити такі значення  $dv, dp$  та  $\Delta d$ , щоб точки максимумів і мінімумів спектральних характеристик цієї моделі максимально наблизити до точок максимумів і мінімумів експериментальних даних (рис. 6.2).

Цільова функція має вигляд

$$F(dv^*, dp^*, \Delta d^*) = \min_{dv, dp, \Delta d} \left( \sum_{i=1}^m \sqrt{(T(dv, dp, \Delta d, \lambda_i(dv, dp, \Delta d)) - \bar{T}_i)^2 + \left(\frac{\lambda_i - \bar{\lambda}_i}{k}\right)^2} \right)$$

при обмеженнях

$$0 \leq dv \leq 300 \text{ нм}, 0 \leq dp \leq 150 \text{ нм}, 0 \leq \Delta d \leq 15 \text{ нм}.$$

Значення  $k$  – коефіцієнт масштабування,  $\bar{\lambda}_i$  – положення точок мінімумів і максимумів та значення пропускання  $\bar{T}_i$  в цих точках для експериментальних даних.

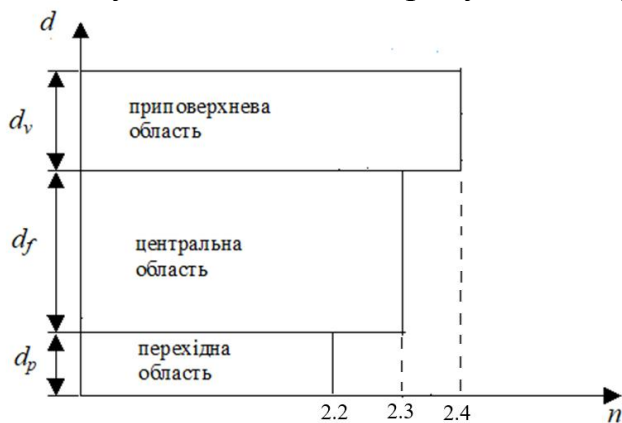


Рисунок 6.3. Модель-розв'язок розглядуваної задачі розпізнавання профілю показника заломлення опроміненої плівки  $As_2S_3$

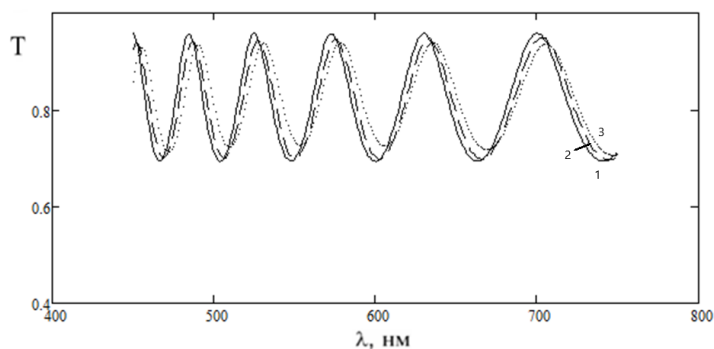


Рисунок 6.4. Спектри пропускання плівки  $As_2S_3$ , одержані на основі розробленої моделі, отриманої при розв'язанні задачі розпізнавання

Цільова функція вимагає ітеративного відшукування  $\lambda_i(dv, dp, \Delta d)$  точок мінімумів і максимумів функції  $T(dv, dp, \Delta d, \lambda_i(dv, dp, \Delta d))$ .

Після проведення обчислень було отримано результати, які показують, що модель профілю показника заломлення (рис. 6.3), яка складається із приповерхневої і перехідної областей, з урахуванням незначного збільшення розмірів плівки, дозволяє отримати спектри пропускання опроміненої плівки  $As_2S_3$  (рис. 6.4).

У підрозділі 6.3, використовуючи відомі значення спектральних коефіцієнтів плівок дисульфиду германію (до і після опромінення) та враховуючи явище фоторозширення, розглядаються задачі розпізнавання профілів показників заломлення свіжонапиленних та фотопросвітлених плівок. Запропоновано моделі визначення профілю показника заломлення за товщиною плівок та отримана оцінка росту товщини плівки після опромінення.

У підрозділі 6.4 проведено моделювання спектральних коефіцієнтів та оптимізацію параметрів неоднорідних плівок, нанесених на високозаломлюючі підкладинки халькогенідної фотоніки, для забезпечення максимального пропускання світла.

