

Міністерство освіти і науки України
ДВНЗ “Ужгородський національний університет”
Національна академія наук України
Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова

Кваліфікаційна наукова праця
на правах рукопису

Міца Олександр Володимирович

УДК 519.87; 535.345.67

ДИСЕРТАЦІЯ

**Моделювання та оптимізація спектральних коефіцієнтів шаруватих
оптичних систем з неоднорідними границями**

01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи

Подається на здобуття наукового ступеня
доктора технічних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей,
результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

_____ О.В. Міца

Науковий консультант
Стецюк Петро Іванович
доктор фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник

Київ - 2021

АНОТАЦІЯ

Міца 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. – Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, Київ, 2021.

Дисертаційна робота присвячена розробці математичного, алгоритмічного та програмного забезпечення для комп'ютерного проектування оптичних систем з врахуванням неоднорідностей на границі розділу, дисперсії показника заломлення, мас-транспорту, нанодфекти, оксидацію та аналізується стійкість до технологічних похибок.

Розглядаються методи математичного моделювання шаруватих оптичних систем, які знаходять широке застосування в таких областях високих технологій, як лазерна техніка, оптоелектроніка, телекомунікації. Спектральні коефіцієнти шаруватих оптичних систем визначаються за допомогою матричного методу Абеле. Першочерговим завданням при конструюванні таких систем є забезпечення максимальної селективності та експлуатаційної надійності при використанні мінімальної кількості тонкоплівкових шарів.

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. Пропонується модель, яка найбільш ефективно апроксимує дисперсію показника заломлення. Пропонується модель структури дефектного шару, досліджується вплив нанодфектів залежно від їхньої природи, розмірів і положень на спектральні коефіцієнти досліджуваної багат шарової оптичної системи.

Для синтезу оптичних фільтрів використовуються методи гладкої та негладкої оптимізації (r-алгоритм Шора). При проектуванні оптичних фільтрів

пропонується двоетапний метод. Він дозволяє враховувати часткову неоднорідність, дисперсію показника заломлення, мас-транспорт, нанодефекти, оксидацію та стійкість до технологічних похибок. Для дослідження стійкості спектральних характеристик використовується метод Монте-Карло. Розглядаються підходи, які дозволяють прискорити знаходження розв'язків в задачах синтезу оптичних покриттів (СОП). Це використання аналітичної похідної (пришвидшений варіант), табуляція значень, швидке множення матриць та використання ефективного методу при одновимірній оптимізації. Запропоновано вибір початкових наближень для ефективного розв'язання задачі синтезу оптичних фільтрів. За допомогою запропонованих методів покращено спектральні характеристики існуючих широкосмугових інтерференційних фільтрів.

Запропоновано розв'язок задачі розпізнавання профілю показника заломлення халькогенідної плівки As_2S_3 після опромінення, який базується на розроблених моделях шаруватих структур та методах розв'язання задач синтезу оптичних покриттів. Запропоновано моделі профілю показника заломлення за товщиною плівок до і після опромінення халькогенідної плівки GeS_2 та отримано оцінка росту її товщини після опромінення.

За допомогою розроблених методів розв'язання задач СОП проведено оптимізацію параметрів неоднорідних плівок, нанесених на високозаломлюючі підкладки халькогенідної фотоніки, для забезпечення максимального пропускання світла.

Отримані результати впроваджено у навчальний процес факультету інформаційних технологій ДВНЗ “Ужгородський національний університет” та науково-дослідний процес Інституту інституту електронної фізики НАНУ, про що є відповідні акти впровадження.

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

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, nanodefects, 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 As_2S_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 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 obtained results were introduced into the educational process of the Faculty of Information Technologies of Uzhhorod National University and the research process of the Institute of the Institute of Electronic Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, about which there are relevant acts of implementation.

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

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА

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 широкосмугових 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 підкладинки 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.
25. Fekeshgazi, I., Vlasenko, Y., Ivan, S., Mitsa, A., Trukhan, V., Sheleg, A. Applied aspects of the nonlinear absorption and gyrotropy of CdP2 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., Міца 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_2 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., Міца 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. Міца 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 широкосмугових інтерференційних фільтрів типу S-2ВН2В...2ВН2В 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 підкладки 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. Кишинев, 2010. С. 100-108.
42. Міца О.В., Повідайчик М.М. Оптимізація портфеля замовлень на підприємстві. *I 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. Кишинев, 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-GeSe₂-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. Міца 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° и 45° . *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.І., Міца О.В. Проектування чотиришарових просвітлюючих покриттів при падінні світла під кутом 45° . *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. Ihnatolia P., Holomb R., Mitsa A., Mitsa V., Feher A. Modeling and ab initio DFT studies of As_4S_m ($m=0-6$) 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 45^0 . *Материалы 5-й международной конференции «Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии»*. Т. II. Кишинев, 2016. С. 92-97.
56. Mitsa O., Petcko V., Holovács 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 маю 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 багат шарових 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. Кишиневу, 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., Váci T., Czitrovsky 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.

ЗМІСТ

УМОВНІ ПОЗНАЧЕННЯ І СКОРОЧЕННЯ.....	19
ВСТУП.....	21
РОЗДІЛ 1. ЗАДАЧІ АНАЛІЗУ ТА СИНТЕЗУ ДЛЯ	
БАГАТОШАРОВИХ ОПТИЧНИХ ПОКРИТТІВ. МЕТОДИ	
РОЗРАХУНКУ.....	31
1.1. Вступні зауваження.....	31
1.2. Задачі аналізу для багатошарових оптичних покриттів.....	34
1.2.1. Рекурентний метод.....	35
1.2.2. Адмітансний метод.....	36
1.2.3. Матричний метод.....	37
1.3. Задачі аналізу для багатошарових оптичних покриттів.....	46
1.3.1. Аналітичні методи синтезу.....	47
1.3.2. Чисельні методи оптимізації характеристик покриття.....	50
1.4. r -алгоритми Шора.....	60
1.4.1. Три обчислювальні форми r -алгоритмів.....	61
1.4.2. Варіант $r(\alpha)$ -алгоритми з адаптивним регулювання кроку....	67
Висновки до розділу 1.....	70
Література до розділу 1.....	71
РОЗДІЛ 2. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ БАГАТОШАРОВИХ	
ОПТИЧНИХ СИСТЕМ З НЕОДНОРІДНИМИ МЕЖАМИ	
РОЗДІЛУ.....	78
2.1. Математичне моделювання неоднорідності на межах розділу....	78
2.2. Математичне моделювання впливу неоднорідностей на границі	87
розділу на спектральні характеристики вузькосмугових фільтрів.....	
2.3. Математичне моделювання впливу неоднорідностей на границі	92
розділу на спектральні характеристики відрізаючих фільтрів.....	
2.4. Математичне моделювання впливу неоднорідностей на границі	94
розділу на спектральні характеристики широкосмугових фільтрів....	

2.5. Моделювання впливу процесів оксидації поверхні плівок.....	97
Висновки до розділу 2.....	98
Література до розділу 2.....	99
РОЗДІЛ 3. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ НАНОДЕФЕКТІВ, АПРОКСИМАЦІЯ ДИСПЕРСІЇ, ДОСЛІДЖЕННЯ СТІЙКОСТІ СПЕКТРАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ДО ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПОХИБОК.....	
103	103
3.1. Вплив нанодфектів на спектральні характеристики оптичних систем.....	103
3.2. Математичне моделювання впливу дисперсії на спектральні характеристики оптичних фільтрів на прикладі реальних матеріалів.	115
3.3. Використання методу Монте-Карло для дослідження впливу похибок параметрів шарів оптичних фільтрів на стійкість їх спектральних характеристик.....	127
Висновки до розділу 3.....	138
Література до розділу 3.....	139
РОЗДІЛ 4. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВПЛИВУ НЕОДНОРІДНОСТЕЙ НА СПЕКТРАЛЬНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ РІЗНИХ ОПТИЧНИХ ФІЛЬТРІВ ПРИ ПАДІННІ СВІТЛА ПІД КУТОМ.....	
144	144
4.1. Вступні зауваження.....	144
4.2. Математичне моделювання впливу неоднорідностей на межах розділу на спектральні характеристики вузькосмугових оптичних фільтрів при падінні світла під кутом.....	146
4.3. Математичне моделювання впливу неоднорідностей на межах розділу на спектральні характеристики відрізаючих оптичних фільтрів при падінні світла під кутом.....	159

4.4. Математичне моделювання впливу неоднорідностей на межах розділу на спектральні характеристики широкопasmових оптичних фільтрів при падінні світла під кутом.....	172
Висновки до розділу 4.....	180
Література до розділу 4.....	181
РОЗДІЛ 5. МЕТОДИ ОПТИМІЗАЦІЇ ДЛЯ ЗАДАЧ СИНТЕЗУ	
ОПТИЧНИХ ПОКРИТТІВ.....	184
5.1. Постановка задачі СОП та її аналіз.....	185
5.1.1. Постановка задачі СОП та вибір функцій якості.....	185
5.1.2. Характеристика задачі СОП.....	191
5.2. Методи оптимізації для задач СОП.....	192
5.2.1. Використання градієнтних і квазіньютонівських методів та r-алгоритмів для задач СОП.....	192
5.2.2. Вибір початкових наближень.....	197
5.3. Скінченно-різницевий та аналітичний способи обчислення градієнта.....	202
5.3.1. Скінченно-різницевий спосіб.....	203
5.3.2. Аналітичний спосіб.....	204
5.4. Пришвидшення роботи оптимізаційних методів.....	207
5.5. Двоетапний метод для синтезу багатошарових оптичних систем	221
5.5.1. Загальна схема.....	221
5.5.2. Застосування двоетапного методу для синтезу багатошарових оптичних систем при падінні світла під кутом.....	222
5.5.3. Покращення характеристик існуючих широкопasmових оптичних покриттів.....	227
Висновки до розділу 5.....	232
Література до розділу 5.....	233

РОЗДІЛ 6. ЗАСТОСУВАННЯ РОЗРОБЛЕНИХ МЕТОДИК ДЛЯ РОЗПІЗНАВАННЯ ПРОФІЛЮ ПОКАЗНИКА ЗАЛОМЛЕННЯ ПЛІВОК ДЛЯ ХАЛЬКОГЕНІДНОЇ ФОТОНІКИ.....	238
6.1. Про задачу розпізнавання профілю показника заломлення плівки.....	239
6.2. Розпізнавання профілю показника заломлення плівки сульфїду миш'яку при її лазерному опромїненнї.....	243
6.3. Розпізнавання профїлей показникїв заломлення плївок дисульфїду германїю.....	255
6.3.1. Розпізнавання профїлю показника заломлення свїжонапилених плївок.....	255
6.3.2. Розпізнавання профїлю показника заломлення фотопросвітлених плївок.....	261
6.4. Моделювання й оптимїзація спектральних коефїцієнтїв неоднорїдних плївок для халькогенїдної фотонїки.....	266
Висновки до роздїлу 6.....	270
Лїтература до роздїлу 6.....	272
ВИСНОВКИ.....	275
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	277
ДОДАТКИ.....	297
Додаток 1. Акти впровадження результатїв дослїджень.....	297

УМОВНІ ПОЗНАЧЕННЯ І СКОРОЧЕННЯ

$\alpha_{Бр}$	кут повної поляризації, або кут Брюстера
n	показник заломлення
d	геометрична товщина
n_j	показник заломлення j -го шару
d_j	геометрична товщина j -го шару
k_j	показник поглинання j -го шару
E	вектор електричної хвилі
H	вектор магнітної хвилі хвилі
E_0	амплітуда падаючої світлової хвилі
ω	частота
k	хвильовий вектор
t_s, t_p	амплітудні коефіцієнти пропускання
r_s, r_p	амплітудні коефіцієнти відбивання
T	коефіцієнт пропускання
R	коефіцієнт відбивання
$\bar{n} = (n_1, n_2, \dots, n_{k-1}, n_k)$	вектор значень показників заломлення
$\bar{d} = (d_1, d_2, \dots, d_{k-1}, d_k)$	вектор значень геометричної товщини
λ	довжина хвилі
θ_0	кут, під яким промінь падає на шарувату структуру
θ_s	кут, під яким промінь виходить із шаруватої структури, кут заломлення
n_0, n_S	показники заломлення зовнішнього середовища і підкладинки
$m_{11}, m_{12}, m_{21}, m_{22}$	елементи характеристичної матриці
n	показник заломлення
d	геометрична товщина
n_f	показник заломлення основної області неоднорідної

	плівки
n_p	показник заломлення перехідної області неоднорідної плівки
d_f	геометрична товщина основної області неоднорідної плівки
d_p	геометрична товщина перехідної області неоднорідної плівки
n_B	показник заломлення основної частини високозаломлюючого шару.
n_H	показник заломлення низькозаломлюючого шару.
T_{\max}	коефіцієнт максимуму пропускання
λ_{\max}	довжина хвилі максимуму пропускання
$\Delta\lambda_{0.5}$	напівширина смуги пропускання
$\Delta\lambda_{0.1}$	десятинна ширина смуги пропускання
$\Delta\lambda_K, \Delta\lambda_D$	ширини спектральних інтервалів подавлення пропускання у короткохвильовій та довгохвильовій областях
λ_{\min}	довжина хвилі мінімуму пропускання
T_{\min}	коефіцієнт мінімуму пропускання
$T_{\text{сер}}$	середній коефіцієнт пропускання
БШС	багатошарова структура
ІЧ	інфрачервоний
ХСН	халькогенідні скловидні напівпровідники
СОП	синтез оптичних покриттів

ВСТУП

Актуальність роботи. Математичне моделювання є основою вивчення більшості сучасних технічних проблем і розвитку багатьох сучасних інноваційних технологій. Важливим об'єктом дослідження, що вимагає застосування методів математичного моделювання, є оптичні шаруваті структури. Такі структури, створювані шляхом напилення тонких діелектричних шарів, знаходять широке застосування в сучасних оптичних пристроях, пов'язаних з вивченням і формуванням оптичного випромінювання, а також в таких областях високих технологій, як лазерна техніка, оптоелектроніка, телекомунікації. Відомо також використання оптичних структур в різноманітних системах: екологічного контролю, модернізації температурних сенсорів, високочутливих пристроїв для отримання термічного зображення (наприклад зображення відбитків пальців людини) тощо. Вони є практично незамінними в галузі телекомунікацій, оскільки мають унікальні у своєму роді якості, що відповідають чітким вимогам оптичних комунікаційних систем. Першочерговим завданням при конструюванні таких структур залишається забезпечення максимальної селективності та експлуатаційної надійності таких структур під час використання мінімальної кількості тонкоплівкових шарів у структурах. Оптичні шаруваті структури варіюються від одношарових до багатшарових структур з десятками і навіть сотнями шарів. При цьому поперечні розміри шарів багаторазово перевищують їх повну товщину. В силу цього, при моделюванні властивостей оптичних шаруватих структур з успіхом застосовуються моделі шаруватих середовищ з необмеженими за двома координатним осях розмірами шарів. Іншим модельним припущенням, на якому до самого останнього часу базувалося дослідження оптичних шаруватих структур, є припущення про ідеальні плоскопараллельних межах розділу шарів. Така ідеалізація була виправдана як рівнем технологій, що використовуються для виробництва елементів шаруватої оптики, так і точністю експериментальних засобів, використовуваних для контролю параметрів цих елементів.

В останні роки було досягнуто значного прогресу в області технологій нанесення багат шарових оптичних покриттів. Відповідно до цього 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, в 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 можуть впливати на спектри пропускання багат шарових структур як при нормальному падінні світлових пучків так і при падінні світла під кутом до поверхні оптичної структури з неоднорідним шаром. Тому виникла необхідність в нових моделях, що повинні брати до уваги неоднорідність меж між тонкими шарами і наявність приповерхневого шару. При цьому нові моделі повинні забезпечувати можливість побудови ефективних алгоритмів, призначених для чисельного аналізу такого впливу.

Будь-яке нове дослідження з моделювання неоднорідностей в оптичних структурах мотивується новими застосуваннями розроблюваних математичних моделей. Тому ще одним стимулом до врахування приповерхневих та перехідних областей між шарами оптичних шаруватих структур є розширення спектральної області їх застосування в бік коротких довжин хвиль, де, як відомо, вплив неоднорідності між шарами різко зростає, як і впливає дисперсія показника заломлення шарів. Таке спектральне розширення пов'язано, зокрема, з планованим переходом лазерної літографії в область вакуумного ультрафіолету, що в свою чергу, дозволить перейти в найближчі роки ще до більш компактних нанотехнологій в нанoeлектроніці.

При моделюванні властивостей оптичних структур, мабуть, найбільш поширений є підхід, який базується на обчисленні тангенціальних складових векторів напруженості електричного і магнітного полів послідовно на всіх межах

шарів, що утворюють оптичну структуру. Введення матричної форми запису рівнянь, що пов'язують амплітуди полів на сусідніх границях, дозволило в компактній формі досить послідовно врахувати інтерференційні ефекти у шаруватих структурах усіх типів. Найбільш поширеним є матричний метод, що вперше був запропонований Ф. Абелле у 1950 році. Своєю математичною природою задачі синтезу оптичних шаруватих покриттів близькі до цілого ряду задач синтезу в інших областях: електродинаміці, радіофізиці, акустиці. Хоча пристрої, з якими пов'язані ці задачі, можуть на перший погляд суттєво відрізнятися від оптичних багатошарових 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 та техніки.

Зазначені обставини роблять досить актуальною задачу розрахунку спектральних характеристик оптичних шаруватих структур, в першу чергу їх спектральних коефіцієнтів відбиття і пропускання, з урахуванням неоднорідності між шарами. Не менш важливою проблемою є вирішення оберненої задачі визначення оптичних параметрів тонких шарів на основі моделей, що адекватно враховують виникнення індукованих світлом зміну профілю показника заломлення в голографічних оптичних середовищах або штучно сформованих на підкладинці синусоїдальних профілів показника заломлення для нового покоління елементів фотоніки. На момент проведення досліджень, результати яких представлені нижче, аналогічні роботи або не проводилися зовсім, або відповідні впливи неоднорідностей в оптичних структурах були вивчені недостатньо.

Одне з основних завдань роботи – моделювання оптичних покриттів з необхідними спектральними характеристиками – базується на завданнях 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. Введення критеріїв стійкості і їх порівняльний аналіз створить можливість їх практичного застосування при виготовленні структур. Для спрощення завдання, як правило вважають, що оптична структура складається із слабопоглинаючих шарів. Аналіз і узагальнення впливу неоднорідностей в оптичних структурах дасть можливість виробити рекомендації для побудови оптимальних алгоритмів розв'язання задач прийому, діагностики та управління електромагнітним випромінюванням, а також задач діагностики і управління параметрами і станом шарувато-неоднорідних середовищ.

Загальні принципи розрахунку оптичних властивостей багат шарових 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 покриттям різних шків, 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.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконувалась на кафедрі інформаційних управляючих систем та технологій ДВНЗ “Ужгородський національний університет” за 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 випромінювання в різних ділянках спектру;
- знаходження і 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 середовища.

Предметом дослідження є моделювання властивостей шаруватих структур з неоднорідністю меж між тонкими шарами. Враховуються довільний кут падіння світла, нанодфекти, 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), r -алгоритми Шора (у випадку, коли цільова функція негладка).

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 по дослідженню та конструюванні 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 надграток 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 студентами при виконанні комплексу курсових, дипломних робіт бакалаврами та магістрами (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 міжнародна науково-технічна конференція «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-професійна конференція «Nature science, the driving force of development» (Budapest, Hungary, 2014); IV Міжнародній самсоновській 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-професійна конференція «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», присвяченої 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.

РОЗДІЛ 1

ЗАДАЧІ АНАЛІЗУ ТА СИНТЕЗУ ДЛЯ БАГАТОШАРОВИХ ОПТИЧНИХ ПОКРИТТІВ. МЕТОДИ РОЗРАХУНКУ

У 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 багатошарового 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 подальшої 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 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, методи покоординатного спуску, випадкового (стохастичного) пошуку, нульового порядку, «голчастого» синтезу, градієнтні методи та генетичні алгоритми. У підрозділі 1.4 наведено конспективний огляд r -алгоритмів Шора, які використовуються при розв'язанні задач СОП.

1.1. Вступні зауваження

Створення шаруватої структури на скляній підкладинці для перерозподілу інтенсивності світлових потоків у видимій області спектру відоме ще з 30-х років минулого століття [1-5]. Одним із першовідкривачів практичного використання шаруватих оптичних структур був учений-фізик українського походження Смакула О.В., який у 1935 році запатентував відкриття – одношарове покриття як спосіб покращення оптичних приладів, що отримав назву «фізичне просвітлення оптики» [6]. Оскільки оптичні лінзи є основним елементом різних приладів –

фотоапаратів, мікроскопів, телескопів, перископів, стереотруб, біноклів, різних оптичних пристроїв для вогнепальної зброї і т. д., – це відкриття стало великим досягненням [1-6]. На початку 70-х років минулого століття використання оптичних покриттів отримало широке розповсюдження [7]. Оптичні покриття стали невід’ємною частиною оптичних деталей пристроїв для побутових потреб цілей, а також для оптичного обладнання для військової та космічної техніки [8-9]. Паралельно з технологією нанесення оптичних шаруватих структур [10], розроблялись теоретичні основи проектування шаруватих структур [11-19]. В основу проектування величин спектральних коефіцієнтів лягла модель з ідеальними межами розділу між шарами [1-5]. Такі розрахунки проводяться і зараз в Україні для потреб розробки і створення як класичних, так і нових оптичних елементів, для оптичної індустрії на заводі «Арсенал» (м. Київ), в Інституті проблем реєстрації інформації НАНУ (м. Київ), Інституті фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАНУ (м. Київ), Інституті металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАНУ (м. Київ), Інституті надтвердих матеріалів ім. В.М. Бакуля НАНУ (м. Київ), Науково-технологічному комплексі «Інститут монокристалів» НАНУ (м. Харків), Національному університеті «Львівська політехніка», Чернівецькому національному університеті імені Юрія Федьковича та ДВНЗ «Ужгородський національний університет».

Створення приладів нічного бачення і розробка пристроїв для контролю вмісту газів, що забруднюють атмосферу, зумовили потребу в нових плівкоутворюючих матеріалах для оптичних шаруватих структур, прозорих в інфрачервоній області спектру [18]. Виявилось, що під час одержання шаруватих структур високозаломлюючий шар на основі ІЧ прозорих матеріалів має частково неоднорідну структуру. Часткова неоднорідність на практиці призводила до зміни величини спектральних коефіцієнтів та інших характеристик шаруватих структур, що призвело до розробки моделі шаруватої структури з частково неоднорідним шаром. Розрахунки на новій моделі допомогли врахувати вплив часткової неоднорідності на спектральні коефіцієнти, що було відображено в кандидатській

дисертації [20]. Результати цієї роботи використані в СКБ аналітичного приладобудування м. Ужгород при створенні приладів для контролю забруднення довкілля. Проектування і дослідження шаруватих структур із частково неоднорідним шаром проводилось у цей же час у США, Канаді, Росії і Чехії [12-19].

Будь-яке нове дослідження з моделювання неоднорідностей в оптичних структурах мотивується новими застосуваннями розроблених математичних моделей. Тому ще одним стимулом до врахування неідеальності областей між шарами оптичних шаруватих структур є розширення спектральної області їх застосування в бік коротких довжин хвиль, де, як відомо, вплив неоднорідності між шарами різко зростає, як і впливає дисперсія показника заломлення шарів [21-23]. Таке спектральне розширення пов'язане, зокрема, з планованим переходом лазерної літографії в область вакуумного ультрафіолету, що, у свою чергу, дозволить перейти в найближчі роки ще до більш компактних нанотехнологій у нанoeлектроніці. Такого ж типу є роботи, що вивчають взаємодію світла із фазозмінними і фоточутливими матеріалами для збереження інформації (під керівництвом Крючина А.А.) і створення голографічних елементів (під керівництвом Стронського О.В.). Надшвидкий оптичний зв'язок з використанням голографічних і нанооптичних елементів на основі халькогенідних стекол буде одним із найбільш імовірних продуктів для інформаційних технологій. В Австралії (університет Сіднея) дотепер уже виготовлено дослідні зразки оптичних чіпів зі смугою пропускання 640 Gb/s на основі плівок системи As-S, що у 8 разів перевищує смугу пропускання в сучасних комерційних хвилеводах на основі діоксиду кремнію [23]. Основною проблемою створення таких оптичних структур є також неідеальність меж розділу з підкладкою і наявність приповерхневого шару [24].

Своєю математичною природою задачі синтезу оптичних шаруватих покриттів з неідеальними межами між шарами близькі до цілого ряду задач синтезу в інших галузях: електродинаміці, радіофізиці, акустиці [17]. Хоча пристрої, з якими пов'язані ці задачі, можуть, на перший погляд, суттєво відрізнятися від оптичних багатошарових 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 та техніки.

1.2. Задачі аналізу для багат шарових оптичних покриттів

Перш ніж розглядати методи розв'язання цих задач, визначимо поняття тонкої плівки. Математично тонка плівка може бути представлена як плоскопаралельний нескінченний шар, товщину якого можна порівняти з довжиною хвилі падаючого світлового випромінювання. Цей шар характеризується показником заломлення n_j , не залежним від товщини, оптичною товщиною $n_j \cdot d_j$, а у разі поглинаючих шарів – показником поглинання k_j . Загалом багат шарова тонкоплівкова система може бути представлена як набір скінченного числа таких шарів, що характеризуються індивідуальними оптичними сталими $(n_j; n_j \cdot d_j; k_j)$.

Багат шарові покриття (БШП) виготовляють у вигляді системи тонких шарів, що послідовно наносяться на певну поверхню. Цю поверхню прийнято називати підкладинкою. Оскільки вся багат шарова система має товщину порядку однієї або декількох довжин хвиль падаючого світла, а її поперечні розміри виявляються на багато порядків більше, шари природно вважати необмеженими за двома напрямками, тобто одержуємо модель багат шарового покриття (рис. 1.1).

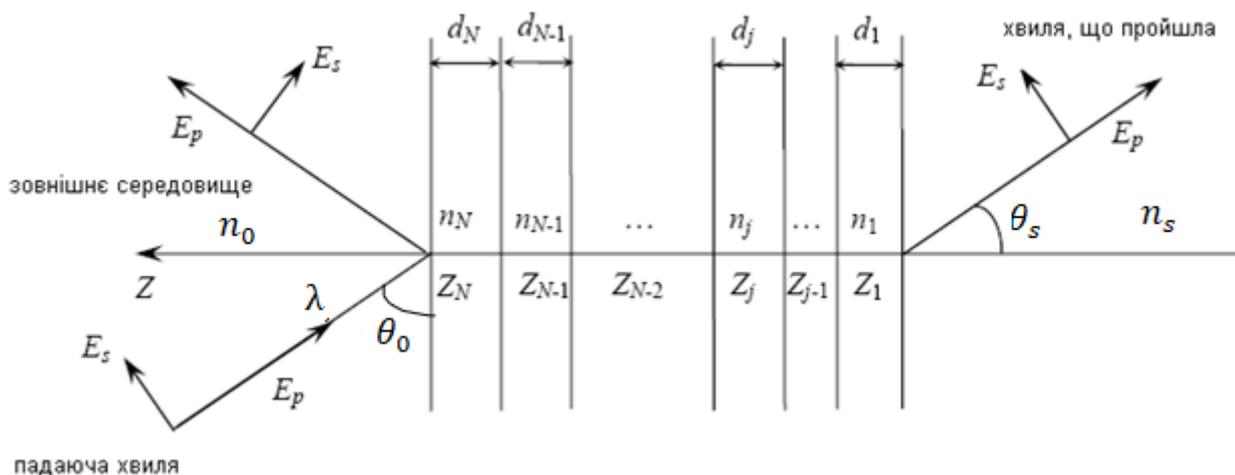


Рисунок 1.1. Модель багат шарового покриття

Вісь Z утворює нормаль до поверхні покриття. Через Z_1, \dots, Z_N позначені координати меж розділу шарів; n_1, \dots, n_N – їх показники заломлення; n_0 та n_s – показники заломлення зовнішнього середовища і підкладки відповідно; d_1, \dots, d_N – геометричні товщини шарів. Терміни s - і p - поляризована хвиля застосовуються для електромагнітних хвиль, поляризованих, відповідно, у площині падіння й перпендикулярні їй. Коефіцієнт пропускання дорівнює відношенню випромінювання, що пройшло через поверхню, до випромінювання, що впало на поверхню.

Розділяють два основних типи задач, які пов'язані з моделюванням характеристик багат шарових оптичних покриттів. Перший – задачі аналізу – полягає у визначенні спектральних характеристик покриття за відомими параметрами шарів. Другий – задачі синтезу – є оберненим щодо задач аналізу: у них за заданими спектральними характеристиками потрібно визначити параметри шаруватого середовища, яке відтворює характеристики, що найбільше наближені до заданих. Другі належать до так званих обернених задач.

Коротко розглянемо найбільш часто використовувані методи для розв'язання задачі аналізу: рекурентний, адмітансний та матричний.

1.2.1. Рекурентний метод

Цей метод, запропонований у [25], базується на врахуванні багаторазових відображень та заломлення променя в шарах плівки з наступним сумуванням цих променів. Сумування відбувається шляхом додавання амплітуд з урахуванням фази кожного променя. Основними формулами в методі А.Г. Власова є рекурентні співвідношення [25]:

$$r_{j-1,m+1} = \frac{r_{j-1,j} + r_{j,m+1}e^{-2i\Phi_j}}{1 + r_{j-1,j}r_{j,m+1}e^{-2i\Phi_j}},$$

$$t_{j-1,m+1} = \frac{t_{j-1,j} + t_{j,m+1}e^{-i\Phi_j}}{1 + r_{j-1,j}r_{j,m+1}e^{-2i\Phi_j}},$$

де r_{jk} і t_{jk} – амплітудні коефіцієнти відбивання і пропускання на межі розділу $j-1$ і j середовищ, які визначаються відомими формулами Френеля [2], Φ_j – ефективна фазова товщина j -ого шару.

Рекурентні формули найбільш просто використовувати при виконанні розрахунку розподілу поля в одному або у всіх шарах системи. Вони забезпечують необхідну точність, але не зручні для розрахунку інтерференції в поглинаючих шарах, оскільки число необхідних рівнянь швидко зростає з числом шарів.

1.2.2. Адмітансний метод

Іноді для розрахунків спектральних характеристик застосовується обчислювальна схема, заснована на використанні адмітансу [11].

Оптичний адмітанс $Y(z, k)$ є величиною, зворотною імпедансу. Імпеданс $Z(z, k)$ вводиться співвідношенням:

$$Z(z, k) = 1 / Y(z, k) = E(z, k) / H(z, k).$$

Отже, адмітанс – відношення тангенціальних складових напруженості магнітного $H(z, k)$ й електричного $E(z, k)$ полів:

$$Y(z, k) = H(z, k) / E(z, k).$$

Амплітудний коефіцієнт відбивання виражається через адмітанс на зовнішній межі покриття:

$$r(k) = \frac{q_a - Y(z_a, k)}{q_a + Y(z_a, k)},$$

де q_a – ефективний показник заломлення зовнішнього середовища.

Адмітанс є характеристикою хвильового руху в даній точці, а не характеристикою середовища, в якому ~~в якій~~ хвиля поширюється. Для розрахунку $Y(z, k)$ використовується рекурентне співвідношення та відповідні граничні умови:

$$Y_{j-1} = \frac{Y_j + i \cdot n_j \cdot \operatorname{tg} \Phi_j}{1 + i \cdot (Y_j / n_j) \cdot \operatorname{tg} \Phi_j}, Y_m = n_m,$$

де $\Phi_j = 2\pi n_j d_j / \lambda$ – фазова товщина j -ого шару.

Енергетичні коефіцієнти відбивання (R) і пропускання (T) обчислюються за допомогою Y_0 :

$$R = \left| \left(1 - \frac{Y_0}{n_0} \right) / \left(1 + \frac{Y_0}{n_0} \right) \right|^2,$$

$$T = \left[\frac{\operatorname{Re}\{n_{m+1}\}}{n_0} \right] \left| (n_0/n_{m+1}) \exp\{-i \sum_{j=0}^m \Phi_j\} \prod_{j=0}^m [(n_{j+1} + Y_j)/(n_j + Y_j)] \right|^2.$$

На цих формулах базується «адмітансний» метод розрахунку оптичних властивостей плівкових систем. Отже, знаючи структуру покриття й параметри навколишніх середовищ, за допомогою наведених вище формул можна розрахувати оптичні характеристики покриття – коефіцієнти відбивання, пропускання та поглинання, а також фазові зміни, що виникають при відбиванні й проходженні через нього світлової хвилі, для заданих довжин хвиль і кутів падіння [11]. Однак цей метод вважається незручним для розрахунку систем, що складаються з шарів нерівної оптичної товщини.

1.2.3. Матричний метод

Найбільш поширеним методом розрахунків оптичних коефіцієнтів є матричний метод. Ідея цього методу полягає у використанні характеристичних матриць M_j . В основі знаходження характеристичних матриць лежить підхід, що базується на вирішенні рівнянь Максвелла для електромагнітної хвилі всередині системи шарів. Загальна теорія цього розрахунку, розвинена Абелем [26], викладена в працях [2, 27].

Розглянемо спочатку випадок нормального падіння світла, а потім узагальнимо для випадку падіння під кутом. Нехай у напрямку Z на багат шарову систему падає випромінювання з плоским хвильовим фронтом. Унаслідок існування на кожній межі розділу відбитої та заломленої хвиль, усередині багат шарової системи виникають інтерференційні ефекти. Для j -го шару загальний вид розв'язку

для електричного і магнітного полів записується у вигляді суми двох синусоїдальних хвиль, що поширюються в протилежних напрямках:

$$\begin{cases} E_{(z,t)} = a_j \exp\left(i\left(\omega t - \frac{2\pi n_j z_j}{\lambda} + \alpha_j\right)\right) + v_j \exp\left(i\left(\omega t - \frac{2\pi n_j z_j}{\lambda} + \beta_j\right)\right), \\ H_{(z,t)} = n_j \left[a_j \exp\left(i\left(\omega t - \frac{2\pi n_j z_j}{\lambda} + \alpha_j\right)\right) - v_j \exp\left(i\left(\omega t + \frac{2\pi n_j z_j}{\lambda} + \beta_j\right)\right) \right]. \end{cases}$$

Тут a_j ; v_j ; α_j ; β_j – сталі, які визначаються з умов безперервності тангенціальних складових напружень електричного й магнітного полів $E_{(z)}$ і $H_{(z)}$ на кожній межі розділу. Оскільки в оптиці, як правило, мають справу з усередненими за часом величинами, тимчасовий множник у виразі для E і H можна опустити. Умову безперервності тангенціальних складових E і H векторів на $(j-1)$ -й межі розділу може бути записано в такому вигляді:

$$\begin{aligned} & a_j \exp\left(i\left(\alpha_j - \frac{2\pi n_j z_{j-1}}{\lambda}\right)\right) + v_j \exp\left(i\left(\beta_j + \frac{2\pi n_j z_{j-1}}{\lambda}\right)\right) = \\ & = a_{j-1} \exp\left(i\left(\alpha_{j-1} - \frac{2\pi n_{j-1} z_{j-1}}{\lambda}\right)\right) + v_{j-1} \exp\left(i\left(\beta_{j-1} + \frac{2\pi n_{j-1} z_{j-1}}{\lambda}\right)\right), \\ & n_j \left[a_j \exp\left(i\left(\alpha_j - \frac{2\pi n_j z_{j-1}}{\lambda}\right)\right) - v_j \exp\left(i\left(\beta_j + \frac{2\pi n_j z_{j-1}}{\lambda}\right)\right) \right] = \\ & = n_{j-1} \left[a_{j-1} \exp\left(i\left(\alpha_{j-1} - \frac{2\pi n_{j-1} z_{j-1}}{\lambda}\right)\right) - v_{j-1} \exp\left(i\left(\beta_{j-1} + \frac{2\pi n_{j-1} z_{j-1}}{\lambda}\right)\right) \right]. \end{aligned}$$

Для зручності аналізу введемо нову систему позначення хвильових полів [28].

$$\begin{aligned} E_j^{(t)} &= a_j \exp\left(i\left(\alpha_j - \frac{2\pi n_j z_j}{\lambda}\right)\right), \\ E_{(j-1)^+}^{(t)} &= a_j \exp\left(i\left(\alpha_j + \frac{2\pi n_j z_{j-1}}{\lambda}\right)\right), \\ E_j^{(r)} &= v_j \exp\left(i\left(\beta_j + \frac{2\pi n_j z_j}{\lambda}\right)\right), \\ E_{(j-1)^+}^{(r)} &= v_j \exp\left(i\left(\beta_j + \frac{2\pi n_j z_{j-1}}{\lambda}\right)\right). \end{aligned}$$

Із цього запису випливає, що

$$\begin{aligned} E_{(j-1)^+}^{(t)} &= E_{j^-}^{(t)} \exp(i\varphi_j), \\ E_{(j-1)^+}^{(r)} &= E_{j^-}^{(r)} \exp(-i\varphi_j). \end{aligned}$$

де $\varphi_j = \frac{2\pi}{\lambda} n_j (z_j - z_{j-1})$.

Величину φ_j назвемо фазовою товщиною шару. З урахуванням умови безперервності на $(j-1)$ -й межі розділу можуть бути переписані в такому вигляді:

$$\begin{cases} E_{(j-1)^-}^{(t)} + E_{(j-1)^-}^{(r)} = E_{j^-}^{(t)} \exp(i\varphi_j) + E_{j^-}^{(r)} \exp(-i\varphi_j), \\ E_{(j-1)^-}^{(t)} - E_{(j-1)^-}^{(r)} = \frac{n_j}{n_{j-1}} \left(E_{j^-}^{(t)} \exp(i\varphi_j) - E_{j^-}^{(r)} \exp(-i\varphi_j) \right). \end{cases}$$

Розв'язавши систему рівнянь відносно $E_{(j-1)^-}^{(t)}$ і $E_{(j-1)^-}^{(r)}$ легко отримати такі рекурентні співвідношення:

$$\begin{aligned} E_{(j-1)^-}^{(t)} &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{n_j}{n_{j-1}} \right) E_{j^-}^{(t)} \exp(i\varphi_j) + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{n_j}{n_{j-1}} \right) E_{j^-}^{(r)} \exp(-i\varphi_j), \\ E_{(j-1)^-}^{(r)} &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{n_j}{n_{j-1}} \right) E_{j^-}^{(t)} \exp(i\varphi_j) + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{n_j}{n_{j-1}} \right) E_{j^-}^{(r)} \exp(-i\varphi_j). \end{aligned}$$

Узагальнені коефіцієнти Френеля f_{j-1} і g_{j-1} для $(j-1)$ -ї межі розділу мають наступний вигляд:

$$f_{j-1} = \frac{n_{j-1} - n_j}{n_{j-1} + n_j}, \quad g_{j-1} = \frac{2n_{j-1}}{n_{j-1} + n_j},$$

тоді

$$\begin{cases} E_{(j-1)^-}^{(t)} = \frac{\exp(i\varphi_j)}{g_{j-1}} E_{j^-}^{(t)} + \frac{f_{j-1}}{g_{j-1}} E_{j^-}^{(r)} \exp(-i\varphi_j), \\ E_{(j-1)^-}^{(r)} = \frac{f_{j-1}}{g_{j-1}} E_{j^-}^{(t)} \exp(i\varphi_j) + \frac{\exp(-i\varphi_j)}{g_{j-1}} E_{j^-}^{(r)}. \end{cases}$$

Ці рекурентні формули можна переписати у вигляді еквівалентного матричного рівняння, що пов'язує електричні поля на j -й і $(j-1)$ -й межах розділу:

$$\begin{bmatrix} E_{(j-1)^-}^{(t)} \\ E_{(j-1)^-}^{(r)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\exp(i\varphi_j)}{g_{j-1}} & \frac{f_{j-1} \exp(-i\varphi_j)}{g_{j-1}} \\ \frac{f_{j-1} \exp(i\varphi_j)}{g_{j-1}} & \frac{\exp(-i\varphi_j)}{g_{j-1}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_j^{(r)} \\ E_j^{(t)} \end{bmatrix} = M_j \begin{bmatrix} E_j^{(r)} \\ E_j^{(t)} \end{bmatrix}.$$

Зручність матричного запису полягає в простоті й компактності рекурентної процедури, що пов'язує $E_{(j-1)^-}^{(t)}$ і $E_{(j-1)^-}^{(r)}$ з $E_j^{(t)}$ і $E_j^{(r)}$. Використовуючи встановлені правила перемноження матриць, легко встановити зв'язок $E_{(j-2)^-}^{(t)}$ і $E_{(j-2)^-}^{(r)}$ з $E_j^{(t)}$ і $E_j^{(r)}$, який узгоджується з результатами безпосередньої алгебраїчної підстановки:

$$\begin{bmatrix} E_{(j-2)^-}^{(t)} \\ E_{(j-2)^-}^{(r)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\exp(i\varphi_{j-1})}{g_{j-2}} & \frac{f_{j-2} \exp(-i\varphi_{j-1})}{g_{j-2}} \\ \frac{f_{j-2} \exp(i\varphi_{j-1})}{g_{j-2}} & \frac{\exp(-i\varphi_{j-1})}{g_{j-2}} \end{bmatrix} \times \\ \times \begin{bmatrix} \frac{\exp(i\varphi_j)}{g_{j-1}} & \frac{f_{j-1} \exp(-i\varphi_j)}{g_{j-1}} \\ \frac{f_{j-1} \exp(i\varphi_{j-1})}{g_{j-1}} & \frac{\exp(-i\varphi_{j-1})}{g_{j-1}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_j^{(t)} \\ E_j^{(r)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_j^{(t)} \\ E_j^{(r)} \end{bmatrix},$$

де:

$$A = \frac{\exp(i(\varphi_{j-1} + \varphi_j)) + f_{j-1} f_{j-2} \exp(-i(\varphi_{j-1} - \varphi_j))}{g_{j-1} g_{j-2}},$$

$$B = \frac{f_{j-1} \exp(i(\varphi_{j-1} - \varphi_j)) + f_{j-2} \exp(-i(\varphi_{j-1} + \varphi_j))}{g_{j-1} g_{j-2}},$$

$$C = \frac{f_{j-2} \exp(i(\varphi_{j-1} + \varphi_j)) + f_{j-1} \exp(-i(\varphi_{j-1} - \varphi_j))}{g_{j-1} g_{j-2}},$$

$$D = \frac{\exp(-i(\varphi_{j-1} + \varphi_j)) + f_{j-1} f_{j-2} \exp(i(\varphi_{j-1} - \varphi_j))}{g_{j-1} g_{j-2}}.$$

Очевидно, що шляхом послідовного застосування цієї рекурентної процедури можна отримати амплітуди електричного поля відбитої та заломленої хвиль з боку середовища, з якого падає світло, з урахуванням граничних умов на m -й межі розділу в такій формі:

$$\begin{bmatrix} E_{\sigma^-}^{(t)} \\ E_{\sigma^-}^{(r)} \end{bmatrix} = M_1 M_2 M_3 \dots M_{m-1} \begin{bmatrix} E_{(m)^-}^{(t)} \\ E_{(m)^-}^{(r)} \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{n_m}{n_{m-1}} \right) \\ \frac{1}{2} \left(1 - \frac{n_m}{n_{m-1}} \right) \end{bmatrix},$$

де $M = \prod_{j=1}^{m-1} M_j$.

Тут яскраво виявляються значні переваги матричного запису, наприклад, зміна фазової товщини φ_j j -го шару впливає тільки на j -ту матрицю.

Матрична форма запису відіграє ще важливішу роль, якщо як змінні використовувати $E_{(z)}$ і $H_{(z)}$. Раніше ми записували електричний і магнітний вектори в j -му шарі на j -й межі розділу таким чином:

$$\begin{cases} E_j = E_{j^-}^{(t)} + E_{j^-}^{(r)}, \\ H_j = n_j E_{j^-}^{(t)} - n_j E_{j^-}^{(r)}, \end{cases}$$

або в еквівалентній формі:

$$\begin{bmatrix} E_j \\ H_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ n_j & -n_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{j^-}^{(t)} \\ E_{j^-}^{(r)} \end{bmatrix}.$$

Таким чином:

$$\begin{bmatrix} E_{j^-}^{(t)} \\ E_{j^-}^{(r)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ n_j & -n_j \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} E_j \\ H_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2n_j} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2n_j} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_j \\ H_j \end{bmatrix}.$$

Щоб отримати зв'язок між електричним і магнітним полями в $(j-1)$ -му і електричним і магнітним полями в j -му шарі, запишемо електричне і магнітне поля в $(j-1)$ -му шарі на $(j-1)$ -й межі розділу:

$$\begin{bmatrix} E_{j-1} \\ H_{j-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ n_{j-1} & -n_{j-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{(j-1)^-}^{(t)} \\ E_{(j-1)^-}^{(r)} \end{bmatrix}.$$

Що рівно

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} E_{j-1} \\ H_{j-1} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ n_{j-1} & -n_{j-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\exp(i\varphi_j)}{g_{j-1}} & \frac{f_{j-1} \exp(-i\varphi_j)}{g_{j-1}} \\ \frac{f_{j-1} \exp(i\varphi_j)}{g_{j-1}} & \frac{\exp(-i\varphi_j)}{g_{j-1}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_j^{(t)} \\ E_j^{(r)} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} \frac{1+f_{j-1}}{g_{j-1}} \exp(i\varphi_j) & \frac{1+f_{j-1}}{g_{j-1}} \exp(-i\varphi_j) \\ n_{j-1} \frac{1-f_{j-1}}{g_{j-1}} \exp(i\varphi_j) & -n_{j-1} \frac{1-f_{j-1}}{g_{j-1}} \exp(-i\varphi_j) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_j^{(t)} \\ E_j^{(r)} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Оскільки $\frac{1+f_{j-1}}{g_{j-1}} = 1$, а $\frac{1-f_{j-1}}{g_{j-1}} = \frac{n_j}{n_{j-1}}$, то:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} E_{j-1} \\ H_{j-1} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \exp(i\varphi_j) & \exp(-i\varphi_j) \\ n_j \exp(i\varphi_j) & -n_j \exp(-i\varphi_j) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{(j-1)^-}^{(t)} \\ E_{(j-1)^-}^{(r)} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} \exp(i\varphi_j) & \exp(-i\varphi_j) \\ n_j \exp(i\varphi_j) & -n_j \exp(-i\varphi_j) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2n_j} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2n_j} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_j \\ H_j \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} \cos \varphi_j & \frac{i}{n_j} \sin \varphi_j \\ in_j \sin \varphi_j & \cos \varphi_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_j \\ H_j \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Таким чином, j -та матриця залежить тільки від оптичних постійних j -го шару (оптична товщина, показник заломлення). У цій системі запису багат шарова система може бути представлена добутком матриць. У цьому разі компоненти E , H вектора в середовищі, з якого падає світло, пов'язані з компонентами E , H вектора в середовищі, у яке світло поширюється, таким співвідношенням:

$$\begin{bmatrix} E_0 \\ H_0 \end{bmatrix} = M_1 M_2 \dots M_{m-1} \begin{bmatrix} E \\ H \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} E \\ H \end{bmatrix}, \quad M = \prod_{j=1}^{m-1} M_j. \quad (1.1)$$

Якщо згадати граничні умови на нульовій і m -й межах розділу:

$$\begin{cases} E_0 = E_{0^-}^{(t)} + E_{0^-}^{(r)} \\ H_0 = n_0 E_{0^-}^{(t)} - n_0 E_{0^-}^{(r)} \end{cases}, \quad \begin{cases} E_m = E_{(m)^+}^{(t)} = 1 \\ H = n_l E_{(m)^+}^{(t)} = n_l \end{cases},$$

то (1.1) можна записати у вигляді:

$$\begin{bmatrix} E_{0^-}^{(t)} + E_{0^-}^{(r)} \\ n_0 E_{0^-}^{(t)} - n_0 E_{0^-}^{(r)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11} & im_{12} \\ im_{21} & m_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ n_l \end{bmatrix}.$$

Перемноживши матриці в правій частині, отримаємо еквівалентну систему рівнянь:

$$\begin{cases} E_{0^-}^{(t)} + E_{0^-}^{(r)} = m_{11} + in_m m_{12}, \\ n_0 E_{0^-}^{(t)} - n_0 E_{0^-}^{(r)} = m_{21} + in_m m_{22}. \end{cases}$$

Розв'язавши систему рівнянь, знайдемо вирази для електричних полів відбитої і заломленої хвиль через елементи характеристичної матриці:

$$\begin{cases} E_{0^-}^{(t)} = \frac{1}{2} \left[(m_{11} + in_m m_{12}) + \frac{1}{n_0} (m_{21} + in_m m_{22}) \right], \\ E_{0^-}^{(r)} = \frac{1}{2} \left[(m_{11} + in_m m_{12}) - \frac{1}{n_0} (m_{21} + in_m m_{22}) \right]. \end{cases}$$

Амплітудні та енергетичні коефіцієнти відбивання і пропускання багат шарової інтерференційної системи, виражені через елементи характеристичної матриці, мають такий вигляд:

$$\left\{ \begin{array}{l} r_{0^-} = \frac{E_{0^-}^{(r)}}{E_{0^-}^{(t)}} = \frac{n_0(m_{11} + in_m m_{12}) - (n_m m_{22} + im_{21})}{n_0(m_{11} + in_m m_{12}) + (n_m m_{22} + im_{21})}, \\ t_{0^-} = \frac{1}{E_{0^-}^{(t)}} = \frac{2n_0}{n_0(m_{11} + in_m m_{12}) + (n_m m_{22} + im_{21})}. \end{array} \right. \quad (1.2)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} R = |r_{0^-}|^2 \\ T = \frac{n_s}{n_0} |t_{0^-}|^2 \end{array} \right. \quad (1.3)$$

Зміни фази електричних полів відбитої і пройденої через багат шарову систему хвиль можуть бути представлені в такому вигляді:

$$\left\{ \begin{array}{l} \operatorname{tg} \rho = -\frac{2n_0(m_{11}m_{21} - n_m^2 m_{22}m_{12})}{n_0^2(m_{11})^2 - n_m^2(m_{22})^2 + n_0^2 n_m^2(m_{12})^2 - (m_{21})^2}, \\ \operatorname{tg} \tau = -\frac{n_0 n_m m_{12} + m_{21}}{n_0 m_{11} + n_m m_{22}} \end{array} \right. \quad (1.4)$$

Вирази для r_{0^-} , t_{0^-} , ρ і τ можуть бути використані для розрахунку в тому разі, якщо елементи матриці $m_{11}, m_{22}, m_{12}, m_{21}$ – дійсні числа. Амплітудні та енергетичні коефіцієнти відбивання і пропускання, а також зміни фази електричних полів відбитої і заломленої електромагнітних хвиль при похилому падінні світла на багат шарову діелектричну систему шарів, можуть бути отримані з формул, аналогічних (1.2) – (1.4), якщо в них фазову товщину шарів замінити на $\frac{2\pi n_j d_j}{\lambda} \cos \alpha_j$, а показники заломлення замінити на «ефективні» значення, різні для

s - і p -компонент випромінювання: $n_j^{(p)} = \frac{\cos \alpha_j}{n_j}$ і $\tilde{n}_j^{(s)} = n_j \cos \alpha_j$.

Перейдемо до матричної форми розв'язання задачі аналізу для оптичних шаруватих покриттів. Це підхід був розроблений Ф. Абеле у 1950 році. Запропоновано характеристичну матрицю одного шару записати у вигляді:

$$M_j(N_j, d_j, \lambda) = \begin{vmatrix} \cos \delta_j(N_j, d_j, \lambda) & -\frac{i}{p_j} \sin \delta_j(N_j, d_j, \lambda) \\ -ip_j \sin \delta_j(N_j, d_j, \lambda) & \cos \delta_j(N_j, d_j, \lambda) \end{vmatrix}, \quad (1.5)$$

де $\delta_j(N_j, d_j, \lambda) = \frac{2\pi N_j d_j \cos \theta_j}{\lambda}$ – фазова товщина, $N_j = n_j(1 + ik_j)$, $i = \sqrt{-1}$,
 $n_j, k_j, d_j, \theta_j, \lambda$ – показник заломлення, показник поглинання, геометрична товщина,
 кут між променем, що падає на $(j+1)$ -й шар, і нормаллю до площини розділу j -го та
 $(j+1)$ -го шарів, довжина хвилі відповідно. Оскільки для зменшення світлових утрат в
 оптичних елементах при просвітленні їх поверхонь використовуються матеріали з
 незначним поглинанням, то будемо вважати для полегшення моделювання $k_j=0$ і,
 відповідно, $N_j=n_j$. При цьому 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).

Характеристичну матрицю k -шарової структури можемо записати:

$$M(\bar{n}, \bar{d}, \lambda) = M_k(n_k, d_k, \lambda) \cdot M_{k-1}(n_{k-1}, d_{k-1}, \lambda) \cdots M_2(n_2, d_2, \lambda) \cdot M_1(n_1, d_1, \lambda), \quad (1.6)$$

де M_j – характеристична матриця j -го шару;

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

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

λ – довжина хвилі.

Звідси коефіцієнт пропускання цієї k -шарової структури при заданих
 значеннях \bar{n}, \bar{d} та λ :

$$T = \frac{P_s}{P_0} |t|^2 = \frac{4}{\left(2 + \frac{P_0}{P_s} m_{11}^2 + \frac{P_s}{P_0} m_{22}^2 + P_0 P_s m_{12}^2 + \frac{1}{P_0 P_s} m_{21}^2 \right)}, \quad (1.7)$$

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);

θ_0 – кут, під яким промінь падає на шарувату структуру;

θ_s – кут, під яким промінь виходить із шаруватої структури, кут заломлення;

n_0, n_s – показники заломлення зовнішнього середовища і підкладинки відповідно,

$m_{11}, m_{12}, m_{21}, m_{22}$ – елементи характеристичної матриці M .

Коефіцієнт відбивання набуде вигляду:

$$R = \left[\frac{n_0 \cdot \cos \theta_0 (m_{11} + n_s \cdot \cos \theta_s \cdot m_{12}) - (n_s \cdot \cos \theta_s \cdot m_{22} + m_{21})}{n_0 \cdot \cos \theta_0 (m_{11} + n_s \cdot \cos \theta_s \cdot m_{12}) + (n_s \cdot \cos \theta_s \cdot m_{22} + m_{21})} \right]^2. \quad (1.8)$$

Також слід відзначити, що згідно із законом збереження енергії для непоглинаючих плівок

$$R + T = 1.$$

Отже, знаючи параметри шаруватого середовища, можна за допомогою формул (1.7), (1.8) визначити його спектральні коефіцієнти, тобто залежності від довжини хвилі коефіцієнта пропускання T та коефіцієнта відбивання R . Це і є прямою задачею, або задачею аналізу.

1.3. Задачі аналізу для багат шарових оптичних покриттів

Розв'язання задачі СОП (синтезу оптичних покриттів) у загальному вигляді пов'язане зі значними труднощами, тому є велика кількість різних методів синтезу, орієнтованих на розв'язання конкретних завдань.

З точки зору використовуваних математичних методів, методи СОП можна розділити на дві групи:

– аналітичні методи СОП [11, 18, 28-40] є послідовністю обчислювальних операцій, аналогічних розв'язанню задачі аналізу, виконання яких дозволяє або знайти розв'язок, або переконатися в його відсутності для розглянутого типу покриттів;

– чисельні методи [41-45] оптимізації характеристик покриття – це методи, що дозволяють мінімізувати функцію якості.

1.3.1 Аналітичні методи синтезу

До аналітичного методу синтезу належать методи, при виборі яких за допомогою аналітичних виразів показників заломлення багатошарової системи дозволяється наблизити до заданої спектральної характеристики покриття. Для спрощення задачі зазвичай вважають, що покриття складається з непоглинаючих шарів рівної оптичної товщини. Задача синтезу в цьому випадку полягає у визначенні показників заломлення шарів.

Один з можливих підходів до проблеми синтезу – синтез за допомогою аналізу, використовуючи матричний та адмітансний методи, що базуються на описаннях властивостей плівкових систем. Наступна група методів заснована на апроксимації спектральної характеристики покриття різними поліномами, які підганяють під необхідну характеристику [31]. При цьому коефіцієнти поліномів виражаються через показники заломлення шарів і навколишніх середовищ. Для реалізації цієї задачі використовується покриття, що складаються з непоглинаючих шарів рівної оптичної товщини. Задача синтезу в цьому випадку полягає у визначенні показників заломлення шарів, що дозволяють наблизитися до заданої спектральної характеристики. Принцип вибору показників заломлення плівкоутворювальних матеріалів для двошарової просвітлювальної системи з чвертьхвильових плівок визначається методом діаграм Шустера, який отримав розвиток у роботі [28].

До аналітичних методів синтезу покриттів належить матричний метод розрахунку спектральних характеристик П.Г. Карда [11]. При деяких наближеннях він дозволяє отримати зручні для завдання синтезу математичні вирази, які використовуються при розв'язанні ряду задач із конструювання широкосмугових просвітлюючих і світлоділних покриттів з невеликим числом шарів. Властиві методу Карда можливості лінеаризації математичних виразів, що визначають залежності спектральних характеристик від конструктивних параметрів покриття, використовуються при комбінації методу з методами лінійного програмування.

Інший спеціальний метод конструювання оптичних покриттів базується на аналізі моделі фільтра Фабрі-П'єро, що в найпростішому випадку складається з двох

відбивачів, між якими поміщено роздільний шар з показником заломлення n_p і оптичною товщиною $n_p d = l(\lambda/2)$, $l=1,2,\dots$. Відбивачами можуть служити як окремі шари, так і багатошарові системи. Як другий відбивач, у принципі, може слугувати підкладинка без покриття. Коефіцієнт пропускання такої структури визначається формулою [32]

$$T = \frac{T_0}{1 - F \sin^2 \varphi},$$

де

$$T_0 = \frac{(1 - R_1)(1 - R_2)}{(1 - \bar{R})^2}; \quad \bar{R} = \sqrt{R_1 R_2};$$

$$F = \frac{4R}{(1 - \bar{R})^2}; \quad \varphi = \frac{\pi \lambda_0}{2 \lambda} l - \frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2}.$$

Тут через R_1 і R_2 позначено коефіцієнти відбивання відбивачів, а φ_1 і φ_2 є відповідними R_1 і R_2 фазовими зсувами, які виникають при відбиванні хвилі.

Коефіцієнти відбивання R_1 і R_2 і, отже, T_0 і F є функціями довжини хвилі. Коефіцієнт пропускання системи T досягає максимального значення $T_{\max} = T_0$ на довжинах хвиль, для яких виконується умова $\varphi = p\pi$, $p=0, 1, 2, \dots$, причому, якщо $R_1 = R_2$, то $T_0=1$. При $T_0=1$ і $F \ll 1$ значення T змінюється від 1 до $1 - F$. Отже, коефіцієнт відбивання системи R змінюється від 0 до F . Якщо $T_0 \neq 1$, то R лежить у межах від $R_{\min} = 1 - T_0$ до $R_{\max} \approx R_{\min} + T_0 F$. Зміну коефіцієнтів відбивання R_1 і R_2 можна досягнути як за рахунок варіювання показників заломлення, так і за рахунок підбору товщин шарів покриття, що утворюють відбивачі.

Відзначимо, що реально умову $R_1 = R_2$ і, отже, $R = 0$ вдається виконати тільки для деяких довжин хвиль. Спектральна ширина ділянки низького відбивання тим більша, чим менша величина \bar{R} . Збільшення величини ділянки низького

відбивання зазвичай досягається за рахунок збільшення осциляцій спектральної кривої коефіцієнтами відбивання.

Яскравим прикладом аналітичних методів є методи, засновані на знаходженні безперервного розподілу показника заломлення шарів за допомогою перетворень Фур'є, які забезпечують отримання заданої спектральної характеристики [33-34]. Ці методи мають свої переваги, головна з яких – відсутність необхідності в нульовому наближенні. Недолік цього класу методів полягає в складності практичної реалізації розрахованих покриттів, а також у їх незастосовності для неспрошеного критерію якості.

При розв'язанні задачі синтезу зручно використовувати методи і прийоми, спрямовані на спрощення математичного опису багатошарової плівкової системи. Такими методами є метод ефективних границь і метод еквівалентних шарів.

Метод ефективних границь використовується в процесі комбінування потрібного фільтра (просвітлюючого покриття) з двох мультишарів (або двох шаруватих оптичних середовищ) з відомими властивостями. Зміни коефіцієнтів відбиття $R_1(\lambda)$ і $R_2(\lambda)$ можна досягти як за рахунок варіювання показників заломлення, так і за рахунок підбору товщини шарів покриття, що утворюють підсистеми 1 і 2. Спочатку метод був розроблений для конструювання фільтрів, а потім модифікований для розрахунку ахроматичних просвітлювальних покриттів [35].

Наступним методом, використовуваним при вирішенні задачі синтезу, є метод еквівалентних шарів [36-40]. Він побудований на аналізі шаруватих систем, які складаються із симетричних комбінацій плівок, що періодично повторюються. Цей метод отримав широке застосування при конструюванні як діелектричних, так і металодіелектричних фільтрів відрізаючого типу, світлоподільних та поляризуючих покриттів.

Аналітичні методи дозволяють ефективно вирішувати тільки прості задачі синтезу покриттів, оскільки мають ряд припущень і переважно використовуються на ранніх етапах розв'язання задачі СОП. Так, наприклад, у роботі [41] вони

можуть бути застосовані тільки для певного виду функції, що залежить від конструктивних параметрів покриття, і припускають наявність обмежень на оптичні параметри покриттів.

На жаль, аналітичні методи мають ряд недоліків: при розв'язанні складних задач, що вимагають аналізу покриття з великою кількістю шарів, вони призводять до громіздким виразів, а також отримані цими методами структури покриттів не завжди можуть бути реалізовані на практиці. Тому, у зв'язку з розвитком комп'ютерної техніки завдання синтезу різних інтерференційних покриттів вирішуються переважно чисельними методами. Аналітичні методи дозволяють ефективно розв'язувати не тільки прості задачі синтезу покриттів, оскільки мають ряд припущень і переважно використовуються на початкових етапах.

1.3.2. Чисельні методи оптимізації характеристик покриття

У зв'язку з розвитком обчислювальної техніки застосування чисельних методів значно спростилося і з'явилася можливість більш широкого їх використання шляхом створення спеціалізованих комп'ютерних програм, заснованих на завданнях оптимізації оціночних функцій (функцій якості) [42-46]. Відмінність чисельних методів від аналітичних полягає в тому, що обмеження на параметри шарів враховуються вже на етапі формулювання завдання.

Чисельні методи синтезу багат шарових покриттів – це методи розв'язання задачі мінімізації функції якості F . Функція якості F залежить від конструктивних параметрів покриття (товщини і показника заломлення шарів) і характеризує відхилення необхідної спектральної характеристики від її наближення. При цьому мінімуму функції відповідає найкраще збіг характеристик, тобто збіг синтезованого спектра з заданим. У загальному випадку функцію якості можна записати у вигляді

$$F(X) = \left(\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} w(\lambda) |f(\lambda) - \bar{f}(\lambda)|^q d\lambda \right)^{1/q},$$

де q – ціле число, $w(\lambda)$ – вагова функція, $f(\lambda)$ та $\bar{f}(\lambda)$ – синтезований та заданий спектри, $X = (n_1, n_2, \dots, n_N, d_1, d_2, \dots, d_N)$ – параметри покриття, N – кількість шарів.

Вибравши L точок зі спектрального діапазону $[\lambda_1, \lambda_2]$, можна функцію якості записати у вигляді

$$F(X) = \left(\sum_{i=1}^L w(\lambda_i) |f(\lambda_i) - \bar{f}(\lambda_i)|^q \right)^{1/q}.$$

При збільшенні q значення $F(X)$ усе більшою мірою визначається максимальною розбіжністю f і \bar{f} . І границя при $q \rightarrow \infty$

$$\lim_{q \rightarrow \infty} \left\{ \sum_i v(\lambda_i) |f(\lambda_i) - \bar{f}(\lambda_i)|^q \right\}^{1/q} = \max_i [v(\lambda_i) |f(\lambda_i) - \bar{f}(\lambda_i)|].$$

Чисельні методи оптимізації характеристик покриття можна розділити на дві категорії – методи, що вимагають початкового (нульового) наближення [45] і методи автоматичного конструювання, для яких початкова конструкція невідома [41]. Методи синтезу, що використовують початкове наближення, у свою чергу, можна розділити на локальні і нелокальні. У першому випадку шукається локальний мінімум функції якості структур на основі аналітичних методів синтезу або вибирається серед відомих систем. У тому випадку, якщо немає достатньо «хорошого» початкового наближення або ж синтез при відомих початкових наближеннях не призводить до отримання задовільного рішення, застосовуються нелокальні методи синтезу.

Серед перших чисельних методів розв'язання СОП був метод послідовного синтезу, запропонований Шатіловим і Тютіковим [47]. Він не потребує початкового наближення. Синтез покриття проводиться шляхом додавання по одному шару, товщина якого вибирається відповідно до мінімуму оціночної функції. Варіюється лише товщина одного шару, який додається при всіх фіксованих параметрах попередніх шарів. Недолік цього методу полягає в тому, що він легко заходить у глухий кут при конструюванні відбиваючих покриттів. Але цю проблему можна подолати, якщо до системи послідовно додавати групу

шарів (не менше двох). Після приєднання кожної групи шляхом ітерації оптимізуються спочатку параметри шарів, що входять до неї, а потім ті, що входять до усіх попередніх плівок.

Такий прийом дозволяє уникнути істотного спотворення оптичних характеристик порівняно з вихідною конструкцією і в той же час дає можливість продовжувати оптимізацію за рахунок збільшення числа варійованих параметрів. Очевидно, що цей метод із гарантією давав би рішення, якби в міру додавання груп шарів оптичні характеристики покриттів, що утворюються, прагнули до певної межі. Довільні покриття такою властивістю не володіють. Цей прийом успішний для використання дзеркальних покриттів для згладжування побічних піків.

Іншим простим чисельним методом розв'язання СОП вважають методи перебору на сітці. Методи перебору можна розділити на методи перебору значень функції $F(X)$ на рівномірній сітці і нерівномірній.

Метод рівномірного перебору належить до пасивних методів тому, що всі значення вектора X задаються одночасно до початку обчислень значень функції. Кожен раз значення параметрів – показника заломлення n_i та геометричних товщин d_i – вибирається з певним однаковим кроком, окремо за кожним із параметрів.

Метод перебору на нерівномірній сітці полягає у використанні нерівномірних значень кроків Δn і Δd . Задачу мінімізації $F(X)$ можна обчислити швидше, ніж на рівномірній сітці. Цей метод є послідовним. Тут вибір точки X_k при кожному $k > 2$ проводиться з урахуванням обчислень значення функції на попередніх точках X_1, X_2, \dots, X_{k-1} .

Розглянемо використання методу релаксаційного (покоординатного) спуску [48]. У практичних задачах є варіанти, коли мінімізується функція не володіє потрібною гладкістю або є гладкою, але обчислення її похідних, з потрібною точністю вимагає великих обчислювальних і часових витрат. Тоді бажано мати методи мінімізації, які вимагають лише обчислення значення функції. Одним з таких методів є метод покоординатного спуску. Цей метод зводить задачу пошуку найменшого значення $F(X)$ до багаторазового розв'язання одновимірних

задач оптимізації. Параметри шарів варіюються послідовно, тобто спочатку визначаються оптимальні параметри першого шару покриття при фіксованих інших, потім другого і т.д. Після проходження по всіх шарах процес повторюється, починаючи з першого шару, і т.д.

Релаксаційним способом, так само, як і градієнтним, здійснюється спуск у локальний мінімум $F(X)$ з кожного випадкового заданого початкового наближення і шляхом порівняння одержуваних локальних мінімумів проводиться вибір найменшого.

Іншими методами, які не вимагають обчислення похідних, є методи нульового порядку. Серед них слід відзначити методи Хука-Дживса, Розенброка та Пауелла.

Хук і Дживс запропонували більш простий з точки зору програмної реалізації метод, що не вимагає виконання одновимірної мінімізації, який відомий як метод конфігурацій [20, 49]. Цей метод не має строгого обґрунтування, однак він є досить ефективним при мінімізації функцій, що містять “яри”. При використанні методу конфігурацій вдається встановити наявність “яру” на поверхні цільової функції та організувати рух робочої точки вздовж нього.

Стратегія пошуку мінімуму багатовимірної функції полягає в наступному. На першому етапі з метою визначення напрямку пошуку виконується “досліджувальний” пошук в околі початкової точки, що є першою базисною точкою \mathbf{b}^1 .

Для знаходження другої базисної точки виконується серія “пробних рухів”: розглядаються вдалі в розумінні зменшення цільової функції кроки за координатними напрямками.

Наприклад, приріст першої координати призвів до збільшення цільової функції порівняно з її значенням у вихідній точці. Тоді отримана точка відкидається, а знак приросту міняється на протилежний. Якщо від’ємний приріст також призводить до збільшення цільової функції, то ця координата залишається без змін і приріст дається наступній координаті.

Якщо зміна координати призводить до зменшення функції, то отримана точка зберігається і здійснюється перехід до наступної координати.

Після перегляду всіх координат перша серія “пробних рухів” завершується, а знайдена точка вважається другою базисною точкою \mathbf{b}^2 . Тут можливі дві ситуації: 1) $F(\mathbf{b}^2) \geq F(\mathbf{b}^1)$, тобто проведення “досліджувального” пошуку не дозволило зменшити значення функції; 2) $F(\mathbf{b}^2) < F(\mathbf{b}^1)$, тобто досягнуто зменшення функції.

У першому випадку довжина “пробного кроку” – значення приросту координати зменшується, і “пробні рухи” починаються знову. У другому випадку в очікуванні повтору успіху робиться крок у напрямку вектора різниці $F(\mathbf{b}^2) \geq F(\mathbf{b}^1)$: $\mathbf{b}' = 2\mathbf{b}^2 - \mathbf{b}^1$.

Для корекції вибраного напрямку в околі точки \mathbf{b}' виконується нова серія “пробних рухів”, яка дає точку \mathbf{b}^3 , що стає третьою базисною точкою. Якщо $F(\mathbf{b}^3) < F(\mathbf{b}^2)$, то пошук продовжується з тим же кроком у напрямку $\mathbf{b}^3 - \mathbf{b}^2$, що приводить у точку $\mathbf{b}'' = 2\mathbf{b}^3 - \mathbf{b}^2$. У протилежному випадку в околі точки \mathbf{b}^2 виконується серія “пробних рухів”, і процес пошуку продовжується. Пошук завершується, як тільки значення приросту за всіма координатами стане менше заданого рівня або виявиться вичерпаним ліміт машинного часу, відведеного на розв’язання задачі.

Недолік методу конфігурацій полягає в тому, що він не може забезпечити зменшення функції, якщо її поверхні рівного рівня мають гострі кути. Уникнути цього можна, наприклад, перезаданням нульового наближення, вибравши його так, щоб воно знаходилось достатньо близько до точки, отриманої в результаті попереднього пошуку. У той же час метод досить наглядний, оскільки він не вимагає підбору різних параметрів, які визначають роботу інших алгоритмів, таких як точність виконання одновимірної мінімізації, вибір інтервалу невизначеності та ін. У цьому методі обидва параметри, що задаються на початку обчислень, – приріст координат вектора конструктивних параметрів і критерій закінчення пошуку – мають очевидний фізичний зміст.

Метод Розенброка полягає в тому, що в кожному циклі проводиться пошук уздовж взаємно-ортогональних напрямків (аналогічно етапу дослідження в алгоритмі методу конфігурацій) [49]. Якщо, наприклад, цільова функція має вузький викривлений гребінь, то пошук за взаємно-ортогональними напрямками має ту властивість, що результуючий напрямок прагне розміститися вздовж осі яру.

Цей метод реалізується наступним чином. Нехай $s_1(k), s_2(k), \dots, s_n(k)$ — одиничні вектори в просторі $R^{(n)}$, де індекс $k = 0, 1, \dots$, означає етапи пошуку. Ортонормовані вектори $s_1(k), s_2(k), \dots, s_n(k)$ будуються на основі інформації, отриманої на $(k - 1)$ -му етапі пошуку.

Розглянемо k -й етап пошуку, і нехай $X_0(k) = X_n(k - 1)$ є точкою в $R^{(n)}$, з якої починається пошук, а $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ — довжини кроків, зв'язаних з відповідними напрямками s_1, s_2, \dots, s_n .

К р о к 1. Пошук починаємо з точки $X_0(k)$ шляхом уведення кроку, рівного $\lambda_1(k) \cdot s_1(k)$, у першому координатному напрямку.

Якщо $f(X_0(k) + \lambda_1(k)s_1(k)) \leq f(X_0(k))$, то крок вважається успішним, при цьому покладаємо $X_1(k) = X_0(k) + \lambda_1(k)s_1(k)$, а величину кроку λ_1 домножуємо на множник α ($\alpha > 0$). Якщо ж $f(X_0(k) + \lambda_1(k)s_1(k)) > f(X_0(k))$, то крок вважається неуспішним, $X_0(k)$ не замінюється на наступну точку, а домножується на множник β ($\beta < 0$). Далі задається збурення (пробний крок) за напрямком $s_2(k)$. Після того, як пройдено всі n напрямків $s_1(k), s_2(k), \dots, s_n(k)$, переходимо до кроку 2.

К р о к 2. Якщо $f(X_n(k)) < f(X_0(k))$, тобто хоча б один спуск за напрямком виявиться успішним, то покладаємо $X_0(k + 1) = X_n(k)$ і повторюємо крок 1. При цьому реалізуємо пробний крок з довжиною $\alpha \lambda_1(k)$ або $\beta \lambda_1(k)$ залежно від результату попереднього збурення за цим напрямком (Розенброк запропонував вибрати $\alpha = 3$ і $\beta = -0,5$).

Збурення вздовж вибраного напрямку пошуку задаються доти, поки кожним із напрямків за успіхом не прослідую невдача. На цьому k -й етап пошуку

закінчується. Остання отримана точка стає початковою точкою наступного етапу: $X_0(k+1) = X_n(k)$. Нормований напрямок $s_1(k+1)$ вибирається паралельним $A(k) = X_0(k+1) - X_0(k)$, а інші напрямки вибираються ортонормованими один одному і до $s_1(k)$ за допомогою одного з відомих методів.

Метод Розенброка не забезпечує автоматичне закінчення процесу пошуку після того, як знайдено екстремум $f(X)$. Пошук проводиться або за визначене число етапів, або закінчується після того, як величина $\|A(k)\|$ стане меншою за певне значення на декількох послідовних етапах.

Метод Пауелла, або метод спряжених напрямків Пауелла, представляє собою алгоритм, який був запропонований Майклом Пауеллом для пошуку функцій локального мінімуму [50]. Функція може бути недиференційованою. Метод буде мінімізувати цільову функцію шляхом двонаправленого пошуку вздовж кожного вектора пошуку. Спочатку задається початкове положення X_0 та N лінійно незалежних напрямків s_1, s_2, \dots, s_N . Ці напрямки на початку можуть збігатися з напрямками координатних осей. За кожним вибраним напрямком потрібно провести одновимірний пошук. Відповідно, у нас нове положення буде знаходитись за формулою

$$X_1 = X_0 + \sum_{i=1}^N \alpha_i s_i,$$

де α_i – оптимальний крок за напрямком s_i .

Далі вектор $\sum_{i=1}^N \alpha_i s_i$ додається в кінець списку напрямків пошуку. А зі списку вилучається напрямок $i_d = \arg \max_{i=1..N} |\alpha_i| \|s_i\|$. Новою множиною напрямків будуть $\{s_1, s_2, \dots, s_{i_d-1}, s_{i_d+1}, \dots, s_N, \sum_{i=1}^N \alpha_i s_i\}$. Алгоритм повторюється доти, поки не виконається умова зупинки пошуку [51].

Метод випадкового (стохастичного) пошуку [48], на відміну від раніше розглянутих методів, характеризується навмисним уведенням елемента випадковості в алгоритм пошуку. Він може здійснюватися двома способами. При першому способі функцію $F(X)$ знаходять шляхом випадкового вибору X з

допустимої області. Точка мінімуму може бути знайдена на будь-якому етапі. Очевидно, що ймовірність знаходження мінімуму в цьому випадку мала. З цієї причини значно більшого поширення набув другий спосіб. Він базується на покрокових алгоритмах випадкового пошуку, які побудовані на послідовному наближенні до мінімуму за рахунок використання на кожному кроці інформації про функцію, що мінімізується. У загальному випадку покроковий процес пошуку можна записати у вигляді:

$$X_k = X_{k-1} + \alpha \cdot C,$$

де α – оптимальний крок за напрямком C , C – напрямок, який генерується випадковим чином.

Цей метод випадкового пошуку функції якості з N параметрами передбачає наявність генератора випадкових чисел, звертаючись до якого в будь-який потрібний момент можна отримати N -вимірний випадковий вектор C із заданим розподілом. Є різні алгоритми методу випадкового пошуку, які розрізняються способом вибору кроку C – це алгоритм з поверненням після невдалого кроку, алгоритм найкращою спроби, випадковий пошук з навчанням та інші. Зокрема, у Санкт-Петербурзькому державному університеті аерокосмічного приладобудування розроблено програмний комплекс для синтезу оптичних покриттів [52], який використовує метод випадкового перебору зі змінним кроком пошуку, коли генеруються випадкові значення показника заломлення і товщини кожного шару й обчислюється відхилення від еталонного спектру. У разі мінімального відхилення значення показників заломлення і товщини зберігаються. Як відхилення використовується сума модулів відносних відхилень значень відбивання або пропускання від заданих у кожній точці спектра. Відносні відхилення в кожній точці множаться на вагові множники, що задаються користувачем.

При вирішенні завдань конструювання покриттів, для яких невідоме перше наближення, досить ефективним є метод голчастих варіацій [53, 54]. У цьому методі як перше наближення використовується відносно товста плівка з

показником заломлення n_1 . Процес оптимізації йде за схемою, що складається з наступних етапів.

1. Дослідження зміни функції якості при вставці тонкого шару з показником заломлення n_2 в різні ділянки покриття. Зміна функції якості називається чутливістю і визначається формулою $\Delta F = F_1 - F_0$ (F_0, F_1 – значення функції якості F до і після вставки голчастого шару).

2. Вставка голчастого шару в ділянку, відповідну найбільшому за модулем від'ємному значенню чутливості ΔF . У результаті вставки кількість шарів покриття збільшується на два, якщо ця ділянка знаходиться всередині шару з n_1 .

3. Оптимізація покриття за товщиною шарів.

4. Повторення першого етапу.

Процес оптимізації переривається при отриманні структури відповідної заданим вимогам або тоді, коли вставка чергового шару не призводить до суттєвого зменшення функції якості. У результаті синтезу виходить двокомпонентне покриття з показниками заломлення n_1 і n_2 . Деякі модифікації методу голчастих варіацій дозволяють проводити одночасну вставку голчастих шарів у кілька ділянок, а також як перше наближення використовувати багатошарові покриття.

В Інституті надтвердих матеріалів ім. В.М. Бакуля НАН України розроблено програму, яка використовує метод голчастих варіацій для розв'язання задач СОП з використанням захисних алмазоподібних вуглецевих плівок [54].

Розглянемо метод градієнтного спуску [55-57]. Він передбачає вибір початкового наближення – деякої точки X_0 . Загальних правил вибору точки X_0 в градієнтному методі, як і в інших методах, немає. У тих випадках, коли з геометричних, фізичних або будь-яких інших міркувань може бути отримана апріорна інформація про область розташування точки (або точок) мінімуму, тоді початкове наближення X_0 намагаються вибрати ближче до цієї області. Градієнт функції $F(X)$ визначається формулою:

$$\nabla F(X) = \left(\frac{\partial F(X)}{\partial n_1}, \frac{\partial F(X)}{\partial n_2}, \dots, \frac{\partial F(X)}{\partial n_N}, \frac{\partial F(X)}{\partial d_1}, \frac{\partial F(X)}{\partial d_2}, \dots, \frac{\partial F(X)}{\partial d_N} \right).$$

Метод градієнтного спуску допускає одночасну варіацію всіх параметрів і руху в бік локального мінімуму за допомогою вектора $\alpha \cdot \nabla F(X)$, де α – відповідний крок уздовж цього напрямку.

У всіх методах градієнтного типу доводиться багаторазово обчислювати значення самої оцінної функції і її градієнт. Ці дві операції є основними, тому швидкість і точність їх виконання значною мірою визначають обчислювальні можливості методу.

Метод генетичного алгоритму полягає в аналізі спектрів при введенні змін (мутацій) у структурі. При знаходженні кінцевого рішення використовують симбіоз двох методів – переборного і градієнтного спуску. Процеси схрещування і мутації відповідають за переборну частину, а за відбір найкращих рішень – градієнтний спуск.

Генетичні алгоритми (ГА), які останнім часом отримали розвиток, застосовуються в задачах багатопараметричної оптимізації та проектування в різних галузях науки і техніки. Застосовується до задач оптимізації та проектування, зокрема й оптичних покриттів, основна відмінність цих методів полягає в тому, що в процесі знаходження оптимального рішення немає необхідності обчислювати похідні функції якості, що істотно позначається на швидкодії та ефективності алгоритмів. Крім цього, відмінною рисою алгоритмів, в основі функціонування яких лежать еволюційні стратегії та генетичні алгоритми, є та обставина, що на кожному кроці (ітерації) вже використовується набір (популяція) альтернативних рішень [58]. В основі роботи генетичних алгоритмів лежить моделювання деяких механізмів популяційної генетики: маніпулювання хромосомним набором при формуванні генотипу нової особини шляхом успадкування ділянок хромосомних наборів батьків (кросинговер), випадкова зміна генотипу, відома в природі як мутація. Також важливим механізмом, запозиченим у природи, є процедура природного відбору, спрямована на поліпшення від покоління до покоління пристосованості членів

популяції шляхом більшої здібності до «виживання» осіб, що володіють певними ознаками.

