

**Методика розв'язку обернених задач синтезу
і аналізу оптичних шаруватих покриттів
із захисною плівкою**

Розглянуто математичну модель задач оптики для шаруватого середовища з неоднорідними шарами. Виконано постановку та проаналізовано розв'язок обернених задач синтезу і аналізу оптики шаруватих середовищ як математичних оптимізаційних задач. Створено програмне забезпечення, яке дозволяє проводити їх розв'язок в рамках даної моделі. Теоретично показано вплив об'ємної неоднорідності вуглецевого шару на фотометричні і еліпсометричні характеристики. Проведено моделювання різномісних інтерференційних багатошарових покриттів із верхнім алмазоподібним шаром, який одночасно є функціонально активним оптичним шаром і виконує роль захисної плівки.

Ключові слова: захисна плівка, обернена задача, оптичне шарувате покриття, оптичні константи, неоднорідність шару.

Вступ. Використання механічно стійкої гідрогенізованої алмазоподібної вуглецевої плівки (а-С:Н) в якості захисного покриття для ІЧ просвітлюючих елементів значно покращує їх механічні експлуатаційні характеристики, а при правильному моделюванні конструкції багатошарового покриття і її технологічній реалізації не погіршує оптичні [1]. Проектування оптичного покриття з захисним шаром має ряд особливостей, які не реалізовані в сучасному програмному забезпеченні [2]. При вивченні фізичних властивостей вуглецевих плівок для інтерференційної ІЧ оптики було виявлено, що при формуванні оптичного покриття на підкладках з різних матеріалів можуть утворюватися плівки з перехідними областями [3]. Також часткова неоднорідність і відсутність різких границь були виявлені при дослідженні багатошарових покриттів із фторидів і оксидів рідкоземельних матеріалів. Більш глибокому аналізу неоднорідності матеріалів плівок та її впливу на оптичні характеристики інтерференційних елементів перешкоджала відсутність програмного забезпечення для гнучкого розв'язку різномісних обернених задач оптики шаруватих середовищ для еліпсометричних і фотометричних досліджень. В першу чергу — задачі проектування оптичних багатошарових покриттів, тобто задачі пошуку такої конструкції покриття, яке б задовольняло заданим спектральним характеристикам. По друге, в зв'язку з досягнутим в останні роки значним технологічним прогресом і створенням нових плівкоутворюючих матеріалів, особливого значення набувають обернені задачі типу розпізнавання. До їх числа входять задачі про визначення оптичних властивостей матеріалів тонких покриттів по спектральних фотометричних і/або еліпсометричних даних. Очевидно, що більш прискіпливе математичне моделювання і врахування якомога більшої кількості достовірних факторів, які впливають на оптичні характеристики оптичного елемента, повинно дозволити підвищити експлуатаційні якості виробу та зберегти значний відсоток ресурсів, витрачених на виробництво. Тому завжди актуальною залишається

поставлена в даній роботі проблема, присвячена розробці математичних моделей та алгоритмів чисельного розв'язку обернених задач типу синтезу і розпізнавання оптики шаруватих середовищ, вдосконаленню чисельних методів розрахунку спектральних характеристик оптичних неоднорідних покриттів, створенню гнучкого програмного забезпечення, необхідного для синтезу та аналізу оптичних інтерференційних покриттів з присутнім в їх конструкції механічно стійким захисним шаром.

Математична модель прямої задачі оптики шаруватих середовищ.

Діелектричні властивості шаруватого середовища постійні на кожній площині перпендикулярній до фіксованого напрямку (рис. 1).

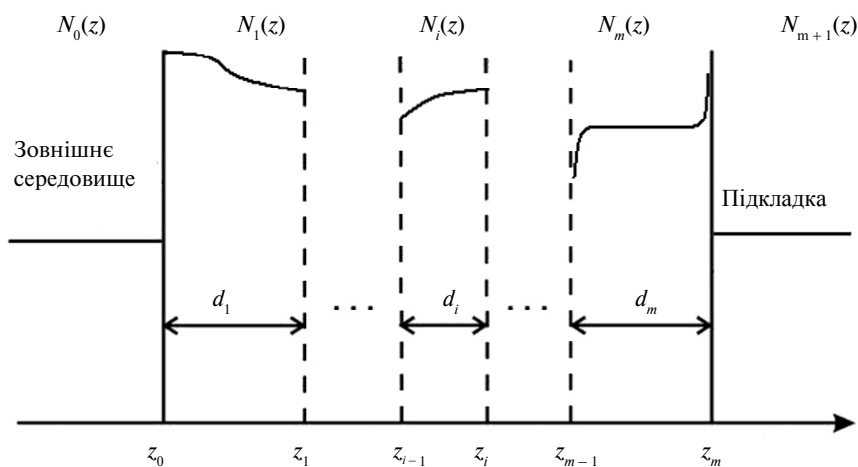


Рис. 1. Модель оптичного шаруватого покриття.