## ВИСНОВКИ

У дисертації розв'язано низку завдань, які в сукупності вирішили науково-технічну проблему моделювання та оптимізації спектральних коефіцієнтів



шаруватих оптичних систем з неоднорідними границями, що включало:

1. Вперше запропоновано систему моделей для врахування неоднорідностей на межах розділу шаруватих структур. Розроблено необхідний математичний апарат, спрямований на комплексне вирішення впливу неоднорідностей на спектральні характеристики найважливіших класів оптичних шаруватих структур – вузькосмугових, відрізаючих та широкосмугових оптичних фільтрів. Виявлено, що відхилення коефіцієнтів пропускання зростає залежно від величини середнього значення показника заломлення неоднорідних областей.

2. Вперше досліджено динаміку зміни просторово-поляризаційних параметрів для вузькосмугових, відрізаючих та широкосмугових оптичних фільтрів залежно від кута падіння світла в рамках моделей, які мають неоднорідності на межах розділу.

3. Вперше запропоновано модель структури дефектного шару для оцінок впливу параметрів дефектів у плівках на рівень пропускання світла, за якою встановлено взаємозв'язок між геометричними й оптичними товщинами суміжних шарів залежно від параметрів дефектів – їх природи, розмірів і положень щодо границь розділу дефектного шару й суміжних середовищ.

4. На основі розроблених моделей досліджено вплив окисації на спектральні характеристики плівок для халькогенідної фотоніки. Вперше виявлено, що зростання товщини окисного шару призводить до збільшення пропускання та зсуву спектральних характеристик в область довгих хвиль, а відхилення становлять 5–8% залежно від довжини хвилі.

5. Вперше проведено дослідження впливу технологічних похибок з нормальним законом розподілу на спектральні характеристики широкосмугових фільтрів за допомогою методу Монте-Карло.

6. Розроблено методи розв'язання задач СОП, які базуються на градієнтних та квазіньютонівських методах,  $r$ -алгоритмах Шора, методах нульового порядку. Досліджено різні способи вибору початкових наближень.

7. Вперше розроблено пришвидшений спосіб для знаходження градієнта цільової функції за допомогою використання префікс- та суфікс-масивів у аналітичному способі обчислення градієнта.

8. Для пришвидшення методів розв'язання задач СОП використано табуляцію значень тригонометричних функцій. Показано, що при виконанні  $10^9$  операцій множення характеристичних матриць це зменшує час виконання програми у 80-140 разів залежно від характеристик комп'ютера.

9. Запропоновано двоетапний метод, який дозволяє компонувати покриття з уже наявних матеріалів з реальними показниками заломлення. За його допомогою покращено спектральні характеристики трьох існуючих широкосмугових інтерференційних фільтрів.

10. На основі методів розв'язання задач СОП розроблено новий підхід для розв'язання задачі розпізнавання профілю показника заломлення миш'яковмісної халькогенідної плівки при одночасній зміні показника заломлення і товщини при фотозатемненні в результаті опромінення. Відтворення експериментальної кривої пропускання опроміненої плівки забезпечує ступінчаста модель профілю показника заломлення плівки, яка включає приповерхневу область, центральну частину і

перехідну область плівка-підкладинка. Визначено розміри приповерхневої та перехідної областей та величину росту товщини халькогенідної плівки після опромінення.

11. На основі розроблених моделей з неоднорідностями на межах розділу запропоновано профіль показника заломлення за товщиною германієвмісної халькогенідної плівки при фотопросвітленні після опромінення та отримана оцінка росту її товщини після опромінення.

12. Для забезпечення максимального пропускання світла вперше проведено оптимізацію параметрів неоднорідних плівок, нанесених на високозаломлюючі підкладинки халькогенідної фотоніки.

### СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Стецюк П.И., Мица А.В. О задачах оптимизации параметров для многослойных оптических покрытий. *Кибернетика и системный анализ*. № 4. 2005. С. 107–115.
2. Mitsa A., Mitsa V., Ugrin A. Mathematical modeling of spectral characteristics of optical coatings with slightly inhomogeneous chalcogenide films. *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*. Vol. 7, No. 2, April 2005. P.955-962.
3. Mitsa A.V., Fekeshgazy I.V., Ugrin A.V. Optical coatings based on non-crystalline films with transition substrate-film layers: sims and auger profiles. *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*. Vol. 7, № 4, August 2005. P.1807–1812.
4. Міца О.В., Фекешгазі І.В. Математичне моделювання впливу дисперсії на спектральні характеристики оптичних фільтрів на прикладі одного з матеріалів. *Вісник Тернопільського державного технічного університету*. №2. Том 10. Тернопіль, 2005. С. 152-156.
5. Стецюк П.И., Міца О.В. Про обчислення градієнта у задачі синтезу оптичних покриттів. *Теорія оптимальних рішень*. № 4. Київ, 2005. С. 127–133.
6. Mitsa A., Mitsa V., Ugrin A., Modelling of spectral characteristics on inhomogeneous (gradient) antireflective coatings based on chalcogenide glasses. *J. Chalcogenide Letters*. Vol.2. N1. 2005. P.5-7.
7. Fekeshgazi, I. V., Sidenko, T. S., Mitsa, O. V., Barna, P., Kikineshi, O. E. Effects of layer nanodefects on the light transmission by optical elements with multilayer interference coatings. *Ukrainian Journal of Physics*. 56(11). 2011. P. 1165-1170.
8. Petsko V., Mitsa O., Borkach E. Design of antireflection coatings of a small number of layers at the incidence of light in angle. *Science and Education a New Dimension Natural and Technical Sciences*. II(3). Issue 21. 2014. P. 63-65.
9. Пецко В. І., Міца О. В., Фекешгазі І. В. Моделювання просторово-поляризаційних параметрів спектральних характеристик вузькосмугових оптичних фільтрів. *Комп'ютерна математика*. Випуск. 1. 2014. С. 37- 45.
10. Пецко В. І., Міца О. В., Головач Й. Г. Дослідження оптимальних параметрів одно-, двошарових однорідних оптичних структур для просвітлення низькозаломлюючої підкладинки при падінні світла під кутом. *Комп'ютерна математика*. Випуск. 2. 2014. С. 231- 241.
11. Пецко В. І., Міца О. В. Моделювання впливу неоднорідностей на спектральні характеристики вузькосмугових оптичних фільтрів. *Східно-Європейський*

*журнал передових технологій*. 4/5(70). 2014. С. 15- 20.

12. Пецко В. І., Міца О. В. Моделювання просторово-поляризаційних параметрів та вплив неоднорідностей на спектральні характеристики ширококутових фільтрів *Вісник Тернопільського національного технічного університету*. №3(75). 2014. С. 231-241.
13. Petsko V. I., Mitsa A. V., Geche F. E., Kotsovsky V. M., Batyuk A. Ye. Optimal parameters of four-layer optical structures when the light is incident at an angle. *Вісник Національного університету "Львівська політехніка". Серія комп'ютерні науки та інформаційні технології*. № 800. 2014. С. 66-71.
14. Міца О., Пецко В., Боркач Є., Петрецький С. Вплив неоднорідностей показника заломлення на спектральні характеристики вузькосмугових оптичних фільтрів при зміні робочої довжини хвилі. *Science and Education a New Dimension Natural and Technical Sciences*. III(6), Issue 54, 2015. P. 31-34.
15. Міца О.В., Гече Ф.Е., Коцовський В.М. Задача просвітлення підкладки за допомогою тришарових оптичних структур при падінні світла під кутом. *Вісник Національного університету "Львівська політехніка". Серія комп'ютерні науки та інформаційні технології*. № 843. 2016. С. 351-356.
16. Міца О.В., Пецко В.І., Стецюк В.І. Двоетапний метод для синтезу багатошарових оптичних систем. *Комп'ютерна математика*. № 1. 2017. С. 73-82.
17. Стецюк П.І., Міца О.В., Стрелюк О.В., Фесюк О.В. Транспортна задача з обмеженнями на пропускні спроможності проміжних пунктів. *Питання прикладної математики і математичного моделювання*. Д.: ДНУ, 2017. С. 207–219.
18. Міца В., Фегер О., Голомб Р., Ткач В., Іванда М., Міца О., Петрецький С. Взаємозв'язок низькотемпературних аномалій теплопровідності та низькочастотних Раман спектрів широкозонних халькогенідних стекол для оптичних покриттів силової оптики. Вид-во «Рік», Ужгород, 2019. 152 С.
19. Holomb R., Ihnatolia P., Mitsa O., Mitsa V., Himics L., Veres M. Modeling and first-principles calculation of low-frequency quasi-localized vibrations of soft and rigid As–S nanoclusters. *Applied Nanoscience*. 2019. С. 1-12.
20. Міца О. Моделі оптичних шаруватих структур з неоднорідностями та оптимізація їх параметрів. Вид-во «Рік», Ужгород, 2020. 336 с.
21. Міца О., Пецко В., Боркач Н., Кондрат О., Сорока Д. Проектування просвітлюючих оптичних покриттів для широкого спектрального діапазону при падінні світла під кутом. *Science and Education a New Dimension Natural and Technical Sciences*. 2020. С. 38-40.
22. Міца О., Боркач Н., Задорожній Є., Мельник Р., Сичов М. Моделювання впливу неоднорідностей на спектральні характеристики при створенні просвітлюючих фільтрів. *Science and Education a New Dimension Natural and Technical Sciences*. 2020. С. 39-42.
23. Kondrat O., Holomb R., Mitsa A. etc., Reversible laser-assisted structural modification of the surface of As-rich nanolayers for active photonics media. *Applied Surface Science*. 2020. P. 146240.
24. Mitsa O., Horoshko Y., Vapnichnyi S. Reduction of programs execution time for tasks

