

Оптимізація спектральних характеристик неоднорідної плівки з лінійним розподілом показника заломлення

О.В. Міца¹, Ю.О. Первак², І.В. Фекешгазі²

¹Ужгородський національний університет,
²Інститут фізики напівпровідників НАН України

Проведено оптимізацію спектральних характеристик неоднорідних плівок з лінійним розподілом показника заломлення на підкладинках з показником заломлення $n_s = 4$. Шляхом співставлення результатів розрахунків на основі використання великого числа методів багатовимірного пошуку екстремумів без обмежень, виходячи з критерію тривалості розрахунків, одержаного середньоквадратичного значення пропускання, рекомендовано кращі методи оптимізації параметрів неоднорідних плівок.

Використання неоднорідних плівок для створення оптичних покриттів та інтегрально-оптичних елементів є актуальним прикладним завданням в оптичному приладобудуванні та інтегральній оптиці [1-4]. Однак теоретичні основи розрахунків характеристик плівок в області оптики неоднорідних покриттів розроблено недостатньо [2,4]. Використовуючи методи багатовимірного пошуку екстремумів нелінійних функцій без обмежень, можна визначити оптимальні для просвітлення параметри плівок з різним характером неоднорідності та дати оцінку їх ефективності для просвітлення різних підкладинок в різних спектральних ділянках [2, 3]. Метою даної роботи було встановлення впливу лінійного розподілу показника заломлення неоднорідної плівки на спектральну залежність пропускання високозаломлюючих підкладинок в області довгих хвиль.

Спектральні характеристики структури будемо розраховувати використовуючи матричний метод Абеле [3-7].

Як відомо [1], характеристична матриця одного шару задається у вигляді:

$$M_j(N_j, d_j, \lambda) = \begin{vmatrix} \cos \delta_j(N_j, d_j, \lambda) & -\frac{i}{p_j} \sin \delta_j(N_j, d_j, \lambda) \\ -ip_j \sin \delta_j(N_j, d_j, \lambda) & \cos \delta_j(N_j, d_j, \lambda) \end{vmatrix},$$

де $\delta_j(N_j, d_j, \lambda) = \frac{2\pi N_j d_j \cos \theta_j}{\lambda}$, $N_j = n_j(1 + ik_j)$, $i = \sqrt{-1}$, $n_j, k_j, d_j, \theta_j, \lambda$ – показник заломлення, показник поглинання, геометрична товщина, кут між променем, що падає на $(j+1)$ -ий шар, і перпендикуляром до площини падіння, довжина хвилі відповідно.

Оскільки для багатьох матеріалів показник поглинання дуже незначний, то будемо вважати для полегшення моделювання $k_j=0$ і, відповідно, $N_j=n_j$.

Значення $p_j = N_j \cos \theta_j$ – для ТЕ хвилі (s -поляризація) і $p_j = \frac{N_j}{\cos \theta_j}$ – для ТМ хвилі (p -поляризація).

Розглянемо випадок, коли кут падіння співпадає з перпендикуляром до площини падіння, тому $\theta_j=0$ і, відповідно, $p_j = N_j$.

Шари будемо нумерувати в порядку розташування їх на підкладинці.

У відповідності з [2] лінійну неоднорідність будемо представляти діленням півки на m рівних за товщиною зон (рис.1), показники заломлення в яких змінюються за лінійним законом $n_j = n_1 - \frac{z}{m-1} \cdot (j-1)$ (рис.2), де n_1 – значення показника заломлення першої зони, z – значення, на яке змінюється показник заломлення від першої зони до межі останньої зони і зовнішнього середовища, $j=1..m$ – номер зони. При $z > 0$ показник заломлення неоднорідної півки лінійно спадає, а при $z < 0$ – лінійно зростає.

Характеристична матриця неоднорідної півки [1] буде рівною

$$M^{неодн.}(n_1, d, \lambda) = M_m\left(n_m, \frac{d}{m}, \lambda\right) \cdot M_{m-1}\left(n_{m-1}, \frac{d}{m}, \lambda\right) \cdots M_1\left(n_1, \frac{d}{m}, \lambda\right),$$

де M_j – характеристична матриця j -ої зони;

d – геометрична товщина неоднорідної півки;

λ – довжина хвилі.

