

**ПРИОРИТЕТНЫЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ПРОЕКТ «ОБРАЗОВАНИЕ»
РОССИЙСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ДРУЖБЫ НАРОДОВ**

**Л.А. СЕВАСТЬЯНОВ, К.П. ЛОВЕЦКИЙ,
Е.Б. ЛАНЕЕВ, О.Н. БИКЕЕВ**

**АЛГОРИТМЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО
ЭКСПЕРИМЕНТА ДЛЯ ПРОЕКТИРОВАНИЯ
ОПТИЧЕСКИХ НАНОСТРУКТУР**

Учебное пособие

Москва

2008

*Инновационная образовательная программа
Российского университета дружбы народов*

**«Создание комплекса инновационных образовательных программ
и формирование инновационной образовательной среды,
позволяющих эффективно реализовывать государственные интересы РФ
через систему экспорта образовательных услуг»**

Экспертное заключение –

доктор физико-математических наук, профессор *И.В. Пузынин*

Севастьянов Л.А., Ловецкий К.П., Ланеев Е.Б., Бикеев О.Н.

Алгоритмы вычислительного эксперимента для проектирования
оптических наноструктур: Учеб. пособие. – М.: РУДН, 2008. – 185 с.

Пособие посвящено изложению технологических аспектов математического моделирования – вычислительному эксперименту. Применение математического моделирования и вычислительного эксперимента позволяет поднять общий уровень теоретических исследований, дает возможность проводить их в более тесной связи с экспериментальными исследованиями. Математическое моделирование может рассматриваться как новый метод познания, конструирования, проектирования, который сочетает в себе многие достоинства как теории, так и эксперимента. Вычислительный эксперимент позволяет подробно и глубоко изучить объекты в достаточной полноте, недоступной чисто теоретическим подходам.

Для магистров и аспирантов, обучающихся по направлению «Прикладная математика и информатика».

Учебное пособие выполнено в рамках инновационной образовательной программы Российского университета дружбы народов, направление «Комплекс экспортноориентированных инновационных образовательных программ по приоритетным направлениям науки и технологий», и входит в состав учебно-методического комплекса, включающего описание курса, программу и электронный учебник.

© Севастьянов Л.А., Ловецкий К.П., Ланеев Е.Б., Бикеев О.Н., 2008

Содержание

Инновационность курса	5
Тема 1. Вычислительный эксперимент и математическое моделирование	8
1.1. Введение.....	8
1.2. Современное состояние математического моделирования и вычислительного эксперимента	15
1.3. Математическое моделирование	19
1.4. Компьютеры в математическом моделировании.....	21
1.5. Вычислительный эксперимент	25
1.6. Вычислительный эксперимент в науке и технологии	28
Тема 2. Вычислительный эксперимент синтеза экранирующей маски для напыления тонкопленочной волноводной линзы.	31
2.1. Пример технического устройства, основанного на волноводной линзе.....	31
2.2 Принципиальные проблемы реализации вычислительного эксперимента.	32
Тема 3. Первый этап реализации вычислительного эксперимента. 40	40
3.1. Синтез обобщенной линзы Люнеберга с полной и неполной апертурой.	40
3.2. Синтез профиля толщины напыленного слоя тонкопленочной волноводной линзы	50
3.3. Способы измерения профиля толщины напыленного слоя.	54
3.4. Синтез параметров экранирующей маски (для напыления тонкопленочной волноводной линзы Люнеберга)	59
3.5. Проверка состоятельности первого этапа вычислительного эксперимента	64
Тема 4. Последующие этапы реализации вычислительного эксперимента	69
4.1. Предсказание результатов напыления при заданных масках с использованием найденных функций установки.....	69
4.2. Измерение профиля толщины напыленного слоя методом лучевого зондирования.....	72
4.3. Восстановление функции источника.....	85
4.4. Восстановление параметров трех- и пяти-сегментных масок прямыми методами условной минимизации.....	92
Тема 5. Завершающий этап реализации вычислительного эксперимента	106
5.1. Анализ состоятельности вычислительного эксперимента и принятие решения о его завершении.....	106
5.2. Теоретические аспекты итеративного алгоритма, реализующего вычислительный эксперимент	107

5.3. Реализация итеративного алгоритма	110
6. Приложение. Плоский оптический волновод.....	115
Лекция 1. Уравнения распространения электромагнитных волн в плоском оптическом волноводе. Анализ возможного вида решения.	117
Лекция 2. Ддисперсионное уравнение трехслойного диэлектрического волновода	126
Лекция 3. Аанализ дисперсионных зависимостей, волноводные моды плоского трехслойного волновода	133
Лекция 4. Перенос энергии волной в плоском диэлектрическом волноводе	143
Литература.....	153
Описание курса и программа	161

Общее описание курса.