1.4. r -алгоритми Шора

Нижче наведено конспективний огляд r -алгоритмів Шора за роботами [59, 60].

Субградієнтні методи з розтягуванням простору в напрямку різниці двох послідовних субградієнтів запропоновані в [61, 62]. Вони названі r -алгоритмами і є одним з центральних результатів докторської дисертації Н.З. Шора (1970 р.) [61]. Програмні реалізації r -алгоритмів виявилися конкурентоспроможними як за часом рахунку, так і за точністю результатів з найбільш ефективними методами розв'язання гладких погано обумовлених задач. Прискорену збіжність r -алгоритмів при мінімізації негладких опуклих функцій забезпечує взаємозв'язок у них двох принципів із чисельних методів оптимізації.

Перший принцип полягає у використанні процедури найшвидшого спуску в напрямку антисубградієнта опуклої функції в перетвореному просторі змінних. Якщо пошук мінімуму функції здійснюється точно, то цей принцип гарантує монотонність за значеннями опуклої функції для точок послідовності, яка мінімізується, та конструюється r -алгоритмами, а якщо наближено, то «монотонність» за функцією, яка замінюється, мінімізується «майже монотонністю».

Однак найшвидший спуск для негладких функцій можна заиклити, щоб уникнути цього, використовується другий принцип. Останній призначений для зменшення ступеня витягнутості поверхонь рівня ярових функцій у перетвореному просторі змінних. Він полягає у використанні операції розтягування простору в напрямку різниці двох послідовних субградієнтів, де другий субградієнт обчислений у точці мінімуму функції в напрямку першого антисубградієнта. У результаті цього розтягування зменшуються поперечні складові субградієнтів уздовж напрямку до точки мінімуму, що забезпечує досить швидку збіжність субградієнтного процесу з розтягуванням простору.

Комбінації цих принципів при певному регулюванні кроку найшвидшого

спуску (точного або наближеного) і відповідному виборі коефіцієнта розтягування простору забезпечують прискорену збіжність конкретних варіантів r -алгоритмів і гарантують їх монотонність (або майже монотонність) за значенням функції, що мінімізується. Це підтверджується результатами численних застосувань r -алгоритмів у задачах лінійного та нелінійного програмування, блочних задач із різними схемами декомпозиції, при вирішенні мінімакських і матричних задач оптимізації, для обчислення подвійних лагранжевих оцінок у багатоекстремальних і комбінаторних задачах оптимізації [61-76].

1.4.1. Три обчислювальні форми r -алгоритмів

Розглянемо задачу мінімізації опуклої функції $f(x)$, де $x \in E^n$ — вектор із n змінних. Мінімальне значення функції позначимо $f^* = f(x^*)$, $x^* \in X^*$. Припустимо, що $f(x)$ має обмежену кількість мінімумів X^* , тобто виконується умова $\lim_{\|x\| \rightarrow \infty} f(x) = +\infty$. Ця умова забезпечує коректність регулювання кроку в r -алгоритмах. Позначимо $\{\alpha_k\}_{k=0}^{\infty}$ набір коефіцієнтів розтягування простору, таких що $\alpha_k > 1$.

Означення 1. r -Алгоритмом для мінімізації $f(x)$ називається ітеративна процедура знаходження послідовності n -мірних векторів $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ і послідовності $n \times n$ -матриць $\{B_k\}_{k=0}^{\infty}$ за таким правилом:

$$x_{k+1} = x_k - h_k B_k \xi_k, B_{k+1} = B_k R_{\beta_k}(\eta_k), k=0,1,2,\dots, \quad (1.9)$$

$$\text{де } \xi_k = \frac{B_k^T g_f(x_k)}{\|B_k^T g_f(x_k)\|}, h_k \geq h_k^* = \arg \min_{h \geq 0} f(x_k - h B_k \xi_k), \quad (1.10)$$

$$\beta_k = \frac{1}{\alpha_k} < 1, \eta_k = \frac{B_k^T r_k}{\|B_k^T r_k\|}, r_k = g_f(x_{k+1}) - g_f(x_k). \quad (1.11)$$

Тут x_0 — початкова точка; $B_0 = I_n$ — одинична $n \times n$ матриця (як матрицю B_0 часто вибирають діагональну матрицю D_n з позитивними коефіцієнтами по діагоналі, за допомогою якої здійснюється масштабування змінних); h_k^* — величина кроку з умовами мінімуму функції $f(x)$ у напрямку нормованого антисубградієнта в перетвореному просторі змінних; $R_{\beta}(\eta) = I_n + (\beta - 1)\eta\eta^T$ — оператор стиснення

простору субградієнтів у нормованому напрямку η з коефіцієнтом $\beta = \frac{1}{\alpha} < 1$; $g_f(x_k)$ і $g_f(x_{k+1})$ – субградієнти функції $f(x)$ відповідно в точках x_k і x_{k+1} . Якщо на ітерації k для процесу (1.9) – (1.11) виконані деякі критерії (умови) припинення пошуку, то вважаємо $k^*=k$, $x_k^*=x_k$ і закінчуємо роботу алгоритму.

На кожній ітерації r -алгоритмів реалізується субградієнтний спуск для опуклої функції $\varphi(y) = f(B_k y)$ в перетвореному просторі змінних $y = A_k x$, де $A_k = B_k^{-1}$. Справді, якщо обидві частини формули $x_{k+1} = x_k - h_k B_k \xi_k$ помножити зліва на матрицю A_k , то отримаємо

$$y_{k+1} = A_k x_{k+1} = A_k x_k - h_k \xi_k = y_k - h_k \frac{B_k^T g_f(x_k)}{\|B_k^T g_f(x_k)\|} = y_k - h_k \frac{g_\varphi(y_k)}{\|g_\varphi(y_k)\|}, \quad (1.12)$$

де вектор $g_\varphi(y_k) = B_k^T g_f(x_k)$ – субградієнт функції $\varphi(y) = f(B_k y)$ в точці $y_k = A_k x_k$ простору змінних $y = A_k x$. Це легко бачити з того, що субградієнт функції $f(x)$ в точці x_k задовольняє нерівності

$$f(x) \geq f(x_k) + (g_f(x_k))^T (x - x_k) \forall x \in E^n,$$

звідки, здійснюючи заміну змінних $x = B_k y$, отримуємо

$$\varphi(y) \geq \varphi(y_k) + (B_k^T g_f(x_k))^T (y - y_k) = \varphi(y_k) + (g_\varphi(y_k))^T (y - y_k) \forall y \in E^n.$$

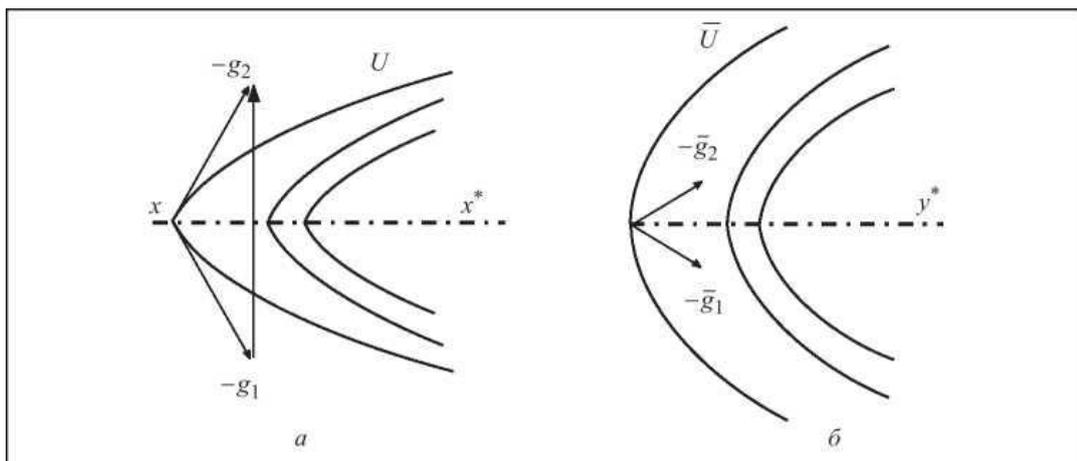


Рисунок 1.2. Розтягування простору по різниці двох субградієнтів, де антисубградієнти стають напрямками спадання функції [59]

Якщо $h_k = h_k^*$, то формула (1.12) означає точний пошук мінімуму функції $\varphi(y) = f(B_k y)$ в напрямку нормованого антисубградієнта в перетвореному просторі змінних $y = A_k u$, а якщо $h_k \approx h_k^*$, – то наближений пошук. Якщо функція $f(x)$ є недиференційованою в точці x_k , то можливий випадок $h_k = h_k^* = 0$, з яким пов'язані основні проблеми з умовою припинення пошуку r -алгоритмів для негладких функцій. Якщо $h_k = 0$, то це не означає, що в точці x_k спуск слід припинити. У процесі виконання серії ітерацій з нульовим кроком змінюється не чергова точка $x_{k+1} = x_k$, а матриця B_{k+1} і черговий субградієнт $g_f(x_{k+1})$. Значить, за рахунок послідовних розтягувань простору в напрямку різниці двох субградієнтів, які отримані в точці x_k , здійснюється пошук відповідного напрямку спадання функції з точки x_k .

Монотонність за функцією, яка мінімізується, для r -алгоритмів забезпечує саме розтягнення простору в напрямку різниці двох послідовних субградієнтів. Цим r -алгоритми відрізняються від субградієнтних методів з розтягуванням простору в напрямку субградієнта, які для негладких опуклих функцій у принципі не можуть бути монотонними за функцією, яка мінімізується. Проілюструємо це на прикладі кусково-гладкої функції (рис.1.2). Нехай ϵ точка на границі двох «кусків» кусково-гладкої поверхні рівня, а градієнти по цим гладким «кусках», обчислені в даній точці, утворюють тупий кут (див. рис 1, а). Ніяке розтягнення простору в напрямку градієнтів не здатне перетворити цей кут у гострий, величина останнього може лише наближатися до $\pi/2$, при цьому кут залишається тупим. Тому, застосовуючи розтягнення простору в напрямку субградієнта, неможливо отримати направлення спадання функції у вигляді антиградієнта до одного зі шматків у розтягнутому просторі. У той же час розтягнення простору в напрямку різниці двох зазначених градієнтів з достатнім коефіцієнтом розтягування перетворює тупий кут між градієнтами в гострий, тобто відповідні образи цих антиградієнтів у розтягнутому просторі стають напрямками спадання функції (див. рис. 1, б).

Отже, сімейство r -алгоритмів визначається послідовністю коефіцієнтів розтягування простору $\{a_k\}_{k=0}^{\infty}$, послідовністю величин кроків $\{h_k\}_{k=0}^{\infty}$ і критеріями

зупинки пошуку. При цьому величина кроку вибирається з умови точного (наближеного) мінімуму функції у напрямку антисубградієнта в перетвореному просторі змінних, унаслідок чого визначаються ті два послідовних субградієнта, розтягнення по різниці яких покращує властивості ярових функції в перетвореному просторі змінних. У разі певного регулювання кроку і коефіцієнтів розтягування простору r -алгоритми є монотонними (або майже монотонними) за функцією, що мінімізується.

Метод (1.9) – (1.11) називають B -формою r -алгоритмів; на кожній його ітерації коригується матриця, яка визначає заміну змінних $x = B y$. Ітерація методу вимагає приблизно $5n^2$ арифметичних операцій множення, що визначають обчислювальну трудомісткість ітерації (операції додавання не враховуються з огляду на їх малий вплив на трудомісткість ітерації). З них $3n^2$ множень необхідно для обчислення векторів $B_k \xi_k$, $B_k^T g_f(x_k)$ та $B_k^T r_k$ (множення матриці на вектор), а $2n^2$ множень – для однорангової корекції матриці $B_{k+1} = B_k R_{\beta_k}(\eta_k)$. Справді,

$$B_{k+1} = B_k R_{\beta_k}(\eta_k) = B_k (I_n + (\beta_k - 1) \eta_k \eta_k^T) = B_k + (\beta_k - 1) (B_k \eta_k) \eta_k^T,$$

звідки легко бачити, що обчислення вектора $\eta = B_k \eta_k$ і побудова однорангової матриці $\eta \eta_k^T$ вимагають $2n^2$ множень.

Розглянуті r -алгоритми мають ще одну B -форму, яка порівняно з методом (1.9) – (1.11) дозволяє заощадити n^2 операцій множення на кожній ітерації. Економні r -алгоритми представляються ітеративною процедурою пошуку послідовностей векторів $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ і матриць $\{B_k\}_{k=0}^{\infty}$ за таким правилом:

$$x_{k+1} = x_k - h_k B_k \frac{\tilde{g}_k}{\|\tilde{g}_k\|}, B_{k+1} = B_k R_{\beta_k}(\eta_k), k=0,1,2,\dots, \quad (1.13)$$

де

$$h_k \geq h_k^* = \arg \min_{h \geq 0} f(x_k - h B_k \frac{\tilde{g}_k}{\|\tilde{g}_k\|}), g_{k+1}^* = B_k^T g_f(x_{k+1}), \quad (1.14)$$

$$\beta_k = \frac{1}{\alpha_k}, \eta_k = \frac{g_{k+1}^* - \tilde{g}_k}{\|g_{k+1}^* - \tilde{g}_k\|}, \tilde{g}_{k+1} = R_{\beta_k}(\eta_k) g_{k+1}^*. \quad (1.15)$$

Тут x_0 – початкова точка, така що $x_0 \neq x^*$; $\tilde{g}_0 = B_0^T g_f(x_0)$, де B_0 – невинроджена $n \times n$ -матриця; $g_f(x_k)$ і $g_f(x_{k+1})$ – субградієнти функції $f(x)$ у точках x_k і x_{k+1} . Якщо на ітерації k виконані деякі критерії припинення пошуку, то вважаємо $k^*=k$, $x_k^* = x_k$ і закінчуємо роботу алгоритму.

Ітерація методу (1.13) – (1.15) вимагає приблизно $4n^2$ операцій множення: по $2n^2$ операції множення для обчислення векторів $B_k \tilde{g}_k$, $B_k^T g_f(x_{k+1})$ і для однорангової корекції матриці $B_{k+1} = B_k R_{\beta_k}(\eta_k)$. Економія в n^2 множень пов'язана з тим, що $\tilde{g}_{k+1} = B_{k+1}^T g_f(x_{k+1})$ – субградієнт у просторі змінних $y = A_{k+1}x$, перераховується з урахуванням уже обчисленого $g_{k+1}^* = B_k^T g_f(x_{k+1})$ – субградієнта в просторі змінних $y = A_k x$. Перерахунок субградієнта \tilde{g}_{k+1} виконується за формулою

$$\begin{aligned} \tilde{g}_{k+1} &= B_{k+1}^T g_f(x_{k+1}) = R_{\beta_k}(\eta_k) B_k^T g_f(x_{k+1}) = R_{\beta_k}(\eta_k) g_{k+1}^* = \\ &= (I_n + (\beta_k - 1)\eta_k \eta_k^T) g_{k+1}^* = g_{k+1}^* + (\beta_k - 1)(\eta_k^T g_{k+1}^*) \eta_k, \end{aligned}$$

яка не вимагає операції множення матриці на вектор. У результаті цього перерахунку при обчисленні нормованого субградієнта в перетвореному просторі за формулою $\xi_k = \frac{\tilde{g}_k}{\|\tilde{g}_k\|}$ відбувається більше нагромадження помилок, ніж при обчисленні за формулою $\xi_k = \frac{B_k^T g_f(x_k)}{\|B_k^T g_f(x_k)\|}$, як у методі (1.9) – (1.11).

Можна записати r -алгоритми в H -формі (за типом методів змінної метрики) за допомогою симетричної матриці $H_k = B_k B_k^T$. Їм відповідає ітеративна процедура відшукання послідовностей векторів $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ і симетричних матриць $\{H_k\}_{k=0}^{\infty}$ за таким правилом:

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k - h_k \frac{H_k g_f(x_k)}{\sqrt{(g_f(x_k))^T H_k g_f(x_k)}}, \\ H_{k+1} &= H_k + (\beta_k^2 - 1) \frac{H_k r_k r_k^T H_k}{r_k^T H_k r_k}, k=0, 1, \dots, \end{aligned} \tag{1.16}$$

$$\text{де } h_k \geq h_k^* = \arg \min_{h \geq 0} f(x_k - h \frac{H_k g_f(x_k)}{\sqrt{(g_f(x_k))^T H_k g_f(x_k)}}), \quad (1.17)$$

$$\beta_k = \frac{1}{a_k} < 1, r_k = g_f(x_{k+1}) - g_f(x_k).$$

Тут x_0 – початкова точка; $H_0 = I_n$ – одинична $n \times n$ матриця; h_k – величина кроку, не менша h_k^* ; $g_f(x_k)$ і $g_f(x_{k+1})$ – субградієнти функції $f(x)$ відповідно в точках x_k і x_{k+1} . Якщо на ітерації k виконані умови припинення пошуку, то вважаємо $k^* = k$, $x_k^* = x_k$ і закінчуємо роботу алгоритму.

У H -формі r -алгоритмів формула для перерахунку чергового наближення x_{k+1} впливає зі справедливості такого ланцюжка співвідношень:

$$B_k \frac{B_k^T g_f(x_k)}{\|B_k^T g_f(x_k)\|} = \frac{B_k B_k^T g_f(x_k)}{\sqrt{(B_k^T g_f(x_k))^T B_k g_f(x_k)}} = \frac{H_k g_f(x_k)}{\sqrt{(g_f(x_k))^T B_k B_k^T g_f(x_k)}} = \frac{H_k g_f(x_k)}{\sqrt{(g_f(x_k))^T H_k g_f(x_k)}},$$

а формула для перерахунку симетричної матриці H_{k+1} з такого ланцюжка співвідношень:

$$\begin{aligned} H_{k+1} &= B_{k+1} B_{k+1}^T = B_k R_{\beta_k}(\eta_k) (B_k R_{\beta_k}(\eta_k))^T = B_k R_{\beta_k}(\eta_k) R_{\beta_k}^T(\eta_k) B_k^T = \\ &= B_k R_{\beta_k}(\eta_k) R_{\beta_k}(\eta_k) B_k^T = B_k R_{\beta_k^2}(\eta_k) B_k^T = B_k (I_n + (\beta_k^2 - 1) \eta_k \eta_k^T) B_k^T = \\ &= B_k B_k^T (\beta_k^2 - 1) B_k \eta_k \eta_k^T B_k^T = H_k + (\beta_k^2 - 1) \frac{B_k B_k^T r_k r_k^T B_k B_k^T}{\|B_k^T r_k\|^2} = \\ &= H_k + (\beta_k^2 - 1) \frac{H_k r_k r_k^T H_k}{(B_k^T r_k)^T B_k^T r_k} = H_k + (\beta_k^2 - 1) \frac{H_k r_k r_k^T H_k}{r_k^T B_k B_k^T r_k} = H_k + (\beta_k^2 - 1) \frac{H_k r_k r_k^T H_k}{r_k^T H_k r_k}. \end{aligned}$$

Згадана H -форма r -алгоритмів більш економна, ніж B -форма: щодо оперативної пам'яті – майже у два рази, оскільки необхідно зберігати симетричну матрицю, а за трудомісткістю – як мінімум у $5/3$ раз. Справді, якщо навіть симетричну матрицю H_k зберігати як повну матрицю розміру $n \times n$, то ітерація методу (1.16), (1.17) вимагає приблизно $3n^2$ операцій множення, з них $2n^2$ множень – для обчислення векторів $H_k g_f(x_k)$ і $\eta = H_k r_k$, а n^2 множень – для обчислення однорангової матриці $\eta \eta^T = H_k r_k r_k^T H_k$, яка використовується при перерахунку

матриці H_{k+1} . Але цей вигравш нівелюється тим, що H -форма r -алгоритмів обчислювально менш стійка, ніж B -форма, і при її реалізації потрібно враховувати додаткові умови. Так, наприклад, для методу (1.16), (1.17) необхідно контролювати, щоб матриця H_k була додатньо-визначена. У методах (1.9) – (1.11) і (1.13) – (1.15) такого контролю не потрібно, оскільки обчислення, хоч і неявно, пов'язані з додатньо-визначеною матрицею $H_k = B_k B_k^T$.

Обчислювальні характеристики розглянутих форм r -алгоритмів за витратами пам'яті й трудомісткістю наведені в таблиці 1.1. І хоча теоретично всі три форми r -алгоритмів однакові, обчислювальна стійкість їх комп'ютерних реалізацій (див. табл. 1.1, останній рядок) різна. Для обох B -форм вона добра, але перевагу має метод (1.9) – (1.11) (див. табл. 1.1, відзначено знаком +). Це обумовлено тим, що перерахунок субградієнта при переході в черговий простір змінних, який використовується в економній B -формі, сприяє накопиченню помилок щодо обчислення цього ж субградієнта методом (1.9) – (1.11). Обчислювальна стійкість r -алгоритмів в H -формі середня. Це означає, що з їх допомогою взагалі не можна знайти такі наближення до точки мінімуму, визначення яких можливе за допомогою r -алгоритмів у B -формі. Можна використовувати r -алгоритми в H -формі, якщо не потрібна висока точність знаходження мінімуму функції $f(x)$.

Таблиця 1.1

Обчислювальні характеристики трьох форм r -алгоритмів

Форма r -алгоритмів	Використовуваний метод	Оперативна пам'ять	Трудо-місткість	Стійкість методу
B -форма	(1.9)-(1.11)	$\sim n^1$	$\sim 5 n^2$	хороша (+)
Економная B -форма	(1.13)-(1.15)	$\sim n^2$	$\sim 4 n^2$	хороша
H -форма	(1.16), (1.17)	$\sim n^2/2$	$\sim 3 n^2$	середня

1.4.2. Варіант $r(\alpha)$ -алгоритми з адаптивним регулювання кроку

Одним з ефективних є $r(\alpha)$ -алгоритм з адаптивним регулюванням кроку, де α – постійний коефіцієнт розтягування простору, а величина кроку h_k налаштовується в процесі виконання одновимірного спуску в напрямку нормованого

антисубградієнта в перетвореному просторі змінних. Налаштування кроку здійснюється за допомогою чотирьох параметрів: $h_0 > 0$ – величина початкового кроку (використовується на першій ітерації, а на кожній наступній ця величина уточнюється); q_1 – коефіцієнт зменшення кроку ($q_1 \leq 1$), якщо умова завершення спуску в напрямку виконується за один крок; q_2 – коефіцієнт збільшення кроку ($q_2 \geq 1$); через кожні n_h кроків одновимірного спуску ($n_h > 1$) величина кроку збільшиться в q_2 разів. Умова завершення спуску в напрямку виконується, як тільки виявлена точка x_{k+1} , для якої виконується умова

$$(x_{k+1} - x_k)^T g_{k+1}(x_{k+1}) \geq 0. \quad (1.18)$$

Умова (1.18) легко перевіряється, оскільки в силу додатності кроку рівносильна виконанню нерівності

$$(B_k B_k^T g_f(x_k))^T g_f(x_{k+1}) \leq 0. \quad (1.19)$$

Воно означає, що кут між двома послідовними субградієнтами в перетвореному просторі змінних буде негострим. Справді, нерівність (1.19) можна записати як умову

$$(B_k B_k^T g_f(x_k))^T g_f(x_{k+1}) \leq 0, \quad (1.20)$$

звідки

$$(g_\varphi(y_k))^T g_\varphi(y_{k+1}) \leq 0, \quad (1.21)$$

де $g_\varphi(y_k) = B_k^T g_f(x_k)$ та $g_\varphi(y_{k+1}) = B_k^T g_f(x_{k+1})$ є субградієнтами функції $\varphi(y) = f(B_k y)$ в точках $y_k = A_k x_k$ і $y_{k+1} = A_k x_{k+1}$ перетвореного простору змінних $y = A_k x$, $A_k = B_k^{-1}$. Оскільки передбачається, що $\lim_{\|x\| \rightarrow \infty} f(x) = +\infty$, то після кінцевого числа кроків адаптивного спуску в напрямку нормованого антисубградієнта обов'язково виконається умова завершення спуску (1.20), (1.21).

Ітеративний процес в $r(\alpha)$ -алгоритмі з адаптивним регулюванням кроку триває

до виконання деякого критерію зупинок, де ключову роль грають параметри ε_x і ε_g . Алгоритм зупиняється в точці x_{k+1} , якщо виконано $\|x_{k+1} - x_k\| \leq \varepsilon_x$ (зупинка за аргументом) або умова $\|g_f(x_{k+1})\| \leq \varepsilon_g$ (зупинка за нормою субградієнту, який використовується для гладких функцій). Крім них застосовуються ще стандартні умови зупинок, якщо перевищено максимальну кількість ітерацій, і аварійна зупинка, який сигналізує про те, що або функція $f(x)$ необмежена знизу, або початковий крок h_0 занадто малий і його необхідно збільшити.

І хоча $r(\alpha)$ -алгоритми з адаптивними регулюваннями кроку не гарантують монотонного спадання функції, однак, як показали експерименти, зростання функції відбувається досить рідко. Докладні рекомендації щодо вибору коефіцієнта розтягування простору й параметрів адаптивного регулювання кроку, наведені в [67], полягають у тому, що адаптивний спосіб регулювання кроку повинен збільшувати точність пошуку мінімуму функції в напрямку в процесі рахунку, а кількість кроків у цьому напрямі не перевищує в середньому двох-трьох на одну ітерацію.

Якщо $r(\alpha)$ -алгоритм з адаптивним регулюванням кроку застосовувати для мінімізації негладких функцій, то рекомендується наступний вибір параметрів: $\alpha = 2 \div 4$, $h_0 = 1.0$, $q_1 = 1.0$, $q_2 = 1.1 \div 1.2$, $n_h = 2 \div 3$. Якщо відома оцінка відстані від початкової точки x_0 до точки мінімуму x^* , то початковий крок h_0 доцільно вибирати той, який можна порівняти з $\|x_0 - x^*\|$. При мінімізації гладких функцій рекомендовані параметри аналогічні, за винятком q_1 ($q_1 = 0.8 \div 0.95$). Це обумовлено тим, що додаткове дроблення кроку сприяє підвищенню точності пошуку мінімуму функції у напрямку, що при мінімізації гладких функцій забезпечує більш швидку швидкість збіжності. При такому виборі параметрів, як правило, число спусків у напрямку рідко перевищує два, а за n кроків точність за функцією поліпшується в три-п'ять разів. Параметри зупинки ε_x , $\varepsilon_g \sim 10^{-6} \div 10^{-5}$ при мінімізації опуклої функції, навіть істотно ярової структури, забезпечують знаходження точки x_k^* – наближення до точки x^* , для якого значення функції досить близьке до оптимального $\left(\frac{f(x_k^*) - f(x^*)}{|f(x^*)| + 1} \sim 10^{-6} \div 10^{-5}\right)$ для негладких і $\left(\frac{f(x_k^*) - f(x^*)}{|f(x^*)| + 1} \sim 10^{-12} \div\right)$

10^{-10} для гладких функцій). Це підтверджується результатами численних тестових і реальних розрахунків.

У рамках сімейства субградієнтних методів з розтягуванням простору в напрямку різниці двох послідовних субградієнтів отримані досить ефективні реалізації r -алгоритмів. Розроблені модифікації r -алгоритмів можна використовувати при мінімізації опуклих негладких функцій з різних областей додатків. Оскільки властивості гладкої функції з дуже швидко мінливим градієнтом схожі з властивостями негладкої функції, то r -алгоритми мають прискорену збіжність при оптимізації ярових гладких функцій. При мінімізації гладких функцій вони виявляються конкурентоздатними з найбільш вдалим реалізаціями методів пов'язаних напрямків і методів квазіньютонівського типу.

За допомогою програмних реалізацій $r(\alpha)$ -алгоритму з адаптивним кроком можна знаходити досить точні наближення до точки мінімуму опуклої функції. Якщо коефіцієнт розтягування простору вибрати таким, щоб він добре узгоджувався з параметрами адаптивного регулювання кроку в напрямку нормованого антисубградієнта в перетвореному просторі змінних, то для виконання одних і тих же критеріїв зупинки можна значно скоротити кількість ітерацій і кількість обчислень значення функції і субградієнта (градієнта). Це залежить від конкретного виду функції, що мінімізується, ступеня її яружності й масштабу змінних.

Висновки до розділу 1

1. Проведено огляд методів розв'язання задачі аналізу, коли за заданими параметрами багат шарового оптичного покриття потрібно визначити спектральні характеристики. Це рекурентний, адмітансний та матричний методи.
2. Розглянуто методи розв'язання оберненої до задачі аналізу – задачі синтезу – визначити параметри оптичного покриття, які б відтворювали наперед задані спектральні характеристики. Серед аналітичних методів розв'язання задач було розглянуто методи діаграм Шустера, Карда, ефективних границь,

еквівалентних меж, методи, що базуються на моделі фільтра Фабрі-П'єро. Серед чисельних методів було розглянуто такі методи: послідовного синтезу, перебору на сітці, покоординатного спуску, випадкового (стохастичного) пошуку, нульового порядку, «голчастого» синтезу, градієнтні методи та генетичні алгоритми.

3. Описано особливості методів, які розроблені в Інституті кібернетики імені В.М. Глушкова НАНУ, – r -алгоритмів Шора. У наступних розділах вони будуть застосовані при розробці методу розв'язання задачі синтезу оптичних покриттів.

Література до розділу 1

1. Ohlídal I., Vohánka J., Čermák M. Optics of Inhomogeneous Thin Films with Defects: Application to Optical Characterization. Review. *Coatings*. 2021. Vol.11, N1. P.22-40.
2. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М.: Наука, 1973. 720 с .
3. Rancourt J.D. Optical Thin Films: User Handbook. The International Society for Optical Engineering, Washington, 1996. 297 p.
4. Hecht E. Optik. San Francisco: Addison Wesley, 2002. 698 p.
5. Schaefer Cl., Bergmann L. Optik. Berlin: Walter de Gruyter, 2004. 1430 s.
6. Smakula A., German Patent 685767, applied 1st November 1935 (1935). Carl-Zeiss-Stiftung—Company profile, information, business description, history, background information on Carl-Zeiss-Stiftung.”
<http://www.referenceforbusiness.com/history2/79/Carl-ZeissStiftung.htm>
7. Крылова Т.Н. Интерференционные покрытия. Л.: Машиностроение, 1973. 224 с.
8. Окатов М.А. и др. Справочник технолога – оптика. СПб.: Политехника, 2004. 679 с.
9. Сукач Г.О., Кідалов В.В., Бойко В.В. Манько О.О. Спектрально-селективні оптичні пристрої для телекомунікацій. Донецьк: Вид-во ТОВ «Юго-Восток, Лтд», 2012.—408с.

10. Майселл, Л. Технология тонких пленок. Справочник: в 2 томах. Нью-Йорк, 1970. Пер. с англ. под ред. М. И. Елинсона, Г. Г. Смолко. М.: Советское радио, 1977. 664 с.
11. Кард П.Г. Анализ и синтез многослойных интерференционных пленок. Таллин: Валгус, 1971. 235 с.
12. Dobrowolski J.A., Ho F.C., Waldorf A. Determination of optical constants of thin film coating materials based on inverse synthesis. *Applied Optics*. 1983. Vol. 22, Issue 20. P. 3191-3200.
13. Willey R.R. Practical Production of Optical Thin Films. *Willey Optical, Consultants*: Charlevoix, MI, USA. 2008. 419 p.
14. Tikhonravov A.V., Amotchkina T.V., Trubetskov M.K. Optical characterization and reverse engineering based on multiangle spectroscopy. *Applied Optics*. 2012. Vol. 51. № 2. P. 245-254.
15. Губанова, Л.А. Оптические покрытия: учебное пособие. СПб. : СПбГУ ИТМО. 2012. 101 с.
16. Willey, R. R. Practical Production of Optical Thin Films. *Willey Optical, Consultants*: Charlevoix, MI, USA. 2008. 419 p.
17. Furman, Sh.A., Tikhonravov A.V. Basics of Optics of Multilayer Systems. Edition Frontieres, Gif-sur-Yvette. 1992. 242 p.
18. Кокс Дж.Т., Хасс Г. Просветляющие покрытия для видимой и инфракрасной областей спектра. *Физика тонких пленок*. Т. 5. М.: Мир, 1967. С. 46–83.
19. Яковлев П.П., Мешков Б.Б. Проектирование интерференционных покрытий. М.: Машиностроение, 1987. 192 с.
20. Міца О.В. Математичне моделювання оптичних шаруватих покриттів та оптимізація їх структури: дис. ... кандидата технічних наук : 01.05.02 / Міца Олександр Володимирович. Тернопіль, 2004. 155с.
21. Герасимов В.В., Мица В.М. Структура и концентрационный профиль элементов пленок $As_x(GeS_2)_{1-x}$ при дискретном вакуумном напылении. *Вакуумная техника и технология*. 1997. Т.7, №1. С. 46–49.

22. Петров В.В., Крючин А.А., Рубиш В.М. Материалы перспективных оптоэлектронных устройств. К.: Наукова думка, 2012. 336 с.
23. Benjamin J. Eggleton, Barry Luther-Davies & Kathleen Richardson Chalcogenide photonics. *Nature Photonics*. V. 5, 2011. P. 141–148.
24. Todorov, R., Tasseva, J., Babeva, T. Thin chalcogenide films for photonic applications. Book. Photonic Crystals–Innovative Systems, Lasers and Waveguides, Publisher Intech, Croatia. 2012. 143 p.
25. Власов А.Г. Отражение и пропускание света системой тонких пленок. *ОМП*. 1946. №2. С. 11-16.
26. Abeles F. The propagation of electromagnetic waves in stratified media. *Ann. Phys.* 1948. Vol.3. N.4. P. 504-520.
27. Бернинг П. Х. Теория и методы расчета оптических свойств тонких. *Сб. физика тонких пленок*. В 8 т. Т. 1. / Под общ. ред. Г. Хасса и Р. Э. Тауна; перевод с англ. под ред. В. Б. Сандомирского и А. Г. Ждана. М.: Мир, 1967. С. 91–151.
28. Путилин Э. С. Оптические покрытия: уч. пос. СПб: СПбГУ ИТМО, 2010. 227 с.
29. Минков И.М., Ветлицкая Е.Л., Золотарев В.М., Капитонова Л.Н. Определение оптических констант поглощающего неоднородного слоя по спектрам отражения. *Оптика и спектроскопия*. 1985. Т.58. №3. С.689-693.
30. Телен А. Конструирование многослойных интерференционных светофильтров. *Сб. физика тонких пленок*. В 8 т. Т. 5. / Под общ. ред. Г. Хасса и Р. Э. Тауна; перевод с англ. под ред. В. Б. Сандомирского и А. Г. Ждана. М.: Мир, 1972. С. 46–83.
31. Фурман Ш.А. Тонкослойные оптические покрытия. Л.: Машиностроение, 1977. 264 с.
32. Rabinovich K., Pagis A. Multilayer Antireflection Coatings: Theoretical Model and Design Parameters. *Appl. Opt.* 1975. V.14. №6. P. 1326-1334.
33. Михайлов В.Н. К теории синтеза интерференционных покрытий с помощью преобразования Фурье. *Оптика и спектроскопия*. 1990. Т. 69. № 3. С.698–703.

34. Dobrowolski J.A. Comparison of the forier transform and flip-flop thin film synthesis methods. *Applied Optics*. 1986. V.25. №12. P. 1966-1972.
35. Knittl Z. Optics of Thin Film Films. Willey. London.1976. 324 p.
36. Сосси Л. Метод синтеза диэлектрических интерференционных покрытий. *Изв. АН Эст. ССР. Сер. физ., матем.*, 1974. Т.23. С.229-237.
37. Epstein L.I. The design of optical filters. *J. Opt. Soc. Am.* 1952. V.42. № 3. P. 806-810.
38. Thelen A. Equivalent layers in multilayer filters. *J. Opt. Soc. Am.* 1966. V.56. No 6. P.1533-1538.
39. Ohmer M.C. Design of three-layer equivalent films. *J. Opt. Soc. Am.* 1978. V.68. № 1. P.137-139.
40. Macleod H.A. Thin film optical filters. New York: McGraw-Hill. 1986. P. 260-261.
41. Фурман Ш.А. Тонкослойные оптические покрытия. Л.: Машиностроение. 1977. 264 с.
42. Фурман Ш.А. Синтез интерференционных покрытий. *Оптика и спектроскопия*. 1984. Т.56. В.2. С.198-200.
43. Baumeister P.W. Starting designs for the computer optimization of optical coatings. *Appl. Opt.* 1995. Vol. 34. № 22. P. 4835–4843.
44. Мухамедов Р.К., Майстер А.В., Гайнутдинов И.С. Синтез покрытий пропускающего типа методом перебора. *ОМП*. 1990. №12. С. 61–63.
45. Тихонравов А.В., Гришина Н.В. Современные подходы к проектированию многослойных оптических покрытий. *Компьютерная оптика*. 1992. № 10-11. С.3-48.
46. Dobrowolski J.A., Tikhonravov A.V., Tmbeckov M.K., Sullivan B.T., Verly P.G. Optimal normal-incidence antireflection coatings. *Appl. Opt.*, 1996. 35, 644-658.
47. Шатилов А.В., Тютикова Л.П. Пример расчета интерференционного светофильтра методом последовательного синтеза. *Оптика и спектроскопия*. 1963. Т.14. В.3. С. 426-429.

48. Васильев Ф.П. Численные методы решения экстремальных задач. М.: Наука, 1980. 520 с.
49. Аоки М. Введение в теорию оптимизации / Пер. с англ. под ред. Б.Т. Поляка. М.: Наука, 1977. 343 с.
50. Powell, M. J. D. An efficient method for finding the minimum of a function of several variables without calculating derivatives. *Computer Journal*. 7 (2). 1964. P. 155–162.
51. Brent, Richard P. "Section 7.3: Powell's algorithm". Algorithms for minimization without derivatives. Englewood Cliffs, N.J.: Prentice-Hall, 1973.
52. Котликов Е.Н., Хонинева Е.В. Программа синтеза интерференционных покрытий «FlmMgr». СПб: ГУАП. 2011. № гос. регистрации 2011612364.
53. Свешников А.Г., Тихонравов А.В., Яншин С.А. Синтез оптических покрытий при наклонном падении света. *Журнал вычисл. матем. и матем. физики*. 1983. № 23. С. 929-939.
54. Старик С. П., Гонтар О. Г., Куцай О. М. Методика розв'язку обернених задач синтезу і аналізу оптичних шаруватих покриттів із захисною плівкою. *Сверхтвердые материалы*. 2009. № 5. С. 50-62.
55. Gao L., Lemarchand F., Lequime M. Exploitation of multiple incidences spectrometric measurements for thin film reverse engineering. *Optics Express*. 2012. Vol. 20. № 14. P. 15734 – 15750.
56. Боглаев Ю.П. Вычислительная математика и программирование. М.: Высшая школа. 1990 г. 544 с.
57. Свешников А.Г., Тихонравов А.В., Фурман Ш.А., Яншин С.А. Общий метод синтеза оптических покрытий. *Оптика и спектроскопия*. 1985. Т. 59. В. 5. С. 1161–1163.
58. Котликов Е.Н., Шалин В.Б., Тропин А.Н. Особенности функционирования алгоритмов многокритериальной оптимизации на основе эволюционных стратегий. *Сборник трудов VII Международной конференции молодых ученых и специалистов «Оптика-2013»*. СПб.: ИТМО. 2013. С. 338-339.

59. Стецюк П.И. Теория и программные реализации r -алгоритмов Шора. *Кибернетика и системный анализ*. 2017. Т. 53, № 5. С. 43–57.
60. Субградієнтні алгоритми та задачі на комбінаторних конфігураціях / Стецюк П.І., Донець Г.П., Ненахов Е.І. та ін.; за загал. ред. П.І. Стецюка. – Київ: Унів. вид-во ПУЛЬСАРИ, 2019. – 235 с.
61. Шор Н.З. Методы минимизации недифференцируемых функций и их приложения: Автореф. дис. ... докт. физ-мат. наук. Киев, 1970. 44 с.
62. Шор Н.З., Журбенко Н.Г. Метод минимизации, использующий операцию растяжения пространства в направлении разности двух последовательных градиентов. *Кибернетика*. 1971. №3. С. 51-59.
63. Шор Н.З. Методы минимизации недифференцируемых функций и их приложения. Киев: Наук. думка, 1979. 200 с.
64. Shor N.Z. Nondifferentiable optimization and polynomial problems. Boston; Dordrecht; London: Kluwer Academic Publishers. 1998. 412 p.
65. Shor N.Z., Stetsyuk P.I. Lagrangian bounds in multiextremal polynomial and discrete optimization problems. *Journal of Global Optimization*. 2002. Vol. 23, N 1. P. 1-41.
66. Шор Н.З., Журбенко Н.Г., Лиховид А.П., Стецюк П.И. Развитие алгоритмов недифференцируемой оптимизации и их приложения. *Кибернетика и системный анализ*. 2003. № 4. С. 80-94.
67. Шор Н.З. Монотонные модификации r -алгоритмов и их приложения *Кибернетика и системный анализ*. 2002. № 6. С. 74-96.
68. Шор Н.З., Стеценко С.И. Квадратичные экстремальные задачи и недифференцируемая оптимизация. Киев: Наук. думка, 1989. 208 с.
69. Шор Н.З., Соломон Д.И. Декомпозиционные методы в дробно-линейном программировании. Кишинев: Штиинца, 1989. 204 с.
70. Киселева Е.М., Шор Н.З. Непрерывные задачи оптимального разбиения множеств: теория, алгоритмы, приложения. Киев: Наук. думка, 2005. 564 с.
71. Шор Н.З., Стецюк П.И. Использование модификации r -алгоритма для

нахождения глобального минимума полиномиальных функций. *Кибернетика и системный анализ*. 1997. № 4. С. 28-49.

72. Kappel F., Kuntsevich A.V. An implementation of Shor's r -algorithm. *Computational Optimization and Applications*. 2000. Vol. 15, N 2. P. 193-205.
73. Стецюк П.И. Методы эллипсоидов и r -алгоритмы. Кишинэу: Эврика. 2014. 488 с.
74. Стецюк П.І., Хіміч О.М., Сидорук В.О. Реалізація r -алгоритму на графічних процесорах. *Компьютерная математика*. Киев: Ин-т кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины, 2016. № 2. С. 100-109.
75. 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.
76. Міца О.В., Повідайчик М.М. Оптимізація портфеля замовлень на підприємстві. *I міжнародна науково-технічна конференція "Обчислювальний інтелект"*. Черкаси, 2011. С. 456-457.

РОЗДІЛ 2

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ БАГАТОШАРОВИХ ОПТИЧНИХ СИСТЕМ З НЕОДНОРІДНИМИ МЕЖАМИ РОЗДІЛУ

У 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. У підрозділі 2.2 проведено математичне моделювання впливу неоднорідностей на спектральні характеристики вузькосмугових фільтрів. У підрозділі 2.3 такі ж дослідження проведено для відрізаючих фільтрів, а в підрозділі 2.4 – для широкосмугових фільтрів. У підрозділі 2.5 досліджено вплив оксидації на спектральні характеристики плівки As_2S_3 .

2.1. Математичне моделювання неоднорідності на межах розділу

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 [1-3], дисперсія показника заломлення [4], мас-транспорт [5-6], нанодефекти [7-8] та оксидація [9]. Без врахування цих факторів (рис. 2.1) та врахування стійкості до технологічних похибок неможливо проектувати 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 [10-20]. 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 λ_0 . Наприклад, “четвертьхвильовий шар” означає, що цей шар має оптичну товщину $nd = \frac{\lambda_0}{4}$, а “напівхвильовий шар” – має оптичну товщину $nd = \frac{\lambda_0}{2}$.

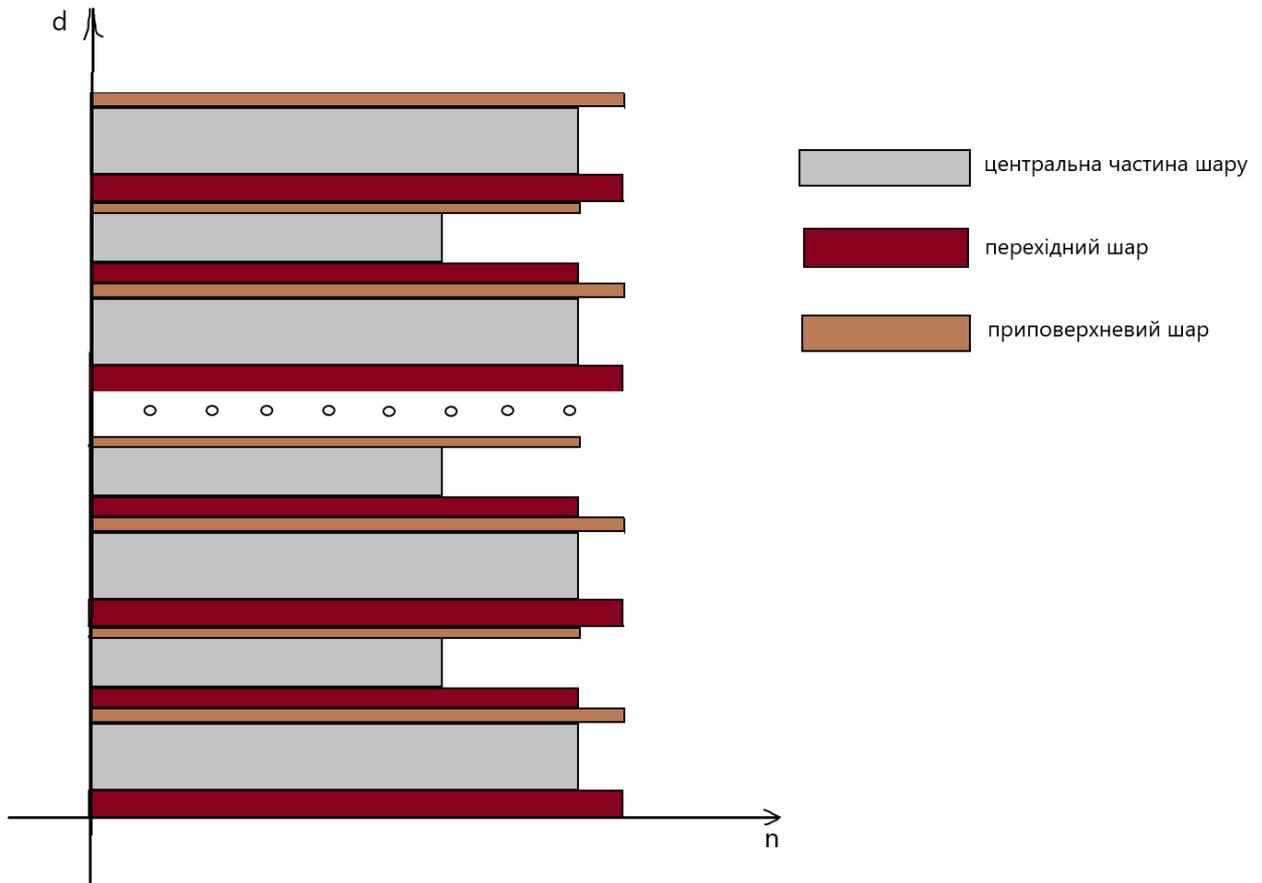
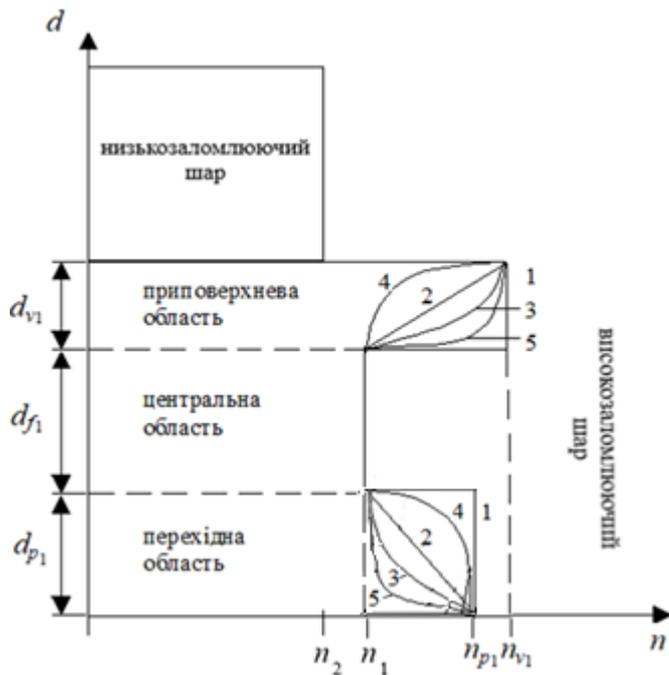
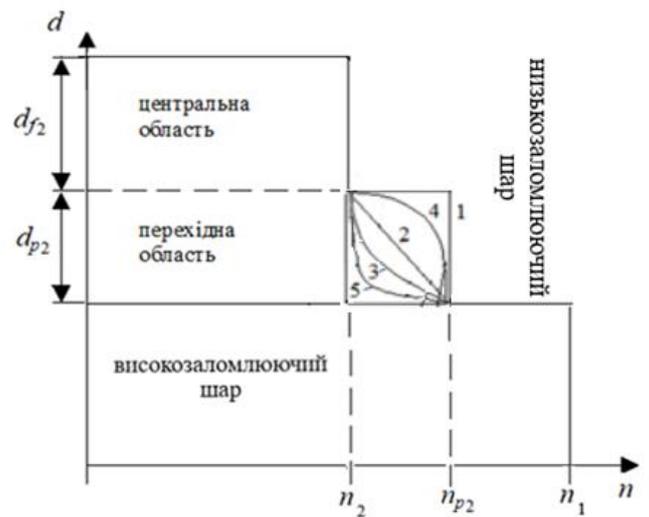


Рисунок 2.2. Універсальна модель багатошарової оптичної структури, що має неоднорідності на межах розділу

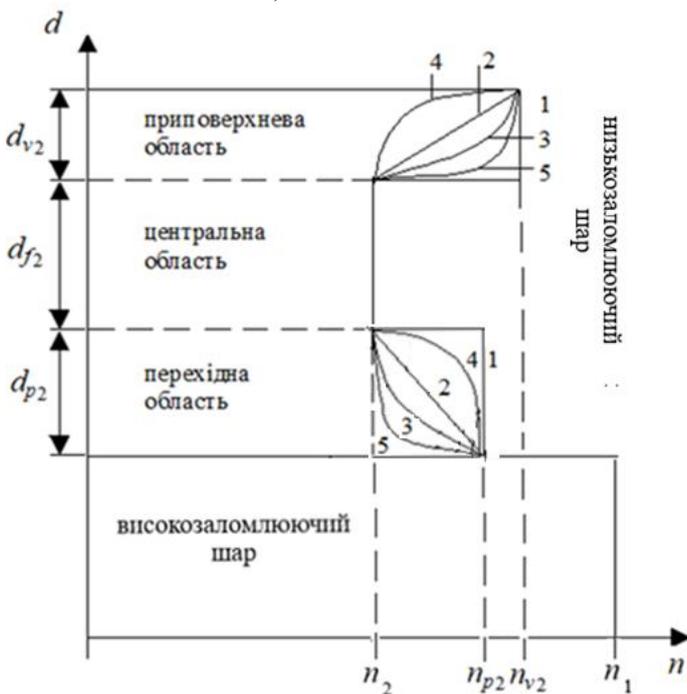
Розглянемо зв'язок робочої довжини хвилі λ_0 з оптичними товщинами вузькосмугових, відрізаючих та широкосмугових оптичних фільтрів. Для вузькосмугових фільтрів типу S-ВНВ..2В..ВНВ окіл робочої довжини хвилі λ_0 буде вузьким діапазоном пропускання, а максимум пропускання буде досягатись при довжині хвилі λ_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 λ_0 для вузькосмугових фільтрів є діапазоном відбивання. Для відрізаючих фільтрів типу S-ВНВ..ВНВ коефіцієнт пропускання при робочій довжині хвилі λ_0 має мінімум. Для широкосмугових фільтрів типу S-2ВН2В..2ВН2В отримаємо широкий діапазон пропускання з максимумом при робочій довжині хвилі λ_0 .



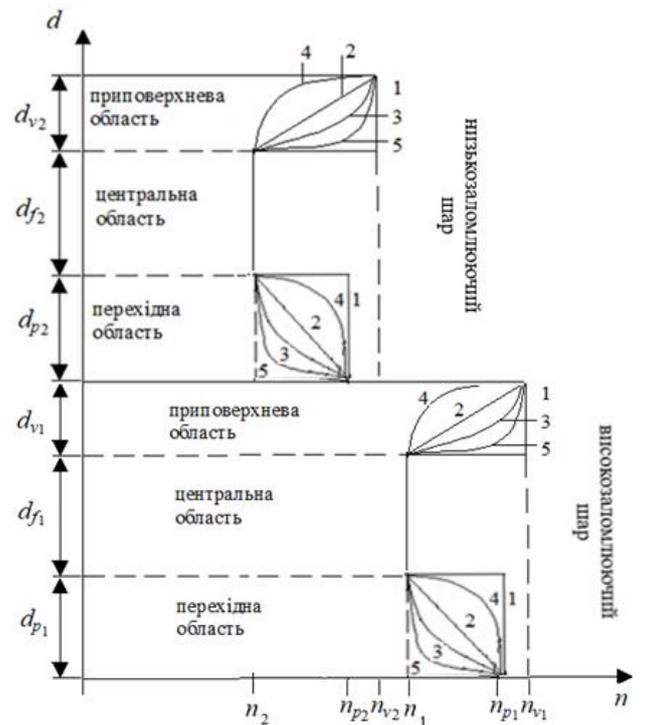
а) Модель 1



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

<i>Розподіли</i>	<i>Показник заломлення j-ої зони перехідної області, np_j</i>	<i>Показник заломлення j-ої зони приповерхневої області, nv_j</i>
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

$$M(n, d, \lambda) = \begin{vmatrix} \cos \frac{2\pi nd}{\lambda} & -\frac{i}{n} \cdot \sin \frac{2\pi nd}{\lambda} \\ -i \cdot n \cdot \sin \frac{2\pi nd}{\lambda} & \cos \frac{2\pi nd}{\lambda} \end{vmatrix}.$$

Тоді характеристичні матриці приповерхневої та перехідної областей будуть знаходитись за формулами

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

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

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

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

Характеристична матриця для шару, який має приповерхневу та перехідну області

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

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 широкосмугового фільтрів. Спочатку знайдемо характеристичну матрицю $(2m + 1)$ -шарового вузькосмугового фільтра для кожної з моделей:

– модель 1 (рис. 2.3а)

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

– 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)

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

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)

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

– 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)

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

Широкосмуговий 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 широкосмугового 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 спектральні характеристики для заданої довжини хвилі за формулами (1.7) та (1.8).

Перша модель (рис. 2.3а), у якій йде чергування високозаломлюючого шару з приповерхневою та перехідною неоднорідними зонами (матеріал GeS_2) та низькозаломлюючого однорідного шару (матеріал MgF_2) розглянута в роботі [21].

2.2. Математичне моделювання впливу неоднорідностей на границі розділу на спектральні характеристики вузькосмугових фільтрів

Промодельємо вплив неоднорідності на межах розділу на спектральні характеристики вузькосмугових фільтрів, які мають частково неоднорідний низькозаломлюючий шар (модель 2, рис. 2.3б). Візьмемо як високозаломлюючий матеріал GeTe , він має показник заломлення, рівний 5. Як низькозаломлюючий матеріал візьмемо GeS_2 , який має показник заломлення, рівний 2.1. У підрозділі розглядається, що матеріал GeS_2 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.

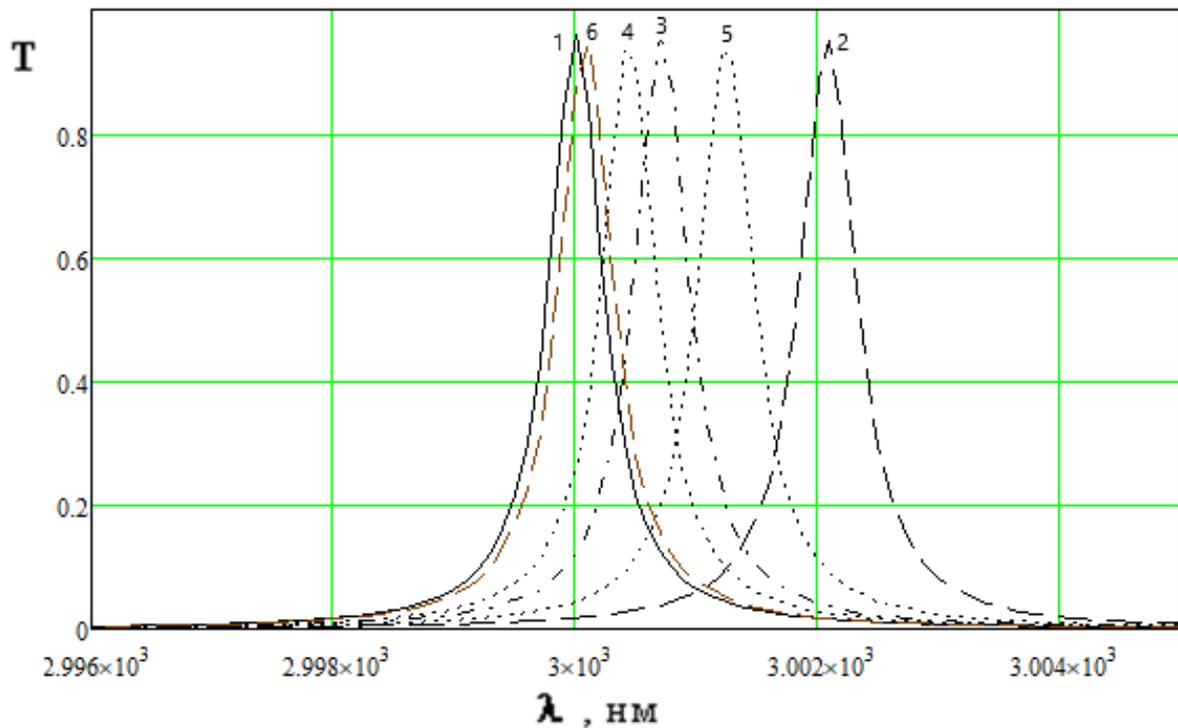


Рисунок 2.4. Спектральні характеристики 17-шарового вузькосмугового оптичного фільтра типу S-ВНВ..2В..ВНВ ($\lambda_0=3000$ нм) за наявності перехідної області низькозаломлюючого шару з різними розподілами показника заломлення: 1 – ідеальний випадок; 2 – зі ступінчастим; 3 – з лінійним; 4 – з квадратичним;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

Дослідимо, як вплине часткова неоднорідність низькозаломлюючого шару на такі характеристики вузькосмугових фільтрів, як довжину хвилі λ_{\max} , коефіцієнт пропускання T_{\max} , напівширину пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ та ширину смуги $\Delta\lambda_{0.1}$ [22].

У таблицях 2.2 та 2.3 наведено числові значення основних характеристик вузькосмугових фільтрів при різних розподілах показника заломлення неоднорідної перехідної області. Розглядалися кількості шарів 17 та 25. Зауважимо, що як при робочій довжині хвилі $\lambda_0=3000$ нм (табл. 2.2, другий стовпець), так і при робочій довжині хвилі $\lambda_0=5000$ нм (табл. 2.3, другий стовпець), положення довжини хвилі при максимумі пропускання λ_{\max} не змінюється з ростом числа шарів для кожного з розглядуваних розподілів показника заломлення.

Таблиця 2.2

Вплив на основні характеристики вузькосмугового фільтра типу S-BНВ..2В..ВНВ перехідної області при робочій довжині хвилі $\lambda_0=3000$ нм

Розподіли	Довжина хвилі λ_{\max} , нм	Коефіцієнт пропускання T_{\max}	Напівширина пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$, нм	Ширина смуги $\Delta\lambda_{0.1}$, нм
17-шарова структура				
Ідеальний	3000	0.959	0.516	1.579
Ступінчастий	3002.08	0.959	0.535	1.637
Лінійний	3000.71	0.959	0.522	1.596
Квадратичний	3000.44	0.959	0.519	1.588
Логарифмічний	3001.24	0.959	0.527	1.612
Експоненціальний	3000.08	0.959	0.516	1.579
25-шарова структура				
Ідеальний	3000	0.959	0.016	0.049
Ступінчастий	3002.08	0.959	0.017	0.052
Лінійний	3000.71	0.959	0.016	0.050
Квадратичний	3000.44	0.959	0.016	0.050
Логарифмічний	3001.24	0.959	0.016	0.051
Експоненціальний	3000.08	0.959	0.016	0.049

Зауважимо, що збільшення кількості шарів вузькосмугового фільтра не призводить до збільшення коефіцієнта пропускання T_{\max} (табл. 2.2, 2.3, треті стовпці). З іншого боку, бачимо, що напівширина пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ та ширина смуги $\Delta\lambda_{0.1}$ суттєво менші у 25-шарових вузькосмугових фільтрів, ніж у 17-шарових, – як при робочій довжині хвилі $\lambda_0=3000$ нм, так і при робочій довжині хвилі $\lambda_0=5000$ нм (табл. 2.2, 2.3, четверті та п'яті стовпці).

Наявність неоднорідної перехідної області зумовлює зсув положення довжини хвилі при максимумі пропускання λ_{\max} в сторону довгих хвиль. При цьому збільшується напівширина пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ та ширина смуги $\Delta\lambda_{0.1}$.

Таблиця 2.3

Вплив на основні характеристики вузькосмугового фільтра типу S-BНВ..2В..ВНВ перехідної області при робочій довжині хвилі $\lambda_0=5000$ нм

Розподіли	Довжина хвилі λ_{\max} , нм	Коефіцієнт пропускання T_{\max}	Напівширина пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$, нм	Ширина смуги $\Delta\lambda_{0.1}$, нм
17-шарова структура				
Ідеальний	5000	0.959	0.860	2.631
Ступінчастий	5002.10	0.959	0.871	2.666
Лінійний	5000.73	0.959	0.863	2.642
Квадратичний	5000.44	0.959	0.862	2.636
Логарифмічний	5001.25	0.959	0.867	2.651
Експоненціальний	5000.08	0.959	0.860	2.631
25-шарова структура				
Ідеальний	5000	0.959	0.027	0.082
Ступінчастий	5002.10	0.959	0.027	0.084
Лінійний	5000.73	0.959	0.027	0.082
Квадратичний	5000.44	0.959	0.027	0.082
Логарифмічний	5001.25	0.959	0.027	0.083
Експоненціальний	5000.08	0.959	0.027	0.082

Найбільше впливає на розглядувані характеристики вузькосмугових фільтрів ступінчастий, далі йдуть логарифмічний, лінійний, квадратичний та експоненціальний розподіли показника заломлення перехідної області низькозаломлюючого шару (рис. 2.4). 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 [23].

Середнє значення показника заломлення перехідної області з розподілом показника заломлення $n_p(z)$ буде рівним

$$n_{sp} = \frac{1}{d_p} \cdot \int_0^{d_p} n_p(z) dz.$$

Для кожного розподілу знайдемо його у числовому вигляді:

– ступінчастий: $n_{sp} = \frac{1}{d_p} \cdot \int_0^{d_p} n_p dz = \frac{1}{30} \cdot \int_0^{30} 2.6 dz = 2.6;$

– лінійний:

$$n_{sp} = \frac{1}{d_p} \cdot \int_0^{d_p} \left(n_f + \frac{z}{d_p} \cdot (n_p - n_f) \right) dz = \frac{1}{30} \cdot \int_0^{30} \left(2.1 + \frac{z}{30} \cdot (2.6 - 2.1) \right) dz = 2.35;$$

– квадратичний:

$$n_{sp} = \frac{1}{d_p} \cdot \int_0^{d_p} \left(n_f + \frac{z^2}{d_p^2} \cdot (n_p - n_f) \right) dz = \frac{1}{30} \cdot \int_0^{30} \left(2.1 + \frac{z^2}{30^2} \cdot (2.6 - 2.1) \right) dz = 2.27;$$

– логарифмічний:

$$n_{sp} = \frac{1}{d_p} \cdot \int_0^{d_p} \left(n_f + \frac{\ln(z)}{\ln(30)} \cdot (n_p - n_f) \right) dz = \frac{1}{30} \cdot \int_0^{30} \left(2.1 + \frac{\ln(z)}{\ln(30)} \cdot (2.6 - 2.1) \right) dz = 2.45;$$

– експоненціальний:

$$n_{sp} = \frac{1}{d_p} \cdot \int_0^{d_p} \left(n_f + \frac{e^z}{e^{d_p}} \cdot (n_p - n_f) \right) dz = \frac{1}{30} \cdot \int_0^{30} \left(2.1 + \frac{e^z}{e^{30}} \cdot (2.6 - 2.1) \right) dz = 2.12.$$

Отже, за величиною середнього значення показника заломлення перехідної області типи розподілів показника заломлення розміщуються в такому порядку: ступінчастий, логарифмічний, лінійний, квадратичний та експоненціальний. Тобто в тому порядку, у якому вони впливають на відхилення довжини хвилі λ_{\max} , напівширини пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ та ширини смуги $\Delta\lambda_{0.1}$ від ідеального випадку.

2.3. Математичне моделювання впливу неоднорідностей на границі розділу на спектральні характеристики відрізаючих фільтрів

Промодельємо вплив неоднорідності на межах розділу на спектральні характеристики відрізаючих фільтрів, які мають частково неоднорідні і високозаломлюючий, і низькозаломлюючий шари (модель 4, рис. 2.3г). Візьмемо як високозаломлюючий матеріал As_2S_3 , він має показник заломлення після опромінення, рівний 2.4. У підрозділі розглядається, що матеріал As_2S_3 має приповерхневу і перехідну область 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. У підрозділі розглядається, що матеріал GeS_2 має приповерхневу і перехідну область з показником заломлення 2.6. Геометрична товщина приповерхневої області рівна 10 нм, а перехідної – 30 нм.

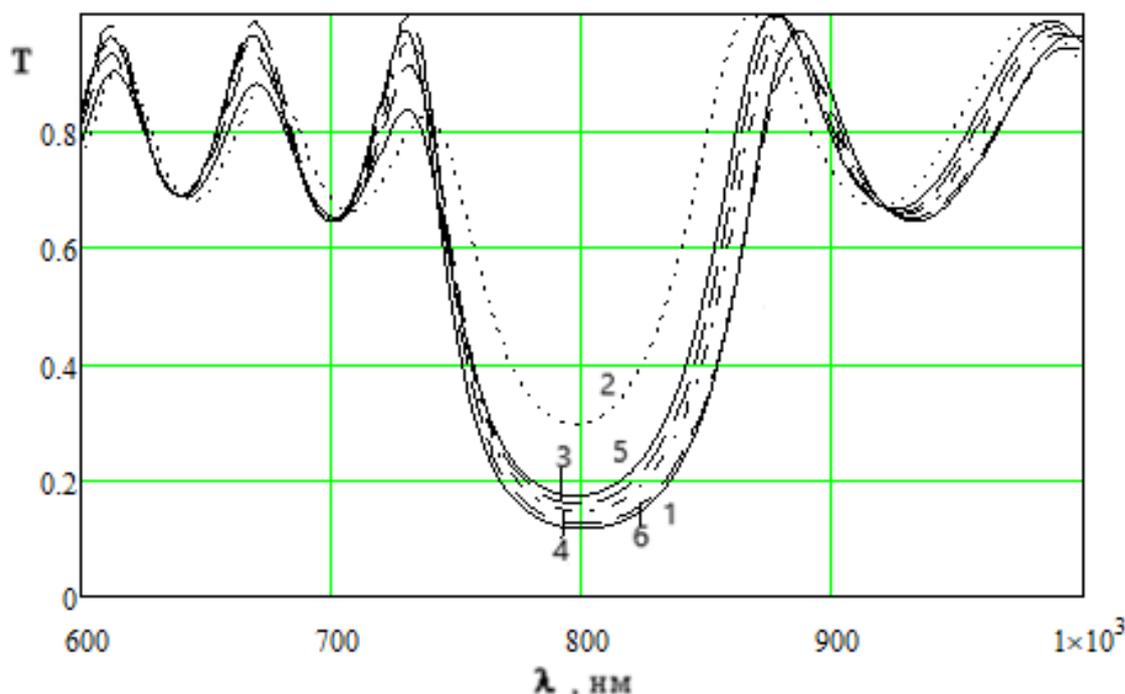


Рисунок 2.5. Спектральні характеристики 17-шарового відрізаючого оптичного фільтра типу S-2ВН2В..2ВН2В при робочій довжині хвилі $\lambda_0=800$ нм за наявності приповерхневої та перехідної областей високозаломлюючого та низькозаломлюючого шарів з різними розподілами показника заломлення: 1 – ідеальний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

Важливими характеристиками відрізаючих фільтрів є діапазон відбивання (у цій роботі було взято $T < 0.2$) та його ліва λ_L і права λ_R границі. Розглянемо, як на них вплине часткова неоднорідність. При проведенні експерименту вважалося, що показники заломлення приповерхневої і перехідної областей мають однаковий розподіл. Виходячи саме з таких припущень і було проведено обчислювальний експеримент (рис. 2.5, табл. 2.4). Обчислювальний експеримент проведено для робочої довжини хвилі $\lambda_0 = 800$ нм, а спектральний діапазон розглядався від 600 до 1000 нм.

Таблиця 2.4

Вплив на основні характеристики відрізаючого фільтра типу S-VNB...VNB неоднорідностей на межах розділу при робочій довжині хвилі $\lambda_0 = 800$ нм

Розподіли	Діапазон відбивання	Ліва границя λ_L	Права границя λ_R
17-шарова структура			
Ідеальний	68.03	767.43	835.46
Ступінчастий	0	–	–
Лінійний	43.68	777.12	820.80
Квадратичний	51.28	774.32	825.60
Логарифмічний	35.50	779.89	815.39
Експоненціальний	63.41	770.17	833.58
25-шарова структура			
Ідеальний	80.13	761.94	842.07
Ступінчастий	24.97	786.67	811.64
Лінійний	65.98	767.45	833.42
Квадратичний	69.64	766.33	835.96
Логарифмічний	63.97	767.59	831.56
Експоненціальний	77.53	763.76	841.29

Для відрізаючих фільтрів, як і для вузькосмугових, на відхилення від ідеального випадку розподіли показників заломлення приповерхневої і перехідної областей впливають у такому порядку – ступінчастий, логарифмічний, лінійний, квадратичний та експоненціальний (табл. 2.4).

Як видно з таблиці 2.4, 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 вище значення 0.2 (рис. 2.4). 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.

2.4. Математичне моделювання впливу неоднорідностей на границі розділу на спектральні характеристики широкосмугових фільтрів

Промодельюємо вплив неоднорідності на межах розділу на спектральні характеристики широкосмугових фільтрів, які мають частково неоднорідний низькозаломлюючий шар (модель 3, рис. 2.3в). Візьмемо як високозаломлюючий матеріал GeTe, він має показник заломлення, рівний 5. Як низькозаломлюючий матеріал візьмемо GeS₂, який має показник заломлення, рівний 2.1. У підрозділі розглядається, що матеріал GeS₂ 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.

Важливими характеристиками широкосмугових фільтрів є ширина смуги $\Delta\lambda_{0.5}$, ширина смуги $\Delta\lambda_{0.1}$ та середина діапазону пропускання λ_{cp} . Середина діапазону пропускання λ_{cp} визначається за формулою:

$$\lambda_{cp} = \frac{\lambda_{0.5}^L + \lambda_{0.5}^R}{2},$$

де $\lambda_{0.5}^L$, $\lambda_{0.5}^R$ – ліва й права границі діапазону пропускання відповідно, значення коефіцієнта пропускання в яких рівне 0.5. Розглянемо, як на них вплине часткова неоднорідність.

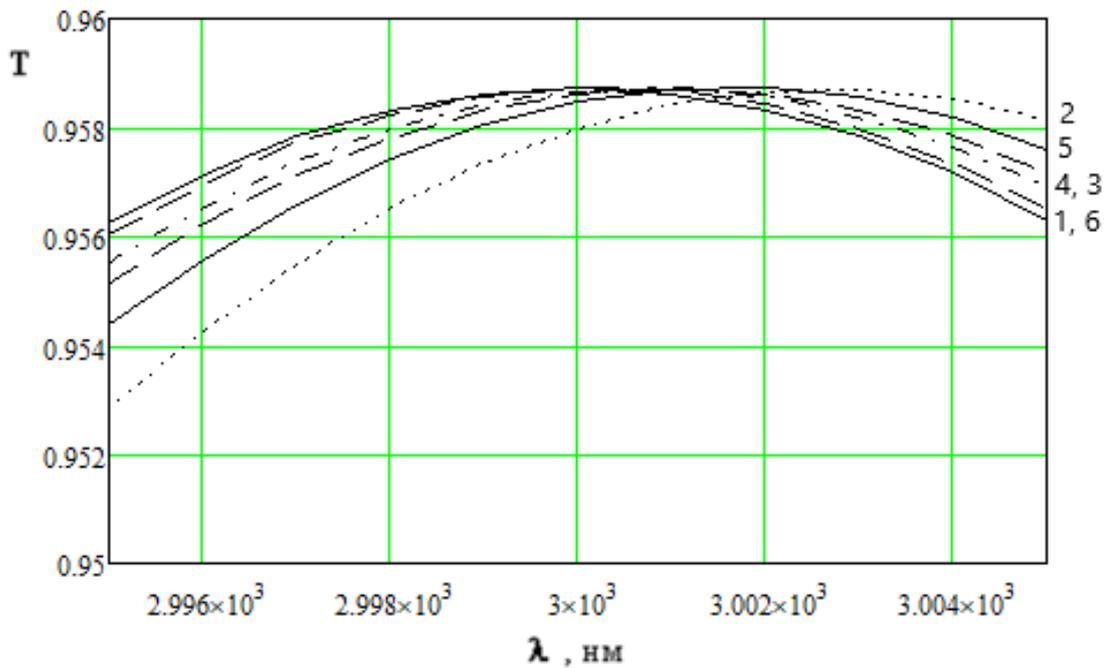


Рисунок 2.6. Спектральні характеристики 17-шарового широкопasmового оптичного фільтра типу S-2ВН2В..2ВН2В в околі робочої довжини хвилі $\lambda_0=3000$ нм за наявності приповерхневої та перехідної областей низькозаломлюючого шару з різними розподілами показника заломлення: 1 – ідеальний випадок; 2 – зі ступінчастим; 3 – з лінійним; 4 – з квадратичним; 5 – з логарифмічним; 6 – з експоненціальним

При проведенні експерименту, як і в попередньому підрозділі, вважалося, що показники заломлення приповерхневої та перехідної областей розподіляються за одним і тим самим законом. Виходячи з цього, і було проведено обчислювальний експеримент (табл. 2.5, 2.6).

З отриманих результатів бачимо, що на відхилення від ідеального випадку таких параметрів, як ширина смуг $\Delta\lambda_{0.5}$ та $\Delta\lambda_{0.1}$ та середина діапазону пропускання λ_{cp} , розглядувані розподіли впливають в такому порядку: ступінчастий, логарифмічний, лінійний, квадратичний та експоненціальний (рис. 2.6, табл. 2.5, 2.6).

Таблиця 2.5

Вплив на основні характеристики 17-шарового широкосмугового фільтра типу S-2ВН2В...2ВН2В неоднорідностей на межах розділу

Розподіли	Середина діапазону пропускання $\lambda_{\text{ср}}$	Ширина смуги $\Delta\lambda_{0.5}$	Ширина смуги $\Delta\lambda_{0.1}$
Робоча довжина хвилі $\lambda_0=3000$ нм			
Ідеальний	3103.05	1130.96	1162.45
Ступінчастий	3110.69	1138.40	1170.32
Лінійний	3106.44	1133.61	1165.26
Квадратичний	3105.96	1132.90	1164.51
Логарифмічний	3107.33	1134.88	1166.61
Експоненціальний	3105.26	1132.17	1163.74
Робоча довжина хвилі $\lambda_0=5000$ нм			
Ідеальний	5171.75	1884.93	1937.42
Ступінчастий	5179.44	1890.53	1943.35
Лінійний	5175.15	1887.02	1939.64
Квадратичний	5174.67	1886.52	1939.11
Логарифмічний	5176.05	1887.91	1940.59
Експоненціальний	5173.96	1885.98	1938.53

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 $\lambda_{\text{ср}}$ 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.

Таблиця 2.6

Вплив на основні характеристики 25-шарового широкосмугового фільтра типу S-2ВН2В...2ВН2В неоднорідностей на межах розділу

Розподіли	Середина діапазону пропускання $\lambda_{\text{ср}}$	Ширина смуги $\Delta\lambda_{0.5}$	Ширина смуги $\Delta\lambda_{0.1}$
Робоча довжина хвилі $\lambda_0=3000$ нм			
Ідеальний	3107.60	1156.49	1169.82
Ступінчастий	3114.88	1164.71	1177.71
Лінійний	3111.15	1159.24	1172.65
Квадратичний	3110.34	1157.98	1171.89
Логарифмічний	3112.01	1160.93	1174.00
Експоненціальний	3109.83	1157.74	1171.10
Робоча довжина хвилі $\lambda_0=5000$ нм			
Ідеальний	5166.18	1901.19	1949.69
Ступінчастий	5174.07	1906.71	1955.67
Лінійний	5169.68	1903.23	1951.94
Квадратичний	5169.14	1902.71	1951.41
Логарифмічний	5170.65	1904.16	1952.91
Експоненціальний	5168.36	1902.14	1950.81

Із ростом числа шарів зростають значення ширин смуг $\Delta\lambda_{0.5}$ та $\Delta\lambda_{0.1}$, значення середини діапазону пропускання $\lambda_{\text{ср}}$ при робочій довжині хвилі $\lambda_0 = 3000$ нм зсувається в довгохвильову область, а при $\lambda_0 = 5000$ нм – у короткохвильову.

2.5. Моделювання впливу процесів оксидації поверхні плівок

Проведені експерименти показали, що на поверхні некристалічної плівки As_2S_3 відбувається формування окисного шару [9]. 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 підкладки. Наявність окисного шару на поверхні плівки при дзеркальному відбиванні завжди «просвітлює» структуру (рис.2.7).

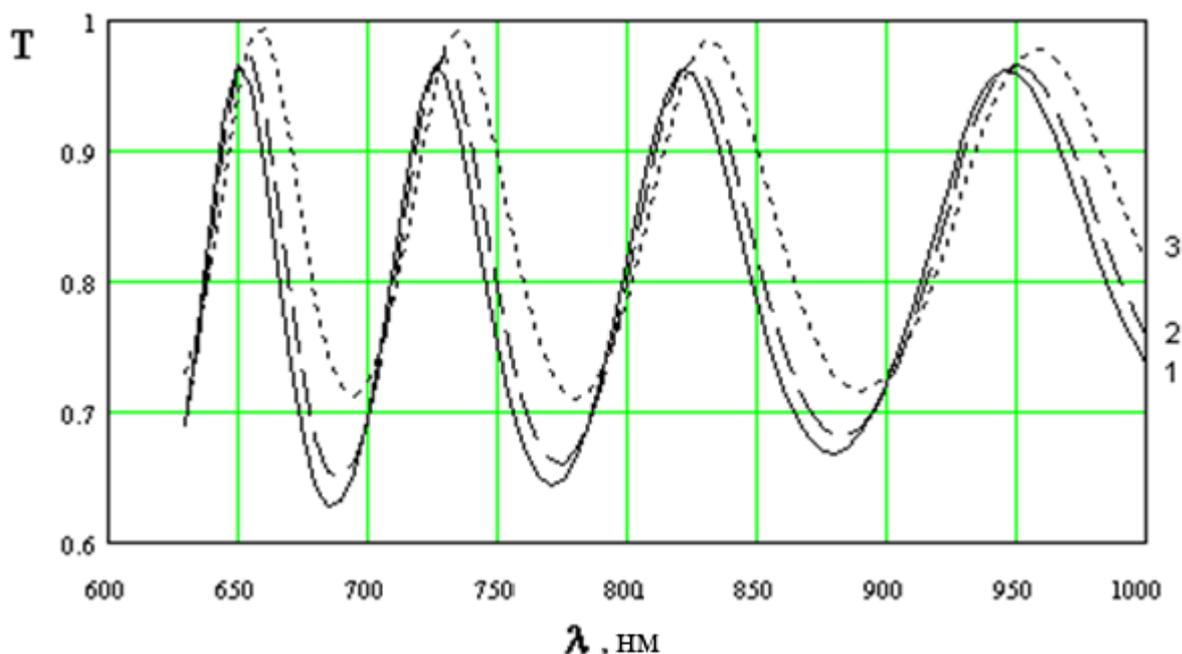


Рисунок 2.7. Криві пропускання при різних товщинах d окисного шару:

1 – $d=10$ нм, 2 – $d=20$ нм, 3 – $d=30$ нм

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.