related to sequences or matrices. *EDP Sciences. In SHS Web of Conferences*. Vol. 75. 2020. P. 04019.

### СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ АПРОБАЦІЙНОГО ХАРАКТЕРУ

25. Fekeshgazi, I., Vlasenko, Y., Ivan, S., Mitsa, A., Trukhan, V., Sheleg, A. Applied aspects of the nonlinear absorption and gyrotropy of CdP<sub>2</sub> crystals. *Proc. 8 th World Multiconference on Systemics, Cybernetics and Informatics (SCI 2004): Invited Session "Photonic Materials for Optical Computing"*. Vol. XVI, Orlando, USA, July 18-21, 2004. P. 421-424.
26. Mitsa, A., Fekeshgazi, I., Gomes, M. Modelling of Spectral Characteristics of Short-period Structures with Slightly Inhomogeneous Films Based on Wide Bandgap Optical Materials. *Proc. 8 th World Multiconference on Systemics, Cybernetics and Informatics (SCI 2004): Invited Session "Photonic Materials for Optical Computing"*. Vol. XVI, Orlando, USA, July 18-21, 2004. P. 634-637.
27. Стецюк П.І., Мица О.В. До використання методів першого порядку в задачах оптимізації багатошарових оптичних плівок. *Міжнародна школа-семінар "Теорія прийняття рішень"*. Ужгород, 2004. С. 88.
28. Фекешгази И.В., Власенко Ю.В., Слипухина И.В., Иван С.Я., Мица А.В., Трухан В.М., Шелег А.У. Влияние дисперсии показателей преломления материалов функциональных элементов на эффективность их ахроматического просветления. *II Українська наукова конференція з фізики напівпровідників*. Чернівці, 2004. С. 206.
29. Fekeshgazi I.V., Vlasenko Yu.V., Slipukhina I.A., Sidenko T.S., Ivan S.Ya., Mitsa O.V. Effect of the refraction index dispersion of optical elements on the base of CdP<sub>2</sub> on the efficiency of antireflective coating performance. *Fifth International Young Scientists Conference "Problems of Optics & High Technology Material Science SPO 2004"*. Kyiv, 2004. P. 166–167.
30. Фекешгази И.В., Сиденко Т.С., Мица А.В., Трухан В.М., Шелег А.У. Выращивание и прикладные аспекты нелинейной поглощательной способности и гиротропии кристаллов дифосфида кадмия. *Международная конференция "Современное материаловедение: достижение и проблемы MMS-2005"*. Киев, 2005. С. 407–408.
31. Фекешгазі І., Сіденко Т., Мица О., Трухан В., Шелег А. Нелінійна поляризованість та гіротропія кристалів дифосфіда кадмію. *Всеукраїнський з'їзд "Фізика в Україні"*. Одеса, 2005. С. 186–187.
32. Фекешгази И.В., Сиденко Т.С., Мица А.В., Трухан В.М., Шелег А.У. Прикладные аспекты нелинейной поглощательной способности и гиротропии кристаллов дифосфида кадмия. *Международная научная конференция "Актуальные проблемы физики твердого тела ФТТ-2005"*. Минск, 2005. С. 355–358.
33. Мица О.В., Матяшовська Б.О., Шумило Н.Я. Дослідження стійкості спектральних характеристик за допомогою методу Монте-Карло на прикладі різних інтерференційних фільтрів. *Міжнародна школа-семінар "Теорія прийняття рішень"*. Ужгород, 2006. С. 74.