Инновационность курса.

Курс является инновационным по содержанию и по литературе, он включает последние научные достижения в области решения задач дифракционной оптики, когда характерные размеры исследуемых объектов не превышают либо сравнимы с длиной волны оптического излучения. Эта область знаний интенсивно развивалась в последнее время, но лишь недавно были созданы устойчивые алгоритмы и разработаны численные методы решения задач для многослойных решеток. Следует отметить, что для оптических однослойных и многослойных решеток с характерными размерами больше длины волны оптического излучения устойчивые методы решения известны с середины прошлого века. Сейчас алгоритмы решения оптических задач в субволновой области распространяются на объекты со сложной геометрией, такие как двумерные решетки с произвольным профилем, трехмерные решетки (фотонные кристаллы) и на анизотропные материалы. Они востребованы, поскольку позволяют создавать математические модели взаимодействия излучения с веществом в наномасштабах, а затем с их помощью проектировать новые эффективные устройства в высокотехнологичных областях медицины, энергетики, инфокоммуникаций и приборостроения.

В ходе проведения занятий по этому курсу разработчики предполагают использование традиционных методик преподавания, принятых в странах болонской системы образования, то есть с использованием кредитной системы оценки знаний.

Наряду с традиционными элементами преподавания математических методов решения прикладных задач разработчики курса предполагают воспользоваться хорошо зарекомендовавшим себя опытом МФТИ и подобных вузов. А именно, в рамках подпрограммы «Оптика

наноструктур» осуществляется закупка уникального аналитического оборудования для измерения разнообразных характеристик оптических наноустройств с целью использования этого оборудования в учебном процессе и для проведения научно-исследовательских работ преподавателями, аспирантами и студентами.

По окончании магистратуры по направлению «Оптика наноструктур» выпускники Российского университета дружбы народов станут конкурентно-способными специалистами в области проектирования современных оптических устройств, которые не будут испытывать затруднений при последующем трудоустройстве.

В настоящее время бурно развивается новая методология научных исследований - математическое моделирование и вычислительный эксперимент. Сущность этой методологии состоит в замене исходного объекта его математической моделью и исследовании современными вычислительными средствами математических моделей. Методология математического моделирования охватывает все новые сферы - от разработки больших технических систем и управления ими до анализа сложнейших экономических и социальных процессов.

Особенно важно применение вычислительного эксперимента при проектировании нанообъектов, поскольку часто только с помощью вычислительных методов и численного моделирования процессов можно представить, как взаимодействует электромагнитное излучение с нанообъектами.

Широкое применение математического моделирования и вычислительного эксперимента позволяет поднять общий уровень теоретических исследований, дает возможность проводить их в более тесной связи с экспериментальными исследованиями. Математическое моделирование может рассматриваться как новый метод познания, конструирования, проектирования, который сочетает в себе многие

достоинства как теории, так и эксперимента. Работа не с самим объектом (явлением, процессом), а с его моделью дает возможность безболезненно, относительно быстро и часто без существенных затрат исследовать его свойства и поведение в любых мыслимых ситуациях (преимущества теории). В то же время вычислительные (компьютерные, имитационные) эксперименты с моделями объектов позволяют, опираясь на мощь современных вычислительных методов и технических инструментов, подробно и глубоко изучать объекты в достаточной полноте, недоступной чисто теоретическим подходам (преимущества эксперимента).

Разрабатываемое в рамках инновационной программы «Оптика наноструктур» учебное пособие по методам вычислительного эксперимента поможет слушателям курса и студентам освоить новые прогрессивные методики проведения научно - исследовательских и опытно-конструкторских работ с использованием самого современного оборудования. Вместе с тем необходимо, конечно же, изучать учебники и монографии, вышедшие в свет к настоящему времени, особенно работы А.А. Самарского и др., которые являются фактическими создателями этого нового направления в науке и технологии.