Область $z > z_m$ відповідає підкладці з показником заломлення N_{m+1} , область $z < z_0$ — навколишнє середовище з показником заломлення N_0 . Саме ж багатошарове покриття знаходиться в інтервалі (z_0, z_m) і складається з m шарів товщиною d_i і показником заломлення $N_i(z)$, де $N_i = n_i - ik_i$ — комплексний показник заломлення, $i = 1, 2, \dots, m$. Захисний шар контактує з зовнішнім середовищем, має показник заломлення N_1 і займає інтервал (z_0, z_1) . Всі матеріали шарів є немагнітні (магнітна проникність рівна одиниці) і в них відсутні об'ємні заряди. Таким чином, багатошарове покриття задане довільною кусково-неперервною комплекснозначною функцією $N = N(z)$.

Якщо плоска електромагнітна монохроматична хвиля циклічної частоти ω (залежність від часу у вигляді $\exp(i\omega t)$) падає з зовнішнього середовища на покриття під кутом φ , то рівняння Максвелла приводяться до наступних задач Коші [4]:

для випадку s -поляризованого світла

$$\begin{aligned} \frac{du}{dz} &= ikv; & \frac{dv}{dz} &= ik[N^2(z) - a^2]u; \\ u|_{z=z_0} &= 1; & v|_{z=z_0} &= q_s^s; \end{aligned} \quad z_0 < z < z_m, \quad (1)$$

для випадку p -поляризованого світла

$$\begin{aligned} \frac{du}{dz} &= ik \left[1 - \frac{a^2}{N^2(z)} \right] v; & \frac{dv}{dz} &= ikN^2(z)u; \\ u|_{z=z_0} &= 1; & v|_{z=z_0} &= q_s^p; \end{aligned} \quad z_0 < z < z_m, \quad (2)$$

де $k = \omega/c$ — хвильове число у вакуумі; $a = N_0 \sin \varphi$. Через $q_s^{s,p}$ позначені ефективні показники заломлення підкладки для випадків s - і p -поляризацій. В загальному випадку ефективний показник q для матеріалу з показником заломлення N визначається як

$$q^{s,p} = \begin{cases} \sqrt{N^2 - a^2}, & \text{для } s\text{-поляризації}; \\ N^2 / \sqrt{N^2 - a^2}, & \text{для } p\text{-поляризації}. \end{cases}$$

Матричні методи дають зручний для програмування математичний апарат для розв'язку цих задач. Першим їх запропонував Ф. Абелес, визначивши характеристичну матрицю оптичної шаруватої системи [5]. Хейфілд і Уайт використали матрицю розсіювання для опису загальних властивостей відбивання і пропускання багат шарового покриття з ізотропними шарами [6]. Берреман розширив матричний метод Абелеса на випадок анізотропних планарних структур [7]. З елементів матриці за відповідними формулами можна визначити повні комплексні амплітудні коефіцієнти відбивання $r_{p,s}$ (коефіцієнти Френеля) і пропускання $t_{p,s}$ для p - і s -поляризованого випромінювання. По відомих $r_{p,s}$ і $t_{p,s}$ розраховують інші оптичні характеристики шаруватих систем. Енергетичні коефіцієнти відбивання $R_{s,p}$ і пропускання $T_{s,p}$ визначають через співвідношення

$$R = |r|^2; \quad T = \frac{n_{m+1} \cos \Phi_{m+1}}{n_0 \cos \Phi_0} |t|^2. \quad (3)$$

В останньому рівнянні (і надалі) опущено індекси поляризації, якщо вони не несуть змістовного навантаження. Коефіцієнти відбивання і пропускання для неполяризованого випромінювання визначаються виразами

$$R = \frac{R_p + R_s}{2}; \quad T = \frac{T_p + T_s}{2}. \quad (4)$$

Еліпсометричний параметр Δ визначає відносну зміну різниці фаз для p - і s -компонент коливання:

$$\Delta = \delta_p - \delta_s = \arg r_p - \arg r_s. \quad (5)$$

Кут Ψ визначає відносну зміну азимуту відновленої лінійної поляризації:

$$\text{tg} \Psi = \frac{r_p}{r_s}. \quad (6)$$

При еліпсометричному чи фотометричному дослідженні покриттів на прозорих плоско-паралельних підкладках необхідно враховувати наявність відбивання світла від задньої сторони підкладки. Підкладки мають товщини значно більші, ніж довжина когерентності світла, тому необхідно розглядати співвідношення для потоків енергії, що поширюються у двох взаємно протилежних напрямках. З цих співвідношень легко одержати наступні формули

для визначення коефіцієнтів пропускання і відбивання з врахуванням другої сторони підкладки:

$$\hat{T} = \frac{vT_0T}{1 - v^2R_0R^-}; \quad \hat{R} = R + \frac{v^2R_0T^2}{1 - v^2R_0R^-}, \quad (7)$$

