

## Метод интегральных характеристик в обратной задаче синтеза оптических покрытий

### 1. Введение

В современной науке и технике всё большая роль отводится разнообразным оптическим приборам, основными компонентами которых являются тонкослойные оптические покрытия. Например, частотные фильтры, многослойные высокоотражающие диэлектрические зеркала, поляризаторы света используются в практически любом лазере или оптоволоконном приборе.

Задача синтеза оптического покрытия заключается в том, что необходимо, варьируя параметры слоистой системы - показатели преломления и толщину слоев - с заданной точностью приблизить спектральную характеристику. Обычно это коэффициент пропускания или отражения. Требования, накладываемые на него, весьма разнообразны. Это может быть полное отражение (зеркало), отражение в одном диапазоне длин волн и пропускание в другом (фильтр), отражение специального вида. Решение задачи синтеза неустойчиво, т.е. существуют сильно отличающиеся оптические покрытия, имеющие близкие спектральные характеристики.

Одной из первых публикаций по устойчивому методу решения проблемы синтеза оптических покрытий можно считать статью [1]. В последние десятилетия технология производства многослойных оптических покрытий совершила скачок вперед. Уровень ее развития выдвигает повышенные требования к уровню проектирования таких систем. Увеличение точности, улучшение качества оптических приборов, их миниатюризация не только предоставляют проектировщикам новые возможности, но и ставят перед ними качественно новые математические задачи, для решения которых создаются постоянно совершенствующиеся методы. Наиболее эффективным методом сейчас считается метод игольчатых вариаций, предложенный А.В. Тихонравовым в 1982 году (см., например, [2]). Этот метод позволяет решать задачу синтеза практически с любым начальным приближением.

Настоящая работа посвящена другому методу решения задачи синтеза - методу интегральных характеристик [3]. В этом методе основным рассматриваемым математическим объектом является не распределение диэлектрической проницаемости  $\varepsilon(z)$  в слоистой среде, а так называемая интегральная диэлектрическая проницаемость (или же интегральный показатель преломления). Основное отличие и преимущество метода интегральных характеристик по сравнению с другими методами решения задачи синтеза состоит в том, что он позволяет, во-первых, давать положительный или отрицательный ответ на вопрос о существовании решения при заданных материалах. Во-вторых, используя его, можно получать целые серии решений задачи с использованием различных показателей преломления, что особенно важно, так как зачастую в распоряжении проектировщика имеется лишь ограниченное число материалов.

## §1. Математическая постановка задачи

### Описание метода интегральных характеристик

В качестве объекта исследования в теории многослойных оптических покрытий рассматривается неограниченная плоская неоднородная пластинка толщины  $H$ , расположенная между двумя однородными средами с диэлектрическими проницаемостями  $\varepsilon_0$  (подложка) и  $\varepsilon_a$  (внешняя среда). Слоистая среда считается непоглощающей, диэлектрическая проницаемость распределена в слое по следующему закону:

$$\varepsilon(z) = \begin{cases} \varepsilon_0 = \text{const}, & z \leq 0 \\ \varepsilon(z), & 0 < z < H, \quad \varepsilon(z) \geq 1 \\ \varepsilon_a = \text{const}, & z \geq H \end{cases} \quad (1)$$

Рассмотрим систему, состоящую из  $N$  слоев. В этом случае  $\varepsilon(z)$  - кусочно-непрерывная функция, имеющая разрывы в точках  $z_j$ ,  $j=0, \dots, N$ ,  $z_0=0$ ,  $z_N=H$ , причём выполняется условие  $1 \leq \varepsilon(z) \leq \varepsilon_{\max}$ , где  $\varepsilon_{\max}$  - максимальная диэлектрическая проницаемость имеющихся в распоряжении материалов. Обычно внешняя среда - воздух, поэтому  $\varepsilon_a=1$ . В дальнейшем, как важный частный случай, реализуемый на практике, будут рассматриваться только кусочно-постоянные  $\varepsilon(z)$ . Тем самым,  $j$ -й слой будет характеризоваться своей диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_j$  и толщиной  $d_j = z_j - z_{j-1}$ .

