

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 535.417

ОБЩИЙ МЕТОД СИНТЕЗА ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ МНОГОСЛОЙНЫХ ОПТИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЙ

А. Г. Свешников, Ш. А. Фурман, А. В. Тихонравов, С. А. Яншин

(кафедра математики)

Практическое решение задач синтеза многослойных оптических покрытий на основе вариационной постановки [1] сводится к минимизации так называемых оценочных функционалов на некотором допустимом множестве в пространстве векторов, описывающих структуру покрытия. Пусть покрытие состоит из N слоев и показатели преломления всех слоев заранее заданы: все нечетные от подложки слои имеют показатель преломления n_1 , а все четные — n_2 . Таким образом, мы рассматриваем так называемые двухкомпонентные покрытия, наиболее соответствующие необходимым условиям оптимальности в задачах синтеза многослойных систем [2]. Пусть $X = \{d_1, d_2, \dots, d_N\}$ — вектор, описывающий толщины слоев покрытия (d_j — толщина j -го слоя, слои считаем занумерованными в направлении от подложки к внешней среде). Вектор X полностью характеризует двухкомпонентное покрытие. По нему однозначно определяется энергетический коэффициент пропускания покрытия $T(\lambda)$ как функция длины волны падающего света λ . В случае непоглощающих покрытий, которые мы и будем рассматривать, наиболее эффективно с вычислительной точки зрения определение $T(\lambda)$ по матричной методике [3]. При этом функция $T(\lambda)$ находится по формуле

$$T(\lambda) = 4\rho_0\rho_l / [2\rho_0\rho_l + \Phi(\lambda)], \quad (1)$$

где

$$\Phi(\lambda) = \rho_0^2 m_{11}^2 + \rho_l^2 m_{22}^2 + \rho_0^2 \rho_l^2 m_{12}^2 + m_{21}^2, \quad (2)$$

а m_{ik} — зависящие от λ элементы характеристической матрицы системы

$$M = \begin{vmatrix} m_{11} & im_{12} \\ im_{21} & m_{22} \end{vmatrix} = \prod_{j=N}^1 \begin{vmatrix} \cos \varphi_j & \frac{i}{p_j} \sin \varphi_j \\ ip_j \sin \varphi_j & \cos \varphi_j \end{vmatrix}. \quad (3)$$

В этих формулах $\varphi_j = \frac{2\pi}{\lambda} n_j \cos \theta_j d_j$ (θ_j — определяемый из закона Снеллиуса через угол падения θ_0 угол распространения волны в j -м слое); $p_j = n_j \cos \theta_j$ и $p_j = \cos \theta_j / n_j$ соответственно для ТЕ- и ТМ-поляризованных волн; ρ_0 и ρ_l — аналогичные p_j параметры, определяемые через показатели преломления внешней среды n_0 и подложки n_l .

Пусть $\tilde{T}(\lambda)$ — заданный при синтезе вид энергетического коэффициента пропускания, который требуется получить в некотором спектральном диапазоне. Введем в этом спектральном диапазоне сетку $\{\lambda_1, \dots, \lambda_M\}$. В качестве функционала, оценивающего близость реаль-

ного коэффициента $T(\lambda)$ и заданной характеристики $\tilde{T}(\lambda)$, возьмем функционал

$$F = \sum_{k=1}^M v_k [T(\lambda_k) - \tilde{T}(\lambda_k)]^2, \quad (4)$$

где v_k — весовые множители.

Поскольку $T(\lambda)$ полностью определяется заданием X , функционал F является фактически функцией векторного аргумента X .

Основные трудности практического решения задач синтеза многослойных оптических покрытий связаны с многоэкстремальностью функционала (4). Вследствие многоэкстремальности поиск на заданном множестве возможных значений X глобального или достаточно глубокого локального минимума — весьма сложная задача. В данной работе для решения этой задачи мы используем наиболее плодотворные, с нашей точки зрения, результаты, полученные при разработке двух различных групп методов поиска минимума F : методов перебора значений F на заданной сетке в пространстве параметров X [4] и методов минимизации градиентного типа [2].