де T і R — коефіцієнти пропускання і відбивання багат шарового покриття без врахування впливу другої сторони підкладки, що розраховують по формулах (3), R^- — коефіцієнт відбивання покриття при падінні світла з боку підкладки; T_0 і R_0 — коефіцієнти пропускання і відбивання однієї сторони підкладки без покриття; $v = \exp\left(-\frac{4\pi}{\lambda} \operatorname{Im} \sqrt{N_{m+1}^2 - N_0^2 \sin^2 \varphi} \cdot d_{m+1}\right)$ — коефіцієнт втрат, обумовлених поглинанням підкладки; d_{m+1} — товщина підкладки. [8]

Амплітудні коефіцієнти відбивання світла від деякого оптичного шаруватого середовища залежать від профілю його показника заломлення $N = N(z)$ (рис. 2), а також визначаються умовами проведення експерименту, такими як оптичні властивості навколишнього середовища $N_0 = n_0 - ik_0$, кут падіння світла на зразок φ_0 , довжини хвилі випромінювання λ , тощо.

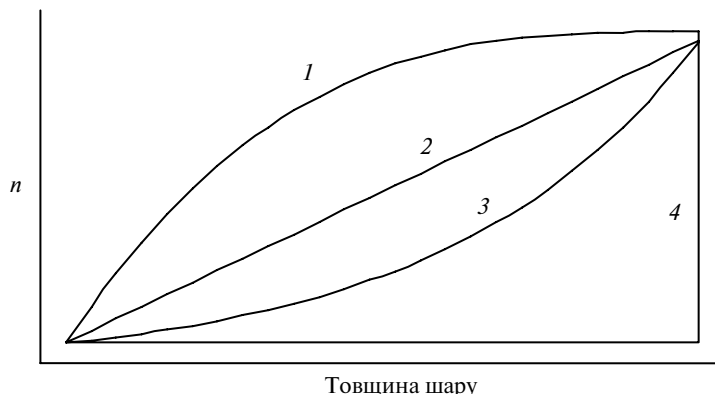


Рис. 2. Приклади розподілу показника заломлення в неоднорідному шарі: 1 — квадратичний; 2 — лінійний; 3 — експоненціальний; 4 — східчастий.

Спектральний вигляд коефіцієнтів Френеля залежить від дисперсії оптичних констант матеріалів. Оптичні константи матеріалів можуть бути задані таблично або аналітично — формулами, які описують дисперсії, і відповідним набором коефіцієнтів. Наприклад, дисперсії SiO_2 описують моделлю Коші, дисперсії Si, SiGe апроксимують за законом гармонічного осцилятора, а Si, HfO_2 — осцилятором Тауца-Лорентца і т. д. Також для опису дисперсії оптичних констант твердих розчинів використано формули апроксимацій Бругемана (ЕМА), складної двійкової (СВА), Бірефрігензе (FBA).

Дисперсія показника заломлення має більший вплив на спектральні характеристики, ніж неоднорідність шару. Дійсно, відносна зміна показника заломлення з товщиною шару звичайно не перевищує одиниць відсотків, в той час як відносна зміна показника заломлення в досліджуваному діапазоні довжин хвиль звичайно становить $\sim 10\%$. Такі варіації не є малими в інтегральному змісті, тому дисперсія показника заломлення включена в роз-

гляд у першу чергу і у випадку малої неоднорідності показник заломлення $N(\lambda, z)$ може бути представлена у факторизованій формі:

$$N = N(\lambda, z) = q(z) n(\lambda) - ik(\lambda). \quad (8)$$

Рівняння (8) дозволяє розділити фізичні ефекти, викликані дисперсією і неоднорідністю. Функція $N(\lambda)$ описує дисперсійні властивості показника заломлення матеріалу шару, в той час як функція $q(z)$ описує просторову залежність властивостей матеріалу шару, тобто неоднорідність. Програмне забезпечення дозволяє моделювати лінійний, квадратичний, гаусів, логарифмічний та поліноміальний профілі показника заломлення (див. рис. 2).

Відзначимо, що для слабкопоглинаючих шарів при існуючій точності вимірів нереалістично шукати просторову залежність коефіцієнта поглинання. Тому розглядають лише неоднорідність показника заломлення.

Отже, при такому підході до побудови математичної моделі покриття по заданим показнику заломлення $N = N(\lambda, z)$ і фізичній товщині d_j , $j = 1, \dots, m + 1$ можна розрахувати спектральні і/або кутові залежності еліпсометричних кутів $\Psi(\lambda)$, $\Delta(\lambda)$, коефіцієнтів пропускання $T(\lambda)$, $T_p(\lambda)$, $T_s(\lambda)$, $\hat{T}(\lambda)$, $\hat{T}_p(\lambda)$, $\hat{T}_s(\lambda)$ та відбивання $R(\lambda)$, $R_p(\lambda)$, $R_s(\lambda)$, $\hat{R}(\lambda)$, $\hat{R}_p(\lambda)$, $\hat{R}_s(\lambda)$ і, таким чином, визначити оператори прямих задач оптики шаруватих середовищ.