Висновки до розділу 2

1. Розглянуто 4 моделі, які передбачають наявність неоднорідностей на межах розділу. Розроблено для них необхідний математичний апарат. На його основі було проведено обчислювальні експерименти, які дозволяють визначити вплив неоднорідностей на межі розділу плівок на спектральні характеристики вузькосмугових, відрізаючих та широкосмугових оптичних фільтрів.

2. При дослідженні впливу неоднорідної перехідної області на межі розділу плівок на спектральні характеристики вузькосмугових оптичних фільтрів було виявлено, що відхилення від ідеального випадку зростає залежно від величини середнього значення показника заломлення цієї області. Це саме правило поширюється і на відрізаючі та широкосмугові оптичні фільтри.

Досліджено, що неоднорідна перехідна область у низькозаломлюючому шарі вузькосмугового фільтра зсуває положення довжини хвилі при максимумі пропускання λ_{\max} в сторону довгих хвиль, при цьому збільшується напівширина пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ та ширина смуги $\Delta\lambda_{0.1}$, значення максимуму пропускання T_{\max} залишається незмінним.

У відрізаючому фільтрі наявність неоднорідностей на межах розділу між шарами зменшує діапазон відбивання.

У широкосмугових фільтрах наявність неоднорідностей на межах розділу збільшує значення ширин смуг $\Delta\lambda_{0.5}$ та $\Delta\lambda_{0.1}$, а значення середини діапазону пропускання $\lambda_{\text{ср}}$ зсуває у довгохвильову спектральну область.

3. При дослідженні впливу оксидації на спектральні характеристики матеріалу As_2S_3 було виявлено, що 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 геометричній товщині окисного шару 30 нм відхилення становлять 5–8% залежно від довжини хвилі.

Література до розділу 2

1. 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, 2005. P.955-962.

2. 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, 2005. P.1807–1812.
3. Mitsa A., Mitsa V., Ugrin A., Modelling of spectral characteristics on inhomogeneous (gradient) antireflective coatings based on chalcogenide glasses *J. Chalcogenide Letters*. Vol.2.No1, 2005. P.5-7.
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. Holomb R., Kondrat O., Mitsa V., Veres M., Czitrovszky A., Feher A., Tsud N., Vondráček M., Veltruská K., Matolín V., Prince K.C. Super-bandgap light stimulated reversible transformation and laser-driven mass transport at the surface of As₂S₃ chalcogenide nanolayers studied in-situ. *J. Chem. Phys.* 149, 2018, P. 214702.
6. Kondrat O., Holomb R., Csik A., Takats V., Veres M. and Mitsa V. Coherent light photo-modification, mass transport effect and surface relief formation in As_xS_{100-x} nanolayers: absorption edge, XPS and Raman spectroscopy combined with profilometry study. *Nanoscale Research Letters*, 2017, 12:149.
7. 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”*. 21-23 October 2009. Kharkov. P. 190-192.
8. 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.
9. 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.

10. Ganguly R., Roy I., Banerjee A., Singh H., Ghosal A., Raychaudhuri P. Magnetic field induced emergent inhomogeneity in a superconducting film with weak and homogeneous disorder. *Physical Review B*, 96(5), 2017, P. 054509.
11. Gershon T., Hamann C., Hopstaken M., Lee Y.S., Shin B., Haight R. Chemical Consequences of Alkali Inhomogeneity in Cu₂ZnSnS₄ Thin-Film Solar Cells. *Advanced Energy Materials*, 5(19), 2015, P. 1500922.
12. Wu X., Lai F., Lin L., Lv J., Zhuang B., Yan Q., Huang Z. Optical inhomogeneity of ZnS films deposited by thermal evaporation. *Applied Surface Science*, 254(20), 2008, P. 6455-6460.
13. Misra S., Aguiar J.A., Sun Y., v. Devener B., Palekis V., Ferekides C.S., Scarpulla M. A. Observation and Implications of Composition Inhomogeneity Along Grain Boundaries in Thin Film Polycrystalline CdTe Photovoltaic Devices. *Advanced Materials Interfaces*, 6(16), 2019, P. 1900152.
14. El-Hajje G., Ory D., Guillemoles J. F., Lombez L. On the origin of the spatial inhomogeneity of photoluminescence in thin-film CIGS solar devices. *Applied Physics Letters*, 109(2), 2016, P. 022104.
15. Wu X., Quan B., Xu X., Hu F., Lu X., Gu C., Wang L. Effect of inhomogeneity and plasmons on terahertz radiation from GaAs (1 0 0) surface coated with rough Au film. *Applied surface science*, 285, 2013, P. 853-857.
16. Pei K., Ren X., Zhou Z., Zhang Z., Ji X., Chan P. K. L. A High-Performance Optical Memory Array Based on Inhomogeneity of Organic Semiconductors. *Advanced Materials*, 30(13), 2018, P. 1706647.
17. Wang, Y., Wei, D., Gao, K. Z., Cao, J., & Wei, F. The role of inhomogeneity of perpendicular anisotropy in magnetic properties of ultra thin CoFeB film. *Journal of Applied Physics*, 115(5), 2014, P. 053901.
18. Pant R. K., Roul B., Singh D. K., Chowdhury A. M., Nanda K. K., Krupanidhi S. B. Inhomogeneity-mediated systematic reduction of the Schottky barrier in a Au/GaN

- nanorod film interface. *Semiconductor Science and Technology*, 36(1), 2020, P. 015017.
19. Starbova K., Mankov V., Dikova J., Starbov N. The effects of vapour incidence on the microstructure and related properties of condensed GeS₂ thin films. *Vacuum*, 53(3-4), 1999, P. 441-445.
20. Márquez E., Bernal-Oliva A. M., Gonzalez-Leal J. M., Prieto-Alcon R., Navarro J. V., Minkov D. Optical constants in the subgap region and vibrational behaviour by far-infrared spectroscopy of wedge-shaped obliquely-deposited amorphous GeS₂ films. *Physica Scripta*, 60(1), 1999, P. 90.
21. Міца О.В. Математичне моделювання оптичних шаруватих покриттів та оптимізація їх структури: дис. ... кандидата технічних наук : 01.05.02 / Міца Олександр Володимирович. Тернопіль, 2004. 155с.
22. Пецко В. І., Міца О. В. Моделювання впливу неоднорідностей на спектральні характеристики вузькосмугових оптичних фільтрів. *Східно-Європейський журнал передових технологій*. 2014. 4/5(70). С. 15- 20.
23. 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 – 2015*, III(6), Issue 54, P. 31-34.

РОЗДІЛ 3

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ НАНОДЕФЕКТІВ, АПРОКСИМАЦІЯ ДИСПЕРСІЇ, ДОСЛІДЖЕННЯ СТІЙКОСТІ СПЕКТРАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ДО ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПОХИБОК

У розділі представлена розроблена математичну 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.

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

3.1. Вплив нанодфектів на спектральні характеристики оптичних систем

Для виготовлення якісних інтерференційних оптичних елементів (інтерференційних фільтрів, просвітлюючих покриттів, потоко- й спектроподілювачів, поляризаторів та ін.) необхідні речовини високого рівня чистоти та сталості параметрів як для підкладинок, так і для покриттів [1]. Наявність нанорозмірних дефектів, нерівномірно розподілених у просторі (порожнеч або включень чужорідних матеріалів), призводить до зміни спектрів пропускання інтерференційних систем [2]. Результати, отримані для інтерференційних покриттів

(особливо для оптичних лінз), що широко використовуються на практиці, наведені в цьому розділі [3].

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 ($n_g = 2.11$), другий, четвертий і шостий – із MgF_2 ($n_n = 1.38$) [4].

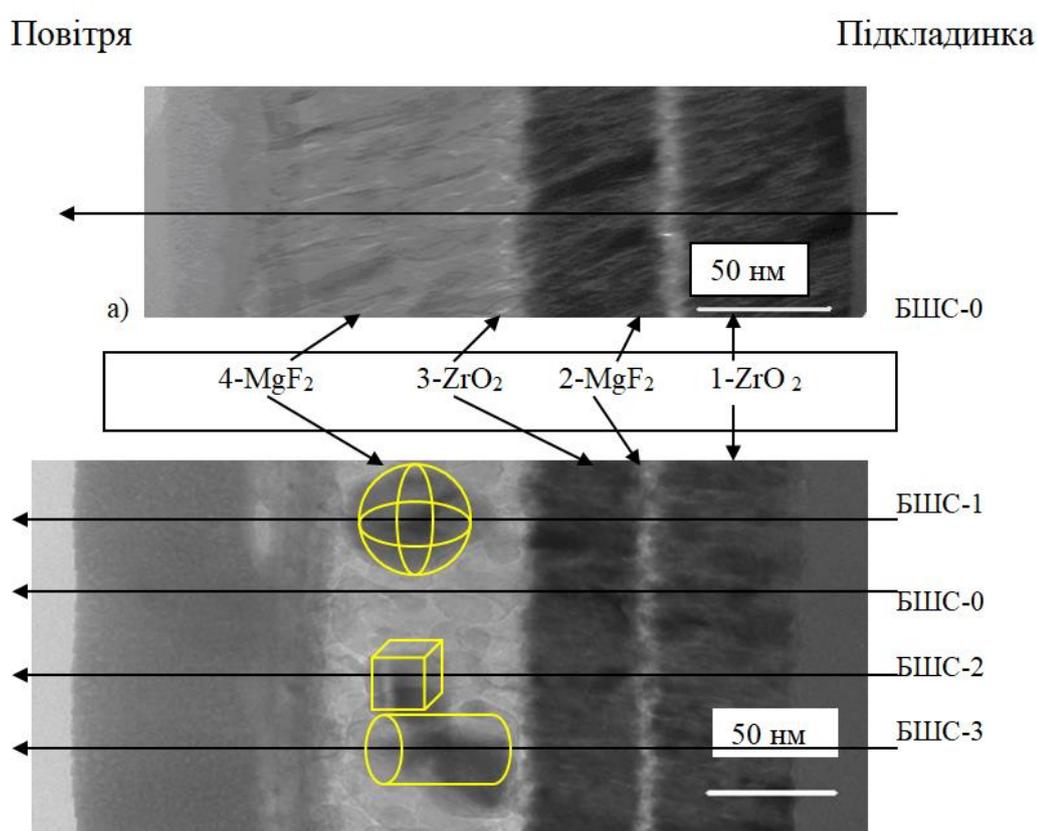


Рисунок 3.1. Поперечний переріз БШС структур без дефектів (3.1а, система БШС-0) і з дефектами (3.1б, системи БШС-1, БШС-2, БШС-3)

За просторовою конфігурацією всі дефекти можуть бути представлені як сферичні (БШС-1), прямокутні (БШС-2) і циліндричні (БШС-3). На рис. 3.1б

наведено поперечний переріз БШС структур площиною, що включає напрямок поширення світла. Параметри шарів БШС представлені в таблиці 3.1.

Порівняння спектрів пропускання показує, що в області БШС-0 (рис. 3.1а і рис. 3.1б) без дефектів вони ідентичні спектрам БШС, вільних від дефектів (рис. 3.1а).

Таблиця 3.1

Товщини шарів для БШС-0 та БШС-1, нм

Речовина шару	Типи БШС і товщини шарів, нм					
	БШС-0		БШС-1-1		БШС-1-2	
	геом.	опт.	геом.	опт.	геом.	опт.
ZrO ₂	60	126.6	60	126.6	60	126.6
MgF ₂	10	13.8	10	13.8	10	13.8
ZrO ₂	50	105.5	50	105.5	50	105.5
MgF ₂	80	110.4	22	30.4	22	30.4
ZrO ₂ Повітря	-	-	40	84.4	40	40
MgF ₂	-	-	18	24.8	18	24.8

Таблиця 3.2

Товщини шарів для БШС-2 та БШС-3, нм

Речовина шару	Типи БШС і товщини шарів, нм							
	БШС-2-1		БШС-2-2		БШС-3-1		БШС-3-2	
	геом.	опт.	геом.	опт.	геом.	опт.	геом.	опт.
ZrO ₂	60	126.6	60	126.6	60	126.6	60	126.6
MgF ₂	10	13.8	10	13.8	10	13.8	10	13.8
ZrO ₂	50	105.5	50	105.5	50	105.5	50	105.5
MgF ₂	30	41.48	30	41.48	10	13,8	10	13,8
ZrO ₂ Повітря	25	53	25	25	50	105.5	50	50
MgF ₂	25	37.4	25	37.4	20	27.6	20	27.6

Наведені на рисунках 3.1а та 3.1б багат шарові структури можуть бути схематично представлені як прозорі підкладинки S із показником заломлення n_s , на

які послідовно один за іншим осаджено шари А з високим показником заломлення n_A і шари В з низьким показником заломлення n_B (рис. 3.2). Оптичні товщини шарів визначаються множниками x_i і y_i для відповідних чвертьхвильових шарів А і В, для яких справедливе співвідношення $n_A d_A = n_B d_B = \lambda_0/4$. Геометричний вигляд дефектних шарів у БШС схематично показаний на рисунку 3.3.



а)



б)



в)

Рисунок 3.2. Модель БШС без дефектів (а), з дефектами, утвореними ZrO_2 (б), та з дефектами, утвореними повітрям (в)

Відповідні структури дефектного шару будуть, як на рисунку 3.2б, якщо матеріал дефекту збігається з речовиною В, або як на рисунку 3.2в, якщо дефект утворений повітрям.

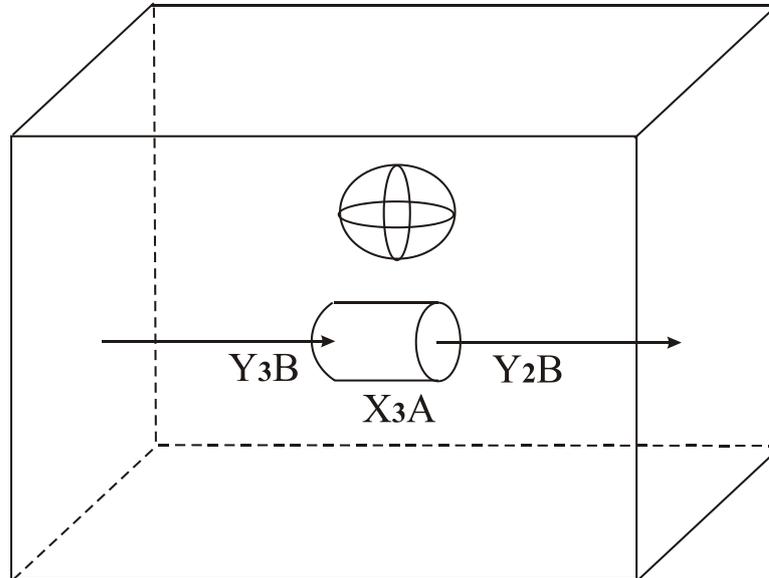


Рисунок 3.3. Геометричний вигляд дефектного шару в БШС

Для оцінки впливу зміни параметрів структури інтерференційних систем на результуюче пропускання використано матричний метод розрахунку, в основі якого лежить задання характеристичної матриці. Якщо геометрична товщина шару дорівнює d , а показник заломлення – n , то характеристична матриця однорідної діелектричної плівки має вигляд:

$$M(n, d, \lambda) = \begin{vmatrix} \cos \delta(n, d, \lambda) & -(i/p) \sin \delta(n, d, \lambda) \\ -ip \sin \delta(n, d, \lambda) & \cos \delta(n, d, \lambda) \end{vmatrix}, \quad (3.1)$$

де $\delta(n, d, \lambda) = 2\pi n d \cos \theta / \lambda$ – фазова товщина шару. Для випадку, коли напрямок поширення випромінювання збігається з нормаллю до поверхні розділу $\theta = 0$ і, відповідно, маємо $p = n$.

Якщо відома характеристична матриця одного шару, можна визначити характеристичну матрицю k -шарової структури як добуток матриць для кожного із шарів:

$$M(\bar{n}, \bar{d}, \lambda) = M_k(n_k, d_k, \lambda) \cdot M_{k-1}(n_{k-1}, d_{k-1}, \lambda) \cdots M_2(n_2, d_2, \lambda) \cdot M_1(n_1, d_1, \lambda), \quad (3.2),$$

де M_j – характеристична матриця j -того шару; $\bar{n} = (n_1, n_2, \dots, n_{k-1}, n_k)$ – вектор величин показників заломлення шарів; $\bar{d} = (d_1, d_2, \dots, d_{k-1}, d_k)$ – вектор геометричних товщин шарів.

Шар, у якому є відповідний дефект (рис. 3.3), буде задаватись характеристичною матрицею у такому вигляді:

$$M_i(n_i, d_i, \lambda) = M_i(n_i, d_{i1}, \lambda) \cdot M_i(n_D, d_{i2}, \lambda) \cdot M_i(n_i, d_{i3}, \lambda), \quad (3.3)$$

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.

Спектральні залежності пропускання БШС систем розраховувалися за формулою (1.29) з урахуванням параметрів шарів, представлених у таблицях 3.1-3.2, та відповідних характеристичних матриць, отриманих з використанням формули (3.1)-(3.3). Було встановлено, що наявність дефектів у шарі MgF_2 призводить до значного зниження максимумів пропускання і їх зсуву в довгохвильову область спектра. Більш істотні ефекти спостерігалися, коли дефект утворювався речовиною з більшим показником заломлення, наприклад, ZrO_2 (криві 3-1 і 3-2 на рис. 3.4).

Як видно з рисунка 3.4а, при заповненні дефекту діоксидом цирконію, зменшення пропускання може досягати 13%. При заповненні дефекту повітрям, зменшення пропускання переважно знаходиться в межах 3-4%. Відхилення від ідеального випадку збільшується зі зростанням розмірів дефекту. Також було проведено ряд експериментів, у яких замінили матеріал MgF_2 ($n_n=1.38$) на інший, з більшим показником заломлення. У цьому випадку пропускна здатність зменшується і вплив дефектів стає меншим.

Рисунки 3.4 дозволяють зорієнтуватися фахівцям у задачах розпізнавання дефектів оптичних систем, визначити розмір та природу дефекту.

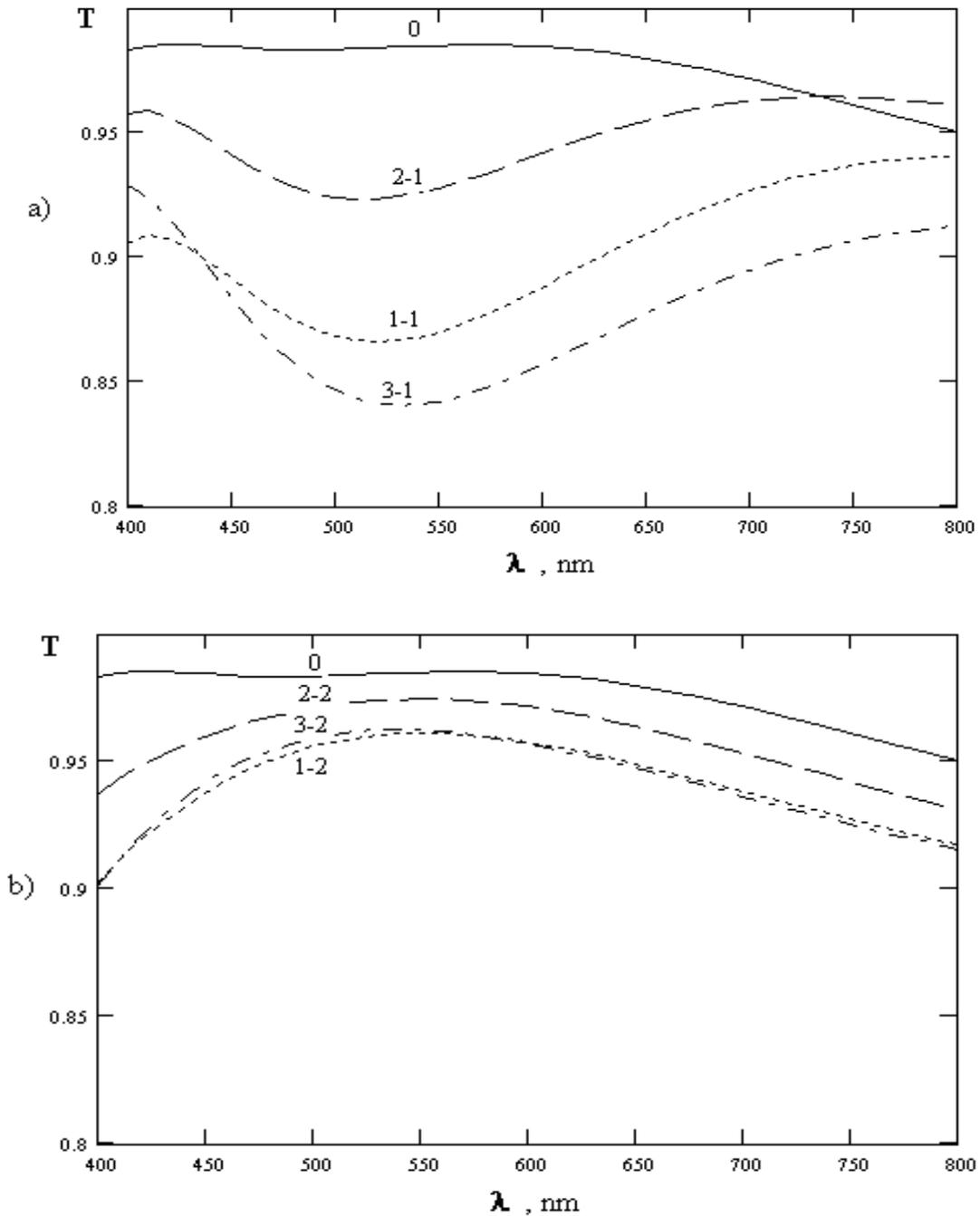


Рисунок 3.4. Спектри пропускання БШС без дефектів (крива 0) і з дефектами з ZrO_2 (криві 1-1, 2-1, 3-1 на рис. 3.4а), а також з повітря (криві 1-2, 2-2, 3-2 на рис. 3.4б)

Було проведено більш детальне дослідження пропускання системи залежно від параметрів дефектів. Дані для шарів структури з різними типами дефектів, що мають постійний поздовжній розмір 20 нм, але з різною оптичною товщиною, що

визначається показником заломлення речовини дефекту, наведені в таблиці 3.3. Відповідні спектри представлені на рис. 3.5.

Таблиця 3.3

Види БШС з геометричним розміром дефекту 20 нм з речовин, що мають різні показники заломлення

Речовина шару	Види БШС, товщини шарів, нм									
	МС-0		МС-n=1		МС-n=2		MLS-n=3		MLS-n=4	
	геом.	опт.	геом.	опт.	геом.	опт.	геом.	опт.	геом.	опт.
ZrO ₂	60	126.6	60	126.6	60	126.6	60	126.6	60	126.6
MgF ₂	10	13.8	10	13.8	10	13.8	10	13.8	10	13.8
ZrO ₂	50	105.5	50	105.5	50	105.5	50	105.5	50	105,5
MgF ₂	80	110.4	30	41.4	30	41,4	30	41.4	30	41.4
дефект	-	-	20	20	20	40	20	60	20	80
MgF ₂	-	-	30	41.4	30	41.4	30	41.4	30	41.4

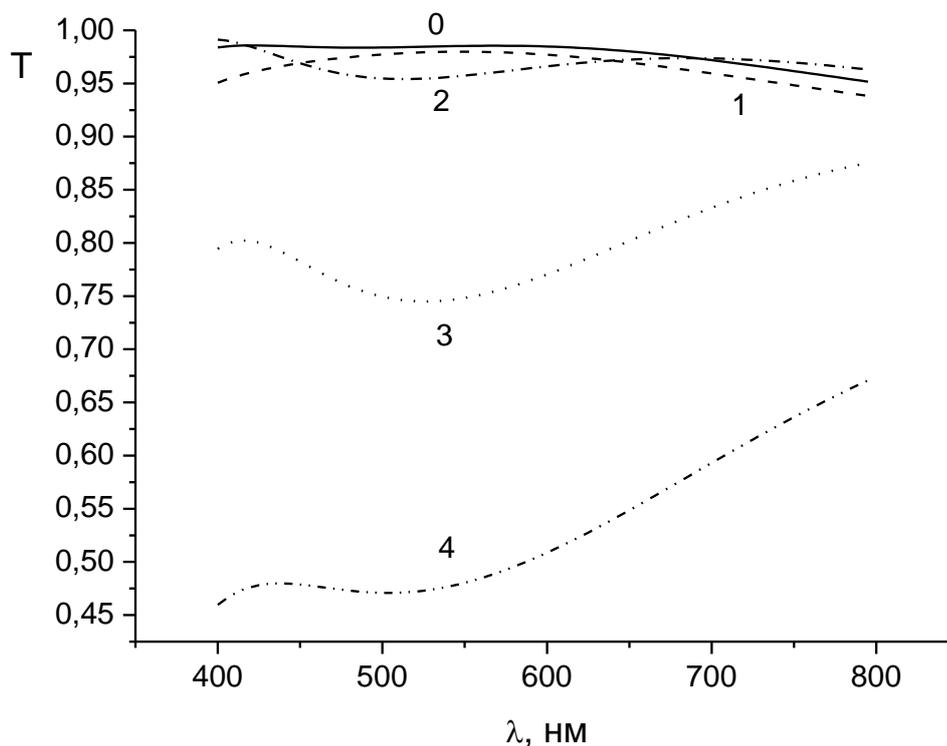


Рисунок 3.5. Спектр пропускання БШС- n без дефектів (крива 0) і з дефектами, що утворені речовинами з показниками заломлення $n=1$ (крива 1), $n=2$ (крива 2), $n=3$ (крива 3), $n=4$ (крива 4)

З рисунка 3.5 видно, що вплив дефекту на спектральні характеристики зростає із збільшенням показника заломлення. Причому цей зв'язок більш схожий на експоненційну залежність. Якщо дефект містить речовину з показником заломлення 3, то спектральні характеристики відрізняються від ідеального випадку до 25%. А за наявності дефекту з показником заломлення 4 це значення може досягати 50%.

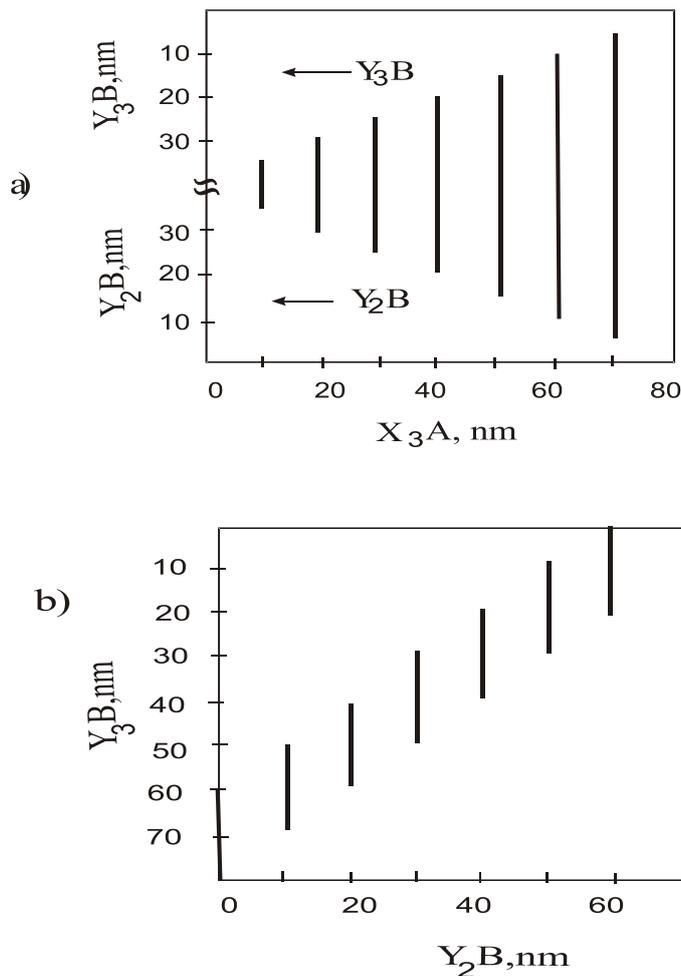


Рисунок 3.6. Діаграма взаємозалежностей між параметрами шарів БШС і поздовжнім розміром дефектів (а) та їхнім просторовим розташуванням (б)

Діаграми взаємозалежностей між параметрами шарів МС та геометричним розміром дефектів, утворених з ZrO_2 , представлені в табл. 3.4 і на рис. 3.6а; залежності від просторового розташування дефекту при його поздовжньому розмірі $X_{3A}=20$ нм – у табл. 3.4 і на рисунку 3.6б.

Таблиця 3.4

Взаємозалежність БШС- D шарів Y_2B та Y_3B при різних поздовжніх розмірах X_3A дефектів з ZrO_2 для БШС-D0, БШС-D1, БШС-D2, БШС-D3 та БШС-D4

Речовина і позначення шарів	Типи БШС- D і товщини шарів, <i>нм</i>									
	БШС-D0		БШС -D1		БШС -D2		БШС -D3		БШС -D4	
	геом.	опт.	геом.	опт.	геом.	опт.	геом.	опт.	геом.	опт.
ZrO_2X_1A	60	126.6	60	126.6	60	126.6	60	126.6	60	126.6
MgF_2Y_1B	10	13.8	10	13.8	10	13.8	10	13.8	10	13.8
ZrO_2X_2A	50	105.5	50	105.5	50	105.5	50	105.5	50	105.5
MgF_2Y_2B	40	55.2	35	48.3	30	41.4	25	34.5	20	27.6
ZrO_2X_3A	0	0	10	21.1	20	42.2	30	63.3	40	84.4
MgF_2Y_3B	40	55.2	35	48.3	30	41.4	25	34.5	20	27.6

Таблиця 3.5

Взаємозалежність БШС- D шарів Y_2B та Y_3B при різних поздовжніх розмірах X_3A дефектів з ZrO_2 для БШС-D5, БШС-D6, БШС-D7 та БШС-D8

Речовина і позначення шарів	Типи БШС- D і товщини шарів, <i>нм</i>							
	БШС-D5		БШС -D6		БШС -D7		БШС -D8	
	геом.	опт.	геом.	опт.	геом.	опт.	геом.	опт.
ZrO_2X_1A	60	126.6	60	126.6	60	126.6	60	126.6
MgF_2Y_1B	10	13.8	10	13.8	10	13.8	10	13.8
ZrO_2X_2A	50	105.5	50	105.5	50	105.5	50	105.5
MgF_2Y_2B	15	20.7	10	13.8	5	6.9	0	0
ZrO_2X_3A	50	105.5	60	126.6	70	147.7	80	168.8
MgF_2Y_3B	15	20.7	10	13.8	5	6.9	0	0

Розміри дефектів розглянуто від 0 до 80 з кроком 10 нм. Спостерігається певна лінійна залежність відхилення від ідеального випадку при збільшенні розміру дефекту від 10 до 60 нм (рис. 3.7а). Криві, які описують спектральні характеристики, пропорційно зменшуються залежно від величини дефекту. Уже починаючи зі значення 70 нм ця закономірність зникає і починається суттєвий зсув в область довгих хвиль.

Таблиця 3.6

Взаємозалежність БШС-Р шарів розмірами Y_2B і Y_3B при різному просторовому розташуванні дефектів з ZrO_2 , що мають поздовжній геометричний розмір $X_3A = 20$ нм для МС-Р0, МС-Р1, МС-Р2 та МС-Р3

Речовина і позначення шарів	Типи БШС- Р і товщини шарів, нм							
	МС-Р0		МС-Р1		МС-Р2		МС-Р3	
	геом.	опт.	геом.	опт.	геом.	опт.	геом.	опт.
ZrO_2X_1A	60	126.6	60	126.6	60	126.6	60	126.6
MgF_2Y_1B	10	13,8	10	13.8	10	13.8	10	13.8
ZrO_2X_2A	50	105.5	50	105.5	50	105.5	50	105.5
MgF_2Y_2B	40	55.2	0	0	10	13.8	20	27.6
ZrO_2X_3A	0	0	20	42.2	20	42.2	20	42.2
MgF_2Y_3B	40	55.2	60	82.8	50	69.4	40	55.2

Таблиця 3.7

Взаємозалежність БШС-Р шарів між розмірами Y_2B і Y_3B при різному просторовому розташуванні дефектів з ZrO_2 , що мають поздовжній геометричний розмір $X_3A = 20$ нм для МС-Р4, МС-Р5, МС-Р6 та МС-Р7

Речовина і позначення шарів	Типи БШС- Р і товщини шарів, нм							
	МС-Р4		МС-Р5		МС-Р6		МС-Р7	
	геом.	опт.	геом.	опт.	геом.	опт.	геом.	опт.
ZrO_2X_1A	60	126.6	60	126.6	60	126.6	60	126.6
MgF_2Y_1B	10	13.8	10	13.8	10	13.8	10	13.8
ZrO_2X_2A	50	105.5	50	105.5	50	105.5	50	105.5
MgF_2Y_2B	30	41.4	40	55.2	50	69.4	60	82.8
ZrO_2X_3A	20	42.2	20	42.2	20	42.2	20	42.2
MgF_2Y_3B	30	41.4	20	27.6	10	13.8	0	0

Спектри пропускання, що відповідають рис. 3.5а діаграми й параметрам шарів з табл. 3.4 і табл. 3.5, представлені на рис. 3.7а. При збільшенні поздовжнього розміру дефекту з речовини з високим показником заломлення виникає мінімум пропускання в області 500-550 нм, що зсувається в довгохвильову область. Подібна залежність спостерігається при зміні положення дефекту щодо центральної точки (табл. 3.5 і діаграма на рис. 3.5а), однак спостережуваний мінімум зсувається в коротку область спектра.

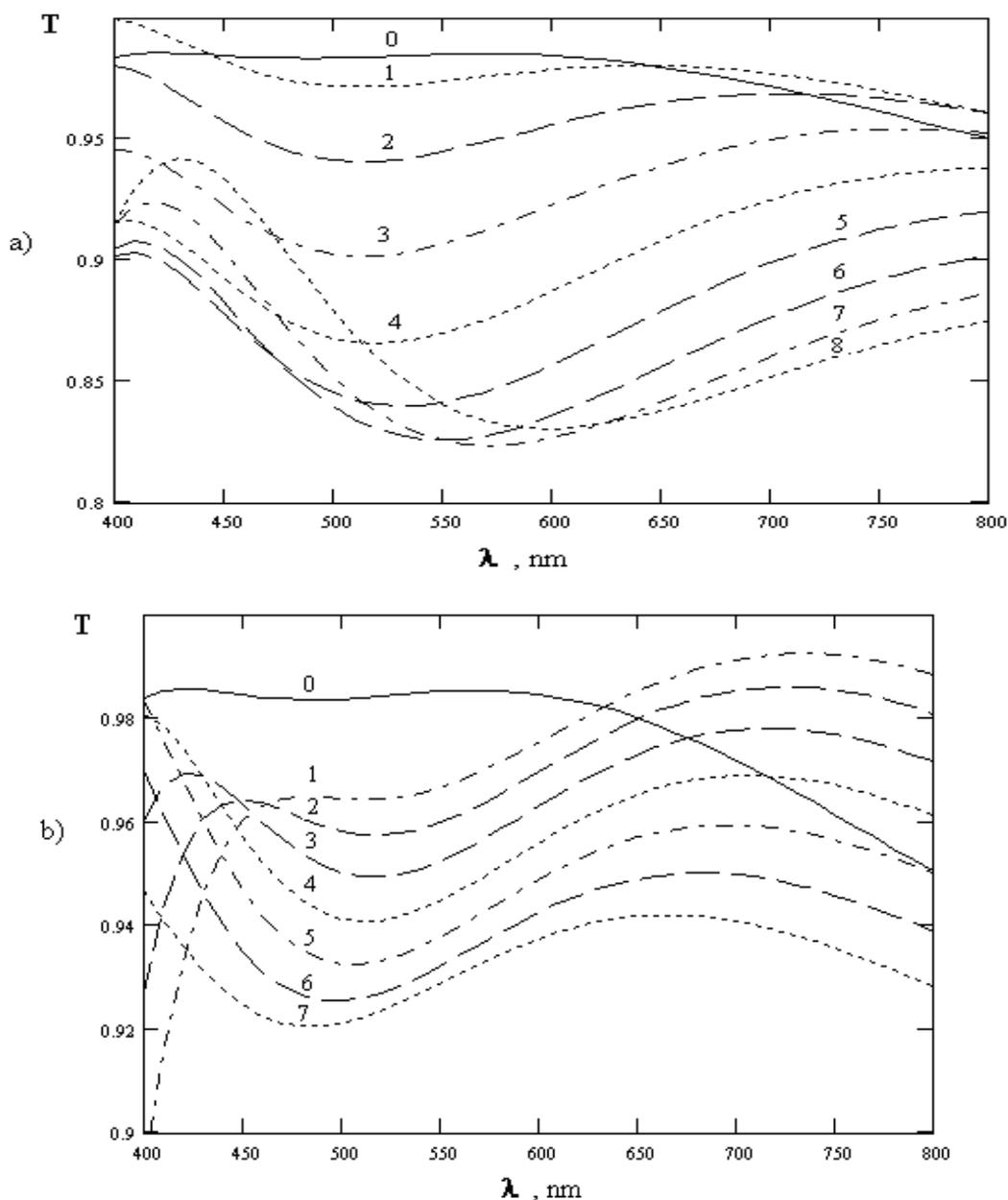


Рисунок 3.7. Залежності спектрів пропускання БШС від поздовжнього розміру дефектів (рис. 3.7а криві 0-8, дані з табл. 3.4, діаграма на рис. 3.6а) і від їхнього просторового розташування (рис. 3.7б криві 0-7, дані з табл. 3.4, діаграма на рис. 3.6б)

Дослідження показали, що навіть незначні дефекти можуть суттєво впливати на спектральні характеристики оптичного покриття. З іншого боку, інформація про них може дозволити прийняти певні дії по відновленню пропускнуої спроможності БШП [6].

3.2. Математичне моделювання впливу дисперсії на спектральні характеристики оптичних фільтрів на прикладі реальних матеріалів

У підрозділі описані важливі аспекти, пов'язані з вибором методу для апроксимації дисперсії показника заломлення, показано на експериментальних даних ефективність різних моделей [7].

Експериментальні дані про дисперсію матеріалу CdP₂ [8-12] наведено в таблиці 3.8.

Таблиця 3.8

λ , нм	600	610	620	630	640	650	660
n_s	3.50	3.47	3.44	3.42	3.40	3.38	3.36
λ , нм	670	680	690	700	710	720	730
n_s	3.34	3.325	3.31	3.30	3.295	3.328	3.32
λ , нм	740	750	760	770	780	790	800
n_s	3.25	3.24	3.23	3.22	3.21	3.20	3.19
λ , нм	810	820	830	840	850	900	1000
n_s	3.185	3.181	3.178	3.176	3.174	3.17	3.17

Для апроксимації даних про дисперсію матеріалів зручно використовувати модель Зельмеєра

$$n_s(\lambda) = \sqrt{A + B/\lambda^2 + C/\lambda^4 + D\lambda^2 + E\lambda^4}$$

або простішу модель

$$n_s(\lambda) = \frac{A}{\lambda^B},$$

де A, B, C, D, E – шукані величини.

Для знаходження коефіцієнтів можна використати метод аналітичного вирівнювання, перейшовши до замін у моделі Зальмеєра

$$y(\lambda) = (n_s(\lambda))^2,$$

$$x_1(\lambda) = \frac{1}{\lambda^2},$$

$$x_2(\lambda) = \frac{1}{\lambda^4},$$

$$x_3(\lambda) = \lambda^2,$$

$$x_4(\lambda) = \lambda^4,$$

а в моделі 2

$$y(\lambda) = \ln(n_s(\lambda)),$$

$$x_1(\lambda) = -\ln(\lambda).$$

Після чого можна використати метод найменших квадратів уже для моделі виду

$$\bar{y} = a_0 + a_1 \cdot \bar{x}_1 + a_2 \cdot \bar{x}_2 + \dots + a_n \cdot \bar{x}_n.$$

Тобто будемо матрицю X , яка буде мати вигляд

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} & \vdots & x_{n,1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_{1,m-1} & \vdots & x_{n,m-1} \\ 1 & x_{1,m} & \vdots & x_{n,m} \end{pmatrix},$$

де $\bar{x}_i = (x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,m})$, $i = \overline{1, n}$.

Коефіцієнти знаходимо за відомою формулою

$$\bar{a} = (X^T \cdot X)^{-1} \cdot X^T \cdot y.$$

Для перевірки якості моделі використаємо такий показник, як коефіцієнт детермінації:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n e_i^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2},$$

де $e_i = y_i - \tilde{y}_i$, $\bar{y} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m y_i$, m – кількість точок.

Використавши описаний підхід, знайдемо параметри у відповідних моделях, за якими будемо наближати експериментальні дані показника заломлення матеріалу CdP₂ (табл. 3.9).

Таблиця 3.9

Модель Зельмеєра					Модель 2	
A	B	C	D	E	A	B
88.5	$-2.65 \cdot 10^7$	$3.643 \cdot 10^{12}$	$-1 \cdot 10^{-4}$	$0.5 \cdot 10^{-10}$	2.969	0.27

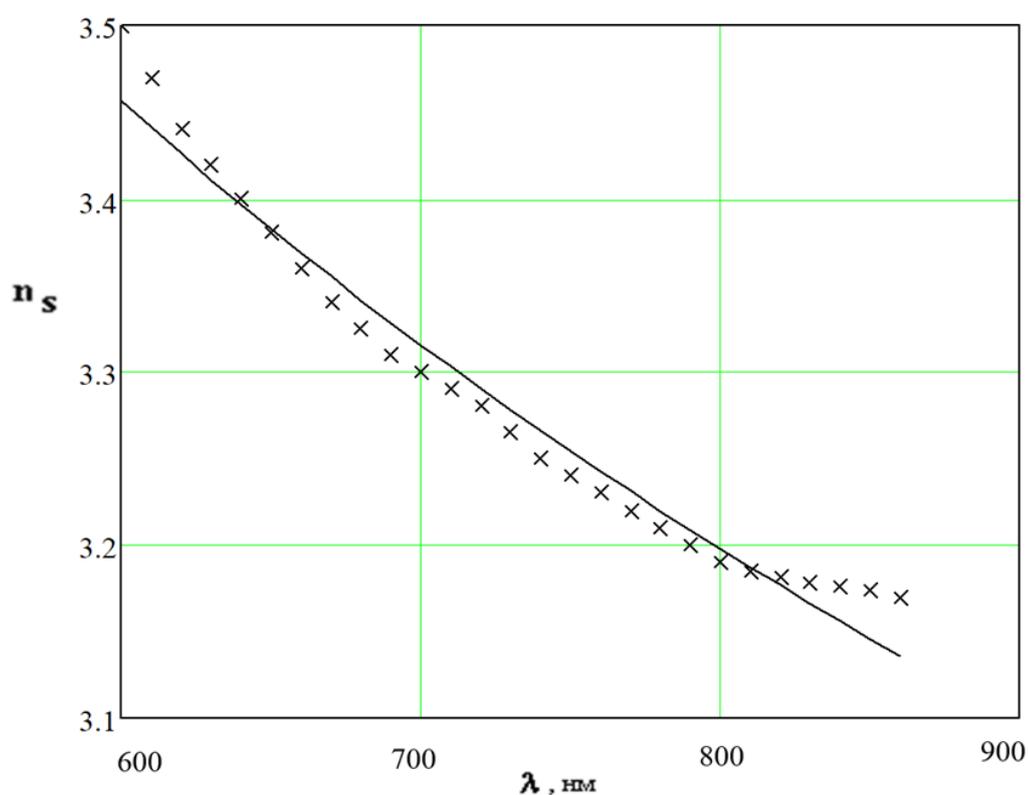


Рисунок 3.8. Дисперсія показника заломлення CdP₂ та її апроксимація моделлю 2

Відповідні графіки, які показують апроксимацію експериментальних даних показника заломлення матеріалу CdP₂ двома розглянутими моделями, зображені на рисунках 3.8 та 3.9.

Значення коефіцієнта детермінації при апроксимації з використанням моделі Зельмеєра рівне 0.999, а при використанні функції виду $n_s(\lambda) = \frac{A}{\lambda^B}$ становить 0.961.

Відзначимо надзвичайно високу точність апроксимації для моделі Зельмеєра.

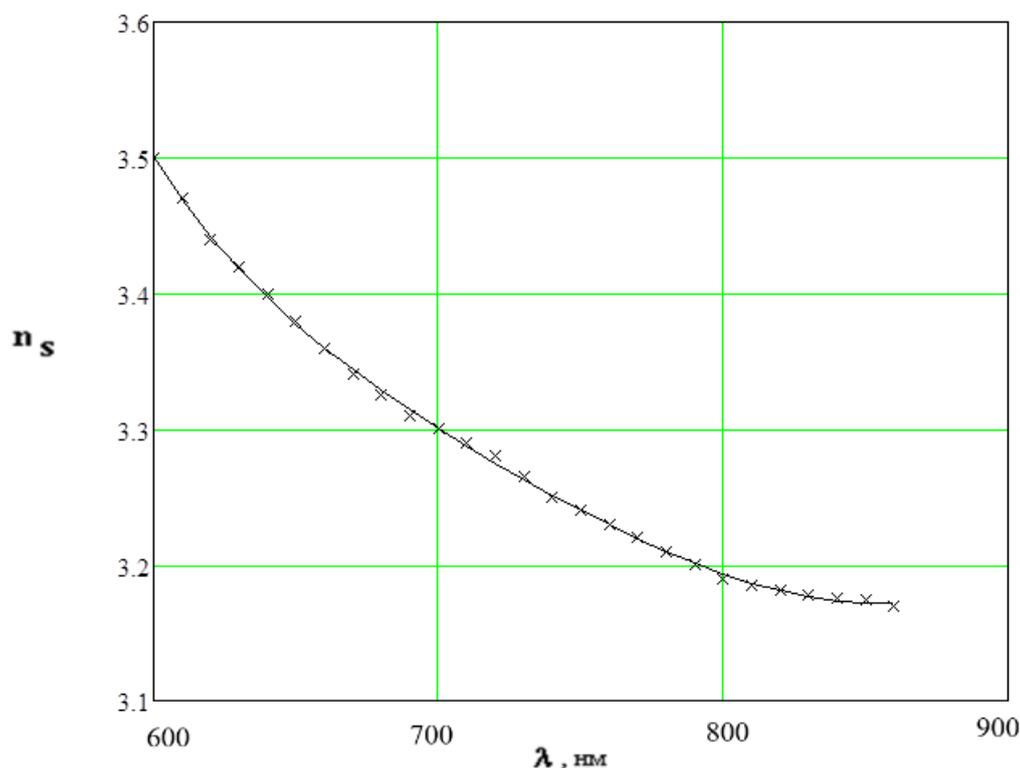


Рисунок 3.9. Дисперсія показника заломлення CdP₂ та її апроксимація моделлю Зельмеєра

Розглянемо ще одні експериментальні дані. Цього разу побудуємо апроксимуючі моделі для матеріалу As₂S₃ [13], інформацію про дисперсію показника заломлення якого наведено в таблиці 3.10.

Таблиця 3.10

λ , нм	1000	1200	1400	1600
n_s	2.480	2.456	2.446	2.438
λ , нм	1800	2000	2200	2300
n_s	2.432	2.429	2.425	2.422

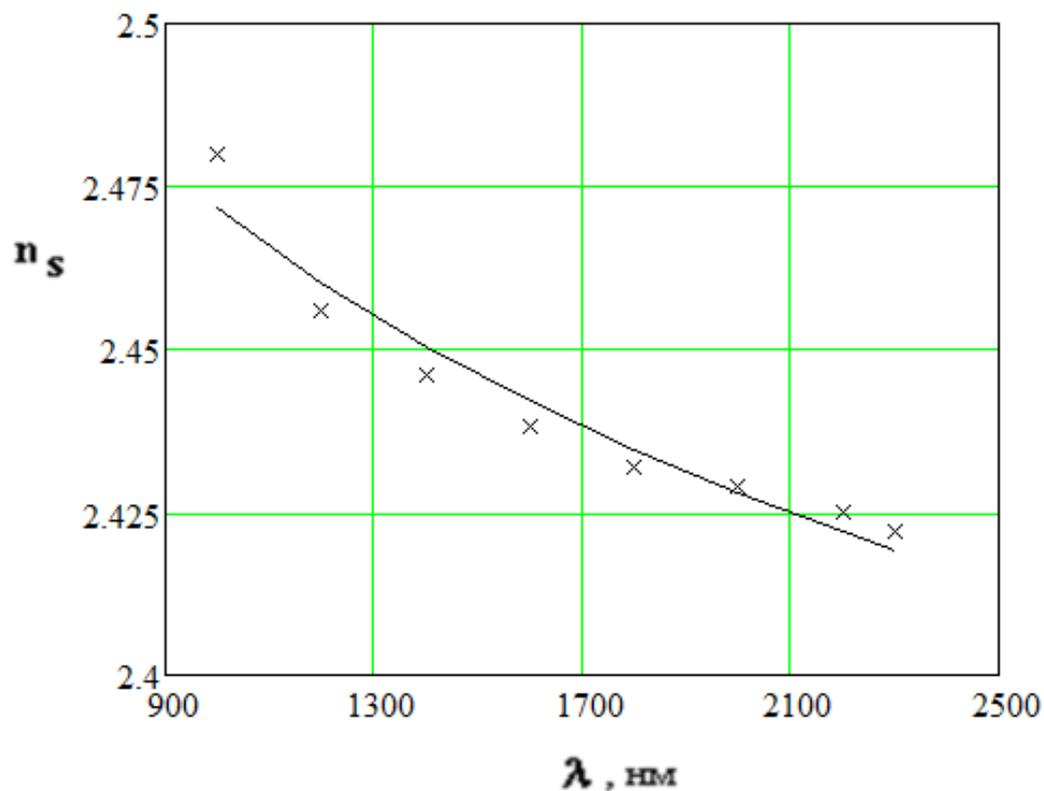


Рисунок 3.10. Дисперсія показника заломлення As_2S_3 та її апроксимація моделлю 2

Використавши схему, яка наведена вище, знайдемо параметри у відповідних моделях, за якими будемо наближати експериментальні дані показника заломлення матеріалу As_2S_3 (табл. 3.10).

Таблиця 3.11

Модель Зельмеєра					Модель 2	
A	B	C	D	E	A	B
5.976	$0.625 \cdot 10^6$	$-0.401 \cdot 10^{12}$	$-2.4 \cdot 10^{-8}$	$5.2 \cdot 10^{-16}$	1.084	0.026

З рисунків 3.10 та 3.11 видно, що краще наближає експериментальні дані модель Зельмеєра. Значення коефіцієнта детермінації при апроксимації з використанням моделі Зельмеєра рівне 0.999, а при використанні функції виду $n_s(\lambda) = \frac{A}{\lambda^B}$ становить 0.944.

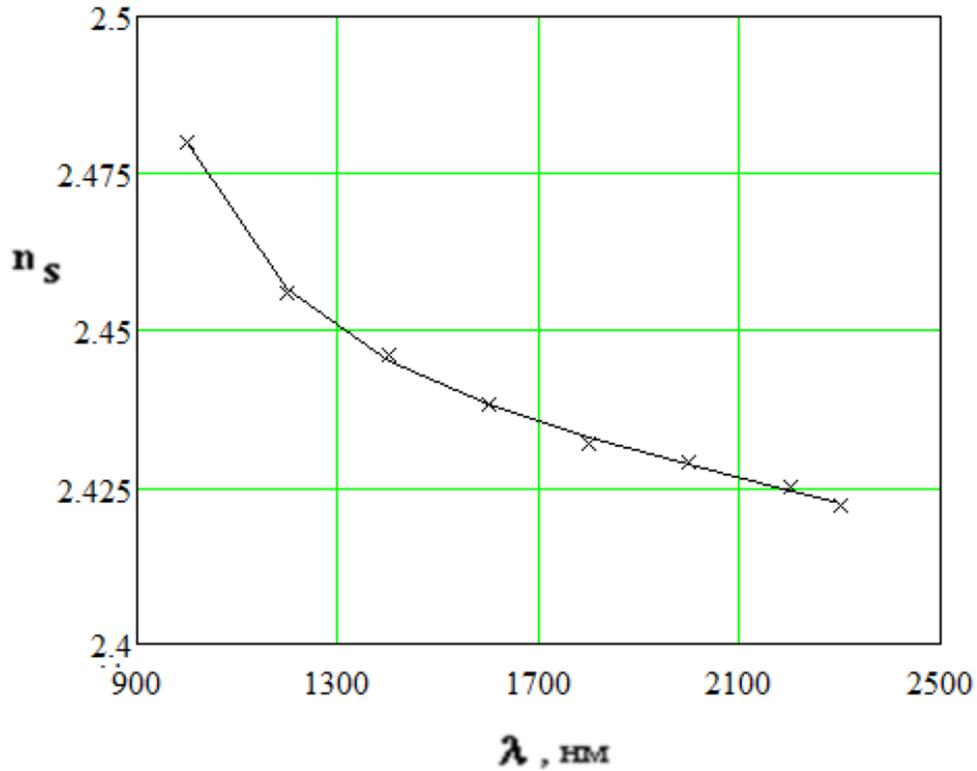


Рисунок 3.11. Дисперсія показника заломлення As_2S_3 та її апроксимація моделлю Зельмеєра

Побудуємо апроксимуючі моделі для матеріалу As_2S_5 [14], інформацію про дисперсію показника заломлення якого наведено в таблиці 3.12.

Таблиця 3.12

λ , нм	1000	2000	3000	4000	5000
n_s	2.29	2.27	2.254	2.249	2.246
λ , нм	6000	7000	8000	9000	10000
n_s	2.244	2.241	2.239	2.236	2.233

Знайдемо параметри у відповідних моделях, за якими будемо наближати експериментальні дані показника заломлення матеріалу As_2S_5 (табл. 3.13).

Таблиця 3.13

Модель Зельмеєра					Модель 2	
A	B	C	D	E	A	B
5.02	-15270	$2.13 \cdot 10^8$	0	0	1.084	0.026

Знову ж бачимо (рис. 3.12 - 3.13), що краще наближає експериментальні дані модель Зельмеєра. Значення коефіцієнта детермінації при апроксимації з використанням моделі Зельмеєра рівне 0.999, а при використанні функції виду $n_s(\lambda) = \frac{A}{\lambda^B}$ становить 0.97.

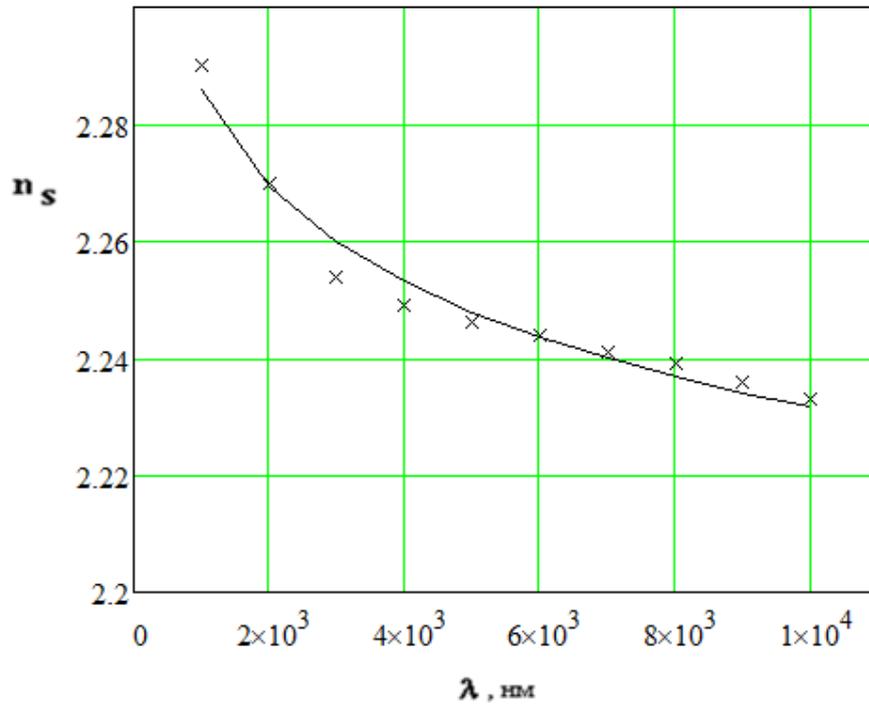


Рисунок 3.12. Дисперсія показника заломлення As_2S_5 та її апроксимація моделлю 2

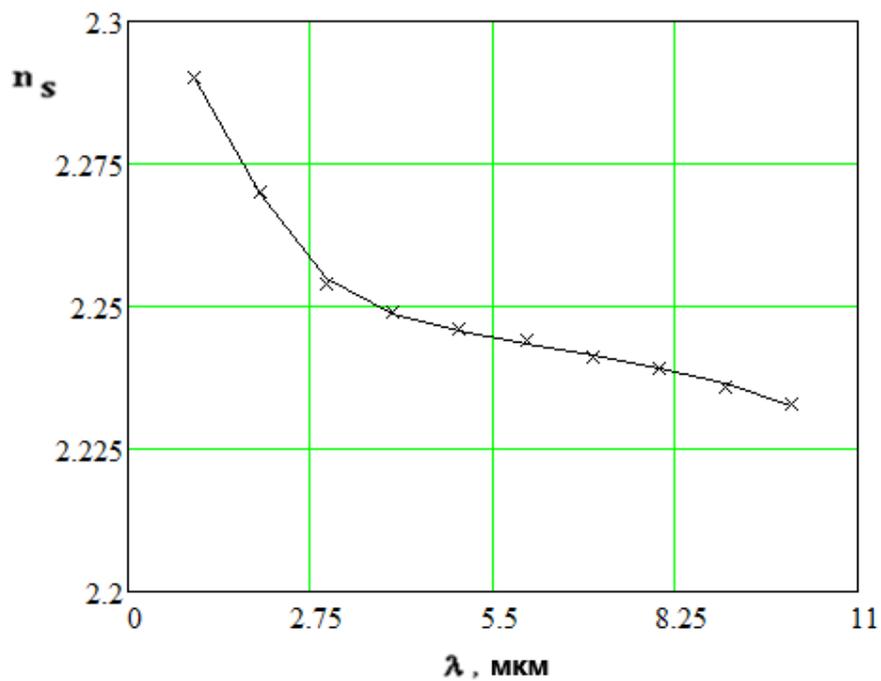


Рисунок 3.13. Дисперсія показника заломлення As_2S_5 та її апроксимація моделлю Зельмеєра

Побудуємо апроксимуючі моделі для матеріалу As_2Se_3 [15], інформація про дисперсію показника заломлення якого наведена в таблиці 3.14.

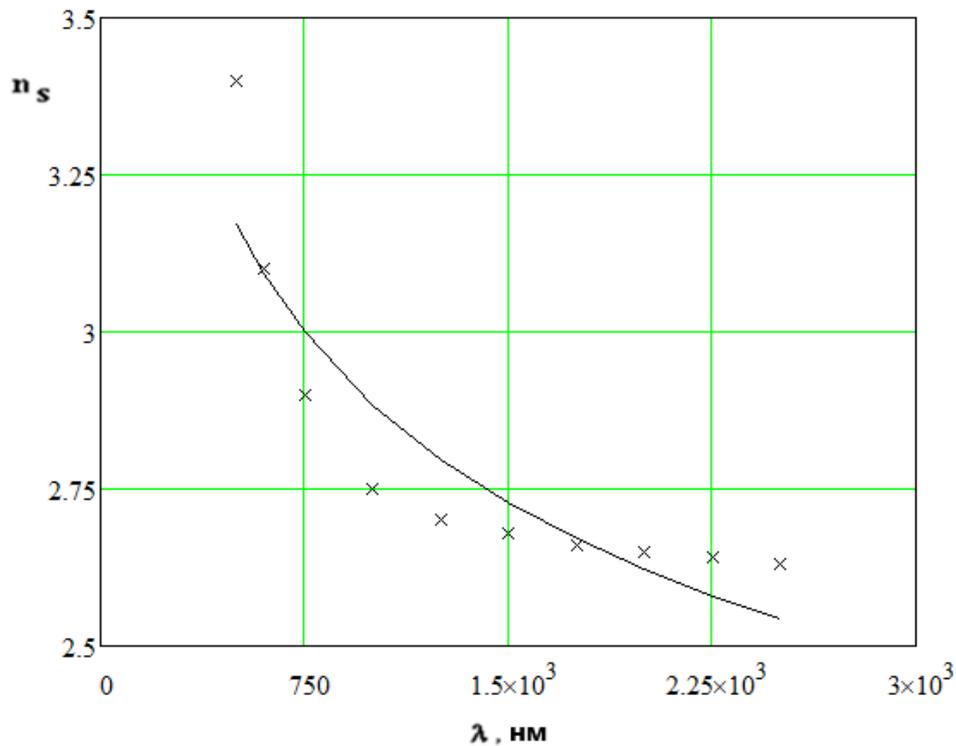
Таблиця 3.14

λ , нм	500	600	750	1000	1250
n_s	3,4	3,1	2,9	2,75	2,7
λ , нм	1500	1750	2000	2250	2500
n_s	2,68	2,66	2,65	2,64	2,63

Параметри для відповідних моделей, за якими будемо наближати експериментальні дані показника заломлення матеріалу As_2Se_3 , наведено в таблиці 3.15.

Таблиця 3.15

Модель Зельмеєра					Модель 2	
A	B	C	D	E	A	B
6.77	$6.42 \cdot 10^5$	$1.38 \cdot 10^{11}$	$4.9 \cdot 10^{-8}$	0	2.008	0.137

Рисунок 3.14. Дисперсія показника заломлення As_2Se_3 та її апроксимація моделлю 2

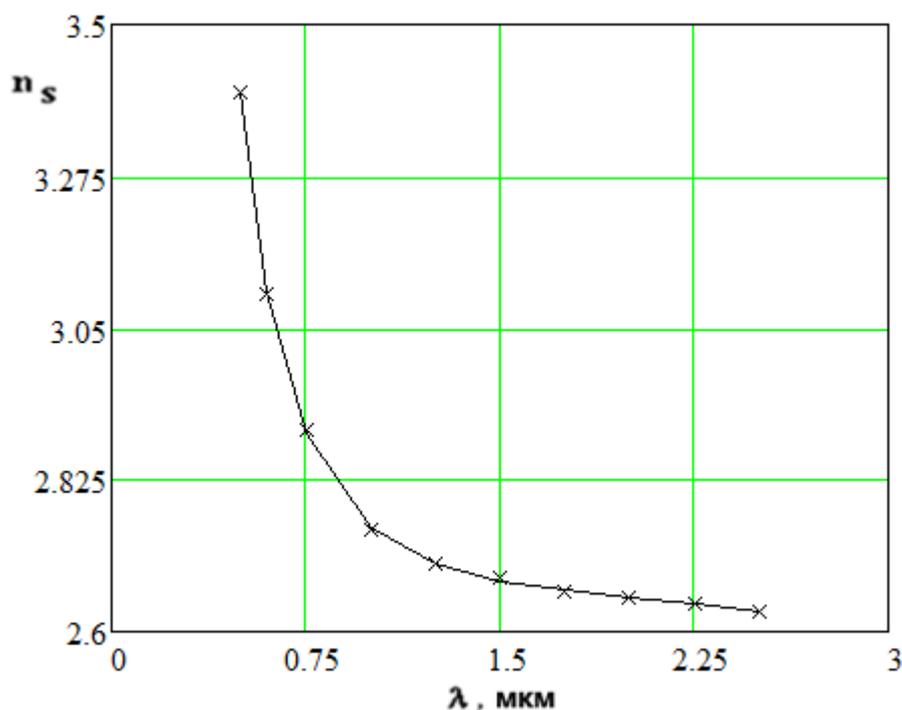


Рисунок 3.15. Дисперсія показника заломлення As_2Se_3 та її апроксимація моделлю Зельмеєра

Матеріал As_2Se_3 широко використовується як халькогенідне скло для інфрачервоної оптики. Побудована модель Зельмеєра дуже точно описує дисперсію показника заломлення цього матеріалу. Значення коефіцієнта детермінації при апроксимації з використанням моделі Зельмеєра рівне 0.999, а при використанні функції виду $n_s(\lambda) = \frac{A}{\lambda^B}$ становить 0.828.

Наведені моделі показують, що немає необхідності зберігати цілі таблиці експериментальних даних, а досить знати значення параметрів формули Зельмеєра для отримання інформації про значення показника заломлення при заданій довжині хвилі. Це може підтвердити і те, що розрахунки, які базувались на основі експериментальних даних про дисперсію показників заломлення матеріалів CdP_2 та As_2S_3 , практично не відрізнялись від розрахунків, які проводились за допомогою апроксимуючої формули Зельмеєра.

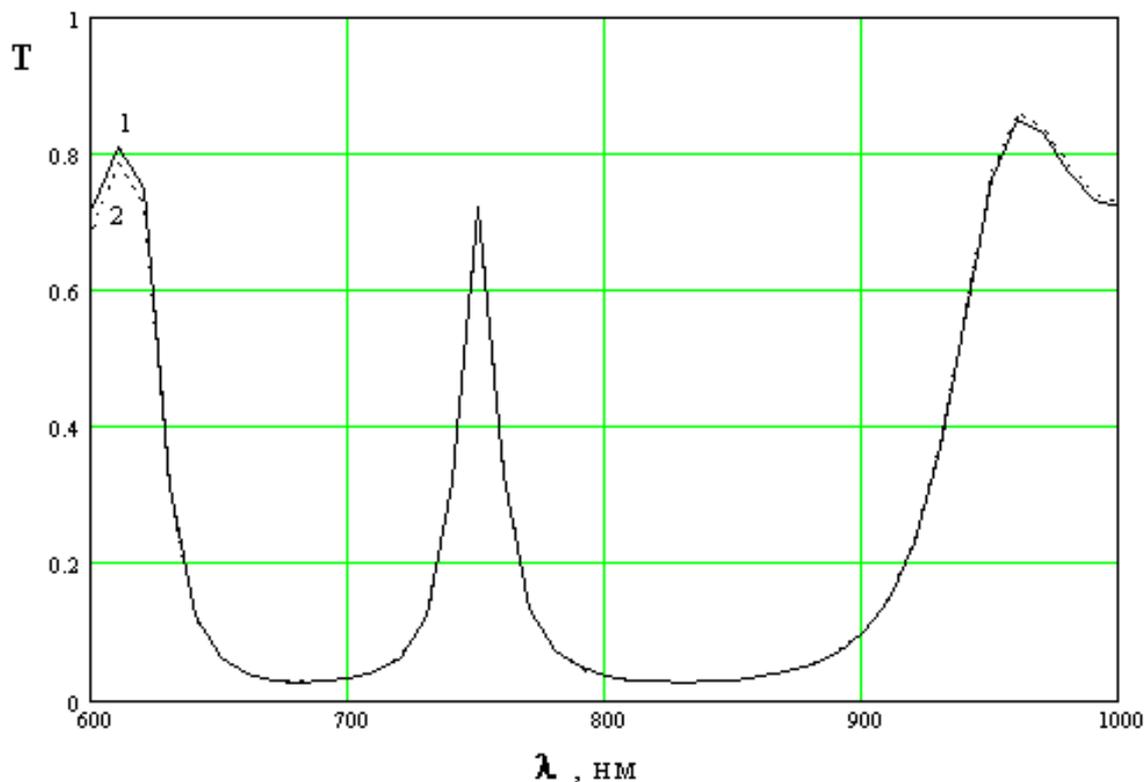


Рисунок 3.16. Криві показника пропускання 17-шарового вузькосмугового фільтра типу S-ВНВ..2В..ВНВ для підкладки CdP_2 без врахування дисперсії (крива 1) та з врахуванням дисперсії (крива 2)

Вплив дисперсії показника заломлення підкладки з матеріалу CdP_2 на спектральні характеристики відрізаючого фільтра типу S-ВНВ..ВНВ, вузькосмугового фільтра типу S-ВНВ..2В..ВНВ та широкосмугового фільтра типу S-2ВН2В..2ВН2В виявився дуже незначним. Особливу увагу було приділено вузькосмуговим фільтрам типу S-ВНВ..2В..ВНВ (рис. 3.16), оскільки для них важливим є будь-яке відхилення довжини хвилі в точці максимуму. Як бачимо з рисунка 3.16, криві показника пропускання вузькосмугового фільтра збігаються практично всюди, крім несуттєвих для цього фільтра кінців.

Дослідження впливу дисперсії показника заломлення підкладки при оптимізації параметрів оптичних багатошарових структур розглядалися на прикладі двох оптичних фільтрів – дев'ятишарового двокомпонентного широкосмугового та чотиришарового широкосмугового (рис. 3.16–3.17). Причому оптимізація параметрів дев'ятишарового двокомпонентного широкосмугового фільтра полягала

в оптимальному підборі геометричних товщин при фіксованих значеннях почергових двох показників заломлення шарів $n_H = 1.45$ та $n_B = 2.1$.

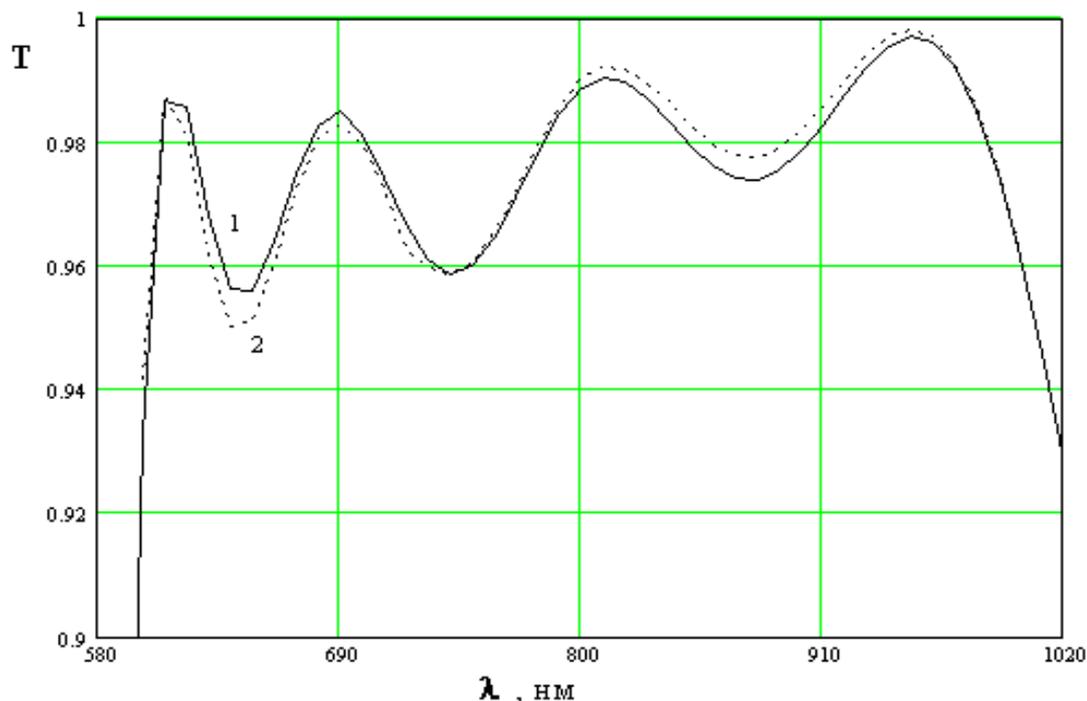


Рисунок 3.16. Криві показника пропускання дев'ятишарового двокомпонентного широкопasmового фільтра для підкладки CdP_2 без врахування дисперсії (крива 1) та з врахуванням дисперсії (крива 2)

Оптимізація параметрів чотиришарового широкопasmового фільтра полягала в оптимальному підборі як геометричних товщин, так і показників заломлення. Для цього також потрібно знати, що реальні найбільш поширені матеріали в цьому спектральному діапазоні 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. Також було відомо, що для оптимізації параметрів чотиришарового широкопasmового фільтра доцільно використовувати r -алгоритм Шора, який виявився досить ефективним за критеріями надійності і швидкодії. Оптимальні параметри для цих фільтрів наведено в таблиці 3.16.

Таблиця 3.16

Оптичні фільтри	Чотиришаровий широкопasmовий				Дев'ятишаровий двокомпонентний широкопasmовий									
	Шари	1	2	3	4	1	2	3	4	5	6	7	8	9
n_i	2.10	1.45	2.10	1.35	1.45	2.10	1.45	2.10	1.45	2.10	1.45	2.10	1.45	2.10
d_i , нм	77	207	166	134	50	50	103	213	79	52	50	247	138	

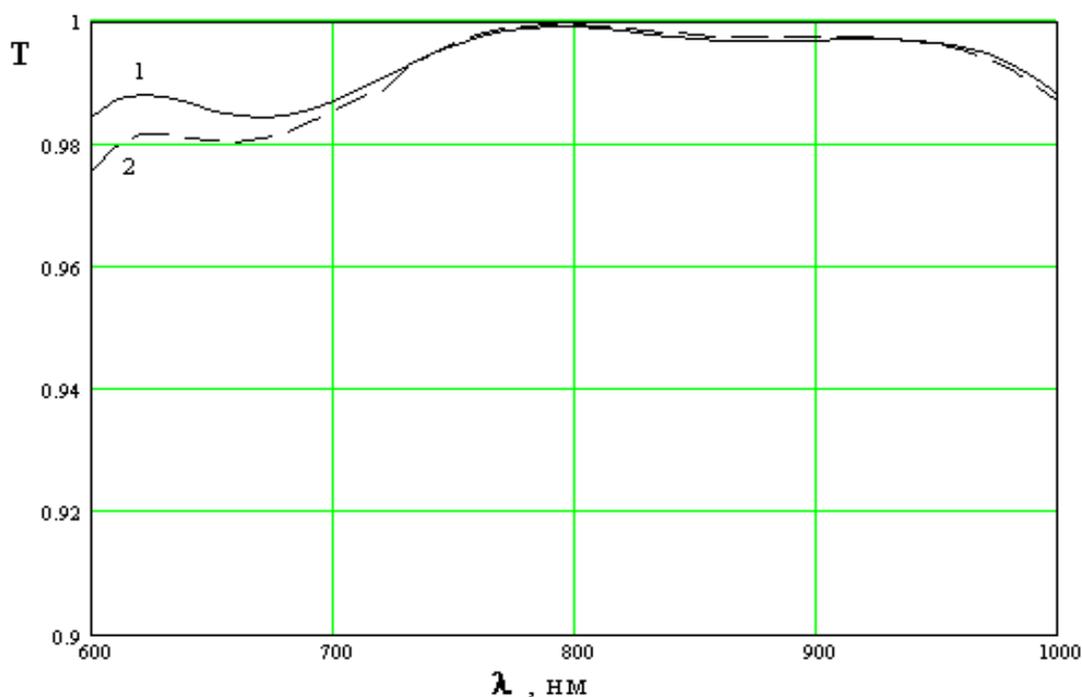


Рисунок 3.17. Криві показника пропускання чотиришарового широкопasmового фільтра для підкладки CdP_2 без врахування дисперсії (крива 1) та з врахуванням дисперсії (крива 2)

При оптимізації параметрів оптичних багатошарових структур вплив дисперсії виявився відчутним, і це переважно пояснюється наявністю тонких шарів, яких немає в попередніх структурах. Тому відхилення кривих показника пропускання оптичних фільтрів для підкладки з врахуванням і без врахування дисперсії на деяких ділянках спектру досягає 0.5-1%. Це дає можливість стверджувати про необхідність врахування дисперсії при оптимізації параметрів оптичних багатошарових структур [16].

3.3. Використання методу Монте-Карло для дослідження впливу похибок параметрів шарів оптичних фільтрів на стійкість їх спектральних характеристик

Мета виконання аналізу стійкості – отримання інформації про розсіювання спектральних характеристик, що виникають при варіаціях параметрів шарів. Як правило, при виготовленні оптичного покриття вдається лише з певною точністю отримати обчислені значення показників заломлення і товщини шарів. Тому дуже важливо оцінити, при якому відхиленні цих значень характеристики покриття виявляються нечутливими або малочутливими до відхилень параметрів шарів від номінальних значень. У такому разі при промисловому виробництві більш надійно можна отримувати вироби з характеристиками, які були закладені в них при проектуванні. Якщо ж якась характеристика покриття виявляється дуже чутливою до зміни деяких параметрів, то слід ретельніше дослідити її стійкість. Крім розв'язання основної задачі аналізу стійкості, пов'язаної з оцінкою чутливості спектральних характеристик покриття до збурень параметрів шарів, аналіз стійкості дозволяє оцінити чутливість характеристик при зміні параметрів навколишніх середовищ [17], а також полегшує внесення необхідних коректив у структуру покриття, що проектується.

Усю сукупність факторів, що впливають на характеристики покриття, можна розділити на дві групи [18]. До першої групи належать фактори, пов'язані з нестабільністю процесу виготовлення шарів покриття. Нестабільність процесу виготовлення покриття є наслідком поганого контролю таких технологічних параметрів, як температура нагріву підкладок, тиск залишкових газів у напилюючій камері, швидкість випаровування і конденсації плівкового матеріалу та ін. У свою чергу, це може призвести до зміни дисперсійної залежності показника заломлення одержуваних шарів при появі неоднорідності. Вплив цієї групи факторів, у принципі, може бути враховано в рамках описаної математичної моделі покриття. При цьому аналіз стійкості характеристик покриття виконується шляхом багаторазового розв'язання прямої задачі з використанням моделей різної

точності. До другої групи належать фактори, пов'язані з контролем параметрів шарів, насамперед їх товщини, у процесі виготовлення покриття. Ця частина проблеми розв'язується за допомогою комп'ютерного моделювання процесу контролю товщини шарів [19]. У ході моделювання вдається врахувати помилки у визначенні товщини шарів, обумовлені обмеженою чутливістю використовуваної контрольної-вимірювальної апаратури, оцінити допуски і вибрати раціональний спосіб контролю. Це дозволяє звести до мінімуму можливі експериментальні помилки і тим самим скоротити шлях від розрахунку конструкції покриття до її практичної реалізації.

Найпростішим варіантом зробити оцінку стійкості спектральних характеристик до можливих похибок параметрів шарів можна, знаючи значення функції якості покриття $F(x)$, за формулою [20]:

$$\Delta F = \sum_{j=1}^{2N} \Delta x_j \frac{\partial F(x_j^0)}{\partial x_j},$$

де N – кількість шарів, x_j^0 та Δx_j – номінальне значення та похибка j -го параметру.

Тоді оцінити степінь розсіювання спектральних характеристик можна за величиною ΔF . Характер розподілу помилок, що виникають при визначенні товщини шарів багат шарових покриттів, у вирішальній мірі залежить від методу контролю, використовуваного при виготовленні покриття. Якщо ж помилки у визначенні товщини шару великі й аналіз за допомогою часткових похідних не дає адекватних результатів, то оцінка розсіювання спектральних характеристик багат шарового оптичного покриття проводиться за допомогою методу Монте-Карло.

Розглянемо загальну схему роботи методу Монте-Карло [17], [21]-[28] і застосуємо його для визначення стійкості спектральних характеристик широкопалочових просвітлюючих покриттів. Відзначимо, що при дослідженні бралось за основу припущення, що похибка параметрів шарів має нормальний розподіл.



Рисунок 3.18. Блок-схема роботи методу Монте-Карло при дослідженні чутливості параметрів шарів оптичних структур до похибок

Розглянемо покрокову роботу наведеного методу (рис. 3.18). На першому кроці вводиться необхідна інформація про багатошарову оптичну систему. Це N –

кількість шарів, n_j та d_j – значення показника заломлення та геометричної товщини j -го шару, а також k – кількість проведених обчислювальних експериментів.

Спектральні характеристики будемо знаходити за допомогою формул (1.27-1.29). Функцією якості покриття було вибрано середньозважене відхилення за сумою модулів

$$F(\vec{n}, \vec{d}) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L |1 - T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_i)|, \quad (3.4)$$

де $\vec{n} = (n_1, n_2, \dots, n_N)$ та $\vec{d} = (d_1, d_2, \dots, d_N)$ – вектори параметрів шарів, $[\lambda_1, \lambda_2]$ – розглядуваний спектральний діапазон, L – число точок сітки спектрального інтервалу від λ_1 до λ_2 . Саме ця функція була використана як функція якості покриття при розв'язанні задач синтезу оптичних покриттів, які описані в розділі 5.5.

На другому кроці встановлюється, що розглядається перший шар і номер досліду рівний 1. На третьому кроці відбувається генерація випадкового числа. Нормальний закон розподілу можна отримати, узявши за основу центральну граничну теорему. Сума n незалежних однаково розподілених випадкових величин з математичним сподіванням M і дисперсією σ розподілена асимптотично нормально при $n \rightarrow \infty$ з математичним сподіванням nM та дисперсією $n\sigma$. На четвертому кроці значення параметру шару виражається через отримане за нормальним розподілом випадкове число. Воно змасштабоване таким чином, що для показника заломлення буде знаходитись у межах $[n_j - 0.05, n_j + 0.05]$, а для геометричної товщини – у межах $[d_j - 2, d_j + 2]$. На п'ятому кроці розраховуються коефіцієнти пропускання при новому значенні зміненого параметру в кожній точці сітки спектрального інтервалу й обчислюється відповідне значення функції якості покриття $F_i(x)$, де i – номер досліду. На шостому кроці додаємо до сум обчислені значення $F_i(x)$

$$\sum_i F_i, \quad \sum_i F_i^2,$$

які в кінці використаємо для знаходження математичного сподівання та дисперсії. На сьомому кроці перевіряється умова виконання запланованого числа дослідів.