В целом предлагаемый метод состоит в следующем. На первом этапе производится прямой перебор значений F (без начального приближения) на некоторой сетке значений X в пространстве параметров. После окончания перебора отбирается K векторов X с наименьшими значениями функционала F . На втором этапе отобранные векторы X_k используются в качестве начальных приближений в программе минимизации функционала F градиентными методами. Минимизация производится методом градиентного спуска с последующим переходом на метод сопряженных градиентов. Из полученных на втором этапе K локальных минимумов отбирается наиболее глубокий — решение рассматриваемой задачи синтеза. Практические возможности предлагаемого метода определяются, очевидно, эффективностью алгоритмов перебора и минимизации градиентными методами.

Рассмотрим сначала алгоритм перебора. Он основывается на идее использования в ходе вычисления $T(\lambda)$ так называемых базовых матриц [4]. При определении $T(\lambda)$ по формулам (1)–(3) основное время счета уходит на формирование характеристических матриц слоев, входящих в матричное произведение (3). Пусть перебор векторов X производится по такой сетке векторных значений, что толщины нечетных и четных слоев могут принимать лишь фиксированные значения: соответственно ih_1 ($i=1, \dots, I_1$) и ih_2 ($i=1, \dots, I_2$). Тогда в ходе вычисления $T(\lambda)$ по формулам (1)–(3) будет использоваться $I_1M + I_2M$ (M — число точек сетки по λ) различных характеристических матриц слоев. Они могут быть заранее вычислены и занесены в память машины. Это резко снижает вычислительные затраты при расчете F . Пусть $I_1 = I_2 = I$ и при переборе нечетные и четные координаты вектора X принимают все возможные значения ih_1 и ih_2 . Тогда общее число различных вариантов значений вектора X равно I^N . Перебор может быть организован по такой схеме, что для вычисления F на всей сетке по X потребуется общее число матричных умножений, равное

$$M(I^2 + I^3 + \dots + I^N) = M \frac{I^2(I^{N-1} - 1)}{I - 1}.$$

Таким образом, среднее число матричных умножений, необходимое для вычисления F при одном значении X , равно $M \frac{I^{N-1} - 1}{I^{N-1} - I^{N-2}}$, т. е.

достаточно мало. Тем самым использованная в [4] схема перебора оказывается наиболее эффективной.

Подобная схема перебора возможных значений X использована и в данной работе. Отличие от работы [4] состоит в том, что толщины отдельных слоев не обязаны принимать все значения из сетки $H_1 = \{ih_1, i=1, \dots, I_1\}$ или $H_2 = \{ih_2, i=1, \dots, I_2\}$. Для каждого слоя задаются свои три параметра (начальное значение, конечное значение, шаг d_j), определяющие, какие значения из сетки H_1 или H_2 может принимать толщина соответствующего слоя. Это расширяет возможности построения различных сеток изменения векторного аргумента X : позволяет фиксировать толщины отдельных слоев, изменять толщины различных слоев с разным шагом и т. д. Это дает возможность, сократив число вариантов в одних слоях, значительно увеличить число вариантов в других слоях. Кроме того, по сравнению с описанной в [4] программой при составлении программы первого этапа метода был введен ряд дополнительных алгоритмических усовершенствований, таких, как использование в программе только одномерных массивов, использование для внутренних подпрограмм автокода madlen ЭВМ БЭСМ-6 и т. п. Это позволило повысить быстродействие программы перебора еще в несколько раз. Для характеристики эффективности разработанной программы приведем некоторые цифры. При синтезе одного из описываемых ниже широкополосных просветляющих покрытий рассматривались 12-слойные системы с числом вариантов толщин каждого слоя, равным 3. Таким образом, общее число рассматриваемых вариантов равно 3^{12} , т. е. более полумиллиона. При числе точек сетки по λ , равном 31, просмотр этого числа вариантов занял около 20 мин на ЭВМ БЭСМ-6.