Розв'язок обернених задач типу розпізнавання. Хоча еліпсометрія і фотометрія використовують різні методики дослідження і дозволяють вимірювати різні характеристики шаруватого покриття, вони мають і багато спільного. Наприклад, вимірювальним інструментом оптичної фотометрії і еліпсометрії є світловий промінь. При правильному виборі спектрального діапазону й інтенсивності світлового променя ці методи не руйнують і не збуджують досліджувану або контрольовану систему.

Методи спектральної фотометрії базуються на експериментальному вимірюванні і подальшому дослідженні спектральних залежностей енергетичних коефіцієнтів відбивання R і/або пропускання T [9]. При цьому довжина хвилі і кут падіння світла на зразок змінюються дискретно в деяких діапазонах довжин хвиль $\lambda_i \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$, $i = 1, \dots, M$, і кутів падіння $\varphi_i \in [\varphi_{\min}, \varphi_{\max}]$, $i = 1, \dots, L$. Сучасні спектрофотометри дозволяють одночасно реєструвати спектри коефіцієнтів відбивання і/або пропускання для s - і p -компонент відбитого і/або заломленого променя світла. Таким чином, експериментальні вимірювання являють собою набір даних $T_{s,p} = T_{s,p}(\lambda, \varphi)$ і/або $R_{s,p} = R_{s,p}(\lambda, \varphi)$.

Суть еліпсометрії полягає в точній кількісній фіксації зміни поляризації світлового променя при його відбиванні від досліджуваної системи. Зміну параметрів еліпса поляризації при відбиванні променя світла від поверхні зразка прийнято характеризувати еліпсометричними кутами (параметрами) Ψ і Δ [10].

З врахуванням (5) і (6) відносний коефіцієнт відбивання запишеться як

$$\rho = \frac{r_p}{r_s} e^{i(\delta_p - \delta_s)} = \text{tg} \Psi e^{i\Delta}. \quad (9)$$

нал (11) оцінює відхилення теоретичних значень спектральних параметрів від відповідних експериментальних значень. Вектор параметрів покриття B визначений на деякій множині Q в l -вимірному просторі, яка обмежена умовами фізичної коректності (наприклад, $n = \text{Re}(N) \geq 1$, $k = -\text{Im}(N) \geq 0$, $d > 0$, ...) і задається системою нерівностей

$$b_{\min} \leq b_i \leq b_{\max}, \quad i = 1, 2, \dots, l. \quad (13)$$

Таким чином, після побудови моделі покриття обернена задача аналізу зводиться до мінімізації неув'язки (11) на деякому компакт Q :

$$B_0 = \arg \inf_{B \in Q} F(B). \quad (14)$$

Навіть у найпростішому випадку функція $F(B)$ є не опуклою і багатоекстремальною (рис. 3). Форма рельєфу функціонала $F(B)$ якісно не змінюється при переході до інших покриттів чи при виборі інших характеристик. Мінімізація функціонала $F(B)$ вимагає застосування трудомістких з погляду обчислювальних витрат методів, які здатні досить надійно знаходити глобальний мінімум. Методи оптимізації можна розділити на дві групи: методи, які вимагають обчислення похідних (методи високого прядку), і методи, які не використовують похідних (методи прямого пошуку) [11]. Як правило, при розв'язку задач нелінійного програмування методи, які використовують похідні, сходяться швидше, ніж методи прямого пошуку. Однак при використанні методів високого порядку при розв'язку обернених задач оптики шаруватих середовищ доводиться зіштовхуватись з двома основними перешкодами. По-перше, досить важко, а часто і неможливо знайти похідні у вигляді аналітичних функцій. А при обчисленні похідних з допомогою різницьових схем виникають похибки особливо великі в околі екстремумів. По-друге, часто машинний час, затрачений на "підготовку" задачі до оптимізації (знаходження похідних), може перевищувати час необхідний для оптимізації цієї ж задачі методами прямого пошуку. Розв'язок оберненої задачі було реалізовано найбільш ефективними для такого типу задач методами з кожної групи: методом Левенберга-Марквардта [12—14] і методом Нелдера-Міда (деформованого багатокутника) [15]. Їхня "працездатність" залежить від конкретної задачі (рельєфу цільової функції), однак метод Левенберга-Марквардта показує кращий результат для більшості випадків.

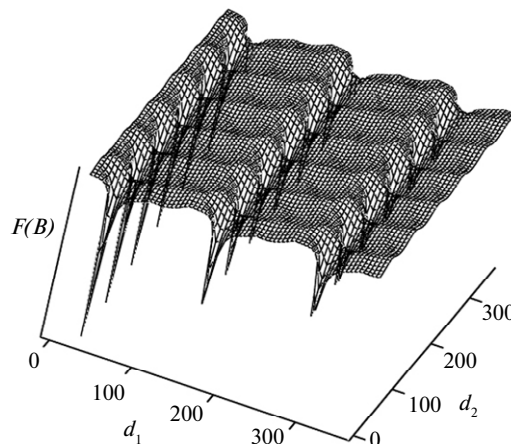


Рис. 3. Рельєф цільової функції $F(B)$ для фотометричних досліджень двошарового вуглецевого покриття в залежності від товщини графітоподібної і алмазоподібної плівок.