34. Міца О.В., Стецюк П.І. Дослідження оптимізації спектральних характеристик семишарового оптичного покриття з чергуючимися шарами. *Міжнародна школа-семінар “Теорія прийняття рішень”*. Ужгород, 2006. С. 75.
35. Міца О.В., Фекешгазі І.В. Дослідження впливу параметра нерівнотовщинності інтерференційних структур на їх спектральні характеристики. *Міжнародна школа-семінар “Теорія прийняття рішень”*. Ужгород, 2006. С. 76.
36. Міца О., Мартон А., Петков К. Моделювання впливу процесів оксидації поверхні плівок на спектральні характеристики інтерференційних фільтрів. *Міжнародна школа-семінар “Теорія прийняття рішень”*. Ужгород, 2008. С. 88.
37. Міца О.В., Матяшовська Б.О., Шумило Н.Я. Дослідження чутливості спектральних характеристик до технологічних похибок за допомогою методу Монте-Карло на прикладі відрізаючих інтерференційних фільтрів типу S-VNB...VNB. *Міжнародна школа-семінар “Теорія прийняття рішень”*. Ужгород, 2008. С. 89.
38. Fekeshgazi I.V., Barna P., Kikineshi O.E., Mitsa O.V., Sidenko T.S. Influence of nanodefects on the light transmission by multilayer interference systems. *Proceedings of the Third International Scientific Conference “Physical and chemical principles of formation and modification of micro- and nanostructures”*. Kharkov. October 21-23, 2009. P. 190-192.
39. Міца О.В., Матяшовська Б.О., Шумило Н.Я. Дослідження чутливості спектральних характеристик ширококугових інтерференційних фільтрів типу S-2VNB2V...2VNB2V до технологічних похибок за допомогою методу Монте-Карло. *Міжнародна школа-семінар “Теорія прийняття рішень”*. Ужгород, 2010. С. 154-155.
40. Міца О.В. Синтез однорідних та неоднорідних оптичних структур при просвітленні високозаломлюючої підкладинки для різних спектральних діапазонів. *Міжнародна школа-семінар “Теорія прийняття рішень”*. Ужгород, 2010. С. 152-153.
41. Мица А.В., Стецюк П.И. Использование  $r$ -алгоритма для оптимизации трех оптических многослойных покрытий. *Материалы 5-й международной конференции «Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии»*. Т. II. Кишиневу, 2010. С. 100-108.
42. Міца О.В., Повідайчик М.М. Оптимізація портфеля замовлень на підприємстві. *І міжнародна науково-технічна конференція “Обчислювальний інтелект”*. Черкаси, 2011. С. 456-457.
43. Мица А.В. Использование  $r$ -алгоритма для оптимизации неоднородных оптических покрытий. *Материалы 3-й международной конференции «Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии»*. Т. II. Кишиневу, 2012. С. 405-410.
44. Пецко В.В., Міца О.В., Головач Й.Г. Моделювання структури оптичних фільтрів в середовищі Інтернет. *Міжнародна школа-семінар “Теорія прийняття рішень”*. Ужгород, 2012. С. 151.
45. Міца О.В., Матяшовська Б.О., Шумило Н.Я. Дослідження чутливості спектральних характеристик одно-, дво-, три- та чотиришарових однорідних

оптичних структур до технологічних похибок за допомогою методу Монте-Карло. *Міжнародна школа-семінар "Теорія прийняття рішень"*. Ужгород, 2012. С. 142-143.