Якщо ця умова виконується, то обчислюються числові характеристики розподілу функції якості:

$$M = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k F_i(x);$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{k-1} \left(\sum_{i=1}^k F_i^2(x) - kM^2 \right)},$$

де M і σ – математичне очікування і дисперсія випадкової величини $F_i(x)$.

На восьмому кроці здійснюється перехід до наступного параметру. На дев'ятому кроці перевіряється умова закінчення обчислювального процесу.

Визначимо найбільш чутливі параметри для ширококутових просвітлюючих покриттів типу S-2ВН2В...2ВН2В при робочій довжині хвилі $\lambda_0=580$ нм. Розглядався спектральний діапазон від 480 до 720 нм, на якому саме при цій довжині хвилі значення коефіцієнтів пропускання є максимально високим [29].

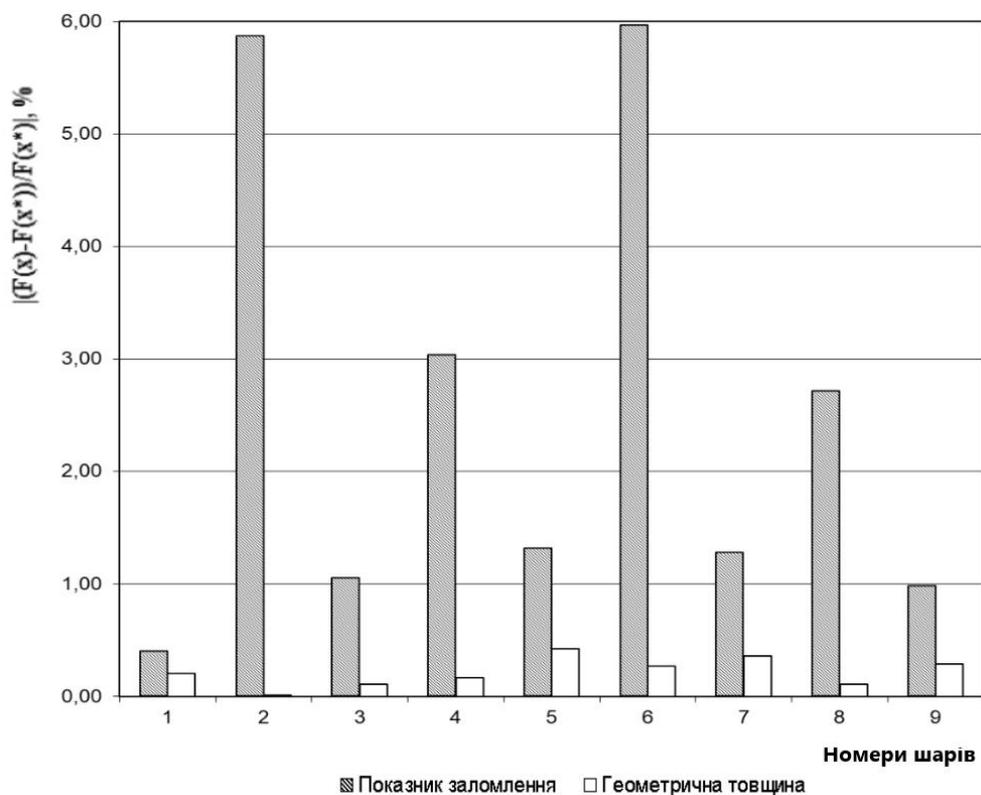


Рисунок 3.19. Діаграма розсіювання функції якості покриття для 9-шарового ширококутового фільтра

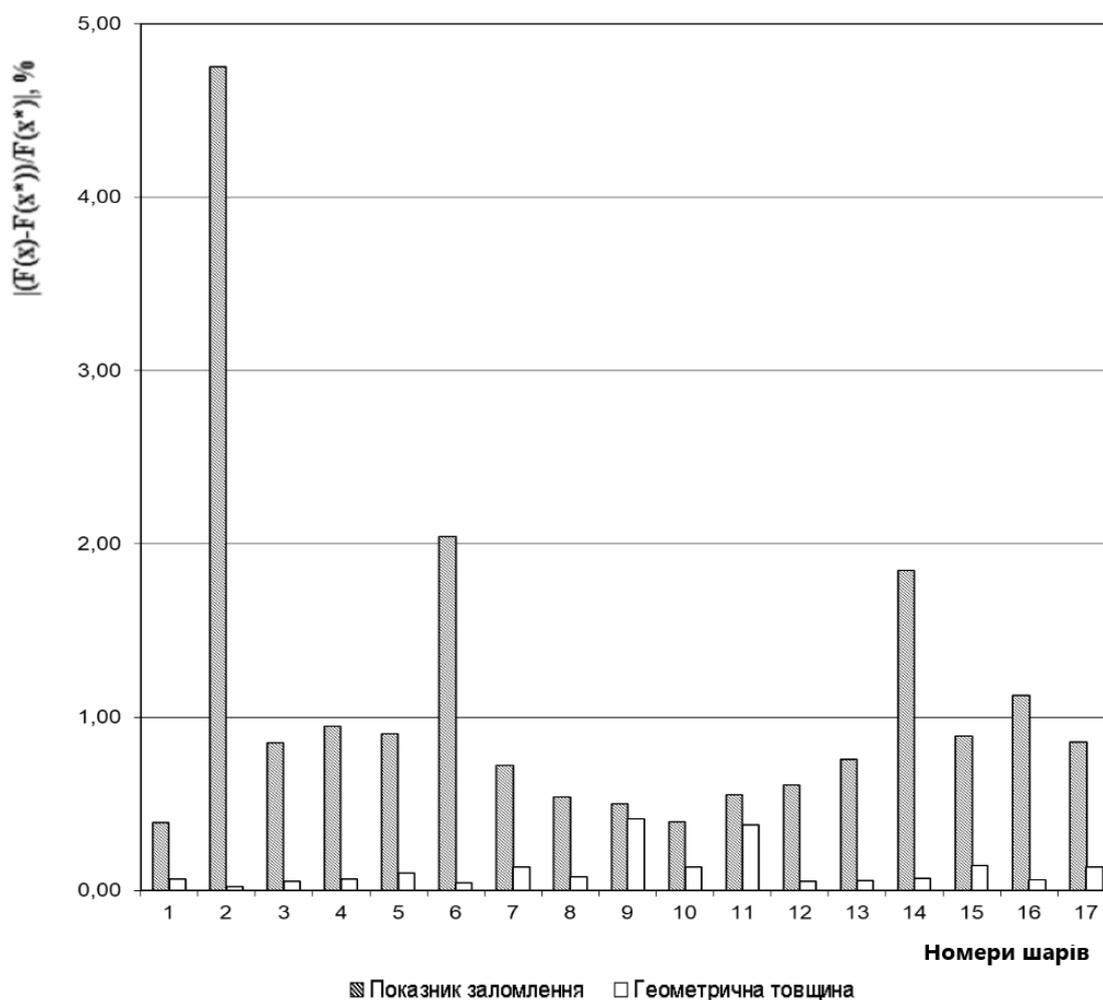


Рисунок 3.20. Діаграма розсіювання функції якості покриття для 17-шарового широкосмугового фільтра

На рисунку 3.19 показана діаграма розсіювання функції якості покриття для 9-шарового широкосмугового просвітлюючого покриття типу S-2ВН2В...2ВН2В. Як бачимо, найбільш чутливими виявились показники заломлення парних шарів, які рівні 1.35. Особливо виділяються другий та шостий, діапазон розсіювання функції якості покриття для яких сягає практично 6%. Натомість вплив технологічних похибок товщин шарів на спектральні характеристик є досить несуттєвим щодо впливу можливих похибок показників заломлення.

На рисунку 3.20 розглянуто вже 17-шарову структуру [30]. І знову бачимо, що чутливість спектральних характеристик до похибок показників заломлення є вищою, ніж до геометричних товщин шарів. Але варто відзначити дев'ятий та одинадцятий шари, діапазон розсіювання функції якості покриття для яких при

варіації товщин плівки має суттєво вищі значення, ніж для інших шарів. Знову ж дуже чутливим до похибок є показник заломлення другого шару.

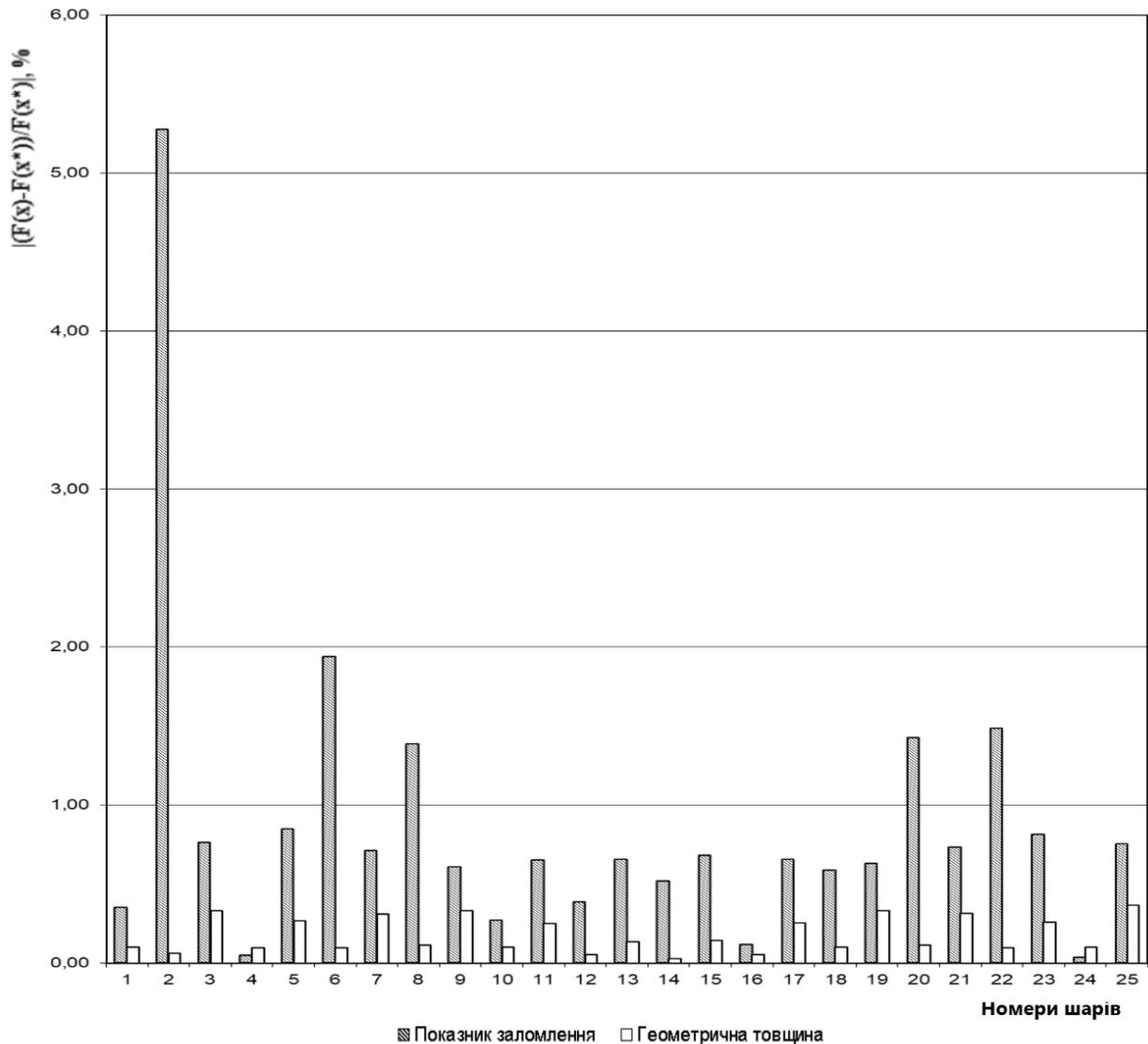


Рисунок 3.21. Діаграма розсіювання функції якості покриття для 25-шарового широкопугового фільтра

Збільшуючи кількість шарів для широкопугового фільтра типу S-2ВН2В...2ВН2В до двадцяти п'яти, можна прослідкувати подальшу тенденцію [31]. Знову ж діапазон розсіювання функції якості покриття суттєво є більшим для того ж параметру, що й для 9- і 17-шарових широкопугових фільтрів, – показника заломлення другого шару (рис. 3.21). Це значення більше за 5%, що у два і більше разів перевищує відповідні показники інших параметрів.

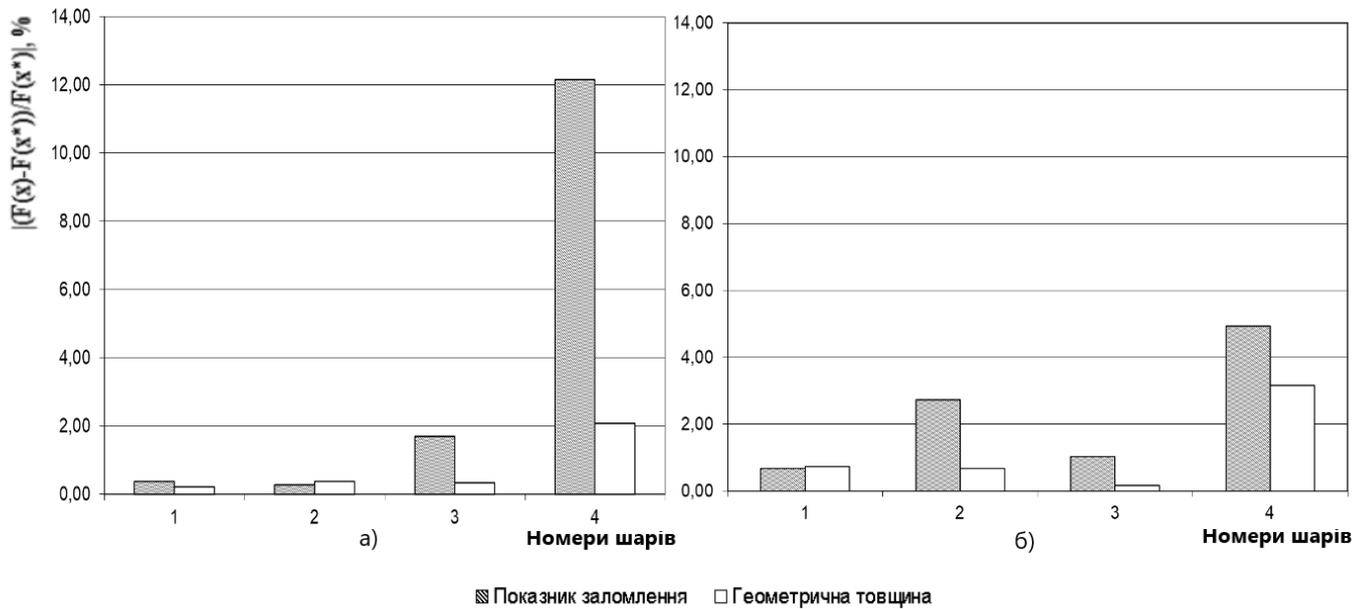


Рисунок 3.22. Діаграми розсіювання функції якості покриття для широкосмугового фільтра при просвітленні підкладинки з показником заломлення $n_s=1.51$: 1 – з параметрами $6.58 \cdot n_1 d_1 = 4.06 \cdot n_2 d_2 = 0.441 \cdot n_3 d_3 = 0.944 \cdot n_4 d_4 = 0.25 \cdot \lambda_0$, $n_1=2.1$, $n_2=1.35$, $n_3=1.9$, $n_4=1.35$; 2 – з параметрами $3.76 \cdot n_1 d_1 = 3.76 \cdot n_2 d_2 = 0.455 \cdot n_3 d_3 = n_4 d_4 = 0.25 \cdot \lambda_0$, $n_1=2.0$, $n_2=1.37$, $n_3=2.0$, $n_4=1.37$.

Проведемо дослідження впливу технологічних похибок на спектральні характеристики спроектованих у розділі 5.5 оптичних структур за допомогою методу Монте-Карло. Порівняємо ці значення з відомими аналогами.

На рисунку 3.22 наведено діаграми розсіювання функції якості покриття для двох оптичних структур – спроектованої в роботі (рис. 3.22 а) та взятої з [32] (рис. 3.22 б). Як бачимо, у спроектованій оптичній структурі дуже чутливим до похибок є верхній – 4-й шар, показник заломлення якого рівний 1.35. Діапазон розсіювання функції якості покриття для показника заломлення перевищує 12%. Відповідно, якщо не можна забезпечити високу якість осадження останнього шару, то для промислового виробництва він може бути непридатним.

Зауважимо, що значення діапазон розсіювання функції якості покриття для розглядуваних чотиришарових структур є суттєво більшими, ніж у попередньо досліджених широкосмугових фільтрів типу S-2ВН2В...2ВН2В. Це пояснюється тим, що попри те, що спектральний діапазон останніх є вужчим, значення функції якості покриття (3.4) на ній є суттєво більшим. Відповідно, однакова зміна значення

функції якості покриття по-різному впливає діапазон розсіювання. Значення функції якості покриття (3.4) для 9-шарового широкопasmового фільтра рівне $F = 0.040708$, для 17-шарового – $F = 0.046302$, а для 25-шарового – $F = 0.049401$. Значення функції якості покриття (3.4) для спроектованого в роботі оптичного покриття рівне $F = 0.002389$, а для взятого з [32] – $F = 0.004002$.

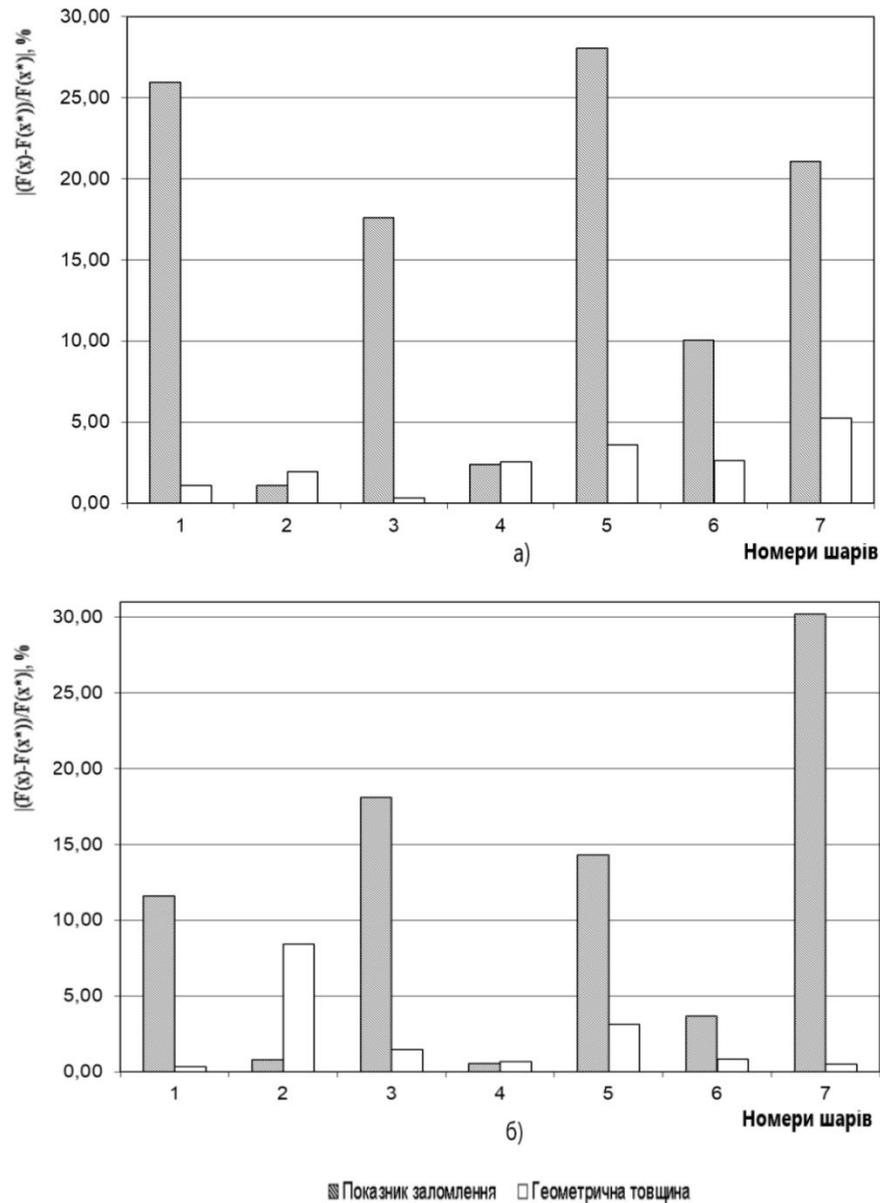


Рисунок 3.23. Діаграми розсіювання функції якості покриття для 7-шаровою структурою з шарами, що чергуються, (1.35 та 2.1) при просвітленні підкладки з показником заломлення $n_s=1.52$: 1 – оптичні товщини шарів відносно λ_0 становлять $0.087 : 0.03 : 0.315 : 0.043 : 0.113 : 0.48 : 0.22$; 2 – оптичні товщини шарів відносно λ_0 становлять $0.064 : 0.038 : 0.401 : 0.032 : 0.084 : 0.459 : 0.229$.

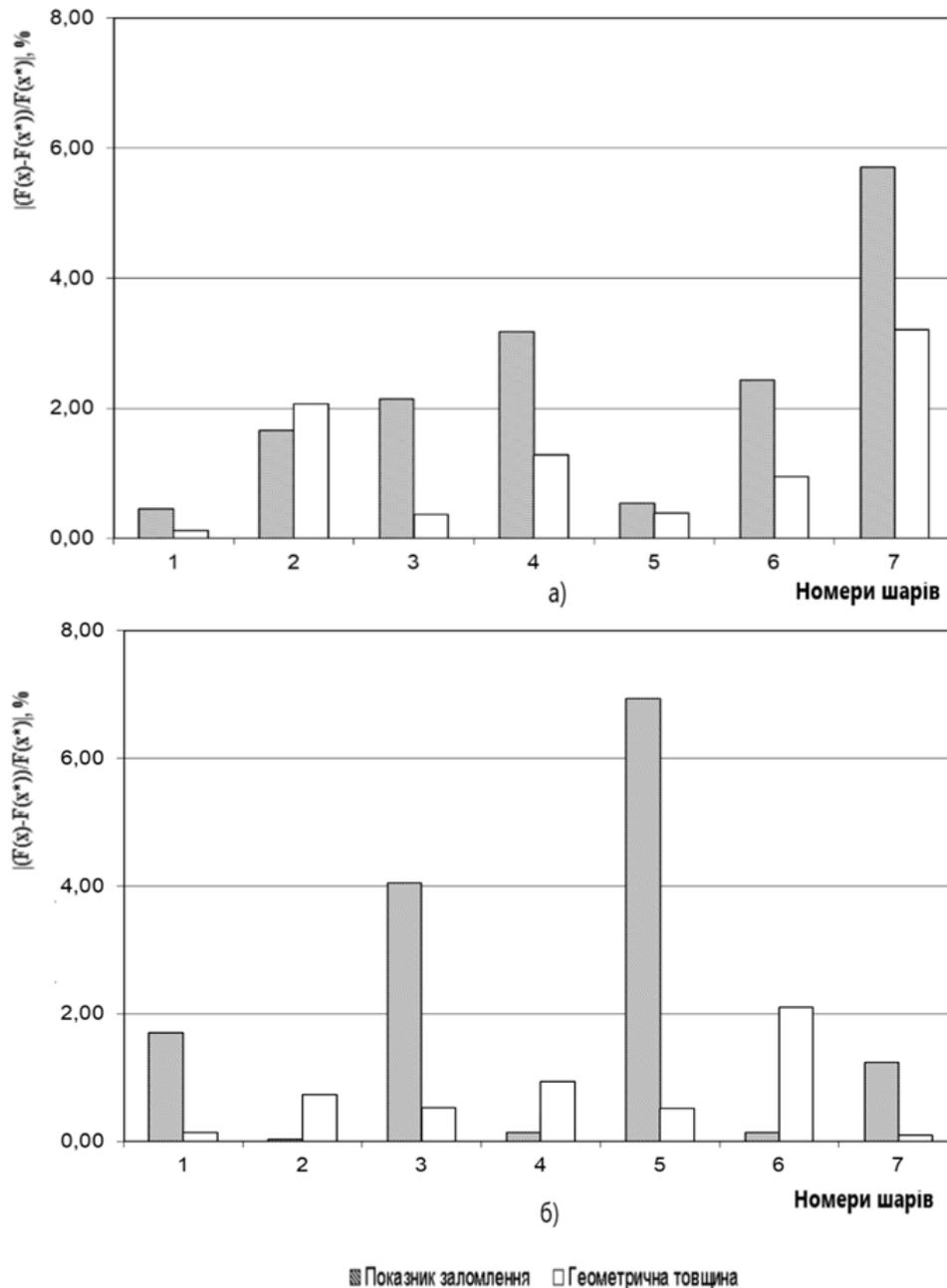


Рисунок 3.24. Діаграми розсіювання функції якості покриття для 7-шаровою структурою з шарами, що чергуються, (1.35 та 2.1) при просвітленні підкладки з показником заломлення $n_s=1.52$: 1 – оптичні товщини шарів відносно λ_0 становлять 0.05 : 0.071 : 0.062 : 0.257 : 0.018 : 0.12 : 0.2; 2 – оптичні товщини шарів відносно λ_0 становлять 0.06 : 0.02 : 0.35 : 0.02 : 0.07 : 0.42 : 0.21.

Діаграми розсіювання функції якості покриття для двох оптичних структур – спроектованої в роботі (рис. 3.23 а) та взятої з [33] (рис. 3.23 б). Значення функції якості покриття (3.4) для спроектованого в роботі оптичного покриття рівне $F = 0.001077$, а для взятого з [33] – $F = 0.002209$. Коefіцієнт пропускання обох

оптичних структур на всьому спектральному діапазоні є близьким до 1. Відповідно, функція якості покриття дуже чутлива до незначних змін у значеннях параметрів. Тому діапазон розсіювання цільової функції показників заломлення першого та п'ятого шарів першого оптичного покриття перевищує 25%, а показника заломлення сьомого шару другого оптичного покриття – перевищує 30%. Зауважимо, що спектральні характеристики є найбільш чутливими до похибок показників заломлення низькозаломлюючих шарів, якими є шари з непарними номерами (рис. 3.23).

Розглянемо діаграми розсіювання функції якості покриття ще двох оптичних структур – спроектованої в роботі (рис. 3.24 а) та взятої з [34] (рис. 3.24 б). Значення функції якості покриття (3.4) для спроектованого в роботі оптичного покриття рівне $F = 0.001589$, а для взятого з [34] – $F = 0.003168$. Вони також просвітлюють видимий спектральний діапазон від 450 до 750 нм. Функція якості покриття для них приймає більше значення, ніж для попередніх розглядуваних оптичних покриттів. Тому значення діапазону розсіювання для них є меншим. Спектральні характеристики найбільш чутливими виявилися до похибок показника заломлення сьомого шару першого покриття (діапазон розсіювання цільової функції практично рівний 6 %) та до похибок показника заломлення п'ятого шару другого покриття (діапазон розсіювання цільової функції практично рівний 7 %). Зауважимо, що значення показників заломлення обох шарів є рівним 1.35.

Підсумовуючи, можна сказати, що чутливість спектральних характеристик до похибок геометричної товщини є, як правило, меншою, ніж до похибок показників заломлення. Для всіх розглянутих оптичних фільтрів найбільший діапазон розсіювання цільової функції був для низькозаломлюючих показників заломлення. Для 9-, 17- та 25-шарових ширококутових фільтрів особливо чутливим до похибок виявився низькозаломлюючий показник заломлення другого шару.

Виділимо дві проблеми, які пов'язані з методом Монте-Карло. Перша – те, що статистична похибка оцінок M і σ зменшується дуже повільно, обернено пропорційно до квадратного кореня із кількості дослідів. Тому потрібно проводити велику кількість дослідів. Друга проблема пов'язана із законом розподілу похибок.

У роботі був вибраний нормальний закон. Але він може бути неоднаковим для різних виробництв. Передусім це стосується показників заломлення шарів, значення яких залежать від багатьох технологічних параметрів, таких як температура нагріву–підігріву підкладинок, швидкість випаровування й конденсації, залишковий тиск газу в напилювальній камері, наявність або відсутність окислювального середовища, чистота використовуваної сировини та інших, між якими є кореляційний зв'язок.

Висновки до розділу 3

1. За певних технологічних умов у шарах просвітлюючих покриттів з'являються нанодфекти, які призводять до відхилення спектральних характеристик реальних структур від необхідних за технологією. Для чисельних оцінок впливу параметрів дефектів на рівень пропускання БШС запропонована модель структури дефектного шару, за якою було встановлено взаємозв'язок між геометричними й оптичними товщинами суміжних шарів залежно від параметрів дефектів – їхньої природи, розмірів і положень щодо границь розділу дефектного шару й суміжних середовищ.

Встановлено, що максимуми пропускання оптичних елементів з реальними дефектними покриттями знижуються зі зростанням показників заломлення речовин дефектів, а їхнє спектральне положення й форма кривих істотно залежать від розмірів дефектів уздовж напрямку поширення світла та їхнього 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%.

2. Описано дві моделі, які дозволяють апроксимувати дисперсію показника заломлення. Показано, що при апроксимації експериментальних даних матеріалів CdP_2 , As_2S_3 , As_2S_5 та As_2Se_3 для моделі Зельмеєра коефіцієнт детермінації буде становити 0.999, що вказує на дуже високу його

ефективність. При оптимізації параметрів оптичних багатошарових структур вплив дисперсії виявився відчутним, і це переважно пояснюється наявністю тонких шарів, яких немає в попередніх структурах. Тому відхилення кривих показника пропускання оптичних фільтрів для підкладки з врахуванням і без врахування дисперсії на деяких ділянках спектру досягає 0.5-1%. А при розгляді класичних оптичних багатошарових структур, таких як відрізаючий фільтр типу S-VNB..VNB, вузькосмуговий фільтр типу S-VNB..2V..VNB та широкосмуговий фільтр типу S-2VN2V..2VN2V, вплив дисперсії виявився несуттєвим.

3. Описано застосування методу Монте-Карло для дослідження стійкості спектральних характеристик різних просвітлюючих фільтрів. Вважалося, що характер похибки при технологічному осадженні плівок має нормальний розподіл. Для широкосмугових фільтрів типу S-2VN2V..2VN2V було показано, що спектральні характеристики є найбільш чутливі до похибок показників заломлення низькозаломлюючих шарів. 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.

Література до розділу 3

1. Бернинг П. Х. Теория и методы расчета оптических свойств, тонких пленок *Физика тонких пленок* / Пер. с англ. под ред. М. И Елинсона и В.Б. Сандомирского. М.: Мир, 1967. Т. 1. С. 91-151.
2. 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.

3. 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.
4. Fekeshgazi I., Borsh V., Koval V., Paterevich V. Byreflection and optical activity of CdP_2 . *Physical status solidy*. 1977. V. 44. P. 15–19.
5. Fekeshgazi, I., Vlasenko, Y., Ivan, S., Mitsa, A., Trukhan, V., Sheleg, A. Applied aspects of the nonlinear absorption and gyrotropy of CdP_2 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.
6. Григорьев Ф. В., Сулимов В. Б., Тихонравов А. В. Влияние наночастиц на структуру напыляемой тонкой пленки: результаты атомистического моделирования. *Вычислительные методы программирования*. 19:2. 2018. С. 173–177.
7. Мица 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.
8. Фекешгазі І.В., Власенко Ю.В., Слипухина І.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.
9. 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_2 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.
10. Фекешгазі І.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.
11. Фекешгазі І., Сіденко Т., Міца О., Трухан В., Шелег А. Нелінійна поляризованість та гіротропія кристалів дифосфіда кадмію. *Всеукраїнський з'їзд “Фізика в Україні”*. Одеса, 2005. С. 186–187.
 12. Фекешгазі І.В., Сіденко Т.С., Міца 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.
 13. Росола І. Й., Чобаль О. І., Різак В. М. Вплив температури на дисперсію показника заломлення стекол As_xS_{1-x} . *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика*. 2019. №46. С. 30-39.
 14. Росола І.Й., Чобаль О.І., Халус А.М., Різак В.М. Вплив технологічного модифікування на рефрактометричні властивості склоподібного As_2S_5 . *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика*. 2016. №40. С. 98-103.
 15. Todorov, Rossen; Tasseva, Jordanka; Babeva, Tsvetanka. Thin chalcogenide films for photonic applications. *Photonic Crystals–Innovative Systems, Lasers and Waveguides, Intech, Croatia*, 2012, 143.
 16. 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.
 17. Яковлев П.П., Мешков Б.Б. Проектирование интерференционных покрытий. М.: Машиностроение, 1987. 192 с.
 18. Батищев Д. И. Методы проектирования. М.: Сов. Радио, 1975. 216 с.
 19. Kochikov I. V., Lagutin Yu. S., Lagutina A.A., Lukyanenko D.V., Tikhonravov A.V., Yagola A.G. Raising the accuracy of monitoring the optical coating

- deposition by application of a nonlocal algorithm of data analysis. *J. Appl. Industr. Math.* 14:2. 2020. P. 329–333.
20. Тихонравов А.В., Кочиков И.В., Матвиенко И.А., Исаев Т.Ф., Лукьяненко Д.В., Шарапова С.А., Ягола А.Г. Корреляция ошибок при напылении оптических покрытий с широкополосным оптическим контролем. *Вычислительные методы программирования.* 19:4. 2018. С. 439–448.
21. Binder K. Monte Carlo methods in statistical physics. Berlin, 1986. 411 P.
22. Ермаков С.М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. М.: Наука, 1971. 372 С.
23. Замалин В.М., Норман Г.Э., Филинов В.С. Метод Монте-Карло в статистической термодинамике. М.: Наука, 1977. 228 С.
24. Соболев И.М. Метод Монте-Карло. М.: Наука, 1972. 64 С.
25. Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973. 311 С.
26. 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...ВНВ. *Міжнародна школа-семінар “Теорія прийняття рішень”*. Ужгород, 2008. С. 89.
27. 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.
28. Міца 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, 2014. С. 195.
29. Міца 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.
30. Міца О.В., Матяшовська Б.О., Шумило Н.Я. Дослідження чутливості спектральних характеристик широкосмугових інтерференційних фільтрів типу S-2ВН2В...2ВН2В до технологічних похибок за допомогою методу Монте-Карло. *Міжнародна школа-семінар "Теорія прийняття рішень"*. Ужгород, 2010. С. 154-155.
31. 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.
32. Просветляющее интерференционное покрытие: А.с. 1083144 СССР, МКИ G 02 В 5/28; G 02 В 1/10. Б.И. Агафонов, М.Ф. Васильева, А.С. Герчиков, Е.А. Федин, П.П. Яковлев (СССР). № 3420182/18–10; Заявлено 12.04.82; Опубл. 30.03.84, Бюл. №12. 3 с.
33. Широкополосное просветляющее покрытие: А.с. 934429 СССР, МКИ G 02 В 5/28. В.Д. Веденский и Е.Г. Столов (СССР). № 2809841/18–10; Заявлено 09.07.79; Опубл. 07.06.82, Бюл. №21. 3 с.
34. Интерференционное ахроматическое просветляющее покрытие: А.с. 838629 СССР, МКИ G 02 В 5/28. В.Д. Веденский, Е.Г. Столов, А.А. Метельников, Ш.А. Фурман и Е.Г. Семин (СССР). № 2822915/18–10; Заявлено 15.10.79; Опубл. 15.06.81, Бюл. №22. 3 с.

РОЗДІЛ 4

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВПЛИВУ НЕОДНОРІДНОСТЕЙ НА СПЕКТРАЛЬНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ РІЗНИХ ОПТИЧНИХ ФІЛЬТРІВ ПРИ ПАДІННІ СВІТЛА ПІД КУТОМ

У розділі досліджується вплив неоднорідностей на межах розділу на просторово-поляризаційні параметри спектральних характеристик вузькосмугових, відрізаючих та широкосмугових оптичних фільтрів при падінні світла під кутом. У підрозділі 4.1 наведено необхідні теоретичні відомості. 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, у підрозділі 4.3 такі ж дослідження проведено для відрізаючих фільтрів, а в підрозділі 4.4 – для широкосмугових фільтрів.

4.1. Вступні зауваження

Вивчення основних залежностей просторово-поляризаційних параметрів від поляризації та кута падіння дозволяє розглядати задачу аналізу оптичних шаруватих покриттів на основі типових складів нового класу матеріалів – халькогенідних плівок, що використовуються при створенні шаруватих структур в халькогенідній фотоніці. Ефекти, які виникають в спектрах шаруватих структур на основі оксидних матеріалів, нанесених на поверхню сонячних елементів та низькозаломлюючих підкладинок при падінні світла під кутом і зміні поляризації описані в [1-8]. Моделювання впливу неоднорідностей на спектральні характеристики вузькосмугових, відрізаючих та широкосмугових оптичних фільтрів при падінні світла під кутом розглянуто в [9-15]. Варіанти фільтрів різного типу на основі оксидних шарів, які конструювали і виготовляли в Україні приведені в [16-19].

Під час падіння під кутом світло розкладається на дві хвилі, які мають відповідно *s*- та *p*-поляризації. Відповідно, усі обчислення повинні проводитись окремо для кожної з поляризацій. Розглянемо теоретичні відомості знаходження

спектральних характеристик при падінні світла під кутом при заданих параметрах N -шарового покриття.

Характеристичну матрицю N -шарової структури 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, θ_j) – показник заломлення, геометрична товщина та кут падіння, які характеризують j -ий шар, λ – довжина хвилі.

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

– для s -поляризації

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

– для p -поляризації

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

де θ_j – кут між променем і нормаллю до площини падіння (рис. 4.1), $i = \sqrt{-1}$. Співвідношення між кутами суміжних середовищ пов'язані законом Снеліуса $n_{j+1} \sin \theta_{j+1} = n_j \sin \theta_j$.

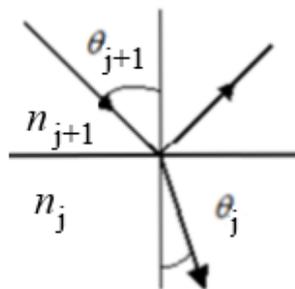


Рис. 4.1. Заломлення світла на межі двох середовищ

Значення коефіцієнта пропускання при падінні світла на багат шарову оптичну структуру під кутом θ_0 при показниках заломлення зовнішнього середовища n_0 та підкладинки n_s для довжини хвилі λ обчислюється окремо для s - та p -поляризацій:

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

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).

У наступних підрозділах використаємо ці формули для знаходження основних залежностей просторово-поляризаційних параметрів спектральних характеристик вузькосмугових, відрізаючих та широкосмугових оптичних фільтрів від поляризації та кута падіння.

4.2. Математичне моделювання впливу неоднорідностей на межах розділу на спектральні характеристики вузькосмугових оптичних фільтрів при падінні світла під кутом

У цьому підрозділі розглянемо такі параметри вузькосмугових фільтрів, як довжина хвилі в положенні максимуму пропускання – λ_{max} , коли немає неоднорідностей, тобто при ідеальному випадку $\lambda_{max} = \lambda_0$; коефіцієнт максимуму пропускання – T_{max} ; напівширина смуги пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ на рівні 0.5, десятинна ширина $\Delta\lambda_{0.1}$ – на рівні 0.1 та відповідні їм значення довжин хвиль λ_3 і λ_4 та λ_2 і λ_5 ; ширини спектральних інтервалів відбивання $\Delta\lambda_K$ і $\Delta\lambda_D$, у межах яких пропускання нижче 0.1 у короткохвильовій $\Delta\lambda_K$ (відстань між λ_1 та λ_2) та довгохвильовій $\Delta\lambda_D$ (відстань між λ_5 та λ_6) областях.

Розглянемо вузькосмуговий оптичний фільтр, який складається із двох матеріалів: високозаломлюючого – GeS_2 та низькозаломлюючого – 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.

Розглянемо зміни спектрів пропускання вузькосмугових інтерференційних фільтрів зі зміною кута падіння θ_0 для s - та p -поляризацій світлових потоків з робочою довжиною хвилі 630 нм. Розглядалися такі кути падіння: 0° , 15° , 30° , 45° , 60° та 75° [9-12, 16].

Результати обчислювального експерименту наведені для кількості шарів вузькосмугових фільтрів, рівної 25 (табл. 4.1–4.7). Додатково були проведені обчислення для кількостей шарів 33 та 49 для отримання більш узагальнених висновків.

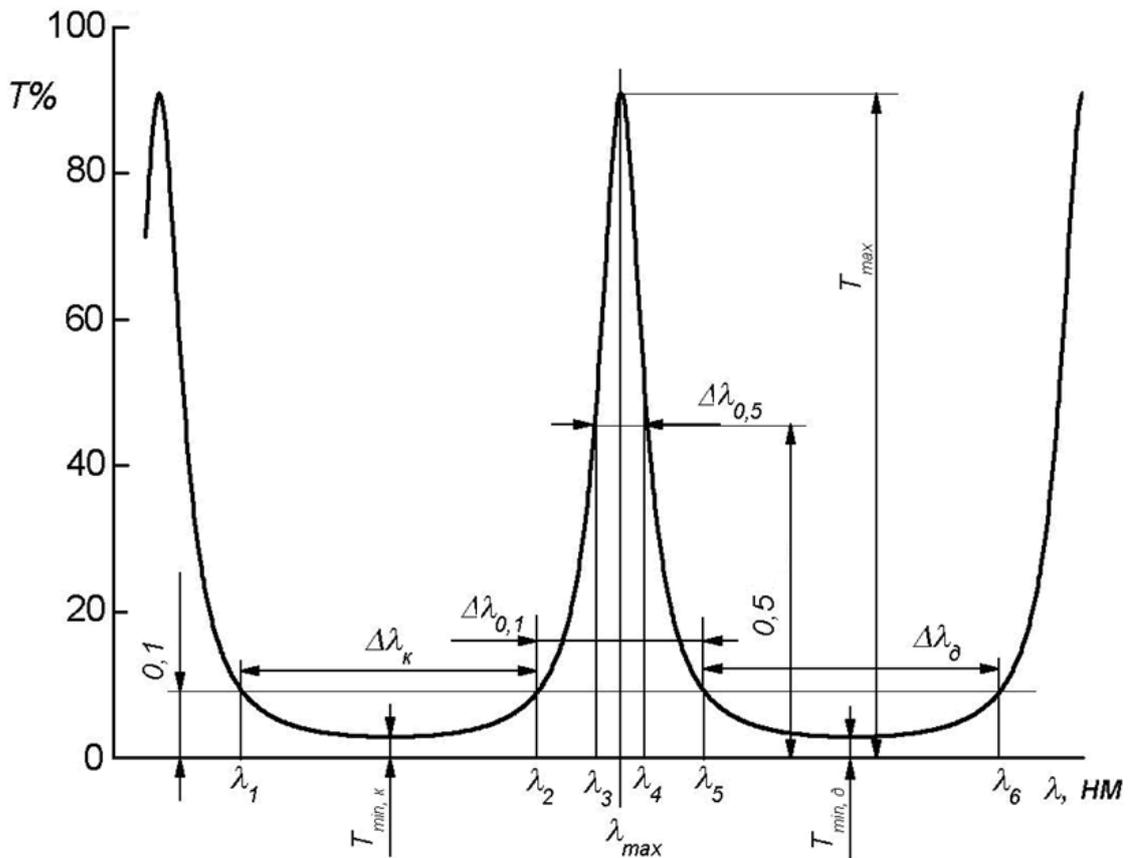


Рис. 4.2. Основні характеристики вузькосмугових оптичних фільтрів

Таблиця 4.1

Зміна параметрів вузькосмугового фільтра для ідеального випадку
при різних кутах падіння

Кути падіння, θ_0	Максимум пропускання T_{\max}	Положення максимуму пропускання λ_{\max} , нм	Напівширина смуги пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$, нм	Десятинна ширина смуги пропускання $\Delta\lambda_{0.1}$, нм	Ширина короткохвильової області відбивання $\Delta\lambda_K$, нм	Ширина довгохвильової області відбивання $\Delta\lambda_D$, нм
0°	0.958715	630	0.29	0.89	104.32	156.53
<i>s</i> -поляризація						
15°	0.954102	623.18	0.24	0.76	105.59	157.13
30°	0.938914	604.28	0.15	0.47	109.36	158.21
45°	0.905318	577.81	0.07	0.21	115.46	160.69
60°	0.810946	550.61	0.03	0.08	122.98	162.48
75°	0.522434	530.25	0.01	0.03	129.77	164.04
<i>p</i> -поляризація						
15°	0.962231	623.13	0.33	1.02	102.35	150.16
30°	0.973833	603.60	0.51	1.55	96.29	132.24
45°	0.991007	574.64	1.05	3.17	85.74	106.16
60°	0.998332	542.10	2.70	8.16	70.49	76.52
75°	0.893818	515.16	7.31	24.66	52.01	44.98

Як видно із таблиці 4.1, для *s*-поляризації значення максимуму пропускання T_{\max} при збільшенні кута падіння світла суттєво зменшується від 0.958715 при падінні під кутом 0° до 0.522434 при $\theta_0 = 75^\circ$. Для *p*-поляризації ця характеристика поводитьсь зовсім по-іншому: спочатку зростає до 1 при збільшенні кута до значення кута Брюстера, а далі спадає до значення 0.893818 при $\theta_0 = 75^\circ$. При цьому значення довжини хвилі в положенні максимуму пропускання λ_{\max} зміщується в область коротких хвиль для обох поляризацій: для *s*-поляризації – від 630 до 530.25 нм, а для *p*-поляризації – від 630 до 515.16 нм.

Наступні чотири характеристики – напівширина смуги пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$, десятинна ширина $\Delta\lambda_{0.1}$, ширини спектральних інтервалів відбивання $\Delta\lambda_K$ і $\Delta\lambda_D$ суттєво відрізняються для *s*- та *p*-поляризацій. Так, значення напівширини смуги

пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ для s -поляризації стрімко зменшується від 0.24 нм при $\theta_0 = 15^\circ$ до 0.01 нм при $\theta_0 = 75^\circ$, а для p -поляризації ця характеристика зростає від 0.33 нм при $\theta_0 = 15^\circ$ до 7.31 нм при $\theta_0 = 75^\circ$ (табл. 4.1, стовпець 4). Така ж поведінка спостерігається і для десятинної ширини смуги пропускання $\Delta\lambda_{0.1}$. Для s -поляризації стрімко зменшується від 0.76 нм при $\theta_0 = 15^\circ$ до 0.03 нм при $\theta_0 = 75^\circ$, а для p -поляризації ця характеристика зростає від 1.02 нм при $\theta_0 = 15^\circ$ до 24.66 нм при $\theta_0 = 75^\circ$ (табл. 4.1, стовпець 5). Ширини короткохвильової та довгохвильової областей відбивання $\Delta\lambda_{\text{к}}$ та $\Delta\lambda_{\text{д}}$ при збільшенні кута падіння від 0° до 75° для s -поляризації зростають від 104.32 нм та 156.53 нм до 129.77 нм та 164.04 нм відповідно, а для p -поляризації – спадають до 52.01 нм та 44.98 нм відповідно (табл. 4.1, стовпці 6-7).

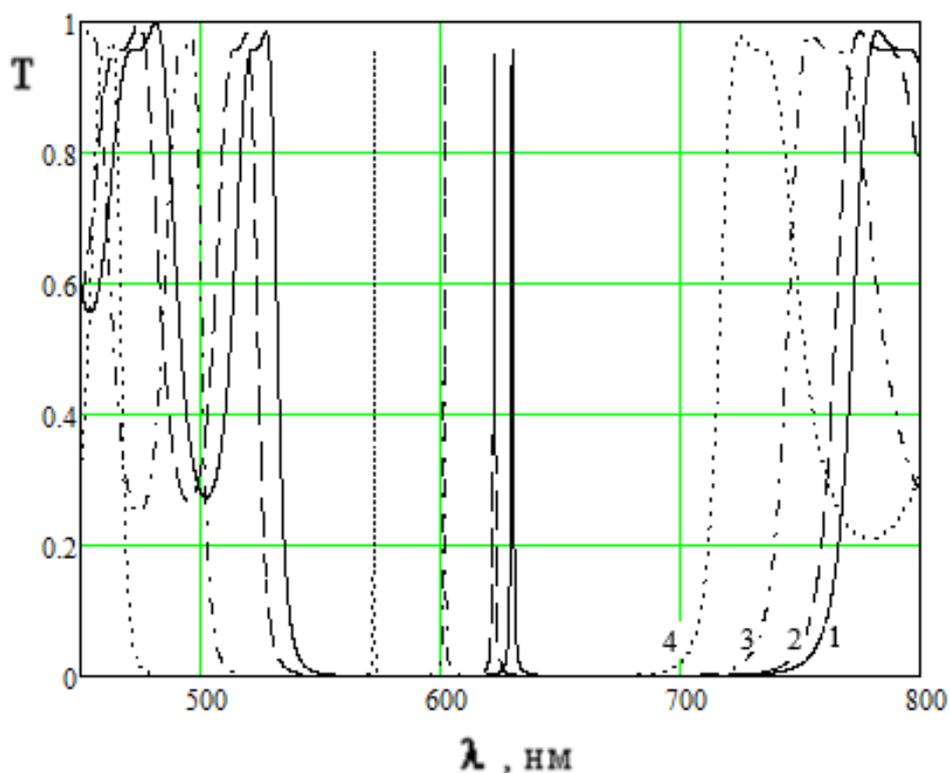


Рисунок 4.3. Трансформація спектрів пропускання 25-шарового вузькосмугового фільтра з робочою довжиною хвилі $\lambda_0 = 630$ нм для s -поляризації при зміні кута падіння: 1 – $\theta_0 = 0^\circ$; 2 – $\theta_0 = 15^\circ$; 3 – $\theta_0 = 30^\circ$; 4 – $\theta_0 = 45^\circ$

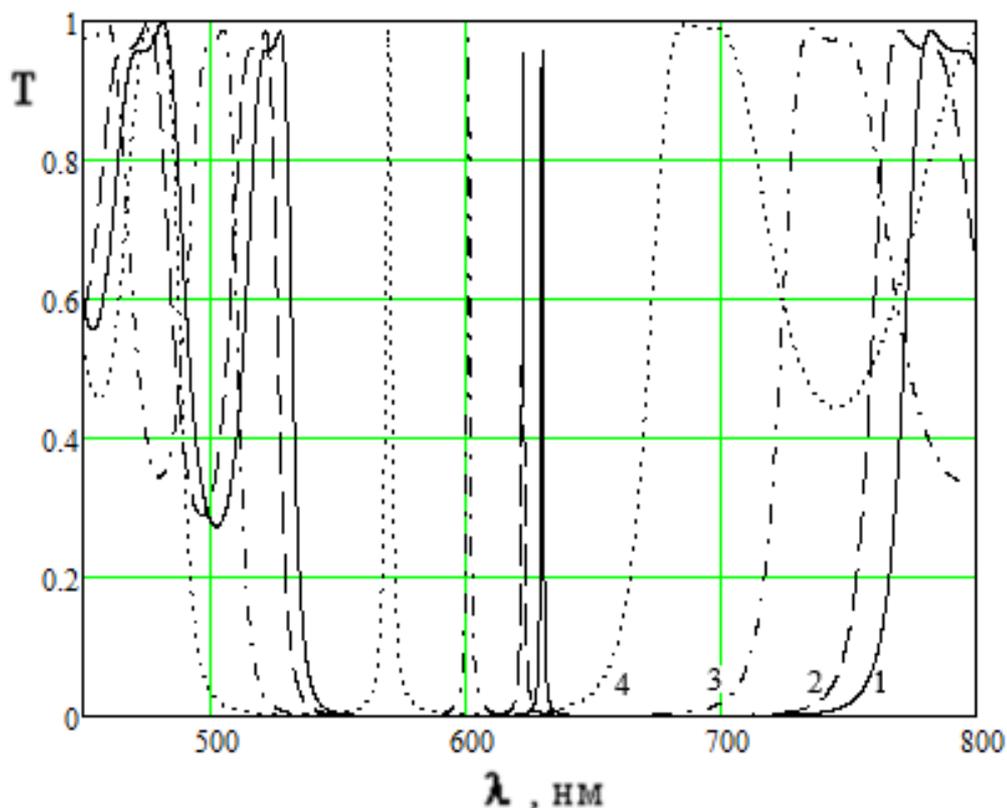


Рисунок 4.4. Трансформація спектрів пропускання 25-шарового вузькосмугового фільтра з робочою довжиною хвилі $\lambda_0 = 630$ нм для p -поляризації при зміні кута падіння: 1 – $\theta_0 = 0^\circ$; 2 – $\theta_0 = 15^\circ$; 3 – $\theta_0 = 30^\circ$; 4 – $\theta_0 = 45^\circ$

На рисунках 4.3-4.4 відображені спектральні характеристики 25-шарового вузькосмугового фільтра з робочою довжиною хвилі $\lambda_0 = 630$ нм для обох поляризацій при падінні світла під кутами 0° , 15° , 30° та 45° . Числові значення розглядуваних параметрів вузькосмугового фільтра обчислено і наведено в таблиці 4.1.

Розглянемо вплив неоднорідностей приповерхневої та перехідної областей з різними розподілами показника заломлення на розглядувані характеристики 25-шарового вузькосмугового фільтра при збільшенні кута падіння від 0° до 75° .

Усі проведені обчислювальні експерименти (табл. 4.2–4.7) вказують, що на відхилення від ідеального випадку розподіли показників заломлення приповерхневої і перехідної областей впливають у такому порядку: ступінчастий, логарифмічний, лінійний, квадратичний та експоненціальний. Це означає, що розглядувані розподіли збільшують відхилення від ідеального випадку з ростом середнього

значення сумарного показника заломлення приповерхневої та перехідної областей. Тобто спостерігається та сама закономірність, що і в розділі 2, коли детально розглядалися моделі з неоднорідними областями при куті падіння світла, що збігається з нормаллю до площини падіння.

Таблиця 4.2

Значення максимуму коефіцієнта пропускання T_{max} для різних розподілів неоднорідностей показника заломлення при різних кутах падіння

Розподіл \ Кут	0^0	15^0	30^0	45^0	60^0	75^0
<i>s</i> -поляризація						
Ідеальний	0.958715	0.954102	0.938914	0.905318	0.810946	0.522434
Ступінчастий	0.980457	0.977451	0.968479	0.942750	0.742756	0.381680
Лінійний	0.967248	0.963554	0.956611	0.929250	0.780262	0.462350
Квадратичний	0.963314	0.959856	0.951082	0.925424	0.786804	0.470646
Логарифмічний	0.970530	0.967127	0.959708	0.931295	0.758542	0.418841
Експоненціальний	0.959703	0.955886	0.939419	0.906013	0.805174	0.516282
<i>p</i> -поляризація						
Ідеальний	0.958715	0.962231	0.973833	0.991007	0.998332	0.893818
Ступінчастий	0.980457	0.982541	0.989486	0.998976	0.994322	0.867461
Лінійний	0.967248	0.970612	0.980120	0.994893	0.995962	0.884015
Квадратичний	0.963314	0.966819	0.977586	0.993326	0.997137	0.888712
Логарифмічний	0.970530	0.974477	0.983685	0.996457	0.995238	0.880143
Експоненціальний	0.959703	0.963513	0.974560	0.991567	0.998100	0.892722

Із таблиці 4.2 видно, що значення максимуму пропускання T_{max} при збільшенні кута падіння, за наявності перехідної та приповерхневої областей із ступінчастим розподілом показника заломлення, для *s*-поляризації буде зменшуватись від 0.980457 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.381680 при $\theta_0 = 75^0$. При цій же поляризації та логарифмічному розподілі показників заломлення неоднорідних областей також буде зменшуватись від 0.9672483 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.418841 при $\theta_0 = 75^0$; при лінійному – від 0.967248 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.462350 при $\theta_0 = 75^0$; при квадратичному – від 0.963314 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.470646 при $\theta_0 = 75^0$; при експоненціальному – від

0.959703 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.516282 при $\theta_0 = 75^0$. Для p -поляризації значення максимуму пропускання T_{\max} при збільшенні кута падіння буде зменшуватись за наявності неоднорідних областей зі ступінчастим розподілом показника заломлення від 0.980457 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.867461 при $\theta_0 = 75^0$; із логарифмічним розподілом – від 0.970530 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.880143 при $\theta_0 = 75^0$; із лінійним – від 0.967248 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.884015 при $\theta_0 = 75^0$; із квадратичним – від 0.963314 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.888712 при $\theta_0 = 75^0$; із експоненціальним – від 0.959703 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.892722 при $\theta_0 = 75^0$. Для обох поляризацій характерним є те, що наявність неоднорідних областей збільшує значення максимуму пропускання T_{\max} відносно ідеального випадку для всіх кутів, менших за кут Брюстера, та зменшує це значення для всіх кутів, більших за нього. Відзначимо, що для s -поляризації значення максимуму пропускання T_{\max} зменшує значно більше, ніж для p -поляризації.

Таблиця 4.3

Значення довжини хвилі в положенні максимуму пропускання λ_{\max} для різних розподілів неоднорідностей показника заломлення при різних кутах падіння

Розподіл \ Кут	0^0	15^0	30^0	45^0	60^0	75^0
<i>s</i> -поляризація						
Ідеальний	630	623.18	604.28	577.81	550.61	530.25
Ступінчастий	650.80	644.24	626.09	601.75	574.79	555.41
Лінійний	641.14	634.46	615.97	590.11	563.57	543.73
Квадратичний	638.02	631.3	612.69	586.65	559.91	539.92
Логарифмічний	644.36	637.72	619.35	593.67	567.33	547.66
Експоненціальний	633.73	626.95	608.17	581.89	554.89	534.68
<i>p</i> -поляризація						
Ідеальний	630	623.13	603.60	574.64	542.10	515.16
Ступінчастий	650.8	643.93	624.38	595.43	562.92	535.71
Лінійний	641.14	634.24	614.62	585.52	552.84	525.53
Квадратичний	638.02	631.12	611.50	582.40	549.72	522.46
Логарифмічний	644.36	637.46	617.84	588.76	556.10	528.78
Експоненціальний	633.73	626.84	607.24	578.19	545.55	518.42

За наявності неоднорідних перехідної та приповерхневої областей високозаломлюючого шару вузькосмугового фільтра положення максимуму пропускання λ_{max} зсувається в довгохвильову область відносно ідеального випадку при всіх розглянутих кутах падіння для обох поляризацій. Причому для s -поляризації значення зсуву в довгохвильову область є на 10-15% більшим, ніж для p -поляризації (табл. 4.3).

При збільшенні кута падіння значення довжини хвилі в положенні максимуму пропускання λ_{max} за наявності перехідної та приповерхневої областей із ступінчастим розподілом показника заломлення буде зсуватись у короткохвильову область від 650.80 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 555.41 нм для s -поляризації та до 535.71 нм для p -поляризації при $\theta_0 = 75^\circ$; із логарифмічним розподілом – від 644.36 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 547.66 нм для s -поляризації та до 547.66 нм для p -поляризації при $\theta_0 = 75^\circ$; із лінійним – від 641.14 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 543.73 нм для s -поляризації та до 525.53 нм для p -поляризації при $\theta_0 = 75^\circ$; із квадратичним – від 638.02 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 539.92 нм для s -поляризації та до 522.46 нм для p -поляризації при $\theta_0 = 75^\circ$; із експоненціальним – від 633.73 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 534.68 нм для s -поляризації та до 518.42 нм для p -поляризації при $\theta_0 = 75^\circ$.

Значення напів- та десятичної ширини смуг пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ та $\Delta\lambda_{0.1}$ за наявності неоднорідних областей високозаломлюючого шару суттєво зменшуються відносно ідеального випадку (табл.4.4-4.5).

Для s -поляризації при збільшенні кута падіння значення напівширини смуги пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ за наявності перехідної та приповерхневої областей зі ступінчастим розподілом показника заломлення зменшується від 0.15 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 0.01 нм при $\theta_0 = 60^\circ$; із логарифмічним розподілом – від 0.21 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 0.02 нм при $\theta_0 = 60^\circ$; із лінійним – від 0.23 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 0.02 нм при $\theta_0 = 60^\circ$; із квадратичним – від 0.26 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 0.02 нм при $\theta_0 = 60^\circ$; із експоненціальним – від 0.29 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 0.02 нм при $\theta_0 = 60^\circ$. Для p -поляризації при збільшенні кута падіння цей показник за наявності неоднорідних областей зі ступінчастим розподілом показника заломлення збільшується від 0.15 нм

при $\theta_0 = 0^\circ$ до 4.34 нм при $\theta_0 = 75^\circ$; із логарифмічним розподілом – від 0.21 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 5.71 нм при $\theta_0 = 75^\circ$; із лінійним – від 0.23 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 6.33 нм при $\theta_0 = 75^\circ$; із квадратичним – від 0.26 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 6.88 нм при $\theta_0 = 75^\circ$; із експоненціальним – від 0.29 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 7.30 нм при $\theta_0 = 75^\circ$ (табл. 4.4).

Таблиця 4.4

Значення напівширини смуги пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ для різних розподілів неоднорідностей показника заломлення при різних кутах падіння

Розподіл \ Кут	0°	15°	30°	45°	60°	75°
<i>s</i> -поляризація						
Ідеальний	0.29	0.24	0.15	0.07	0.03	0.01
Ступінчастий	0.15	0.13	0.08	0.03	0.01	0.01
Лінійний	0.23	0.2	0.12	0.06	0.02	0.01
Квадратичний	0.26	0.22	0.14	0.06	0.02	0.01
Логарифмічний	0.21	0.18	0.1	0.05	0.02	0.01
Експоненціальний	0.29	0.24	0.14	0.07	0.03	0.01
<i>p</i> -поляризація						
Ідеальний	0.29	0.33	0.51	1.05	2.70	7.31
Ступінчастий	0.15	0.18	0.28	0.62	1.64	4.34
Лінійний	0.23	0.27	0.42	0.89	2.35	6.33
Квадратичний	0.26	0.3	0.47	0.97	2.54	6.88
Логарифмічний	0.21	0.25	0.38	0.81	2.14	5.71
Експоненціальний	0.29	0.33	0.5	1.05	2.69	7.30

Значення десятинної ширини смуги пропускання $\Delta\lambda_{0.1}$ для *s*-поляризації при збільшенні кута падіння за наявності перехідної та приповерхневої областей зі ступінчастим розподілом показника заломлення зменшується від 0.47 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 0.01 нм при $\theta_0 = 75^\circ$; із логарифмічним розподілом – від 0.64 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 0.02 нм при $\theta_0 = 75^\circ$; із лінійним – від 0.71 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 0.02 нм при $\theta_0 = 75^\circ$; із квадратичним – від 0.79 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 0.02 нм при $\theta_0 = 75^\circ$; із експоненціальним – від 0.87 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 0.03 нм при $\theta_0 = 75^\circ$. Для *p*-поляризації при збільшенні кута падіння цей показник за наявності неоднорідних

областей зі ступінчастим розподілом показника заломлення збільшується від 0.47 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 14.35 нм при $\theta_0 = 75^\circ$; із логарифмічним розподілом – від 0.64 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 19.06 нм при $\theta_0 = 75^\circ$; із лінійним – від 0.71 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 21.24 нм при $\theta_0 = 75^\circ$; із квадратичним – від 0.79 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 23.20 нм при $\theta_0 = 75^\circ$; із експоненціальним – від 0.87 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 23.91 нм при $\theta_0 = 75^\circ$ (табл. 4.5).

Таблиця 4.5

Значення десятинної ширини смуги пропускання $\Delta\lambda_{0.1}$ для різних розподілів неоднорідностей показника заломлення при різних кутах падіння

Розподіл\ Кут	0°	15°	30°	45°	60°	75°
<i>s</i> -поляризація						
Ідеальний	0.89	0.76	0.47	0.21	0.08	0.03
Ступінчастий	0.47	0.39	0.25	0.11	0.04	0.01
Лінійний	0.71	0.61	0.38	0.18	0.07	0.02
Квадратичний	0.79	0.67	0.42	0.19	0.07	0.02
Логарифмічний	0.64	0.54	0.34	0.15	0.06	0.02
Експоненціальний	0.87	0.74	0.46	0.21	0.08	0.03
<i>p</i> -поляризація						
Ідеальний	0.89	1.02	1.55	3.17	8.16	24.66
Ступінчастий	0.47	0.55	0.86	1.85	4.97	14.35
Лінійний	0.71	0.83	1.28	2.69	7.10	21.24
Квадратичний	0.79	0.91	1.41	2.93	7.67	23.20
Логарифмічний	0.64	0.73	1.15	2.43	6.45	19.06
Експоненціальний	0.87	0.99	1.54	3.15	8.11	23.91

Значення ширини короткохвильової області відбивання $\Delta\lambda_K$ та ширини довгохвильової області відбивання $\Delta\lambda_D$ за наявності неоднорідних областей високозаломлюючого шару для *s*-поляризації зростають, а для *p*-поляризації – спадають.

Таблиця 4.6

Значення ширини короткохвильової області відбивання $\Delta\lambda_k$ для різних розподілів неоднорідностей показника заломлення при різних кутах падіння

Розподіл \ Кут	0^0	15^0	30^0	45^0	60^0	75^0
<i>s</i> -поляризація						
Ідеальний	104.32	105.59	109.36	115.46	122.98	129.77
Ступінчастий	117.46	118.8	122.75	129.08	136.71	143.36
Лінійний	109.78	111.05	114.82	120.86	128.21	134.68
Квадратичний	107.69	108.95	112.69	118.69	126.00	132.48
Логарифмічний	112.09	113.37	117.19	123.31	130.71	137.20
Експоненціальний	105.41	106.66	110.39	116.38	123.74	130.32
<i>p</i> -поляризація						
Ідеальний	104.32	102.35	96.29	85.74	70.49	52.01
Ступінчастий	117.46	115.27	108.64	97.53	82.60	66.93
Лінійний	109.78	107.66	101.23	90.23	74.83	57.27
Квадратичний	107.69	105.61	99.26	88.34	72.85	54.72
Логарифмічний	112.09	109.95	103.43	92.39	77.10	60.17
Експоненціальний	105.41	103.39	97.16	86.40	70.93	52.30

Значення ширини короткохвильової області відбивання $\Delta\lambda_k$ для *s*-поляризації при збільшенні кута падіння за наявності перехідної та приповерхневої областей зі ступінчастим розподілом показника заломлення зростає від 117.46 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 143.36 нм при $\theta_0 = 75^0$; із логарифмічним розподілом – від 112.09 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 137.20 нм при $\theta_0 = 75^0$; із лінійним – від 109.78 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 134.68 нм при $\theta_0 = 75^0$; із квадратичним – від 107.69 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 132.48 нм при $\theta_0 = 75^0$; із експоненціальним – від 105.41 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 130.32 нм при $\theta_0 = 75^0$. Для *p*-поляризації при збільшенні кута падіння цей показник за наявності неоднорідних областей із ступінчастим розподілом показника заломлення зменшується від 117.46 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 66.93 нм при $\theta_0 = 75^0$; із логарифмічним розподілом – від 112.09 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 60.17 нм при $\theta_0 = 75^0$; із лінійним – від 109.78 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 57.27 нм при $\theta_0 = 75^0$; із квадратичним – від 107.69 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 54.72 нм при

$\theta_0 = 75^0$; із експоненціальним – від 105.41 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 52.30 нм при $\theta_0 = 75^0$ (табл. 4.6).

Таблиця 4.7

Значення ширини довгохвильової області відбивання $\Delta\lambda_d$ для різних розподілів неоднорідностей показника заломлення при різних кутах падіння

Розподіл \ Кут	0^0	15^0	30^0	45^0	60^0	75^0
<i>s</i> -поляризація						
Ідеальний	156.53	157.13	158.21	160.69	162.48	164.04
Ступінчастий	175.49	175.55	177.79	179.88	182.24	184.07
Лінійний	163.58	163.93	165.72	167.00	169.52	171.67
Квадратичний	160.77	161.35	162.81	164.72	167.00	168.96
Логарифмічний	166.52	167.42	168.52	170.87	172.65	175.01
Експоненціальний	157.89	158.48	160.04	162.10	164.09	165.81
<i>p</i> -поляризація						
Ідеальний	156.53	150.16	132.24	106.16	76.52	44.98
Ступінчастий	175.49	168.62	149.36	121.58	91.01	63.06
Лінійний	163.58	156.65	138.49	111.63	81.39	50.35
Квадратичний	160.77	154.26	135.94	109.33	79.18	47.28
Логарифмічний	166.52	160.00	140.87	114.33	84.01	53.95
Експоненціальний	157.89	151.47	133.38	107.06	77.11	45.76

Значення ширини довгохвильової області відбивання $\Delta\lambda_d$ для *s*-поляризації при збільшенні кута падіння за наявності перехідної та приповерхневої областей із ступінчастим розподілом показника заломлення зростає від 175.49 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 184.07 нм при $\theta_0 = 75^0$; із логарифмічним розподілом – від 166.52 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 175.01 нм при $\theta_0 = 75^0$; із лінійним – від 163.58 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 171.67 нм при $\theta_0 = 75^0$; із квадратичним – від 160.77 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 168.96 нм при $\theta_0 = 75^0$; із експоненціальним – від 157.89 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 165.81 нм при $\theta_0 = 75^0$. Для *p*-поляризації при збільшенні кута падіння цей показник за наявності неоднорідних областей із ступінчастим розподілом показника заломлення зменшується від 175.49 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 63.06 нм при $\theta_0 = 75^0$; із логарифмічним розподілом – від 166.52 нм

при $\theta_0 = 0^\circ$ до 53.95 нм при $\theta_0 = 75^\circ$; із лінійним – від 163.58 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 50.35 нм при $\theta_0 = 75^\circ$; із квадратичним – від 160.77 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 47.28 нм при $\theta_0 = 75^\circ$; із експоненціальним – від 157.89 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 45.76 нм при $\theta_0 = 75^\circ$ (табл. 4.7).

При збільшенні кількості шарів зменшується різниця між ідеальним випадком різких меж між плівками та наявністю приповерхневої та перехідної областей у високозаломлюючій компоненті. Це спостерігається при всіх можливих робочих довжинах хвиль і довільних кутах падіння світла.

Виходячи з отриманих результатів обчислювального експерименту, можна сформулювати такі твердження.

Твердження 4.1. Наявність неоднорідних областей у високозаломлюючому шарі вузькосмугових оптичних фільтрів призводить до того, що:

- значення максимуму коефіцієнта пропускання T_{max} збільшується для обох поляризацій при кутах падіння, менших за кут Брюстера, та зменшується в протилежному випадку;

- довжина хвилі в положенні максимуму пропускання λ_{max} зсувається в довгохвильову область для обох поляризацій;

- напівширина $\Delta\lambda_{0.5}$ та десятинна ширина $\Delta\lambda_{0.1}$ зменшуються, а ширина спектральних інтервалів $\Delta\lambda_K$ та $\Delta\lambda_D$ збільшуються для всіх кутів для обох поляризацій.

Твердження 4.2. Якщо кут падіння світла збільшується, то спектральні параметри вузькосмугових оптичних фільтрів як в ідеальному випадку, так і при наявності неоднорідних областей мають однакову тенденцію:

- значення максимуму коефіцієнта пропускання T_{max} для s -поляризованого світла зменшується, а для p -поляризованого – зростає до кута Брюстера, а потім зменшуються, причому залишаються завжди вищими, ніж для s -поляризованого світла;

- довжина хвилі в положенні максимуму пропускання λ_{max} зміщується в короткохвильову область, залишаючись вищою для s -поляризованого світла;
- напівширина $\Delta\lambda_{0.5}$ та десятинна ширина $\Delta\lambda_{0.1}$ смуг пропускання для s -поляризованого світла зменшуються, а для p -поляризованого – зростають, залишаючись завжди вищими, ніж для s -поляризованого світла;
- ширини спектральних інтервалів $\Delta\lambda_K$ та $\Delta\lambda_D$ низького пропускання для s -поляризованого світла зростають, а для p -поляризованого – спадають.

Проведені дослідження для більшої кількості шарів для вузькосмугових оптичних фільтрів дозволяють стверджувати, що при збільшенні кількості шарів значення коефіцієнта пропускання T_{max} , напівширина $\Delta\lambda_{0.5}$ та десятинна ширина $\Delta\lambda_{0.1}$ зменшуються, положення максимумів λ_{max} зсуваються в сторону коротких хвиль для обох поляризацій; ширина спектральних інтервалів $\Delta\lambda_K$ та $\Delta\lambda_D$ зменшується для s -поляризації, а для p -поляризації зменшується до певного кута залежно від кількості шарів, а далі зростає.

4.3. Математичне моделювання впливу неоднорідностей на межах розділу на спектральні характеристики відрізаючих оптичних фільтрів при падінні світла під кутом

Промодельємо вплив неоднорідності на межах розділу на спектральні характеристики відрізаючих фільтрів, які мають частково неоднорідні низькозаломлюючі шари [13-14, 16]. Візьмемо як високозаломлюючий матеріал As_2S_3 , він має показник заломлення після опромінення, рівний 2.4. Як низькозаломлюючий матеріал візьмемо GeS_2 , який має показник заломлення, рівний 2.1. У підрозділі розглядається, що матеріал GeS_2 має приповерхневу й перехідну область з показником заломлення 2.6. Геометрична товщина приповерхневої рівна 10 нм, а перехідної – 30 нм. Обчислювальний експеримент проведено для робочої довжини хвилі $\lambda_0=800$ нм, а спектральний діапазон розглядався від 600 до 1000 нм. Під час проведення експерименту вважалося, що показники заломлення

приповерхневої і перехідної областей мають однаковий розподіл. Саме з огляду на такі припущення й було проведено обчислювальний експеримент.

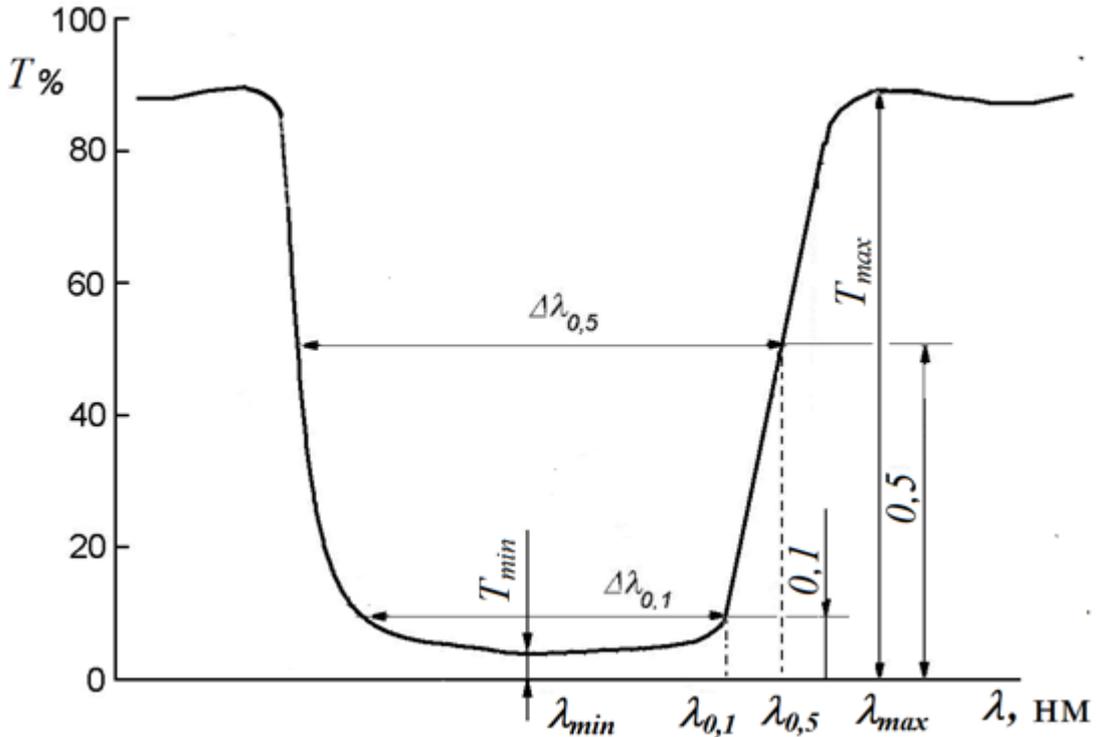


Рисунок 4.5. Основні характеристики відрізаючих оптичних фільтрів

На рисунку 4.5 наведено основні характеристики відрізаючих оптичних фільтрів: довжина хвилі мінімуму пропускання – $\lambda_{min} = \lambda_0$; коефіцієнт мінімуму пропускання – T_{min} ; ширина області мінімального пропускання $\Delta\lambda_{0,5}$ на рівні $T=0.5$ і $\Delta\lambda_{0,1}$ – на рівні $T=0.1$ та відповідні їм значення довжин хвиль $\lambda_{0,5}$ і $\lambda_{0,1}$; довжина хвилі максимуму пропускання – λ_{max} , коефіцієнт максимуму пропускання – T_{max} . Розглянемо зміни спектрів пропускання відрізаючих інтерференційних фільтрів зі зміною кута падіння θ_0 для s - та p -поляризацій світлових потоків з довжиною хвилі 800 нм.

