

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ТЕРНОПІЛЬСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ІВАНА ПУЛЮЯ

Міца Олександр Володимирович

УДК 519.87; 535.345.67

**МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ОПТИЧНИХ ШАРУВАТИХ ПОКРИТТІВ ТА
ОПТИМІЗАЦІЯ ЇХ СТРУКТУРИ**

01.05.02. – математичне моделювання та обчислювальні методи

АВТОРЕФЕРАТ
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата технічних наук

Тернопіль – 2004

Дисертація є рукопис

Робота виконана в Ужгородському національному університеті

Науковий керівник: доктор технічних наук, професор

ГОЛОВАЧ Йозеф Ігнацович,
професор кафедри кібернетики
та прикладної математики УжНУ

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук,
професор СОПРОНЮК Федір Олексійович,
Чернівецький національний університет
імені Юрія Федьковича, завідувач кафедри
математичних проблем управління і кібернетики

кандидат технічних наук,
СОЛОВЙОВ Євген Олександрович,
Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова
НАН України, старший науковий співробітник

Провідна установа: Державний науково-дослідний інститут інформаційної
інфраструктури Державного комітету зв'язку та інформатизації та НАН
України, м. Львів, відділ інформаційних технологій та систем

Захист відбудеться “ 10 ” червня 2004 року о 14⁰⁰ годині на засіданні спеціалізованої вченої
ради К 58.052.01 при Тернопільському державному технічному університеті імені Івана Пулюя за
адресою: 46001, м. Тернопіль, вул. Білогірська, навчальний корпус №10

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Тернопільського державного технічного
університету імені Івана Пулюя, 46001, м. Тернопіль, вул. Руська, 56

Автореферат розісланий “ 7 ” травня 2004 р.

Вчений секретар спеціалізованої
вченої ради К 58.052.01
кандидат фізико-математичних наук

Шелестовський Б.Г.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. При вивченні фізичних властивостей деяких нових плівкоутворюючих матеріалів для інтерференційної та силової оптики було виявлено, що при формуванні оптичного покриття на різних підкладках утворюються частково неоднорідні плівки з перехідними областями. На основі оптичних матеріалів можна також формувати неоднорідну плівку з новими унікальними властивостями. В цьому напрямку слід відмітити роботи В. Герасимова, І. Миголинця, О. Тихонравова, Ш. Фурмана, R. Jacobsson та ін. На даний час проблема моделювання характеристик оптичних покриттів з частковою неоднорідністю вирішена недостатньо. Відома шарувато-неоднорідна модель часткової неоднорідності з ступінчастим розподілом не відображає реального розподілу профілю показника заломлення в плівках. Такий стан справ в першу чергу вимагає розробки математичних моделей профілю показника заломлення покриттів, які б враховували реальні дані профілекултивних фізичних досліджень для плівок найбільш вивчених нових матеріалів. Це б уможливило вивчення безпосереднього взаємозв'язку між особливостями формування покриття та інформативними ознаками структури плівка-підкладка. Технологія виготовлення оптичних покриттів вимагає відтворюваності характеристик і прогнозуванню можливих відхилень в параметрах шарів. Методи математичного моделювання в поєднанні з розвитком сучасних комп'ютерних технологій дозволяють у найзагальнішій їх постановці отримати оцінку характеристик покриття, дослідити причину зміни положення і рівня пропускання в екстремумах інтерференційних структур, виконати локальний і глобальний прогноз поведінки і прогнозувати наслідки.

Можливості просвітлення підкладок неоднорідною плівкою, а тим більше порівняльна їх характеристика з результатами просвітлення багатошаровими однорідними структурами, є невивченими. Відомі математичні методи не завжди дозволяють розв'язати оптимально задачу синтезу однорідних шаруватих структур навіть для невеликої кількості шарів. Це стимулювало розробку нових математичних підходів до рішення проблеми синтезу оптичних покриттів, що знайшло відображення в роботах О. Тихонравова, М. Трубецкова, В. Sullivan, J. Dobrowolski, А. Крашлінікової. Тому питання визначення найбільш ефективних методів при розв'язанні різних обернених задач синтезу теж є актуальним в даний час.

За своєю математичною природою задачі синтезу оптичних шаруватих покриттів близькі до цілого ряду задач синтезу в інших областях фізики: електродинаміці, радіофізиці, акустиці. Хоча пристрої, з якими пов'язані ці задачі, можуть на перший погляд суттєво відрізнятися від оптичних шаруватих покриттів, проте хвильові процеси в них та їх основні характеристики описуються тими ж рівняннями, що і в оптиці. Тому математичні методи і підходи до розв'язання задач синтезу,

пов'язаних з оптичними шаруватими покриттями, можна поширити і на задачі синтезу з інших розділів фізики.

Наведені аргументи вказують на актуальність теми, тому дана дисертаційна робота присвячена розв'язанню проблеми визначення і вдосконаленню чисельних методів розрахунку спектральних характеристик оптичних фільтрів різного типу з частковою неоднорідністю у високозаломлюючому шарі; визначенню можливостей просвітлення неоднорідною плівкою із різними типами розподілу показника заломлення низькозаломлюючої і високозаломлюючої підкладинок для різних спектральних інтервалів; визначенню найбільш ефективних методів при розв'язанні різних обернених задач синтезу, а також створенню відповідного програмного забезпечення.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Роботу виконано в рамках гранту Міністерства науки і технологій Ф4 №1706-97 “Дослідження індукованих світлом нелінійних та поляризаційних явищ у неупорядкованих Ge-As-S стеклах і плівках” №0199U004197, держбюджетної теми ДБ-408 Міносвіти і науки “Модифікація перехідного шару на границях плівка-кремній” №0100U005337 та гранту 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).

Мета і задачі дослідження. *Метою роботи* є розробка математичної моделі частково неоднорідних та неоднорідних плівок, дослідження оптимальних параметрів неоднорідної та однорідних багатошарових структур, використовуючи методи багатовимірного пошуку.