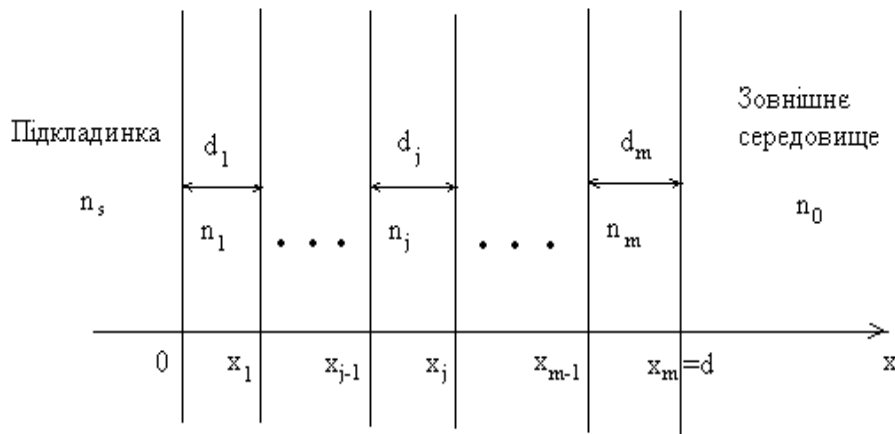


Рис.1. Схематичне зображення неоднорідної півки поділеної на m зон.

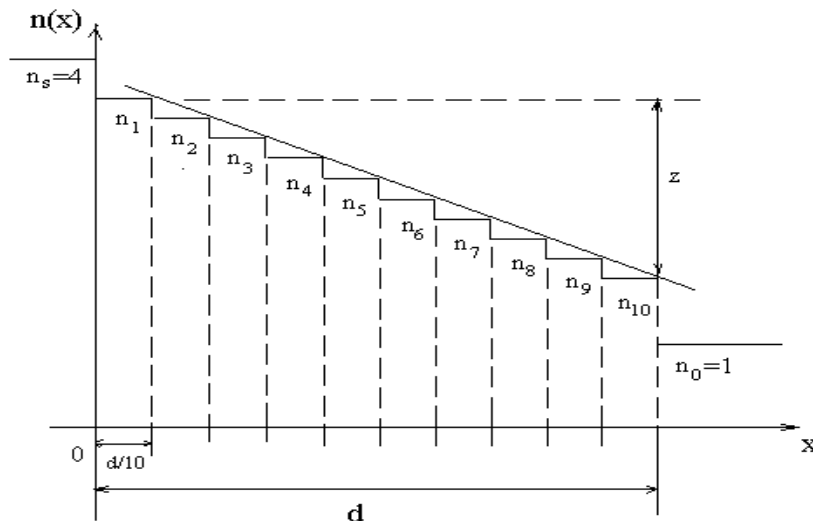


Рис.2. Схематичне зображення неоднорідної півки, розбитої на 10 зон, з лінійним розподілом показника заломлення.

Звідси легко знайти коефіцієнт пропускання неоднорідної плівки при заданих значеннях показника заломлення n_1 , геометричної товщини d та довжини хвилі λ [1]:

$$T(n_1, d, \lambda) = 1 - \left[\frac{n_0(M_{11}^{неодн.}(n_1, d, \lambda) + n_s \cdot M_{12}^{неодн.}(n_1, d, \lambda)) - (n_s \cdot M_{22}^{неодн.}(n_1, d, \lambda) + M_{21}^{неодн.}(n_1, d, \lambda))}{n_0(M_{11}^{неодн.}(n_1, d, \lambda) + n_s \cdot M_{12}^{неодн.}(n_1, d, \lambda)) + (n_s \cdot M_{22}^{неодн.}(n_1, d, \lambda) + M_{21}^{неодн.}(n_1, d, \lambda))} \right]^2,$$

де n_0 , n_s – показники заломлення зовнішнього середовища і підкладки відповідно, $M_{11}^{неодн.}$, $M_{12}^{неодн.}$, $M_{21}^{неодн.}$, $M_{22}^{неодн.}$ – елементи характеристичної матриці неоднорідної плівки $M^{неодн.}$.