Пусть из внешней среды под углом  $\theta_a$  к нормали падает плоская электромагнитная волна с волновым числом  $k_0$ , меняющаяся по закону  $e^{i\omega t}$ . В случае  $E$ -поляризации векторная амплитуда электрического поля имеет только составляющую  $E_x$ , а магнитного  $H_y$  и  $H_z$ . Исходя из уравнений Максвелла, легко установить [4], что  $E_x$  и  $H_y$  имеют вид

$$E_x = U(z)e^{ik_0\alpha y}, \quad H_y = -V(z)e^{ik_0\alpha y},$$

где  $\alpha = \sqrt{\varepsilon_a} \sin \theta_a$ , а  $U(z)$  и  $V(z)$  удовлетворяют системе уравнений

$$\begin{cases} U' = ik_0 V \\ V' = ik_0 [\varepsilon(z) - \alpha^2] U \end{cases} \quad (2)$$

Амплитудный коэффициент отражения  $r(k_0)$  вводится как отношение амплитуд отражённой  $E_R$  и падающей  $E_A$  волн при  $z = z_a$ :

$$r(k_0) = \frac{E_R}{E_A}.$$

Из условий на границах слоистой среды и связи между амплитудами электрического и магнитного полей в однородной среде вытекают соотношения

$$\frac{V(z_0)}{U(z_0)} = \sqrt{\varepsilon_0} \cos \theta_0, \quad (3)$$

$$\frac{V(z_a)}{U(z_a)} = \sqrt{\varepsilon_a} \cos \theta_a \frac{E_A - E_R}{E_A + E_R}, \quad (4)$$

где  $\theta_0$  - угол между нормалью и направлением распространения прошедшей волны в подложке, определяемый из закона преломления  $\sqrt{\varepsilon_a} \sin \theta_a = \sqrt{\varepsilon_0} \sin \theta_0$ .

От системы (2) удобно перейти к уравнению для адмитанса  $A_E$ , который вводится как  $A_E = V/U$ . Это уравнение имеет вид

$$A'_E = ik_0[\varepsilon(z) - \alpha^2] - ik_0 A_E^2. \quad (5)$$

Из (3) получаем начальное условие  $A_E(z_0) = \sqrt{\varepsilon_0} \cos \theta_0$ , а из (4) выражаем амплитудный коэффициент отражения через  $A_E(z_a)$ :

$$r(k_0) = \frac{\sqrt{\varepsilon_a} \cos \theta_a - A_E(z_a)}{\sqrt{\varepsilon_a} \cos \theta_a + A_E(z_a)} \quad (6)$$

Энергетический коэффициент отражения равен  $R(k_0) = |r(k_0)|^2$ .

В дальнейшем мы будем рассматривать только нормальное падение. В этом случае уравнение (5) принимает вид

$$A' = ik_0[\varepsilon(z) - A^2] \quad (7)$$

с начальным условием  $A(z_0) = \sqrt{\varepsilon_0(z)}$ . Будем вместо диэлектрических проницаемостей слоев  $\varepsilon$ , оперировать с показателями преломления  $n_j = \sqrt{\varepsilon_j}$ .

Итак, обратная задача синтеза заключается в определении  $n(z)$  из задачи (7) при дополнительном условии вида (6). Это обычная обратная коэффициентная задача, которая является некорректно поставленной. Действительно, во-первых, может не существовать покрытия, реализующего заданный коэффициент отражения. Во-вторых, данному коэффициенту отражения могут отвечать различные покрытия. Наконец, не всякая система практически реализуема: при производстве многослойных оптических покрытий всегда есть ограничения на число слоев и их толщину, на характеристики материалов.

Решение обратной задачи в такой формулировке определяется неустойчиво. Для таких задач обычно применяют методы регуляризации с использованием априорной информации о поведении  $n(z)$ . В работе [3] показано, что в данной задаче устойчиво определяется другая характеристика среды - интегральный показатель преломления (ИПП)

$$N(z) = \int_0^z n(\xi) d\xi. \quad (8)$$

Таким образом, близким ИПП соответствуют близкие спектральные характеристики. Использование ИПП позволяет упростить решение обратной задачи. Пусть нам известна общая толщина системы  $H$  и пусть нам задано максимальное число слоев  $N$ , составляющих её. Будем полагать, что все слои имеют одинаковую толщину.