Для досягнення вказаної мети необхідно було вирішити такі основні завдання:

1. Розробити математичну модель частково неоднорідної плівки та чисельні методи для моделювання впливу часткової неоднорідності на спектральні характеристики.
2. Розробити математичну модель неоднорідної плівки. Розробити чисельні методи для визначення оптимальних параметрів неоднорідної плівки.
3. Розв'язати оптимізаційну задачу дослідження можливостей просвітлення підкладинок одно-, дво-, три-, чотиришаровими структурами. Порівняти із результатами для неоднорідної структури.
4. Визначити найбільш ефективні методи для розв'язання оптимізаційних задач, пов'язаних із оптичними шаруватими покриттями.
5. Дослідити стійкість спектральних характеристик відносно можливих похибок параметрів для всіх отриманих результатів.

Об'єктом дослідження є оптичні шаруваті покриття.

Предметом дослідження є вплив часткової неоднорідності в плівках на спектральні характеристики інтерференційних фільтрів, визначення оптимальних параметрів неоднорідної і однорідних оптичних структур та визначення найбільш оптимальних методів для розв'язання даної задачі, аналіз стійкості спектральних характеристик відносно можливих похибок параметрів шарів.

Методи дослідження. Для дослідження впливу часткової неоднорідності на спектральні характеристики використовувався матричний метод Абеле.

Для визначення оптимальних параметрів неоднорідної і однорідних оптичних структур використовувалися методи багатовимірної оптимізації: конфігурацій (Хука-Дживса), Розенброка, найскорішого спуску, спряжених градієнтів (Флетчера-Рівса, Поллака-Рібб'єра), змінної метрики (Девідона-Флетчера-Пауелла, Гольдфарба, Фіакко-Мак-Кормика, Грінстадта).

Для дослідження стійкості спектральних характеристик відносно можливих похибок параметрів шарів використовувався метод Монте-Карло.

Наукова новизна роботи полягає в наступному:

1. Розроблено математичну модель частково неоднорідної плівки GeS_2 , яка базується на експериментально отриманих даних. Досліджено вплив неоднорідних областей з різним типом розподілу показника заломлення даної плівки на спектральні характеристики четвертьхвильового і напівхвильового шарів та відрізаючого фільтру типу S-BНВ..ВНВ, вузькосмугового фільтру типу S-BНВ..2В..ВНВ, широкосмугового фільтру типу S-2ВН2В..2ВН2В.
2. Розроблено математичну модель неоднорідної плівки. Визначено оптимальні параметри неоднорідної плівки при просвітленні низькозаломлюючої ($n_s=1.51$) і високозаломлюючої ($n_s=4.0$) підкладинок для різних спектральних інтервалів. Розглядувались такі розподіли показника заломлення неоднорідної плівки: лінійний, квадратичний, логарифмічний, експоненціальний.
3. Досліджено оптимальні параметри одно-, дво-, три-, чотиришарових структур при просвітленні низькозаломлюючої ($n_s=1.51$) і високозаломлюючої ($n_s=4.0$) підкладинок для різних спектральних інтервалів. Наведено їх порівняльну характеристику із результатами, отриманими для неоднорідної плівки.
4. Застосовано алгоритми для розв'язання вищенаведених оптимізаційних задач. Наведено порівняльну характеристику вказаних алгоритмів багатовимірної оптимізації.
5. Досліджено стійкість спектральних характеристик відносно можливих похибок параметрів для всіх отриманих результатів.

Практичне значення отриманих результатів. Сукупність отриманих у дисертації результатів дозволяє ставити і розв'язувати практично важливі задачі по дослідженню та конструюванні оптичних шаруватих покриттів.

Розроблені підходи, числово-аналітичні методики і програми дають змогу проектувати оптичні покриття з кращими властивостями, ніж існуючі, застосовані в СКБ засобів аналітичної техніки м. Ужгорода (акт впровадження від 01.12.2003 р.).

Особистий внесок автора. Усі результати, що складають основний зміст дисертаційної роботи, отримані автором **самостійно**. Публікації [1, 6, 7, 14] написані дисертантом одноосібно. У публікаціях [2–4, 8–13, 15–17], написаних у співавторстві, співавтори брали участь у постановці задачі і в обговоренні результатів. У публікаціях [5, 18], автор дисертації брав участь у постановці задачі, отриманні, обговоренні та узагальненні результатів.

Апробація. Основні результати, представлені в дисертації, доповідались і обговорювалися на наукових конференціях і школах-семінарах, зокрема: 40th Hungarian conference on Spectrochemistry (Дебрецен, 1997, Угорщина); 23rd European congress on molecular spectroscopy (Балатонфюред, 1997, Угорщина); SPIE IV International conference of optical diagnostics of materials and devices for opto-, micro- and quantum electronics (Київ, 1999, Україна); 4th International conference on applied informatics (Егер-Нозвей, 1999, Угорщина); The international society for optical engineering (Вінниця, 2000; 2002, Україна); Міжнародна конференція молодих вчених та аспірантів ІЕФ'2001 (Ужгород, 2001, Україна); 14-й міжнародний симпозіум “Тонкі плівки в оптиці і електроніці” (Харків, 2002, Україна); Міжнародна наукова конференція студентів та молодих вчених “Політ” (Київ, 2002, Україна); The International conference NANO-7/ECOSS-21 (Мальме, 2002, Швеція); Третя міжнародна науково-практична конференція “Штучний інтелект-2002” (Кацивелі, 2002, Україна); Міжнародна школа-семінар “Теорія прийняття рішень” (Ужгород, 2002, Україна); Fourth International Young Scientists Conference “Problems of Optics & High Technology Material Science SPO 2003” (Київ, 2003, Україна).

Публікації. Основні результати дисертаційної роботи опубліковано у 18 друкованих працях, з них 12 статей, у тому числі 4 статті [1–4] у журналах з переліку ВАК України по технічним наукам.