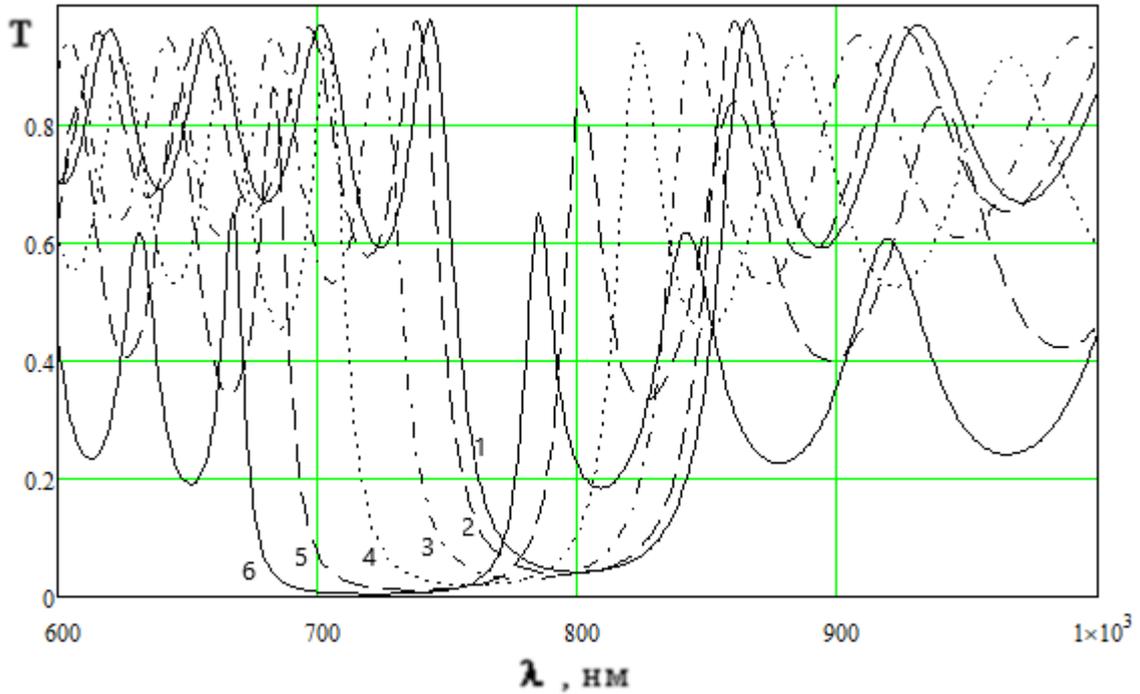


Рисунок 4.6. Трансформація спектрів пропускання 25-шарового відрізаючого оптичного фільтра з робочою довжиною хвилі $\lambda_0 = 800$ нм для s -поляризації при зміні кута падіння: 1 – $\theta_0 = 0^\circ$; 2 – $\theta_0 = 15^\circ$; 3 – $\theta_0 = 30^\circ$; 4 – $\theta_0 = 45^\circ$; 5 – $\theta_0 = 60^\circ$; 6 – $\theta_0 = 75^\circ$

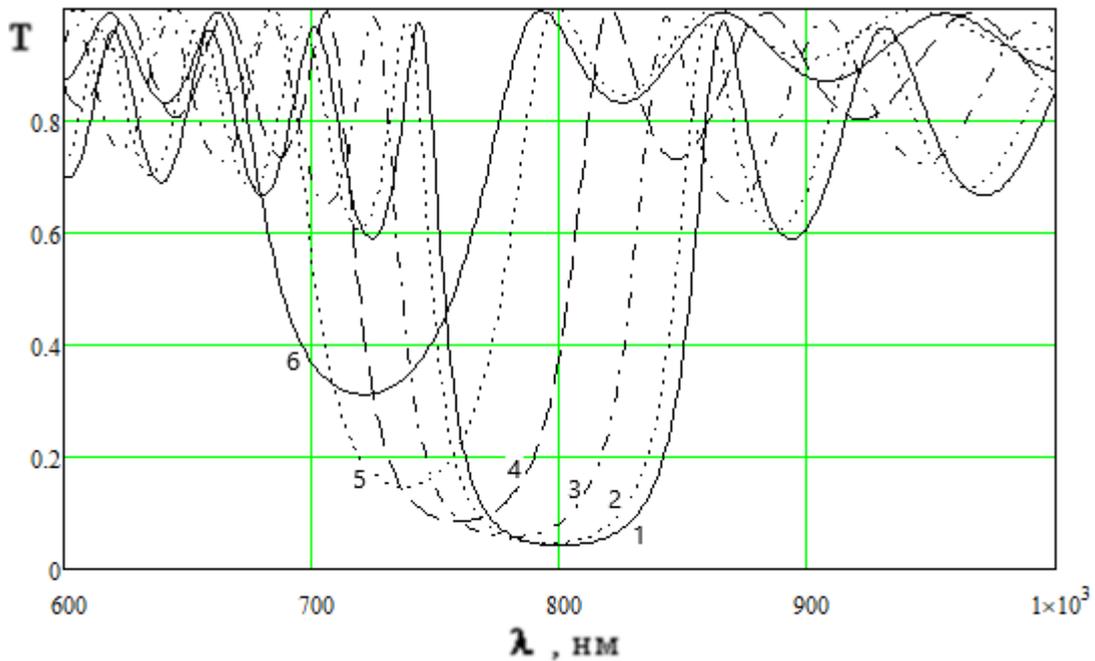


Рисунок 4.7. Трансформація спектрів пропускання 25-шарового відрізаючого оптичного фільтра з робочою довжиною хвилі $\lambda_0 = 800$ нм для p -поляризації при зміні кута падіння: 1 – $\theta_0 = 0^\circ$; 2 – $\theta_0 = 15^\circ$; 3 – $\theta_0 = 30^\circ$; 4 – $\theta_0 = 45^\circ$; 5 – $\theta_0 = 60^\circ$; 6 – $\theta_0 = 75^\circ$

Таблиця 4.8

Значення основних параметрів вузькосмугового фільтра
при різних кутах падіння

Розподіл\ Кут	0^0	15^0	30^0	45^0	60^0	75^0
<i>s</i> -поляризація						
T_{min}	0.041650	0.038466	0.030261	0.02022	0.011353	0.004852
λ_{min}	800	794.63	779.78	759.01	737.65	721.60
$\Delta\lambda_{0,1}$	61.14	63.25	68.84	76.42	84.88	94.57
$\Delta\lambda_{0,5}$	99.57	100.03	101.35	103.44	138.76	119.3
$\lambda_{0,1}$	831.74	827.51	815.71	799.13	782.5	771.93
$\lambda_{0,5}$	852.87	847.78	833.72	814.21	794.6	789.44
λ_{max}	866.04	860.47	845.06	823.58	801.58	785.1
T_{max}	0.976856	0.974125	0.963819	0.936799	0.863650	0.649367
<i>p</i> -поляризація						
T_{min}	0.041650	0.045093	0.057206	0.08484	0.146816	0.311901
λ_{min}	800	794.63	779.78	758.99	737.58	720.75
$\Delta\lambda_{0,1}$	61.14	58.09	48.26	26.16	–	–
$\Delta\lambda_{0,5}$	99.57	97.77	92.58	84.67	75.13	70.28
$\lambda_{0,1}$	831.74	824.74	804.65	772.3	–	–
$\lambda_{0,5}$	852.87	846.51	828.79	803.67	777.03	758.08
λ_{max}	866.04	859.99	843.35	820.55	799.35	792.55
T_{max}	0.976856	0.979360	0.986561	0.996167	0.999614	0.995975

Із таблиці 4.8 видно, що для *s*-поляризації при збільшенні кута падіння світла мінімальні значення пропускання T_{min} поступово знижуються від 0.041650 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.004852 при $\theta_0 = 75^0$, при цьому положення λ_{min} зміщується в короткохвильову область від 800 до 721.6 нм. Для *p*-поляризації мінімум пропускання T_{min} зростає від 0.041650 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.311901 при $\theta_0 = 75^0$, при цьому λ_{min} зміщується в короткохвильову область до 720.75 нм. Ширина області мінімального пропускання на рівні $T = 0.1$ для *s*-поляризації збільшується від 61.14 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 94.57 нм при $\theta_0 = 75^0$, причому відповідна довжина хвилі в довгохвильовій області $\lambda_{0,1}$ зміщується в короткохвильову область від 831.74 до

771.93 нм. Для p -поляризації ця величина зменшується від 61.14 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 26.16 нм при $\theta_0 = 45^\circ$, а відповідна довжина хвилі $\lambda_{0,1}$ більше зміщується в короткохвильову область від 831.74 до 772.3 нм. Для кутів $\theta_0 = 60^\circ$ та $\theta_0 = 75^\circ$ значення ширини області мінімального пропускання на рівні $T = 0.1$ та відповідної довжини хвилі $\lambda_{0,1}$ відсутні через те, що значення коефіцієнта пропускання світла на досліджуваному проміжку вище за 0.1. Ширина області мінімального пропускання на рівні $T = 0.5$ для s -поляризації збільшується від 99.57 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 119.3 нм при $\theta_0 = 75^\circ$, а відповідна довжина хвилі в довгохвильовій області $\lambda_{0,5}$ зміщується в короткохвильову область від 852.87 до 789.44 нм. Для p -поляризації ця величина зменшується від 99.57 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 70.28 нм при $\theta_0 = 75^\circ$, а відповідна довжина хвилі $\lambda_{0,5}$ зміщується в короткохвильову область до 758.08 нм. Коефіцієнт максимуму пропускання T_{max} для s -поляризації зменшується від 0.976856 при $\theta_0 = 0^\circ$ до 0.649367 при $\theta_0 = 75^\circ$, а відповідна йому довжина хвилі λ_{max} зміщується в короткохвильову область від 866.04 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 785.1 нм при $\theta_0 = 75^\circ$. Для p -поляризації ця величина зростає при збільшенні кута падіння до кута Брюстера, а далі спадає, а відповідна йому довжина хвилі λ_{max} зміщується в короткохвильову область до 792.55 нм.

Розглянемо вплив неоднорідностей приповерхневої та перехідної областей з різними розподілами показника заломлення на розглядувані характеристики 25-шарового відрізаючого оптичного фільтра при збільшенні кута падіння від 0° до 75° . Усі проведені обчислювальні експерименти (табл. 4.9–4.14) вказують, що відхилення від ідеального випадку збільшується з ростом середнього значення сумарного показника заломлення приповерхневої та перехідної областей низькозаломлюючого шару, тобто розподіли показників заломлення впливають у такому порядку: ступінчастий, логарифмічний, лінійний, квадратичний та експоненціальний.

Таблиця 4.9

Значення мінімуму коефіцієнта пропускання T_{min} для різних розподілів неоднорідностей показника заломлення при різних кутах падіння

Розподіл\ Кут	0^0	15^0	30^0	45^0	60^0	75^0
<i>s</i> -поляризація						
Ідеальний	0.041650	0.038466	0.030261	0.02022	0.011353	0.004852
Ступінчастий	0.173436	0.164584	0.140129	0.105369	0.067441	0.032370
Лінійний	0.094154	0.088713	0.074265	0.054337	0.033728	0.015719
Квадратичний	0.071861	0.067373	0.055716	0.039681	0.024376	0.011258
Логарифмічний	0.114232	0.106831	0.090528	0.066896	0.042156	0.019832
Експоненціальний	0.047612	0.044167	0.035410	0.024232	0.013838	0.006213
<i>p</i> -поляризація						
Ідеальний	0.041650	0.045093	0.057206	0.08484	0.146816	0.311901
Ступінчастий	0.173436	0.184108	0.219871	0.293349	0.428645	0.548678
Лінійний	0.094154	0.100699	0.122272	0.168244	0.259548	0.406612
Квадратичний	0.071861	0.077066	0.094619	0.132797	0.211637	0.366360
Логарифмічний	0.114232	0.121551	0.146672	0.199520	0.301822	0.442128
Експоненціальний	0.047612	0.051488	0.064689	0.094431	0.159780	0.322793

Із таблиці 4.9 видно, що для обох поляризацій характерним є те, що наявність неоднорідних областей збільшує значення мінімуму пропускання T_{min} відносно ідеального випадку для всіх кутів падіння.

Значення мінімуму пропускання T_{min} при збільшенні кута падіння, за наявності перехідної та приповерхневої областей із ступінчастим розподілом показника заломлення, для *s*-поляризації буде зменшуватись від 0.173436 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.032370 при $\theta_0 = 75^0$. При цій же поляризації та логарифмічному розподілі показників заломлення неоднорідних областей також буде зменшуватись від 0.114232 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.019832 при $\theta_0 = 75^0$; при лінійному – від 0.094154 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.015719 при $\theta_0 = 75^0$; при квадратичному – від 0.071861 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.011258 при $\theta_0 = 75^0$; при експоненціальному – від 0.047612 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.006213 при $\theta_0 = 75^0$. Для *p*-поляризації значення мінімуму пропускання T_{min} при збільшенні

кута падіння буде зростати за наявності неоднорідних областей із ступінчастим розподілом показника заломлення від 0.173436 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.548678 при $\theta_0 = 75^0$; із логарифмічним розподілом – від 0.114232 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.442128 при $\theta_0 = 75^0$; із лінійним – від 0.094154 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.406612 при $\theta_0 = 75^0$; із квадратичним – від 0.071861 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.366360 при $\theta_0 = 75^0$; із експоненціальним – від 0.047612 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.322793 при $\theta_0 = 75^0$.

Таблиця 4.10

Значення положення довжини хвилі при мінімумі пропускання λ_{min} для різних розподілів неоднорідностей показника заломлення при різних кутах падіння

Розподіл \ Кут	0^0	15^0	30^0	45^0	60^0	75^0
s-поляризація						
Ідеальний	800	794.63	779.78	759.01	737.65	721.60
Ступінчастий	799.36	794.58	781.4	763.01	744.17	730.07
Лінійний	799.74	794.61	780.43	760.61	740.26	724.99
Квадратичний	799.85	794.62	780.15	759.93	739.15	723.55
Логарифмічний	799.65	794.60	780.67	761.21	741.24	726.26
Експоненціальний	799.97	794.63	779.85	759.19	737.95	721.99
p-поляризація						
Ідеальний	800	794.63	779.78	758.99	737.58	720.75
Ступінчастий	799.36	794.48	781.05	762.54	745.07	749.26
Лінійний	799.74	794.57	780.19	760.31	740.68	732.25
Квадратичний	799.85	794.61	780.17	759.71	739.43	727.41
Логарифмічний	799.65	794.65	780.38	760.84	741.71	736.53
Експоненціальний	799.97	794.52	779.74	759.25	737.82	722.16

Як бачимо з таблиці 4.10, значення положення довжини хвилі при мінімумі пропускання λ_{min} для обох поляризацій за наявності неоднорідних областей при збільшенні кута падіння буде зміщуватись у короткохвильову область відносно ідеального випадку. При збільшенні кута падіння положення довжини хвилі при мінімумі пропускання λ_{min} також буде зміщуватись у короткохвильову область. Так, при ступінчастому розподілі показника заломлення неоднорідних областей це

зміщення буде від 799.36 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 730.07 нм для s -поляризації та до 749.26 нм для p -поляризації при $\theta_0 = 75^0$; при логарифмічному розподілі – від 799.65 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 726.26 нм для s -поляризації та до 736.53 нм для p -поляризації при $\theta_0 = 75^0$; при лінійному розподілі – від 799.74 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 724.99 нм для s -поляризації та до 732.25 нм для p -поляризації при $\theta_0 = 75^0$; при квадратичному розподілі – від 799.85 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 723.55 нм для s -поляризації та до 727.41 нм для p -поляризації при $\theta_0 = 75^0$; при експоненціальному розподілі – від 799.97 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 721.99 нм для s -поляризації та до 722.16 нм для p -поляризації при $\theta_0 = 75^0$.

Таблиця 4.11

Ширина області мінімального пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ на рівні $T=0.5$ для різних розподілів неоднорідностей показника заломлення при різних кутах падіння

Розподіл \ Кут	0^0	15^0	30^0	45^0	60^0	75^0
s-поляризація						
Ідеальний	99.57	100.03	101.35	103.44	138.76	119.30
Ступінчастий	66.27	66.98	68.98	72.10	76.93	–
Лінійний	86.25	86.31	88.41	90.87	114.13	–
Квадратичний	91.91	92.23	93.92	96.28	124.44	–
Логарифмічний	81.26	81.75	83.45	86.21	104.65	–
Експоненціальний	98.04	98.61	99.96	102.25	135.82	112.17
p-поляризація						
Ідеальний	99.57	97.77	92.58	84.67	75.13	70.28
Ступінчастий	66.27	64.51	59.14	49.45	30.01	–
Лінійний	86.25	84.47	79.20	70.58	57.08	–
Квадратичний	91.91	90.12	84.89	76.57	64.75	–
Логарифмічний	81.26	79.48	74.19	65.30	50.31	–
Експоненціальний	98.04	96.24	91.04	83.05	73.05	68.23

Ширина області мінімального пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ на рівні $T=0.5$ за наявності неоднорідних областей суттєво зменшується відносно ідеального випадку для обох поляризацій для всіх кутів падіння. При збільшенні кута падіння ширина області

мінімального пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ на рівні $T=0.5$ для s -поляризації зростає, а для p -поляризації – спадає. Для ступінчастого, лінійного, квадратичного та експоненціального розподілів показника заломлення неоднорідних областей при куті падіння $\theta_0 = 75^\circ$ це значення відсутнє через те, що коефіцієнт пропускання лівої границі знаходиться нижче позначки 0.5.

Ширина області мінімального пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ на рівні $T=0.5$ при збільшенні кута падіння, за наявності перехідної та приповерхневої областей із ступінчастим розподілом показника заломлення, для s -поляризації буде зростати від 66.27 при $\theta_0 = 0^\circ$ до 76.93 при $\theta_0 = 60^\circ$. При цій же поляризації та логарифмічному розподілі показників заломлення неоднорідних областей також буде зростати від 81.26 при $\theta_0 = 0^\circ$ до 104.65 при $\theta_0 = 60^\circ$; при лінійному – від 86.25 при $\theta_0 = 0^\circ$ до 114.13 при $\theta_0 = 60^\circ$; при квадратичному – від 91.91 при $\theta_0 = 0^\circ$ до 124.44 при $\theta_0 = 60^\circ$; при експоненціальному – від 98.04 при $\theta_0 = 0^\circ$ до 112.17 при $\theta_0 = 75^\circ$. Для p -поляризації ширина області мінімального пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ на рівні $T=0.5$ при збільшенні кута падіння буде спадати за наявності неоднорідних областей із ступінчастим розподілом показника заломлення від 66.27 при $\theta_0 = 0^\circ$ до 30.01 при $\theta_0 = 60^\circ$; із логарифмічним розподілом – від 81.26 при $\theta_0 = 0^\circ$ до 50.31 при $\theta_0 = 60^\circ$; із лінійним – від 86.25 при $\theta_0 = 0^\circ$ до 57.08 при $\theta_0 = 60^\circ$; із квадратичним – від 91.91 при $\theta_0 = 0^\circ$ до 64.75 при $\theta_0 = 60^\circ$; із експоненціальним – від 98.04 при $\theta_0 = 0^\circ$ до 68.23 при $\theta_0 = 75^\circ$.

Як бачимо із таблиці 4.12, довжина хвилі $\lambda_{0.5}$, що відповідає $T=0.5$ для обох поляризацій за наявності неоднорідних областей при збільшенні кута падіння буде зміщуватись у короткохвильову область. Так, при ступінчастому розподілі показника заломлення неоднорідних областей це зміщення буде від 833.08 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 782.39 нм для s -поляризації та до 760.40 нм для p -поляризації при $\theta_0 = 60^\circ$; при логарифмічному розподілі – від 841.99 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 787.78 нм для s -поляризації та до 767.78 нм для p -поляризації при $\theta_0 = 60^\circ$; при лінійному розподілі – від 789.62 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 724.99 нм для s -поляризації та до 770.48 нм для p -поляризації при $\theta_0 = 60^\circ$; при квадратичному розподілі – від 848.32 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до

791.89 нм для s -поляризації та до 773.11 нм для p -поляризації при $\theta_0 = 60^\circ$; при експоненціальному розподілі – від 851.96 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 788.38 нм для s -поляризації та до 757.21 нм для p -поляризації при $\theta_0 = 75^\circ$.

Таблиця 4.12

Довжина хвилі $\lambda_{0,5}$, що відповідає $T=0.5$ для відрізаючого фільтра для різних розподілів неоднорідностей показника заломлення при різних кутах падіння

Розподіл\ Кут	0°	15°	30°	45°	60°	75°
s-поляризація						
Ідеальний	852.87	847.78	833.72	814.21	794.6	789.44
Ступінчастий	833.08	828.65	816.4	799.41	782.39	–
Лінійний	844.95	840.23	826.79	808.19	789.62	–
Квадратичний	848.32	843.28	829.64	810.91	791.89	–
Логарифмічний	841.99	837.36	824.29	806.17	787.78	–
Експоненціальний	851.96	846.87	832.92	813.53	794.04	788.38
p-поляризація						
Ідеальний	852.87	846.51	828.79	803.67	777.03	758.08
Ступінчастий	833.08	827.32	811.18	787.80	760.40	–
Лінійний	844.95	838.73	821.65	797.28	770.48	–
Квадратичний	848.32	842.19	824.64	800.14	773.11	–
Логарифмічний	841.99	835.86	819.12	794.84	767.78	–
Експоненціальний	851.96	845.63	827.98	802.94	776.27	757.21

Як бачимо з таблиці 4.13, для s -поляризації наявність неоднорідних областей збільшує значення максимуму пропускання T_{max} відносно ідеального випадку для всіх кутів падіння, а для p -поляризації при кутах падіння світла 0° , 15° та 75° наявність неоднорідних областей збільшує значення максимуму пропускання T_{max} , а 30° та 75° – зменшує.

Значення максимуму пропускання T_{max} при збільшенні кута падіння, за наявності перехідної та приповерхневої областей із ступінчастим розподілом показника заломлення, для s -поляризації буде зменшуватись від 0.990007 при $\theta_0 = 0^\circ$

до 0.879574 при $\theta_0 = 75^\circ$. При цій же поляризації та логарифмічному розподілі показників заломлення неоднорідних областей також буде зменшуватись від 0.984089 при $\theta_0 = 0^\circ$ до 0.775881 при $\theta_0 = 75^\circ$; при лінійному – від 0.982116 при $\theta_0 = 0^\circ$ до 0.741350 при $\theta_0 = 75^\circ$; при квадратичному – від 0.979881 при $\theta_0 = 0^\circ$ до 0.702215 при $\theta_0 = 75^\circ$; при експоненціальному – від 0.977461 при $\theta_0 = 0^\circ$ до 0.659857 при $\theta_0 = 75^\circ$. Для p -поляризації значення максимуму пропускання T_{max} при збільшенні кута падіння буде спадати до певного кута, а далі буде зростати.

Таблиця 4.13

Коефіцієнт максимуму пропускання T_{max} для різних розподілів неоднорідностей показника заломлення при різних кутах падіння

Розподіл \ Кут	0°	15°	30°	45°	60°	75°
s-поляризація						
Ідеальний	0.976856	0.974125	0.963819	0.936799	0.863650	0.649367
Ступінчастий	0.990007	0.990999	0.994268	0.999212	0.992993	0.879574
Лінійний	0.982116	0.981775	0.975899	0.961864	0.915487	0.741350
Квадратичний	0.979881	0.978106	0.970722	0.951254	0.893499	0.702215
Логарифмічний	0.984089	0.983306	0.980466	0.971226	0.934689	0.775881
Експоненціальний	0.977461	0.974801	0.965120	0.939570	0.869553	0.659857
p-поляризація						
Ідеальний	0.976856	0.979360	0.986561	0.996167	0.999614	0.995975
Ступінчастий	0.990007	0.988934	0.984832	0.974426	0.960461	0.996557
Лінійний	0.982116	0.983190	0.985769	0.987571	0.983853	0.996108
Квадратичний	0.979881	0.981562	0.986263	0.991267	0.990709	0.996209
Логарифмічний	0.984089	0.984626	0.985510	0.984219	0.978180	0.996395
Експоненціальний	0.977461	0.979800	0.986381	0.995157	0.997713	0.996102

Як бачимо з таблиці 4.14, значення положення довжини хвилі при максимумі пропускання λ_{max} для обох поляризацій за наявності неоднорідних областей буде зміщуватись у короткохвильову область відносно ідеального випадку. При збільшенні кута падіння положення довжини хвилі при максимумі пропускання λ_{max} також буде зміщуватись у короткохвильову область. Так, при ступінчастому

розподілі показника заломлення неоднорідних областей це зміщення буде від 851.73 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 777.91 нм для *s*-поляризації та до 797.88 нм для *p*-поляризації при $\theta_0 = 75^0$; при логарифмічному розподілі – від 858.17 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 781.15 нм для *s*-поляризації та до 795.48 нм для *p*-поляризації при $\theta_0 = 75^0$; при лінійному розподілі – від 860.32 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 782.22 нм для *s*-поляризації та до 794.68 нм для *p*-поляризації при $\theta_0 = 75^0$; при квадратичному розподілі – від 862.75 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 783.45 нм для *s*-поляризації та до 793.78 нм для *p*-поляризації при $\theta_0 = 75^0$; при експоненціальному розподілі – від 865.38 нм при $\theta_0 = 0^0$ до 784.77 нм для *s*-поляризації та до 792.80 нм для *p*-поляризації при $\theta_0 = 75^0$.

Таблиця 4.14

Значення положення довжини хвилі при максимумі пропускання λ_{max} для різних розподілів неоднорідностей показника заломлення при різних кутах падіння

Розподіл\ Кут	0^0	15^0	30^0	45^0	60^0	75^0
s-поляризація						
Ідеальний	866.04	860.47	845.06	823.58	801.58	785.1
Ступінчастий	851.73	846.64	832.58	812.99	792.92	777.91
Лінійний	860.32	854.84	840.07	819.24	798.23	782.22
Квадратичний	862.75	857.19	842.19	821.24	799.69	783.45
Логарифмічний	858.17	852.76	838.20	817.76	796.72	781.15
Експоненціальний	865.38	859.93	844.59	823.19	801.28	784.77
p-поляризація						
Ідеальний	866.04	859.99	843.35	820.55	799.35	792.55
Ступінчастий	851.73	846.47	832.10	812.95	799.18	797.88
Лінійний	860.32	854.48	838.75	817.61	799.28	794.68
Квадратичний	862.75	856.78	840.56	818.82	799.21	793.78
Логарифмічний	858.17	852.45	837.26	816.27	799.16	795.48
Експоненціальний	865.38	859.27	842.73	820.21	799.24	792.80

При збільшенні кількості шарів зменшується різниця між ідеальним випадком різких меж між плівками та наявністю приповерхневої та перехідної областей у низькозаломлюючій компоненті відрізаючих оптичних фільтрів. Це спостерігається

при всіх можливих робочих довжинах хвиль і довільних кутах падіння світла. Виходячи з отриманих результатів обчислювального експерименту, можна сформулювати наступні твердження.

Твердження 4.3. Наявність неоднорідних областей у низькозаломлюючому шарі відрізаючих оптичних фільтрів призводить до:

- значення мінімуму коефіцієнта пропускання T_{min} збільшується для обох поляризацій;

- положення мінімуму пропускання λ_{min} для обох поляризацій при кутах падіння, не більших за 15° , незначно зсувається в короткохвильову, а при більший – 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 для обох поляризацій;

- значення максимуму коефіцієнта пропускання T_{max} збільшується для s -поляризації, а для p -поляризації збільшується при кутах, менших за кут Брюстера, та зменшується в іншому випадку;

- положення максимуму пропускання λ_{max} для s -поляризації зсувається в короткохвильову область, а для p -поляризації при кутах падіння, менших за 75° , зсувається в короткохвильову, а при більший – у довгохвильову область.

Твердження 4.4. Якщо кут падіння світла збільшується, то спектральні параметри відрізаючих оптичних фільтрів як в ідеальному випадку, так і при наявності неоднорідних областей мають однакову тенденцію:

- значення мінімуму коефіцієнта пропускання T_{min} для s -поляризованого світла зменшується, а для p -поляризованого – зростає;

- положення мінімуму пропускання λ_{min} зміщується в короткохвильову область для обох поляризацій;

- ширина області мінімального пропускання $\Delta\lambda_{0,1}$ на рівні $T=0.1$ збільшується для s -поляризованого світла, а для p -поляризованого – зменшується; для кутів,

більших за 45° , значення коефіцієнта пропускання світла на досліджуваному проміжку є більшим за 0.1, відповідно цей параметр дорівнює 0;

– довжина хвилі $\lambda_{0,1}$, що відповідає $T=0.1$, зміщується в короткохвильову область для обох поляризацій та існує лише для кутів падіння світла не більших за 45° ;

– ширина області мінімального пропускання $\Delta\lambda_{0,5}$ на рівні $T=0.5$ збільшується для s -поляризованого світла, а для p -поляризованого – зменшується.

– довжина хвилі $\lambda_{0,5}$, що відповідає $T=0.5$, зміщується в короткохвильову область для обох поляризацій;

– коефіцієнт максимуму пропускання T_{max} для s -поляризованого світла зменшується, а для p -поляризованого – зростає до кута Брюстера, а потім спадає;

– положення максимуму пропускання λ_{max} зміщується в короткохвильову область для обох поляризацій.

4.4. Математичне моделювання впливу неоднорідностей на межах розділу на спектральні характеристики широкосмугових оптичних фільтрів при падінні світла під кутом

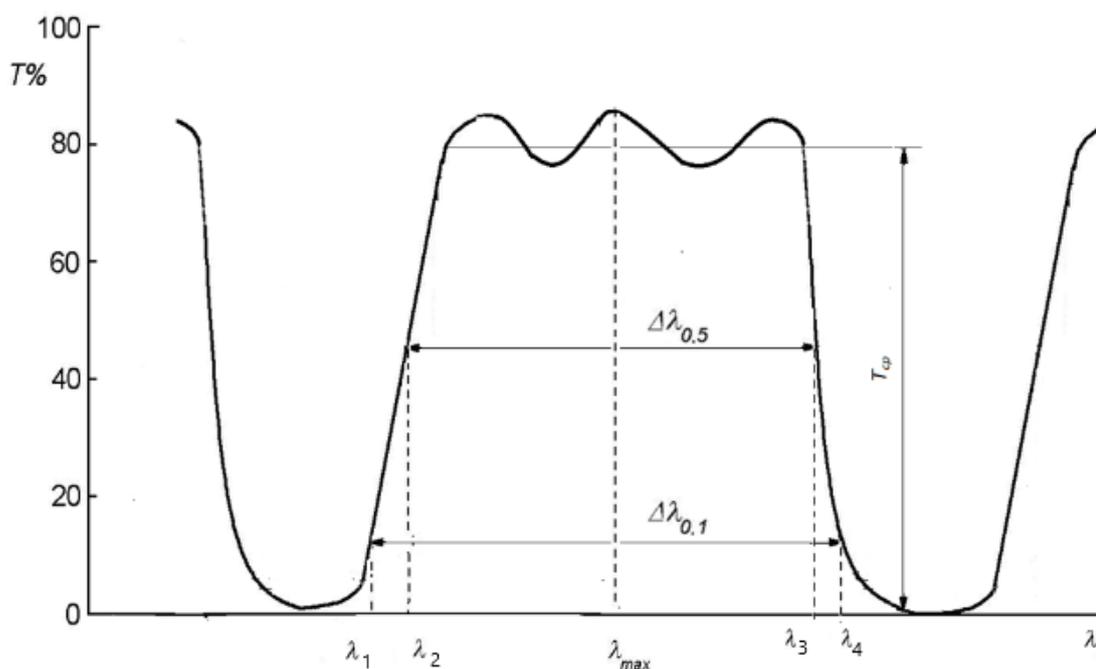


Рисунок 4.8. Основні характеристики широкосмугових оптичних фільтрів

Промодельємо вплив неоднорідності низькозаломлюючого шару на спектральні характеристики широкосмугових фільтрів [15-16]. Візьмемо як високозаломлюючий матеріал GeTe, він має показник заломлення рівний 5, а низькозаломлюючим матеріалом візьмемо GeS₂. У підрозділі розглядається, що центральна частина матеріалу GeS₂ має показник заломлення, рівний 2.1, і має приповерхневу і перехідну області з показником заломлення 2.6. Геометрична товщина приповерхневої області рівна 10 нм, а перехідної – 30 нм.

На рисунку 4.8 наведено основні характеристики широкосмугових оптичних фільтрів: середнє значення пропускання $T_{сер}$, яке визначається в діапазоні довжин хвиль від λ_2 до λ_3 – короткохвильова та довгохвильова границі спектрального діапазону на рівні $T=0.5$; ширина смуги пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ на рівні $T=0.5$ і ширина смуги пропускання $\Delta\lambda_{0.1}$ – на рівні $T=0.1$, які визначаються в діапазоні довжин хвиль від λ_2 до λ_3 та λ_1 до λ_4 – відповідно короткохвильові та довгохвильові границі спектрального діапазону. Розглянемо зміни спектрів пропускання широкосмугових оптичних фільтрів зі зміною кута падіння θ_0 для s - та p -поляризацій світлових потоків з робочою довжиною хвилі 3000 нм.

Таблиця 4.15

Основні параметри спектрів пропускання широкосмугового фільтра

Розподіл \ Кут	0°	15°	30°	45°	60°	75°
<i>s</i> -поляризація						
$\Delta\lambda_{0.5}$	987.19	936.38	929.74	916.98	–	–
$\Delta\lambda_{0.1}$	1169.82	1160.80	1135.98	1101.58	1066.22	1038.33
$T_{сер}$	0.816363	0.814296	0.782250	0.712856	–	–
<i>p</i> -поляризація						
$\Delta\lambda_{0.5}$	987.19	1006.73	1072.92	1175.98	1181.59	1191.75
$\Delta\lambda_{0.1}$	1169.82	1172.44	1180.11	1191.82	1204.50	1210.79
$T_{сер}$	0.816363	0.819063	0.840696	0.849924	0.906303	0.830664

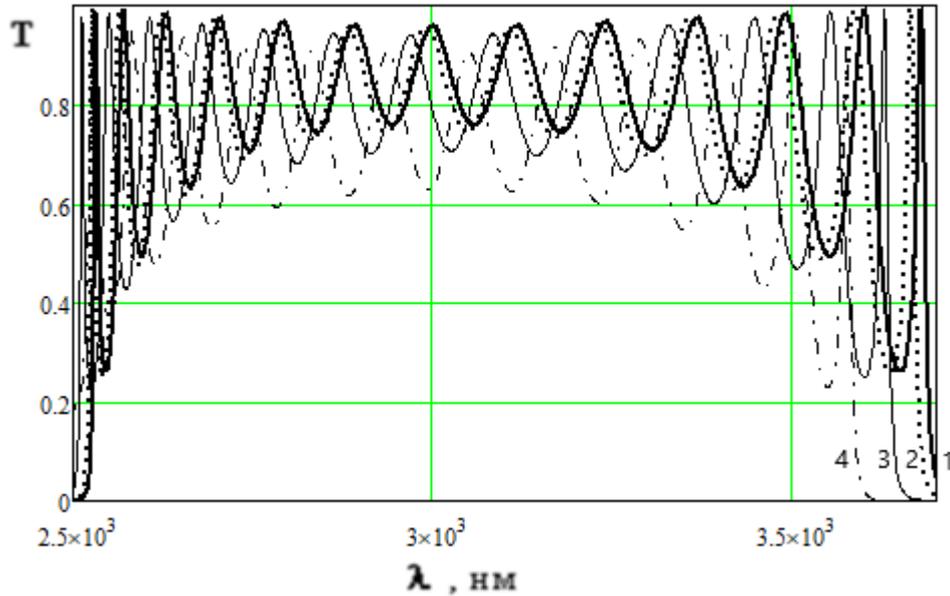


Рисунок 4.9. Трансформація спектрів пропускання 25-шарового ширококутового оптичного фільтра з робочою довжиною хвилі $\lambda_0 = 3000$ нм для s -поляризації при зміні кута падіння: 1 – $\theta_0 = 0^\circ$; 2 – $\theta_0 = 15^\circ$; 3 – $\theta_0 = 30^\circ$; 4 – $\theta_0 = 45^\circ$

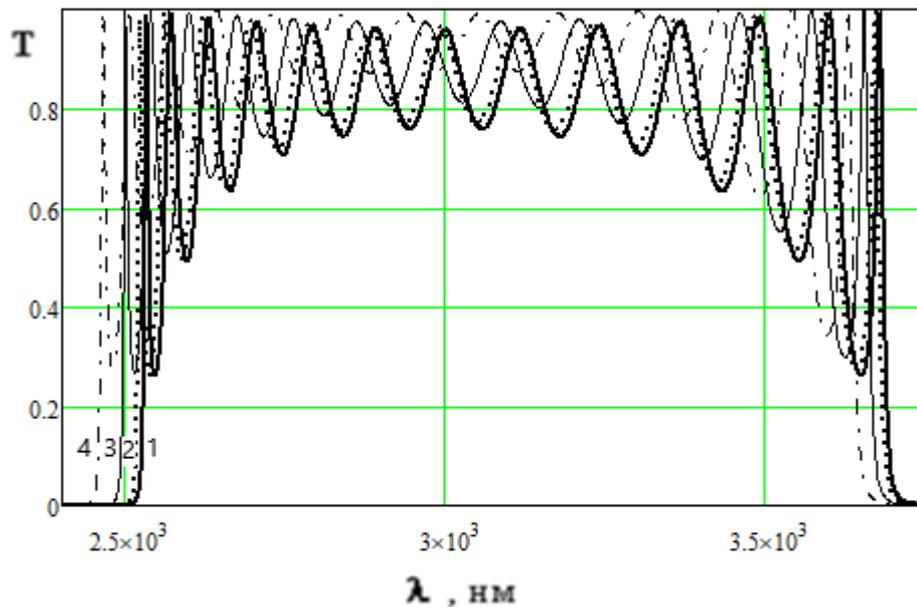


Рисунок 4.10. Трансформація спектрів пропускання 25-шарового ширококутового оптичного фільтра з робочою довжиною хвилі $\lambda_0 = 3000$ нм для p -поляризації при зміні кута падіння: 1 – $\theta_0 = 0^\circ$; 2 – $\theta_0 = 15^\circ$; 3 – $\theta_0 = 30^\circ$; 4 – $\theta_0 = 45^\circ$

Як бачимо з таблиці 4.15, середнє значення пропускання $T_{сер}$ для s -поляризації при збільшенні кута падіння світла зменшується від 0.816363 при $\theta_0 = 0^\circ$ до 0.712856 при $\theta_0 = 45^\circ$. При куті падіння $\theta_0 = 60^\circ$ крива коефіцієнта пропускання перетинає багато разів лінію $T = 0.5$, а при $\theta_0 = 75^\circ$ – знаходиться нижче цієї лінії. Це

стосується й випадку наявності неоднорідних областей у низькозаломлюючому шарі. Відповідно, середнє значення пропускання $T_{сер}$ при цих кутах падіння не наведено в таблицях 4.15, 4.16 та 4.18. Для p -поляризації ця характеристика зростає від $\theta_0 = 0^0$ до кута Брюстера, а потім зменшується. При цьому середнє значення пропускання $T_{сер}$ завжди більше для p -поляризації, ніж для s -поляризації.

Напів- та десятинна ширини смуги пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ та $\Delta\lambda_{0.1}$ для s -поляризації зменшуються, а для p -поляризації – зростають. На рисунках 4.9 та 4.10 зображено зміну спектрів при зміні кута падіння для 25-шарового ширококутового фільтра при робочій довжині хвилі $\lambda_0 = 3000$ нм для s - та p -поляризацій.

Розглянемо вплив неоднорідностей приповерхневої та перехідної областей низькозаломлюючого шару з різними розподілами показника заломлення на характеристики 25-шарового ширококутового фільтра при збільшенні кута падіння від 0^0 до 75^0 . Усі проведені обчислювальні експерименти (табл. 4.15–4.18) вказують, що на відхилення від ідеального випадку розподіли показників заломлення приповерхневої і перехідної областей впливають у такому порядку: ступінчастий, логарифмічний, лінійний, квадратичний та експоненціальний. Як і в попередніх підрозділах, це означає, що розглядувані розподіли збільшують відхилення від ідеального випадку з ростом середнього значення сумарного показника заломлення приповерхневої та перехідної областей.

Як видно з таблиці 4.16, середнє значення пропускання $T_{сер}$ при збільшенні кута падіння, за наявності перехідної та приповерхневої областей із ступінчастим розподілом показника заломлення в низькозаломлюючому шарі, для s -поляризації буде зменшуватись від 0.790361 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.703213 при $\theta_0 = 45^0$. При цій же поляризації та логарифмічному розподілі показників заломлення неоднорідних областей також буде зменшуватись від 0.802162 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.707652 при $\theta_0 = 45^0$; при лінійному – від 0.806962 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.708899 при $\theta_0 = 45^0$; при квадратичному – від 0.811383 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.710738 при $\theta_0 = 45^0$; при експоненціальному – від 0.815267 при $\theta_0 = 0^0$ до 0.712512 при $\theta_0 = 45^0$. Для p -поляризації середнє значення пропускання $T_{сер}$ за наявності неоднорідних областей

при збільшенні кута падіння до кута Брюстера буде зростати, а далі буде спадати. Для обох поляризацій характерним є те, що наявність неоднорідних областей зменшує середнє значення пропускання $T_{сер}$ відносно ідеального випадку для всіх кутів, менших за кут Брюстера. Причому це відхилення від ідеального випадку зростає з ростом середнього значення сумарного показника заломлення приповерхневої та перехідної областей. Для p -поляризації середнє значення пропускання $T_{сер}$ при куті падіння, який більший за кут Брюстера, буде більшим, ніж в ідеальному випадку.

Таблиця 4.16

Середнє значення пропускання $T_{сер}$ для різних розподілів неоднорідностей показника заломлення при різних кутах падіння

Розподіл\ Кут	0^0	15^0	30^0	45^0	60^0	75^0
s -поляризація						
Ідеальний	0.816363	0.814296	0.782250	0.712856	–	–
Ступінчастий	0.790461	0.787489	0.755191	0.703213	–	–
Лінійний	0.806962	0.803473	0.771526	0.708899	–	–
Квадратичний	0.811383	0.808230	0.776126	0.710738	–	–
Логарифмічний	0.802162	0.799652	0.767468	0.707652	–	–
Експоненціальний	0.815267	0.813163	0.781105	0.712512	–	–
p -поляризація						
Ідеальний	0.816363	0.819063	0.840696	0.849924	0.906303	0.830664
Ступінчастий	0.790461	0.793972	0.819381	0.827671	0.919042	0.854754
Лінійний	0.806962	0.808927	0.832270	0.837123	0.909499	0.840472
Квадратичний	0.811383	0.811422	0.835694	0.840106	0.908733	0.836305
Логарифмічний	0.802162	0.803413	0.828873	0.835585	0.912409	0.843814
Експоненціальний	0.815267	0.817595	0.839616	0.844640	0.906569	0.831872

Значення десятичної та напівширини смуг пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ та $\Delta\lambda_{0.1}$ за наявності неоднорідних областей високозаломлюючого шару зростають відносно ідеального випадку (табл.4.17-4.18). При збільшенні кута падіння значення

десятичної та напівширини смуг пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ та $\Delta\lambda_{0.1}$ для s -поляризації спадають, а для p -поляризації – зростають до кута Брюстера, а далі спадають.

Для s -поляризації при збільшенні кута падіння значення десятичної ширини смуги пропускання $\Delta\lambda_{0.1}$ за наявності перехідної та приповерхневої областей із ступінчастим розподілом показника заломлення в низькозаломлюючому шарі зменшується від 1177.71 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 1050.74 нм при $\theta_0 = 75^\circ$; із логарифмічним розподілом – від 1174.26 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 1045.26 нм при $\theta_0 = 75^\circ$; із лінійним – від 1172.78 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 1043.19 нм при $\theta_0 = 75^\circ$; із квадратичним – від 1171.63 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 1041.28 нм при $\theta_0 = 75^\circ$; із експоненціальним – від 1170.08 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 1038.82 нм при $\theta_0 = 75^\circ$. Для p -поляризації десятична ширина смуги пропускання $\Delta\lambda_{0.1}$ за наявності неоднорідних областей при збільшенні кута падіння до кута Брюстера буде зростати, а далі буде спадати (табл. 4.17).

Таблиця 4.17

Значення десятичної ширини смуги пропускання $\Delta\lambda_{0.1}$ для різних розподілів неоднорідностей показника заломлення при різних кутах падіння

Розподіл \ Кут	0°	15°	30°	45°	60°	75°
<i>s</i> -поляризація						
Ідеальний	1169.82	1160.80	1135.98	1101.58	1066.22	1038.33
Ступінчастий	1177.71	1169.02	1145.10	1111.93	1077.79	1050.74
Лінійний	1172.78	1164.19	1139.53	1105.62	1070.95	1043.19
Квадратичний	1171.63	1162.59	1138.18	1103.56	1068.78	1041.28
Логарифмічний	1174.26	1165.22	1141.23	1107.17	1072.68	1045.26
Експоненціальний	1170.08	1161.28	1136.32	1102.16	1066.65	1038.82
<i>p</i> -поляризація						
Ідеальний	1169.82	1172.44	1180.11	1191.82	1204.50	1201.79
Ступінчастий	1177.71	1180.56	1188.82	1201.26	1214.59	1211.25
Лінійний	1172.78	1175.79	1183.69	1195.70	1208.44	1205.57
Квадратичний	1171.63	1174.51	1182.41	1193.79	1206.52	1203.97
Логарифмічний	1174.26	1176.81	1184.90	1197.11	1210.15	1206.99
Експоненціальний	1170.08	1172.71	1180.61	1192.35	1204.86	1202.23

Значення напівширини смуги пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ для *s*-поляризації при збільшенні кута падіння за наявності перехідної та приповерхневої областей із ступінчастим розподілом показника заломлення зменшується від 1164.19 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 970.82 нм при $\theta_0 = 45^\circ$; із логарифмічним розподілом – від 1084.44 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 946.49 нм при $\theta_0 = 45^\circ$; із лінійним – від 1057.89 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 938.42 нм при $\theta_0 = 45^\circ$; із квадратичним – від 1027.83 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 929.38 нм при $\theta_0 = 45^\circ$; із експоненціальним – від 995.23 нм при $\theta_0 = 0^\circ$ до 919.36 нм при $\theta_0 = 45^\circ$. Для *p*-поляризації напівширина смуги пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ за наявності неоднорідних областей при збільшенні кута падіння до кута Брюстера буде зростати, а далі буде спадати (табл. 4.18).

Таблиця 4.18

Значення напівширини смуги пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ для різних розподілів неоднорідностей показника заломлення при різних кутах падіння

Розподіл\ Кут	0°	15°	30°	45°	60°	75°
<i>s</i> -поляризація						
Ідеальний	987.19	936.38	929.74	916.98	–	–
Ступінчастий	1164.19	1085.55	1045.72	970.82	–	–
Лінійний	1057.89	996.15	976.23	938.42	–	–
Квадратичний	1027.83	970.79	956.32	929.38	–	–
Логарифмічний	1084.44	1018.32	993.43	946.49	–	–
Експоненціальний	995.23	943.34	935.18	919.36	–	–
<i>p</i> -поляризація						
Ідеальний	987.19	1006.73	1072.92	1175.98	1181.59	1011.75
Ступінчастий	1014.19	1042.51	1125.63	1182.48	1191.80	1023.00
Лінійний	997.99	1021.04	1094.00	1178.58	1185.67	1016.25
Квадратичний	993.40	1014.96	1085.04	1177.48	1183.94	1014.34
Логарифмічний	1002.04	1026.41	1101.91	1179.56	1187.21	1017.94
Експоненціальний	988.43	1008.38	1075.34	1176.28	1182.06	1012.27

При збільшенні кількості шарів буде зменшуватись різниця між ідеальним випадком та випадком з наявністю приповерхневої та перехідної областей у низькозаломлюючому шарі при всіх робочих довжинах хвиль і кутах падіння світла. Виходячи з отриманих результатів обчислювального експерименту, можна сформулювати наступні твердження.

Твердження 4.5. Наявність неоднорідних областей у низькозаломлюючому шарі широкосмугових оптичних фільтрів призводить до:

- для *s*-поляризації зменшення відносно ідеального випадку середнього значення пропускання $T_{сер}$, десятичної та напівширини смуг пропускання $\Delta\lambda_{0.5}$ та $\Delta\lambda_{0.1}$;

- для *p*-поляризації зменшення відносно ідеального випадку середнього значення пропускання $T_{сер}$ при куті падіння від 0^0 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.

Твердження 4.6. Якщо кут падіння світла збільшується, то спектральні параметри широкосмугових оптичних фільтрів як в ідеальному випадку, так і при наявності неоднорідних областей мають однакову тенденцію: значення середнього коефіцієнта пропускання $T_{сер}$, 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.

Висновки до розділу 4

1. Наявність неоднорідних областей у високозаломлюючому шарі вузькосмугових оптичних фільтрів призводить для обох поляризацій до збільшення значення максимуму коефіцієнта пропускання T_{max} при кутах падіння, менших за кут Брюстера, та до зменшення в іншому випадку, зсуву довжини хвилі в положенні максимуму пропускання λ_{max} в довгохвильову область, зменшення напівширини $\Delta\lambda_{0.5}$ та десятичної ширини $\Delta\lambda_{0.1}$ та збільшення ширини спектральних інтервалів $\Delta\lambda_K$ та $\Delta\lambda_D$. Зі збільшенням кута падіння значення максимуму коефіцієнта пропускання T_{max} для s -поляризованого світла зменшується, а для p -поляризованого – зростає до кута Брюстера, а потім зменшуються; довжина хвилі в положенні максимуму пропускання λ_{max} зміщується в короткохвильову область; напівширина $\Delta\lambda_{0.5}$ та десятична 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.

2. Наявність неоднорідних областей у низькозаломлюючому шарі відрізаючих оптичних фільтрів призводить для обох поляризацій збільшення значення мінімуму коефіцієнта пропускання T_{min} , положення мінімуму пропускання λ_{min} при кутах падіння, не більших за 15° , 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 максимуму коефіцієнта пропускання T_{max} збільшується для s -поляризації, а для p -поляризації збільшується при кутах, менших за кут Брюстера, та зменшується в іншому випадку, положення максимуму пропускання λ_{max} для s -поляризації зсувається в короткохвильову область, а для p -поляризації при кутах падіння, менших за 75° , зсувається в короткохвильову, а при більших – у довгохвильову область. Зі збільшенням кута падіння значення мінімуму коефіцієнта пропускання T_{min} для s -поляризованого світла зменшується, а для p -

поляризованого – зростає; положення мінімуму пропускання λ_{\min} та максимуму пропускання λ_{\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; коефіцієнт максимуму пропускання T_{\max} для s -поляризованого світла зменшується, а для p -поляризованого – зростає до кута Брюстера, а потім спадає.

3. Наявність неоднорідних областей у низькозаломлюючому шарі ширококутових оптичних фільтрів призводить для s -поляризації до зменшення середнього значення пропускання $T_{\text{сер}}$, десятичної та напівширини смуг пропускання $\Delta\lambda_{0,5}$ та $\Delta\lambda_{0,1}$ відносно ідеального випадку; для p -поляризації зменшення середнього значення пропускання $T_{\text{сер}}$ при куті падіння від 0^0 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 середнього коефіцієнта пропускання $T_{\text{сер}}$, 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.

Література до розділу 4

1. Lee, S., Jeong, I., Kim, H. P., Hwang, S. Y., Kim, T. J., Kim, Y. D., ... & Kim, J. (2013). Effect of incidence angle and polarization on the optimized layer structure of organic solar cells. *Solar energy materials and solar cells*, 118, 9-17.
2. Hasegawa, T. (2007). Advanced multiple-angle incidence resolution spectrometry for thin-layer analysis on a low-refractive-index substrate. *Analytical chemistry*, 79(12), 4385-4389.

3. Liu, Q., Gerling, L. G., Bernal-Texca, F., Toudert, J., Li, T., Zhan, X., & Martorell, J. (2020). Light harvesting at oblique incidence decoupled from transmission in organic solar cells exhibiting 9.8% efficiency and 50% visible light transparency. *Advanced Energy Materials*, *10*(17), 1904196.
4. Minkov, D. (1991). Computation of the optical constants of a thin dielectric layer on a transmitting substrate from the reflection spectrum at inclined incidence of light. *JOSA A*, *8*(2), 306-310.
5. Marvin, A., Toigo, F., & Celli, V. (1975). Light scattering from rough surfaces: general incidence angle and polarization. *Physical Review B*, *11*(8), 2777.
6. Sveshnikov, A. G., Tikhonravov, A. V., & Ianshin, S. A. (1983). Synthesis of optical coatings for the oblique incidence of light. *Zhurnal Vychislitelnoi Matematiki i Matematicheskoi Fiziki*, *23*, 929-935.
7. Elson, J. M., Rahn, J. P., & Bennett, J. M. (1983). Relationship of the total integrated scattering from multilayer-coated optics to angle of incidence, polarization, correlation length, and roughness cross-correlation properties. *Applied Optics*, *22*(20), 3207-3219.
8. Sutter, F., Montecchi, M., von Dahlen, H., Fernández-García, A., & Röger, M. (2018). The effect of incidence angle on the reflectance of solar mirrors. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, *176*, 119-133.
9. Пецко В. І., Міца О. В., Фекешгазі І. В. Моделювання просторово-поляризаційних параметрів спектральних характеристик вузькосмугових оптичних фільтрів. *Комп'ютерна математика*. 2014. Випуск. 1. С. 37- 45.
10. Пецко В. І., Міца О. В. Моделювання впливу неоднорідностей на спектральні характеристики вузькосмугових оптичних фільтрів. *Східно-Європейський журнал передових технологій*. 2014. 4/5(70). С. 15- 20.
11. Holomb Roman, Mitsa Oleksandr, Akalin Elif, Akyuz Sevim, Spectroscopic studies g-GeSe₂-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.

12. 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*. 2015, III(6), Issue 54, P. 31-34.
13. 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: УжНУ, 2016. С. 213-214.
14. 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*. 2014, II(3), Issue 21, P. 63-65
15. Пецко В. І., Міца О. В. Моделювання просторово-поляризаційних параметрів та вплив неоднорідностей на спектральні характеристики широкосмугових фільтрів. *Вісник ТНТУ*. 2014. №3(75). С. 231-241.
16. Міца О. Моделі оптичних шаруватих структур з неоднорідностями та оптимізація їх параметрів. Вид-во «Рік», Ужгород, 2020. 336 с.
17. Первак Ю.А., Фекешгази И.В. Оптические свойства неравнотолщинных многослойных покрытий с симметричными периодами. *Квант. электрон.* (Киев). 1994. №46. С. 8-11.
18. Яремчук І.Я., Фітьо В.М., Бобицький Я.В. Спектральні характеристики багат шарових структур на основі трикомпонентних блоків. *Вісник Нац. Унів. „Львівська Політехніка“*. Електроніка. 2006. № 558. С. 80-85.
19. Первак В.Ю. Спектральные свойства интерференционных фильтров, образованных многократным повторением трехкомпонентных блоков фильтра. *Оптический журнал*. 2003. Том 70, № 10. С. 91-96.

РОЗДІЛ 5

МЕТОДИ ОПТИМІЗАЦІЇ ДЛЯ ЗАДАЧ СИНТЕЗУ ОПТИЧНИХ ПОКРИТТІВ

У розділі розглядаються методи знаходження оптимальних параметрів для задач синтезу оптичних покриттів (СОП). Вони використовують градієнтні методи, квазіньютонівські методи, r -алгоритми, методи нульового порядку (використовують лише значення цільової функції). Цільові функції визначають якість покриття, яке оцінюється відхиленням спектральних характеристик від тих, які потрібно досягти, за критеріями найменших квадратів, найменших модулів та мінімаксім. Описано підходи, які суттєво пришвидшують роботу оптимізаційних методів.

Матеріал розділу викладено в такому порядку. У підрозділі 5.1 наведено оптимізаційну постановку задачі, характеристики трьох функцій якості покриття, розглянуто коректність задачі за Адамаром, запропоновано функції якості для задачі синтезу широкосмугових оптичних покриттів. У підрозділі 5.2 описано особливості використання для розв'язання задач СОП градієнтних і квазіньютонівських методів, r -алгоритмів та методів нульового порядку, висвітлено питання вибору початкових наближень для кожного типу задач. У підрозділі 5.3 описано скінченно-різницевий та аналітичний способи знаходження градієнта для гладкої цільової функції та узагальнених градієнтів для негладких цільових функцій. Описано пришвидшення обох способів за допомогою техніки префікс- та суфікс-масивів.

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 за допомогою техніки префікс- та суфікс-масивів. Наведено також комп'ютерні способи пришвидшення, такі як табуляція значень тригонометричних функцій, швидке множення матриць та використання методу золотого перерізу при одновимірній оптимізації.

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

5.1. Постановка задачі СОП та її аналіз

5.1.1. Постановка задачі СОП та вибір функцій якості

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 введений 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

$$F_1(\vec{n}, \vec{d}) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L w_i \left(T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_i) - T_{ideal}(\lambda_i) \right)^2, \quad (5.4)$$

$$F_2(\vec{n}, \vec{d}) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L w_i |T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_i) - T_{ideal}(\lambda_i)|, \quad (5.5)$$

$$F_3(\vec{n}, \vec{d}) = \max_{i=1, \dots, L} w_i |T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_i) - T_{ideal}(\lambda_i)|, \quad (5.6)$$

де w_i – вагові коефіцієнти, які визначають внесок у цільову функцію при довжині хвилі λ_i , L – число точок сітки спектрального інтервалу від λ_1 до λ_2 , $T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_i)$ – значення коефіцієнта пропускання для параметрів (\vec{n}, \vec{d}) та довжини хвилі λ_i , $T_{ideal}(\lambda_i)$ – значення коефіцієнта пропускання, який потрібно досягнути при довжині хвилі λ_i .

Обмеження (5.2), (5.3) накладаються на параметри багат шарового оптичного покриття – показники заломлення та товщини. Показники заломлення вибираються із числа наявних плівкоутворюючих матеріалів. Залежно від спектральних діапазонів, це можуть бути різні набори. У видимій та інфрачервоній областях, як правило, показник заломлення не перевищує 2.6. Для ультрафіолетової області можуть бути задіяні матеріали з більш високим показником заломлення. Обмеження (5.3) задає умови на геометричну товщину плівки. Нижня межа прив'язана до технології нанесення, верхня межа при створенні багат шарових оптичних покриттів, як правило, не перевищує робочої довжини хвилі λ_0 .

Функції якості покриття за формулами (5.4)-(5.6) мають такий зміст. Функція $F_1(\vec{n}, \vec{d})$ задає зважене середньоквадратичне відхилення коефіцієнтів пропускання від потрібних для вибраних L значень довжин хвиль. Ця функція є гладкою, тому для її мінімізації можна застосовувати градієнтні методи, квазіньютонівські методи, методи нульового порядку (використовують лише значення цільової функції). Функція $F_2(\vec{n}, \vec{d})$ задає середньозважене відхилення за сумою модулів щодо вибраних L значень довжин хвиль. Функція $F_3(\vec{n}, \vec{d})$ задає відхилення за мінімаксим (чебишевським) критерієм. Функції $F_2(\vec{n}, \vec{d})$ та $F_3(\vec{n}, \vec{d})$ є негладкими, тому для їх мінімізації можуть бути використані г-алгоритми Шора та методи нульового порядку.

Значення коефіцієнта пропускання енергії електромагнітної хвилі довжини λ через багат шарову оптичну структуру при падінні світла на поверхню під кутом θ_0 (рис. 5.1) обчислюється через коефіцієнти характеристичної матриці $M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)$ таким чином:

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

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);

θ_0 – кут, під яким промінь падає на багат шарову структуру;

θ_s – кут, під яким промінь виходить із багат шарової структури;

n_0, n_s – показники заломлення зовнішнього середовища та підкладки відповідно.

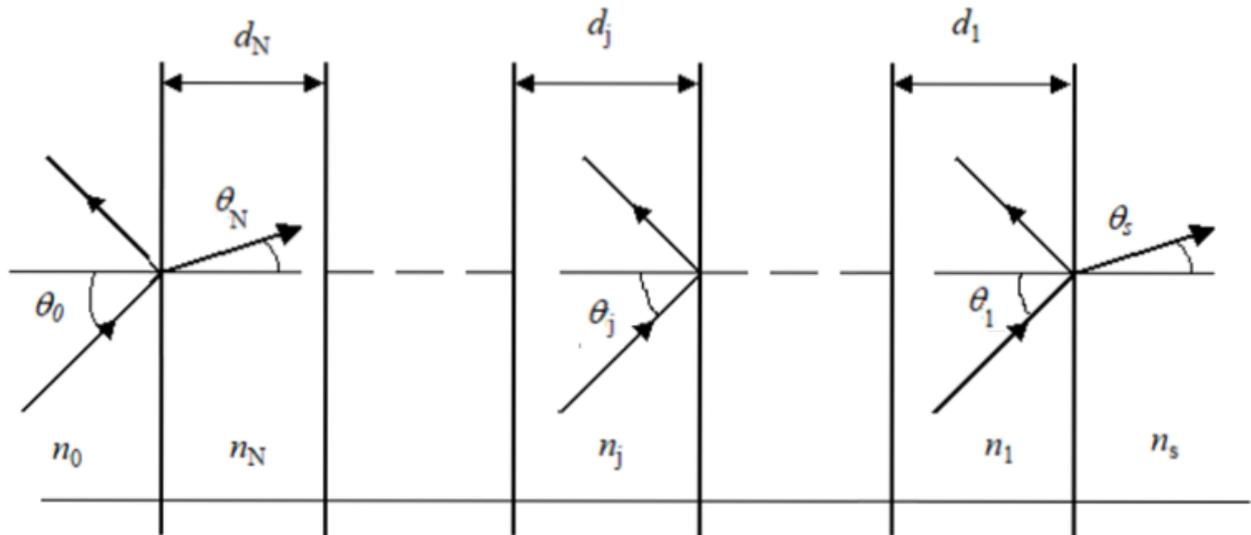


Рисунок 5.1. Загальна схема проходження світла через багат шарову оптичну структуру

Характеристична матриця N -шарової структури рівна добутку матриць кожного із шарів:

$$M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda, \theta_0) = \\ = M(n_N, d_N, \lambda, \theta_N) \cdot M(n_{N-1}, d_{N-1}, \lambda, \theta_{N-1}) \cdots M(n_2, d_2, \lambda, \theta_2) \cdot M(n_1, d_1, \lambda, \theta_1),$$

де характеристична матриця одного шару рівна

$$M(n, d, \lambda, \theta) = \begin{vmatrix} \cos \delta(n, d, \lambda, \theta) & -\frac{i}{n} \cdot \sin \delta(n, d, \lambda, \theta) \\ -i \cdot n \cdot \sin \delta(n, d, \lambda, \theta) & \cos \delta(n, d, \lambda, \theta) \end{vmatrix},$$

$\delta(n, d, \lambda, \theta) = \frac{2\pi n d \cdot \cos\theta}{\lambda}$ – фазова товщина шару, $i = \sqrt{-1}$, θ – кут між променем і нормаллю до площини падіння.

Кути між променем і нормаллю до площини падіння для кожного із шарів пов'язані законом Снеліуса і легко визначаються зі співвідношення:

$$n_0 \sin \theta_0 = n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2 = \dots = n_j \sin \theta_j = \dots = n_N \sin \theta_N = n_s \sin \theta_s.$$

Якщо $\theta_0 = 0$, то значення коефіцієнта пропускання для N -шарової оптичної структури обчислюються за формулою

$$T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda) = \frac{4}{2 + \frac{n_0}{n_s} M_{11}^2(\vec{n}, \vec{d}, \lambda) + \frac{n_s}{n_0} M_{22}^2(\vec{n}, \vec{d}, \lambda) + n_0 n_s M_{12}^2(\vec{n}, \vec{d}, \lambda) + \frac{1}{n_0 n_s} M_{21}^2(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)},$$

де характеристична матриця N -шарової структури матиме вигляд

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

а характеристична матриця одного шару рівна

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

Зауважимо, що для характеристичної матриці багатошарової оптичної структури виконується умова

$$\det(M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)) = 1. \quad (5.7)$$

Це випливає з того, що характеристична матриця кожного шару має таку ж властивість

$$\det(M(n_i, d_i, \lambda)) = 1, i = 1, 2, \dots, N.$$

Властивість (5.7) має простий фізичний зміст. Якщо електромагнітна хвиля поширюється в N непоглинаючих її енергію середовищах, то довільним чином скомбіноване (із цих N середовищ) середовище не буде поглинати енергію електромагнітної хвилі.

При розв'язанні задачі просвітлення підкладки значення $T_{ideal}(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_i)$ є сталими і рівними одиниці. При цьому цільові функції будуть мати вигляд:

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

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

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

Враховуючи, що коефіцієнт пропускання менший за одиницю, то функцію $F_2(\vec{n}, \vec{d})$ ми можемо записати в такому вигляді

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

і вона буде гладкою для задач просвітлення прокладки. Аналогічно функцію $F_3(\vec{n}, \vec{d})$ можна записати у вигляді

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

Але, на відміну від функції $F_2(\vec{n}, \vec{d})$, вона є негладкою.

У випадку, якщо всі $w_i = 1$, отримуємо такі цільові функції

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

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

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

Задачі синтезу широкопasmових оптичних покриттів у роботах [1-4] розглядалися як задачі на максимум для аналогічних відхилень, але не від

максимального коефіцієнта пропускання, а від мінімально можливого, тобто нульового значення коефіцієнта пропускання. Для середньозваженого квадратичного відхилення ця задача формулюється як

$$\max_{\vec{n}, \vec{d}} \left(F(\vec{n}, \vec{d}) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L T^2 \left(\overline{n(\lambda_i)}, \vec{d}, \lambda_i \right) \right), \quad (5.8)$$

при обмеженнях (5.2) та (5.3).

Аналогічно для середньозваженого відхилення за сумою модулів ця задача формулюється як

$$\max_{\vec{n}, \vec{d}} \left(F(\vec{n}, \vec{d}) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L T \left(\overline{n(\lambda_i)}, \vec{d}, \lambda_i \right) \right), \quad (5.9)$$

при обмеженнях (5.2) та (5.3).

Для відхилення за мінімаксним (чебишевським) критерієм задача формулюється як

$$\max_{\vec{n}, \vec{d}} \left(F(\vec{n}, \vec{d}) = \min_{i=1, \dots, L} T \left(\overline{n(\lambda_i)}, \vec{d}, \lambda_i \right) \right). \quad (5.10)$$

при обмеженнях (5.2) та (5.3).

У цих моделях, які використовують функції якості (5.8)-(5.10), передбачається, що може бути дисперсія показника заломлення. Відповідно значення показника заломлення є функцією від довжини хвилі і задається наближеною формулою Зельмеєра

$$n_i(\lambda) = \sqrt{A_i + \frac{B_i}{\lambda^2} + \frac{C_i}{\lambda^4} + D_i \lambda^2 + E_i \lambda^4},$$

де A_i, B_i, C_i, D_i, E_i – параметри для моделі показника заломлення за наявності дисперсії. Оптичні матеріали можна описувати або значеннями коефіцієнтів дисперсійної формули, або безпосередньо значеннями показника заломлення для

різних довжин хвиль. Коефіцієнти Зельмеєра легко знаходяться за схемою, описаною в розділі 3.2. Для багатьох оптичних матеріалів вони доступні в базах даних.

5.1.2. Характеристика задачі СОП

Задача (5.1)–(5.3) є багатоекстремальною. Вона містить $2N$ змінних, де перші N змінних – це показники заломлення шарів, другі N змінних – це геометричні товщини шарів. Двосторонні обмеження на змінні задаються умовами (5.2)–(5.3).

Локальні мінімуми задачі (5.1)–(5.3) часто забезпечують потрібну точність апроксимації та мають практично реалізовані параметри покриття. У статті [5] Тихонравов А.В. та Гришина Н.В. такі розв'язки запропонували називати квазіоптимальними. Ми будемо дотримуватися цієї назви, розуміючи під квазіоптимальними розв'язками такі локальні екстремуми задачі (5.1)–(5.3), для яких знайдені параметри покриття є практично реалізовані.

У статті [6] Гласко В.Б., Тихонов А.Н., Тихонравов А.В. дослідили коректність задачі СОП за Адамаром. Задача є коректною за Адамаром, якщо 1) існує розв'язок; 2) розв'язок єдиний; 3) розв'язок стійкий до малих варіацій знайдених параметрів.

Якщо кількість шарів збільшується, то ми отримуємо більше параметрів для зменшення значення функцій якості $F(\vec{n}, \vec{d})$ в оптимізаційних задачах СОП. Тому варто уточнити критерій припинення пошуку розв'язку оптимізаційної задачі (5.1)–(5.3). Будемо шукати розв'язок з точністю ε

$$|F(\vec{n}_\varepsilon^*, \vec{d}_\varepsilon^*) - F^*| \leq \varepsilon. \quad (5.11)$$

У випадку задачі на мінімум – це буде нерівність $F(\vec{n}_\varepsilon^*, \vec{d}_\varepsilon^*) - F^* \leq \varepsilon$, а у випадку задачі на максимум – це буде $F^* - F(\vec{n}_\varepsilon^*, \vec{d}_\varepsilon^*) \leq \varepsilon$.

Уведення нерівності (5.11) в оптимізаційну модель викликане двома факторами. По-перше, існує велика кількість квазіоптимальних розв'язків, які можуть мати конструкторське впровадження. По-друге, точного наближення заздалегідь заданих спектральних характеристик часто досягти неможливо.

Спектральні характеристики оптичного покриття є аналітичними функціями і можуть бути диференційовані нескінченну кількість разів. Відповідно, якщо ідеалізована характеристика є постійною чи має розриви, то точної апроксимації не отримаємо. З практичної точки зору в постановку задачі варто також внести умову на обмеження кількості шарів, яка б служила критерієм зупинки пошуку розв'язку і коректуванням достатньо малої величини ε .

Додаткова умова, яка пов'язана з виготовленням оптичного покриття, дозволяє вибрати з множини розв'язків, що задовольняють критерій (5.11), одну конструкцію – відповідно буде виконуватись друга умова Адамара. Ця умова повинна враховувати особливості вибраних матеріалів, їх взаємодію між собою.

Метод Монте-Карло дозволяє вибирати найбільш стійкі до похибок конструкторські розв'язки (підрозділ 3.3). Тому для вибраного оптичного покриття повинна виконуватись умова, що незначна зміна вхідних параметрів також буде задовольняти критерій (5.8), відповідно, буде задовольняти третю умову Адамара.

5.2. Методи оптимізації для задач СОП

5.2.1. Використання градієнтних методів для задач СОП

У загальному випадку градієнтні методи здійснюють пошук розв'язку за ітераційною формулою [7]:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k g(\mathbf{x}^k), \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

де $\mathbf{x}^k = (n_1^k, n_2^k, \dots, n_N^k, d_1^k, d_2^k, \dots, d_N^k)^T$ – вектор параметрів, координатами якого є показники заломлення n_j і геометричні товщини d_j , вектор $g(\mathbf{x}^k)$ – градієнт функції $f(x)$ на k -ій ітерації, α_k – відповідний крок уздовж цього напрямку.

Якщо крок α_k^* визначається із розв'язку задачі одновимірної оптимізації $f(\mathbf{x}^k + \alpha_k^* \xi_k) = \min f(\mathbf{x}^k + \alpha_k \xi_k)$, то такий метод називається градієнтним методом найшвидшого спуску. Для розв'язання оптимізаційних задач СОП в якості методу одновимірної оптимізації було використано метод золотого перерізу.

Рух у вибраному напрямку не враховує обмеження, які накладаються на показники заломлення й геометричні товщини (5.2)–(5.3). Тому краще перейти до безумовної оптимізації, використавши перехід до інших змінних

$$x_j = x_{j\min} + (x_{j\max} - x_{j\min}) \sin^2 z_j, \quad (5.12)$$

$$x_j = \frac{x_{j\max} z_j^2 + x_{j\min}}{z_j^2 + 1}, \quad j = 1, \dots, N. \quad (5.13)$$

Таким чином, для кожного з параметрів є можливість шукати розв'язок у нескінченному просторі. Цільова функція при цьому ускладнюється. Змінні за формулою (5.12) забезпечують більш плавну зміну утвореної поверхні і мають менш різкі перепади, ніж при використанні формули (5.13). З іншого боку, перехід до безумовної оптимізації за формулою (5.12) потребує обчислення значення $\arcsin(x)$, що є досить затратною операцією за часом. Для підходу, який використовується в цій роботі, це стосується як значень геометричних товщин, так і показників заломлення. Для цього серед значень показників заломлення потрібно вибрати мінімальне та максимальне. Більш детально вибір показників заломлення шарів у кінцевому випадку описано в розділі 5.5.

У роботі були використані методи нульового порядку – Хука-Дживса та Розенброка; градієнтні методи [8-19] – найшвидшого спуску, спряжених градієнтів (Флетчера-Рівса, Поллака-Рібб'єра) та змінної метрики (Давідона-Флетчера-Пауелла, Гольдфарба, Фіакко–Мак-Кормика, Грінстадта); методи узагальненого градієнта з перетворенням простору – r -алгоритм Шора [20-28].

Після переходу до задачі безумовної оптимізації задачу (5.1)–(5.3) можна розглядати як задачу пошуку точки мінімуму гладкої або негладкої функції $f(x)$, $x \in R^n = R^{2N}$. Мінімальне значення функції позначимо $f^* = f(x^*)$, де $x^* \in X^*$. Для її розв'язання можна використовувати r -алгоритми, які детально описані в підрозділі 1.3.

$r(\alpha)$ -Алгоритмом мінімізації функції $f(x)$ називається ітеративна процедура знаходження послідовності $2n$ -вимірних векторів \mathbf{x}^k та послідовності матриць $\{B_k\}_{k=0}^{\infty}$ за таким правилом:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - h_k B_k \xi_k, B_{k+1} = B_k R_{\beta_k}(\eta_k), k=0,1,2,\dots, \quad (5.14)$$

де

$$\xi_k = \frac{B_k^T g_f(\mathbf{x}^k)}{\|B_k^T g_f(\mathbf{x}^k)\|}, h_k \geq h_k^* = \arg \min_{h \geq 0} f(\mathbf{x}^k - h B_k \xi_k), \quad (5.15)$$

$$\beta_k = \frac{1}{\alpha_k} < 1, \quad \eta_k = \frac{B_k^T r_k}{\|B_k^T r_k\|},$$

$$r_k = g_f(\mathbf{x}^{k+1}) - g_f(\mathbf{x}^k). \quad (5.16)$$

Тут x_0 – стартова точка; $B_0 = I_n$ – одинична $n \times n$ -матриця (як матрицю B_0 часто вибирають діагональну матрицю з додатними коефіцієнтами на діагоналі, за допомогою якої здійснюється масштабування змінних); h_k^* – величина кроку до точки мінімуму функції $f(x)$; $R_{\beta}(\eta) = I_n + (\beta - 1)\eta\eta^T$ – оператор стиснення простору субградієнтів у нормованому напрямку η з коефіцієнтом $\beta = 1/\alpha < 1$; $g_f(\mathbf{x}^{k+1})$ і $g_f(\mathbf{x}^k)$ – узагальнені градієнти функції $f(x)$ в точках \mathbf{x}^{k+1} та \mathbf{x}^k . Якщо на ітерації k процесу (15.14) – (15.16) виконані критерії (умови) зупинки, то вважаємо $k^* = k$, $x_k^* = x_k$ і закінчуємо роботу алгоритму.

На кожній ітерації r -алгоритмів реалізується градієнтний спуск для функції $\varphi(y) = f(B_k y)$ в перетвореному просторі змінних $y = A_k x$, де $A_k = B_k^{-1}$. Справді, якщо обидві частини формули $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - h_k B_k \xi_k$ домножити зліва на матрицю A_k , то отримаємо

$$y_{k+1} = A_k \mathbf{x}^{k+1} = A_k \mathbf{x}^k - h_k \xi_k = y_k - h_k \frac{B_k^T g_f(\mathbf{x}^k)}{\|B_k^T g_f(\mathbf{x}^k)\|} = y_k - h_k \frac{g_{\varphi}(y_k)}{\|g_{\varphi}(y_k)\|},$$

де вектор $g_\varphi(y_k) = B_k^T g_f(\mathbf{x}^k)$ – узагальнений градієнт функції $\varphi(y) = f(B_k y)$ в точці $y_k = A_k \mathbf{x}^k$ простору змінних $y = A_k x$.

Сімейство $r(\alpha)$ -алгоритмів визначається коефіцієнтом розтягу простору $\alpha > 1$ і послідовністю величин кроків $\{h_k\}_{k=0}^\infty$, які визначають ті два послідовні узагальнені градієнти $g_f(\mathbf{x}^{k+1})$ і $g_f(\mathbf{x}^k)$, розтягування за різницею яких (див. формулу (15.16)) зменшує ступінь витягнутості функції в перетвореному просторі змінних. Вибір коефіцієнта $\alpha > 1$ та адаптація величин $\{h_k\}_{k=0}^\infty$ до критеріїв зупинки визначають ті чи інші варіанти $r(\alpha)$ -алгоритмів. Кількість ітерацій $r(\alpha)$ -алгоритму, необхідна для знаходження точки \mathbf{x}^{k^*} , для якої $f(\mathbf{x}^{k^*}) - f^* \leq \varepsilon$, емпірично оцінюється як $k^* = O(n \log(1/\varepsilon))$, де n – кількість змінних.

У практичних реалізаціях $r(\alpha)$ -алгоритмів зазвичай використовують адаптивний спосіб регулювання кроку. Він полягає в тому, що величина h_k налаштовується (адаптується) в процесі виконання одновимірного спуску, який завершується, як тільки знайдено узагальнений градієнт, що утворює негострий кут з узагальненим градієнтом, що визначає напрямок одновимірного спуску (умова завершення спуску за напрямком). Налаштування величини кроку h_k здійснюється за допомогою чотирьох параметрів: $h_0 > 0$ – величина початкового кроку (використовується на першій ітерації, а на кожній наступній – уточнюється); q_1 ($q_1 \leq 1$) – коефіцієнт зменшення кроку (якщо умова завершення спуску за напрямком виконується за перший крок); q_2 ($q_2 \geq 1$) – коефіцієнт збільшення кроку. Через кожні n_h кроків одновимірного спуску ($h_h > 1$) величина кроку збільшується в q_2 разів. Якщо множина мінімумів X^* є обмеженою, то після скінченної кількості кроків адаптивного спуску в напрямку нормованого узагальненого антисубградієнта обов'язково виконується умова завершення спуску за напрямком.

Методи змінної метрики та спряжених градієнтів здійснюють пошук розв'язку за ітераційною формулою:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{p}^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

де вектор \mathbf{p}^k – напрям пошуку на k -ій ітерації, α_k – відповідний крок уздовж цього напрямку.

Напрямок пошуку при виконанні першої ітерації в методі спряжених градієнтів, як і в методі змінної метрики, вибирають таким, що співпадає з антиградієнтом. Для прискорення збіжності, а також виключення можливих накопичень похибок обчислень, при практичних обчисленнях рекомендується періодично через декілька ітерацій оновлювати напрям пошуку, наприклад, заміною поточного напрямку антиградієнтним. Пошукові методи змінної метрики й спряжених градієнтів сполучають переваги методів першого та другого порядків. Перша ітерація в цих методах виконується за методом градієнтного спуску, тоді як у міру наближення до мінімуму зміна функції набуває все більшою мірою квадратичного характеру.

Значення вектора \mathbf{p}^k для розглядуваних методів визначалось наступним чином. Для найшвидшого спуску – це градієнт $\mathbf{p} = -\nabla F(\mathbf{x})$. У методах змінної метрики напрям вибирається за формулою $\mathbf{p}^k = -\mathbf{h}_k \nabla F(\mathbf{x}^k)$, де $\mathbf{h}_k \equiv \mathbf{h}(\mathbf{x}_k)$ – k -те наближення оберненої матриці Гессе функції $F(\mathbf{x}^k)$. Відповідно, вибір \mathbf{h}_k вирізняє методи змінної метрики:

метод Девідона – Флетчера – Пауелла

$$\mathbf{h}_{k+1} = h_k + \frac{\mathbf{r}^k (\mathbf{r}^k)^T}{(\mathbf{r}^k)^T \mathbf{Y}^k} + \frac{h_k \mathbf{Y}^k (\mathbf{Y}^k)^T h_k}{(\mathbf{Y}^k)^T h_k \mathbf{Y}^k};$$

метод Гольдфарба

$$\mathbf{h}_{k+1} = \mathbf{h}_k + \left[\left(1 + \frac{(\mathbf{Y}^k)^T h_k \mathbf{Y}^k}{(\mathbf{Y}^k)^T \mathbf{r}^k} \right) \mathbf{r}^k (\mathbf{r}^k)^T - \mathbf{r}^k (\mathbf{Y}^k)^T h_k - h_k \mathbf{Y}^k (\mathbf{r}^k)^T \right] \frac{1}{(\mathbf{Y}^k)^T \mathbf{r}^k};$$

метод Фіакко – Мак-Корміка

$$\mathbf{h}_{k+1} = h_k + (\mathbf{r}^k - h_k \mathbf{Y}^k) \left[(\mathbf{Y}^k)^T (\mathbf{r}^k - h_k \mathbf{Y}^k) \right]^{-1} \left[(\mathbf{r}^k)^T - (\mathbf{Y}^k)^T h_k \right];$$

метод Грінстадта

$$\mathbf{h}_{k+1} = \mathbf{h}_k + \left[\mathbf{r}^k (\mathbf{Y}^k)^T h_k + h_k \mathbf{Y}^k (\mathbf{r}^k)^T - \left(1 + \frac{(\mathbf{Y}^k)^T \mathbf{r}^k}{(\mathbf{Y}^k)^T h_k \mathbf{Y}^k} \right) h_k \mathbf{Y}^k (\mathbf{Y}^k)^T h_k \right] \frac{1}{(\mathbf{Y}^k)^T h_k \mathbf{Y}^k}.$$

Тут прийнято позначення $\mathbf{r}^k = \alpha_k^* \mathbf{h}_k \nabla F(\mathbf{x}^k)$, $\mathbf{Y}^k = \nabla F(\mathbf{x}^{k+1}) - \nabla F(\mathbf{x}^k)$.

У методах спряжених градієнтів напрям $\mathbf{p}^{k+1} = -\nabla F(\mathbf{x}^k) + \beta_k \mathbf{p}^k$, де

$$\beta_k = \frac{\nabla^T F(\mathbf{x}^k) \nabla F(\mathbf{x}^{k+1})}{\nabla^T F(\mathbf{x}^{k+1}) \nabla F(\mathbf{x}^k)} - \text{метод Флетчера-Рівса},$$

$$\beta_k = \frac{(\mathbf{Y})^T \nabla F(\mathbf{x}^{k+1})}{\nabla^T F(\mathbf{x}^k) F(\mathbf{x}^k)} - \text{метод Поллака - Рібб'єра}.$$

5.2.2. Вибір початкових наближень

Градієнтні методи є ефективними й дають якісні розв'язки для великого числа шарів лише в поєднанні з правильно вибраними початковими наближеннями.

Досить часто з використанням одного нульового наближення знайти квазіоптимальний розв'язок не можна. Наявність великої кількості локальних екстремумів є завадою для цієї мети. Тому на практиці має місце один з таких варіантів.

1) Область, у якій шукається екстремум цільової функції, розбивається на невеликі підобласті, на центрах яких як на нульових наближеннях перевіряють роботоздатність того чи іншого ітераційного алгоритму. Якщо при цьому потрібний критерій поведінки цільової функції виконується, то можна процес продовжити до критерію припинення ітераційного процесу, у протилежному випадку необхідно впевнитись, що екстремуму потрібного характеру в цій підобласті немає. Організація повного перебору початкових наближень, як правило, дозволяє досягнути бажаного результату, але потребує для цього багато часу. Тобто якщо діапазон значень кожного параметру розбити на m частинок, а кількість шарів буде

рівною n , то кількість варіантів різних початкових наближень буде рівна m^{2n} . Це ефективно працює лише для невеликих значень m та n .

2) Початкові наближення визначаються методами випадкового пошуку.

3) Початкові наближення вибирались виходячи з досвіду. Тобто зі структур, які вже дають непогане наближення.