Определим методом подбора некоторое распределение показателя преломления  $\tilde{n}(z)$ , при котором выполняются условия, наложенные на коэффициент отражения  $R(k_0)$ . Полученное методом подбора решение  $\tilde{n}(z)$ , хотя и даёт минимальную невязку в обратной задаче, но, как правило, не удовлетворяет практическим условиям на  $n_j$  и имеет явно завышенное число слоев.

Вычислим по полученному  $\tilde{n}(z)$  приближённый ИПП:

$$\tilde{N}(z) = \int_0^z \tilde{n}(\xi) d\xi, \quad z \in [0, H]. \quad (9)$$

Так как  $\tilde{N}(z)$  определяется из обратной задачи единственно и устойчиво, то  $\tilde{N}(z)$  близко к  $N(z)$ , которое порождает необходимый коэффициент отражения. Теперь, зная  $\tilde{N}(z)$ , можно поставить вопрос о существовании решения задачи синтеза при заданном наборе материалов  $n_k$ , где  $k=1, \dots, m$ . Установив существование решения задачи синтеза, можно определить  $n(z)$  из более простой задачи – решения интегрального уравнения первого рода

$$\int_0^z n(\xi) d\xi = N(z) \quad (10)$$

при дополнительных условиях, что  $n(z)$  – кусочно-постоянная функция с возможными значениями  $n_k$ ,  $k=1, \dots, m$ .

## §2. Минимизация оценочного функционала

Оценочный функционал для нашей задачи представляет собой квадрат нормы разности коэффициента отражения, реализуемого данной слоистой системой, и желаемого коэффициента. И тот, и другой коэффициент отражения зависят от волнового числа падающей волны, которое меняется в диапазоне  $[k_1, k_2]$ . Оценочный функционал имеет следующий вид

$$J[n] = \|R(k, n(z)) - R_D(k)\|_{L_2[k_1, k_2]}^2. \quad (11)$$

Первоначальный "грубый" поиск показателя преломления  $n(z)$ , реализующего желаемый коэффициент отражения, производится методом проекции градиента [5], при котором  $k$ -й итерационный шаг осуществляется по формуле

$$n^k = P_{D_N}(n^{k-1} - \alpha_n J'[n^{k-1}]), \quad (12)$$

где введены обозначения:  $D_N = \{n = \{n_1, n_2, \dots, n_N\} : 1 \leq n_j \leq n_{\max}, j=1, 2, \dots, N\}$ ,  $P_{D_N}$  – проектор на множество  $D_N$ ,  $J'[n]$  – градиент оценочного функционала (11),  $\alpha_k$  – параметр метода, определяемый из условия минимальности функционала (11) по данному направлению градиента. Выпишем формулу для градиента оценочного функционала  $J$ :

$$J'[n] = 2(R(k, n(z)) - R_D(k), \delta R)_{L_2[k_1, k_2]}. \quad (13)$$

При каждом фиксированном волновом числе  $k$   $R(k, n(z))$  фактически представляет собой функционал, зависящий от функции  $n(z)$ . В этом случае под  $\delta R$  следует понимать вариацию этого функционала. Однако, учитывая, что в

нашей задаче функция  $n(z)$  кусочно-постоянная и  $R$ , таким образом, зависит от  $N$  переменных (показателей преломления слоев системы),  $\delta R$  есть не что иное, как градиент коэффициента отражения  $R$ .

Нам понадобится решение уравнения (7) в  $j$ -м слое. В [2] показано, что оно имеет вид

$$A(z) = \frac{i n_j \sin \varphi_j + A(z_{j-1}) \cos \varphi_j}{\cos \varphi_j + \frac{i}{n_j} A(z_{j-1}) \sin \varphi_j}, \quad (14)$$

где  $\varphi_j = k n_j (z - z_{j-1})$ ,  $n_j$  - показатель преломления  $j$ -го слоя,  $z_{j-1}$  - нижняя граница  $j$ -го слоя. Полагая в формуле (14)  $z = z_j$  и обозначая  $A(z_j) = A_j$ , получим рекуррентную формулу для пересчёта значений адмитанса с нижней границы слоя на верхнюю.