Структура і обсяг роботи. Дисертаційну роботу викладено на 155 сторінках машинописного тексту, вона містить 51 ілюстрацію, 24 таблиць та складається із вступу, п'яти розділів і висновків. Список використаної літератури містить 127 найменувань.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, сформульовано мету досліджень, викладено короткий зміст дисертації і отриманих в ній результатів, виділено їх наукову новизну та практичну значимість.

У **першому розділі** проаналізовано стан проблеми на даний час. Розкрито суть задач аналізу та синтезу для оптичних покриттів. Наведено метод Абеле для розв'язання задачі аналізу (прямої задачі) та дано оцінку задачі синтезу (оберненій задачі) як задачі математичної фізики.

Описано можливі підходи до розв'язання оберненої задачі для оптичних покриттів. Серед них такі, як методи еквівалентних шарів, ефективних меж, корекції спектральних характеристик та методи, що базуються на апроксимації спектральної характеристики покриття різними поліномами. Наведено їх переваги і недоліки при розв'язанні даної задачі.

У **другому розділі** наведено постановку оптимізаційної задачі, яка використовує методи багатовимірного пошуку для знаходження оптимальних параметрів оптичного шаруватого покриття.

Використання методів багатовимірного пошуку дозволяє отримувати найкращі результати при розв'язанні задачі синтезу оптичних шаруватих покриттів. Подано детальний опис даних методів, що використані в дисертаційній роботі. Це такі методи: конфігурацій (Хука-Дживса), Розенброка, найскорішого спуску, спряжених градієнтів (Флетчера-Рівса, Поллака-Рібб'єра), змінної метрики (Девідона-Флетчера-Пауелла, Гольдфарба, Фіакко-Мак-Кормика, Грінстадта). Наведено загальні переваги і недоліки кожного із них. Критерієм ефективності методів вибрано середню витрату машинного часу на пошук та величину області можливих початкових значень, які дозволяють досягнути глобального максимуму. Перше характеризує швидкодію методу, а друге – надійність. Для одновимірної мінімізації був вибраний метод “золотого перерізу”.

Функціонали, які досліджувались в даній роботі є дуже громіздкими і їх похідну аналітично знайти практично неможливо, тому вона визначалась за допомогою методів кінцево-різницевої апроксимації.

При визначенні стійкості спектральних характеристик інтерференційних фільтрів необхідно знати, що похибка вимірювання показника заломлення одного шару становить не вище ± 0.05 , а геометричної товщини – може становити ± 2 нм. В даній роботі застосовано рівномірний розподіл для похибок. Розбивається весь можливий діапазон значень похибок на 100 рівних частин і з кожної із них вибирається одне значення випадковим чином.

У **третьому розділі** побудовано математичні моделі частково неоднорідних плівок, отриманих за експериментальними даними, досліджується вплив даних моделей на спектральні характеристики відносно ідеального випадку та стійкість їх до можливих похибок.

За допомогою профілекултивних методів вивчення складу виявлено, що на межах розділу високозаломлююча некрystalічна плівка-підкладинка і плівка-вакуум виникають неоднорідності складу і відповідно показника заломлення (рис. 1).

Особливості характеристик оптичних короткоперіодних структур з частково неоднорідними плівками практично не досліджені. Тому метою роботи в даному розділі було моделювання спектральних характеристик короткоперіодних структур з частково неоднорідною високозаломлюючою компонентою.

Задання неоднорідності показника заломлення з розподілом $n(z)$ по товщині в перехідному шарі здійснюється наступним чином. Перехідний шар розбивається на m_p рівних за товщиною зон, і значення показника заломлення в залежності від типу розподілу рівне значенню наведеному в таблиці 1. Аналогічно задається неоднорідність у приповерхневому шарі.

Таблиця 1

Розподіли	Показник заломлення j -ої зони перехідної області, n_{pj}	Показник заломлення j -ої зони приповерхневої області, n_{vj}
Ступінчастий	n_p	n_v
Лінійний	$n_f + \frac{(n_p - n_f)}{m_p - 1} \cdot (j - 1)$	$n_v - \frac{(n_v - n_f)}{m_v - 1} \cdot (j - 1)$
Квадратичний	$n_f + \frac{(n_p - n_f)}{(m_p - 1)^2} \cdot (j - 1)^2$	$n_v - \frac{(n_v - n_f)}{(m_v - 1)^2} \cdot (j - 1)^2$
Логарифмічний	$n_f + \frac{(n_p - n_f)}{\ln(m_p)} \cdot \ln(j)$	$n_v - \frac{(n_v - n_f)}{\ln(m_v)} \cdot \ln(j)$
Експоненціальний	$n_f + \frac{(n_p - n_f)}{e^{mp-1} - 1} \cdot (e^{j-1} - 1)$	$n_v - \frac{(n_v - n_f)}{e^{mv-1} - 1} \cdot (e^{j-1} - 1)$

Значення показника заломлення в перехідному шарі за законом $n(z)$ змінювалось від n_f до n_p , а в приповерхневому – від n_v до n_f . Геометрична товщина центральної частини плівки (d_f) у цьому випадку:

$$d_f(d_p, d_v) = \frac{1}{n_f} \left(\frac{\lambda_0}{k} - d_p \cdot n_{sp} - d_v \cdot n_{sv} \right), \quad (1)$$

де

$$n_{sp} = \frac{1}{m_p} \sum_{j=1}^{mp} n_{pj}, \quad n_{sv} = \frac{1}{m_v} \sum_{j=1}^{mv} n_{vj}. \quad (2)$$

Змінні n_{sp} і n_{sv} – середні значення показника заломлення в перехідному і приповерхневому шарі відповідно; m_p і m_v – кількість розбиттів перехідного і приповерхневого шару відповідно; $k=2$ – коли розглядається напівхвильовий шар і $k=4$ – коли розглядається четвертьхвильовий шар; n_f – показник заломлення центральної частини плівки; n_{pj} і n_{vj} – показники заломлення j -тої зони при розбитті перехідної і приповерхневої області відповідно (табл. 1).