Перейдем теперь к обсуждению второго этапа метода. Быстродействующие и точные алгоритмы минимизации строятся за счет использования аналитического выражения для градиента функционала (4). Получим это выражение. Для этого введем матрицы

$$P_0 = \begin{vmatrix} p_0 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad P_l = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & p_l \end{vmatrix}$$

и матрицу

$$M_s = P_0 M P_l.$$

С их помощью выражение (2) для $\Phi(\lambda)$ может быть записано в виде

$$\Phi(\lambda) = \text{Sp}\{M_s (M_s^*)^T\}.$$

Найдем производную Φ по толщине k -го слоя. Очевидно, что

$$\frac{\partial \Phi}{\partial d_k} = 2 \text{Sp} \left\{ \frac{\partial M_s}{\partial d_k} (M_s^*)^T \right\},$$

где

$$\frac{\partial M_s}{\partial d_k} = P_0 M_N \dots M_{k+1} \frac{\partial M_k}{\partial d_k} M_{k-1} \dots M_1 P_l.$$

Производная характеристической матрицы k -го слоя по d_k равна

$$\frac{\partial M_k}{\partial d_k} = \frac{2\pi}{\lambda} n_k \cos \theta_k L_k, \quad (5)$$

где

$$L_k = \begin{vmatrix} -\sin \varphi_k & \frac{i}{p_k} \cos \varphi_k \\ i p_k \cos \varphi_k & -\sin \varphi_k \end{vmatrix}.$$

Собирая вместе выписанные выше выражения, получаем, что

$$\frac{\partial \Phi}{\partial d_k} = \frac{4\pi}{\lambda} n_k \cos \theta_k \operatorname{Sp} \{P_0 M_N \dots M_{k+1} L_k M_{k-1} \dots M_1 P_1 (M_s^*)^T\}. \quad (6)$$

Учитывая, что шпур матричного произведения не изменяется при перестановке сомножителей, и вводя матрицы

$$\Psi_{k-1} = M_{k-1} \dots M_1 P_1^2 (M^*)^T P_0^2,$$

запишем (6) в виде

$$\frac{\partial \Phi}{\partial d_k} = \frac{4\pi}{\lambda} n_k \cos \theta_k \operatorname{Sp} \{M_N \dots M_{k+1} L_k \Psi_{k-1}\}. \quad (7)$$

Из (4), (1) и (7) получаем выражение для градиента функционала F . Градиент F есть вектор с координатами

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial d_k} = & -\frac{2\pi}{\rho_0 \rho_1} n_k \cos \theta_k \sum_{m=1}^M v_m (T(\lambda_m) - \tilde{T}(\lambda_m)) \times \\ & \times \frac{T^2(\lambda_m)}{\lambda_m} \operatorname{Sp} \{M_N \dots M_{k+1} L_k \Psi_{k-1}\}_{\lambda=\lambda_m}. \end{aligned} \quad (8)$$

Полученные аналитические выражения позволяют вычислять $\operatorname{grad} F$ с машинной точностью и с минимальными дополнительными затратами времени по сравнению с временем, необходимым для вычисления самого функционала F . Действительно, матрицы M_j и произведения $M_N \dots M_{k+1}$ находятся в ходе вычисления F , матрицы L_k непосредственно получаются из уже сформированных характеристических матриц слоев, а матрицы Ψ_{k-1} могут быть найдены по рекуррентной формуле

$$\Psi_k = M_k \Psi_{k-1} \quad (9)$$

с начальным условием

$$\Psi_0 = P_1^2 (M^*)^T P_0^2 = \left\| \begin{array}{cc} \rho_0^2 m_{11} & -im_{21} \\ -ip_0^2 \rho_1^2 m_{12} & \rho_1^2 m_{22} \end{array} \right\|.$$