Амплитудный коэффициент отражения выражается через решение уравнения для адмитанса (7) на границе с внешней средой по формуле:

$$r(k) = \frac{n_a + A(z_a, k)}{n_a - A(z_a, k)}. \quad (15)$$

Для энергетического коэффициента отражения справедливо следующее равенство:

$$R(k) = r(k) \times \bar{r}(k) = |r|^2. \quad (16)$$

Кроме частоты, коэффициенты отражения и адмитанс зависят от  $n(z)$ , то есть фактически ещё от  $N$  переменных. По аналогии с (13), обозначим через  $\delta r$  и  $\delta A_N$  векторы, компонентами которых являются частные производные  $r$  и  $A_N$  по показателям преломления  $j$ -го слоя  $n_j$ ,  $j \in [1, N]$ . Тогда из (15) следует, что

$$\delta r = \frac{(n_a - A_N) \delta A_N + (n_a + A_N) \delta A_N}{(n_a - A_N)^2} = \frac{2n_a \delta A_N}{(n_a - A_N)^2} = \frac{(1+r)^2}{2n_a} \delta A_N. \quad (17)$$

В свою очередь, из (16) следует

$$\delta R = r \delta \bar{r} + \bar{r} \delta r = 2 \operatorname{Re}(\bar{r} \delta r), \quad (18)$$

откуда

$$\delta R = \operatorname{Re} \left( \frac{\bar{r} (1+r)^2}{n_a} \delta A_N \right). \quad (19)$$

Таким образом, для вычисления выражения (13) необходимо найти  $\delta A_N$ . Продифференцировав (14), получаем рекуррентную формулу для первой производной адмитанса по  $n_j$ :

$$\frac{\partial A_j}{\partial n_j} = \frac{i\varphi_j - \frac{ikd_j}{n_j} A_{j-1}^2 + \frac{i}{2} \sin 2\varphi_j \left(1 + \frac{A_{j-1}^2}{n_j^2}\right) - \frac{2}{n_j} A_{j-1} \sin^2 \varphi_j}{\left(\cos \varphi_j + \frac{i}{n_j} A_{j-1} \sin \varphi_j\right)^2}. \quad (20)$$

Пользуясь формулой (20), сначала находим вектор  $\left\{ \frac{\partial A_1}{\partial n_1}, \frac{\partial A_2}{\partial n_2}, \dots, \frac{\partial A_N}{\partial n_N} \right\}$ .

Затем, используя очевидное соотношение (см. (14))

$$\frac{\partial A_k}{\partial n_j} = \frac{\frac{\partial A_{k-1}}{\partial n_j}}{\left(\cos \varphi_j + \frac{i}{n_k} A_{k-1} \sin \varphi_k\right)^2}, \quad k = j+1, \dots, N, \quad (21)$$

находится искомый вектор  $\delta A_N = \left\{ \frac{\partial A_N}{\partial n_1}, \frac{\partial A_N}{\partial n_2}, \dots, \frac{\partial A_N}{\partial n_N} \right\}$

Считая ИПП непрерывно дифференцируемым на всём отрезке  $[0, H]$ , можно получить условия на существования решения задачи (10) (они будут получены ниже). Однако исходный ИПП является кусочно-линейным и на границах слоев не имеет производной. Поэтому для получения условий необходимо каким-либо образом сгладить ИПП. Кроме того, сглаженный ИПП можно эффективно использовать при анализе обратной задачи - учитывая его вид, выяснять, какие материалы будут в данной задаче оптимальными, то есть давать минимальное число слоев. Сглаживание ИПП проводится с помощью сплайн-аппроксимации. Сглаженный ИПП обозначим  $\tilde{N}^s(z)$ .