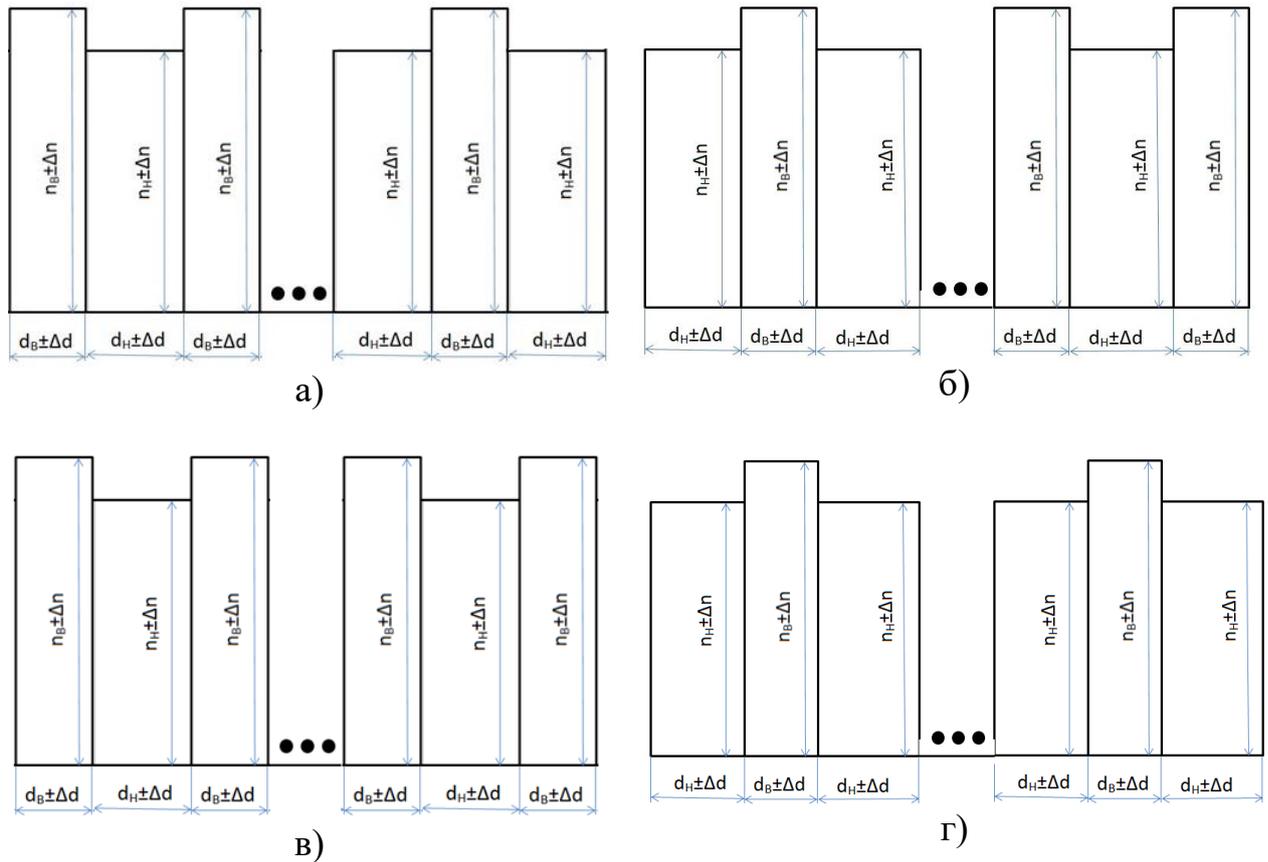


Рисунок 5.2. Структури багатошарового покриття, які використовувались у роботі як початкові наближення при синтезі відрізаючих оптичних фільтрів

Для розв'язання задачі (5.1)-(5.3) було вибрано 3-й варіант. З отриманих квазіоптимальних розв'язків вибиралось те, при якому функція якості приймає найменше значення.

Це можна зробити при синтезі відрізаючих, широкосмугових та вузькосмугових оптичних фільтрів. Зокрема, для відрізаючих оптичних фільтрів досить ефективними є початкові наближення, які будуть мати структуру, яка зображена на рисунку 5.2. Вони задаються таким чином. Спочатку вибираємо

середину діапазону й фіксуємо відповідне значення λ_0 . Далі вибираємо випадковим чином показник заломлення для першого шару з діапазону $[n_B - \Delta n, n_B + \Delta n]$, де n_B – високий показник заломлення, а Δn – деяке невелике значення, яке дозволяє покривати певну кількість високозаломлюючих матеріалів. Геометричну товщину для першого шару вибираємо з певного околу значення $\frac{\lambda_0}{4 \cdot n_1}$. Відповідно для другого шару вибираємо випадковим чином показник заломлення з діапазону $[n_H - \Delta n, n_H + \Delta n]$, де n_H – низький показник заломлення, а геометричну товщину вибираємо з певного околу значення $\frac{\lambda_0}{4 \cdot n_2}$ (рис. 5.3).

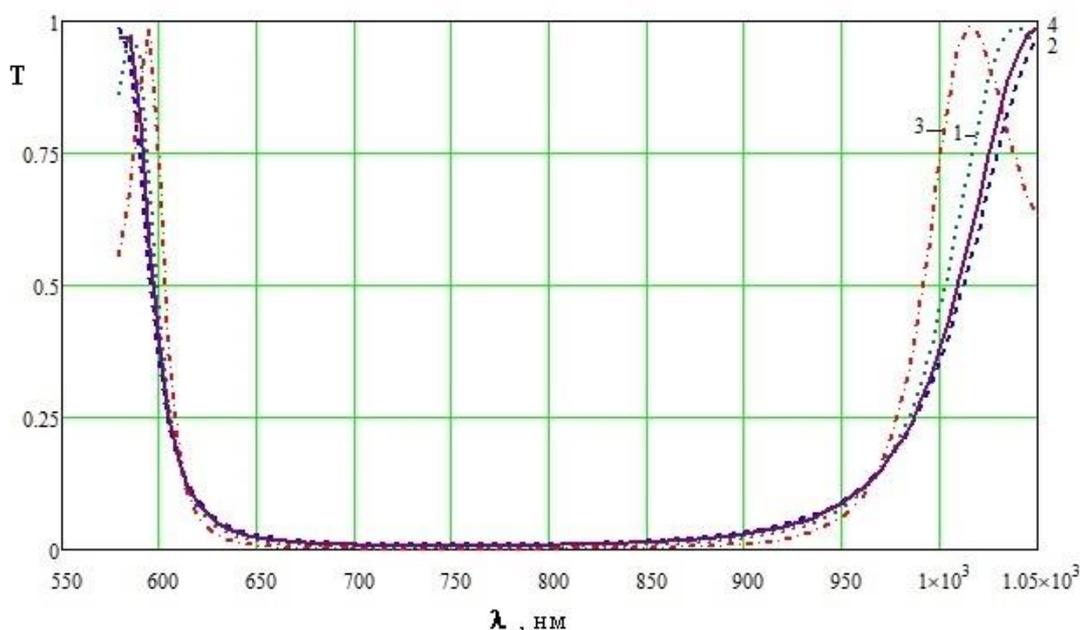


Рисунок 5.3. Спектральні характеристики багатошарового оптичного покриття:

- 1 – 10-шарове покриття S-ВНВ...НВН
- 2 – 10-шарове покриття S- НВН...ВНВ
- 3 – 11-шарове покриття S-ВНВ...ВНВ
- 4 – 11-шарове покриття S- НВН...НВН

Таким чином, непарні шари формуються за принципом, який було використано для першого шару, а парні – за принципом, який було використано для другого шару. Не менш ефективними є також початкові наближення, у яких спочатку буде йти низькозаломлюючий шар, а потім – високозаломлюючий, і вони

чергуються. Для низькозаломлюючого та високозаломлюючого шарів вибираються параметри за цими ж, наведеними вище принципами. На рисунку 5.3 структури а) та б) є ефективними початковими наближеннями при непарній кількості шарів. При парній кількості потрібно використати на один шар менше (рис. 5.2в та 5.2г), що не погіршить спектральні характеристики (рис. 5.3).

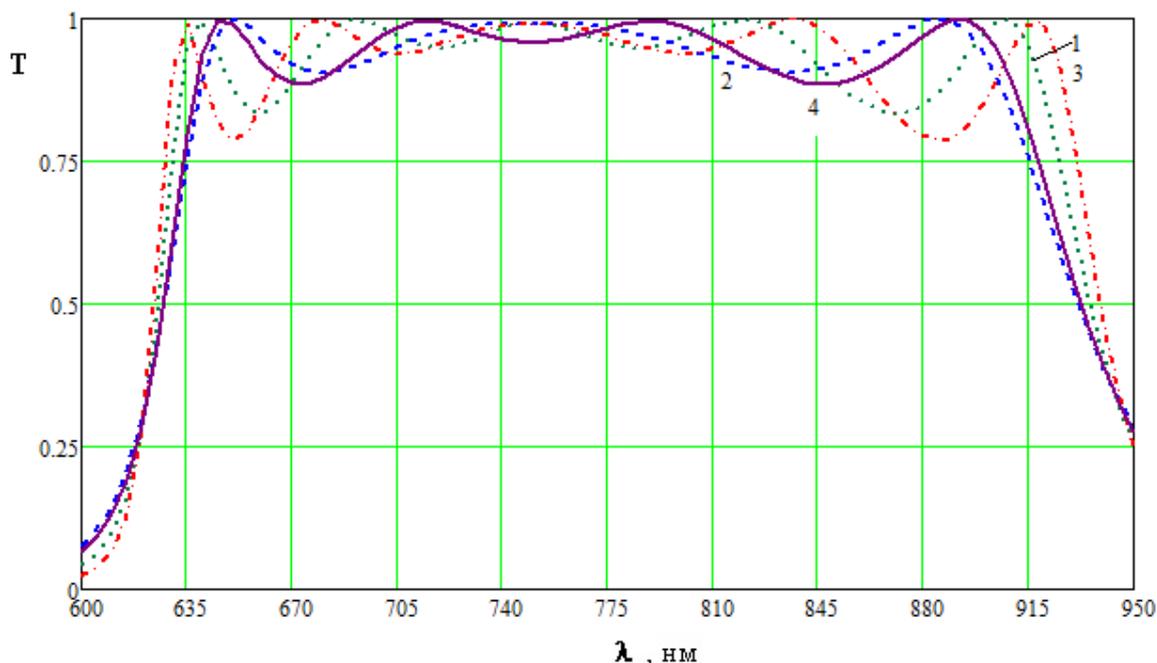


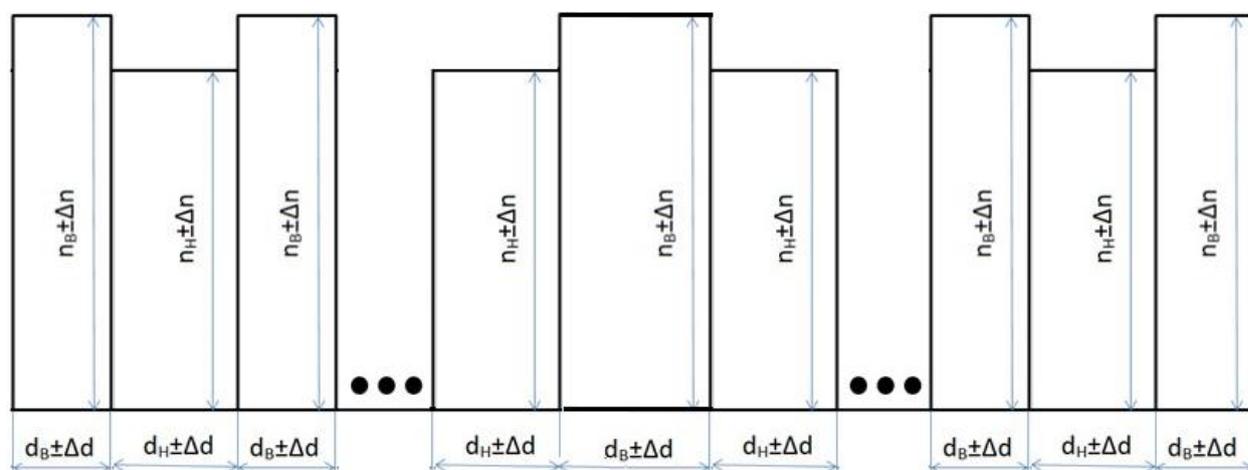
Рисунок 5.4. Спектральні характеристики багат шарового оптичного покриття:

- 1 – 10-шарове покриття S-2ВН2В...Н2ВН
- 2 – 10-шарове покриття S- Н2ВН...2ВН2В
- 3 – 11-шарове покриття S-2ВН2В...2ВН2В
- 4 – 11-шарове покриття S- Н2ВН...Н2ВН

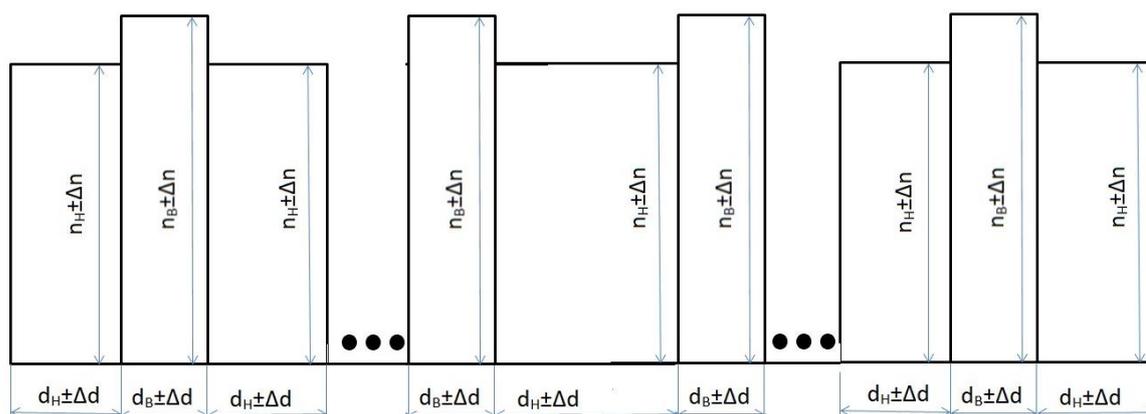
Для широкосмугових фільтрів структура початкового наближення буде відрізнятися тим, що геометрична товщина високозаломлюючого шару є вдвічі більшою, ніж структури для відрізаючого фільтра (рис. 5.4).

Якщо планується парна кількість шарів, то від структури з непарною кількістю шарів вона буде відрізнятися відсутністю останнього шару. Це практично не впливає на просвітлюючі характеристики (рис. 5.4). І знову ж, структура буде чергувати високозаломлюючий та низькозаломлюючий шари і може починатися як з високозаломлюючого, так і з низькозаломлюючого. Звертаємо увагу, що якщо

змінити у два рази товщину низькозаломлюючого, а не високозаломлюючого шару, то відповідне початкове наближення буде малоефективним.



а)



б)

Рисунок 5.5. Структури багат шарового покриття, які використовувались у роботі як початкові наближення при синтезі вузькосмугових оптичних фільтрів

Структура початкового наближення для вузькосмугових фільтрів передбачає чергування високозаломлюючого та низькозаломлюючого шарів з близькими за розмірами оптичними товщинами, крім шару, який розміщений посередині. Він повинен мати у два рази більшу геометричну товщину (рис. 5.5). Знову ж, структура, яка задає ефективне початкове наближення для вузькосмугових фільтрів, починатися може як з високозаломлюючого, так і з низькозаломлюючого шарів.

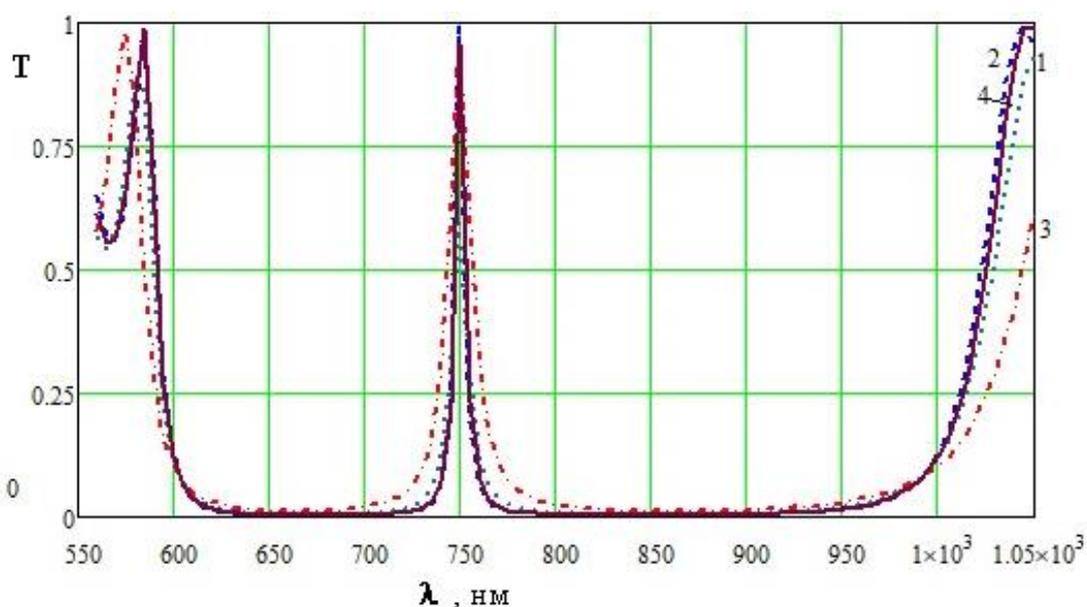


Рисунок 5.6. Спектральні характеристики багатошарового оптичного покриття:

- 1 – 10-шарове покриття S-VHV...H2VH...HVH
- 2 – 10-шарове покриття S- HVH...V2HV...VHV
- 3 – 11-шарове покриття S-VHV...H2VH...VHV
- 4 – 11-шарове покриття S- HVH...V2HV...HVH

І знову ж, структура з парною кількістю шарів (рис. 5.5а) відрізняється від структури з непарною кількістю шарів (рис. 5.5б) лише відсутністю останнього шару. Ця особливість несуттєво впливає на якість оптичного фільтра (рис. 5.6). Але слід зауважити один нюанс. Геометрична товщина низькозаломлюючого шару, як правило, більша за геометричну товщину високозаломлюючого шару на значення, яке рівне відношенню їх коефіцієнтів заломлення. Відповідно, збільшивши її удвічі, можна отримати досить товсту плівку з відповідними технологічними недоліками. Тому варто звернути на це увагу.

5.3. Скінченно-різницевий та аналітичний способи обчислення градієнта

У підрозділі проаналізуємо два способи обчислення градієнта функції $F(\vec{n}, \vec{d})$: скінченно-різницевий та аналітичний. Для аналітичного способу показано дві реалізації – прямолінійна та пришвидшена з використанням префікс- і суфікс-

масивів. При цьому відзначимо як недоліки, так і переваги двох способів [29]. Компоненти вектор-градієнта $\nabla F(\vec{n}_k, \vec{d}_k)$, обчисленого в точці (\vec{n}_k, \vec{d}_k) , домовимося позначати $\nabla_i F(\vec{n}_k, \vec{d}_k)$, $i=1, \dots, 2N$. Для скороченого позначення індекс k будемо не використовувати там, де це не призводить до непорозуміння.

5.3.1. Скінченно-різницевий спосіб

Нехай \vec{e}_i – N -вимірний вектор, i -та компонента якого рівна одиниці, усі інші компоненти рівні нулю.

Задаємо досить малі величини Δn_i та Δd_i , $i=1, \dots, N$. Тоді компоненти градієнта функції $F(\vec{n}, \vec{d})$ в точці (\vec{n}_k, \vec{d}_k) будуть обчислюватись за допомогою наступних формул:

$$\nabla_i F(\vec{n}_k, \vec{d}_k) = \frac{F(\vec{n}_k + \Delta n_i \vec{e}_i, \vec{d}_k) - F(\vec{n}_k, \vec{d}_k)}{\Delta n_i}, i = 1, \dots, N,$$

$$\nabla_{N+i} F(\vec{n}_k, \vec{d}_k) = \frac{F(\vec{n}_k, \vec{d}_k + \Delta d_i \vec{e}_i) - F(\vec{n}_k, \vec{d}_k)}{\Delta d_i}, i = 1, \dots, N.$$

Хоча це і найпростіший спосіб для реалізації знаходження $F(\vec{n}, \vec{d})$, він має два суттєві недоліки:

1. Різномасштабність параметрів \vec{n} та \vec{d} (в реальних задачах коефіцієнти заломлення визначаються декількома одиницями, а геометричні товщини мають порядок декількох сотень нанометрів (10^{-9} м)) потребує досить акуратного використання величин Δn_i та Δd_i , $i=1, \dots, N$, при побудові правил зупинки ітераційного процесу.
2. Точність знаходження локального екстремуму суттєво залежить від використовуваних значень Δn_i та Δd_i , $i=1, \dots, N$. Це означає, що спосіб знайти оптимальні параметри \vec{n}^* та \vec{d}^* з точністю, близькою до точності, з якою обчислюються градієнти в точках, приречений на невдачу, тому що через достатньо «грубе» обчислення градієнта вибираються неправильні кроки для субградієнтного процесу.

Твердження 5.1. Для обчислення градієнта функції $F(\vec{n}, \vec{d})$ скінченно-різницевий метод вимагає $N_0^* = (2N + 1) \cdot (N - 1) \cdot L$ операцій множення характеристичних матриць.

Доведення. Для знаходження значення $F(\vec{n}_k, \vec{d}_k)$ потрібно $(N - 1)$ операцій множення характеристичних матриць. Для кожного з $2N$ параметрів, для яких потрібно обчислити значення $F(\vec{n}_k + \Delta n_i \vec{e}_i, \vec{d}_k)$ або $F(\vec{n}_k, \vec{d}_k + \Delta d_i \vec{e}_i)$ потрібно також $(N - 1)$ таких операцій. Ці операції потрібно зробити для кожної з L вибраних значень довжин хвиль. Відповідно, кількість операцій буде рівна

$$N_0^* = ((N - 1) + 2N(N - 1)) \cdot L = (2N + 1) \cdot (N - 1) \cdot L.$$

Твердження доведено.

5.3.2. Аналітичний спосіб

Аналітичний спосіб обчислення градієнта функції $F(\vec{n}, \vec{d})$ вільний від недоліків, властивих скінченно-різницевому способу. Безпосереднє диференціювання функції $F_1(\vec{n}, \vec{d})$ дає наступні формули для знаходження компонента її градієнта в точці (\vec{n}_k, \vec{d}_k) :

$$\nabla_i F_1(\vec{n}_k, \vec{d}_k) = 2 \frac{1}{L} \sum_{j=1}^L (T(\vec{n}_k, \vec{d}_k, \lambda_j) - T_j) \frac{\partial T(\vec{n}_k, \vec{d}_k, \lambda_j)}{\partial n_i}, \quad i=1, \dots, N,$$

$$\nabla_{N+i} F_1(\vec{n}_k, \vec{d}_k) = 2 \frac{1}{L} \sum_{j=1}^L (T(\vec{n}_k, \vec{d}_k, \lambda_j) - T_j) \frac{\partial T(\vec{n}_k, \vec{d}_k, \lambda_j)}{\partial d_i}, \quad i=1, \dots, N,$$

та наступні формули для знаходження узагальнених градієнтів

$$\nabla_i F_2(\vec{n}_k, \vec{d}_k) = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^L \text{sign}(T(\vec{n}_k, \vec{d}_k, \lambda_j) - T_j) \frac{\partial T(\vec{n}_k, \vec{d}_k, \lambda_j)}{\partial n_i}, \quad i=1, \dots, N,$$

$$\nabla_{N+i} F_2(\vec{n}_k, \vec{d}_k) = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^L \text{sign}(T(\vec{n}_k, \vec{d}_k, \lambda_j) - T_j) \frac{\partial T(\vec{n}_k, \vec{d}_k, \lambda_j)}{\partial d_i}, \quad i=1, \dots, N,$$

$$\nabla_i F_3(\vec{n}_k, \vec{d}_k) = \text{sign}(T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_{j^*}) - T_{j^*}) \frac{\partial T(\vec{n}_k, \vec{d}_k, \lambda_{j^*})}{\partial n_i}, i=1, \dots, N,$$

$$\nabla_{N+i} F_3(\vec{n}_k, \vec{d}_k) = \text{sign}(T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_{j^*}) - T_{j^*}) \frac{\partial T(\vec{n}_k, \vec{d}_k, \lambda_{j^*})}{\partial d_i}, i=1, \dots, N,$$

де

$$j^* = \underset{j=1, \dots, L}{\text{argmax}} |T(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_j) - T_j|.$$

У випадку цільової функції (5.4) це буде градієнт, а у випадку цільової функції (5.5)–(5.6) це буде узагальнений градієнт.

Отже, для аналітичного обчислення $\nabla F_1(\vec{n}_k, \vec{d}_k)$, $\nabla F_2(\vec{n}_k, \vec{d}_k)$ та $\nabla F_3(\vec{n}_k, \vec{d}_k)$ достатньо для всіх $i=1, \dots, N$ уміти знаходити аналітичні вирази 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 λ . Використовуючи (3) ці похідні, легко можна знайти для кожного i ($1 \leq i \leq N$) по наступному правилу :

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

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

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

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

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

Матриці $\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial n_i}$ та $\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_i}$ легко розрахувати, використовуючи співвідношення (1.27) і (1.28):

$$\begin{aligned} \frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial n_1} &= \frac{\partial M(n_1, d_1, \lambda)}{\partial n_1} \prod_{k=2}^N M(n_k, d_k, \lambda), \\ \frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial n_i} &= \prod_{k=1}^{i-1} M(n_k, d_k, \lambda) \frac{\partial M(n_i, d_i, \lambda)}{\partial n_i} \prod_{k=i+1}^N M(n_k, d_k, \lambda), \quad i = 2, \dots, N-1, \\ \frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial n_N} &= \prod_{k=1}^{N-1} M(n_k, d_k, \lambda) \frac{\partial M(n_N, d_N, \lambda)}{\partial n_N}, \\ \frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_1} &= \frac{\partial M(n_1, d_1, \lambda)}{\partial d_1} \prod_{k=2}^N M(n_k, d_k, \lambda), \\ \frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_i} &= \prod_{k=1}^{i-1} M(n_k, d_k, \lambda) \frac{\partial M(n_i, d_i, \lambda)}{\partial d_i} \prod_{k=i+1}^N M(n_k, d_k, \lambda), \quad i = 2, \dots, N-1, \\ \frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_N} &= \prod_{k=1}^{N-1} M(n_k, d_k, \lambda) \frac{\partial M(n_N, d_N, \lambda)}{\partial d_N}, \end{aligned} \quad (5.16)$$

де матриця (2x2) – матриці $\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial n_i}$ та $\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_i}$ для кожного $i=1, \dots, N$ будуть мати

наступний вигляд:

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

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

Аналітичний спосіб дозволяє обчислити точне (у межах комп'ютерної арифметики) значення градієнта функції $F(\vec{n}, \vec{d})$ в точці (\vec{n}_k, \vec{d}_k) , та за затратами арифметичних операцій він такий, як і в скінченно-різницевому способі. Аналітичний спосіб більш доцільно використовувати, ніж скінченно-різницевий, коли потрібна висока точність знаходження оптимальних параметрів (\vec{n}^*, \vec{d}^*) .

Твердження 5.2. Для обчислення градієнту функції $F(\vec{n}, \vec{d})$ аналітичним способом кількість операцій множення характеристичних матриць рівна $N_1^* = 2N(N - 1)L$.

5.4. Пришвидшення роботи оптимізаційних методів

Знаходження значення функції якості та її градієнта (узагальненого градієнта) є основними операціями при розв'язанні задачі синтезу оптичних покриттів. Відповідно, для пришвидшення роботи методів багатовимірного пошуку пропонується використати такі вдосконалення.

1) Використати аналітичну похідну при використанні градієнтних методів.

Операції множення характеристичних матриць є найбільш ресурсозатратними при знаходженні похідних. Перевагою аналітичного підходу є не лише менша на $(N - 1)$ кількість таких операцій, а насамперед більша точність і, як наслідок, менша кількість ітерацій.

2) Пришвидшене множення матриць.

Пришвидшена реалізація [30], при якій забирається повторюване множення матриць для різних $i=1, \dots, N$, властиве прямолінійній реалізації. Суть прискореної реалізації полягає в наступному. Обчислюємо такі префікс-матриці:

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

Обчислюємо такі суфікс-матриці:

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

Для чого досить $2(N - 2)$ операцій помножених матриць розміром 2×2 . Після цього для знаходження матриць $\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial n_i}$ та $\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_i}$ для всіх $i = 1, \dots, N$ взамін формули (5.15) будемо використовувати наступні формули:

$$\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_j)}{\partial n_1} = \frac{\partial M(n_1, d_1, \lambda_j)}{\partial n_1} * M_2^-,$$

$$\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_j)}{\partial n_i} = M_{i-1}^+ * \frac{\partial M(n_i, d_i, \lambda_j)}{\partial n_i} * M_{i+1}^-, i = 2, \dots, N - 1,$$

$$\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_j)}{\partial n_N} = M_{N-1}^- * \frac{\partial M(n_N, d_N, \lambda_j)}{\partial n_N},$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_j)}{\partial d_1} &= \frac{\partial M(n_1, d_1, \lambda_j)}{\partial d_1} * M_2^-, \\ \frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_j)}{\partial d_i} &= M_{i-1}^+ * \frac{\partial M(n_i, d_i, \lambda_j)}{\partial d_i} * M_{i+1}^-, i = 2, \dots, N-1, \\ \frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda_j)}{\partial d_N} &= M_{N-1}^- * \frac{\partial M(n_N, d_N, \lambda_j)}{\partial d_N}.\end{aligned}\quad (5.17)$$

яка є також формулою (5.17), але записаною в більш компактному для практичного застосування вигляді.

Твердження 5.3. Для обчислення градієнту функції $F(\vec{n}, \vec{d})$ пришвидшеним аналітичним способом потрібно $N_2^* = 2(3N - 4)L$ множень характеристичних матриць.

Доведення. Підрахуємо кількість операцій для однієї довжини хвилі.

Для знаходження допоміжних матриць M_i^+ ($i = 1, \dots, N-1$) та M_i^- ($i = 2, \dots, N$) потрібно всього $2(N-2)$ операцій, тобто $(N-2)$ для кожної. Для реалізації формули (5.15а) потрібно $2(2 + 2(N-2)) = 4(N-1)$ множень характеристичних матриць.

Тому для обчислення матриць $\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial n_i}$ та $\frac{\partial M(\vec{n}, \vec{d}, \lambda)}{\partial d_i}$ для всіх $i = 1, \dots, N$ прискорена реалізація потребує

$$N_2^* = (2(N-2) + 4(N-1))L = 2(3N-4)L$$

операцій множення матриць. Твердження доведено.

Твердження 5.4. Пришвидшений варіант аналітичного способу обчислення градієнту функції $F(\vec{n}, \vec{d})$ виграє у прямолінійній реалізації, і цей виграв буде характеризуватися наступною величиною:

$$q(N) = \frac{3}{N} - \frac{1}{N(N-1)},$$

де N – кількість шарів.

Доведення. Знайдемо відповідне співвідношення кількостей операцій множення характеристичних матриць

$$q(N) = \frac{N_2^*}{N_1^*} = \frac{2(3N - 4)L}{2N(N - 1)L} = \frac{3(N - 1) - 1}{N(N - 1)} = \frac{3}{N} - \frac{1}{N(N - 1)}.$$

Твердження доведено.

Аналогічне твердження можна також сформулювати і для обчислення градієнту функції $F(\vec{n}, \vec{d})$ скінченно-різницевим методом (див. твердження 5.1).

Для обчислення градієнту функції $F(\vec{n}, \vec{d})$ пришвидшеним скінченно-різницевим методом кількість операцій множень характеристичних матриць буде

$$N_3^* = (2(3N - 4) + (N - 1))L.$$

Розглянемо перевагу пришвидшеного множення матриць.

При $N=2$ маємо $q(2)=1$, а при $N=3$ маємо $q(3) = \frac{5}{6}$. Однак уже при $N=60$ маємо суттєвий вигравш

$$q(60) = \frac{3 \cdot 60 - 4}{60 \cdot 59} = \frac{176}{3540} \approx \frac{1}{20}.$$

Що означає, що при роботі з шістдесятишаровим оптичним покриттям можна зекономити у двадцять разів на обчисленнях, пов'язаних із множенням матриць (рис. 5.7). Однак потрібно відзначити, що при розв'язанні оптимізаційної задачі (5.1)–(5.3) ми не отримуємо «чистого» вигравшу за часом у $q(N)$ разів. Річ у тім, що розрахунок характеристичних матриць для кожного шару потребує використання трудомістких щодо обчислення математичних функцій $\sin(x)$ та $\cos(x)$, які можуть перевершувати складні операції, пов'язані з множенням матриць. Тому застосуємо прийом, який дозволить зменшити час виконання цих операцій.

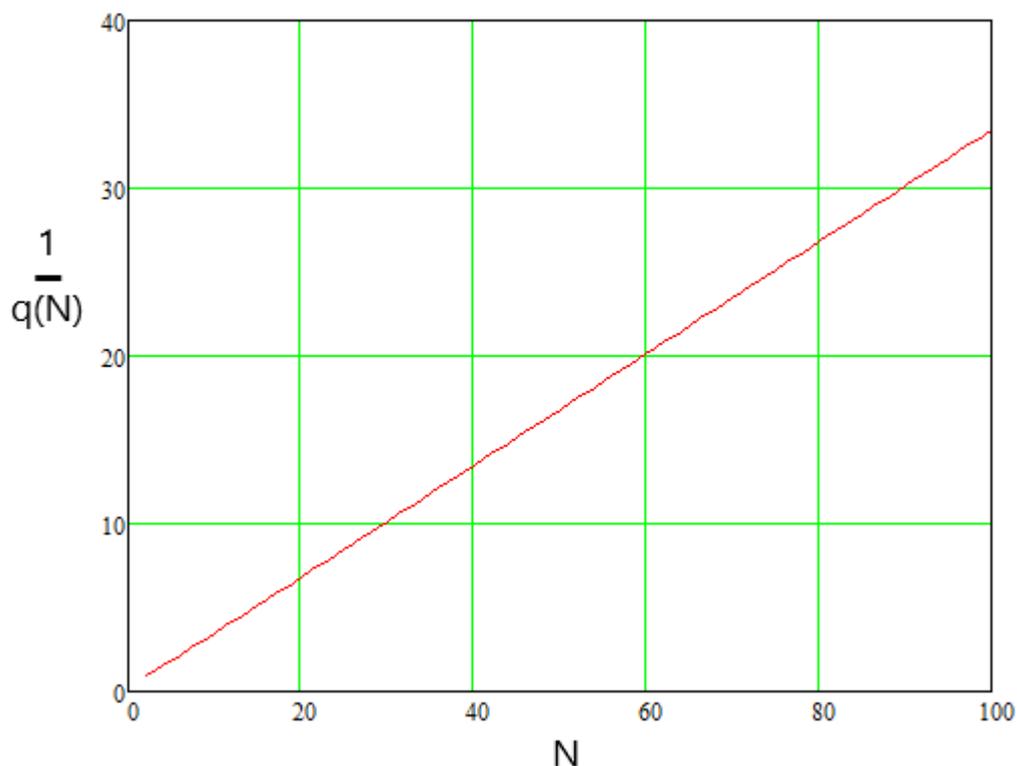


Рисунок 5.7. Перевага прискореного методу над прямолінійною реалізацією залежно від кількості шарів N

3) Табуляція тригонометричних функцій ($\sin(x)$, $\cos(x)$).

У роботі значення косинусів та синусів потрібно знаходити від функції

$$\delta(n, d, \lambda) = \frac{2\pi n d}{\lambda}.$$

Якщо значення $n \in [n_{min}, n_{max}]$, $d \in [d_{min}, d_{max}]$ та $\lambda \in [\lambda_{min}, \lambda_{max}]$, то діапазон значень цієї функції буде $\left[\frac{2\pi n_{min} d_{min}}{\lambda_{max}}, \frac{2\pi n_{max} d_{max}}{\lambda_{min}} \right]$. Розділимо його на не менше, ніж у 10^7 частин, і протабулюємо значення синусів та косинусів. Перевіримо на різних комп'ютерах, наскільки збільшилась швидкодія при 10^9 операцій множення характеристичних матриць (табл. 5.1). Для цього була написана програма-автоматизатор, яка виконувала цю дію 100 разів, і визначався середній час.

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

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. Відзначимо, що під час зміни кількості операцій множення характеристичних матриць час виконання без табуляції та з табуляцією збереже вказане співвідношення.

Твердження 5.5. Наявність табуляцій значень тригонометричних функцій при виконанні операцій множення характеристичних матриць у задачі (5.1)–(5.3) зменшує час виконання у десятки разів.

4) Використання методу золотого перерізу при визначенні кроку.

Після визначення похідної настає етап визначення кроку.

Крок α_k^* в ітераційному процесі визначається із розв'язку задачі

$$F(\mathbf{x}^k + \alpha_k^* \mathbf{p}^k) = \min F(\mathbf{x}^k + \alpha_k \mathbf{p}^k).$$

Це задача одновимірної оптимізації.

Порівняємо ефективність методів одновимірної оптимізації – золотого перерізу та тернарний пошук. Для цього розв'яжемо окрему задачу, для якої процес порівняння є досить зручним.

Умова досить проста: знайти розміщення точки, від якої відстань до прямих була б якомога меншою. Під відстанню до прямих будемо розуміти відстань до найбільш віддаленої прямої. Прямі задані двома точками.

Спочатку задамо структуру, яка буде описувати лінію в програмі

```
struct line {
    double a, b, c;
    line (double x1, double y1, double x2, double y2) {
        double aa = (y2 - y1);
        double bb = (x1 - x2);
        double cc = x2 * (y1 - y2) + y2 * (x2 - x1);
        double norm = sqrt(aa * aa + bb * bb);
        this->a = aa / norm;
        this->b = bb / norm;
        this->c = cc / norm;
    }
    double get(double x, double y) {
        return abs(a * x + b * y + c);
    }
};
```

В описаній структурі вже зразу наведено метод, який повертає відстань від точки до прямої. Як відомо, відстань від точки (x_0, y_0) до i -ої прямої $a_i \cdot x + b_i \cdot y + c_i = 0$ рівна

$$\text{dist}(x_0, y_0, a_i, b_i, c_i) = \frac{|a_i x_0 + b_i y_0 + c_i|}{\sqrt{a_i^2 + b_i^2}}.$$

Поділивши на $\sqrt{a_i^2 + b_i^2}$ значення коефіцієнтів прямої $a'_i = \frac{a_i}{\sqrt{a_i^2 + b_i^2}}$, $b'_i = \frac{b_i}{\sqrt{a_i^2 + b_i^2}}$,
 $c'_i = \frac{c_i}{\sqrt{a_i^2 + b_i^2}}$, отримаємо, що відстань

$$\text{dist}(x_0, y_0, a_i, b_i, c_i) = |a'_i x_0 + b'_i y_0 + c'_i|.$$

Структура, яка описує пряму, готова до використання, і швидкість знаходження відстані від точки до прямої зростає після уникнення постійного визначення кореня квадратного та поділу на нього.

Уведемо дані та сформуємо всю інформацію про прямі у векторі

```
vector<line> lines;
int n; cin >> n;
for (int i = 0; i < n; i++) {
    int x1, y1, x2, y2;
    cin >> x1 >> y1 >> x2 >> y2;
    line s(x1, y1, x2, y2);
    lines.push_back(s);
}
```

Відстань від точки до прямих будемо знаходити за допомогою функції:

```
double dist(double x, double y) {
    double ans = 0.0;
    for (auto i : lines) {
        ans = max(ans, i.get(x, y));
    }
    return ans;
}
```

З огляду на введені вище позначення, цільова функція буде мати вигляд

$$f(x, y) = \max_{i=1, \dots, n} \text{dist}(x, y, a_i, b_i, c_i) \rightarrow \min_{\substack{x \in \mathbb{R} \\ y \in \mathbb{R}}}$$

Дослідимо, як буде зображена ця цільова функція в просторі. Очевидно, що функція відстані довільної точки (x, y) до i -ої прямої буде становити площину. А цільова функція буде збігатися то з однією площиною, то з іншою, яка буде

перетинатись із попередньою. Типовий вигляд цільової функції зображено на рисунку 5.8.

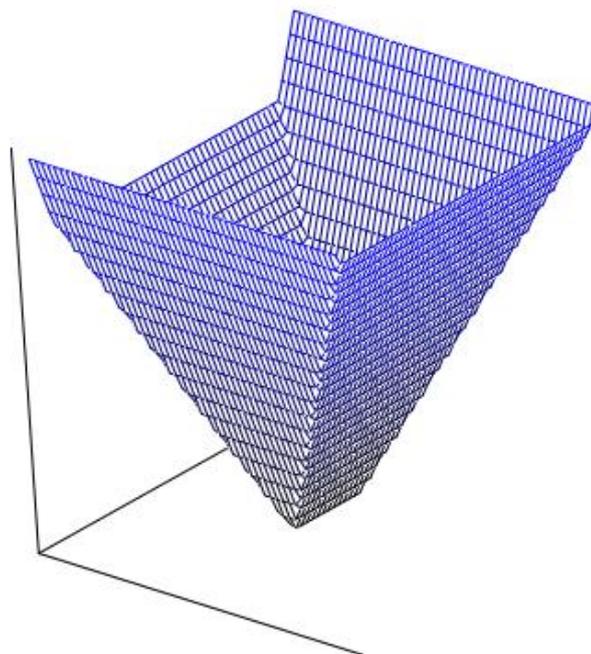


Рисунок 5.8. Типовий вигляд цільової функції

Якщо записати функцію відстані від точки до прямих при фіксації одного з параметрів x чи y , то можна звернути увагу, що вона є унімодальною, тобто вона неперервна, і при зміні незафіксованого параметру спочатку спадає, а потім зростає (рис. 5.9). Тому застосуємо для знаходження мінімального значення цільової функції метод золотого перерізу.

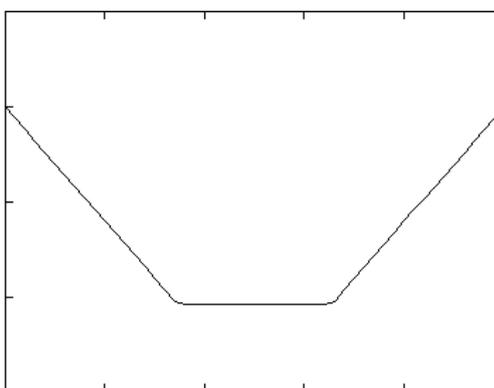


Рис. 5.9. Типовий вигляд цільової функції з фіксованим одним параметром

Звертаємо увагу, що можна застосовувати цей метод по черзі – спочатку до одного, а потім до іншого параметру. Але такий підхід потребує великої кількості ітерацій, поки наблизиться до шуканого розв’язку. Тому використаємо те, що цільова функція при кожному фіксованому значенні змінної x є унімодальною. Тому будемо всередині кожного кроку для змінної x знаходити оптимальне значення цільової функції зразу ж і щодо змінної y (рис. 5.10). Це суттєво пришвидшить пошук розв’язку.

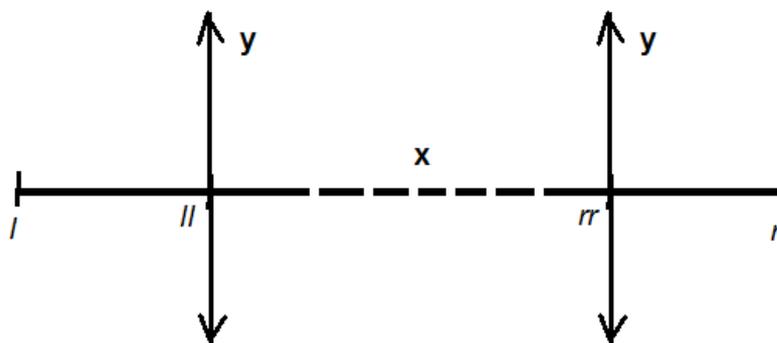


Рисунок 5.10. Для визначення шуканого значення щодо змінної x кожен раз запускається метод золотого перерізу за змінною y , і досягнуте значення є індикатором вибору значення звуження проміжку за змінною x

Відповідна реалізація наведена нижче:

```
double Golden_Section_y (double x) {
    double l = -1e9, r = 1e9;
    while (r - l > eps) {
        double ll = l + 0.38 * (r - l);
        double rr = l + 0.62 * (r - l);
        if (dist(x, ll) < dist(x, rr))
            r = rr;
        else
            l = ll;
    }
    return l;
}
```

```

double Golden_Section_x () {
    double l = -1e9, r = 1e9;
    while (r - l > eps) {
        double ll = l + 0.38 * (r - l);
        double rr = l + 0.62 * (r - l);
        if (dist(ll,Golden_Section_y(ll)) <
dist(rr,Golden_Section_y(rr)))
            r = rr;
        else
            l = ll;
    }
    return l;
}

```

Часова складність алгоритму рівна $O(n \cdot \log^2 C)$, де C – параметр, який залежить від діапазону пошуку та точності. Квадрат операцій виникає через те, що один метод золотого перерізу використовується в іншому. Якщо виконувати пошук кроку послідовно спочатку за одним параметром, а потім за іншим, то отримаємо часову складність, рівну $O(n^2 \cdot \log C)$.

Порівняємо метод золотого перерізу з іншим – тернарним пошуком. Відзначимо, що при заміні коефіцієнтів у методі золотого перерізу 0.38 на $1/3$, а 0.62 на $2/3$ отримаємо метод тернарного пошуку. У системі Codeforces було проведено замір часу знаходження розв’язків для обох цих методів, коли розмірність цієї задачі є більшою і йтиме від 10000 до 100000 з кроком 10000.

Як видно з рисунку 5.11, існує лінійна залежність часу виконання розглядуваних методів від розмірності задачі. Метод тернарного пошуку потребує приблизно на 40% більше часових затрат, ніж метод золотого перерізу при знаходженні розв’язку розглядуваної задачі. Також важливим показником є те, що кількість ітерацій методу золотого перерізу для визначення шуканого значення змінної x у діапазоні $[-10^9, 10^9]$ буде становити 74, а для методу тернарного пошуку – 87.

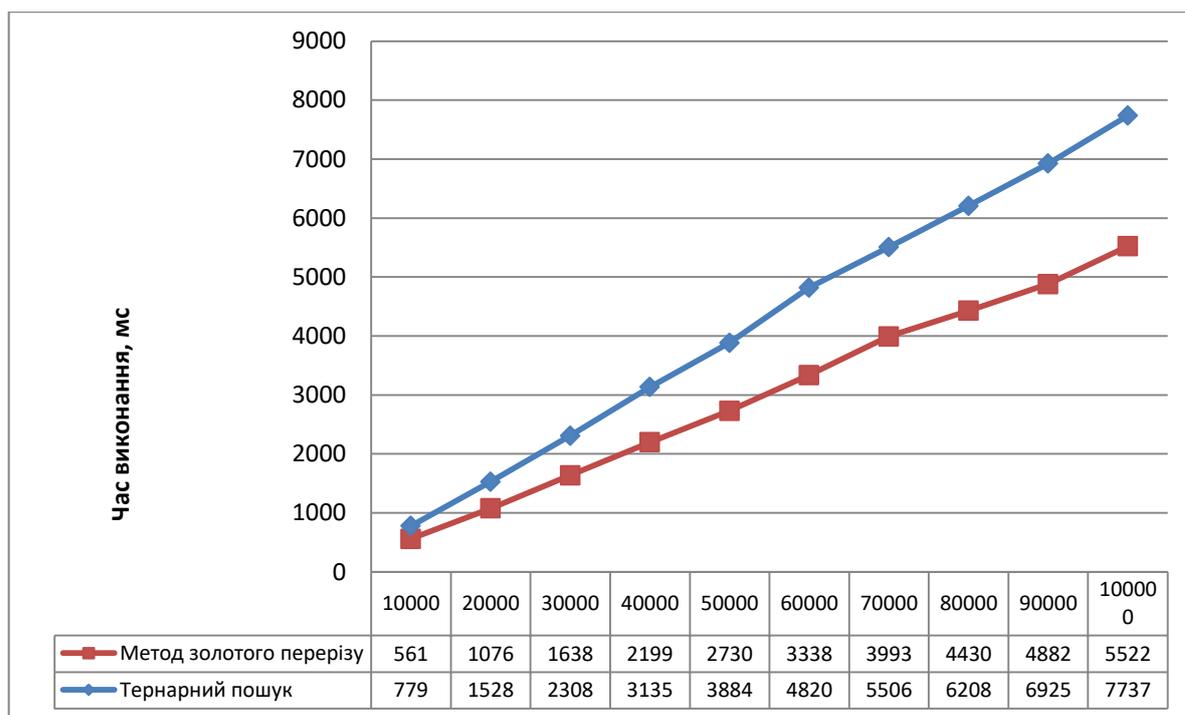


Рисунок 5.11. Графіки залежності часу виконання тернарного пошуку та методу золотого перерізу від розмірності задачі

5) Ефективна реалізація множення двох матриць.

Для задач, пов'язаних з оптимізацією шаруватих структур в задачах теплопровідності та радіації, потрібно виконувати множення матриць великої розмірності. Тут може з'явитися ще один пункт пришвидшення роботи методів багатовимірною пошуку, який пов'язаний з особливістю реалізації операції множення матриць. Розглянемо дві реалізації цієї операції.

Таблиця 5.2

Дві реалізації множення двох матриць

Загальновідомий варіант	Пришвидшений варіант
<pre>for (int i = 0; i < n; i++) for (int j = 0; j < n; j++) for (int k = 0; k < n; k++) c[i][j] += a[i][k] * b[k][j];</pre>	<pre>for (int i = 0; i < n; i++) for (int k = 0; k < n; k++) { long long x = a[i][k]; for (int j = 0; j < n; j++) c[i][j] += x * b[k][j]; }</pre>

У таблиці 5.2 описано знаходження добутку матриць $C = A \cdot B$, усі матриці розмірностей $n \times n$. Проведемо для цих двох реалізацій обчислювальний експеримент, використавши тестувальну систему ejudge 3.7.9+.

OK

10 total tests runs, 10 passed, 0 failed.
Score gained: 100 (out of 100).

Max. CPU time: 15.384

Tested on host: olymp

CPU model: Intel Xeon E3-12xx v2 (Ivy Bridge)

CPU MHz: 3392.308

N	Result	Time (sec)	Real time (sec)	Max memory used	Extra info	Score	Link
1	OK	15.384	15.389	37986304	OK	10 (10)	L I O A E C F
2	OK	15.200	15.205	37986304	OK	10 (10)	L I O A E C F
3	OK	15.204	15.209	37986304	OK	10 (10)	L I O A E C F
4	OK	15.272	15.277	37986304	OK	10 (10)	L I O A E C F
5	OK	15.360	15.365	37986304	OK	10 (10)	L I O A E C F
6	OK	15.160	15.171	37986304	OK	10 (10)	L I O A E C F
7	OK	15.188	15.194	37986304	OK	10 (10)	L I O A E C F
8	OK	15.080	15.089	37986304	OK	10 (10)	L I O A E C F
9	OK	15.304	15.313	37986304	OK	10 (10)	L I O A E C F
10	OK	15.356	15.366	37986304	OK	10 (10)	L I O A E C F

Рисунок 5.12. Тестування загальновідомого підходу множення матриць для тестів розмірності 1000 x 1000

Для проведення обчислювального експерименту було підготовлено 10 тестів для матриць розмірності 1000 x 1000. На рисунку 5.12 вказано час виконання кожного тесту при загальновідомій реалізації. Позначка “OK” указує, що кінцева відповідь збіглася з номінальною. Час проходження кожного тесту при загальновідомій реалізації перевищує 15 секунд. На рисунку 5.13 вказано час проходження кожного тесту при швидшому варіанті. Він суттєво менший, ніж при загальновідомій реалізації, і максимально витрачений час рівний 1.388 с. Відзначимо, що час зчитування вхідних даних і виводу відповіді становить приблизно 350 мілісекунд. Відповідно, якщо у загальновідомому варіанті поміняти

другий та третій цикли місцями і зафіксувати у звичайній змінній значення елемента першої матриці, то швидкість виконання операції множення для матриць суттєво зросте. Це пришвидшення становить від 2 до 15 разів – залежно від характеристик комп'ютера (рис. 5.12-5.13). При збільшенні розмірності матриць перевага пришвидшеного варіанту буде ще більше зростати. Можливі й подальші покращення [31], які можуть дати перевагу ще на 20%.

OK

10 total tests runs, 10 passed, 0 failed.
Score gained: 100 (out of 100).

Max. CPU time: 1.388

Tested on host: olymp

CPU model: Intel Xeon E3-12xx v2 (Ivy Bridge)

CPU MHz: 3392.308

N	Result	Time (sec)	Real time (sec)	Max memory used	Extra info	Score	Link
1	OK	1.088	1.091	37986304	OK	10 (10)	L I O A E C F
2	OK	1.060	1.065	37986304	OK	10 (10)	L I O A E C F
3	OK	1.092	1.094	37986304	OK	10 (10)	L I O A E C F
4	OK	1.060	1.064	37986304	OK	10 (10)	L I O A E C F
5	OK	1.388	1.392	37986304	OK	10 (10)	L I O A E C F
6	OK	1.056	1.063	37986304	OK	10 (10)	L I O A E C F
7	OK	1.032	1.034	37986304	OK	10 (10)	L I O A E C F
8	OK	1.040	1.047	37986304	OK	10 (10)	L I O A E C F
9	OK	1.056	1.062	37986304	OK	10 (10)	L I O A E C F
10	OK	1.052	1.060	37986304	OK	10 (10)	L I O A E C F

Рисунок 5.13. Тестування пришвидшеного підходу множення матриць для тестів розмірності 1000 x 1000

5.5. Двоетапний метод для синтезу багат шарових оптичних систем

5.5.1. Загальна схема

Для зведення до реальних матеріалів запропонований двоетапний метод [32], що реалізується у формі послідовності кроків (рис. 5.14):

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

Проводимо локальну оптимізацію лише за товщиною однієї з функцій оцінок якості:

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

$$\max_{\vec{d}} \left(F(\vec{n}, \vec{d}) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L T \left(\overline{n(\lambda_{(i)})}, \overline{d(\lambda_{(i)})}, \lambda_{(i)} \right) \right)$$

$$\max_{\vec{d}} \left(F(\vec{n}, \vec{d}) = \min_{\lambda} T \left(\overline{n(\lambda)}, \overline{d(\lambda)}, \lambda \right) \right)$$

$$50 \text{ нм} \leq d_j \leq 750 \text{ нм} \quad (j = 1, N)$$

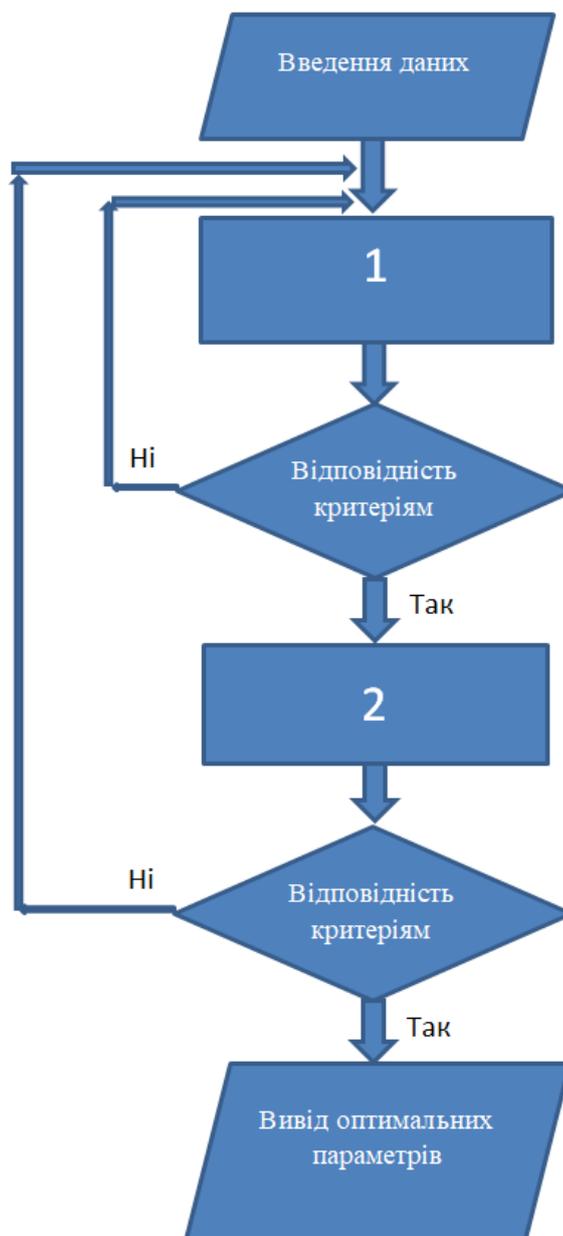


Рисунок 5.14. Схема роботи двоетапного методу для синтезу багатошарових оптичних систем

5.5.2. Застосування двоетапного методу для синтезу багатошарових оптичних систем при падінні світла під кутом

Застосуємо описаний двоетапний метод для синтезу одно-, дво-, три- та чотиришарового покриттів на спектральному інтервалі від 200 до 700 нм при падінні світла під кутом $\theta_0 = 30^\circ$. Як підкладку візьмемо скло з показником заломлення

$n=1.51$. За допомогою методів багатовимірного пошуку спочатку знаходимо локально-оптимальні параметри функціоналу (5.10), а далі визначаємо показники заломлення реальних матеріалів, які є найближчими до отриманих теоретичних результатів. Після цього фіксуємо показники заломлення й оптимізуємо товщини шарів.

Після проведення обчислень для одношарового покриття для s-поляризації отримаємо оптичне покриття, для якого шар завтовшки $d_1 = 74.386$ нм складається з матеріалу Na_3AlF_6 , показник заломлення якого $n_1 = 1.35$. Значення цільової функції (5.10) для s-поляризації дорівнює 0.9683945 (рис. 5.15а). Для р-поляризації (рис. 5.15б) була спроектована така одношарова оптична структура: для шару взято Na_3AlF_6 з показником $n_1 = 1.35$ та товщиною $d_1 = 74.276$ нм. Значення функції якості (5.10) дорівнює 0.9838743.

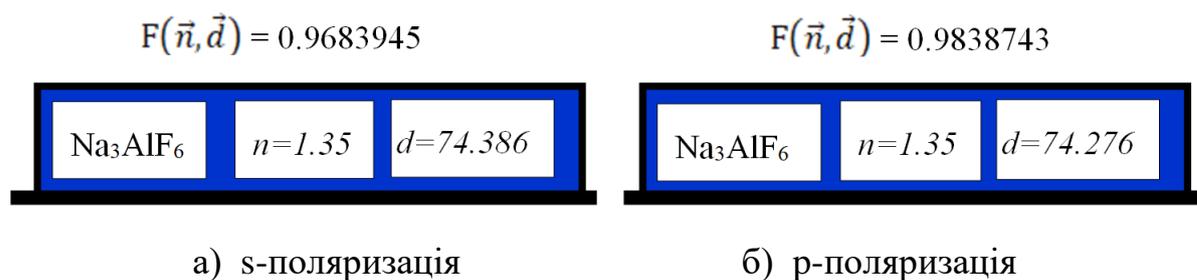


Рисунок 5.15. Одношарове покриття при падінні світла під кутом $\theta_0 = 30^\circ$

Розглянемо двошарове покриття при падінні світла під кутом $\theta_0 = 30^\circ$. Після проведення обчислень для s-поляризації отримаємо оптичне покриття з такою структурою: перший шар завтовшки $d_1 = 145.142$ нм з матеріалу Al_2O_3 , показник заломлення якого $n_1 = 1.63$, другий – матеріал Na_3AlF_6 з показником заломлення $n_2 = 1.35$ та товщиною $d_2 = 74.834$ нм. Значення цільової функції (5.10) дорівнює 0.9742812 (рис. 5.16а). Для р-поляризації (рис. 5.16б) була спроектована така двошарова оптична структура. Для першого шару взято SiO_2 з показником заломлення $n_1 = 1.6$ товщиною $d_1 = 149.783$ нм, для другого Na_3AlF_6 з показником $n_2 = 1.35$ товщиною $d_2 = 72.649$ нм. Значення цільової функції (5.10) дорівнює 0.9837345.

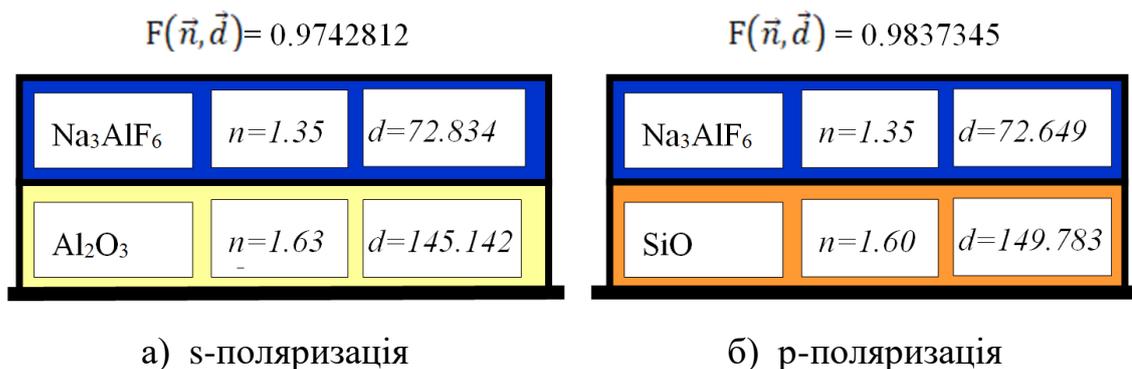


Рисунок 5.16. Двошарове покриття при падінні світла під кутом $\theta_0 = 30^\circ$

Розглянемо тришарове покриття при падінні світла під кутом $\theta_0 = 30^\circ$. Після проведення обчислень для s-поляризації отримаємо оптичне покриття з такою структурою: перший шар – Al₂O₃ з показником заломлення $n_1 = 1.7$ товщиною $d_1 = 95.162$ нм, другий – матеріал SiO з показником заломлення $n_2 = 1.6$ та товщиною $d_2 = 50.000$ нм, третій – Na₃AlF₆ з показником $n_3 = 1.35$ товщиною $d_3 = 67.938$ нм. Значення цільової функції (5.10) дорівнює 0.9726021 (рис. 5.17а). Для p-поляризації (рис. 5.17б) при падінні світла під кутом $\theta_0 = 30^\circ$ була спроектована така тришарова оптична структура. Для першого шару взято Al₂O₃ з показником заломлення $n_1 = 1.65$ товщиною $d_1 = 99.234$ нм, для другого PbTe з показником заломлення $n_2 = 1.57$ товщиною $d_2 = 50.000$ нм, для третього Na₃AlF₆ з показником $n_3 = 1.35$ товщиною $d_3 = 68.352$ нм. Значення цільової функції (5.10) дорівнює 0.9908263.

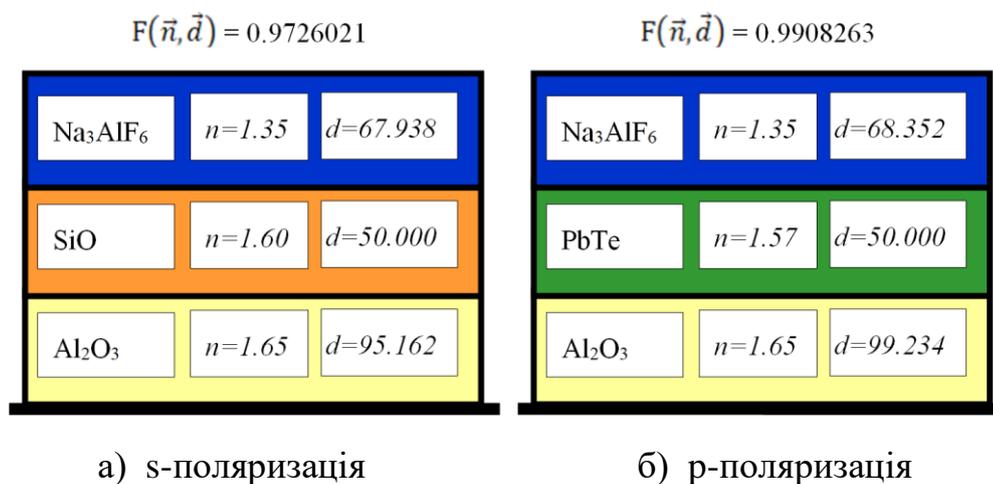


Рисунок 5.17. Тришарове покриття при падінні світла під кутом $\theta_0 = 30^\circ$

Розглянемо чотиришарове покриття при падінні світла під кутом $\theta_0 = 30^\circ$. Після проведення обчислень для s-поляризації отримаємо оптичне покриття з такою структурою: перший шар – Al_2O_3 з показником заломлення $n_1 = 1.65$ товщиною $d_1 = 50.000$ нм, другий – матеріал HfO_2 з показником заломлення $n_2 = 1.98$ товщиною $d_2 = 85.282$ нм, третій – Al_2O_3 з показником заломлення $n_3 = 1.65$ товщиною $d_3 = 50.000$ нм, четвертий – Na_3AlF_6 з показником $n_4 = 1.35$ та товщиною $d_4 = 64.823$ нм (рис. 5.18а). Значення цільової функції (5.10) дорівнює 0.9832345. Для р-поляризації при падінні світла під кутом $\theta_0 = 30^\circ$ була спроектована така чотиришарова оптична структура. Для першого шару взято Al_2O_3 з показником заломлення $n_1 = 1.65$ товщиною $d_1 = 50.000$ нм, для другого HfO_2 з показником заломлення $n_2 = 1.98$ товщиною $d_2 = 85.917$ нм, для третього Al_2O_3 з показником заломлення $n_3 = 1.65$ товщиною $d_3 = 50.000$ нм, для четвертого Na_3AlF_6 з показником $n_4 = 1.35$ товщиною $d_4 = 61.972$ нм (рис. 5.18б). Значення цільової функції (5.10) дорівнює 0.9912242.

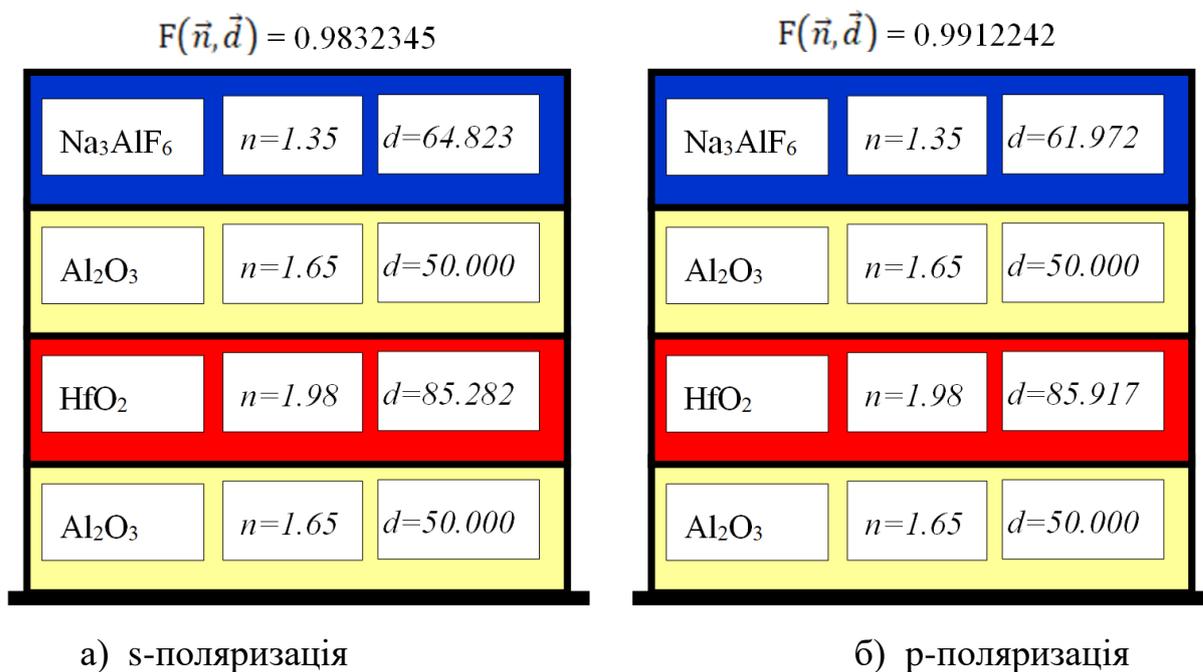
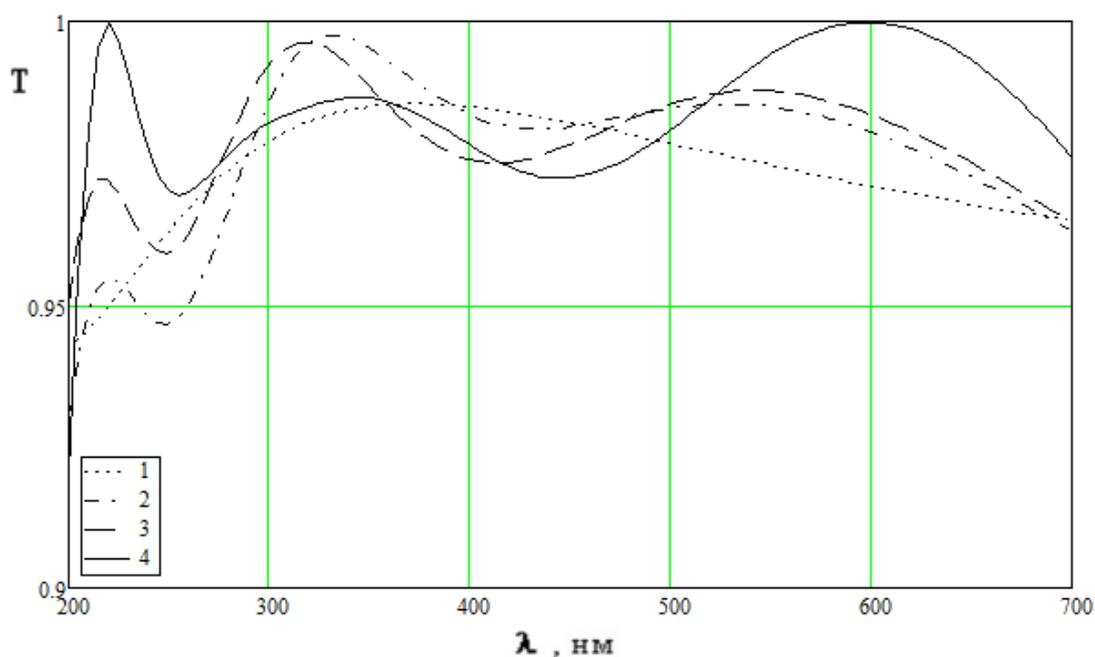


Рисунок 5.18. Чотиришарове покриття при падінні світла під кутом $\theta_0 = 30^\circ$

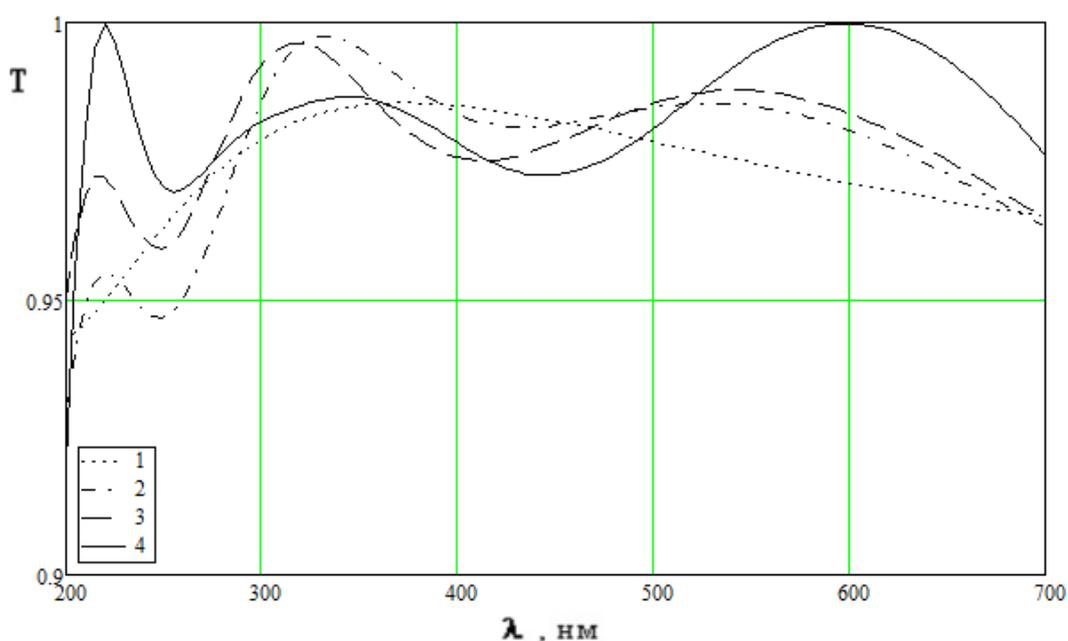
На всьому спектральному інтервалі для р-поляризації коефіцієнт пропускання спроектованих покриттів більший, ніж для s-поляризації, незалежно від кількості

шарів. Для обох поляризацій значення цільової функції зростає зі збільшенням кількості шарів, хоча графіки коефіцієнтів пропускання для обох поляризацій перетинаються (рис. 5.19а, рис. 5.19б).

Цей підхід реалізований для вирішення ряду інших задач [33-35].



а) s-поляризація



б) p-поляризація

Рисунок 5.19. Криві коефіцієнтів пропускання для кута $\theta_0 = 30^\circ$:
1 – одношарове покриття; 2 – двошарове покриття; 3 – тришарове покриття; 4 –
чотиришарове покриття

Результати обчислень наведені з точністю 10^{-6} . При дослідженні одно-, двошарових структур як нульових наближень обиралось 256 точок, для тришарової – 324 точки, для чотиришарової 512 – початкових наближень. Для одно- та двошарових структур уся область можливих значень параметрів розбивається на 256 підобластей, із яких і обиралося по одному нульовому наближенню. Для три- та чотиришарових структур для вибору нульових наближень уся область можливих значень параметрів розбивається на 324 і 512 підобластей відповідно. Спектральні характеристики для одно-, дво-, три- та чотиришарових оптичних структур, при яких цільова функція (5.10) досягає максимуму, зображено на рисунку 5.19.

5.5.3. Покращення характеристик існуючих широкосмугових оптичних покриттів

Застосуємо розроблену методику до покращення характеристик існуючих широкосмугових оптичних покриттів. Використаємо для цього г-алгоритм Шора [34-35] і візьмемо функцією якості

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

де $[\lambda_1, \lambda_2]$ – розглядуваний спектральний діапазон, L – число точок сітки спектрального інтервалу від λ_1 до λ_2 . У цьому розділі значення L вибиралось рівним $\lambda_2 - \lambda_1 + 1$, тобто в цільовій функції розглядалось кожне цілочислове значення проміжку $[\lambda_1, \lambda_2]$.

Покажемо роботу запропонованого оптимізаційного підходу на практиці.

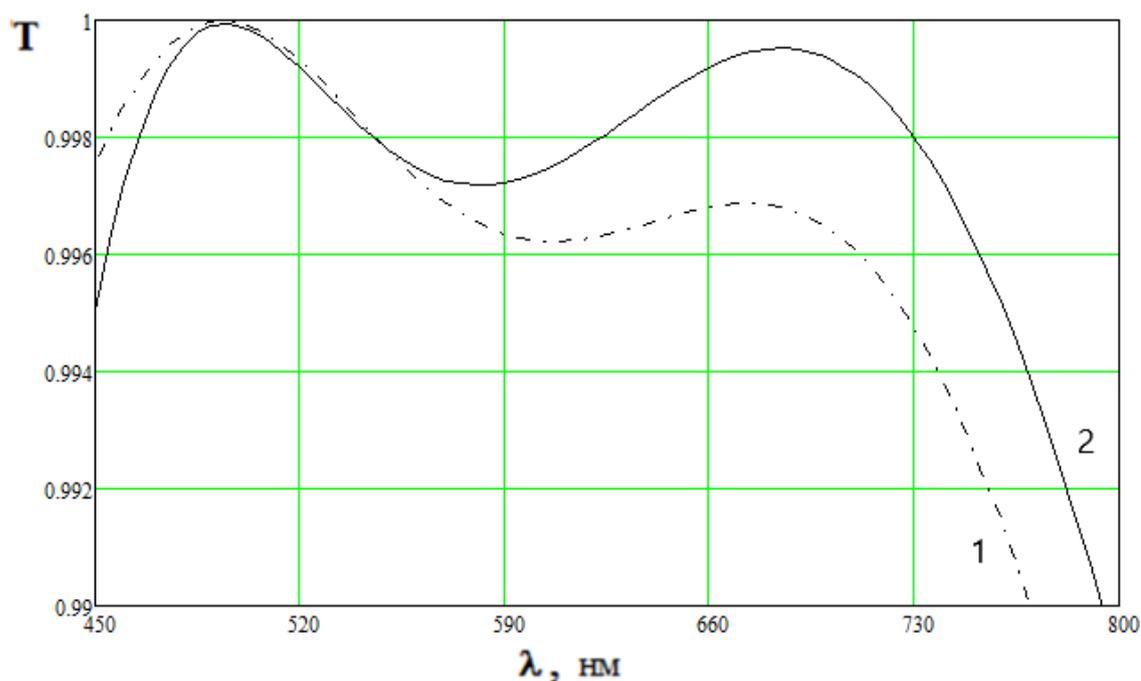


Рисунок 5.20. Криві коефіцієнта пропускання широкопasmового фільтра при просвітленні підкладинки з показником заломлення $n_s=1.51$:

1 – параметри, взяті з авторського свідоцтва №1083144 [36]

$$3.76 \cdot n_1 d_1 = 3.76 \cdot n_2 d_2 = 0.455 \cdot n_3 d_3 = n_4 d_4 = 0.25 \cdot \lambda_0, \quad n_1 = 2.0, \quad n_2 = 1.37, \quad n_3 = 2.0, \quad n_4 = 1.37;$$

2 – параметри, визначені в цій роботі

$$6.58 \cdot n_1 d_1 = 4.06 \cdot n_2 d_2 = 0.441 \cdot n_3 d_3 = 0.944 \cdot n_4 d_4 = 0.25 \cdot \lambda_0, \quad n_1 = 2.1, \quad n_2 = 1.35, \quad n_3 = 1.9, \quad n_4 = 1.35.$$

На спектральному інтервалі від 450 до 800, значення функції якості для першого оптичного покриття $F(\vec{n}, \vec{d}) = 1.404$, а для другого оптичного покриття – $F(\vec{n}, \vec{d}) = 0.838$. Відповідно, значення функції якості $F(\vec{n}, \vec{d})$ було покращено на 40% (рис. 5.20).

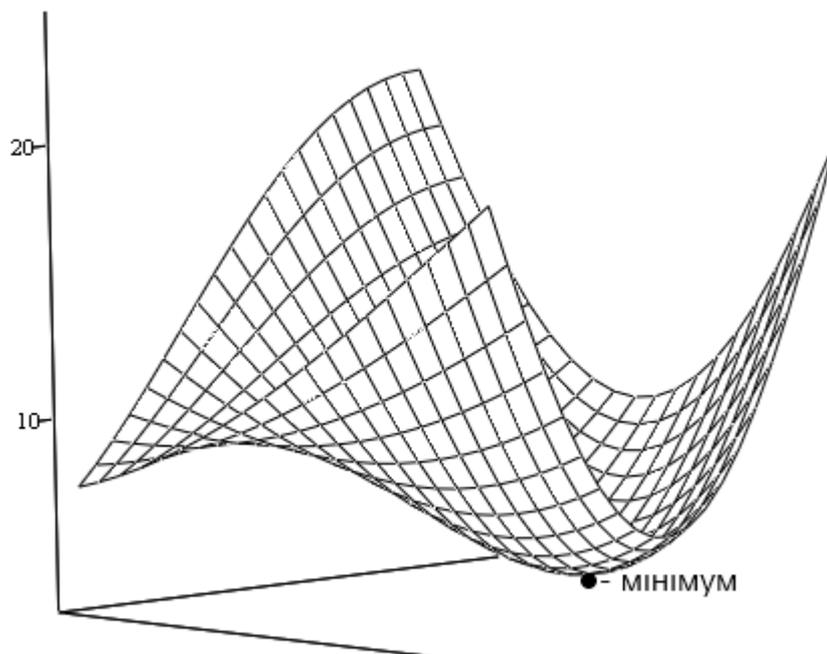


Рисунок 5.21. Вигляд поверхні функції якості, коли зафіксуємо всі знайдені оптимальні параметри, крім геометричних товщин 3-го та 4-го шарів, для оптичного покриття з параметрами $0.153 \cdot n_1 d_1 = 0.25 \cdot n_2 d_2 = 0.25 \cdot \lambda_0$, $n_1 = 1.35$, $n_2 = 1.9$, $n_3 = 1.35$, $n_4 = 2.1$ при просвітленні підкладинки з показником заломлення $n_s = 1.52$

Структуру поверхні цього функціоналу можна оцінити, зафіксувавши всі параметри, крім двох. Як видно з рисунку 5.21, уже лише з частинки поверхні можна стверджувати, що вона має овражний характер. Розглянемо семишарову структуру з шарами (1.35 та 2.1), що чергуються, та оптичними товщинами шарів відносно λ_0 становлять $0.05 : 0.071 : 0.062 : 0.257 : 0.018 : 0.12 : 0.2$. Для неї зафіксуємо всі знайдені оптимальні параметри, крім геометричних товщин 6-го та 7-го шарів. Утворена поверхня (рис. 5.24) дає більше уявлення про овражний характер функції якості, яка розглядається в цьому розділі.

