

## УСТОЙЧИВЫЙ МЕТОД ВОССТАНОВЛЕНИЯ ТЕНЗОРА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ ПО СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКИМ ДАННЫМ

*А. А. Хохлов*

Российский университет дружбы народов, Москва

Статья посвящена математическому моделированию взаимодействия электромагнитных волн оптического диапазона с многослойными оптическими структурами, применение которых широко распространено в настоящее время. Рассмотрен устойчивый метод восстановления свойств одного слоя по измеренным или требуемым характеристикам. Приводятся ссылки на работы в этой области.

This paper is devoted to mathematical modeling of interaction of electromagnetic waves of optical range with multilayer optical structures, the application of which is widely distributed today. A robust method of calculation of optical properties for one layer using measured or required parameters is described here. Also we give references to scientific works in this area.

PACS: 78.67.Pt

Моделирование взаимодействия ТЕ- и ТМ-поляризаций с оптическими структурами, характерные размеры которых могут быть значительно меньше длины волны видимого диапазона, представляет большой практический интерес в связи с тенденциями миниатюризации в микроэлектронике и перспективами развития оптоэлектроники. Рассмотрим лишь некоторые применения результатов решения этой задачи. В США и Европе активно реализуются программы по развитию солнечной энергетики, основанной на использовании солнечных батарей, диагностика, проектирование и оптимизация работы которых требует точного учета взаимодействия света с оптическими многослойными покрытиями. Развиваются технологии создания гибких дисплейных покрытий нового поколения, помимо этого производители улучшают характеристики существующих LCD- и LED-дисплеев, в которых одним из значимых при формировании изображения элементов является многослойное тонкопленочное покрытие матрицы. В современных оптоэлектронных устройствах востребованы высококачественные зеркала, поляризаторы (общей толщиной менее 1 мкм) и многие другие элементы дифракционной оптики. Также надо отметить использование многослойных структур в медицине. Из таких структур на основе коллагеновых пленок изготавливают различные импланты, одним из примеров которых является искусственная роговица глаза.

Решаемые в рамках этого направления исследований задачи принято делить на два класса. Прямые задачи включают в себя моделирование взаимодействия света с различными многослойными изотропными и анизотропными структурами. Обратные задачи

решаются в процессе проектирования многослойных оптических структур с заранее заданными свойствами. Обратные задачи в общем случае являются некорректными. Обычно их решают с помощью итеративных алгоритмов оптимизации, что влечет необходимость многократного решения прямых задач. Это делает особо важным скорость работы и устойчивость используемых численных методов. Общих методов решения обратных задач не существует. Следует отметить алгоритмы, построенные с использованием метода тихоновской регуляризации.

В качестве метода решения прямой задачи автором используется модифицированный коллективом лаборатории «Оптика наноструктур» РУДН метод Берремана [1]. Рассматривается система уравнений Максвелла для немагнитных сред при отсутствии сторонних токов и зарядов в определенной декартовой системе координат. В этой системе координат система уравнений Максвелла представляет собой систему из шести уравнений: четырех дифференциальных и двух алгебраических. Путем некоторых подстановок данную систему можно редуцировать к однородной системе из четырех дифференциальных уравнений первого порядка. Начальными условиями системы являются две тангенциальные компоненты падающей волны, в качестве решения получаем по две тангенциальные компоненты отраженной и прошедшей волн. В общем случае оптическая система «разбивается» на слои, в каждом из которых можно считать характеристики слоя (диэлектрическую проницаемость) постоянными, при этом матрица коэффициентов  $\Delta$  системы дифференциальных уравнений также будет постоянной. Она составляется из элементов тензора диэлектрической проницаемости слоя оптической системы. Следует отметить, что в большинстве реальных задач диэлектрические свойства пленок сами по себе без абстрактного «разбиения» постоянны вдоль выделенного направления. Для каждого слоя решение системы с постоянными коэффициентами можно записать в виде

$$\psi(h) = \exp\left(\frac{i\omega h \Delta}{c}\right) \psi(0) = P(h)\psi(0), \quad (1)$$

где  $h$  — толщина слоя, а  $P(h)$  принято называть матрицей Берремана для одного слоя. Векторы  $\Psi$  состоят из компонент полей отраженного, прошедшего и падающего света. В случае моделирования многослойной системы решение уравнения выглядит следующим образом:

$$\Psi(h) = \prod_{i=1}^n P(h_i)\Psi(0). \quad (2)$$

С точки зрения физики смысл вышеприведенного уравнения заключается в соблюдении граничных условий непрерывности тангенциальных компонент полей при переходе между слоями. Поэтому в рамках этого метода задачу моделирования можно ставить для сколь угодно сложных разнородных слоистых структур.