Промодельюємо вплив перехідного і поверхневого шару в високозаломлюючій компоненті на спектральні характеристики структур. Вибираючи за параметри показник заломлення n , геометричну товщину шару d і довжину хвилі λ , можна записати характеристичну матрицю одного шару таким чином:

$$M_s(n, d, \lambda) = \begin{vmatrix} \cos \delta(n, d, \lambda) & -\frac{i}{p} \sin \delta(n, d, \lambda) \\ -ip \sin \delta(n, d, \lambda) & \cos \delta(n, d, \lambda) \end{vmatrix}. \quad (3)$$

Характеристичні матриці перехідного і приповерхневого шару будуть рівні відповідно:

$$M_p(\lambda) = \prod_{j=0}^{mp-1} M_s(n_{pj}, \frac{d_p}{m_p}, \lambda), \quad (4)$$

$$M_v(\lambda) = \prod_{j=0}^{mv-1} M_s(n_{vj}, \frac{d_v}{m_v}, \lambda). \quad (5)$$

Отже, якщо брати до уваги наявність приповерхневого і перехідного шарів, то використовуючи формули (1), (4–5), можна записати характеристичну матрицю даної частково неоднорідної структури:

$$M(\lambda) = M_v(\lambda) \cdot M_s(n_f, d_f(d_p, d_v), \lambda) \cdot M_p(\lambda). \quad (6)$$

Як бачимо, вона рівна добутку характеристичних матриць приповерхневого шару, центральної частини і перехідного шару.

Перейдемо до розгляду багат шарових структур. Спочатку розглянемо відрізаючий фільтр конструкції S-ВНВ..ВНВ. Будемо вважати, що високозаломлюючий шар містить перехідну і приповерхневу область. Тоді його характеристична матриця буде рівною:

$$M_B(\lambda) = M_v(\lambda) \cdot M_s(n_B, d_f(d_p, d_v), \lambda) \cdot M_p(\lambda), \quad (7)$$

де n_B – показник заломлення центральної частини високозаломлюючого шару.

Низькозаломлюючий шар буде мати характеристичну матрицю рівною:

$$M_H(\lambda) = M_s(n_H, d_f(d_p, d_v), \lambda), \quad (8)$$

де n_H – показник заломлення низькозаломлюючого шару.

Беручи це до уваги, ми можемо записати характеристичну матрицю $(2k+1)$ -шарової структури типу S-ВНВ..ВНВ:

$$M(\lambda) = \prod_{i=1}^k (M_B(\lambda) \cdot M_H(\lambda)) \cdot M_B(\lambda). \quad (9)$$

Розглянемо вузькосмуговий фільтр з конструкцією S-BНВ..2В..ВНВ. Якщо вважати, що високозаломлюючий шар містить перехідну і приповерхневу область, тоді його характеристична матриця визначається формулою (7), а низькозаломлюючого шару – формулою (8). Характеристичну матрицю $(4k+1)$ -шарової структури типу S-BНВ..2В..ВНВ можемо задати формулою:

$$M(\lambda) = \prod_{i=1}^k (M_B(\lambda) \cdot M_H(\lambda)) \cdot M_s \left(n_B, \frac{1}{n_B} \left(\frac{\lambda_0}{2} - d_p \cdot n_{sp} - d_v \cdot n_{sv} \right), \lambda \right) \cdot \prod_{i=1}^k (M_H(\lambda) \cdot M_B(\lambda)).$$

Характеристичну матрицю для широкосмугового фільтру типу S-2ВН2В..2ВН2В, можна записати у вигляді

$$M(\lambda) = \prod_{i=1}^k \left(M_s \left(n_B, \frac{1}{n_B} \left(\frac{\lambda_0}{2} - d_p \cdot n_{sp} - d_v \cdot n_{sv} \right), \lambda \right) \cdot M_H(\lambda) \right) \cdot M_s \left(n_B, \frac{1}{n_B} \left(\frac{\lambda_0}{2} - d_p \cdot n_{sp} - d_v \cdot n_{sv} \right), \lambda \right).$$

Знаючи характеристичну матрицю всієї структури, можна знайти коефіцієнт пропускання, залежний від довжини хвилі λ :

$$T(\lambda) = 1 - \left[\frac{n_0(M_{11}(\lambda) + n_s \cdot M_{12}(\lambda)) - (n_s \cdot M_{22}(\lambda) + M_{21}(\lambda))}{n_0(M_{11}(\lambda) + n_s \cdot M_{12}(\lambda)) + (n_s \cdot M_{22}(\lambda) + M_{21}(\lambda))} \right]^2, \quad (10)$$

де n_0, n_s – показники заломлення зовнішнього середовища і підкладки відповідно.

Досліджено, що різні розподіли показника заломлення перехідної і приповерхневої областей четвертьхвильового (рис. 2а) і напівхвильового (рис. 2б) одиничних шарів, відрізаючого (рис. 4а) та вузькосмугового (рис. 4б) фільтрів впливають на відхилення спектральних характеристик від ідеального випадку у порядку величини їх середнього значення показника заломлення в цих областях. Щодо широкосмугового фільтру, то для нього існують інші закономірності, які детально описані в підрозділі 3.3.3.

В роботі також проведено детальне дослідження впливу на спектральні характеристики розмірів перехідної і приповерхневої областей (рис. 3а–3б).

У четвертому розділі розглянуто можливості просвітлення однорідними оптичними структурами низькозаломлюючої підкладки.