Для функціонала $F(B)$ характерна різка “яровидність” ізоліній (особливо при розв’язку задач еліпсометрії), тобто існування в просторі параметрів напрямів, вздовж яких функціонал $F(B)$ залишається практично незмінним. Очевидно, чим більша “довжина яру”, тим гірша точність оцінки відповідного параметра. Звідси виникає проблема нестійкості при мінімізації $F(B)$, яка характеризує погану обумовленість оберненої параметричної задачі, а при нескінченній “довжині яру” — її виродженість. Розроблене програмне забезпечення дозволяє використовувати декілька способів для підвищення стійкості розв’язку: зменшення меж апріорної інформації (13), пошук глобального розв’язку і використання наступного критерію зупинки ітераційної процедури:

$$F(B_0) \leq \chi_{2M-l}^2, \quad (15)$$

де χ_{2M-l}^2 — квантиль; χ^2 — розподіл з $2M-l$ ступенями свободи. Критерій (15) означає, що в якості розв’язку береться точка, значення функціонала в якій узгоджується з похибкою η_X вимірювання значення характеристики X і є статистичним узагальненням принципу неув’язки, який використовується для вибору параметрів регуляризації в методах розв’язку некоректних задач [16, 17].

Погана обумовленість обернених задач породжує одну важливу обставину — зупинка процедури мінімізації рівномірно може відбутися в будь-якій точці на “дні яру”, яка задовольняє критеріям зупинки (в тому числі критерію (15)) і залежить лише від вибору початкової точки ітераційного процесу. Щоб уникнути цієї залежності, формують вибірку з L векторів B_0 . Для цього замість початкового вектора B^0 беруть L випадкових точок всередині допустимої множини Q (13) з рівною ймовірністю $1/L$. Для кожної початкової точки $B_i^{(0,j)}$, $1 \leq j \leq L$ знаходять точку мінімуму $B_{0i}^{(j)}$ функціоналу $F(B)$, послідовність яких складає вибірку в просторі оцінюваних параметрів. Оцінку знайдених невідомих параметрів виконує з використанням нелінійного методу оцінки по медіані вибірки [18]:

$$\hat{B}_i^{\text{med}} = \text{med}\{B_{0i}^{(j)}\} = \begin{cases} B_i^{(L/2+1)}, & L - \text{нечетне}; \\ \frac{1}{2}(B_i^{(L/2)} + B_i^{(L/2+1)}), & L - \text{четне}. \end{cases}$$

Статистична обробка розв’язків погано обумовлених обернених задач оптики шаруватих середовищ дає можливість поетапного формування нових меж пошуку, що особливо важливо при відсутності достовірної апріорної інформації про невідомі параметри, і відповідно, підвищення точності оцінки параметрів системи [19].

Таким чином, розв’язок оберненої задачі типу проектування зводиться до розв’язку математичної оптимізаційної задачі.

Розв’язок обернених задач типу проектування. Коли розв’язані обернені задачі розпізнавання і визначені параметри моношарів, виникає задача проектування багат шарового покриття з наперед заданими оптичними характеристиками. Найширше в техніці використовують оптичні покриття для одержання високих коефіцієнтів відбивання (дзеркальні покриття), для збільшення пропускання і покращення контрастності оптичних систем (просвітлювальні покриття), для спектрального і енергетичного розділення і скла-

дання оптичних сигналів та їх хроматичної корекції (вузькосмугові, смугові, відрізаючі фільтри), для поляризації випромінювання (інтерференційні поляризатори). Тобто існує задача моделювання багатошарових покриттів, які б забезпечували потрібні спектральні характеристики. Результатом розв'язку задачі проектування є конструкція покриття, яке забезпечує властивості досить близькі до заданих. В найпоширенішому випадку конструкція опиисується товщинами шарів покриття і послідовністю матеріалів. Ця задача є оберненою до задачі синтезу шаруватого покриття, тому її розв'язок дещо подібний до розв'язку обернених задач аналізу, які розглянуто вище. Для вирішення задач синтезу багатошарових оптичних покриттів в 1982 році О. В. Тихонравовим був запропонований метод голкових варіацій [20]. Особливістю цього підходу є те, що в процесі розв'язку задачі синтезу число шарів покриття не фіксують, а визначають в самому процесі розв'язку. Новий шар в покриття вводять з малою оптимальною товщиною і на графіку функції $N = N(z)$ він виглядає як голка.