46. Holomb R., Mitsa O., Akalin E., Akyuz S. Spectroscopic studies g-GeSe<sub>2</sub>-material for telecommunication: theory and experiment. *Матеріали першої міжнародної науково-практичної конференції молодих науковців "Інформаційні технології як інноваційний шлях розвитку України у XXI столітті"*. Ужгород, 2013. С. 41-44.
47. Mitsa A., Holovacs J., Petcko V. Optimization of structure of the wide band interference filters. *The 9th International Conference on Applied Informatics*. Eger, Hungary, January 29–February 1, 2014. P.231-237.
48. Мица О. В., Матяшовська Б.О., Шумило Н.Я. Дослідження чутливості спектральних характеристик неоднорідної плівки з різними розподілами показника заломлення до технологічних похибок за допомогою методу Монте-Карло. *Матеріали VII міжнародної школи-семінару «Теорія прийняття рішень»*. Ужгород, УжНУ 2014. С. 195.
49. Пецко В. И., Мица А. В. Проектирование трехслойных просветляющих покрытий при падение света под углами 30<sup>0</sup> и 45<sup>0</sup>. *Материалы 4-й международной конференции «Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии»*. Т. II. Кишинев, 2014. С. 372-377.
50. Фекешгази И. В., Каюкин В. А., Сиденко Т. С., Мица А. В., Пецко В.И. Угловые и поляризационные зависимости пропускания света интерференционными фильтрами из тугоплавких оксидов. *Материалы IV международной самсоновской конференции*. Киев, 2014, УМТ. С. 48-49.
51. Фекешгази И. В., Сиденко Т. С., Мица А. В., Пецко В.И. Пространственно-поляризационные зависимости пропускания света интерференционными структурами фильтров для фотовольтаники. *Матеріали III-ї міжнародної практичної конференції «Напівпровідникові матеріали, інформаційні технології та фотовольтаїка»*. Кременчук, 2014. С. 29-30.
52. Пецко В.И., Мица О.В. Проектування чотиришарових просвітлюючих покриттів при падінні світла під кутом 45<sup>0</sup>. *Матеріали VII міжнародної школи-семінару «Теорія прийняття рішень»*. Ужгород, 2014. С. 196-197.
53. Фекешгази И. В., Сиденко Т. С., Мица А.В., Пецко В.И. Угловые и поляризационные зависимости пропускания света интерференционными структурами сенсорных систем. *Матеріали VI-ї міжнародної науково-технічної конференції «Сенсорна електроніка та мікросистемні технології»*. Одеса, 2014. С. 151.
54. Innatolia P., Holomb R., Mitsa A., Mitsa V., Feher A. Modeling and ab initio DFT studies of As<sub>4</sub>S<sub>m</sub> (m=0-6) cage-like nanoclusters and 12-membered As-S ring conformers. *International research and practice conference «Nanotechnology and nanomaterials»*. Lviv, Ukraine, August 24-27, 2016. P. 534.
55. Мица А.В., Пецко В.И. Проектирование двухслойных и трехслойных просветляющих оптических покрытий в широком диапазоне при падение света под углом 45<sup>0</sup>. *Материалы 5-й международной конференции «Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии»*. Т. II. Кишинев,

2016. С. 92-97.

56. Mitsa O., Petcko V., Holovacs J., Levchuk O. Optimization of the parameters of the layer system on the example of the optical structure. *The 1th IEEE International Conference on Data Stream Mining & Processing*. Lviv, Ukraine. August 23-27, 2016. P. 96-99.
57. Пецко В.І., Міца О.В., Матяшовська Б.О., Шумило Н.Я. Моделювання просторово-поляризаційних залежностей для одного з типів відрізаючих оптичних фільтрів. *Праці VIII міжнародної школи-семінару "Теорія прийняття рішень"*. Ужгород, 2016. С. 213-214.
58. Головач Й.Г., Міца О.В., Оришич С.С. Синтез одного класу теплообмінних систем, як задача прийняття рішень. *Праці VIII міжнародної школи-семінару "Теорія прийняття рішень"*. Ужгород, 2016. С. 213-214.
59. Спачинський В.В., Міца О.В. Автоматизація розрахунків спектральних характеристик оптичних систем, які мають шарувату структуру. *Міжнародна конференція молодих учених та аспірантів "ІЕФ-2017"*. Ужгород, 2017. С. 118.
60. Ihnatolia P., Mitsa A., Holomb R. Modeling and ab initio calculations of molecular- and 2D network-like isomers of light sensitive chalcogenides. *Міжнародна конференція молодих учених та аспірантів "ІЕФ-2017"*. Ужгород, 2017. С. 143.
61. Міца О.В., Пецко В.І., Спачинський В.В. Особливості синтезу структур оптичних багатошарових систем. *Міжнародна наукова конференція «Сучасна інформатика: проблеми, досягнення та перспективи розвитку»*. Київ, Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, 2017. С. 109 – 110.
62. Holomb R., Ihnatolia P., Mitsa A., Mitsa V. Modelling and first-principles calculation of low frequency quasy-localized vibrations of soft and rigid As-S. *International research and practice conference «Nanotechnology and nanomaterials»*. Chernivtsi, Ukraine. August 23-26, 2017. P. 484.
63. Левчук А.М., Мица А.В., Копча-Горячкина Г.Э., Попович И.И. Робототехническая система реализации алгоритма CFOP. *Материалы 6-й международной конференции «Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии»*. Т. II. Кишинев, 2018. С. 377-381.
64. Mitsa O., Holovacs J., Holomb R., Levchuk O. Investigation of the influence of errors the parameters of the layers of optical filters on the stability of their spectral characteristics. *The 11th International Conference on Applied Informatics*. Eger, Hungary. January 28-29, 2020. P.242-249.
65. Holomb R., Kondrat O., Mitsa V., Mitsa A., Gevczy D., Olashyn D., Veres M., Himics L., Rigó I., Váczi T., Czitrovszky A., Csík A., Takats V. Characterization by scanning electron microscopy and energy-dispersive X-ray and Raman spectroscopy of As-S crystallites synthesized by nano-gold catalysis. *8th International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" (NANO-2020)*. Lviv, Ukraine. August 26 - 29, 2020. P. 398.