Знаючи характеристичну матрицю окремого одного шару (3), можемо записати характеристичну матрицю однорідної N -шарової структури:

$$M(\bar{n}, \bar{d}, \lambda) = M_N(n_N, d_N, \lambda) \cdot M_{N-1}(n_{N-1}, d_{N-1}, \lambda) \cdots M_2(n_2, d_2, \lambda) \cdot M_1(n_1, d_1, \lambda),$$

де M_j – характеристична матриця j -ого шару;

$\bar{n} = (n_1, n_2, \dots, n_{N-1}, n_N)$ – вектор значень показників заломлення;

$\bar{d} = (d_1, d_2, \dots, d_{N-1}, d_N)$ – вектор значень геометричної товщини;

Цільова функція представляється у вигляді:

$$\max_{\bar{n}, \bar{d}} F(\bar{n}, \bar{d}) = \left(\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L T^2(\bar{n}, \bar{d}, \lambda_{(i)}) \right)^{1/2}, \quad (11)$$

де L – число точок сітки спектрального інтервалу від λ_1 до λ_2 , $\lambda_{(i)}$ – значення довжин хвиль на даній сітці.

При дослідженні вибирались значення області довжин хвиль від ультрафіолетової до ближньої інфрачервоної

$$\lambda_1 = 200 \text{ нм}, \lambda_1 < \lambda_2 \leq 1200 \text{ нм}, \Delta\lambda = 5 \text{ нм}, \quad (12)$$

та обмеження на параметри

$$1.35 \leq n_j \leq 2.6, 50 \text{ нм} \leq d_j \leq 750 \text{ нм} \quad (j = \overline{1, N}), N = 1, 2, 3, 4. \quad (13)$$

В роботі побудовано графіки оптимальних значень геометричної товщини, показника заломлення та функціоналу (11) для різних спектральних інтервалів для одно-, дво-, три- та чотиришарових структур. Було досліджено деякі їх закономірності, а також виявлено наступне:

Твердження 4.1. Обернена задача синтезу для одно-, дво-, три- та чотиришарових однорідних структур є нестійкою.

Твердження 4.2. Функціонал $F(\bar{n}, \bar{d})$ для задачі (11–13) не є строго спадним, але має схильність до спадання.

В даному розділі також описано, як даний оптимізаційний підхід дозволяє покращити існуючі спектральні фільтри (рис. 5–7). Так, наприклад, реальні матеріали в короткохвильовій області мають такі показники заломлення: 1.35–1.37, 1.45, 1.6, 1.7, 1.8, 1.9, 1.95, 2.0, 2.05, 2.1. Для спектрального інтервалу, коли $\lambda_2/\lambda_1=2.0$, оптимальними параметрами є $n_{opt} = (1.685, 1.475, 1.883, 1.350)$ та $d_{opt} = (794, 904, 708, 500)$. Найближчими до оптимальних значень є матеріали з показниками заломлення $\tilde{n} = (1.7, 1.45, 1.9, 1.35)$. Зафіксуємо ці значення і оптимізуємо

функціонал по геометричній товщині: $\max_{\bar{d}} F(\tilde{n}, \bar{d}) = \left(\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L T^2(\tilde{n}, \bar{d}, \lambda_{(i)}) \right)^{1/2}$.

Отримаємо оптимальні значення геометричної товщини при фіксованих значеннях показника заломлення, значення функціоналу $F(\tilde{n}, \bar{d})$ для яких становить 0.997 (рис. 5, крива 2). Значення функціоналу $F(\bar{n}, \bar{d})$ з параметрами взятими із авторського свідоцтва №1083144 для спектрального інтервалу, коли $\lambda_2/\lambda_1=2.0$, буде становити 0.995 (рис. 5, крива 1). Оптимальні значення геометричної

товщини записані відносно робочої довжини хвилі, яка є основною при побудові інтерференційного фільтру.

Як показав експеримент, досить близькі результати до оптимальних можна отримати не розв'язуючи задачу (11–13). Для цього значення геометричної товщини можна визначати за формулою

$$\tilde{d}_j = \frac{d_{opt,j} \cdot n_{opt,j}}{\tilde{n}_j}, \quad (j = \overline{1, k}), \text{ де } k - \text{кількість шарів.}$$

Можна також збільшити пропускання в розглядуваному діапазоні хвиль разом з тим збільшивши даний діапазон, як це показано на прикладі з авторським свідоцтвом №838629. Для спектрального діапазону $0.75 - 1.14 \lambda_0$ значення функціоналу $F(\bar{n}, \bar{d})$ з параметрами взятими із авторського свідоцтва №838629 становить 0.9974, а для обчислених в даній роботі параметрів – 0.9989 (рис. 7). Збільшивши спектральний діапазон до розмірів $0.6 - 1.14 \lambda_0$ значення функціоналу $F(\bar{n}, \bar{d})$ з параметрами обчисленими в даній роботі практично не зміниться, а для авторського свідоцтва №838629 буде становити – 0.9889.

У п'ятому розділі побудовано математичну модель неоднорідної плівки, вперше досліджено оптимальні параметри для різних розподілів показника заломлення, динаміку їх зміни із збільшенням спектрального інтервалу та наведено порівняльну характеристику із однорідними структурами.

Було розглянуто задачу апроксимації неоднорідної плівки ступінчастою структурою шляхом розділення всієї товщини неоднорідної плівки на m рівних по товщині зон-підшарів (рис. 8), показники заломлення в яких, у залежності від типу розподілу, змінюються за законами, наведеними в таблиці 5.1. У таблиці введені такі позначення: 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-підшару. При $z < 0$ показник заломлення неоднорідної плівки зменшується, а при $z > 0$ – зростає із збільшенням товщини плівки. Величини n_1, d, z являються параметрами неоднорідної структури.

Для визначення спектральних характеристик використовується матричний метод Абеле. Характеристична матриця одного окремого шару задається формулою (3). Характеристична матриця неоднорідної плівки буде визначатися

$$M^{неодн.}(n_1, d, \lambda) = M_m\left(n_m, \frac{d}{m}, \lambda\right) \cdot M_{m-1}\left(n_{m-1}, \frac{d}{m}, \lambda\right) \cdots M_1\left(n_1, \frac{d}{m}, \lambda\right), \quad (14)$$

де M_j – характеристична матриця j -ої зони-підшару; d – геометрична товщина всієї неоднородної плівки; λ – довжина хвилі. Показник пропускання визначається формулою (10).