В цільовій функції $F(B)$ (11) вигляд неув'язок (12) дещо зміниться:

$$e_{X_i} = X_i^z - X_i'(B), \quad (16)$$

де X_i^z — задані значення оптичної характеристики. Ваговий множник P_X в функціоналі (11) замінюється на невід'ємну спектральну вагову функцію $P_X(\lambda)$, яка дає змогу пріоритетного врахування вибраних точок в досліджуваному спектральному діапазоні. Решта позначень вже описана вище. Враховуючи (16), задачу проектування шаруватого середовища в загальному випадку можна записати у вигляді (14). Розроблене програмне забезпечення дозволяє розширити множину обмежень Q при проектуванні оптичного покриття. А саме, крім обмежень (13) дозволяє встановити обмеження на максимальну кількість шарів, максимальну товщину всього багатошарового покриття, виключити можливості “небажаного” порядку сусідніх шарів (між якими відсутня адгезія, значна дифузія, утруднена технологічна реалізація і т. д.). А при проектуванні багатошарових покриттів із захисною механічно стійкою плівкою множина Q виконує роль множини додаткових умов. Головною умовою є розташування захисної плівки верхнім (першим) шаром, який контактує з навколишнім середовищем. Матеріал другого шару повинен забезпечувати достатню адгезію з першим шаром, тому алгоритм вибирає відповідні матеріали для другого шару з множини доступних матеріалів. Аналогічний вибір автоматично проводиться перед введенням кожного нового шару в модель покриття. Крім цього, програмне забезпечення дозволяє керувати порядком матеріалів, враховуючи інші допоміжні функції шарів в конструкції покриття (антидифузні бар'єрні прошарки, зв'язуючі прошарки між шарами, матеріали яких не мають адгезії між собою) шляхом розширення множини Q .

Таким чином, подібно до розв'язку обернених задач типу розпізнавання, розв'язок оберненої задачі синтезу теж зводиться до розв'язку математичної оптимізаційної задачі. Приймаючи до уваги, що знаходження похідних у задачах проектування простіше, ніж у задачах розпізнавання, то розроблене програмне забезпечення використовує згаданий раніше метод Левенберга-Марквардта. Його ефективність в порівнянні з іншими методами пояснюють наступним чином. Більшість методів високих порядків в своїй роботі для знаходження напрямків мінімізації використовують градієнти цільової функції. Метод Левенберга-Марквардта використовує замість градієнта

якобіан (тобто матрицю A з елементами виду $a_{i,j} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}$), який дозволяє от-

римати більше інформації про рельєф цільової функції, ніж її градієнт. Існує математичне не зовсім строгі, але інтуїтивно зрозуміле пояснення цього факту: знаючи градієнт функції F , можна побудувати її лінійну апроксимацію, але якщо відомо її якобіан, то можна побудувати лінійні апроксимації функцій f_i , які дозволяють побудувати квадратичну апроксимацію функції F . Функції f_i звичайно нелінійні, але функція F ще більш нелінійна, і тому апроксимація функції F як суми квадратів лінійних апроксимацій виявляється більш точною, ніж проста лінійна апроксимація функції F як нелінійної функції загального вигляду. Використання якобіана в поєднанні з деякими прийомами, які дозволяють оптимально вибирати крок на основі інформації про рельєф функції, дає можливість розв'язувати задачу за меншу кількість ітерацій, ніж будь-яким іншим методом. Також відомо, що в багатоекстремальних задачах метод Левенберга-Марквардта має тенденцію сходиться до більш "хороших" локальних мінімумів, ніж інші методи оптимізації. Ця властивість поки недостатньо досліджена в теоретичному плані, але на практиці метод став класичним для розв'язку обернених задач оптики шаруватих середовищ.

Моделювання оптичних характеристик. З використанням описаного в даній роботі програмного забезпечення виконано математичне моделювання конструкцій оптичних покриттів і знайдені розв'язки різнотипних обернених задач оптики шаруватих середовищ.

На рис. 4 представлені дисперсії показника заломлення алмазоподібного а-С:Н покриття, визначені зі спектрів відбивання і еліпсометричних даних. Такі дані одержують як при окремому, так і при одночасному розв'язку обернених задач еліпсометрії і фотометрії.

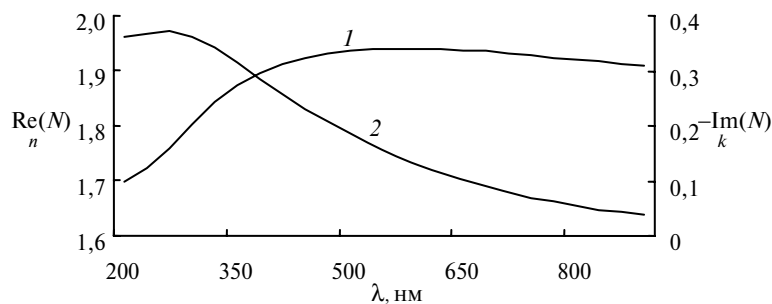


Рис. 4. Дисперсія показника заломлення (1) і коефіцієнта поглинання (2) алмазоподібного а-С:Н покриття.