## АНОТАЦІЯ

**Мица О.В.** Моделювання та оптимізація спектральних коефіцієнтів шаруватих оптичних систем з неоднорідними границями. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук за спеціальністю 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи (12 – інформаційні технології). – Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, Київ, 2021.

Дисертаційна робота присвячена розробці математичного, алгоритмічного та програмного забезпечення для комп'ютерного моделювання оптичних систем з врахуванням неоднорідностей на границі розділу, дисперсії показника заломлення, мас-транспорту, нанодфектів, оксидації, стійкості до технологічних похибок. Проведено моделювання впливу неоднорідностей на границі розділу та нанодфектів плівок на спектральні характеристики різних оптичних фільтрів. Досліджено динаміку зміни просторово-поляризаційних параметрів вузькосмугових, відрізаючих та широкосмугових оптичних фільтрів при падінні світла під кутом. Запропоновано моделі оптимізаційних задач синтезу оптичних покриттів (СОП) та розроблено методи їх розв'язання, які базуються на градієнтних методах, квазіньютонівських методах,  $\gamma$ -алгоритмах Шора, методах нульового порядку. Розроблено пришвидшений спосіб знаходження градієнта цільової функції та запропоновано комп'ютерні реалізації для пришвидшеного розв'язання задач СОП. Розроблено двоетапний метод, який дозволяє компонувати покриття з уже наявних матеріалів з реальними показниками заломлення. За його допомогою покращено спектральні характеристики трьох існуючих широкосмугових інтерференційних фільтрів. Запропоновано новий підхід для розв'язання задачі розпізнавання профілю показника заломлення халькогенідної плівки  $As_2S_3$  після опромінення, який базується на розроблених моделях шаруватих структур та методах розв'язання задач СОП. Запропоновано моделі профілю показника заломлення за товщиною плівок до і після опромінення халькогенідної плівки  $GeS_2$  та отримано оцінку росту її товщини після опромінення. Проведено оптимізацію параметрів неоднорідних плівок, нанесених на високозаломлюючі підкладинки халькогенідної фотоніки.

**Ключові слова:** моделювання, оптичні шаруваті покриття, спектральні характеристики, синтез оптичних покриттів, неоднорідні границі, метод Абеле, метод Монте-Карло, нелінійні задачі, методи оптимізації.

## АННОТАЦИЯ

**Мица А.В.** Моделирование и оптимизация спектральных коэффициентов слоистых оптических систем с неоднородными границами. – Квалификационный научный труд на правах рукописи.

Диссертация на соискание ученой степени доктора технических наук по специальности 01.05.02 – математическое моделирование и вычислительные методы (12 – информационные технологии). – Институт кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины, Киев, 2021.



Диссертационная работа посвящена разработке математического, алгоритмического и программного обеспечения для компьютерного моделирования оптических систем с учетом неоднородностей на границе раздела, дисперсии показателя преломления, масс-транспорта, нанодефектов, окисидации, устойчивости к технологическим ошибкам. Проведено моделирование влияния неоднородностей на границе раздела и нанодефектов пленок на спектральные характеристики различных оптических фильтров. Исследована динамика изменения пространственно-поляризационных параметров узкополосных, отрезающих и широкополосных оптических фильтров при падении света под углом. Предложены модели оптимизационных задач синтеза оптических покрытий (СОП) и разработаны методы их решения, основанные на градиентных и квазиньютоновских методах, r-алгоритмах Шора, методах нулевого порядка. Разработан ускоренный способ нахождения градиента целевой функции и предложены компьютерные реализации для ускоренного решения задач СОП. Разработан двухэтапный метод, который позволяет компоновать покрытие из уже имеющихся материалов с реальными показателями преломления. С его помощью улучшены спектральные характеристики трех существующих широкополосных интерференционных фильтров. Предложено новый подход для решения задачи распознавания профиля показателя преломления халькогенидной пленки  $As_2S_3$  после облучения, основанное на разработанных моделях слоистых структур и методах решения задач СОП. Предложены модели профиля показателя преломления по толщине пленок до и после облучения халькогенидной пленки  $GeS_2$  и получена оценка роста ее толщины после облучения. С помощью разработанных методов решения задач СОП проведена оптимизация параметров неоднородных пленок, нанесенных на высокопреломляющие подложки халькогенидной фотоники.