Задача ставиться так: необхідно визначити значення n_1 і d , які б забезпечували максимальне середньоквадратичне відхилення коефіцієнта пропускання від 0 у заданому спектральному діапазоні довжин хвиль. Для цього цільова функція представляється у вигляді:

$$\max_{n_1, d} F(n_1, z, d) = \left(\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L T^2(n_1, d, \lambda_{(i)}) \right)^{1/2}, \quad (15)$$

де L – число точок сітки спектрального інтервалу від λ_1 до λ_2 , $\lambda_{(i)}$ – значення довжин хвиль на даній сітці.

Вперше показано, що однорідний шар ($z = 0$) з оптимальними параметрами ефективніше просвітлює підкладку з $n_s = 1.51$, ніж будь-який із розглядуваних неоднорідних шарів. Також вперше отримано результати, що квадратичний розподіл показника заломлення неоднорідної плівки набагато ефективніше просвітлює високозаломлюючі підкладинки, ніж лінійний, логарифмічний чи експоненціальний розподіли (рис. 9), тому важливим є вивчення можливостей просвітлення з використанням його в різних спектральних діапазонах. Було розглянуто різні спектральні діапазони (λ_1, λ_2), де $\lambda_2/\lambda_1 = 1.1, 1.2, \dots 3.5$.

Відразу необхідно відмітити, що оптимальні значення параметра n_1 завжди рівні $1.35 - z$, при $z < 0$. Тобто, оптимальною завжди є неоднорідна плівка показник заломлення якої змінюється від $1.35 - z$ на межі плівка-повітря до 1.35 на межі плівка-підкладинка.

Після проведення розрахунків виявилось, що при значеннях λ_2/λ_1 від 1.1 до 1.5 оптимальні значення z розміщені в межах 1.61–1.82, а далі відбувається різкий скачок до 2.56. Для значень λ_2/λ_1 від 1.6 до 3.5 оптимальні значення z знаходяться в межах 2.55–2.58. Було також визначено, що в цих межах знаходяться і оптимальні значення z при $\lambda_2/\lambda_1 > 3.5$. Тобто збільшення спектрального інтервалу (наприклад, $\lambda_2/\lambda_1 = 20.0$ і більше) практично не впливає на оптимальні значення z .

Оптимальна геометрична товщина не має певної закономірності до $\lambda_2/\lambda_1 < 2.2$, а для спектрального інтервалу $\lambda_2/\lambda_1 \geq 2.2$ оптимальна геометрична товщина приблизно рівна

$$d_{opt} \cong (450 + (\lambda_2/\lambda_1 - 2.2) \cdot 20 \pm 5) \text{ нм}. \quad (16)$$

Значення функціоналу F при оптимальних параметрах (рис. 10) різко зменшується при збільшенні спектрального інтервалу λ_2/λ_1 від 1.1 до 1.6. Далі дуже повільно спадає від 0.989 ($\lambda_2/\lambda_1 = 1.6$) до 0.987 ($\lambda_2/\lambda_1 = 3.5$). Слід відмітити, що збільшення спектрального інтервалу, починаючи із $\lambda_2/\lambda_1 = 1.6$, вже суттєво не впливає на значення функціоналу, і значення функціоналу при оптимальних параметрах не опускається нижче 0.9845 (наприклад, $\lambda_2/\lambda_1 = 20.0$ і більше).

Твердження 5.1. Із збільшенням спектрального діапазону функціонал $F(\bar{n}, \bar{d})$, який характеризує можливості просвітлення однорідними структурами (при $k = \overline{1, 4}$), спадає швидше, ніж функціонал $F(n_1, z, d)$, який характеризує можливості просвітлення неоднорідними структурами.

Результати наведені у п'ятому розділі показують, що із збільшенням спектрального інтервалу зростає ефективність використання неоднорідної плівки з квадратичним розподілом для просвітлення високозаломлюючих підкладінок у порівнянні з багат шаровими однорідними структурами.

ВИСНОВКИ

В дисертаційній роботі розв'язана актуальна науково-технічна проблема: синтез шаруватих середовищ з частково-неоднорідними або неоднорідними плівками. Розроблено програмне забезпечення для моделювання і оптимізації спектральних характеристик таких структур. Результати доведено до практичної реалізації і впроваджено. При цьому одержано такі результати:

1. Розроблено математичну модель профілю показника заломлення $n = n(z)$ по товщині частково неоднорідної плівки, яка на відміну від існуючої шарувато-неоднорідної моделі відображає можливі варіанти ходу показника заломлення за даними профілекултивних методів вивчення складу в приповерхневій і перехідній областей плівок, допускає проведення розрахунків спектральних характеристик інтерференційних фільтрів при зміні виду розподілу $n(z)$ і розмірів приповерхневої та перехідної областей.
2. Обґрунтовано математичну модель профілю показника заломлення повністю неоднорідних плівок і проведено порівняльний аналіз просвітлення низькозаломлюючої ($n_s=1.51$) і високозаломлюючої ($n_s=4.0$) підкладінок однорідними і неоднорідною плівками. Вперше встановлено, що при просвітленні високозаломлюючої підкладінки, квадратичний розподіл показника заломлення неоднорідної плівки набагато ефективніший, ніж лінійний, логарифмічний чи експоненціальний розподіли. Також встановлено, що одношарова однорідна структура краще просвітлює низькозаломлюючі підкладінки, ніж неоднорідна плівка з будь-яким типом розподілу показника заломлення.
3. Запропоновано постановку оптимізаційної задачі визначення впливу ширини спектрального інтервалу λ_2/λ_1 на ефективність просвітлення однорідними і неоднорідними плівками високозаломлюючої підкладінки. Вперше виявлено, що із збільшенням заданого для просвітлення спектрального інтервалу λ_2/λ_1 можливості просвітлення високозаломлюючої підкладінки однорідними структурами зменшуються швидше, ніж неоднорідними. Починаючи із $\lambda_2/\lambda_1 > 2.6$, неоднорідна плівка з квадратичним розподілом показника заломлення просвітлює

краще, ніж двошарові однорідні структури, а починаючи із $\lambda_2/\lambda_1 > 4.1$ – краще, ніж тришарові однорідні структури.