На рис. 5 представлені теоретичні спектри коефіцієнта відбивання алмазоподібної плівки на германієвій підкладці. Обидва спектра відповідають плівкам з дисперсією показника заломлення, представленою на рис. 4, і товщиною — 300 нм. У першому випадку використано модель однорідного тонкого шару. У другому випадку профіль показника заломлення плівки мав 4 %-ну неоднорідність на границі з германієм і 2 %-ну на границі з повітрям. Видно, що неоднорідність вносить вклад в значення коефіцієнта відбивання і мало впливає на положення його мінімумів і максимумів. Тому розв'язок оберненої задачі доцільно починати з аналізу екстремумів спектральних характеристик і визначення оптичної товщини плівки, потім характеру її

дисперсійних залежностей і вже після цього робити припущення про неоднорідність і аналізувати її.

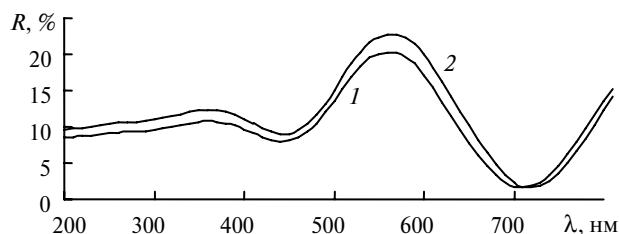


Рис. 5. Спектри відбивання а-С:Н плівок товщиною 300 нм на германії для однорідної плівки (1) і плівки з 4 %-ною неоднорідністю на границі з підкладкою і 2 %-ною — з повітрям (2).

Для даних моделей покриття розраховані кутові залежності еліпсометричних параметрів для довжині хвилі He-Ne лазера 632,8 нм (рис. 6).

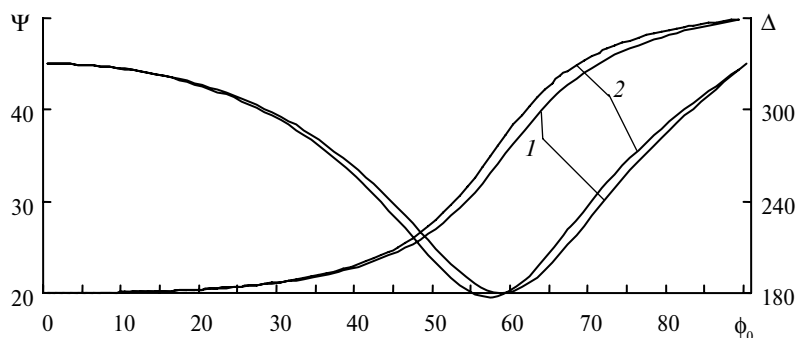


Рис. 6. Кутові залежності еліпсометричних параметрів а-С:Н плівок товщиною 300 нм на германії для однорідної плівки (1) і плівки з 4 %-ною неоднорідністю на границі з підкладкою і 2 %-ною — з повітрям (2).

З таких залежностей легко бачити кути падіння, на яких проявляється більша чутливість еліпсометричних вимірювань до неоднорідності плівки і, таким чином, вибору оптимальних умов експерименту.

На рис. 7 наведено результати розв'язку оберненої задачі синтезу для декількох принципово різних покриттів. Загальною властивістю для всіх їх є підвищена механічна стійкість за рахунок захисту робочої поверхні алмазоподібною плівкою. Для світлоділителя використано модель неоднорідної (градієнтної) алмазоподібною плівки.

Висновки

Проведено аналіз оптимізаційних методів розв'язку обернених задач синтезу і аналізу оптики шаруватих середовищ і на його основі створено сучасне програмне забезпечення для математичного моделювання оптичних покриттів. Розглянуто математичну модель задачі оптики для покриття з об'ємною неоднорідністю шарів. Показано вплив неоднорідності алмазоподібного вуглецю на фотометричні і еліпсометричні характеристики. Теоретично показано можливості використання захисних алмазоподібних вуглецевих плівок в різноманітних багатшарових оптичних покриттях.