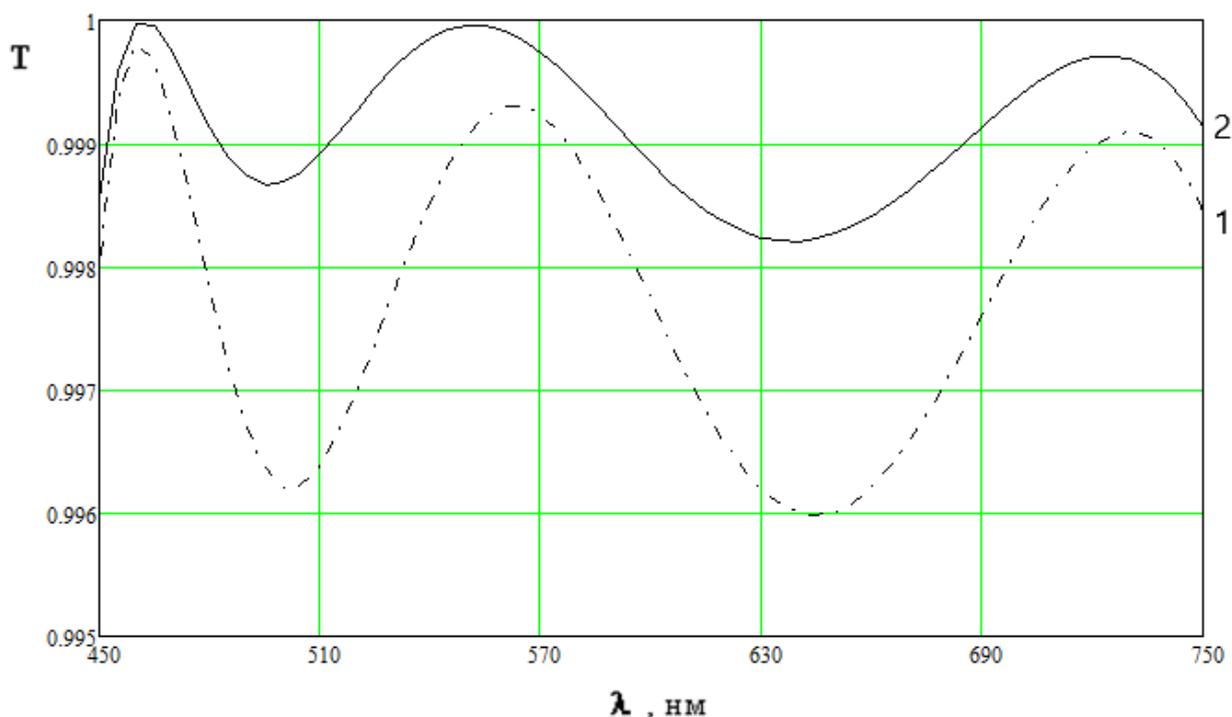


Рисунок 5.22. Криві коефіцієнта пропускання при просвітленні 7-шаровою структурою з чергуючимися шарами (1.35 та 2.1) підкладки з показником заломлення $n_s=1.52$:

1 – параметри, взяті із авторського свідоцтва №934429 [37] (оптичні товщини шарів відносно λ_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 λ_0 становлять 0.087 : 0.03 : 0.315 : 0.043 : 0.113 : 0.48 : 0.22).

На спектральному інтервалі від 450 до 750, значення функції якості для першого оптичного покриття $F(\vec{n}, \vec{d}) = 0.665$, а для другого оптичного покриття – $F(\vec{n}, \vec{d}) = 0.324$. Відповідно, значення функції якості $F(\vec{n}, \vec{d})$ було покращено більш як на 50% (рис. 5.23).

Відзначимо, що для градієнтних методів використання розглядуваної в цьому розділі цільової функції дає менш ефективний результат. Для них потрібно використовувати функцію якості (5.10).

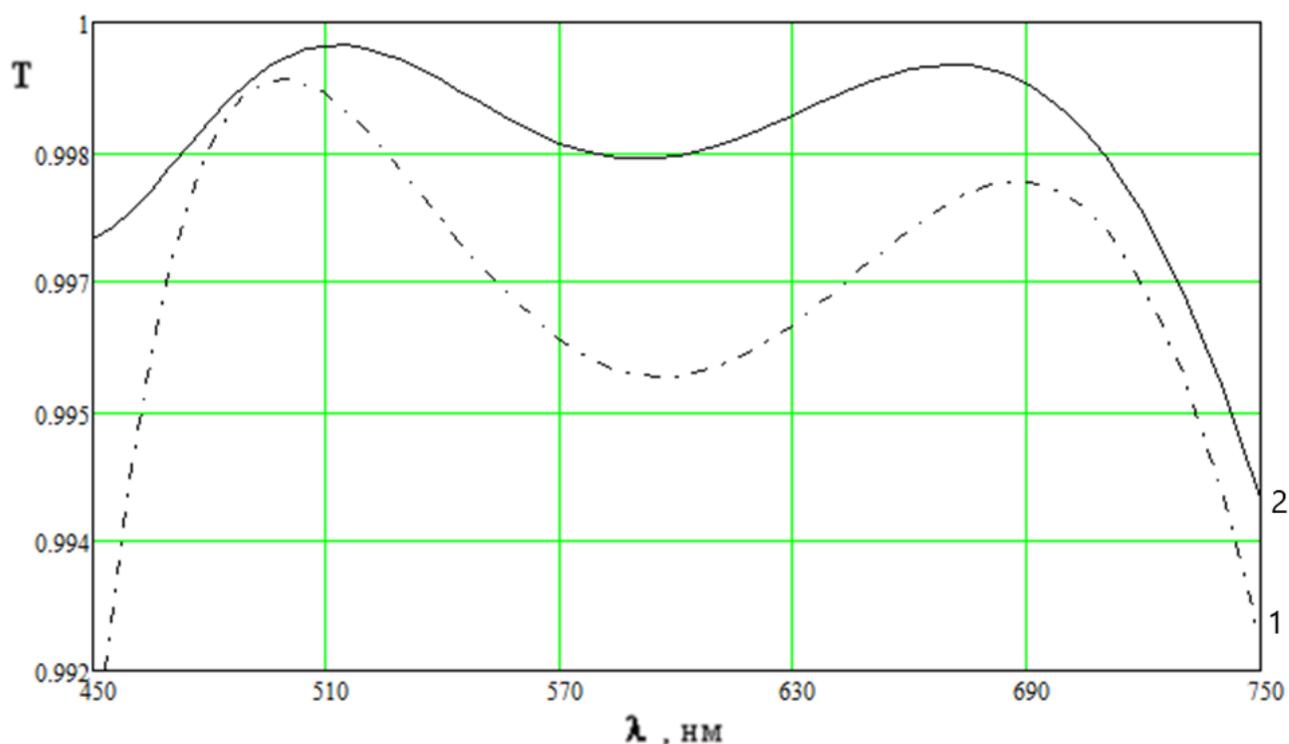


Рисунок 5.23. Криві коефіцієнта пропускання при просвітленні 7-шаровою структурою з чергуючимися шарами (1.35 та 2.1) підкладинки з показником заломлення $n_s=1.52$:

1 – параметри, узяті з авторського свідоцтва №838629 [38] (оптичні товщини шарів відносно λ_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 λ_0 становлять 0.05 : 0.071 : 0.062 : 0.257 : 0.018 : 0.12 : 0.2).

На спектральному інтервалі від 450 до 750 значення функції якості для першого оптичного покриття $F(\vec{n}, \vec{d}) = 0.953$, а для другого оптичного покриття – $F(\vec{n}, \vec{d}) = 0.478$. Відповідно, значення функції якості $F(\vec{n}, \vec{d})$ було покращено практично на 50% (рис. 5.23).

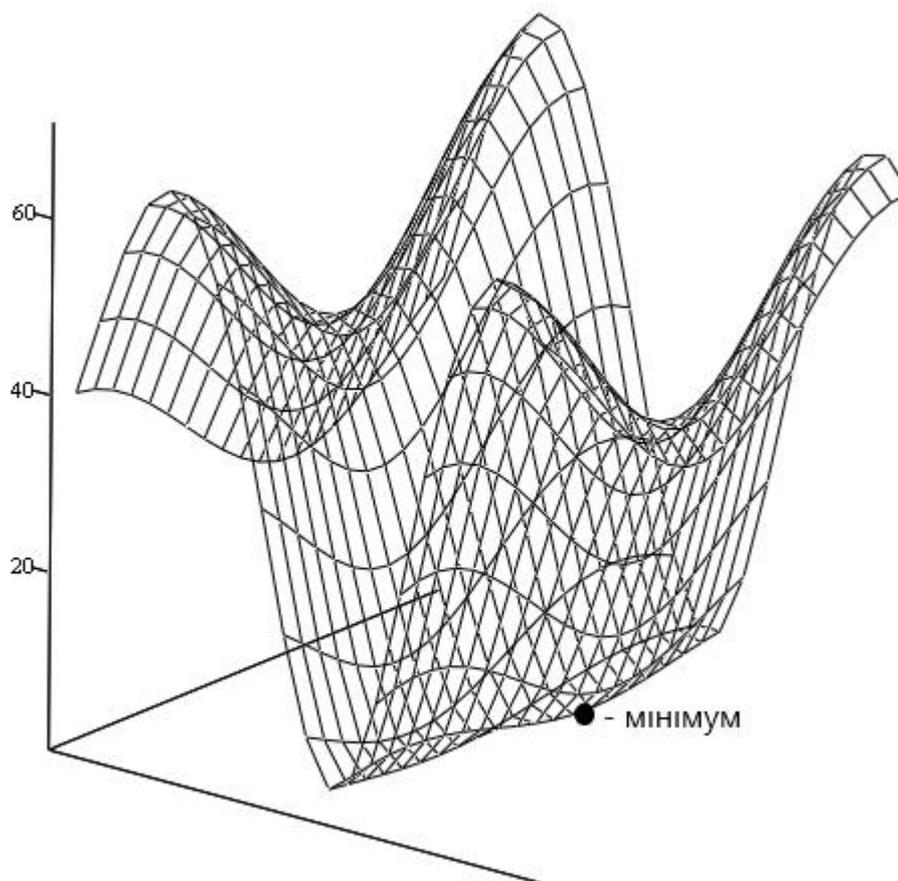


Рисунок 5.24. Вигляд поверхні функції якості, коли зафіксуємо всі знайдені оптимальні параметри, крім геометричних товщин 6-го та 7-го шарів, для 7-шарового оптичного покриття з шарами, що чергуються, з показниками заломлення 1.35 та 2.1, оптичні товщини перших п'яти шарів якого відносно λ_0 становлять 0.05 : 0.071 : 0.062 : 0.257 : 0.018. Розглядається підкладка з показником заломлення $n_s=1.52$

Висновки до розділу 5

1. Запропоновано моделі оптимізаційних задач СОП та їх зведення до задач безумовної мінімізації гладких та негладких функцій. Описано особливості переходу до нових змінних для кожної із запропонованих моделей.

2. Розроблено методи розв'язання задач СОП, які базуються на градієнтних та квазіньютонівських методах, r-алгоритмах Шора, методах нульового порядку. Особливу увагу приділено вибору початкових наближень.
3. Розроблено пришвидшений спосіб для знаходження градієнта цільової функції за допомогою використання префікс- та суфікс-масивів у аналітичному способі обчислення градієнта. Виведено теоретичну оцінку його переваги $q(N) = \frac{3}{N} - \frac{1}{N(N-1)}$, де N – кількість шарів.
4. Для пришвидшеного розв'язання задач СОП запропоновано комп'ютерні реалізації: табуляція значень тригонометричних функцій, швидке множення матриць та використання ефективного методу при одновимірній оптимізації. Показано, що при виконанні 10^9 операцій множення характеристичних матриць використання табуляції значень $\sin(x)$ та $\cos(x)$ зменшує час виконання в десятки разів.
5. Розроблено двоетапний метод, який дозволяє компонувати покриття з уже наявних матеріалів з реальними показниками заломлення. При проектуванні він дозволяє враховувати часткову неоднорідність, дисперсію показника заломлення, мас-транспорт, нанодефекти, оксидацію та стійкість до технологічних похибок.
6. За допомогою двоетапного методу покращено спектральні характеристики трьох наявних ширококутових інтерференційних фільтрів. Зокрема, для ширококутового просвітлюючого покриття (а.с. №1083144) цільова функція покращена на 40%, а для двох інших (а.с.№934429 та а.с.№838629) – покращена на 50%.

Література до розділу 5

1. Міца О.В. Синтез однорідних та неоднорідних оптичних структур при просвітленні високозаломлюючої підкладки для різних спектральних діапазонів. *Міжнародна школа-семінар “Теорія прийняття рішень”*. Ужгород, 2010. С. 152-153.

2. Mitsa O., Petcko V., Holovács 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.
3. Спачинський В.В., Міца О.В. Автоматизація розрахунків спектральних характеристик оптичних систем, які маю шарувату структуру. *Міжнародна конференція молодих учених та аспірантів "ІЕФ-2017"*. Ужгород. 2017. С. 118.
4. 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.
5. Тихонравов А.В., Гришина Н.В. Современные подходы проектированию многослойных оптических покрытий. *Компьютерная оптика*. 1992. Вып. 10-11. С. 3-48.
6. Гласко В.Б., Тихонов А.Н., Тихонравов А.В. О синтезе многослойных покрытий. *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 1974. Том 14. №1. С. 135–144.
7. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование / Пер. с англ. под ред. М. Л. Быховского. М.: Мир, 1975. 534 с.
8. Ляшенко И.Н., Карагодова Е.А., Черникова Н.В., Шор Н.З. Линейное и нелинейное программирование. К.: Выща школа. 1975. 372 с.
9. Михалевич В.С., Волкович В.Л. Вычислительные методы исследования и проектирования сложных систем. М.: Наука, 1982. 285 с.
10. Михалевич В.С., Сергиенко И.В., Шор Н.З. Исследование методов решения оптимизационных задач и их приложения. *Кибернетика*. 1981. №4. С. 89-113.
11. Михалевич В.С., Трубин В.А., Шор Н.З. Оптимизационные задачи производственно-транспортного планирования. М.: Наука, 1986. 264 с.

12. Нефедов В.Н. О сложности вычисления глобального минимума. *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 1993. Том 33. №10. С. 1480-1498.
13. Пшеничный Б.Н., Данилин Ю.М. Численные методы в экстремальных задачах. М.: Наука, 1975. 319 с.
14. Растрингин Л. А. Статистические методы поиска. М.: Наука, 1968. 376 с.
15. Стронгин Р.Г. Численные методы в многоэкстремальных задачах. М.: Наука, 1978. 240 с.
16. Тихонравов А. В. О принципиально достижимой точности решения задач синтеза. *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 1983. № 3. С. 32-41.
17. Фиакко А., Мак-Кормик Г. Нелинейное программирование. Методы последовательной безусловной минимизации / Пер. с англ. под ред. Е. Г. Гольштейна. М.: Мир, 1972. 240 с.
18. Nesterov Yu. Gradient methods for minimizing composite functions. *Mathematical Programming*. 2013. 140.1: 125-161.
19. Черняк, А. А., Черняк, Ж. А., Метельский, Ю. М., Богданович, С. А. Методы оптимизации: теория и алгоритмы. Москва: Издательство Юрайт, 2019. 357 с.
20. Stetsyuk P.I. Shor's r -Algorithms: Theory and Practice. In Optimization Methods and Applications. In Honor of Ivan V. Sergienko's 80th Birthday / S. Butenko, P.M.Pardalos, V. Shylo. Springer. 2017. P. 495–520.
21. Стецюк П.И. Теория и программные реализации r -алгоритмов Шора. *Кибернетика и системный анализ*. 2017. № 5. С. 43–57.
22. Бардадым Т.А., Журбенко Н.Г., Ивличев А.В., Лиховид А.П. Использование r -алгоритма в методе модифицированной функции Лагранжа для задач с критическими множителями. *Компьютерная математика*. 2017. № 2. С. 101–107.

23. Журбенко Н.Г. Об одном семействе модификаций r -алгоритма. *Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки*. 2017. № 15. С. 65–69.
24. Журбенко Н.Г. Численная эффективность одной модификации r -алгоритма. *Теорія оптимальних рішень*. 2017. С. 33–38.
25. Стецюк П.І., Хіміч О.М., Сидорук В.О. Реалізація r -алгоритму на графічних процесорах. *Комп'ютерна математика*. 2016. № 2. С. 100–109.
26. Стецюк П.І., Гасников А.В. NLP-програми і r -алгоритм в задачі ентропійно-линейного програмування. *Теорія оптимальних рішень*. 2015. С. 73–78.
27. Шор Н. З. Методы минимизации негладких функций и матричные задачи оптимизации. *Сборник избранных трудов академика Н. З. Шора*. Кишинев: ЭВРИКА, 2009. 240 с.
28. Шор Н.З., Журбенко Н.Г. Метод минимизации, использующий операцию растяжения пространства в направлении разности двух последовательных градиентов. *Кибернетика*. 1971. № 3. С. 51 – 59
29. Стецюк П.І., Міца О.В. Про обчислення градієнта у задачі синтезу оптичних покриттів. *Теорія оптимальних рішень*. № 4. Київ, 2005. С. 127–133.
30. Стецюк П.І., Міца А.В. О задачах оптимизации параметров для многослойных оптических покрытий. *Кибернетика и системный анализ*. № 4. Київ, 2005. С. 107–115.
31. Ермолаев И. Умножение матриц: эффективная реализация шаг за шагом. [Электронный ресурс]. Доступно: <https://habr.com/ru/post/359272/>. Дата звернення: Лист. 28, 2019.
32. Міца О.В., Пецко В.І., Стецюк В.І. Двоетапний метод для синтезу багатосферних оптичних систем. *Комп'ютерна математика*. 2017, № 1. С. 73-82.

33. Мица 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.
34. Стецюк П.І. Алгоритми недиференційовної оптимізації та лагранжеві двоїсті оцінки в складних екстремальних задачах: дис. ... доктора фіз.- мат. наук : 01.05.01 /Стецюк Петро Іванович. К., 2013. 305 с.
35. Мица А.В., Стецюк П.І. Использование r -алгоритма для оптимизации трех оптических многослойных покрытий. *Материалы 5-й международной конференции «Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии»*. Том II. Кишинев, 2010. С. 100-108.
36. Просветляющее интерференционное покрытие: А.с. 1083144 СССР, МКИ G 02 В 5/28; G 02 В 1/10. Б.И. Агафонов, М.Ф. Васильева, А.С. Герчиков, Е.А. Федин, П.П. Яковлев (СССР). № 3420182/18–10; Заявлено 12.04.82; Оpubл. 30.03.84, Бюл. №12. 3 с.
37. Широкополосное просветляющее покрытие: А.с. 934429 СССР, МКИ G 02 В 5/28. В.Д. Веденский и Е.Г. Столов (СССР). № 2809841/18–10; Заявлено 09.07.79; Оpubл. 07.06.82, Бюл. №21. 3 с.
38. Интерференционное ахроматическое просветляющее покрытие: А.с. 838629 СССР, МКИ G 02 В 5/28. В.Д. Веденский, Е.Г. Столов, А.А. Метельников, Ш.А. Фурман и Е.Г. Семин (СССР). № 2822915/18–10; Заявлено 15.10.79; Оpubл. 15.06.81, Бюл. №22. 3 с.

РОЗДІЛ 6

ЗАСТОСУВАННЯ РОЗРОБЛЕНИХ МЕТОДИК ДЛЯ РОЗПІЗНАВАННЯ ПРОФІЛЮ ПОКАЗНИКА ЗАЛОМЛЕННЯ ПЛІВОК ДЛЯ ХАЛЬКОГЕНІДНОЇ ФОТОНІКИ

У розділі розглядається використання розроблених в 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 підхід (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. Розв'язано оптимізаційну задачу, до якої був імплементований метод розв'язання задач СОП (розділ 5).

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.

6.1. Про задачу розпізнавання профілю показника заломлення плівки

Унікальні властивості матеріалів для халькогенідної фотоніки пов'язані з їх чутливістю до когерентного лазерного випромінювання та фотоіндукованих структурних трансформацій, які є ключовими при використанні ХСН в якості середовищ для голографії та систем оптичного запису інформації [1-6]. За допомогою лазерного опромінення в безкисневих оптичних середовищах можна також створювати хвилеводи та розгалужувачі, дифракційні ґратки, моделі 3D оптичної пам'яті, тощо [3, 5-8]. На даний час в Україні у відділі оптичних носіїв інформації Інституту проблем реєстрації інформації НАНУ під керівництвом чл.-кор. НАНУ Крючина А.А. досліджені процеси й розроблені методи формування поверхневих рельєфних структур в аморфних плівках ХСН методом фотоіндукованого мас-транспорту [5, 6, 9-11]. Напрямок зміни розмірів, як і напрямок і величина мас-транспорту в аморфних плівках, залежать від їх хімічного складу та схеми запису. Кількісні значення зміни складу при мас-транспорті на поверхні без впливу кисневих забруднень у високочистих халькогенідних плівках, одержаних на основі синхротрон-фотоелектронних досліджень, наведені в [12].

Широке застосування ХСН обумовлено їх прозорістю у видимій та ІЧ областях спектру, порівняно простим одержанням оптичних середовищ із заданими значеннями показника заломлення та його дисперсії, можливістю суттєво змінювати оптичні характеристики і параметри при лазерному опроміненні.

Значення показників заломлення халькогенідних плівок знаходяться в широких межах і суттєво залежать від хімічного складу. Для прикладу, на рис. 6.1 наведені значення свіжо напилених плівок деяких халькогенідних систем, визначені на довжині хвилі $\lambda=1.5$ мкм [13].

Опромінення свіжонапилених плівок призводить до суттєвих змін (зменшення або збільшення) n , викликаних структурними перетвореннями (рис. 6.2 і 6.3) [1, 4, 13-16]. Наприклад, опромінення плівок As_2S_3 , As_2Se_3 і $As_{50}S_{50}$, зеленим лазером ($\lambda=530$ нм), призводить до збільшення їх показника заломлення та фотозатемнення (спектри поглинання зміщуються у довгохвильову ділянку спектру). Протилежна картина спостерігається для плівок системи Ge-S. При опроміненні плівок GeS_2 і

Ge_2S_3 таким же лазером їх спектри поглинання зсуваються в короткохвильову ділянку спектр у (проходить фотопросвітлення плівок). При цьому показник заломлення плівок зменшується.

Це створює можливість діагностики змін показника заломлення плівок ХСН під час опромінення шляхом моделювання оптичного пропускання в області прозорості опромінених і неопромінених плівок. Однак, необхідно враховувати, що при опроміненні плівок змінюються їх розміри [3] та хімічний склад (рис. 6.4) [17]. Ці зміни визначають хід залежностей значень показника заломлення халькогенідних плівок від товщини (рис. 6.2 і 6.3) [13]. З наведених рисунків видно, що найбільші зміни n проявляються в плівках товщиною менше 100 нм.

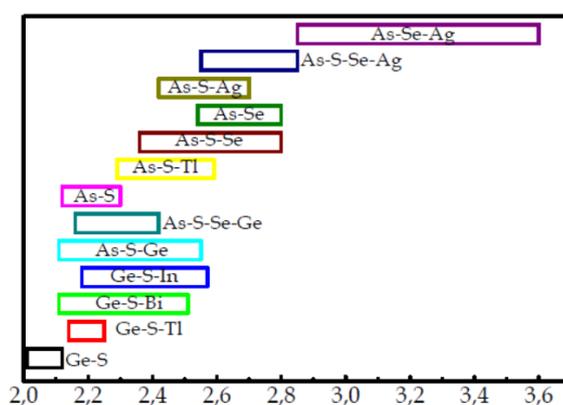


Рисунок 6.1. Показники заломлення плівок халькогенідних систем, визначені на довжині хвилі $\lambda=1.5$ мкм [13]

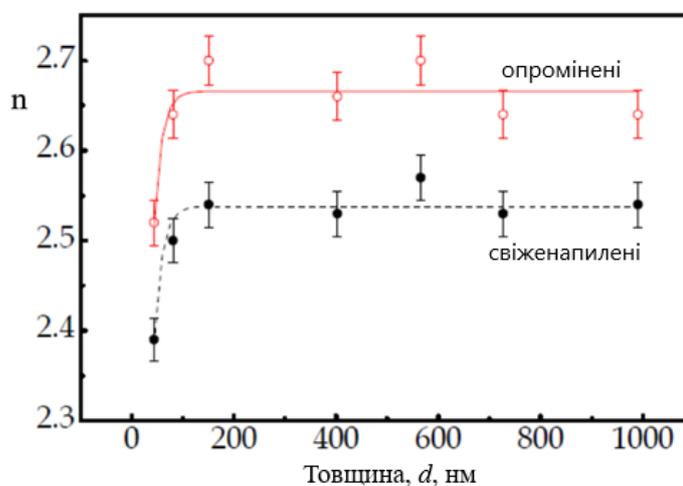


Рисунок 6.2. Залежність показника заломлення опроміненої і неопроміненої плівки $\text{As}_{50}\text{S}_{50}$ від товщини [13]

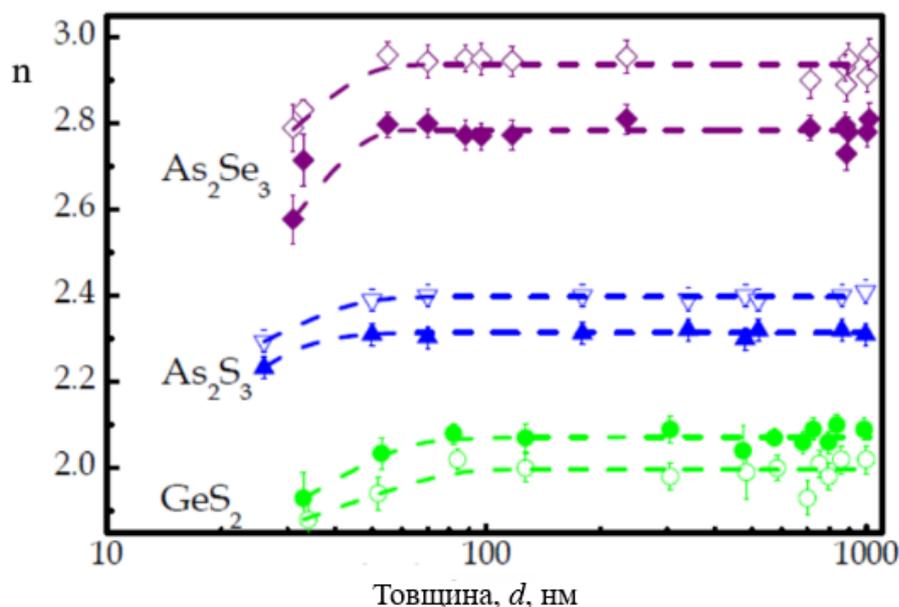


Рисунок 6.3 Залежність показника заломлення опромінених і неопромінених плівок As_2S_3 , As_2Se_3 , GeS_2 від товщини [13]. Опромінена плівка – незафарбовані кола, трикутники і квадрати, свіжонапилена плівка – зафарбовані кола, трикутники і квадрати

Формування часткової неоднорідності на початковій стадії росту відносять до процесів електростатичної взаємодії атомів з підкладкою і нестехіометрії на межі розділу плівка-підкладка [18]. Процеси електростатичної взаємодії атомів з підкладкою мають фундаментальний характер.

Формула для розрахунків перехідного шару для цього механізму наведена в [18]:

$$x = \ln(2\varepsilon_0/3kt)/a, \quad (6.1)$$

де a – стала, яка залежить від індивідуальних властивостей адсорбованих атомів ($a = -(2/d) \cdot \ln(\alpha/d^3)$); α – поляризованість атомів; d – діаметр атома; k – стала Больцмана; t – час.

Формування відхилення складу плівок від заданого (формування нестехіометрії) визначається методом їх одержання [18]. Для халькогенідних плівок, одержаних термічним напиленням, виявлено наявність приповерхневої і перехідної областей [18]. Наявність приповерхневої області впливає з порівняння профілю показника заломлення плівок (рис. 6.3) та концентраційного профілю елементів у плівках (рис. 6.4). Оцінки показали, що товщина перехідної області для плівок GeS_2

може складати 30 нм [17]. Для найбільш відомих для класичної оптичної індустрії плівок діоксиду кремнію (SiO_2) субстехіометричний проміжний оксидний шар між неокисленим кремнієм та повністю окисленим двоокисом кремнію може простягати на віддаль до 1 нм [19].

Виходячи із експериментальних даних при моделюванні оптичних властивостей плівок ХСН і відтворенні їх показника заломлення при опроміненні, необхідно взяти до уваги зміну показника заломлення на межах розділу. Іншою важливою складовою для верифікації моделі відтвореного профілю показника заломлення опромінених плівок є експериментальні спектри пропускання.

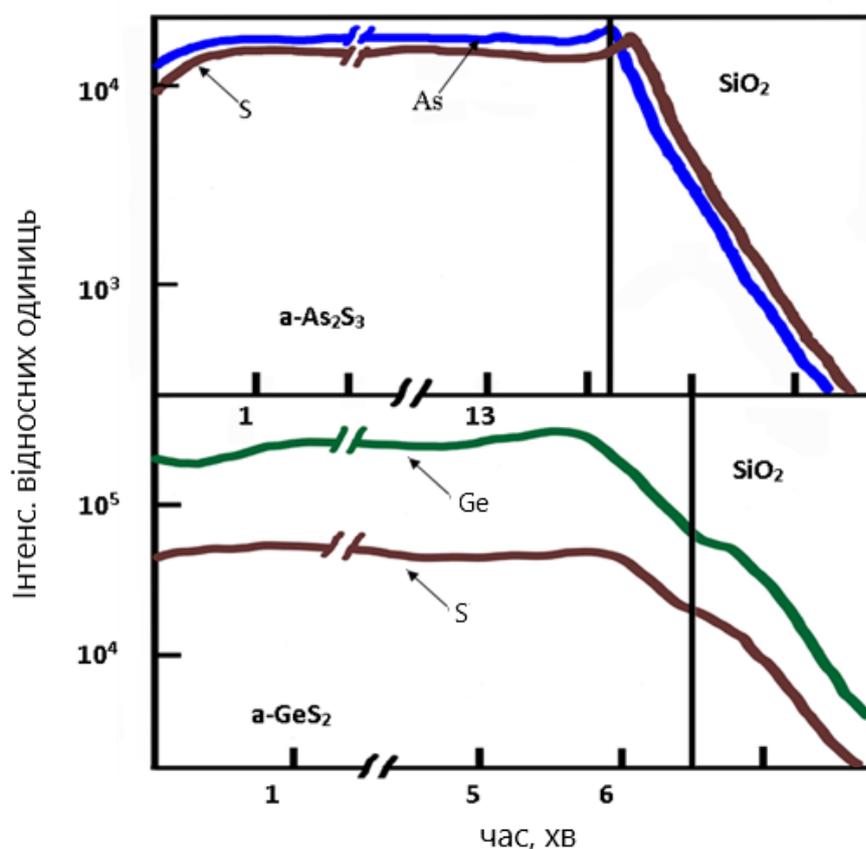


Рисунок 6.4. Концентраційні профілі елементів плівок, одержаних термічним ($a\text{-As}_2\text{S}_3$) і дискретним ($a\text{-GeS}_2$) напilenням на SiO_2 [17]

6.2. Розпізнавання профілю показника заломлення плівки сульфїду миш'яку при її лазерному опроміненні

Задачі розпізнавання належать до найбільш складних обернених задач, пов'язаних з оптичними системами. Згідно з постановкою задачі потрібно відтворити за експериментальними даними спектральних характеристик у найпростішому ступінчастому наближенні профіль показника заломлення плівки після опромінення. Цей профіль під дією зовнішніх чинників змінюється, і потрібно відповісти, у яких областях плівки відбулися найсуттєвіші зміни показника заломлення. Ми виходили з того, що відтворений профіль показника заломлення повинен базуватися на експериментальних даних з дослідження спектрів пропускання плівки після опромінення.

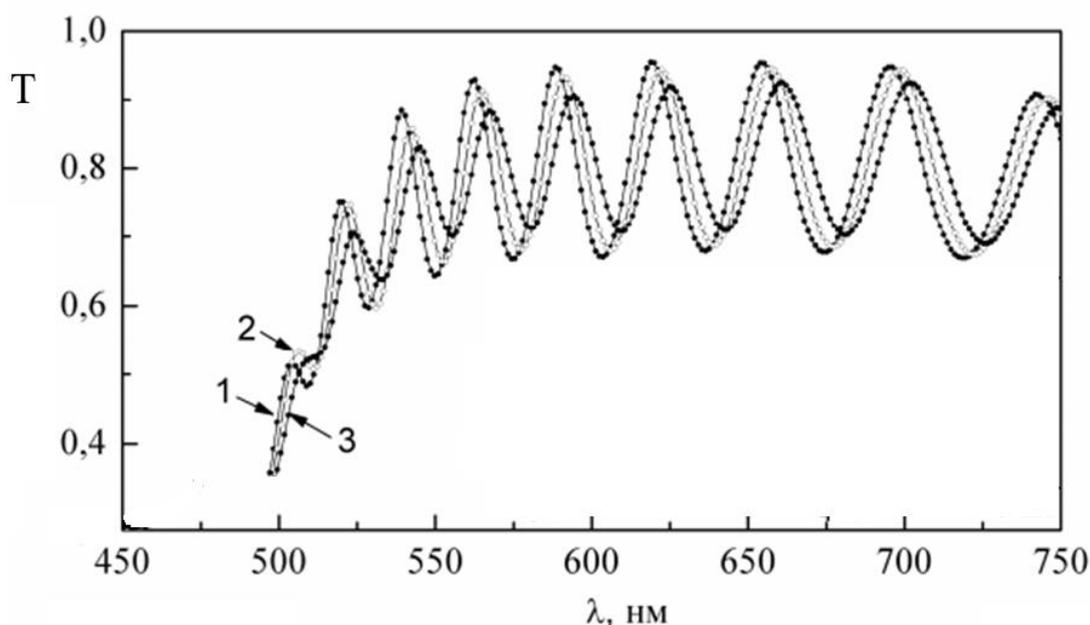


Рисунок 6.5. Спектри пропускання свіжоприготованої (1) та експонованих (2, 3) плівок As_2S_3 . Час експонування, хв.: 1-0; 2-5; 3-10 [4]

З експериментальних даних, наведених на рисунку 6.5, видно, що під час експонування спектри пропускання аморфної плівки As_2S_3 (показник заломлення свіжонапиленої плівки 2.3) з оптичною товщиною $\frac{m \cdot \lambda_0}{2}$ (m – натуральне число) зсуваються в область довгих хвиль. При цьому розмах коливань зменшується. Як

відомо [12], під час опромінення плівки на її поверхні формується миш'якозбагачений приповерхневий шар з більшим показником заломлення. Зміни поверхні свіжонапиленої плівки As_2S_3 при відпалі та опроміненні ілюструє рисунок 6.6. Процеси фототрансформації молекул у процесі опромінення халькогенідних наночарів когерентними джерелами світла з різною довжиною хвилі й поляризацією супроводжуються дифузією трансформованих молекул з об'єму на поверхню, створюючи градієнт концентрації [12].

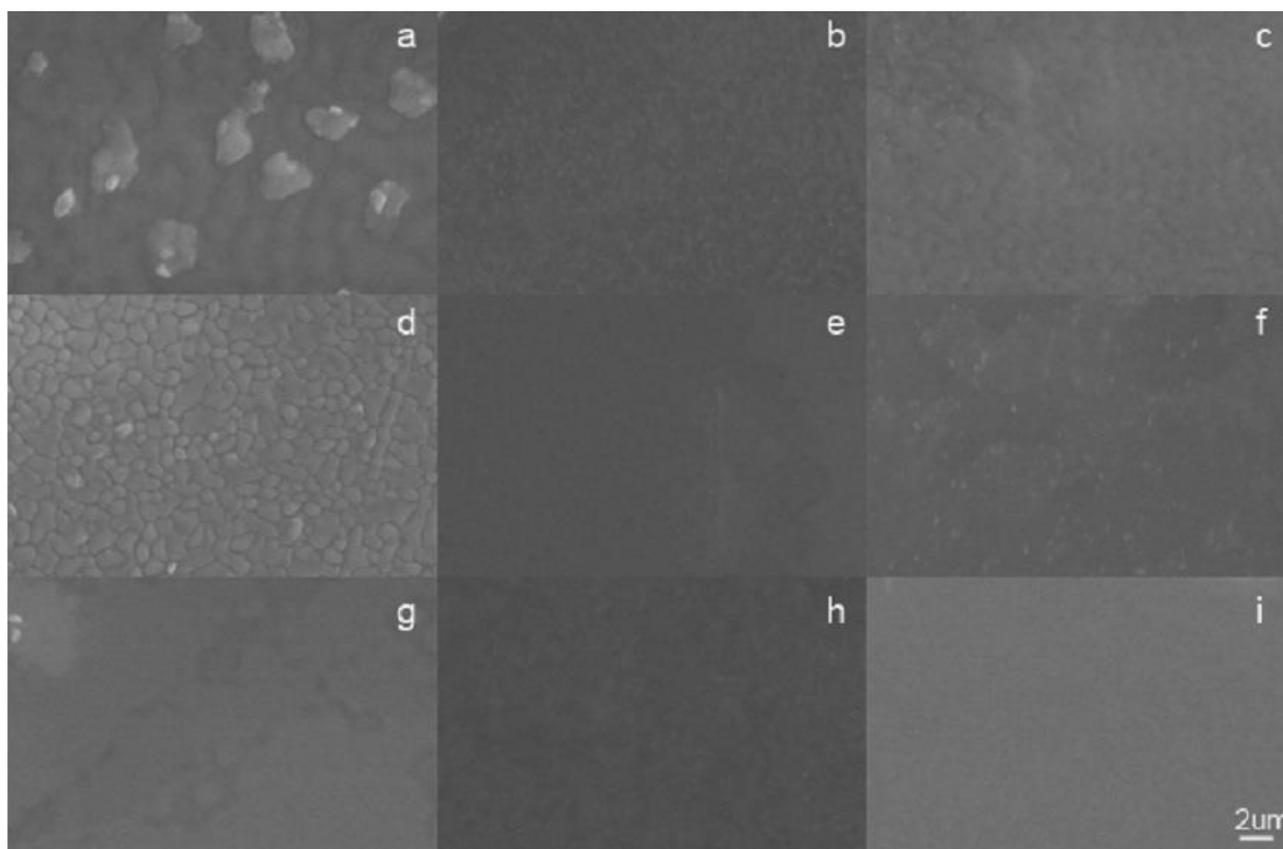


Рисунок 6.6. СЕМ зображення свіжонапилених (a, d, g), відпалених (b, e, h) та опромінених (c, f, i) плівок $As_{40}S_{60}$ (a, b, c), $As_{45}S_{55}$ (d, e, f) та $As_{50}S_{50}$ (g, h, i) [12]

Для порівняння модельних і експериментальних даних нами взятий спектральний діапазон від 500 до 750 нм. Геометрична товщина плівки була близька до розмірів плівки, що досліджувалася в [4] і складала 1.37 мкм. Оптична товщина приймалась рівною $5 \cdot \lambda_0$ ($\lambda_0=630$ нм).

Будемо по чергово вводити параметри й досліджувати їх вплив на спектральні характеристики плівок, звертаючи особливу увагу на два показники (рис. 6.7), яких потрібно досягнути:

- 1) зменшення розмаху коливання;
- 2) зсув максимумів в область довгих хвиль.

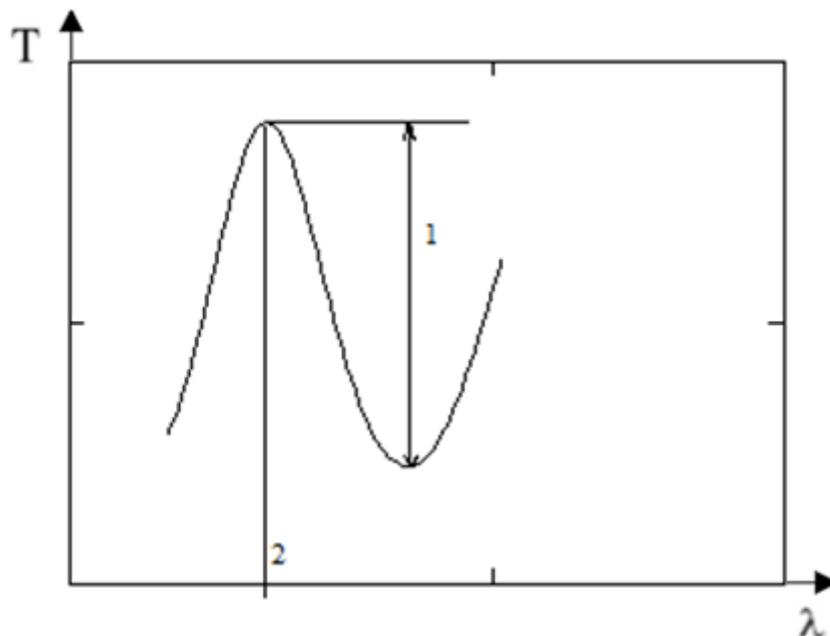


Рисунок 6.7. Два основні показники (1 – розмах коливання; 2 – положення максимуму), які вплинули на побудову моделі-розв’язку задачі розпізнавання

Промодельємо вплив приповерхневого шару з показником заломлення 2.4 на спектральні характеристики, змінюючи його розмір з невеликим кроком. Показник заломлення 2.4 прийнятий рівним показнику заломлення об’ємного скла [13].

Як видно з рисунку 6.8, з ростом приповерхневої області положення максимумів і мінімумів здійснюють незначні коливні рухи вверх-вниз. При цьому спостерігається незначний зсув максимумів в область довгих хвиль. Крім того, як видно з рисунку 6.5, зсув у довгохвильову область зростає і при збільшенні часу експонування. З урахуванням того, що приповерхнева область збільшується від 0 до 300 нм з кроком 1 нм, були проведені розрахунки спектральних характеристик плівок As_2S_3 .

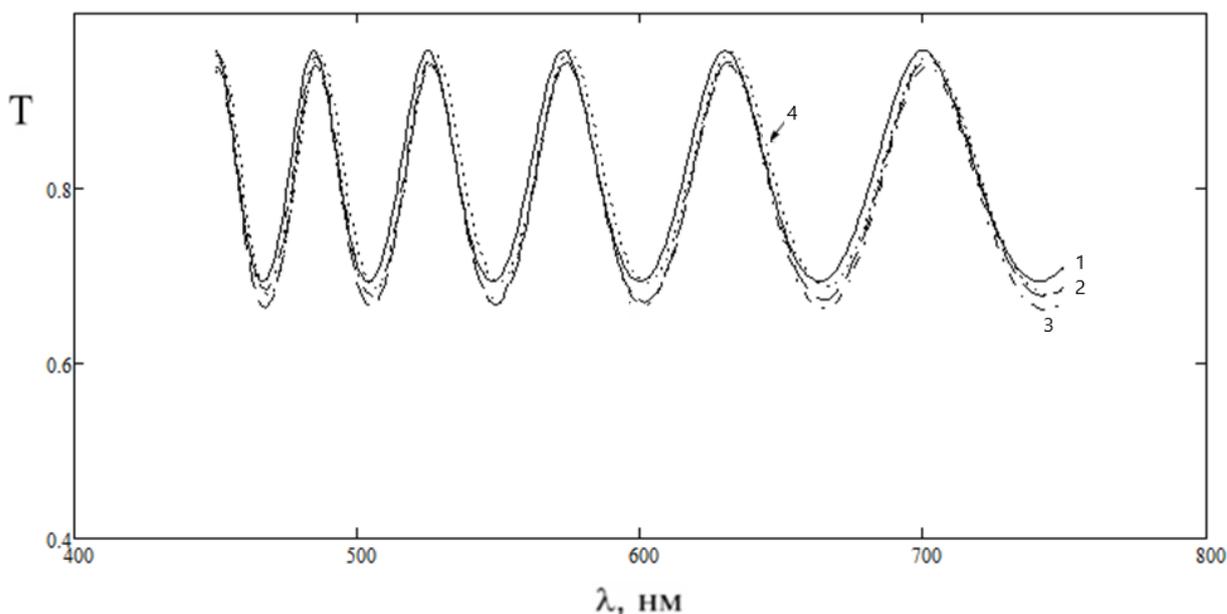


Рисунок 6.8. Спектральні характеристики плівки As_2S_3 при наявності приповерхневого шару, нм: 1 – 0; 2 – 40; 3 – 80; 4 – 120

Одержані результати дозволяють стверджувати:

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.

З іншого боку, як видно з рисунку 6.3, наявність приповерхневого шару не призводить до зменшення розмаху коливання. Відповідно, потрібно включити додатковий параметр у модель, яка повинна включати перехідний шар, а виходячи з [3], і незначний ріст товщини плівки.

Розмах коливання за наявності й зростанні приповерхневого шару спочатку збільшується (рис. 6.9), а в подальшому зменшується. Однак розмах коливання ніколи не стає меншим за початковий.

Випадок, коли розмір плівки при експонуванні зменшується, було відкинута, оскільки в такому випадку відбувався суттєвий зсув в область коротких хвиль.

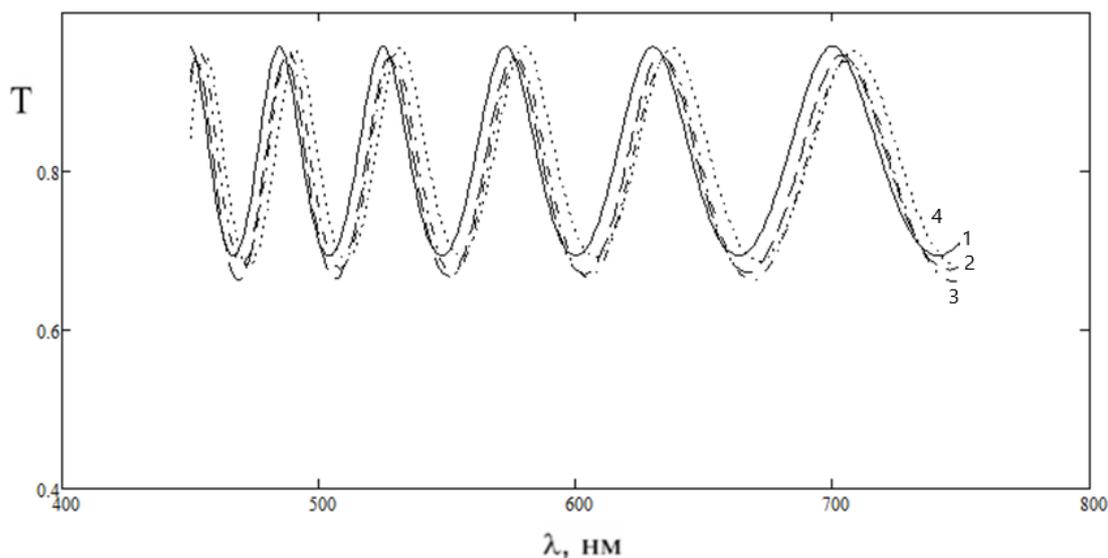


Рисунок 6.9. Спектральні характеристики плівки As_2S_3 при наявності приповерхневого шару (нм: 1 – 0; 2 – 40; 3 – 80; 4 – 120) та зростанні товщини плівки на величину 1/10 від розмірів приповерхневої області

Зростання товщини плівки навіть на величину 1/10 від розмірів приповерхневої області призводить до більш суттєвого зсуву в область довгих хвиль (рис. 6.9), ніж тільки наявність приповерхневої області. Однак, коли одержуємо достатній зсув в область довгих хвиль, все одно основним недоліком розглядуваної моделі залишається те, що розмах коливання не зменшується.

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.

З твердження 6.2 випливає, що модель, яка буде враховувати лише приповерхневу область і зростання розмірів плівки, не зможе забезпечувати спектральні характеристики, які отримані експериментальним шляхом.

У зв'язку з цим, у модель потрібно ввести додатковий параметр. Візьмемо за основу модель, яка розглянута в розділі 2, для якої вже розроблено математичну основу. Вона містить, окрім приповерхневого, ще й перехідний шар, який знаходиться на межі плівка-підкладка. Показник заломлення цієї області не може бути більшим, ніж показник заломлення плівки, з двох причин. По-перше, відбулось

збільшення показника заломлення приповерхневої області за рахунок мас-транспорту на приповерхневій частині плівки [8]. По-друге, уже з позицій моделювання можна сказати, що збільшення показника заломлення буде призводити до збільшення розмаху коливання. Відповідно, показник заломлення перехідної області може бути лише меншим за показник заломлення центральної частини плівки. Цей висновок узгоджується з експериментальними даними товщинної залежності показника заломлення, наведеної на рис. 6.4.

Продовжимо моделювання спектральних характеристик плівки з перехідним шаром плівка-підкладка. Візьмемо для проведення обчислювального експерименту значення показника заломлення перехідної області, рівне 2.2. Після проведення обчислювального експерименту було виявлено:

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

Проведені розрахунки показали, що з ростом розміру перехідної області розмах коливання спочатку зменшується, а в подальшому збільшується. Потрібно зазначити, що протяжна перехідна область плівка-підкладка призводить до зсуву максимумів в область коротких хвиль. Необхідно визначити, чи можна за допомогою введеного ще одного параметру для шуканої моделі отримати спектральні характеристики, які б максимально наближувалися до експериментальних. Для цього побудуємо відповідну математичну модель, основу для якої візьмемо з розділу 2.

Якщо характеристичну матрицю одного шару при падінні світла, яке збігається з нормаллю до поверхні, виразити через показник заломлення n , геометричну товщину d та довжину хвилі λ

$$M(n, d, \lambda) = \begin{vmatrix} \cos \frac{2\pi nd}{\lambda} & -\frac{i}{n} \cdot \sin \frac{2\pi nd}{\lambda} \\ -i \cdot n \cdot \sin \frac{2\pi nd}{\lambda} & \cos \frac{2\pi nd}{\lambda} \end{vmatrix}, \quad (6.2)$$

то характеристична матриця запропонованої моделі буде мати вигляд

$$M(dv, dp, \Delta d, \lambda) = M(2.4, dv, \lambda) \cdot M(2.3, df + \Delta d, \lambda) \cdot M(2.2, dp, \lambda), \quad (6.3)$$

де dv – геометрична товщина приповерхневої області, dp – геометрична товщина перехідної області, Δd – розмір росту плівки.

Геометрична товщина центральної частини плівки df визначалась як

$$df = 10 \cdot \lambda_0 - dp - dv,$$

де λ_0 – робоча довжина хвилі, яка була взята з області прозорості й рівна 650 нм.

Коефіцієнт пропускання для такої моделі буде обчислюватися з урахуванням уведених параметрів за формулою

$$T(dv, dp, \Delta d, \lambda) = \frac{4}{2 + \frac{n_0}{n_s} M_{11}^2(dv, dp, \Delta d, \lambda) + \frac{n_s}{n_0} M_{22}^2(dv, dp, \Delta d, \lambda) + n_0 n_s M_{11}^2(dv, dp, \Delta d, \lambda) + \frac{1}{n_0 n_s} M_{11}^2(dv, dp, \Delta d, \lambda)}, \quad (6.4)$$

де n_0 – показник заломлення зовнішнього середовища (повітря), прийнятий рівним 1, n_s – показник заломлення підкладки (для скла це значення прийняте рівним 1.51).

Цільову функцію будемо будувати, виходячи з позицій мінімумів і максимумів спектральних характеристик. Позначимо в порядку зростання довжини хвилі точки мінімумів і максимумів для халькогенідної плівки до опромінення – $X_1(T_1, \lambda_1)$, $X_2(T_2, \lambda_2)$, ..., $X_m(T_m, \lambda_m)$, а також відмітимо положення точок мінімумів і максимумів для експериментальних даних – $\bar{X}_1(\bar{T}_1, \bar{\lambda}_1)$, $\bar{X}_2(\bar{T}_2, \bar{\lambda}_2)$, ..., $\bar{X}_m(\bar{T}_m, \bar{\lambda}_m)$, (m – кількість таких точок). Сформулюємо оптимізаційну задачу наступним чином:

визначити такі значення dv, dp та Δd , щоб точки максимумів і мінімумів спектральних характеристик цієї моделі максимально наблизити до точок максимумів і мінімумів експериментальних даних (рис. 6.10).

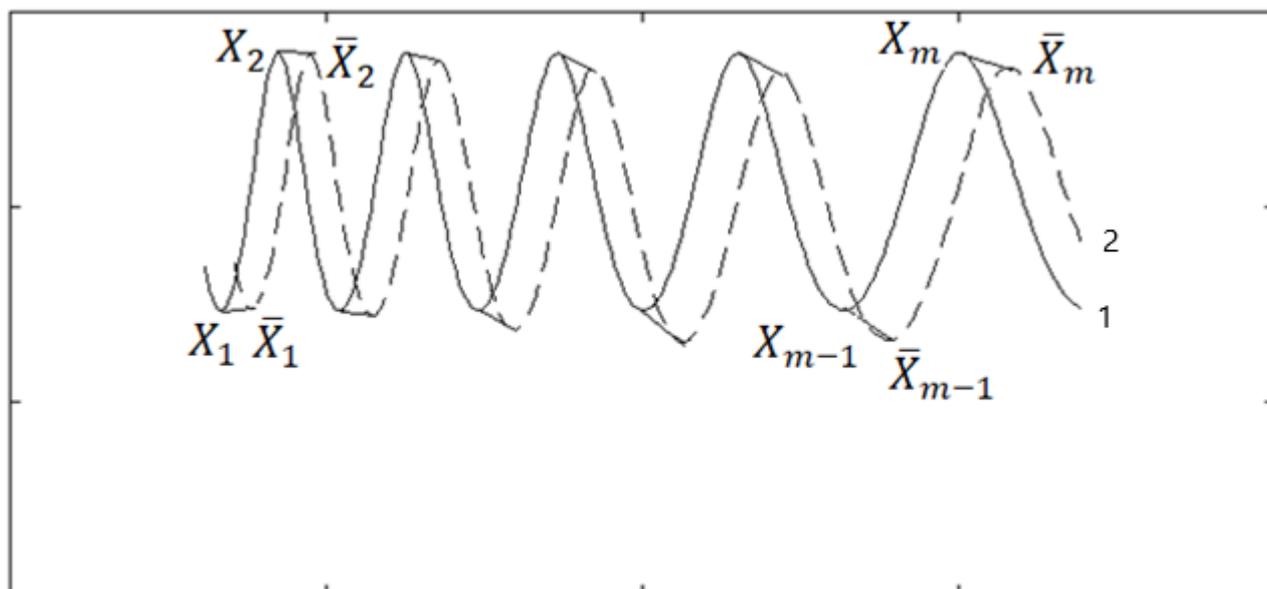


Рисунок 6.10. Схематична модель зв'язування відповідних точок максимумів і мінімумів, сумарна відстань між якими і є значенням побудованої цільової функції, спектральних характеристик: 1 – шукані значення розробленої моделі; 2 – взяті з експериментальних даних [4]

Цільова функція буде мати вигляд

$$F(dv^*, dp^*, \Delta d^*) = \min_{dv, dp, \Delta d} \left(\sum_{i=1}^m \sqrt{(T(dv, dp, \Delta d, \lambda_i(dv, dp, \Delta d)) - \bar{T}_i)^2 + \left(\frac{\lambda_i - \bar{\lambda}_i}{k}\right)^2} \right) \quad (6.5)$$

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.

Відзначимо, що цільова функція має певні складності обчислення, які пов'язані з ітеративним відшукуванням $\lambda_i(dv, dp, \Delta d)$ точок мінімумів і максимумів функції $T(dv, dp, \Delta d, \lambda_i(dv, dp, \Delta d))$.

Ця модель є більш узагальненою і включає описані попередні дві: першу – наявність лише приповерхневої області ($dp = 0, \Delta d = 0$), другу – наявність приповерхневої області й росту розмірів плівки ($dp = 0$).

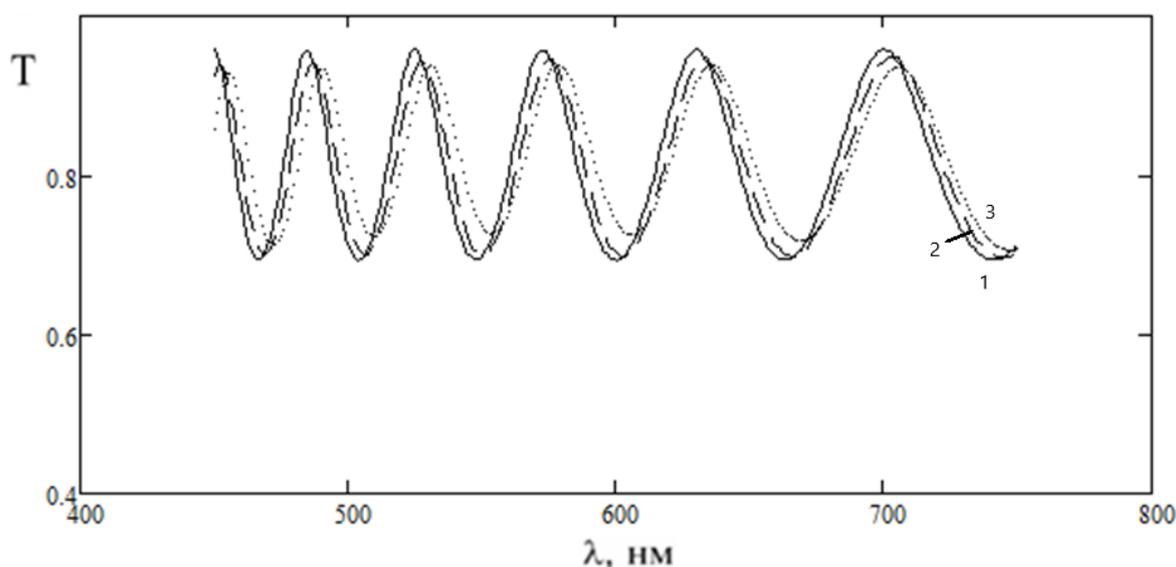


Рисунок 6.11. Спектри пропускання плівки As_2S_3 , одержані на основі розробленої моделі, отриманої при розв'язанні задачі розпізнавання

Використаємо для пошуку оптимальних параметрів цієї задачі метод Хука-Дживса. Починаючи з випадково вибраної базисної точки будемо виконувати серію “пробних рухів”: розглядаються вдалі в розумінні зменшення цільової функції кроки за координатними напрямками. Якщо приріст першої координати призвів до збільшення цільової функції порівняно з її значенням у вихідній точці, то отримана точка відкидається, а знак приросту змінюється на протилежний. Якщо від'ємний приріст також призводить до збільшення цільової функції, то ця координата залишається без змін і приріст дається наступній координаті. Якщо ж зміна координати призводить до зменшення функції, то отримана точка зберігається, а далі здійснюється перехід до наступної координати. Після серії мультизапусків

виберемо найменше із знайдених значень цільової функції, що є, згідно з наведеним означенням у розділі 5, квазіоптимальним.

Після проведення розрахунків було отримано такі квазіоптимальні значення шуканих параметрів $dv \approx 20$ нм, $dp \approx 30$ нм, $\Delta d \approx 8$ нм, які дозволяють відтворювати експериментальні спектральні характеристики опромінених протягом 5 хв плівок As_2S_3 . Для відтворення спектральних характеристик опромінених протягом 10 хв плівок значення цих параметрів мають бути наступними: $dv \approx 120$ нм, $dp \approx 60$ нм, $\Delta d \approx 12$ нм. Тобто одним з варіантів для вибраної товщини плівки може бути розмір приповерхневої області приблизно 120 нм з показником заломлення 2.4, розмір перехідної області приблизно 60 нм з показником заломлення 2.2 (рис. 6.11). Зростання товщини плівки після експонування при цьому приблизно рівне 12 нм.

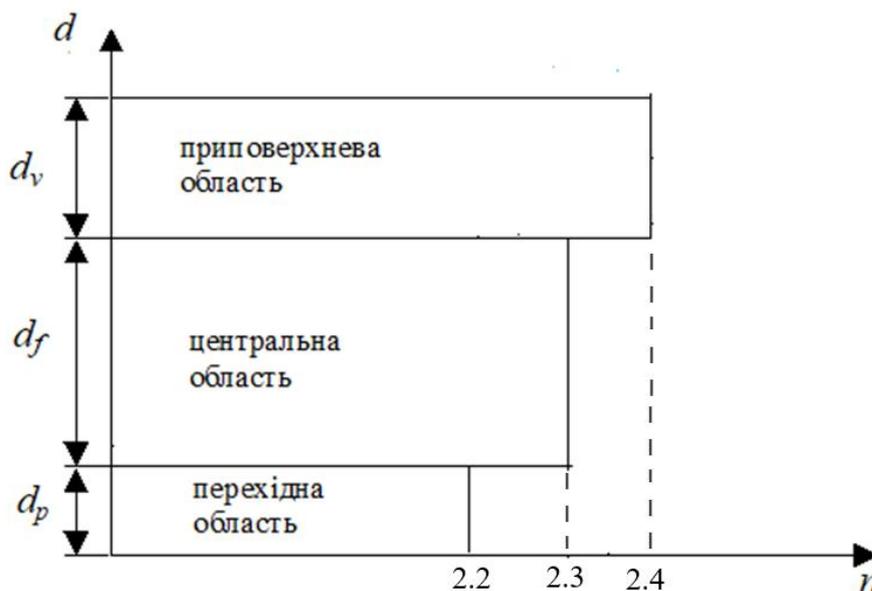


Рисунок 6.12. Модель-розв'язок розглядуваної задачі розпізнавання профілю показника заломлення опроміненої плівки As_2S_3

Таким чином, спектральні характеристики опроміненої плівки As_2S_3 теоретично можуть бути досягнуті при дотриманні моделі профілю показника заломлення (рис. 6.12), яка складається із приповерхневої і перехідної областей, з урахуванням незначного збільшення розмірів плівки.

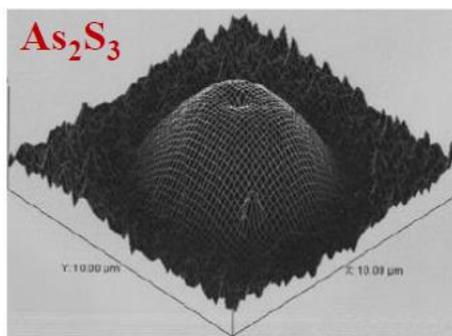


Рисунок 6.13. Фотовидовження (photoexpansion) у плівках As_2S_3 [20]

Якщо не брати до уваги зростання розмірів плівки, то побудувати модель, яка б забезпечувала спектральні характеристики, подібні експериментальним, не представляється можливим. Цей висновок узгоджується з експериментальними даними про зростання товщини плівки в процесі експонування (рис. 6.13) [3, 20-22]. За даними [20] збільшення об'єму ΔV складає $\Delta V/V \sim 0.4\%$.

Явище фоторозширення лягло в основу створення одноступінчатим методом голографічних ґраток на основі плівок As_2S_3 [21] (рис. 6.14) та нанолінз (рис.6.15-6.16).

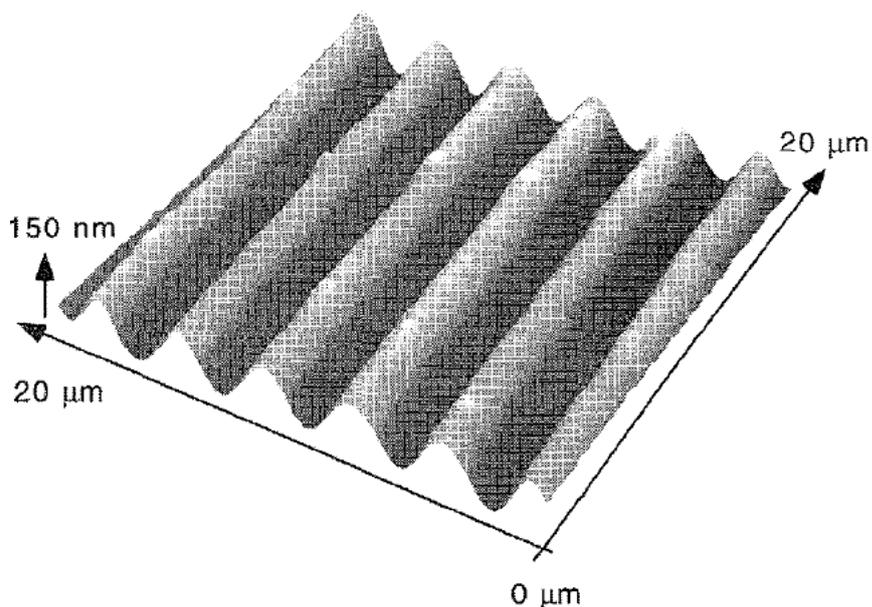


Рисунок 6.14. Формування голографічної ґратки в плівках As_2S_3 за рахунок фоторозширення [21]

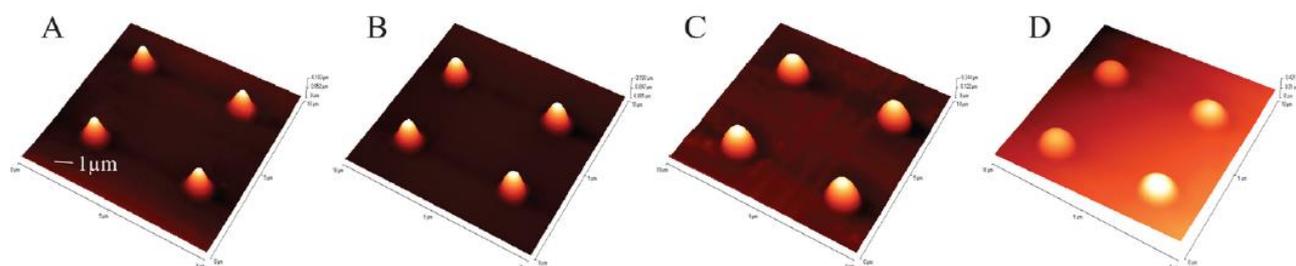


Рисунок 6.15. Зображення в атомно-силовому мікроскопі (АФМ) процесу формування нанолінз у плівках As_2S_3 за рахунок фоторозширення при різних інтенсивностях лазерного (800 нм) опромінення: а- 8 мВт; б-12 мВт; с-18 мВт; д- 20 мВт [22]

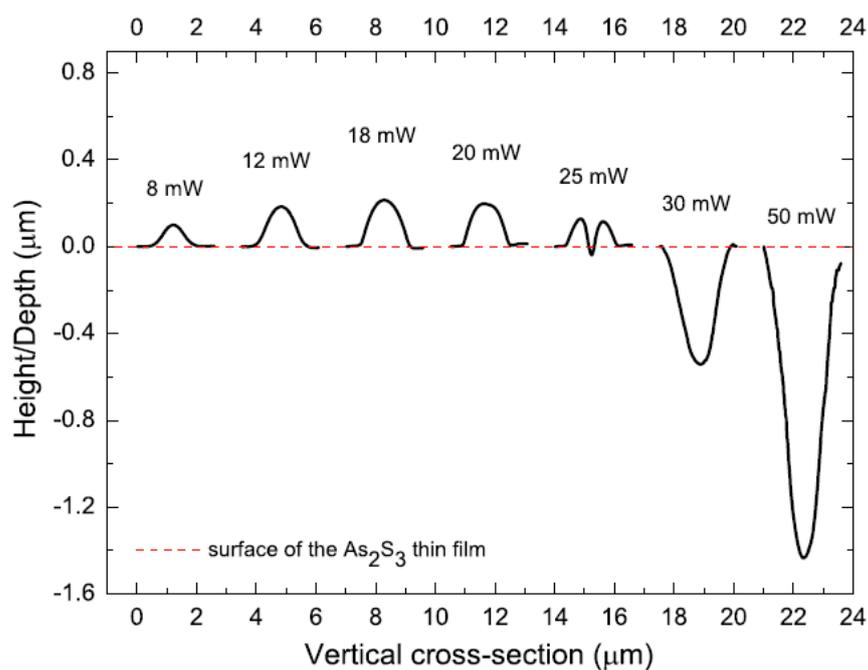


Рисунок 6.16. Вертикальний переріз висоти нанолінз із АФМ знімку (рис.6.15), сформованих у плівках As_2S_3 за рахунок фоторозширення при різних інтенсивностях лазерного опромінення [22]

6.3. Розпізнавання профілей показників заломлення плівок дисульфиду германію

У підрозділі розглянуто задачі розпізнавання профілей показників заломлення за спектрами пропускання свіжонапилених та фотопросвітлених плівок дисульфиду германію. Запропоновано моделі, які відтворюють експериментально отримані спектральні характеристики.

6.3.1. Розпізнавання профілю показника заломлення свіжонапилених плівок

Дослідження концентраційного профілю елементів свіжонапилених плівок системи Ge-S показали, що плівки мають частково неоднорідну структуру, у якій можна виділити центральну частину плівки і перехідну область плівка-підкладка (рис. 6.17) [23]. На межі розділу плівка-підкладка спостерігається більше значення відношення Ge/S порівняно зі значенням відношення Ge/S у центральній частині плівки. Методами багатокутової еліпсометрії для таких плівок була запропонована двошарова модель, у якій показник заломлення центральної частини плівки складав 2.05-2.1, а перехідної області – 2.6 [23]. Останнє значення показника заломлення характерне для плівок і стекол $\text{Ge}_{40}\text{S}_{60}$ [24]. При різних термічних методах напилення плівок (при прямому напиленні із човника та дискретному напиленні) на межі розділу плівка-підкладка завжди спостерігається збільшення вмісту германію по відношенню до сірки (рис. 6.17, 6.18) [23].

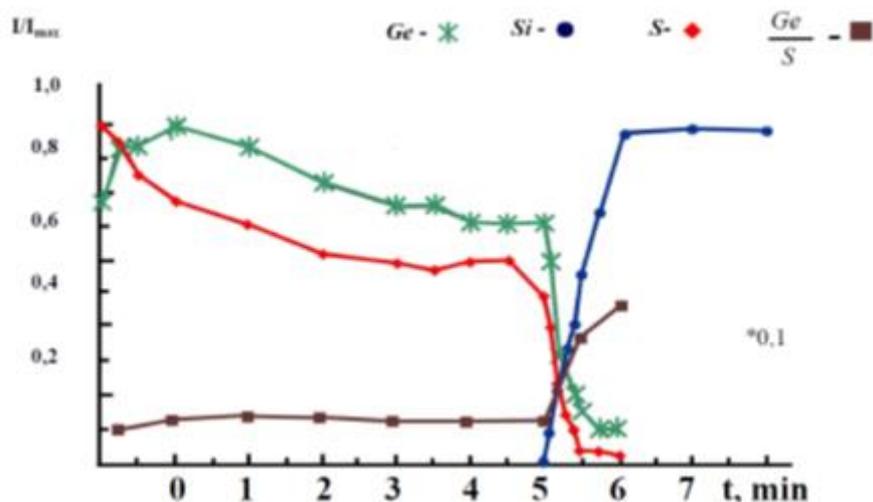


Рисунок 6.17 . Концентраційний профіль елементів у плівці GeS_2 , одержаній простим термічним випаровуванням у вакуумі вихідного скла із танталового човника [23]

Шарувато-неоднорідну структуру плівки GeS_2 на скляній підкладинці можна представити у вигляді чергування низькозаломлюючого (Н) і високозаломлюючого (В) шарів S-ВН або S-ВНВ. В останньому випадку запропонована структура плівки передбачала можливість формування високозаломлюючого приповерхневого шару. Обидві структури S-ВН і S-ВНВ створюють умови просвітлення плівкою підкладинки [23]. Справді, нами був виявлений експериментальний факт, що пропускання плівки GeS_2 в області прозорості в інтерференційному максимумі біля 775 нм складає близько 94%, що є більшим, ніж значення пропускання (92%) чистої скляної підкладинки з показником заломлення 1.51 [23]. Зауважимо, що пропускання однорідної плівки на скляній підкладинці в інтерференційних максимумах, що лежать в області прозорості, має збігатися з пропусканням чистої підкладинки (92%), або досягати близько 96% у модельних спектрах, при врахуванні пропускання тільки однієї поверхні підкладинки.

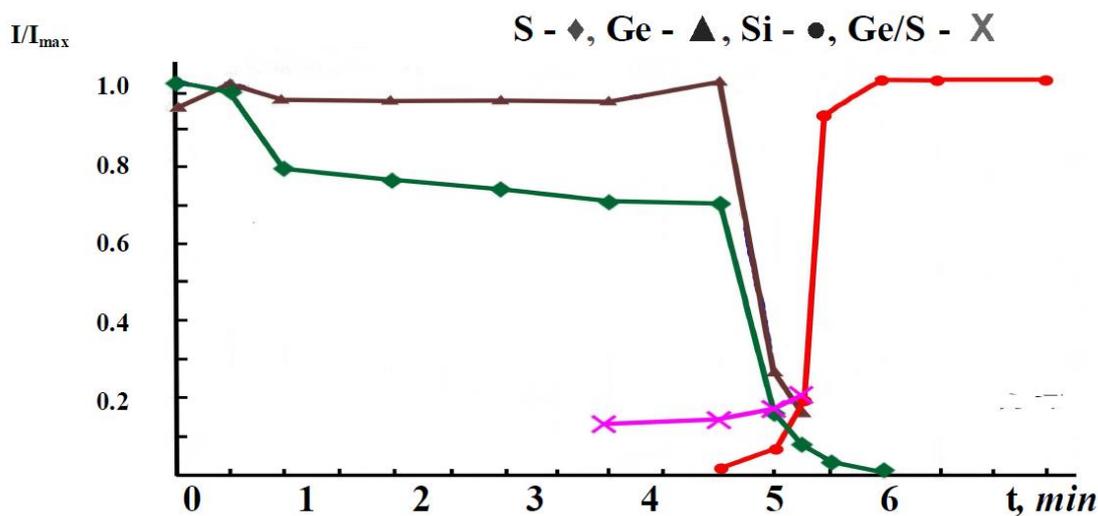


Рисунок 6.18. Концентраційний профіль елементів у плівці GeS_2 , одержаній дискретним термічним випаровуванням із танталового човника у вакуумі дрібнодисперсного порошка вихідного скла [23]

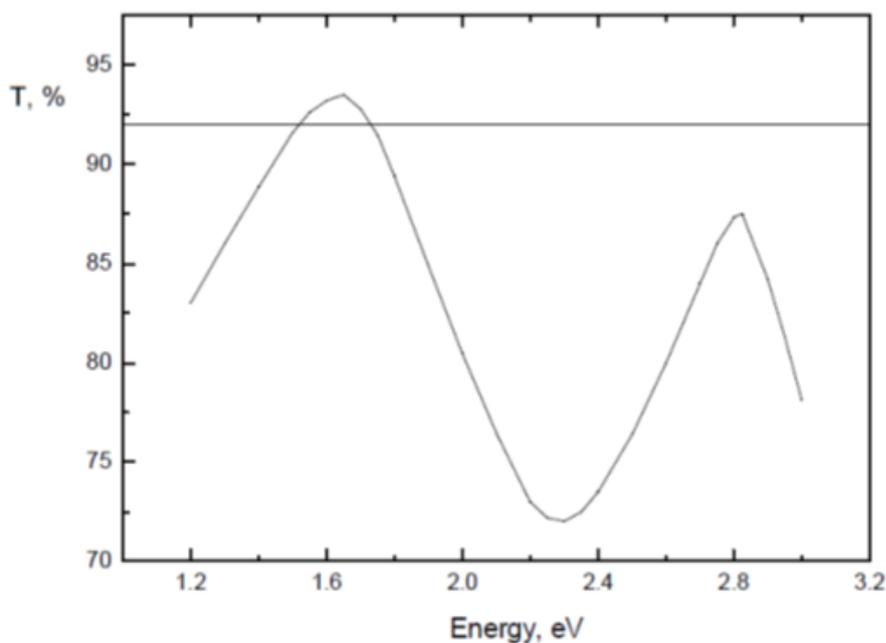


Рисунок 6.19 . Залежність пропускання від енергії фотона плівки GeS_2 , одержаної дискретним термічним випаровуванням у вакуумі [23]

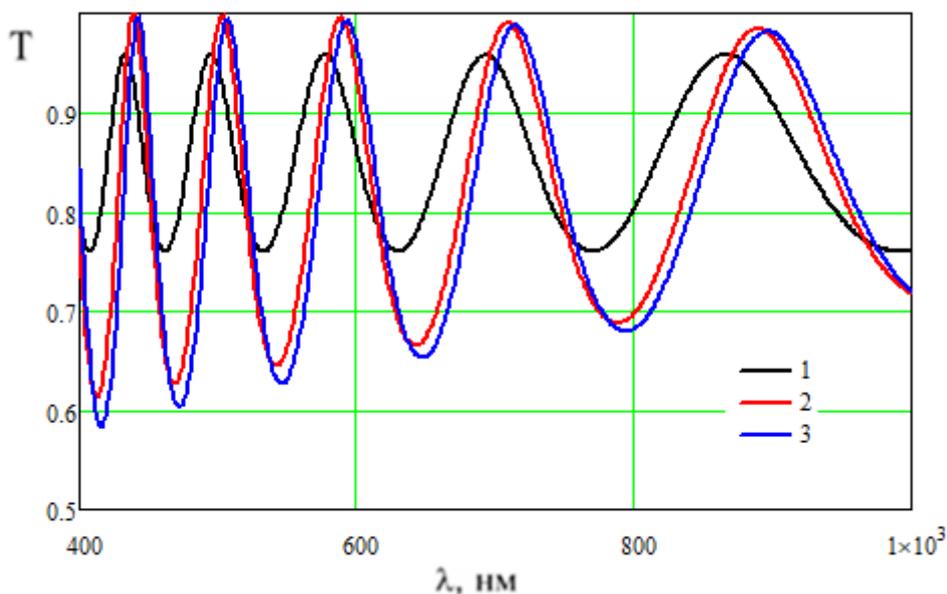


Рисунок 6.20. Спектральні характеристики модельного одиничного шару GeS_2 на скляній підкладинці з оптичною товщиною $\frac{11}{4}\lambda_0$ ($\lambda_0=630$ нм):

- 1 – шар GeS_2 з показником заломлення 2.1;
- 2 – шар GeS_2 з показником заломлення 2.1; перехідна область – показник заломлення 2.6, товщина 30 нм;
- 3 – шар GeS_2 з показником заломлення 2.1; перехідна область – показник заломлення 2.6, товщина 30 нм; приповерхнева область – показник заломлення 2.6, товщина 10 нм.

Для порівняння експериментальних (рис. 6.19) для побудови модельних спектрів нами взятий спектральний діапазон від 400 до 1000 нм. Геометрична товщина модельної плівки була близька до розмірів плівки, що досліджувалася в [4] і складала 845 нм. Показник заломлення свіжонапиленої плівки дисульфиду германію в області, де слабо помітна дисперсія, рівний $n = 2.1$. Оптична товщина приймалась рівною $\frac{11}{4}\lambda_0$ ($\lambda_0=630$ нм). Мінімальне значення коефіцієнта пропускання $T_{\min} = 0.78$ при ідеальному випадку однорідної за товщиною плівки досягається при довжинах хвиль

$$\lambda_{\min} = \frac{k}{2(m + 0.5)} \lambda_0$$

де $m=1, 2, 3, \dots$, а саме значення T_{\min} є сталим у всіх точках мінімуму модельної свіжонапиленої плівки $\text{Ge}_{33}\text{S}_{67}$ (рис. 6.20, крива 1).

Таблиця 6.1

Вплив величини геометричної товщини перехідної області на значення коефіцієнта пропускання T_{\max} та довжину хвилі λ_{\max} для напівхвильового шару при робочій довжині хвилі $\lambda_0=630$ нм

Значення геометричної товщини d_p , нм	Коефіцієнт пропускання T_{\max}	Довжина хвилі λ_{\max}
0	0.959	630.000
3	0.959	640.060
6	0.961	649.040
9	0.964	656.598
12	0.968	662.646
15	0.972	667.246
18	0.976	670.519
21	0.979	672.607
24	0.983	673.642
27	0.986	673.746
30	0.989	673.020

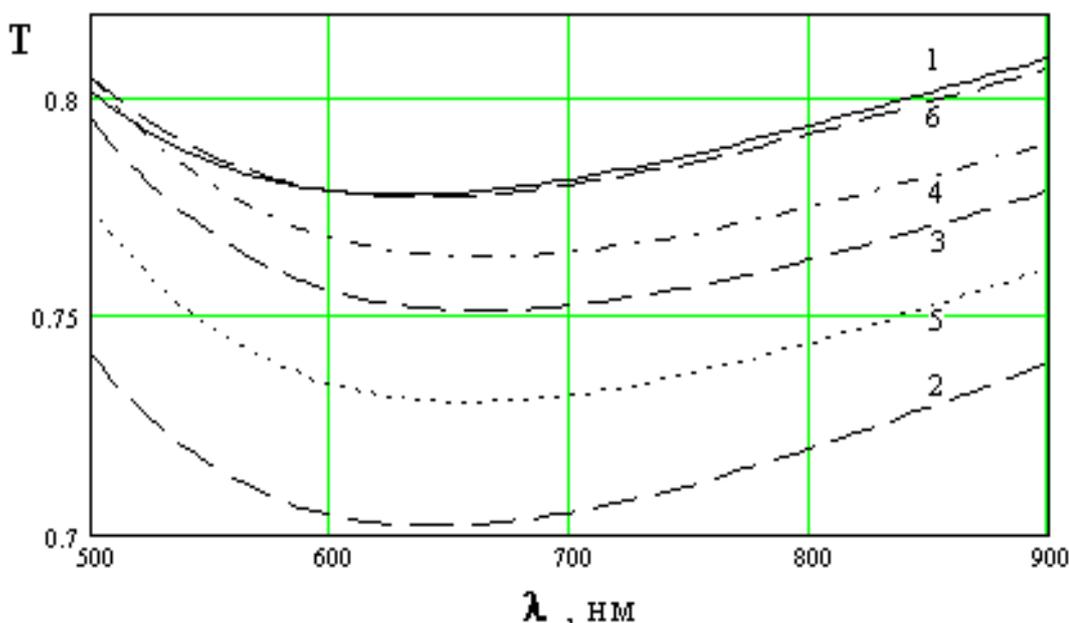


Рисунок 6.21. Спектральні характеристики одиночного чвертьхвильового шару ($\lambda_0=630$ нм) в ідеальному випадку та за наявності перехідної області з різними розподілами показника заломлення :

- 1 – ідеальний випадок;
- 2 – зі ступінчастим розподілом показника заломлення;
- 3 – з лінійним розподілом показника заломлення;
- 4 – з квадратичним розподілом показника заломлення;
- 5 – з логарифмічним розподілом показника заломлення;
- 6 – з експоненціальним розподілом показника заломлення.