4. Проведено порівняльний аналіз ефективності методів розв'язання обернених задач синтезу шаруватих середовищ. Встановлено, що при просвітленні низькозаломлюючої підкладки однорідними по товщині плівками ефективними для дослідження одношарової структури виявились методи конфігурацій (Хука-Дживса), Девідона-Флетчера-Пауелла та Фіакко–Мак-Кормика, двошарової структури – Розенброка, тришарової структури – Розенброка, чотиришарової структури – поєднання одного із методів найскорішого спуску чи змінної метрики з методом конфігурацій (Хука-Дживса).

При розв'язанні задачі просвітлення високозаломлюючих підкладок оптимальними покриттями виявилось, що для одно-, двошарових однорідних по товщині покриттів та неоднорідної плівки з квадратичних розподілом показника заломлення найефективніше використовувати метод конфігурацій (Хука-Дживса). При визначенні оптимальних значень тришарових однорідних структур ефективнішими за інших виявились методи конфігурацій (Хука-Дживса), Розенброка та найскорішого спуску. При дослідженні чотиришарових однорідних структур, найбільш ефективними є методи Розенброка та найскорішого спуску.

5. Ґрунтуючись на методі Монте-Карло досліджено чутливість спектральних характеристик до відхилень параметрів шарів в процесі наплення інтерференційних фільтрів.
6. На основі розроблених математичних моделей і методів запропоновано покращити характеристики існуючих широкосмугових інтерференційних фільтрів.

Список опублікованих праць здобувача за темою дисертації

1. **Мица О.В.** Аналіз ефективності методів багатовимірної оптимізації при дослідженні однорідних та неоднорідних структур // Штучний інтелект. – Донецьк. – 2002. – Вип. 4. – С. 42–48.
2. **Мица А.В.,** Первак Ю.А., Фекешгази И.В. Оптимизация спектральных характеристик неоднородных пленок с линейным распределением показателя преломления // Управляющие системы и машины. – Киев. – 2003. – С. 26–29.
3. **Мица О.В.,** Головач Й.Г. Синтез одно-, дво- та тришарових структур та аналіз ефективності методів багатовимірного пошуку // Радіоелектроніка та інформатика. – Харків. – 2003. – Вип. 1. – С. 105–109.
4. **Мица О.В.,** Головач Й.Г. Математичне моделювання спектральних характеристик короткоперіодних структур з частково неоднорідними плівками // Інформаційні технології та системи. – № 1-2. – Т. 6. – Львів. – 2003. – С. 152–159.

5. **Мица О.В.**, Стецюк П.І. Задача знаходження оптимальних параметрів однорідного оптичного покриття // Теорія оптимальних рішень. – № 2. – Київ, 2003. – С. 127–134.
6. **Мица О.В.** Синтез чотиришарових структур та аналіз ефективності методів багатовимірного пошуку // Наук. вісник Чернівецького ун-ту. – Сер. матем. – 2002. – Вип. 150. – С. 63–68.
7. **Мица О.В.** Математичне моделювання характеристик широкосмугових фільтрів з частково неоднорідним вискозаломлюючим шаром // Наук. вісник Ужгород. ун-ту. Сер. матем. і інф. – 2002. – Вип. 7. – С. 76–81.
8. Golovach J., **Mitsa A.** Modelling spectral characteristics of structures with the layers based on dissociative materials // Book of Abstract 40th Hungarian conference on Spectrochemistry. Debrecen. Hungary. 1997. – P. M25.
9. Sikora S., Golovach J., Vashchuk F., **Mitsa A.** Brightness contrast and optical control of pressure-tightness for flat electroluminescent panels // 23rd European congress on molecular spectroscopy. Balatonfured. Hungary. Book of Abstracts. 1997. – P. 411.
10. 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 .
11. **Mitsa A.**, Pervak Yu., Gerasimov V. Modelling and diagnostics of characteristics of interference filter with layered-inhomogeneous high refractive index // Optical Diagnostics of Materials and Devices for Opto-, Micro- and Quantum Electronics (SPIE IV International Conference). **Kyiv**. Ukraine. 1999. – P. 75.
12. Pervak Y., **Mitsa A.**, Holovach J., Fekeshgazi I. Influence of transition film-substrate layers on optical properties of multilayer structure // Proceedings of SPIE (The International Society for Optical Engineering). – Vinnytsia, 2000. – Vol.4425. – P.321-325.
13. **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. – ст. 75-80.
14. **Мица О.В.** Оптимізація характеристик оптичних покриттів на основі неоднорідних плівок з різним типом розподілу показника заломлення // Наук. вісник Ужгород. ун-ту. Сер. матем. і інф. – 2001. – Вип. 6. – ст. 95-99.
15. **Мица А.В.**, Первак Ю.А., Фекешгази И.В. Расчет и оптимизация оптических свойств неоднородных пленок на подложках Ge с квадратическим распределением показателя преломления // Харьковская научная ассамблея (14-й международный симпозиум “Тонкие пленки в оптике и электронике”). – Харьков: Контраст, – 2002. – ст. 62-65.
16. Pervak Y.O., Fekeshgazi I.V., **Mitsa A.V.** Optimization of the structure of a nonuniform film with linear distribution of the refractive index for the anti-reflective coatings of high reflective materials // Proceedings of SPIE (The International Society for Optical Engineering). – Vinnytsia, 2002. – P.71.

17. Головач Й.Г., **Мица О.В.** Дослідження стійкості спектральних характеристик за допомогою методу Монте-Карло на прикладі четвертьхвильового шару // Міжнародна школа-семинар “Теорія прийняття рішень”. – Ужгород, 2002. – С. 28.
18. Fekeshgazi I.V., Vlasenko Yu.V., Ivan S.Ya., **Mitsa A.V.**, Trukhan V.M., Sheleg A.U. Applied aspects the nonlinear gyrotropy of CdP₂ crystals // Fourth International Young Scientists Conference “Problems of Optics & High Technology Material Science SPO 2003”. – Kyiv, 2003. – P. 146.

