

МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ФОТОМЕТРИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ НАХОЖДЕНИЯ ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ СТРУКТУР

Приц Е.В.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
г. Минск, Республика Беларусь

Новиков П.Э.

Работа посвящена обзору и анализу методов решения обратной фотометрической задачи, применяемых для высокоточного определения действительной и мнимой части комплексного показателя преломления (оптических параметров) и толщины тонкопленочных покрытий. Рассмотрены аналитические подходы на основе интерференционных экстремумов и современные численные оптимизационные алгоритмы, использующие спектры пропускания и отражения. Показано, что использование гибридных алгоритмов с применением дисперсионных моделей позволяет минимизировать погрешность расчетов.

Тонкие пленки являются фундаментальной основой современной оптоэлектроники, интегральной фотоники и сенсорной техники. Управление их свойствами достигается за счет выбора материала и толщины, что требует точного решения обратной фотометрической задачи – извлечения физически достоверных спектральных зависимостей действительной $n(\lambda)$ и мнимой $k(\lambda)$ частей комплексного показателя преломления из измеренных коэффициентов отражения R и пропускания T [1, 2].

Прямая задача оптики тонких пленок заключается в расчете спектров пропускания и отражения по известным параметрам структуры. Она решается аналитически с использованием матричного метода или формул Френеля [3]. Однако определение оптических параметров по экспериментальным данным является значительно более сложной задачей. Основная трудность заключается в многолучевой интерференции и необходимости учета комплексного показателя преломления как для пленки, так и для подложки [3, 4]. Кроме того, обратная задача часто является некорректно поставленной: одному спектру может соответствовать несколько наборов параметров, что порождает проблему множественности решений [1].

Для решения этой задачи в современных вычислительных комплексах используется минимизация целевой функции. Она описывает суммарное квадратичное отклонение теоретически рассчитанных значений от экспериментально полученных данных.

Математическая основа этого процесса описывается следующим образом [1, 2]:

$$F(n, k) = (R_{\text{calc}} - R_{\text{exp}})^2 + (T_{\text{calc}} - T_{\text{exp}})^2 + \omega_{\text{phys}} F_{\text{phys}} + \omega_{\text{nk}} \Psi_{\text{nk}} + \omega_{\text{smoth}} \Delta_{\text{smoth}}, \quad (1)$$

где $F(n, k)$ – целевая функция, описывающая суммарное отклонение расчетных данных от экспериментальных, которую необходимо минимизировать для поиска параметров; T_{exp} и R_{exp} – экспериментальные значения коэффициентов пропускания и отражения на рассматриваемой длине волны; T_{calc} и R_{calc} – теоретически рассчитанные значения; Δ_{smoth} – фазовый сдвиг между компонентами, Ψ_{nk} – изменение соотношения амплитуд компонент электрического поля, ω_{phys} , ω_{smoth} и ω_{nk} – весовые коэффициенты, определяющие степень влияния каждого регуляризирующего слагаемого на итоговое значение функции, F_{phys} – функция физических ограничений

Решение обратной задачи путем прямой минимизации функции (1) часто приводит к проблеме множественности решений, так как система уравнений является недоопределенной и сильно нелинейной. Эффективным способом преодоления данной проблемы является использование каскадного гибридного алгоритма (например, комбинации методов Пауэлла, Нелдера-Мида и дифференциальной эволюции [2, 5]). Глобальный алгоритм осуществляет поиск по всему пространству параметров и находит область глобального минимума без необходимости ручного задания стартовой точки, после чего локальный алгоритм выполняет финальное прецизионное уточнение.

Важнейшим аспектом алгоритмической реализации, гарантирующим физическую достоверность результатов, является внедрение системы регуляризации. В процессе оптимизации целевая функция дополняется алгоритмическими ограничениями. Условие представляет собой математическое выражение закона сохранения энергии для оптических сред. Его программная реализация (наложение больших числовых штрафов на целевую функцию при нарушении неравенства) позволяет алгоритму принудительно отбрасывать ложные математические корни, возникающие из-за овражной структуры функции невязки или аппаратных шумов измерительного оборудования. Это особенно актуально для избежания вырожденности в случаях, когда значения n и k математически близки друг к другу.