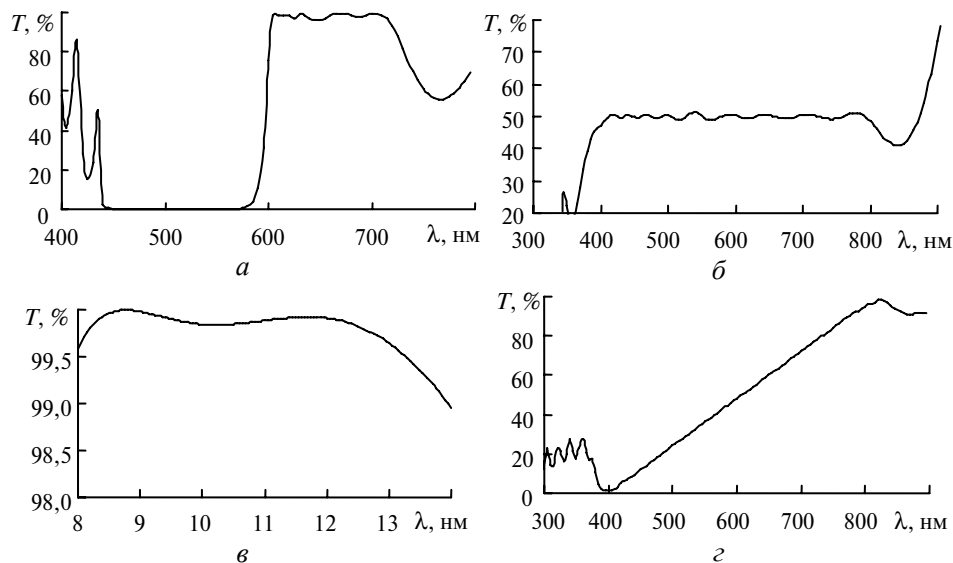


Рис. 7. Коефіцієнт пропускання, отриманий в результаті розв'язку різних задач методом голкових варіацій: 13-шарового відрізаючого фільтра (а), 17-шарового світлоділителя (б), 11-шарового інфрачервоного просвітлювального покриття (в), 32-шарового “лінійного” покриття (з).

Для подальшого розвитку даної проблеми цікавим залишається розробка алгоритмів і програмного забезпечення для вибору оптимального захисного покриття з допустимого набору механічно стійких плівок.

1. Staryk S. P., Gontar O. G., Gorshtein B. A. et al. Multilayer antireflection interference coatings with protective diamond-like films for wavelength range from 8 to 12 mm // J. Superhard Materials. — 2006. — № 2. — P. 52—58.
2. Optical thin film consulting. — <http://www.kruschwitz.com>.
3. Staryk S. P., Gontar O. G., Gorokhov V. Yu., Gorshtein B. A. Optical characteristics of carbon coatings on silicon substrates // J. Superhard Materials. — 2004. — № 6. — P. 64—68.
4. Furman Sh. A., Tikhonravov A. V. Basics of optics of multilayer systems. — Ed. Frontiers, Gif-sur-Yvette Cedex, 1992. — 149 p.
5. Abeles F. Matrix method // Ann. de Physique. — 1950. — 5. — P. 596—640.
6. Hayfield P. C. S., White G. W. T. An assessment of the suitability of the Drude-Tronstad polarized light method for the study of film growth on polycrystalline metals // Ellipsometry in the Measurement of Surfaces and Thin Films. — 1964. — 256. — P. 157—200.
7. Berreman D. W., Scheffer T. J. Bragg reflection of light from single-domain cholesteric liquid-crystal films // Phys. Rev. Lett. — 1970. — 25, N 9. — P. 577—581.
8. Трубецков М. К. Обратные задачи синтеза и распознавания в оптике многослойных покрытий.: Автореф. дис. ... докт. физ.-мат. наук. — М., 2001. — 24 с.
9. Комраков Б. М., Шапочкин Б. А. Измерение параметров оптических покрытий. — М.: Машиностроение, 1986. — 136 с.
10. Аззам Р., Башара Н. Эллипсометрия и поляризованный свет. — М.: Мир, 1981. — 583 с.
11. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование. — М.: Мир, 1975. — 534 с.
12. Levenberg, K. A. Method for the solution of certain problems in least squares // Quart. Appl. Math. — 1944. — 2. — P. 164—168.
13. Marquardt D. An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters SIAM // Appl. Math. — 1963. — 11. — P. 431—441.
14. More J. J. The levenberg-marquardt algorithm: implementation and theory // Numerical analysis, lecture notes in mathematics. — Heidelberg: Springer-Verlag, 1977. — P. 105—116.

15. *Nelder J. A., Mead R. A.* A simplex method for function minimization // *Comp. Journ.* — 1965. — 7. — P. 308—315.
16. *Воскобойников Ю. Е.* Выбор размерности функциональных приближений экспериментальных данных // *Автометрия.* — 1985. — № 4. — С. 64—71.
17. *Тихонов А. Н., Арсенин В. Я.* Методы решения некорректных задач. — М.: Наука, 1979. — 288 с.
18. *Кормен Т., Лейзерсон Ч., Ривест Р.* Алгоритмы: построение и анализ. — М.: МЦНМО, 2001. — 960 с.
19. *Воскобойников Ю. Е., Свиташева С. Н.* Точность восстановления параметров пленочной системы и обусловленность обратной задачи эллипсометрии // *Автометрия.* — 1992. — № 4. — С. 76—87.
20. *Тихонравов А. В.* О методе синтеза оптических покрытий, использующем необходимые условия оптимальности // *Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физика. Астрономия.* — 1982. — 23, № 6. — С. 91—93.

Ін-т надтвердих матеріалів
ім. В. М. Бакуля НАН України

Надійшла 07.07.09