Для нахождения матрицы Берремана необходимо использовать устойчивый способ нахождения экспоненциальной функции от комплекснозначной матрицы коэффициентов системы дифференциальных уравнений [2]. Изначально самим Берреманом было предложено разложение матричной экспоненты в ряд Тейлора с точностью до третьего члена, однако такой подход позволяет работать лишь только с тонкими слоями и дает большую погрешность. В работе Палто [3] предложено сначала использовать модифицированный метод Лагерра для нахождения собственных значений матрицы коэффициентов, а затем формулу Сильвестра–Лагранжа для нахождения функции от матрицы по известным

собственными значениям. Однако в случаях, когда собственные значения одинаковы, в формуле Сильвестра–Лагранжа возникает неопределенность деления на ноль, что делает предложенный метод не универсальным. В рамках исследования метода автором было предложено применение преобразования подобия для нахождения функции от матрицы и усовершенствованного алгоритма Якоби для нахождения собственных значений и векторов. Такой подход дает устойчивые решения системы дифференциальных уравнений для любых начальных условий. После нахождения переходной матрицы  $P(h)$  для всей моделируемой системы слоев приступаем к решению СЛАУ 4-го порядка, в результате решения которой становятся известны компоненты отраженной и прошедшей волн, и можно найти энергетические коэффициенты пропускания  $T$  и отражения  $R$  как отношение потоков энергии прошедшей и отраженной волны к потоку энергии падающей волны соответственно. Методика решения прямой задачи, используемая автором, подробно описана в работе [4].

Перейдем к рассмотрению обратной задачи и методов ее решения. Фактически это задача восстановления тензора диэлектрической проницаемости и толщины слоя по экспериментально полученным энергетическим коэффициентам отражения и пропускания на определенном диапазоне длин волн для разных углов падения. В качестве исходных данных можно также взять требуемые свойства проектируемой структуры, и тогда это задача синтеза. Следует заметить, что в общем случае такие задачи являются некорректными [4], и для их решения необходимо использовать методы регуляризации.

Существует несколько подходов к решению обратных задач. Среди изученных автором хочется отметить методики, разработанные в лаборатории «Quantum Materials Group» [5]. Они дают возможность восстанавливать диэлектрическую проницаемость при помощи дисперсионных соотношений Крамерса–Кронига. Суть метода заключается в следующем. Для комплексного коэффициента отражения Френеля (в случае нормального падения световой волны) записывается аналог соотношений Крамерса–Кронига между коэффициентом отражения и фазой коэффициента Френеля. Далее предлагается составить функцию, квадратично характеризующую разницу между вычисленными и измеренными оптическими характеристиками и минимизировать ее. Чтобы она зависела только от мнимой части диэлектрической проницаемости, используются соотношения Крамерса–Кронига. С точки зрения физики функция, описывающая диэлектрическую проницаемость, должна быть положительна и интегрируема. Однако в пространстве таких функций задача минимизации некорректна, и предлагается решать задачу в пространстве, в котором диэлектрическая проницаемость является линейной комбинацией некоторого количества базисных функций, представляющих собой хорошо известные осцилляторы Лоренца. Минимизацию предлагается проводить методом Левенберга–Марквардта [6].

Автором используется иной метод, изначально разработанный руководителем лаборатории «Оптика наноструктур» Российского университета дружбы народов К. П. Ловецким в сотрудничестве с коллегами из Стэнфордского университета (США). Он позиционирован как устойчивый численный алгоритм восстановления оптических характеристик слоистых анизотропных систем по измеренным спектрофотометрическим данным, основан на многопараметрической оптимизации нелинейного функционала с применением соотношений Крамерса–Кронига для сужения пространства решений. Данный метод находится в стадии непрерывных улучшений, доработок с целью повышения скорости вычислений без потери устойчивости. Автор также принимает участие в этой работе. Данный метод отличается от метода, предложенного в [5], большей точностью и универ-

сальностью применения. Это достигается за счет использования базиса, состоящего из более гладких функций для приближения диэлектрической проницаемости и более полного учета априорной информации. Также он позволяет рассчитывать и оптимизировать толщину оптической системы. Рассмотрим подробнее алгоритм восстановления свойств одного слоя.

Неизвестные характеристики описываются вектором

$$\bar{x}(\lambda) = \{\varepsilon'_A(\lambda), \varepsilon''_A(\lambda), \varepsilon'_B(\lambda), \varepsilon''_B(\lambda), \varepsilon'_C(\lambda), \varepsilon''_C(\lambda), \phi, \theta, \psi, h\}, \quad (3)$$

включающим в себя все характеристики слоя (действительные и мнимые части компонентов тензора диэлектрической проницаемости, углы Эйлера и толщину слоя). Мнимая часть тензора диэлектрической проницаемости приближается линейной комбинацией базисных функций вида

$$\text{Im } \hat{\varepsilon} = \varepsilon_0 + \sum_{j=1}^N A_j \exp \left\{ -\frac{(\omega - \omega_j)^2}{\Delta_j} \right\}. \quad (4)$$