### §3. Решение задачи синтеза с заданным набором материалов

Итак, имеем уравнение

$$\int_0^z n(\xi) d\xi = \tilde{N}^s(z). \quad (22)$$

Задача состоит в том, чтобы найти такое кусочно-постоянное распределение  $n(z)$ , которое с заданной точностью  $\delta$  приближает ИПП  $\tilde{N}^s(z)$  при дополнительных условиях на показатели преломления  $n_k$ ,  $k = 1, \dots, M$ .

При численном решении приходится рассматривать значения  $\tilde{N}^s(z)$  на некоторой сетке  $\Omega = \{z_i = ih, i = 0, 1, \dots, m, hm = H\}$  где  $H$  — толщина слоистой системы. Определим, при каких условиях на  $\delta, h$  и  $n_k$ ,  $k \in [1, M]$  решение задачи существует.

Тот факт, что  $n(z)$  является искомым решением, записывается так:

$$\left\| \tilde{N}''(z) - \int_0^z n(\xi) d\xi \right\|_{C[0, H]} \leq \delta, \quad (23)$$

или, по-другому,

$$-\delta \leq \tilde{N}''(z_i) - \int_0^{z_i} n(\xi) d\xi \leq \delta \quad \forall z_i \in \Omega. \quad (24)$$

Из непрерывной дифференцируемости функции  $\tilde{N}''(z)$  следует, что на отрезке  $[z_0, z_i]$  существует точка  $\zeta$  такая, что

$$\tilde{N}''(z_i) - \tilde{N}''(0) = \tilde{N}'''(\zeta) z_i. \quad (25)$$

Поскольку  $\tilde{N}''(0) = 0$ , то условие (25) переписывается в виде

$$\begin{cases} \int_0^z n(\xi) d\xi \leq \tilde{N}'''(\zeta) z_i + \delta \\ \int_0^z n(\xi) d\xi \geq \tilde{N}'''(\zeta) z_i - \delta \end{cases} \quad \forall z_i \in \Omega, \quad \forall \zeta \in [0, z_i]. \quad (26)$$

Теперь, учитывая, что  $\int_0^{z_i} n(\xi) d\xi = \sum_{k=1}^i n_k h = h \sum_{k=1}^i n_k$  и обозначая

$n_{\max} = \max_{1 \leq k \leq i} n_k$  и  $n_{\min} = \min_{1 \leq k \leq i} n_k$ , получим

$$ihn_{\min} \leq \int_0^{z_i} n(\xi) d\xi \leq ih n_{\max}, \quad (27)$$

откуда

$$\begin{cases} n_{\min} \leq \tilde{N}'''(\zeta) + \frac{\delta}{ih} \\ n_{\max} \geq \tilde{N}'''(\zeta) - \frac{\delta}{ih} \end{cases}, \quad \zeta \in [0, z_i] \quad (28)$$

Следовательно, для того, чтобы при заданном шаге сетки и наборе материалов существовало решение с указанной погрешностью, необходимо и достаточно выполнение условий

$$\begin{cases} \min_{1 \leq j \leq M} n_j \leq \inf_{z \in \Omega} \tilde{N}'''(z) + \frac{\delta}{H} \\ \max_{1 \leq j \leq M} n_j \geq \sup_{z \in \Omega} \tilde{N}'''(z) - \frac{\delta}{h} \end{cases} \quad (29)$$

Установив, при каких показателях преломления существует решение уравнения (22), можно непосредственно приступить к поиску  $n(z)$ . На каждом отрезке  $z \in [z_i, z_{i+1}]$ ,  $i = 0, \dots, N-1$ , таком, что

$$\|\tilde{N}^*(z_{i+1}) - \tilde{N}^*(z_i) - n_i(z_{i+1} - z_i)\|_C \leq \delta, \quad (30)$$

положим  $n(z) = n_i$ . Если условие не выполняется, то необходимо сменить материал. Предлагается два алгоритма решения этой задачи. В первом алгоритме материал  $n_i$  используется до тех пор, пока выполняется условие (30) - тем самым минимизируется число слоев системы, иногда принося в жертву точность приближения. В другом алгоритме, напротив, на каждом шаге выбирается тот материал, который обеспечивает минимум нормы в (30). После его работы число слоев, как правило, превосходит число слоев, полученное при первом алгоритме.