Таким образом, для определения очередного значения $\partial F / \partial d_k$ требуется произвести всего $3 \times M$ матричных умножений: по одному умножению при каждом λ_m для определения Ψ_k по рекуррентной формуле (9) и $2 \times M$ в выражении (8). Поскольку основные затраты машинного времени уходят на формирование характеристических матриц слоев, градиент F с помощью формул (8), (9) может быть вычислен практически параллельно с вычислением значения самого функционала. Это обеспечивает высокую эффективность градиентных методов минимизации F , используемых на втором этапе метода.

Рассмотрим теперь некоторые примеры синтеза широкополосных просветляющих покрытий с помощью комплекта программ, реализующих описанный выше метод. Во всех приводимых ниже примерах синтезировались просветляющие покрытия для области спектра с отношением граничных длин волн, равным 2,15. Заметим, что практически все известные к настоящему времени по литературным данным покрытия рассчитаны на просветление в области с отношением граничных длин волн не более чем 2. При синтезе используются материалы с показателями преломления 1,46 и 1,96. Во всех приводимых примерах внешняя среда — воздух, угол падения $\theta_0 = 0^\circ$ (нормальное падение). На рис. 1, 2 приведены спектральные кривые энергетического коэффициен-

га пропускания для покрытий на подложке с n_i , равным 1,46; 1,51; 1,61; 1,64. Толщины слоев синтезированных покрытий даны в таблице. В последних двух столбцах указаны значения показателей преломления нечетных (n_1) и четных (n_2) слоев. Как видно из рис. 1, 2, во всех рассматривавшихся случаях удалось достичь высокого уровня просветления во всей заданной спектральной области. Весь цикл вы-

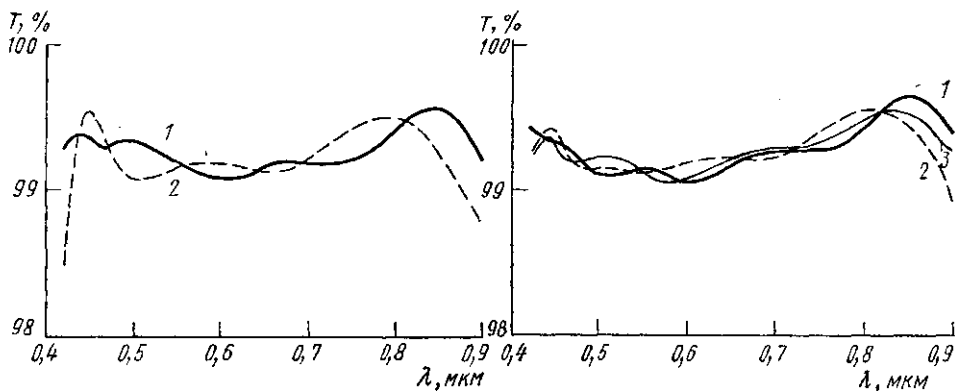


Рис. 1. Энергетические коэффициенты пропускания просветляющих покрытий на подложке с $n_i=1,46$: 12-слойное (1) и 8-слойное покрытие (2)

Рис. 2. Энергетические коэффициенты пропускания просветляющих покрытий: 1—10-слойное покрытие на подложке с $n_i=1,51$; 2—7-слойное покрытие на подложке с $n_i=1,61$; 3—7-слойное покрытие на подложке с $n_i=1,64$

числений для получения каждой из систем (перебор и минимизация всех отобранных начальных приближений) занимал не более 1 ч машинного времени ЭВМ БЭСМ-6.