АНОТАЦІЇ

Мица О.В. *Математичне моделювання шаруватих оптичних покриттів та оптимізація їх структури.* – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи. – Тернопільський державний технічний університет імені Івана Пулюя. Тернопіль, 2004.

Розроблено математичну модель частково неоднорідної плівки. Досліджено вплив часткової неоднорідності на спектральні характеристики одиничних четвертьхвильового і напівхвильового шарів, відрізаючих, вузькосмугових та широкосмугових фільтрів.

Розроблено математичну модель неоднорідної плівки із різними закономірностями розподілу показника заломлення. Досліджено оптимальні профілі неоднорідної плівки при здійсненні просвітлення низькозаломлюючої і високозаломлюючої підкладинок в різних спектральних діапазонах. Наведено порівняльну характеристику просвітлення підкладинок неоднорідним шаром і одно-, дво-, три- та чотиришаровими структурами.

Визначено найбільш ефективні методи для розв’язання наведених обернених задач синтезу оптичних шаруватих структур, вибираючи за критерій надійність та швидкодію. За допомогою методу Монте-Карло досліджено їх стійкість.

Для розрахунку спектральних характеристик і оптимізації запропонованих моделей було розроблено відповідне програмне забезпечення.

Ключові слова: математичне моделювання, частково неоднорідні і неоднорідні плівки, оптимізація структури, стійкість спектральних характеристик, показник заломлення, геометрична товщина.

Мица А.В. *Математическое моделирование слоистых оптических покрытий и оптимизация их структуры.* – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 01.05.02 – математическое моделирование и численные методы. – Тернопольский государственный технический университет имени Ивана Пулюя. Тернополь, 2004.

Разработано математическую модель частично неоднородных пленок. Исследовано и описано влияние частичной неоднородности на спектральные характеристики одиночных четверть- и полуволновых слоев, отрезающего, узкополосного та широкополосного интерференционных фильтров. Рассмотрены ступенчатый, линейный, квадратический, логарифмический и экспоненциальный закономерности распределения показателей преломления в неоднородных областях.

Разработано математическую модель неоднородной пленки. Решено обратные задачи синтеза для неоднородной пленки с разными распределениями показателя преломления и в разных спектральных интервалах на низкопреломляющей ($n_s=1.51$) и высокопреломляющей ($n_s=4.0$) подложках. Показано, что при просветлении высокопреломляющей подложки, квадратическое распределение показателя преломления неоднородной пленки намного эффективнее, чем другие виды распределений. Приведено сравнительную характеристику возможностей просветления подложек неоднородной пленкой с квадратическим распределением показателя преломления и одно-, двух-, трех- и четырехслоистыми однородными структурами. Для низкопреломляющей и высокопреломляющей подложек исследовано динамику изменения параметров и целевой функции неоднородной пленки и одно-, двух-, трех- и четырехслоистых однородных структур при увеличении спектрального интервала. Показано, что с увеличением спектрального интервала возможности просветления высокопреломляющей подложки однородными структурами уменьшаются быстрее, чем неоднородными.

Рассмотрены основные подходы к решению обратных задач синтеза слоистых сред. Среди которых: методы эквивалентных слоев, эффективных границ, коррекции спектральных характеристик и методы, что базируются на аппроксимации спектральной характеристики покрытия разными полиномами. Показано, что эффективнее всего использовать для решения обратных задач синтеза методы многомерного поиска. Для проверки данного подхода было взято три известных решения проблемы создания широкополосных просветляющих покрытий и показано, что за счет лучшего подбора параметров слоев их характеристики можно улучшить.

Для решения обратных задач синтеза слоистых структур были использованы методы многомерного поиска: конфигураций (Хука-Дживса), Розенброка, наискорейшего спуска, сопряженных градиент (Флетчера-Ривса, Поллака-Риббьера), переменной метрики (Девидона-Флетчера-Пауелла, Гольдфарба, Фиакко-Мак-Кормика, Гринстадта). Для каждой из задач предложено наиболее эффективные методы их решения, выбирая за критерий надежность и быстродействие.

Используя метод Монте-Карло для каждой исследованной структуры определено устойчивость ее к возможным вариациям параметров.

Разработано программное обеспечение для математического моделирования и оптимизации спектральных характеристик оптических интерференционных структур. Внедрение полученных результатов подтверждено соответствующими документами.

Ключевые слова: математическое моделирование, частично неоднородные и неоднородные пленки, оптимизация структуры, стойкость спектральных характеристик, показатель преломления, геометрическая толщина.

Mitsa A.V. *Mathematical modeling of layered optical coatings and optimization of their structure.* – Manuscript.

Thesis for the scientific degree of candidate of technical sciences in the speciality 01.05.02 – Mathematical modeling and computational methods. – Ternopil state Ivan Pul'uj technical university, Ternopil, 2004.

The model of a partially inhomogeneous film has been developed. The influence of partial inhomogeneity on spectral characteristics of single quarter-wave and half-wave layers, cut-off, narrow-band and wide-band filters has been studied.

The mathematical model of an inhomogeneous film with different distributions of the refractive index has been developed. Optimal profiles of an inhomogeneous film under antireflection of low- and high-refractive substrates in different spectral ranges have been studied. The comparison of antireflecting the substrates by the inhomogeneous layer or by one-, two-, three- and four-layered structures has been given.

The most effective methods to solve the given inverse problems for synthesis of optical layered structures have been defined, the reliability and quick-action chosen as a criterion. Their stability has been studied by using the Monte-Karlo method.

To calculate spectral characteristics and optimization of the proposed models the appropriate software has been developed.

Keywords: mathematical modeling, partially inhomogeneous and inhomogeneous films, optimization of structure, stability of spectral characteristics, the refractive index, geometric thickness.