Розглянемо модельний спектр пропускання плівки дисульфиду германію за наявності перехідної області плівка-підкладка (рис. 6.20). Перехідний шар будемо розглядати з максимально можливою товщиною $d_p=30$ нм і показником заломлення $n_p= 2.6$. Обґрунтування вибраних значень d_p і n_p для плівок дисульфиду германію наведено в [23].

На відміну від однорідної плівки, за наявності перехідної області, значення T_{\min} не є однаковим у всьому спектральному інтервалі, а осцилює зі зменшенням значення T_{\min} і збільшенням T_{\max} при зменшенні довжини хвилі (рис. 6.20, крива 2). Пропускання в області T_{\max} у діапазоні 400-1000 нм демонструє просвітлення підкладки при довжинах хвиль, які відповідають близьким до T_{\max} , порівняно зі спектром пропускання однорідної за товщиною модельної плівки з показником заломлення 2.1 (рис. 20, крива 1). З ростом довжини хвилі, значення T_{\max} несуттєво

зменшуються, а T_{\min} зростає. При введенні додаткової неоднорідності у вигляді ступінчастого приповерхневого шару товщиною 10 нм і показником заломлення 2.6 (рис. 20, крива 3) і присутності перехідної області спостерігається ще більше підсилення T_{\max} і зменшення T_{\min} .

Таблиця 6.2.

Вплив на спектральні характеристики чвертьхвильового одиничного шару за наявності перехідної та перехідної з приповерхневою областями

Розподіли	За наявності перехідної області		За наявності перехідної та приповерхневої області	
	λ_{\min} , нм	T_{\min}	λ_{\min} , нм	T_{\min}
Робоча довжина хвилі $\lambda_0=480$ нм				
Ідеальний	480	0.760	480	0.760
Ступінчастий	471	0.636	486	0.635
Лінійний	500	0.713	508	0.712
Квадратичний	505	0.734	515	0.732
Логарифмічний	487	0.678	492	0.679
Експоненціальний	490	0.759	501	0.754
Робоча довжина хвилі $\lambda_0=630$ нм				
Ідеальний	630	0.778	630	0.778
Ступінчастий	644	0.702	660	0.702
Лінійний	664	0.751	672	0.751
Квадратичний	664	0.764	673	0.763
Логарифмічний	659	0.730	663	0.730
Експоненціальний	640	0.777	651	0.775
Робоча довжина хвилі $\lambda_0=750$ нм				
Ідеальний	750	0.778	750	0.778
Ступінчастий	782	0.727	795	0.727
Лінійний	789	0.761	796	0.761
Квадратичний	785	0.769	793	0.768
Логарифмічний	790	0.747	793	0.747
Експоненціальний	759	0.778	770	0.776

З подальшою проєкцією на власні експериментальні результати [23] (рис. 6.19), і з зазначеного вище (рис. 6.20, крива 2), можна зробити висновок, що наявність перехідного шару у свіжонапиленій плівці одночасно збільшує T_{\max} і зменшує T_{\min} . Для рівня пропускання T_{\min} у модельному спектрі, близького до $T_{\min} = 94\%$ в експериментальному спектрі (рис. 6.19) і 96% у модельному спектрі (рис. 6.20, крива 1), значення показника заломлення в перехідній області, рівне 2.6, і її товщина (30 нм) є завищеними (рис. 6.20, крива 2). Із товщинної залежності T_{\max} напівхвильового шару (табл. 6.1), T_{\max} досягається при товщинах перехідної області біля 20 нм. Крім ступінчастої зміни показника заломлення, виходячи із характеру зміни концентрації елементів на межі розділу (рис. 6.17, 6.18), можна припустити, що можливі й інші закономірності (крім ступінчатого) зміни показника заломлення на межі розділу з протяжністю 30 нм, що ближче наближають T_{\min} до експериментальних даних ($T_{\min} = 71\%$) (рис. 6.19). З урахуванням пропускання тільки однієї поверхні, такими видами розподілу показника заломлення можуть бути лінійний або квадратичний закони, для яких $T_{\min} = 75-77\%$ (рис. 6.21, табл. 6.2) [25].

6.3.2. Розпізнавання профілю показника заломлення фотопросвітлених плівок

На відміну від сульфїду миш'яку (див. розд. 6.1), при опроміненні дисульфїду германію виявлено фотопросвітлення (рис. 6.22), яке супроводжується зменшенням показника заломлення [24]. Щодо чисельних значень показника заломлення свіжонапиленої та опроміненої плівки GeS_2 в літературі є розбіжності. В [24] показано, що свіжонапилена плівка в області прозорості (>700 нм) має показник заломлення 2.1, а опромінена – 2.05. У процесі опромінення плівка збільшує свою товщину [23]. Треба зазначити, що значення показника заломлення опроміненої плівки 2,05 за своєю величиною наближається до значення показника заломлення об'ємного скла [25]. Оцінки, наведені у [24], показали, що збільшення товщини плівки при опроміненні складає $\approx 4.8\%$.

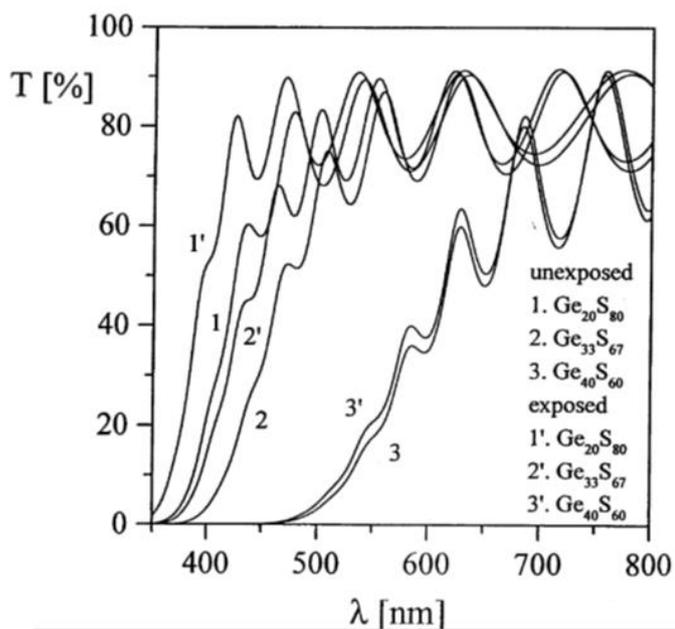


Рисунок 6.22. Спектри пропускання неопромінених і опромінених плівок системи Ge-S. Позначення на рисунку [24]

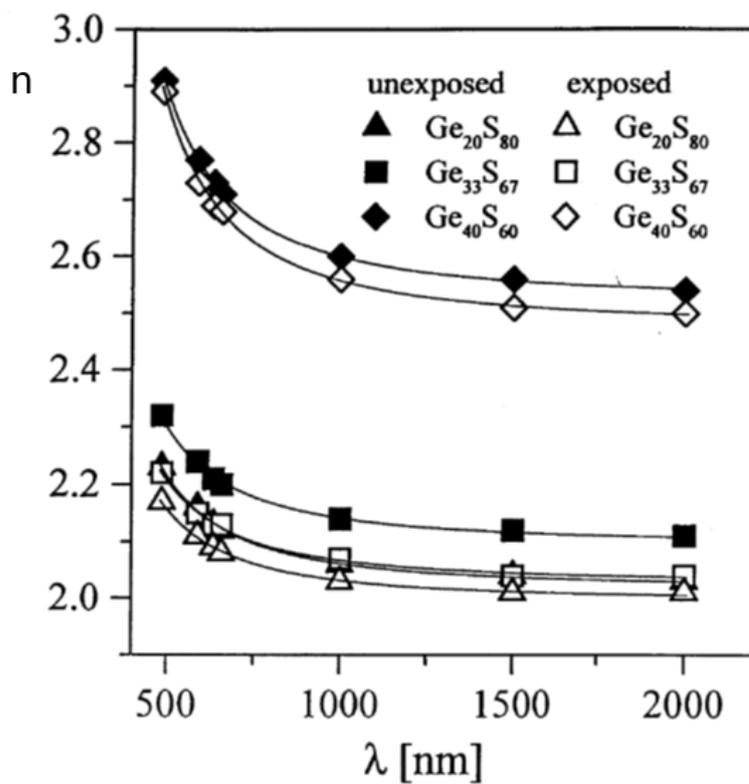


Рисунок 6.23. Дисперсія показника заломлення опромінених та неопромінених плівок системи Ge-S [24]

З рисунка 6.23 легко помітити, що в області слабкої дисперсії показники заломлення свіжонапилених плівок $\text{Ge}_{20}\text{S}_{80}$, $\text{Ge}_{33}\text{S}_{67}$, $\text{Ge}_{40}\text{S}_{60}$ складають 2.0, 2.1 і 2.6, відповідно [14, 24]. Із зменшенням вмісту сірки у складі плівок і, відповідно, зменшенням їх показника заломлення, розмах коливань у спектрах пропускання плівок цього ряду складів збільшується (рис. 6.23). Що стосується максимумів коливань (T_{\max}) на інтерференційній кривій, їх положення в області прозорості практично збігається з пропусканням чистої підкладки й досягає рівня 92%. Опромінення плівок веде до зменшення показника заломлення (рис. 6.23), росту товщини плівок [24], одночасного збільшення значень T_{\min} і T_{\max} у спектрах пропускання плівок усіх трьох складів (рис. 6.22).

Для побудови профілю показника заломлення плівки дисульфиду германію після опромінення розглянемо спектри пропускання свіжонапилених і опромінених плівок $\text{Ge}_{20}\text{S}_{80}$, $\text{Ge}_{33}\text{S}_{67}$ (GeS_2), $\text{Ge}_{40}\text{S}_{60}$ (Ge_2S_3) (рис. 6.23), узятих з [14, 24], і далі в розрахунках використовувати показники заломлення свіжонапилених і опромінених плівок вищенаведених складів (рис. 6.23), узятих із області вище 800 нм, де відсутня помітна дисперсія показника.

При опроміненні плівки GeS_2 за умови однорідного зменшення показника заломлення по всій товщині плівки від 2.1 до 2.05, модельний спектр демонструє зростання T_{\min} , тоді як T_{\max} залишається на рівні пропускання підкладки [14-16], як і у випадку пропускання модельної свіжонапиленої плівки з показником заломлення 2.1 (рис. 6.24, крива 2). За умови незмінності товщини плівки значення пропускання в інтерференційних мінімумах зростає, а їх положення, внаслідок зменшення оптичної товщини (при зменшенні показника заломлення від 2.1 до 2.05), зміщуються від $\lambda_{01}=630$ нм до $\lambda_{02}=615$ нм. Різниця $\lambda_{01}-\lambda_{02}=15$ нм. Для того, щоб мінімум λ_{02} перемістився до положення λ_{01} , необхідно, щоб геометрична товщина плівки збільшилась від 825 до 845 нм, тобто зросла на 20 нм. Оптична товщина при такому зростанні геометричної товщини буде відповідати умові $\frac{11}{4}\lambda_0$ ($\lambda_0=630$ нм).

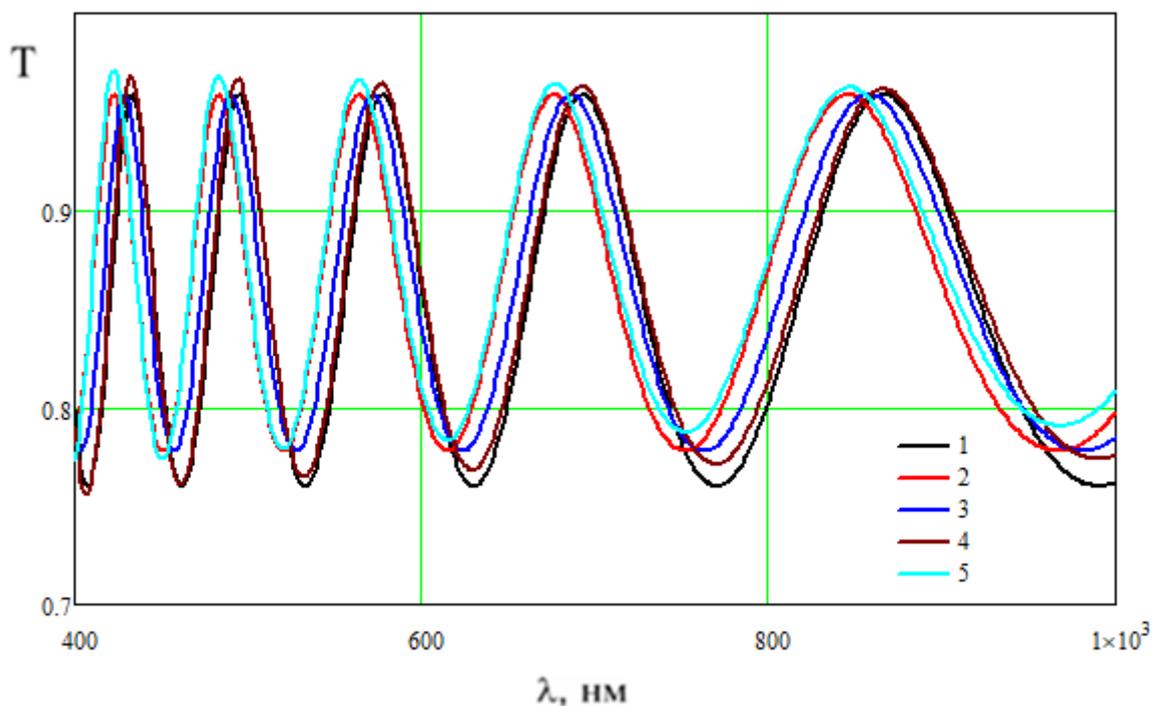


Рисунок 6.24. Модельні спектри пропускання плівки GeS_2 до і після опромінення:

- 1 – свіжонапилена однорідна плівка GeS_2 , показник заломлення 2.1;
- 2 – опромінена плівка GeS_2 , за умови однорідної зміни по всій товщині показника заломлення з 2.1 до 2.05 при опроміненні (без зміни товщини плівки по відношенню до свіжонапиленої плівки);
- 3 – опромінена плівка GeS_2 з показником заломлення 2.05 і ростом товщини всієї плівки на 12 нм по відношенні до свіжонапиленої та плівки;
- 4 – опромінена плівка GeS_2 з показником заломлення 2.05, ростом товщини на 12 нм і сформованим перехідним шаром товщиною 10 нм і показником заломлення 2.4 (товщина перехідного шару віднімалася від загальної товщини фотовидовженої плівки);
- 5 – опромінена плівка GeS_2 з показником заломлення 2.0, ростом товщини на 12 нм і сформованим перехідним шаром товщиною 10 нм і показником заломлення 2.4 (товщина перехідного шару віднімалася від загальної товщини фотовидовженої плівки).

У цьому випадку положення T_{\min} опроміненої плівки експериментального спектра (рис. 6.22) буде наближатися до положення T_{\min} свіжонапиленої плівки. Таке наближення мінімумів у шкалі довжин хвиль опроміненої і свіжонапиленої плівок можливе лише у тому випадку, коли геометрична товщина плівки в процесі

опромінення зростає. При цьому чисельне значення T_{\min} в модельній опроміненій плівці залишається вищим, ніж чисельне значення пропускання в мінімумі свіжонапиленої плівки (рис. 6.24 крива 3).

Зростання T_{\max} і зменшення T_{\min} в області 400-1000 нм модельної плівки з перехідним шаром (рис. 6.24, крива 4) узгоджується з ростом T_{\max} в експериментальному спектрі опроміненої плівки дисульфїду германїю (рис. 6.22) і може свідчити про формування в плівці області з більшим показником заломлення на межі розділу плівка-підкладинка. При одночасному й однорідному зменшенні показника заломлення по всій товщині плівки при опроміненні росту T_{\max} вище рівня пропускання підкладинки в модельному спектрі не спостерігається (рис. 6.24, крива 2). Щоб досягти рівня пропускання T_{\min} у модельному спектрі (рис. 6.24, крива 4), близького до T_{\min} в експериментальному спектрі (рис. 6.22), значення показника заломлення в перехідній області рівне 2.6 і товщина 30 нм дає завищені значення T_{\min} (рис. 6.20).

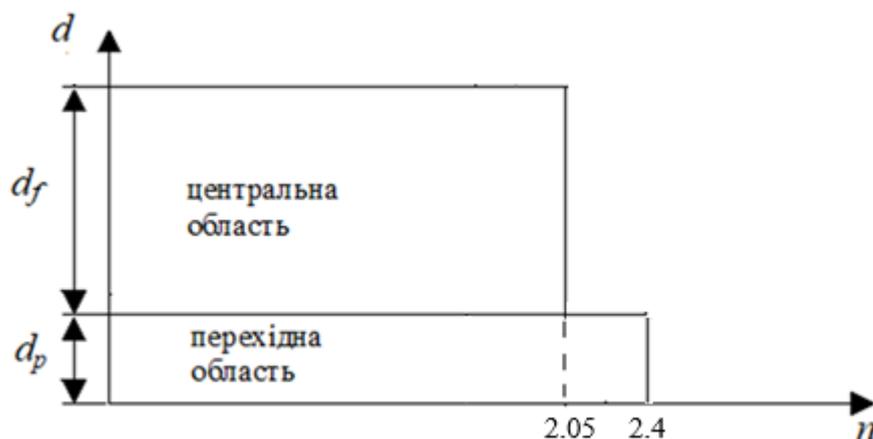


Рисунок 6.25. Відновлена модель профілю показника заломлення опроміненої плівки GeS_2 у вигляді шару з показником заломлення 2.05 і перехідної області плівка-підкладинка товщиною 10 нм і показником заломлення 2.4

Найкраще узгодження модельного й експериментального спектрів при лазерному опроміненні плівки дисульфїду германїю досягається при показнику заломлення центральної частини опроміненої плівки 2.05, росту її товщини при

опроміненні на 18 нм, формуванням перехідного шару з показником заломлення 2.4 і розміром 10 нм. Як і у випадку з плівкою трисульфиду германію, і у випадку дисульфиду германію треба допустити наявність мас-транспорту з перехідної області сіркозбагачених кластерів при опроміненні, що веде до збагачення перехідної області германієм.

Відновлену модель профілю показника заломлення опроміненої плівки GeS_2 можна представити у вигляді шарувато-неоднорідної структури з показником заломлення центрального шару 2.05 і перехідної області плівка-підкладинка товщиною 10 нм і показником заломлення 2.4 (рис. 6.25).

6.4. Моделювання й оптимізація спектральних коефіцієнтів неоднорідних плівок для халькогенідної фотоніки

За рахунок появи додаткових вимог до проектування шаруватих оптичних структур виникла необхідність введення зміни в теоретичному підході до проектування та введення процедури оптимізації характеристик таких структур [26]. Крім того, необхідність введення таких змін виникає у зв'язку з розширенням спектральної області застосування оптичних шаруватих покриттів в ділянку коротких довжин хвиль, де зростає роль неоднорідностей і дисперсії показника заломлення матеріалів [13, 26, 27].

Про значну роль неоднорідностей на оптичні характеристики покриттів згадувалося ще в [17]. Під час діагностики просвітлення оптичних вікон на основі кристалів германію одиночною плівкою некристалічного дисульфиду германію було виявлено відхилення експериментальних спектральних характеристик просвітлюючого покриття від теоретично розрахованих даних. Було встановлено, що причиною таких відхилень є особливість випаровування вихідного скла у вакуумі, що призводить до формування неоднорідностей в оптичному покритті – приповерхневого і перехідного шарів (рис. 6.4) [17]. В [27] при вивченні однорідної і неоднорідної плівок MgF_2 експериментально було підтверджено наш висновок [26] про ефективність просвітлення підкладинки неоднорідною плівкою. Відмітимо, що

у [27] розглядався тільки випадок при лінійному профілі показника заломлення (рис. 6.26)).

Нижче наведені результати теоретичних розрахунків оптимальних параметрів просвітлення підкладки неоднорідною плівкою $As_{20}(Ge_2S_3)_{80}$. Для цього використовувався розроблений у розділі 5 оптимізаційний метод розв'язання задач СОП. Цільовою функцією була вибрана функція оцінки якості (5.8).

Вище ми наводили результати досліджень концентраційних профілів хімічних елементів у плівках As_2S_3 і GeS_2 (рис. 6.4). Такі ж дослідження були проведені і для плівок $As_{20}(Ge_2S_3)_{80}$. Аналізуючи ВІМС-профіль плівки складу $As_{20}(Ge_2S_3)_{80}$, напиленої звичайним термічним випаровуванням на підшар SiO_2 при температурі випаровувача $T=1000^\circ C$ (рис. 6.27), встановлено, що вміст Ge, S та As за товщиною змінюється майже синхронно. При глибині дослідження понад 10 \AA вміст кисню починає лінійно зростати з наближенням до підкладки, на якій є підшар діоксиду кремнію.

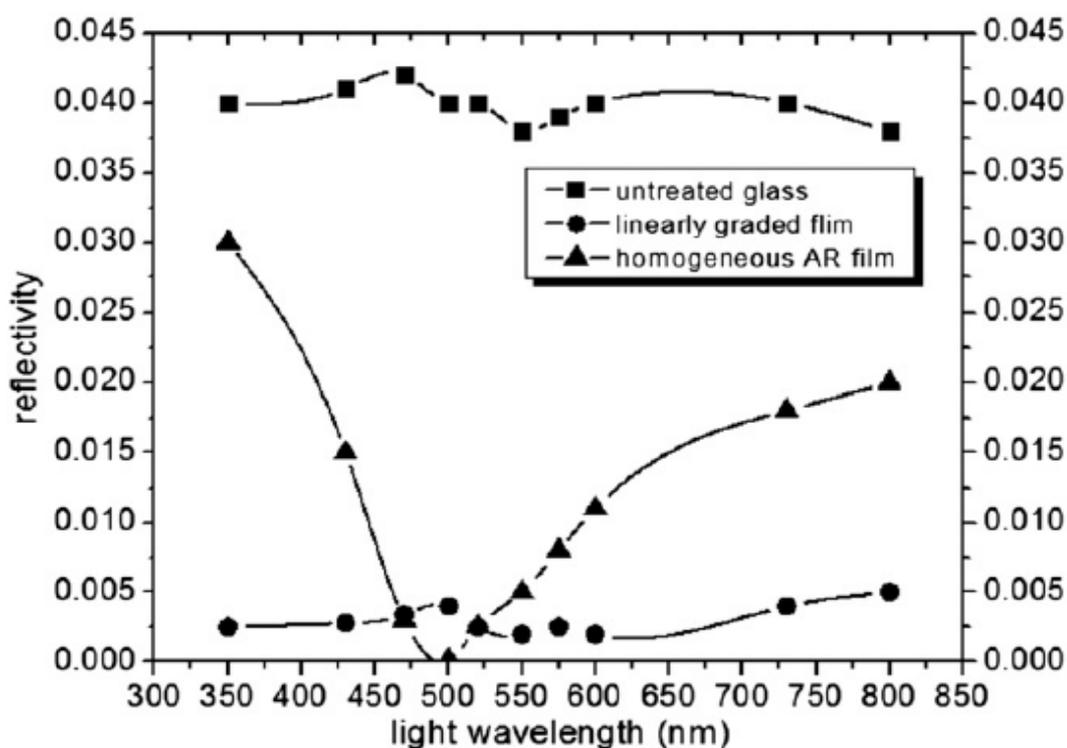


Рисунок 6.26. Моделювання спектрів відбивання чистої скляної підкладки (зафарбовані квадрати) та підкладки, просвітленої однорідною плівкою MgF_2 (зафарбовані трикутники) і неоднорідною плівкою з лінійним розподілом показника заломлення за товщиною (зафарбовані кола) [26]

Незважаючи на відсутність у вихідному для наплення матеріалі кремнію, у плівці по всій її товщині спостерігається дифузія кремнію із підкладки (рис. 6.27). При нормуванні германію на сірку було виявлено, що у приповерхневій області вміст германію починає суттєво зростати відносно сірки (рис. 6.28).

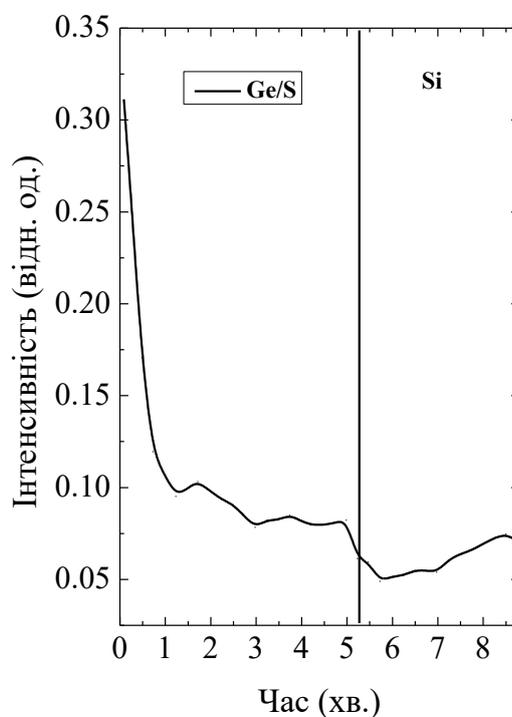
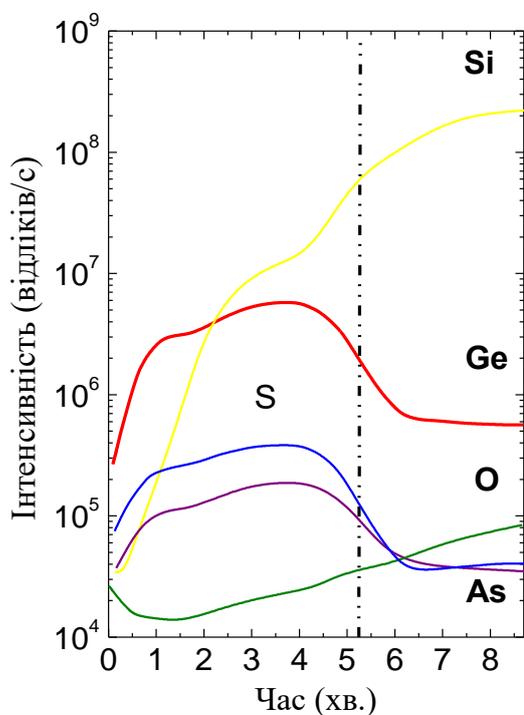


Рисунок 6.27. Концентраційний профіль елементів плівки $As_{20}(Ge_2S_3)_{80}$ [25]

Рисунок 6.28. Залежність відношення Ge/S плівки $As_{20}(Ge_2S_3)_{80}$ від часу травлення іонами цезію [25]

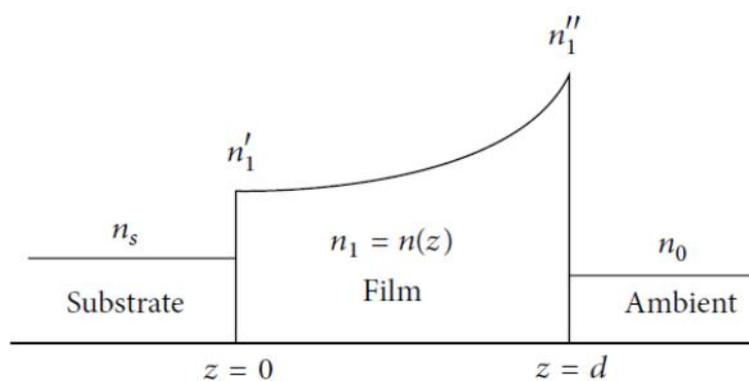


Рисунок 6.29. Схематичне представлення розподілу показника заломлення неоднорідної плівки за товщиною

Враховуючи залежність відношення Ge/S за товщиною плівки, розподіл показника заломлення схематично представлено на рис. 6.29. Для вибору значень показника заломлення халькогенідних плівок ми використали дані, наведені на рисунку 6.23 для плівок GeS_2 і Ge_2S_3 , показники заломлення яких після лазерного опромінення наближаються до показників заломлення монолітного скла з області значень n , де дисперсія показника заломлення мінімальна [14, 24].

Спектральні характеристики градієнтної плівки $As_{20}(Ge_2S_3)_{80}$ при зміні показника заломлення від 2.6 на поверхні до 2.05 на межі розділу на підкладинці з показником заломлення 4.0 (кристалічний германій) наведені на рисунку 6.30.

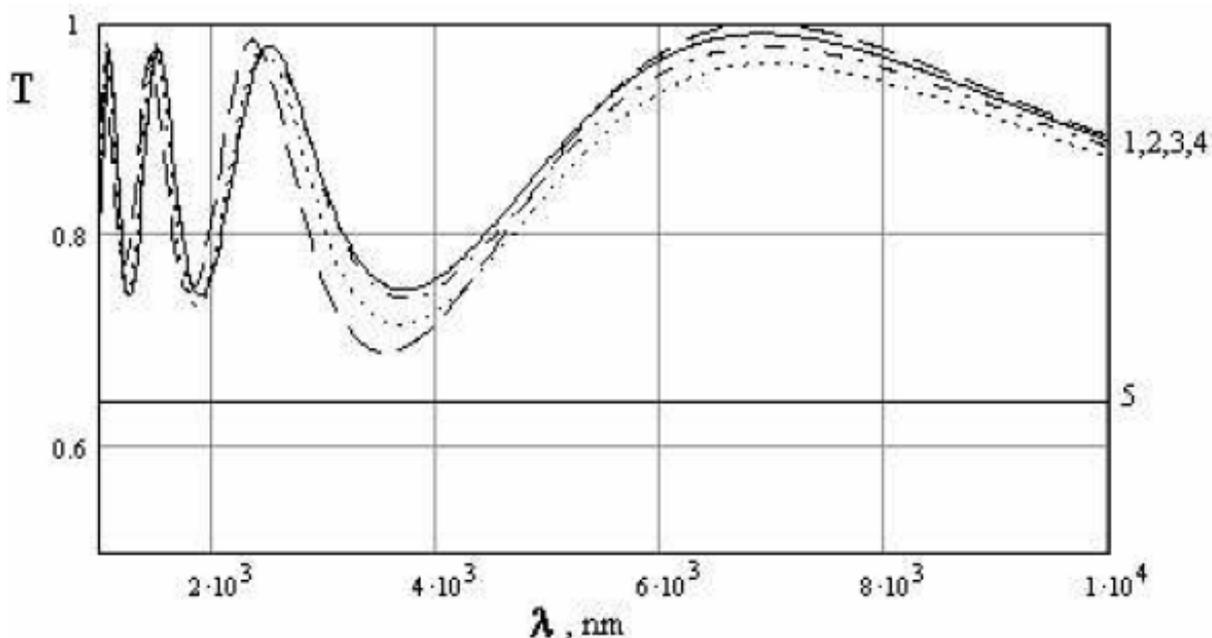


Рисунок 6.30. Спектральні характеристики плівок неоднорідної плівки при зміні показника заломлення від 2.6 на поверхні до 2.05 на межі розділу на підкладинці з показником заломлення 4.0 (кристалічний германій) [27]:

- 1- експоненційний розподіл показника заломлення при загальній товщині плівки 846.5 нм, пунктирна лінія;
- 2- квадратичний розподіл при $d=853,0$ нм, суцільна лінія;
- 3- лінійний розподіл при $d= 821,2$ нм, лінія з крапок;
- 4- логарифмічний розподіл $d=7815$ нм, переривиста лінія;
- 5- пропускання однієї поверхні підкладинки.

Таблиця 6.3.

Товщини шару й оптимальні параметри функціоналу при просвітленні підкладинки неоднорідною халькогенідною плівкою

Розподіл	Показник заломлення підкладинки монокристалічного кремнію $n=3.4$		Показник заломлення підкладинки монокристалічного германію $n=4$	
	Товщина, d , нм	Функціонал	Товщина, d , нм	Функціонал
Лінійний	845.1	0.8940	821.2	0.8917
Квадратичний	871.9	0.9049	853.0	0.8994
Експоненційний	865.9	0.9039	864.5	0.8930
Логарифмічний	802.6	0.8768	781.5	0.8777

Як видно з рисунку 6.30 та значень функціоналу (табл. 6.3), найвищий рівень просвітлення було досягнуто для квадратичного закону розподілу показника заломлення за товщиною. В ІЧ області від 2000 до 10000 нм найбільший розмах інтерференційної кривої дає квадратичний закон розподілу.

Вище наведені наші дані про використання оптимізаційних методів просвітлення підкладінок градієнтними плівками використані в монографії [28].

Висновки до розділу 6

1. Розроблено підхід, який дозволяє розв'язати задачу розпізнавання профілю показника заломлення халькогенідної плівки As_2S_3 після опромінення. Він базується на аналізі поведінки двох параметрів – розмаху коливань інтерференційної кривої та положенню максимумів спектральних коефіцієнтів. Встановлено, що ні наявність приповерхневого шару, ні ріст товщини плівки при опроміненні не можуть забезпечити зменшення розмаху коливань, як це спостерігається в експериментальних спектрах пропускання опроміненої плівки.

При побудові моделі введено додатковий параметр – перехідну область плівка-підкладка, яка формується на початковій стадії росту плівки. Її товщина може збільшуватися індукованим світлом у процесі мас-транспорту в халькогенідних плівках. При моделюванні спектрів пропускання обґрунтовано, що значення показника заломлення перехідної області повинно бути меншим, ніж значення показника заломлення в центральній частині плівки. Опромінення плівки веде до збільшення її товщини у порівнянні з початковим розміром неопроміненої плівки.

2. Запропоновано оптимізаційну модель, яка використовуючи методи розв'язання задач СОП, дозволяє визначити розміри приповерхневої та перехідної областей та величину росту товщини халькогенідної плівки після опромінення. Відтворення експериментальної кривої пропускання опроміненої плівки забезпечує ступінчаста модель профілю показника заломлення плівки, яка включає приповерхневу область, центральну частину і перехідну область плівка-підкладка.
3. Запропоновано модель профілю показника заломлення фотопросвітленої халькогенідної плівки дисульфиду германію, що включає ініційовану світлом центральну частину та перехідну область плівка-підкладка з більшим показником заломлення. Отримані результати з відтворення профілю показника заломлення халькогенідних плівок можуть служити основою знаходження залежності розмірів приповерхневої та перехідної областей і величини росту розмірів плівки у залежності від дози опромінення оптичних середовищ нанофотоніки та пасивних елементів інтегрально-оптичних структур.
4. Виявлено, що в інфрачервоній області спектру для неоднорідної халькогенідної плівки на високозаломлюючих підкладках найвищий рівень просвітлення досягається для квадратичного закону розподілу показника заломлення.

Література до розділу 6

1. Петров В.В., Крючин А.А., Костюкевич С.О., Рубіш В.М. Неорганічна фотолітографія. К.: ІМФ НАНУ, 2007. 197 с.
2. Петров В.В., Крючин А.А., Шанойло С.М., Кравець В.Г., Косско І.О., Беляк Є.В., Лачук А.С., Костюкевич С.О. Надщільний оптичний запис інформації. К.: ІПРІ НАН України, 2009. 282 с.
3. Benjamin J. Eggleton, Barry Luther-Davies & Kathleen Richardson Chalcogenide photonics. *Nature Photonics*. 2011. Vol. 5. P. 141–148.
4. Петров В.В., Крючин А.А., Рубіш В.М. Матеріали перспективних оптоелектронних пристроїв. К.: Наукова думка, 2012. 336 с.
5. Петров В.В., Крючин А.А., Куницький Ю.А., Рубіш В.М., Лапчук А.С., Костюкевич С.О. Методи нанолітографії. Київ: Наукова думка, 2015. 262 с.
6. Коротун А.В., Коваль А.О., Крючин А.А., Рубіш В.М., Петров В.В., Тітов І.М. Нанопотонні технології. Сучасний стан і перспективи. Ужгород: ФОП СабовА.М., 2019. 482 с.
7. Todorov, R., Tasseva, J., Lozanova, V., Lalova, A., Iliev, T., & Paneva, A. Ellipsometric characterization of thin films from multicomponent chalcogenide glasses for application in modern optical devices. *Advances in Condensed Matter Physics*. 2013. P.351-357.
8. Todorov, R., Tasseva, J., Babeva, T., Petkov, K. Multilayer As₂Se₃/GeS₂ quarter wave structures for photonic applications. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2010. Vol. 43 (50). P. 505103.
9. Відділ оптичних носіїв інформації Інституту проблем реєстрації інформації НАНУ, в тому числі: Ужгородська лабораторія матеріалів оптоелектроніки та фотоніки [Електронний ресурс]. URL: <http://ipri.kiev.ua/index.php?id=97> (дата звернення: 08.12.2020).
10. Kryuchyn A.A., Petrov V.V., Rubish V.M., Trunov M.L., Lytvyn P.M. and Kostyukevich S.A. Formation of Nanoscale Structures on Chalcogenide Films. *Phys. Status Solidi B*. 2018. 255(6), 1700405.

11. Trunov M.L., Lytvyn P.M. Selective light-induced mass transport in amorphous As_xSe_{100-x} films driven by the composition tuning: Effect of temperature on maximum acceleration. *Journal of Non-Crystalline Solids*. 493. 2018. P. 86-93.
12. Holomb R., Kondrat O., Mitsa V., Veres M., Czitrovsky A., Feher A. Super-bandgap light stimulated reversible transformation and laser-driven mass transport at the surface of As_2S_3 chalcogenide nanolayers studied in situ. *Journal of Chemical Physics*. 2018, Vol.149, P. 214702 (1-11).
13. Todorov, R., Tasseva, J., Babeva, T. Thin chalcogenide films for photonic applications. Book. *Photonic Crystals—Innovative Systems, Lasers and Waveguides*. Publisher Intech, Croatia. 2012. P. 143.
14. Todorov R., Iliev Tz., Petkov K. Light-induced changes in the optical properties of thin films of Ge–S–Bi(Tl, In) chalcogenides. *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2003. Vol.326&327. P. 263–267.
15. Rubish V.M., Gera E.V., Durcot M.O., Pop M.M., Kostyukevich S.O., Kudryavtsev A.A., Mykulanyets-Meshko O.S., Rigan M.Yu. Photo- and thermally-induced changes in the optical properties of Ge-S-Se amorphous films. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*. 2013. V.16. N 4. P. 349-353.
16. Мар'ян В.М., Горват Г.Т., Поп М.М., Гера Е.В., Рубіш В.М. Фотостимульовані зміни оптичних властивостей тонких плівок сульфідів германію та миш'яку. *Фізика і хімія твердого тіла*. 2008. N.9. № 3. С. 524-528 .
17. Герасимов В.В., Мица В.М. Структура и концентрационный профиль элементов пленок $As_x(GeS_2)_{1-x}$ при дискретном вакуумном напылении. *Вакуумная техника и технология*. 1997. Т.7, №1. С. 46–49.
18. Физика тонких пленок / Под ред. Г.Хасса и Р.Э.Туна: Пер. с англ. М.: Мир. 1972. Т.5. 315 с.
19. Lukovsky G. Atomic structure and thermal stability of silicon suboxides in bulk thin films and in transition region at Si–SiO₂ interfaces. In: *Abstracts 17th Int. Conf. on Amorph. and Microcryst. Semicond.* Budapest, Hungary. 1997. P.1.
20. Saitoh A., Tanaka K. Self-developing aspherical chalcogenide-glass microlenses for semiconductor lasers. *Appl. Phys. Lett.* 83(9), 2003, P. 1725–1727.

21. Ramachandran S., Bishop S. G., Guo J. P. and Brady D. J. Fabrication of holographic gratings in As₂S₃ glass by photoexpansion and photodarkening. *Photonics Technology Letters*. 1996. Vol. 8. No. 8. P.17-26.
22. Velea A., Popescu M., Sava F., Lorinczi A., Simandan I.D., Socol G., Mihailescu I.N., Stefan N., Jipa F., Zamfirescu M., Kiss A., Braic V. Photoexpansion and nano-lens formation in amorphous As₂S₃ thin films by 800 nm femtosecond laser irradiation. *Journal of Applied Physics*. 112, 2012. P. 033105.
23. 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. No. 4. 2005. P. 1807–1812.
24. Petkov K. Compositional dependence of the photoinduced phenomena in thin chalcogenide films. *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*. Vol. 4. No. 3. 2002. P. 611 – 629.
25. 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 стекел для оптичних покриттів силової оптики. Монографія . Ужгород: Вид-во «РІК-У», 2019. 152 с.
26. Shen H.P., Zhao C.Y. Analytical considerations of light transport in nanostructured homogeneous/inhomogeneous thin films. *Thin Solid Films*. 542. 2013. P. 204–209.
27. Mitsa V., Mitsa A., Uhrin M. Modelling of spectral characteristics of inhomogeneous (gradient) anti-reflective coatings based on chalcogenide glasses. *Chalcogenide Letters*. 2005.Vol. 2. No. 1. P. 5–7.
28. Сукач Г.О., Кідалов В.В., Бойко В.В., Манько О.О. Спектрально-селективні оптичні пристрої для телекомунікацій. Донецьк: Вид-во ТОВ «Юго-Восток, Лтд», 2012. 408с.

ВИСНОВКИ

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 оксидації 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 109 операцій множення характеристичних матриць це зменшує час виконання програми у 80-140 разів залежно від характеристик комп'ютера.
9. Запропоновано двоетапний метод, який дозволяє komponувати 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-підкладка. 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 підкладки халькогенідної фотоніки.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Abeles F. The propagation of electromagnetic waves in stratified media. *Ann. Phys.* 1948. Vol.3. N.4. P. 504-520.
2. Baumeister P.W. Starting designs for the computer optimization of optical coatings. *Appl. Opt.* 1995. Vol. 34. № 22. P. 4835–4843.
3. Benjamin J. Eggleton, Barry Luther-Davies & Kathleen Richardson Chalcogenide photonics. *Nature Photonics*. V. 5, 2011. P. 141–148.
4. Binder K. Monte Carlo methods in statistical physics. Berlin, 1986. 411 P.
5. Brent, Richard P. "Section 7.3: Powell's algorithm". Algorithms for minimization without derivatives. Englewood Cliffs, N.J.: Prentice-Hall, 1973.
6. Dobrowolski J.A. Comparison of the Fourier transform and flip-flop thin film synthesis methods. *Applied Optics*. 1986. V.25. №12. P.1966-1972.
7. Dobrowolski J.A., Ho F.C., Waldorf A. Determination of optical constants of thin film coating materials based on inverse synthesis. *Applied Optics*. 1983. Vol. 22, Issue 20. P. 3191-3200.
8. Dobrowolski J.A., Tikhonravov A.V., Tmbeckov M.K., Sullivan B.T., Verly P.G. Optimal normal-incidence antireflection coatings. *Appl. Opt.*, 1996. 35, 644-658.
9. El-Hajje G., Ory D., Guillemoles J. F., Lombez L. On the origin of the spatial inhomogeneity of photoluminescence in thin-film CIGS solar devices. *Applied Physics Letters*, 109(2), 2016, P. 022104.
10. Elson, J. M., Rahn, J. P., & Bennett, J. M. (1983). Relationship of the total integrated scattering from multilayer-coated optics to angle of incidence, polarization, correlation length, and roughness cross-correlation properties. *Applied Optics*, 22(20), 3207-3219.
11. Epstein L.I. The design of optical filters. *J. Opt. Soc. Am.* 1952. V.42. № 3. P. 806-810.
12. Fekeshgazi I., Borsh V., Koval V., Paterevich V. Byreflection and optical activity of CdP₂. *Physical status solidy*. 1977. V. 44. P. 15–19.

13. 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"*. 21-23 October 2009. Kharkov. P. 190-192.
14. 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.
15. 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 CdP₂ 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.
16. 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.
17. Fekeshgazi, I., Vlasenko, Y., Ivan, S., Mitsa, A., Trukhan, V., Sheleg, A. Applied aspects of the nonlinear absorption and gyrotropy of CdP₂ 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.
18. Furman, Sh.A., Tikhonravov A.V. Basics of Optics of Multilayer Systems. Edition Frontieres, Gif-sur-Yvette. 1992. 242 p.
19. Ganguly R., Roy I., Banerjee A., Singh H., Ghosal A., Raychaudhuri P. Magnetic field induced emergent inhomogeneity in a superconducting film with weak and homogeneous disorder. *Physical Review B*, 96(5), 2017, P. 054509.

20. Gao L., Lemarchand F., Lequime M. Exploitation of multiple incidences spectrometric measurements for thin film reverse engineering. *Optics Express*. 2012. Vol. 20. № 14. P. 15734 – 15750.
21. Gershon T., Hamann C., Hopstaken M., Lee Y.S., Shin B., Haight R. Chemical Consequences of Alkali Inhomogeneity in Cu₂ZnSnS₄ Thin-Film Solar Cells. *Advanced Energy Materials*, 5(19), 2015, P. 1500922.
22. Hasegawa, T. (2007). Advanced multiple-angle incidence resolution spectrometry for thin-layer analysis on a low-refractive-index substrate. *Analytical chemistry*, 79(12), 4385-4389.
23. Hecht E. *Optik*. San Francisco: Addison Wesley, 2002. 698 p.
24. 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. C. 1-12.
25. Holomb R., Kondrat O., Mitsa V., Veres M., Czitrovsky A., Feher A., Tsud N., Vondráček M., Veltruská K., Matolín V., Prince K.C. Super-bandgap light stimulated reversible transformation and laser-driven mass transport at the surface of As₂S₃ chalcogenide nanolayers studied in-situ. *J. Chem. Phys.* 149, 2018, P. 214702.
26. Holomb R., Kondrat O., Mitsa V., Veres M., Czitrovsky A., Feher A. Super-bandgap light stimulated reversible transformation and laser-driven mass transport at the surface of As₂S₃ chalcogenide nanolayers studied in situ. *Journal of Chemical Physics*. 2018, Vol.149, P. 214702 (1-11).
27. Holomb Roman, Mitsa Oleksandr, Akalin Elif, Akyuz Sevim, Spectroscopic studies g-GeSe₂-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.
28. Kappel F., Kuntsevich A.V. An implementation of Shor's *r*-algorithm. *Computational Optimization and Applications*. 2000. Vol. 15, N 2. P. 193-205.
29. Knittl Z. *Optics of Thin Film Films*. Willey. London.1976. 324 p.

30. Kochikov I. V., Lagutin Yu. S., Lagutina A.A., Lukyanenko D.V., Tikhonravov A.V., Yagola A.G. Raising the accuracy of monitoring the optical coating deposition by application of a nonlocal algorithm of data analysis. *J. Appl. Industr. Math.* 14:2. 2020. P. 329–333.
31. Kondrat O., Holomb R., Csik A., Takats V., Veres M. and Mitsa V. Coherent light photo-modification, mass transport effect and surface relief formation in As_xS_{100-x} nanolayers: absorption edge, XPS and Raman spectroscopy combined with profilometry study. *Nanoscale Research Letters*, 2017, 12:149.
32. Kryuchyn A.A., Petrov V.V., Rubish V.M., Trunov M.L., Lytvyn P.M. and Kostyukevich S.A. Formation of Nanoscale Structures on Chalcogenide Films. *Phys. Status Solidi B*. 2017. DOI: 10.1002/pssb.201700405.
33. Lee, S., Jeong, I., Kim, H. P., Hwang, S. Y., Kim, T. J., Kim, Y. D., ... & Kim, J. (2013). Effect of incidence angle and polarization on the optimized layer structure of organic solar cells. *Solar energy materials and solar cells*, 118, 9-17.
34. Liu, Q., Gerling, L. G., Bernal-Texca, F., Toudert, J., Li, T., Zhan, X., & Martorell, J. (2020). Light harvesting at oblique incidence decoupled from transmission in organic solar cells exhibiting 9.8% efficiency and 50% visible light transparency. *Advanced Energy Materials*, 10(17), 1904196.
35. Lukovsky G. Atomic structure and thermal stability of silicon suboxides in bulk thin films and in transition region at Si–SiO₂ interfaces. In: *Abstracts 17th Int. Conf. on Amorph. and Microcryst. Semicond.* Budapest, Hungary. 1997. P.1.
36. Macleod H.A. Thin film optical filters. New York: McGraw-Hill. 1986. P. 260-261.
37. Márquez E., Bernal-Oliva A. M., Gonzalez-Leal J. M., Prieto-Alcon R., Navarro J. V., Minkov D. Optical constants in the subgap region and vibrational behaviour by far-infrared spectroscopy of wedge-shaped obliquely-deposited amorphous GeS₂ films. *Physica Scripta*, 60(1), 1999, P. 90.
38. Marvin, A., Toigo, F., & Celli, V. (1975). Light scattering from rough surfaces: general incidence angle and polarization. *Physical Review B*, 11(8), 2777.

39. Minkov, D. (1991). Computation of the optical constants of a thin dielectric layer on a transmitting substrate from the reflection spectrum at inclined incidence of light. *JOSA A*, 8(2), 306-310.
40. Misra S., Aguiar J.A., Sun Y., v. Devener B., Palekis V., Ferekides C.S., Scarpulla M. A. Observation and Implications of Composition Inhomogeneity Along Grain Boundaries in Thin Film Polycrystalline CdTe Photovoltaic Devices. *Advanced Materials Interfaces*, 6(16), 2019, P. 1900152.
41. 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, 2005. P.955-962.
42. Mitsa A., Mitsa V., Ugrin A., Modelling of spectral characteristics on inhomogeneous (gradient) antireflective coatings based on chalcogenide glasses *J. Chalcogenide Letters*. Vol.2.No1, 2005. P.5-7.
43. 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, 2005. P.1807–1812.
44. 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.
45. Mitsa O., Petcko V., Holovács 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.
46. Mitsa V., Mitsa A., Uhrin M. Modelling of spectral characteristics of inhomogeneous (gradient) anti-reflective coatings based on chalcogenide glasses. *Chalcogenide Letters*. 2005.Vol. 2. No. 1. P. 5–7.
47. Nesterov Yu. Gradient methods for minimizing composite functions. *Mathematical Programming*. 2013. 140.1: 125-161.

48. Ohlídal I., Vohánka J., Čermák M. Optics of Inhomogeneous Thin Films with Defects: Application to Optical Characterization. Review. *Coatings*. 2021. Vol.11, N1. P.22-40.
49. Ohmer M.C. Design of three-layer equivalent films. *J. Opt. Soc. Am.* 1978. V.68. № 1. P.137-139.
50. Pant R. K., Roul B., Singh D. K., Chowdhury A. M., Nanda K. K., Krupanidhi S. B. Inhomogeneity-mediated systematic reduction of the Schottky barrier in a Au/GaN nanorod film interface. *Semiconductor Science and Technology*, 36(1), 2020, P. 015017.
51. Pei K., Ren X., Zhou Z., Zhang Z., Ji X., Chan P. K. L. A High-Performance Optical Memory Array Based on Inhomogeneity of Organic Semiconductors. *Advanced Materials*, 30(13), 2018, P. 1706647.
52. Petkov K. Compositional dependence of the photoinduced phenomena in thin chalcogenide films. *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*. Vol. 4. No. 3. 2002. P. 611 – 629.
53. 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*. 2014 , II(3), Issue 21, P. 63-65
54. Powell, M. J. D. An efficient method for finding the minimum of a function of several variables without calculating derivatives. *Computer Journal*. 7 (2). 1964. P. 155–162.
55. Rabinovich K., Pagis A. Multilayer Antireflection Coatings: Theoretical Model and Design Parameters. *Appl. Opt.* 1975. V.14. №6. P. 1326-1334.
56. Ramachandran S., Bishop S. G., Guo J. P. and Brady D. J. Fabrication of holographic gratings in As₂S₃ glass by photoexpansion and photodarkening. *Photonics Technology Letters*. 1996. Vol. 8. No. 8. P.17-26.
57. Rancourt J.D. Optical Thin Films: User Handbook. The International Society for Optical Engineering, Washington, 1996. 297 p.
58. Rubish V.M., Gera1 E.V., Durcot M.O., Pop M.M., Kostyukevich S.O., Kudryavtsev A.A., Mykulanyets-Meshko O.S., Rigan M.Yu. Photo- and thermally-

induced changes in the optical properties of Ge-S-Se amorphous films. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*. 2013. V.16. N 4. P. 349-353.

59. Saitoh A., Tanaka K. Self-developing aspherical chalcogenide-glass microlenses for semiconductor lasers. *Appl. Phys. Lett.* 83(9), 2003, P. 1725–1727.

60. Schaefer Cl., Bergmann L. *Optik*. Berlin: Walter de Gruyter, 2004. 1430 s.

61. Shen H.P., Zhao C.Y. Analytical considerations of light transport in nanostructured homogeneous/inhomogeneous thin films. *Thin Solid Films*. 542. 2013. P. 204–209.

62. Shor N.Z. *Nondifferentiable optimization and polynomial problems*. Boston; Dordrecht; London: Kluwer Academic Publishers. 1998. 412 p.

63. Shor N.Z., Stetsyuk P.I. Lagrangian bounds in multiextremal polynomial and discrete optimization problems. *Journal of Global Optimization*. 2002. Vol. 23, N 1. P. 1-41.

64. Smakula A., German Patent 685767, applied 1st November 1935 (1935). Carl-Zeiss-Stiftung–Company profile, information, business description, history, background information on Carl-Zeiss-Stiftung.”

<http://www.referenceforbusiness.com/history2/79/Carl-ZeissStiftung.htm>

65. Starbova K., Mankov V., Dikova J., Starbov N. The effects of vapour incidence on the microstructure and related properties of condensed GeS₂ thin films. *Vacuum*, 53(3-4), 1999, P. 441-445.

66. Stetsyuk P.I. Shor’s r-Algorithms: Theory and Practice. In *Optimization Methods and Applications. In Honor of Ivan V. Sergienko’s 80th Birthday* / S. Butenko, P.M.Pardalos, V. Shylo. Springer. 2017. P. 495–520.

67. Sutter, F., Montecchi, M., von Dahlen, H., Fernández-García, A., & Röger, M. (2018). The effect of incidence angle on the reflectance of solar mirrors. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 176, 119-133.

68. Sveshnikov, A. G., Tikhonravov, A. V., & Ianshin, S. A. (1983). Synthesis of optical coatings for the oblique incidence of light. *Zhurnal Vychislitelnoi Matematiki i Matematicheskoi Fiziki*, 23, 929-935.

69. Thelen A. Equivalent layers in multilayer filters. *J. Opt. Soc. Am.* 1966. V.56. No 6. P.1533-1538.
70. Tikhonravov A.V., Amotchkina T.V., Trubetskov M.K. Optical characterization and reverse engineering based on multiangle spectroscopy. *Applied Optics*. 2012. Vol. 51. № 2. P. 245-254.
71. Todorov R., Iliev Tz., Petkov K. Light-induced changes in the optical properties of thin films of Ge–S–Bi(Tl, In) chalcogenides. *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2003. Vol.326&327. P. 263–267.
72. Todorov, R., Tasseva, J., Babeva, T., Petkov, K. Multilayer As_2Se_3/GeS_2 quarter wave structures for photonic applications. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2010. Vol. 43 (50). P. 505103.
73. Todorov, R., Tasseva, J., Babeva, T. Thin chalcogenide films for photonic applications. Book. *Photonic Crystals–Innovative Systems, Lasers and Waveguides*, Publisher Intech, Croatia. 2012. 143 p.
74. Todorov, R., Tasseva, J., Babeva, T. Thin chalcogenide films for photonic applications. Book. *Photonic Crystals–Innovative Systems, Lasers and Waveguides*. Publisher Intech, Croatia. 2012. P. 143.
75. Todorov, R., Tasseva, J., Lozanova, V., Lalova, A., Iliev, T., & Paneva, A. Ellipsometric characterization of thin films from multicomponent chalcogenide glasses for application in modern optical devices. *Advances in Condensed Matter Physics*. 2013. P.351-357.
76. Todorov, Rossen; Tasseva, Jordanka; Babeva, Tsvetanka. Thin chalcogenide films for photonic applications. *Photonic Crystals–Innovative Systems, Lasers and Waveguides, Intech, Croatia*, 2012, 143.
77. Trunov M.L., Lytvyn P.M. Selective light-induced mass transport in amorphous As_xSe_{100-x} films driven by the composition tuning: Effect of temperature on maximum acceleration. *Journal of Non-Crystalline Solids*. 493. 2018. P. 86-93.
78. Velea A., Popescu M., Sava F., Lorinczi A., Simandan I.D., Socol G., Mihailescu I.N., Stefan N., Jipa F., Zamfirescu M., Kiss A., Braic V. Photoexpansion and nano-lens formation in amorphous As_2S_3 thin films by 800 nm femtosecond laser

irradiation. *Journal of Applied Physics*. 112, 2012. P. 033105.

79. Wang, Y., Wei, D., Gao, K. Z., Cao, J., & Wei, F. The role of inhomogeneity of perpendicular anisotropy in magnetic properties of ultra thin CoFeB film. *Journal of Applied Physics*, 115(5), 2014, P. 053901.

80. Willey, R. R. Practical Production of Optical Thin Films. *Wiley Optical, Consultants: Charlevoix, MI, USA*. 2008. 419 p.

81. Wu X., Lai F., Lin L., Lv J., Zhuang B., Yan Q., Huang Z. Optical inhomogeneity of ZnS films deposited by thermal evaporation. *Applied Surface Science*, 254(20), 2008, P. 6455-6460.

82. Wu X., Quan B., Xu X., Hu F., Lu X., Gu C., Wang L. Effect of inhomogeneity and plasmons on terahertz radiation from GaAs (1 0 0) surface coated with rough Au film. *Applied surface science*, 285, 2013, P. 853-857.

83. Аоки М. Введение в теорию оптимизации / Пер. с англ. под ред. Б.Т. Поляка. М.: Наука, 1977. 343 с.

84. Бардадым Т.А., Журбенко Н.Г., Ивличев А.В., Лиховид А.П. Использование г-алгоритма в методе модифицированной функции Лагранжа для задач с критическими множителями. *Компьютерная математика*. 2017. № 2. С. 101–107.

85. Батищев Д. И. Методы проектирования. М.: Сов. Радио, 1975. 216 с.

86. Бернинг П. Х. Теория и методы расчета оптических свойств тонких. *Сб. физика тонких пленок*. В 8 т. Т. 1. / Под общ. ред. Г. Хасса и Р. Э. Тауна; перевод с англ. под ред. В. Б. Сандомирского и А. Г. Ждана. М.: Мир, 1967. С. 91–151.

87. Боглаев Ю.П. Вычислительная математика и программирование. М.: Высшая школа. 1990 г. 544 с.

88. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М.: Наука, 1973. 720 с .

89. Васильев Ф.П. Численные методы решения экстремальных задач. М.: Наука, 1980. 520 с.

90. Відділ оптичних носіїв інформації Інституту проблем реєстрації інформації НАНУ, в тому числі: Ужгородська лабораторія матеріалів оптоелектроніки та фотоніки [Електронний ресурс]. URL:

<http://ipri.kiev.ua/index.php?id=97> (дата звернення: 08.12.2020).

91. Власов А.Г. Отражение и пропускание света системой тонких пленок. *ОМП*. 1946. №2. С. 11-16.
92. Герасимов В.В., Мица В.М. Структура и концентрационный профиль элементов пленок $As_x(GeS_2)_{1-x}$ при дискретном вакуумном напылении. *Вакуумная техника и технология*. 1997. Т.7, №1. С. 46–49.
93. Герасимов В.В., Мица В.М. Структура и концентрационный профиль элементов пленок $As_x(GeS_2)_{1-x}$ при дискретном вакуумном напылении. *Вакуумная техника и технология*. 1997. Т.7, №1. С. 46–49.
94. Гласко В.Б., Тихонов А.Н., Тихонравов А.В. О синтезе многослойных покрытий. *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 1974. Том 14. №1. С. 135–144.
95. Григорьев Ф. В., Сулимов В. Б., Тихонравов А. В. Влияние наночастиц на структуру напыляемой тонкой пленки: результаты атомистического моделирования. *Вычислительные методы программирования*. 19:2. 2018. С. 173–177.
96. Губанова, Л.А. Оптические покрытия: учебное пособие. СПб. : СПбГУ ИТМО. 2012. 101 с.
97. Ермаков С.М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. М.: Наука, 1971. 372 С.
98. Ермолаев И. Умножение матриц: эффективная реализация шаг за шагом. [Электронный ресурс]. Доступно: <https://habr.com/ru/post/359272/>. Дата звернення: Лист. 28, 2019.
99. Журбенко Н.Г. Об одном семействе модификаций r -алгоритма. *Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки*. 2017. № 15. С. 65–69.
100. Журбенко Н.Г. Численная эффективность одной модификации r -алгоритма. *Теорія оптимальних рішень*. 2017. С. 33–38.
101. Замалин В.М., Норман Г.Э., Филинов В.С. Метод Монте-Карло в статистической термодинамике. М.: Наука, 1977. 228 С.

102. Интерференционное ахроматическое просветляющее покрытие: А.с. 838629 СССР, МКИ G 02 В 5/28. В.Д. Веденский, Е.Г. Столов, А.А. Метельников, Ш.А. Фурман и Е.Г. Семин (СССР). № 2822915/18–10; Заявлено 15.10.79; Опубл. 15.06.81, Бюл. №22. 3 с.

103. Кард П.Г. Анализ и синтез многослойных интерференционных пленок. Таллин: Валгус, 1971. 235 с.

104. Киселева Е.М., Шор Н.З. Непрерывные задачи оптимального разбиения множеств: теория, алгоритмы, приложения. Киев: Наук. думка, 2005. 564 с.

105. Кокс Дж.Т., Хасс Г. Просветляющие покрытия для видимой и инфракрасной областей спектра. *Физика тонких пленок*. Т.5. М.: Мир, 1967. С.46–83.

106. Коротун А.В., Коваль А.О., Крючин А.А., Рубіш В.М., Петров В.В., Тітов І.М. Нанопотонні технології. Сучасний стан і перспективи. Ужгород: ФОП СабовА.М., 2019. 482 с.

107. Котликов Е.Н., Хонинева Е.В. Программа синтеза интерференционных покрытий «FlmMgr». СПб: ГУАП. 2011. № гос. регистрации 2011612364.

108. Котликов Е.Н., Шалин В.Б., Тропин А.Н. Особенности функционирования алгоритмов многокритериальной оптимизации на основе эволюционных стратегий. *Сборник трудов VII Международной конференции молодых ученых и специалистов «Оптика-2013»*. СПб.: ИТМО. 2013. С. 338-339.

109. Крылова Т.Н. Интерференционные покрытия. Л.: Машиностроение, 1973. 224 с.

110. Ляшенко И.Н., Карагодова Е.А., Черникова Н.В., Шор Н.З. Линейное и нелинейное программирование. К.: Выща школа. 1975. 372 с.

111. Майселл, Л. Технология тонких пленок. Справочник: в 2 томах. Нью-Йорк, 1970. Пер. с англ. под ред. М. И. Елинсона, Г. Г. Смолко. М.: Советское радио, 1977. 664 с.

112. Мар'ян В.М., Горват Г.Т., Поп М.М., Гера Е.В., Рубіш В.М. Фотостимульовані зміни оптичних властивостей тонких плівок сульфідів германію та миш'яку. *Фізика і хімія твердого тіла*. 2008. N.9. № 3. С. 524-528 .

113. Минков И.М., Ветлицкая Е.Л., Золотарев В.М., Капитонова Л.Н. Определение оптических констант поглощающего неоднородного слоя по спектрам отражения. *Оптика и спектроскопия*. 1985. Т.58. №3. С.689-693.

114. Михайлов В.Н. К теории синтеза интерференционных покрытий с помощью преобразования Фурье. *Оптика и спектроскопия*. 1990. Т. 69. № 3. С.698–703.

115. Михалевич В.С., Волкович В.Л. Вычислительные методы исследования и проектирования сложных систем. М.: Наука, 1982. 285 с.

116. Михалевич В.С., Сергиенко И.В., Шор Н.З. Исследование методов решения оптимизационных задач и их приложения. *Кибернетика*. 1981. №4. С.89-113.

117. Михалевич В.С., Трубин В.А., Шор Н.З. Оптимизационные задачи производственно-транспортного планирования. М.: Наука, 1986. 264 с.

118. 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»*. Том II. Кишинев, 2010. С. 100-108.

119. 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. Монографія . Ужгород: Вид-во «РІК-У», 2019. 152 с.

120. Міца О. Моделі оптичних шаруватих структур з неоднорідностями та оптимізація їх параметрів. Вид-во «Рік», Ужгород, 2020. 336 с.

121. Міца 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, 2014. С. 195.

122. 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.

123. 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 – 2015*, III(6), Issue 54, P. 31-34.

124. Міца О.В. Математичне моделювання оптичних шаруватих покриттів та оптимізація їх структури: дис. ... кандидата технічних наук : 01.05.02 / Міца Олександр Володимирович. Тернопіль, 2004. 155с.

125. Міца О.В. Математичне моделювання оптичних шаруватих покриттів та оптимізація їх структури: дис. ... кандидата технічних наук : 01.05.02 / Міца Олександр Володимирович. Тернопіль, 2004. 155с.

126. Міца О.В. Синтез однорідних та неоднорідних оптичних структур при просвітленні високозаломлюючої підкладки для різних спектральних діапазонів. *Міжнародна школа-семінар “Теорія прийняття рішень”*. Ужгород, 2010. С. 152-153.

127. Міца 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.

128. 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.

129. 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.

130. Міца О.В., Матяшовська Б.О., Шумило Н.Я. Дослідження чутливості спектральних характеристик широкосмугових інтерференційних фільтрів типу S-2ВН2В...2ВН2В до технологічних похибок за допомогою методу Монте-Карло. *Міжнародна школа-семінар “Теорія прийняття рішень”*. Ужгород, 2010. С. 154-155.

131. 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.

132. Міца О.В., Пецко В.І., Стецюк В.І. Двоетапний метод для синтезу багатошарових оптичних систем. *Комп’ютерна математика*. 2017, № 1. С. 73-82.

133. 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.

134. Міца О.В., Повідайчик М.М. Оптимізація портфеля замовлень на підприємстві. *I міжнародна науково-технічна конференція “Обчислювальний інтелект”*. Черкаси, 2011. С. 456-457.

135. 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.

136. 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.

137. Мухамедов Р.К., Майстер А.В., Гайнутдинов И.С. Синтез покритий пропускаючого типа методом перебору. *ОМП*. 1990. №12. С. 61–63.

138. Нефедов В.Н. О сложности вычисления глобального минимума. *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 1993. Том 33. №10. С. 1480-1498.
139. Окатов М.А. и др. Справочник технолога – оптика. СПб.: Политехника, 2004. 679 с.
140. Первак В.Ю. Спектральные свойства интерференционных фильтров, образованных многократным повторением трехкомпонентных блоков фильтра. *Оптический журнал*. 2003. Том 70, № 10. С. 91-96.
141. Первак Ю.А., Фекешгази И.В. Оптические свойства неравнотолщинных многослойных покрытий с симметричными периодами. *Квант. электрон.* (Киев). 1994. №46. С. 8-11.
142. Петров В.В., Крючин А.А., Костюкевич С.О., Рубиш В.М. Неорганічна фотолітографія. К.: ІМФ НАНУ, 2007. 197 с.
143. Петров В.В., Крючин А.А., Куницький Ю.А., Рубиш В.М., Лапчук А.С., Костюкевич С.О. Методи нанолітографії. Київ: Наукова думка, 2015. 262с.
144. Петров В.В., Крючин А.А., Рубиш В.М. Материалы перспективных оптоэлектронных устройств. К.: Наукова думка, 2012. 336 с.
145. Петров В.В., Крючин А.А., Шанойло С.М., Кравець В.Г., Косско І.О., Беляк Є.В., Лачук А.С., Костюкевич С.О. Надщільний оптичний запис інформації. К.: ІПРІ НАН України, 2009. 282 с.
146. Пецко В. І., Міца О. В. Моделювання впливу неоднорідностей на спектральні характеристики вузькосмугових оптичних фільтрів. *Східно-Європейський журнал передових технологій*. 2014. 4/5(70). С. 15- 20.
147. Пецко В. І., Міца О. В. Моделювання просторово-поляризаційних параметрів та вплив неоднорідностей на спектральні характеристики широкосмугових фільтрів. *Вісник ТНТУ*. 2014. №3(75). С. 231-241.
148. Пецко В. І., Міца О. В., Фекешгазі І. В. Моделювання просторово-поляризаційних параметрів спектральних характеристик вузькосмугових оптичних фільтрів. *Комп'ютерна математика*. 2014. Випуск. 1. С. 37- 45.

149. 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: УжНУ, 2016. С. 213-214.

150. Просветляющее интерференционное покрытие: А.с. 1083144 СССР, МКИ G 02 B 5/28; G 02 B 1/10. Б.И. Агафонов, М.Ф. Васильева, А.С. Герчиков, Е.А. Федин, П.П. Яковлев (СССР). № 3420182/18–10; Заявлено 12.04.82; Опубл. 30.03.84, Бюл. №12. 3 с.

151. Путилин Э. С. Оптические покрытия: уч. пос. СПб: СПбГУ ИТМО, 2010. 227 с.

152. Пшеничный Б.Н., Данилин Ю.М. Численные методы в экстремальных задачах. М.: Наука, 1975. 319 с.

153. Растрингин Л. А. Статистические методы поиска. М.: Наука, 1968. 376 с.

154. Росола І. Й., Чобаль О. І., Різак В. М. Вплив температури на дисперсію показника заломлення стекол As_xS_{1-x} . *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика*. 2019. №46. С. 30-39.

155. Росола І.Й., Чобаль О.І., Халус А.М., Різак В.М. Вплив технологічного модифікування на рефрактометричні властивості склоподібного As_2S_5 . *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика*. 2016. №40. С. 98-103.

156. Свешников А.Г., Тихонравов А.В., Фурман Ш.А., Яншин С.А. Общий метод синтеза оптических покрытий. *Оптика и спектроскопия*. 1985. Т. 59. В. 5. С. 1161–1163.

157. Свешников А.Г., Тихонравов А.В., Яншин С.А. Синтез оптических покрытий при наклонном падении света. *Журнал вычисл. матем. и матем. физики*. 1983. № 23. С. 929-939.

158. Соболев И.М. Метод Монте-Карло. М.: Наука, 1972. 64 С.

159. Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973. 311 С.

160. Сосси Л. Метод синтеза диэлектрических интерференционных покрытий. *Изв. АН Эст. ССР. Сер. физ., матем.*, 1974. Т.23. С.229-237.

161. Спачинський В.В., Міца О.В. Автоматизація розрахунків спектральних характеристик оптичних систем, які маю шарувату структуру. *Міжнародна конференція молодих учених та аспірантів "ІЕФ-2017"*. Ужгород. 2017. С. 118.
162. Старик С. П., Гонтар О. Г., Куцай О. М. Методика розв'язку обернених задач синтезу і аналізу оптичних шаруватих покриттів із захисною плівкою. *Сверхтвердые материалы*. 2009. № 5. С. 50-62.
163. Стецюк П.И. Методы эллипсоидов и r -алгоритмы. Кишинэу: Эврика. 2014. 488 с.
164. Стецюк П.И. Теория и программные реализации r -алгоритмов Шора. *Кибернетика и системный анализ*. 2017. Т. 53, № 5. С. 43–57.
165. Стецюк П.И. Теория и программные реализации r -алгоритмов Шора. *Кибернетика и системный анализ*. 2017. № 5. С. 43–57.
166. Стецюк П.И., Гасников А.В. NLP-программы и r -алгоритм в задаче энтропийно-линейного программирования. *Теорія оптимальних рішень*. 2015. С. 73-78.
167. Стецюк П.И., Мица А.В. О задачах оптимизации параметров для многослойных оптических покрытий. *Кибернетика и системный анализ*. № 4. Київ, 2005. С. 107–115.
168. Стецюк П.І. Алгоритми недиференційовної оптимізації та лагранжеві двоїсті оцінки в складних екстремальних задачах: дис. ... доктора фіз.- мат. наук : 01.05.01 /Стецюк Петро Іванович. К., 2013. 305 с.
169. Стецюк П.І., Міца О.В. Про обчислення градієнта у задачі синтезу оптичних покриттів. *Теорія оптимальних рішень*. № 4. Київ, 2005. С. 127–133.
170. 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.
171. Стецюк П.І., Хіміч О.М., Сидорук В.О. Реалізація r -алгоритму на графічних процесорах. *Комп'ютерна математика*. Киев: Ин-т кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины, 2016. № 2. С. 100-109.
172. Стронгин Р.Г. Численные методы в многоэкстремальных задачах. М.: Наука, 1978. 240 с.

173. Субградієнтні алгоритми та задачі на комбінаторних конфігураціях / Стецюк П.І., Донець Г.П., Ненахов Е.І. та ін.; за загал. ред. П.І. Стецюка. – Київ: Унів. вид-во ПУЛЬСАРИ, 2019. – 235 с.

174. Сукач Г.О., Кідалов В.В., Бойко В.В. Манько О.О. Спектрально-селективні оптичні пристрої для телекомунікацій. Донецьк: Вид-во ТОВ «Юго-Восток, Лтд», 2012. – 408с.

175. Сукач Г.О., Кідалов В.В., Бойко В.В., Манько О.О. Спектрально-селективні оптичні пристрої для телекомунікацій. Донецьк: Вид-во ТОВ «Юго-Восток, Лтд», 2012. 408с.

176. Телен А. Конструирование многослойных интерференционных светофильтров. *Сб. физика тонких пленок*. В 8 т. Т. 5. / Под общ. ред. Г. Хасса и Р. Э. Тауна; перевод с англ. под ред. В. Б. Сандомирского и А. Г. Ждана. М.: Мир, 1972. С. 46–83.

177. Тихонравов А. В. О принципиально достижимой точности решения задач синтеза. *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 1983. № 3. С. 32-41.

178. Тихонравов А.В., Гришина Н.В. Современные подходы к проектированию многослойных оптических покрытий. *Компьютерная оптика*. 1992. № 10-11. С.3-48.

179. Тихонравов А.В., Гришина Н.В. Современные подходы проектированию многослойных оптических покрытий. *Компьютерная оптика*. 1992. Вып. 10-11. С.3-48.

180. Тихонравов А.В., Кочиков И.В., Матвиенко И.А., Исаев Т.Ф., Лукьяненко Д.В., Шарапова С.А., Ягола А.Г. Корреляция ошибок при напылении оптических покрытий с широкополосным оптическим контролем. *Вычислительные методы программирования*. 19:4. 2018. С. 439–448.

181. 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.

182. 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.

183. 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.

184. Фекешгази И., Сіденко Т., Міца О., Трухан В., Шелег А. Нелінійна поляризованість та гіротропія кристалів дифосфіда кадмію. *Всеукраїнський з'їзд “Фізика в Україні”*. Одеса, 2005. С. 186–187.

185. Фиакко А., Мак-Кормик Г. Нелинейное программирование. Методы последовательной безусловной минимизации / Пер. с англ. под ред. Е. Г. Гольштейна. М.: Мир, 1972. 240 с.

186. Физика тонких пленок / Под ред. Г.Хасса и Р.Э.Туна: Пер. с англ. М.: Мир. 1972. Т.5. 315 с.

187. Фурман Ш.А. Синтез интерференционных покрытий. *Оптика и спектроскопия*. 1984. Т.56. В.2. С.198-200.

188. Фурман Ш.А. Тонкослойные оптические покрытия. Л.: Машиностроение, 1977. 264 с.

189. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование / Пер. с англ. под ред. М. Л. Быховского. М.: Мир, 1975. 534 с.

190. Черняк, А. А., Черняк, Ж. А., Метельский, Ю. М., Богданович, С. А. Методы оптимизации: теория и алгоритмы. Москва: Издательство Юрайт, 2019. 357 с.

191. Шатилов А.В., Тютикова Л.П. Пример расчета интерференционного светофильтра методом последовательного синтеза. *Оптика и спектроскопия*. 1963. Т.14. В.3. С. 426-429.

192. Широкополосное просветляющее покрытие: А.с. 934429 СССР, МКИ G 02 В 5/28. В.Д. Веденский и Е.Г. Столов (СССР). № 2809841/18–10; Заявлено 09.07.79; Опубл. 07.06.82, Бюл. №21. 3 с.
193. Шор Н.З. Методы минимизации негладких функций и матричные задачи оптимизации. *Сборник избранных трудов академика Н. З. Шора*. Кишинев: ЭВРИКА, 2009. 240 с.
194. Шор Н.З. Методы минимизации недифференцируемых функций и их приложения: Автореф. дис. ... докт. физ-мат. наук. Киев, 1970. 44 с.
195. Шор Н.З. Методы минимизации недифференцируемых функций и их приложения. Киев: Наук. думка, 1979. 200 с.
196. Шор Н.З. Монотонные модификации r -алгоритмов и их приложения *Кибернетика и системный анализ*. 2002. № 6. С. 74-96.
197. Шор Н.З., Журбенко Н.Г. Метод минимизации, использующий операцию растяжения пространства в направлении разности двух последовательных градиентов. *Кибернетика*. 1971. №3. С. 51-59.
198. Шор Н.З., Журбенко Н.Г., Лиховид А.П., Стецюк П.И. Развитие алгоритмов недифференцируемой оптимизации и их приложения. *Кибернетика и системный анализ*. 2003. № 4. С. 80-94.
199. Шор Н.З., Соломон Д.И. Декомпозиционные методы в дробно-линейном программировании. Кишинев: Штиинца, 1989. 204 с.
200. Шор Н.З., Стеценко С.И. Квадратичные экстремальные задачи и недифференцируемая оптимизация. Киев: Наук. думка, 1989. 208 с.
201. Шор Н.З., Стецюк П.И. Использование модификации r -алгоритма для нахождения глобального минимума полиномиальных функций. *Кибернетика и системный анализ*. 1997. № 4. С. 28-49.
202. Яковлев П.П., Мешков Б.Б. Проектирование интерференционных покрытий. М.: Машиностроение, 1987. 192 с.
203. Яремчук І.Я., Фітьо В.М., Бобицький Я.В. Спектральні характеристики багатосферних структур на основі трикомпонентних блоків. *Вісник Нац. Унів. „Львівська Політехніка”. Електроніка*. 2006. № 558. С. 80-85.

Додаток 1. Акти впровадження результатів досліджень

НАЦІОНАЛЬНА
АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ЕЛЕКТРОННОЇ ФІЗИКИ
вул. Університетська, 21,
88017 Ужгород
Тел. 380 (312)643524
Тел./факс: 380 (312)643650
E-mail: nanu.iep@gmail.com
Код ЄДРПОУ 05540008



NATIONAL
ACADEMY OF SCIENCES
OF UKRAINE
INSTITUTE OF ELECTRON PHYSICS
Universitetska, 21
Uzhgorod 88017
Phone: 380 (312)643524
Phone/Fax: 380 (312)643650
E-mail: nanu.iep@gmail.com
State registration code 05540008

ЗАТВЕРДЖУЮ

Директор

Інституту електронної фізики
НАН України, доктор фіз.-мат. наук

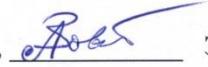
Г.М. Гомонай

2020 р.

АКТ-ВПРОВАДЖЕННЯ
результатів дисертаційної роботи
Міци Олександра Володимировича,
представленої до захисту на здобуття наукового ступеня
доктора технічних наук

Результати наукових розробок та досліджень по дисертаційній роботі Міци О.В. “Моделювання та оптимізація спектральних коефіцієнтів шаруватих оптичних систем з неоднорідними границями” впроваджено в ІЕФ НАН України для діагностики й оптимізації характеристик оптичних покриттів при виготовленні оптичних елементів халькогенідної фотоніки та створенні аморфних надграток на основі халькогенідних плівок. Розроблене дисертантом програмне забезпечення використовувалося та впроваджено для розрахунків спектральних коефіцієнтів шаруватих оптичних систем з неоднорідними границями, воно також використовується для контролю й оптимізації характеристик оптичних шарів у режимі реального часу при їх напыленні на високозаломлюючі та низькозаломлюючі підкладки.

Заступник директора

з наукової роботи ІЕФ НАН України,  Завілопуло А.М.

д.ф.-м-н, професор



МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
«УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ»
 вул. Підгірна, 46, м. Ужгород, Закарпатська область, 88000
 тел: (0312) 61-33-21, 42-99-89 факс: (0312) 61-33-96
 e-mail: official@uzhnu.edu.ua Код ЄДРПОУ 02070832

24.11.2020 № 3548/01-14

На № _____ від _____

ДОВІДКА

про використання в ДВНЗ “Ужгородський національний університет”
 наукових результатів докторської дисертаційної роботи
 доцента, кандидата технічних наук
 МІЦІ Олександра Володимировича

Моделі, алгоритми, методи та програмне забезпечення дисертаційного дослідження Міци О.В. впроваджені в навчальний процес факультету інформаційних технологій ДВНЗ “УжНУ”. 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”.

Результати досліджень, приведені у дисертаційній роботі Міци О.В., використовуються студентами при виконанні комплексу курсових, дипломних робіт бакалаврами та магістрами.

Проректор з наукової роботи



Студеняк І.П.

Декан факультету інформаційних технологій

Повхан І.Ф.