Отметим, что время, затрачиваемое на синтез, в значительной степени зависит от значения параметра K , определяющего число отби-

Оптические толщины слоев (Å)

Рисунок и кривая	Номер слоя												n_1	n_2
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12		
Рис. 1														
Кривая 1	696	759	233	671	293	794	290	508	787	42	784	1026	1,96	1,46
Кривая 2	105	300	113	216	795	28	635	1009	—	—	—	—	1,96	1,46
Рис. 2														
Кривая 1	116	617	276	653	246	932	230	518	1598	1005	—	—	1,96	1,46
Кривая 2	402	132	925	212	471	1577	997	—	—	—	—	—	1,46	1,96
Кривая 3	437	136	1018	196	489	1582	1007	—	—	—	—	—	1,46	1,96

раемых на первом этапе вариантов и, соответственно, число проводимых на втором этапе процессов минимизации функционала F . Опыт проведенных расчетов показал, что это число целесообразно выбирать равным $50 \div 100$. Такое большое значение связано с тем, что, как правило, наиболее глубокий локальный минимум, полученный на втором этапе синтеза, отнюдь не соответствует тем отобранным на первом этапе начальным приближениям, для которых значения F минимальны. При числе $K=50 \div 100$ зачастую одинаковые наиболее глубокие локальные минимумы получаются многократно. Это позволяет с большой

вероятностью говорить о том, что найденные минимумы являются глобальными.

Полученные результаты показывают, что описанный метод и реализующий его комплекс программ позволяют синтезировать просветляющие покрытия со значительно более широкой рабочей областью, чем известные ранее. Данный метод будет полезен для решения новых задач синтеза, в которых трудно заранее подобрать хорошее начальное приближение: задач синтеза светоделителей, фильтров со сложной формой спектральной кривой, новых типов покрытий с нетрадиционными спектральными зависимостями коэффициентов пропускания и отражения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Свешников А. Г., Тихонравов А. В. // Теория и методы решения некорректно поставленных задач и их приложения. (Сб. науч. трудов НГУ). Новосибирск, 1983. С. 213—220. [2] Свешников А. Г., Тихонравов А. В., Яншин С. А. // ЖВМ и МФ. 1983. 23, № 4. С. 929—935. [3] Фурман Ш. А. Тонко-слойные оптические покрытия. Л., 1977. [4] Фурман Ш. А. // Опт. и спектр. 1984. 56, № 2. С. 1198—2001.

Поступила в редакцию
05.06.85

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1986. Т. 27, № 5

УДК 535.417

СИНТЕЗ ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ ОПТИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ НЕОБХОДИМЫХ УСЛОВИЙ ОПТИМАЛЬНОСТИ

Н. В. Гришина

(кафедра математики)

Большой интерес к проблемам синтеза оптических покрытий связан с широким и разнообразным применением таких систем на практике. Основной проблемой при синтезе покрытий с заданными спектральными характеристиками оказывается многоэкстремальность оценочного функционала. Новый метод синтеза оптических покрытий, направленный на преодоление этих трудностей, был предложен в работах [1, 2]. В них вводились игольчатые вариации показателя преломления $n(t)$, приводящие к возрастанию (в общем случае) числа слоев покрытия и уменьшению оценочного функционала. При этом рассматривалось приращение функционала первого порядка по ширине игольчатой вариации Δt и из необходимых условий оптимальности выбиралось место проведения игольчатой вариации. Ширина вариации показателя преломления затем подправлялась при минимизации функционала методом градиентного спуска.

В данной работе рассматриваются приращения оценочного функционала при игольчатом варьировании показателя преломления первого и второго порядков по ширине игольчатой вариации Δt . В этом случае использование необходимых условий оптимальности позволяет не только выбирать место проведения вариации, но и оценить ее оптимальную ширину.

Пусть n_0 , n_l — показатели преломления внешней среды и подложки, n_L и n_N — чередующиеся показатели преломления слоев, ($n_L < n_N$), d_1 , d_2 , ..., d_N — геометрические толщины слоев, пронумерованные от подложки, N — число слоев покрытия. В качестве оценочного функционала возьмем