Цільова функція представляється у вигляді [3]:

$$F(n_1, d) = \left(\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L T^2(n_1, d, \lambda_i) \right)^{1/2},$$

де L – число точок сітки спектрального інтервалу від λ_{\min} до λ_{\max} . При рівномірному його розділенні з кроком $\Delta\lambda$

$$L = \frac{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}{\Delta\lambda} + 1.$$

При розв'язуванні вказаної вище задачі вибиралося $m=10$, $\lambda_{\min}=2000$ нм, $\lambda_{\max}=7000$ нм; при $\Delta\lambda=10$ нм отримуємо $L=501$ точку, $100 \text{ нм} \leq d \leq 1500 \text{ нм}$,

$$z = -1.0, -0.9, \dots, 3.1, \quad n_1 = \begin{cases} \text{від } (1.35 + z) \text{ до } 6.0, & \text{якщо } z > 0 \\ \text{від } 1.35 \text{ до } (6.0 + z), & \text{якщо } z < 0 \end{cases}.$$

Дане обмеження забезпечить дотримання умови, що показник заломлення будь-якої зони неоднорідного шару буде знаходитись в межах від 1.35 до 6.0. В даних межах і містяться показники заломлення реальних матеріалів.

Як видно з розглядуваної моделі кількість зон рівна 10. Розрахунки показали, що збільшення числа зон суттєво не змінює результати.

Цільова функція, яку необхідно максимізувати, буде рівною

$$F(n_1, d) = \left(\frac{1}{501} \sum_{l=0}^{500} T^2(n_1, d, 2000 + 100 \cdot l) \right)^{1/2}.$$

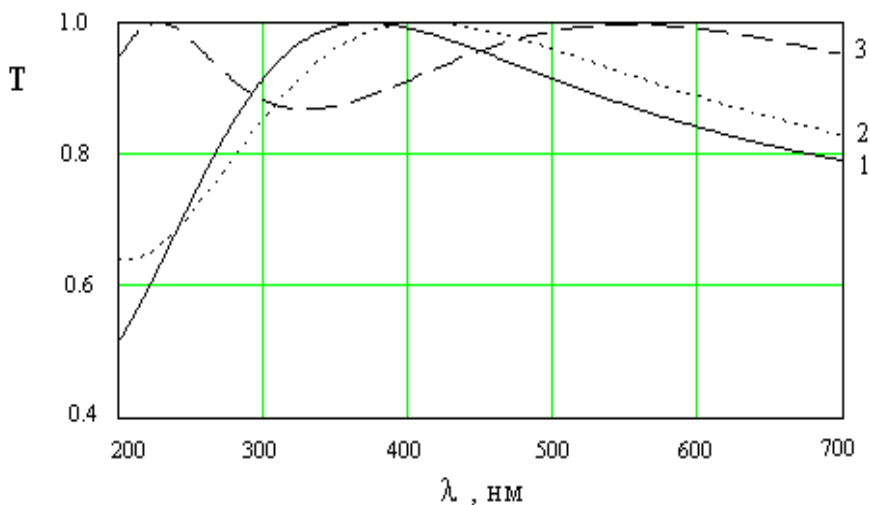


Рис.3. Спектральні характеристики одиничного шару на підкладці з показником заломлення $n_s=4$:

1 – неоднорідний шар з параметрами $n_1=1.478$ і $d=395.0$ нм та коефіцієнтом $z=1.0$;

2 – однорідний шар з параметрами $n_1=2.0$ та $d=514.0$ нм;

3 – неоднорідний шар з параметрами $n_1=2.650$ і $d=906.7$ нм та коефіцієнтом $z=-1.3$.

Для знаходження оптимальних для просвітлення параметрів неоднорідної плівки було випробувано різні методи багатовимірною пошуку екстремумів нелінійних функцій без обмежень [3, 8]. Серед яких методи конфігурацій (Хука-Дживса), Розенброка, найскорішого спуску, спряжених градієнт (Флетчера-Рівса, Поллака-Рібб'єра), змінної метрики (Девідона-Флетчера-Пауелла, Гольдфарба, Фіакко– Мак-Кормика, Грінстада).