#### § 4. Вычислительный эксперимент

Идеи, изложенные в предыдущих параграфах, были использованы для синтеза пяти оптических покрытий. Каждое из покрытий реализует некоторый специфический коэффициент отражения: параболу, пандус (линейную зависимость коэффициента отражения от длины волны), низкочастотный фильтр (его также называют "горячим зеркалом", поскольку происходит отражение низких - инфракрасных - частот и пропускание высоких), коэффициент отражения, равный 0.5 во всём диапазоне длин волн, а также довольно необычный случай - отражение во всём диапазоне, за исключением области 5500-5600 ангстрем.

Результаты первоначальной минимизации для пяти задач, сформулированных выше, представлены на рисунках 1-5.

По оси абсцисс отложена длина волны падающего света, в нашем случае она изменялась от 4000 до 7000 ангстрем. По оси ординат отложен коэффициент отражения оптической системы, желаемый RDes и полученный RCalc. В качестве исходной бралась система, состоящая из 100 слоев равной толщины, общей толщиной 20000 ангстрем. Оценочный функционал (11) считался по формуле трапеций.

В качестве  $n_{\min}$  в градиентном методе мы брали значение 1.4, в качестве  $n_{\max}$  - 2.6, внешняя среда - воздух с показателем преломления 1, роль подложки играло стекло с показателем преломления 1.52. По полученным распределениям показателей преломления были построены интегральные характеристики. Затем они были сглажены и использованы для уменьшения числа слоев. Заметим, что число слоев и общая толщина исходной системы выбирались так, чтобы толщина каждого слоя была мала по сравнению с длиной волны. Это связано с тем, что всё вышеприведённые модели действуют только в тонких плёнках.



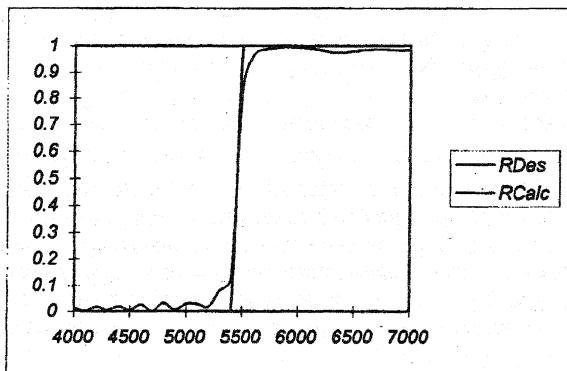
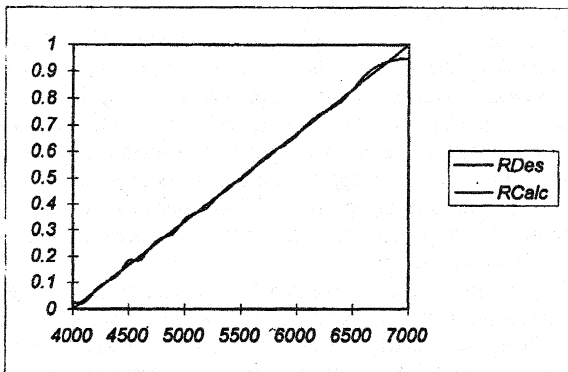
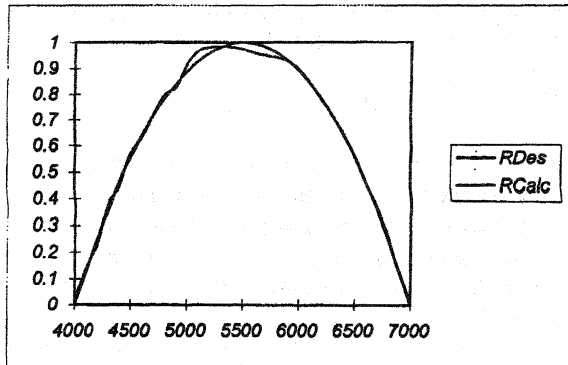


Рис. 1,2,3.