Помимо алгоритмической системы штрафов, фундаментом для корректной работы любых численных методов является физическая строгость математических моделей, закладываемых в расчет расчетных спектров T и R . Сложность целевой функции невязки, с которой вынужден работать оптимизатор, напрямую вытекает из трансцендентного характера уравнений оптики тонких пленок. Так,

для системы «воздух–пленка–подложка» при нормальном падении света точное математическое выражение для коэффициента пропускания T , всесторонне описывающее многолучевую интерференцию в поглощающей среде, обладает высокой степенью нелинейности.

Для нормального падения света точное выражение для пропускания имеет вид:

$$T = \frac{Ae^{-\frac{4\pi k d}{\lambda_0}}}{B - Ce^{-\frac{4\pi k d}{\lambda_0}} \cos\left(\frac{4\pi n d}{\lambda_0}\right) + De^{-\frac{8\pi k d}{\lambda_0}}} \quad (2)$$

где T – коэффициент пропускания системы, определяющий долю интенсивности света, прошедшего через структуру, n – действительная часть показателя преломления пленки; λ_0 – длина волны падающего излучения в вакууме; k – мнимая часть показателя преломления пленки; d – физическая толщина пленки; A , B , C , D – комплексные коэффициенты, зависящие от показателей преломления пленки, подложки и окружающей среды.

Искомые n и k находятся одновременно в показателях экспоненциального затухания и под знаком тригонометрической функции косинуса.

Чтобы алгоритм глобальной оптимизации не блуждал по всему пространству возможных решений, критически важно сузить для него границы поиска. Наилучшей практикой является передача в численный алгоритм надежного начального приближения, в первую очередь – предварительно оцененной геометрической толщины слоя d .

Получить такую оценку позволяет классический метод огибающих, который анализирует спектральное расстояние между соседними экстремумами (максимумами или минимумами) интерференционной картины.

Начальное приближение толщины пленки d может быть вычислено строго аналитически по формуле:

$$d = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{2[n(\lambda_1)\lambda_2 - n(\lambda_2)\lambda_1]} \quad (3)$$

где d – расчетная геометрическая (физическая) толщина слоя, $n(\lambda_1)$ и $n(\lambda_2)$ – значения показателя преломления, предварительно рассчитанные в точках соответствующих экстремумов, λ_1 и λ_2 – значения длин волн, соответствующих двум соседним интерференционным экстремумам на спектральной кривой

Использование начального приближения толщины d переводит решение из области глобального поиска в фазу направленного уточнения параметров. Это позволяет сфокусировать алгоритм на прецизионной коррекции дисперсионного профиля и восстановлении оптических параметров в зонах сильного поглощения, где аналитические методы становятся неэффективными.

Подводя итог, применение классических аналитических уравнений или исключительно численных алгоритмов не обеспечивает требуемой точности и стабильности при исследовании тонкопленочных структур. Применение подобных гибридных методов открывает возможности для высокоточной характеристики оптических покрытий, что является неотъемлемой частью технологического процесса при создании современной компонентной базы интегральной фотоники и оптоэлектроники.

Список использованных источников:

1. Stenzel, O. A hybrid method for determination of optical thin film constants / O. Stenzel, R. Petrich, W. Scharff, A. V. Tikhonravov, V. Hopfe // *Thin Solid Films*. – 1992. – Vol. 207. – P. 324-329.
2. Poelman, D. Methods for the determination of the optical constants of thin films from single transmission measurements: a critical review / D. Poelman, P. F. Smet // *Journal of Physics D: Applied Physics*. – 2003. – Vol. 36. – P. 1850-1857.
3. Macleod, H. A. *Thin-Film Optical Filters* / H. A. Macleod. – 4th ed. – CRC Press, 2010. – 800 p.
4. Swanepoel, R. Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon / R. Swanepoel // *Journal of Physics E: Scientific Instruments*, 1983. – Vol. 16. – P. 1214-1222.
5. Storn, R. Differential evolution – a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces / R. Storn, K. Price // *Journal of Global Optimization*. – 1997. – Vol. 11. – P. 341-359.