Обчислення проводились на комп'ютері з процесором AMD K6-233 МГц 128 МБайт ОЗП.

Таблиця 1. Оптимальні значення функціоналу $F(n_1, d)$ при $n_0=1.0$ та $n_s=4$ при лінійному розподілі показника заломлення.

z	n_1	d	$F(n_1, d)$
-1.0	1.478	395.0	0.8766947
-0.9	1.534	402.6	0.8778510
-0.8	1.590	410.8	0.8790810
-0.7	1.644	419.6	0.8803929
-0.6	1.698	429.2	0.8817965
-0.5	1.751	439.6	0.8833035
-0.4	1.803	451.1	0.8849285
-0.3	1.854	463.9	0.8866895
-0.2	1.904	478.2	0.8886098
-0.1	1.953	494.5	0.8907199
0.0	2.000	514.0	0.8930628
0.1	2.045	536.5	0.8957019
0.2	2.088	566.2	0.8987436
0.3	2.127	611.6	0.9024125
0.4	2.153	725.2	0.9076329
0.5	2.187	772.7	0.9142848
0.6	2.224	803.3	0.9209089
0.7	2.263	830.0	0.9272442
0.8	2.302	855.6	0.9331690
0.9	2.343	880.9	0.9386010
1.0	2.386	906.7	0.9434770
1.1	2.450	920.3	0.9476846
1.2	2.550	912.8	0.9505583
1.3	2.650	906.7	0.9520594
1.4	2.750	902.5	0.9523572
1.5	2.850	900.8	0.9516257
1.6	2.950	902.4	0.9500475
1.7	3.050	909.1	0.9478241
1.8	3.150	924.8	0.9451996
1.9	3.250	1500.0	0.9458146
2.0	3.350	1500.0	0.9478393
2.1	3.450	1500.0	0.9492418
2.2	3.550	1500.0	0.9499826
2.3	3.650	1500.0	0.9500525
2.4	3.750	1500.0	0.9494701
2.5	3.850	1500.0	0.9482744
2.6	3.950	1500.0	0.9465150
2.7	4.050	1500.0	0.9442424
2.8	4.150	1500.0	0.9415003
2.9	4.250	1500.0	0.9383211
3.0	4.350	1500.0	0.9347270
3.1	4.450	1500.0	0.9307375

Для визначення глобального максимуму вибиралась велика кількість початкових значень. Із досягнутих локальних максимумів вибиралося найбільше значення, яке і вважалося глобальним максимумом.

У таблиці 1 наведені оптимальні значення параметрів n_1 та d при різних значеннях z . Слід відмітити, що із збільшенням значення z зростає кількість локальних максимумів. Тобто область, з якої можна вибирати початкові значення для параметрів n_1 та d , які дозволяють досягати глобальний максимум, зменшується.

Від значення $z = -1.0$ до значення $z = 1.1$ зростає значення глобального максимуму, причому значення параметрів n_1 та d в точці глобального максимуму збільшуються. Далі вказана закономірність втрачається.

Починаючи з $z = 1.9$ глобальний максимум досягається на границі при $n_1 = 1.35 + z$ та $d = 1500.0$ нм.

Найбільше значення глобального максимуму досягається при $z=1.4$. Це значення досягається при $n_1=2.750$ та $d=902.5$ нм і становить $F=0.9523572$ (рис.3, крива 3).

При визначенні глобального максимуму ефективність кожного методу дуже різна.

Порівняємо ефективність кожного методу за часом та кількістю ітерацій. Для цього виберемо п'ять різних початкових значень для параметрів n_1 та d при деякому фіксованому z (наприклад при $z=-2.0$). Це будуть точки: I – (1500, 1.7); II – (2000, 3.6); III – (7500, 2.9); IV – (8000, 4); V – (10000, 1.5). Глобальний максимум при цьому повинен досягатись при $n_1=1.350$ та $d=1500$ нм і становити $F_{max}=0.9478393$.