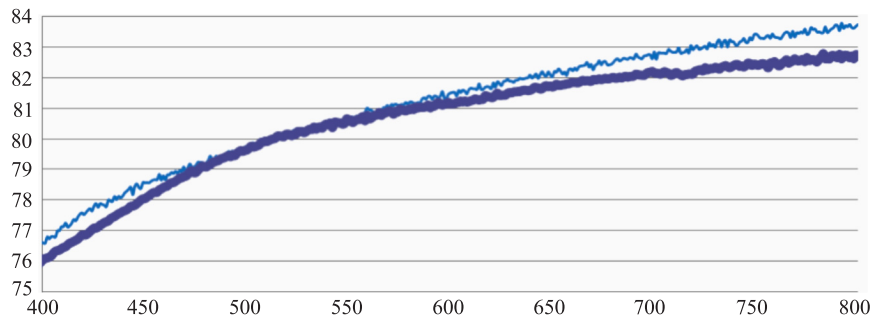
Величины,  $A_j, \omega_j, \Delta_j, j = 1, \dots, N$ , а также толщина слоя анизотропного материала являются искомыми параметрами, по которым затем проводится оптимизация. Известно, что тензор диэлектрической проницаемости  $\hat{\varepsilon}$  является аналитической в верхней комплексной полуплоскости функцией и стремится к нулю для больших частот [7], а значит, он удовлетворяет соотношениям Крамерса–Кронига, в соответствии с которыми мы можем вычислить его действительную часть:

$$\text{Re } \hat{\varepsilon} = 1 + \frac{1}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\text{Im } \hat{\varepsilon}}{x - \omega} dx. \quad (5)$$

Составляем целевую функцию, характеризующую квадратичную разность между требуемыми и вычисляемыми параметрами:

$$F(\bar{x}) = \int_{\lambda} \left( \sum_{i=1}^n (\tilde{T}_i(\lambda) - T_i(\bar{x}(\lambda), \lambda))^2 \right) d\lambda + \int_{\lambda} \left( \sum_{i=1}^n (\tilde{R}_i(\lambda) - R_i(\bar{x}(\lambda), \lambda))^2 \right) d\lambda. \quad (6)$$

Далее минимизируем ее методом Нелдера–Мида либо другим методом многопараметрической оптимизации нулевого порядка. Соотношения Крамерса–Кронига в данном случае выступают в качестве дополнительных условий, благодаря которым можно сузить пространство, в котором ищется диэлектрическая проницаемость, и тем самым перевести задачу в разряд корректных. Необходимо отметить, что при расчете реальных, особенно многослойных, структур время, требуемое для проведения оптимизации, велико даже при использовании современной вычислительной техники. Возникает необходимость использовать методы оптимизации, которые используют первую или вторую производную целевой функции, это могло бы существенно ускорить процесс. Однако аналитическое вычисление производной сильно затруднено ввиду сложности функционала, а численное недопустимо из-за большой погрешности. Решение этой задачи входит в круг интересов и направлений деятельности автора.



Сравнение коэффициентов пропускания, полученных в результате измерений (жирная линия) и решения прямой задачи по восстановленному показателю преломления (тонкая линия)

На рисунке приведен коэффициент пропускания акриловой пластмассы для длин волн от 400 до 800 нм. Жирная кривая представляет собой результат измерения на спектрофотометре Lambda 950, а тонкая — результат решения прямой задачи по восстановленному при помощи решения обратной задачи комплексному показателю преломления. Видно, что отличия незначительны, что говорит о точности и устойчивости метода.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Berreman D. W. Optics in Stratified and Anisotropic Media:  $4 \times 4$  Matrix Formulation // J. Opt. Soc. 1972. No.62. P. 502–510.
2. Гантмахер Ф. Р. Теория матриц. М.: Наука, 1966.
3. Палто С. П. Алгоритм решения оптической задачи для слоистых анизотропных сред // ЖЭТФ. 2001. Т. 119, № 4.
4. Севастьянов Л. А., Ловецкий К. П., Хохлов А. А. Моделирование прохождения света через многослойные анизотропные покрытия. Восстановление тензора диэлектрической проницаемости для однослойного анизотропного образца // Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем: Материалы междунар. науч. конф. «Моделирование нелинейных процессов и систем». 2008. Т. 2, вып. 12. С. 484.
5. Kuzmenko A. B. Kramers–Kronig Constrained Variational Analysis of Optical Spectra. cond-mat/0503565v1. 2005.
6. Ловецкий К. П. и др. Математический синтез оптических наноструктур. М.: Изд-во Рос. ун-та дружбы народов, 2008. 145 с.
7. Агранович В. М., Гинзбург В. Л. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. М.: Наука, 1965.