**Ключевые слова:** моделирование, оптические слоистые покрытия, спектральные характеристики, синтез оптических покрытий, неоднородные границы, метод Абеле, метод Монте-Карло, нелинейные задачи, методы оптимизации.

## ABSTRACT

**Mitsa O.V.** Modeling and optimization of spectral coefficients of layered optical systems with inhomogeneous boundaries. – Qualifying scientific work based on the rights of the manuscript.

The dissertation on competition of a scientific degree of the doctor of technical sciences on a specialty 01.05.02 – mathematical modeling and computational methods (12 – information technologies). V.M. Glushkov Institute of Cybernetics NAS of Ukraine, Kyiv, 2021.

The dissertation is devoted to the development of mathematical, algorithmic and software for computer design of optical systems taking into account the inhomogeneities at the interface, refractive index variance, mass transport, nanodeflects, oxidation and the analysis of stability layered structures to technological errors. Methods of mathematical modeling of layered optical systems, being widely used in such areas of high technology as laser technology, optoelectronics, telecommunications, have been considered in the

thesis. The spectral coefficients of layered optical systems have been determined using the Abele matrix method. The primary task in the design of such systems is to ensure the maximum selectivity and operational reliability while using a minimum number of thin-film layers. The influence of inhomogeneities at the interface and film nanodefects on the spectral characteristics of different optical filters has been modeled. The dynamics of changes in the spatial-polarization parameters of narrowband, cut-off and broadband optical filters with the light falling at the angle has been studied. A model most effectively approximating the variance of the refractive index has been proposed as well as the one of the structure of the defective layer. The influence of nanodefects depending on their nature, size and position on the spectral coefficients of the studied multilayer optical system was also in the focus of the attention. Smooth and non-smooth optimization methods (Shore r-algorithm) are used for the synthesis of optical filters. A two-steps method has been proposed. It allows to take into account partial inhomogeneity, refractive index variance, mass transport, nanodefects, oxidation and stability to technological errors. The Monte Carlo method is used to study the stability of spectral characteristics. Approaches allowing to accelerate the finding of solutions in the problems of synthesis of optical coatings (SOC) are considered in the thesis as well. This is the usage of an analytical derivative (accelerated version), tabulation of values, rapid multiplication of matrices and the usage of an efficient method for one-dimensional optimization. The choice of initial approximations for the effective solution of the problem of synthesis of optical filters has been offered. The proposed methods improve the spectral characteristics of existing broadband interference filters. The solution of the problem of reconstruction of the refractive index profile of the chalcogenide film  $\text{As}_2\text{S}_3$  after irradiation is proposed. It is based on the developed models of layered structures and the methods for solving the problems of synthesis of optical coatings. Models of the refractive index profile along the film thickness before and after irradiation of the chalcogenide film  $\text{GeS}_2$  are proposed and an estimate of the growth of its thickness after irradiation has been obtained. With the help of the developed methods of solving SOC problems, the parameters of inhomogeneous films deposited on highly refracting substrates of chalcogenide photonics were optimized to ensure maximum light transmission.

The results obtained in the dissertation have allowed to set and solve scientific and practically important tasks for the investigation, designing and optimization of the characteristics of optical layered coatings with inhomogeneities. The approaches being developed, numerical-analytical methods and the programs have allowed to diagnose and optimize the characteristics of layered structures during fabrication of optical elements for the chalcogenide photonics and the creation of amorphous superlattices based on chalcogenide films. Models, algorithms, methods and software are introduced into the educational process of the Faculty of Information Technologies of Uzhhorod National University.

**Keywords:** modeling, optical layered coatings, spectral characteristics, synthesis of optical coatings, inhomogeneous boundaries, Abele method, Monte Carlo method, nonlinear problems, optimization methods.