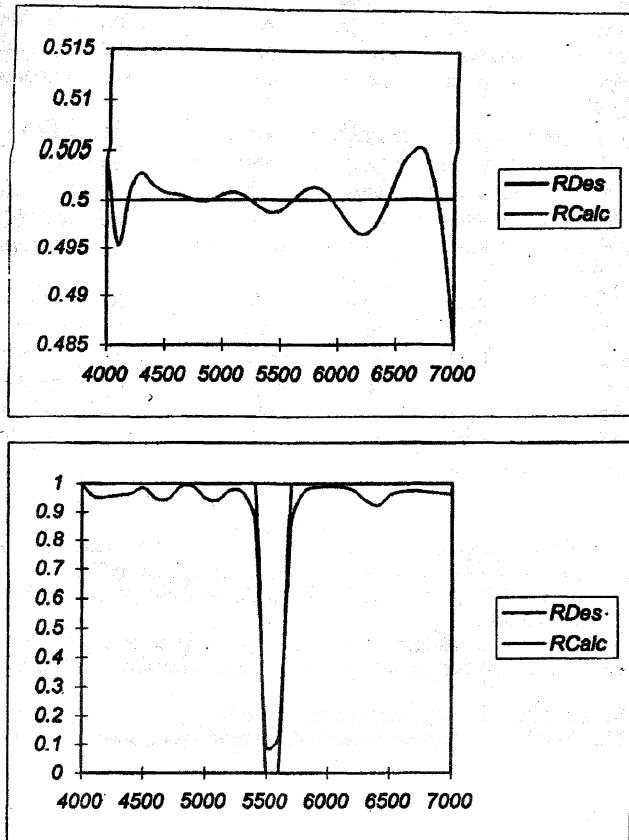


Рис. 4.5.

Полученные результаты ярко демонстрируют правомерность использования идеи ИПП. Действительно, близким интегральным характеристикам соответствуют близкие коэффициенты отражения.

Главным достоинством метода является возможность работы с несколькими, вообще говоря, произвольными материалами. Зная интегральный показатель преломления (ИПП) системы, можно получать условия разрешимости задачи синтеза с заданным набором материалов. Нахождение первого приближения ведётся без использования сложных методов - регуляризации, игольчатых вариаций. В этом, однако, состоит и недостаток - на толщины слоев, составляющих систему, наложены строгие ограничения.

Толщины слоев кратны некоторому числу, например 100 ангстрем, поэтому не всегда удаётся достичь высокой точности и сократить при этом число слоев. Например, нам так и не удалось улучшить результаты, полученные А.В.Тихонравовым. Однако тот факт, что в приведённом в нашей работе алгоритме используются именно фиксированные толщины, может быть и преимуществом в том случае, если технически возможно напылять только такого рода покрытия.

Метод интегральных характеристик может применяться не только в задаче синтеза, но и в задаче распознавания оптических покрытий, в которой по измеренной зависимости коэффициента отражения от длины волны требуется найти систему, его реализующую, на основе дополнительных данных. Вообще, на основе интегральных характеристик возможно разработать идеологию решения целого класса обратных задач.

Накопленные серии решений одномерных задач, одной из которых является задача, рассмотренная нами, могут быть весьма полезными при решении двумерных задач. Это могут быть, к примеру, задачи синтеза двумерных оптических покрытий, в которых слои не абсолютно плоские, а имеют гладкую нижнюю границу - например, покрытия, наносящиеся на линзы.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 99-01-00089.

#### Литература

1. Гласко В.Б., Тихонов А.Н., Тихонравов А.В. О синтезе многослойных покрытий. // Журнал вычислительной математики и математической физики, 1974, т. 14, №1, с. 135-144.
2. Furman Sh., Tikhonravov A.V. Basics of optics of multilayer systems. Editions Frontieres, Gif-sur-Yvette, France, 1992.
3. Дмитриев В.И. Интегральные характеристики в обратных задачах оптики. // Вестник Московского университета, серия 15, "Вычислительная математика и кибернетика" 1998, №4, с. 10-13.
4. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М., 1973.
5. Васильев Ф.П. Численные методы решения экстремальных задач. М., 1980.