Умовами припинення ітерацій для кожного з методів були умови [3]:
для методу конфігурацій (Хука-Дживса) – $\lambda < 10^{-2}$;

для методу Розенброка – $\left| \frac{F(X_{k+1}) - F(X_k)}{F(X_{k+1})} \right| < \varepsilon, \quad \varepsilon = 10^{-7}$;

для інших методів – $\left| \frac{F(X_{k+1}) - F(X_k)}{F(X_{k+1})} \right| < \varepsilon, \quad \varepsilon = 10^{-7}$.

Слід відмітити, що при дослідженні тришарових структур [3] найефективнішими з методів змінної метрики виявились методи Девідона-Флетчера-Пауелла та Гольдфарба, а методи Фіакко–Мак-Корміка та Грінстадта не змогли локалізувати глобальний максимум. Тобто для обох задач метод Девідона-Флетчера-Пауелла показав свою ефективність, а метод Грінстадта виявився однаково неефективним.

Ефективність ітераційного процесу кожного методу можна оцінити розглянувши таблицю. Швидкість локалізації і знаходження глобального мінімуму найкращою виявилась знову у методах конфігурацій (Хука-Дживса) та Розенброка.

Глобальний максимум в розглядуваній задачі можна досягнути будь-яким методом. Для цього для кожного методу потрібно підібрати відповідне значення ε (табл.4). Звичайно, що із зменшенням значення ε характеристики ефективності кожного методу погіршуються. При $\varepsilon = 10^{-17}$ методи Гольдфарба і Грінстадта теж досягають глобальний максимум, але виходячи з критеріїв часу і кількості ітерацій, за які досягається глобальний максимум, слід відзначити що ці методи є дуже неефективними.

Таблиця 4. Значення ε при якому методи збігаються повністю:

Методи	ε
Розенброка	10^{-8}
Найскорішого спуску	10^{-8}
Флетчера-Рівса	10^{-8}
Поллака-Рібб'єра	10^{-8}
Девідона-Флетчера-Пауелла	10^{-9}
Гольдфарба	10^{-17}
Фіакко–Мак-Корміка	10^{-9}
Грінстадта	10^{-17}

Отже, як слідує з наведених вище результатів, при оптимізації спектральних характеристик неоднорідних плівок з лінійним розподілом показника заломлення найкраще використовувати методи прямого пошуку – методи конфігурацій (Хука-Дживса) та Розенброка.

1. *Сергеев А.Н., Осадчий Л.А., Фролова М.Н.* Однородные и неоднородные пленки оксидных систем // Обзоры по электронной технике. Сер. 6. – М.: ЦНИИ “Электроника”, 1989. – Вып. 2 (430). – 63 с.
2. *Хасс Г., Франкомб М., Гофман Р.* Физика тонких пленок. – М.: Мир, 1978. – Т.8. – С. 88-89.
3. *Яковлев П.П., Мешков Б.Б.* Проектирование интерференционных покрытий. – М.: Машиностроение, 1987. – 192 с.
4. *Vegly P.G., Tikhonravov A.V., Trubetskov M.K.* Efficient refinement algorithm for the synthesis of inhomogeneous optical coatings // Applied Optics. – Vol.36, №7. – P. 1487-1495.
5. *Мица О.В., Головач Й.Г., Первак Ю.О.* Матричний метод дослідження впливу неоднорідностей компонент короткоперіодних структур на їх характеристики // Наук. вісник Ужгород. ун-ту. Сер. матем. і інф. – 2000. – Вип. 5. – С. 75-80.
6. *Holovacs J., Mitsa A., Mitsa V.* Computer modelling of characteristics of structures with short periods // Proc. 4th International Conference on Applied Informatics. Eger-Noszvaj. Hungary. 1999. – P. 51-57.

7. *Pervak Y., Mitsa A., Holovach J., Fekeshgazi I.* Influence of transition film-substrate layers on optical properties of multilayer structure // The International Society for Optical Engineering. Vunnytsa. 2000. – Vol. 4425. – P. 321-325.
8. *Ляшенко И.Н., Карагодова Е.А., Черникова Н.В., Шор Н.З.* Линейное и нелинейное программирование– К.: Выща шк., 1975. – 372 с.