В список дополнительной и рекомендуемой литературы включены все научно-исследовательские публикации, положенные в основу предлагаемого курса.

В качестве практических заданий, курсовых работ и тем рефератов слушателям магистерской программы будут предложены актуальные проблемы и задачи, решение которых востребовано современным уровнем развития высокотехнологичных отраслей промышленности и научно-исследовательских лабораторий.

Тема 1. Вычислительный эксперимент и математическое моделирование

Понятия вычислительного эксперимента и математического моделирования были введены в прикладную математику академиком А.А. Самарским В своих основополагающих статьях [1, 2] он определяет их как технологическую и научную составляющие единого подхода к решению сложных научно-технических проблем.

1.1. Введение

Технический цикл вычислительного эксперимента можно условно разбить на несколько этапов:

- выбор физического приближения и математическая формулировка задачи (построение математической модели изучаемого явления или объекта);
- разработка вычислительного алгоритма решения задачи;
- реализация алгоритма в виде программы для ЭВМ;
- проведение расчетов на ЭВМ;
- обработка, анализ и интерпретация результатов расчетов, сопоставление с физическим экспериментом и, в случае необходимости, уточнение или пересмотр математической модели, то есть возвращение к первому этапу и повторение цикла вычислительного эксперимента.

Следует еще раз подчеркнуть, что деление вычислительного эксперимента на указанные пять этапов имеет в значительной мере условный характер. На самом деле все эти основные этапы тесно связаны между собой и служат одной цели - получению с необходимой точностью за возможно меньшее машинное время адекватного количественного описания изучаемого физического явления или процесса.

Сама структура вычислительного эксперимента показывает, что это сложный научно-производственный процесс, в котором участвует большой коллектив специалистов различного профиля - от физиков - теоретиков и экспериментаторов до программистов и инженеров - электронщиков. Успех дела зависит от согласованного взаимодействия всех участников вычислительного эксперимента и, в частности, от умения находить компромиссные решения вопросов в областях, где перекрещиваются интересы различных специалистов.

Изучением математических моделей физики занимается математическая физика. Уравнения математической физики обычно выражают законы сохранения (количества движения, массы, энергии, заряда и т.д.) и представляют собой дифференциальные уравнения в частных производных, интегро-дифференциальные или интегральные уравнения.

Изучение математической модели сначала проводится обычными средствами математической физики, например методами общей теории дифференциальных и интегральных уравнений. Прежде всего, исследуется вопрос о постановке задачи. Задача должна быть поставлена математически грамотно. Нужно убедиться в том, что существует единственное решение, выяснить характер его зависимости от входных данных (корректна или некорректна задача), для того чтобы определить возможность и метод работы с этой моделью.

Для предварительного исследования модели вначале используются все традиционные методы, применяемые физиками: качественный размерностный анализ, поиск частных решений для специальных случаев, рассмотрение предельных случаев. Таким образом, добывается первичная (быть может, грубая) информация о качественном характере явления. Полученные на этом этапе точные решения необходимы, кроме того, как тесты для проверки качества вычислительных алгоритмов, которые будут

строиться для решения полной задачи. Математическая модель физического явления включает помимо основных уравнений, выражающих общие законы сохранения, некоторые дополнительные соотношения, описывающие свойства конкретных сред и являющиеся фактически коэффициентами уравнений. Это коэффициенты теплопроводности, диффузии, электропроводности, поглощения излучения, вязкости и т.д. К таким соотношениям относятся и уравнения состояния. Все соотношения являются функциями состояния среды. Например, свойства плазмы сильно зависят от ее термодинамического состояния, что, в частности, порождает дополнительные «нелинейности» в уравнениях.

При построении математической модели необходимо знать физические характеристики сред с достаточной точностью. В противном случае самые лучшие методы расчета не смогут обеспечить правильного представления о реальном явлении. В изучаемых физиками процессах реализуются самые различные условия - от комнатных до звездных температур и от газовых до твердотельных плотностей. Большинство этих условий настолько далеки от обычных, что непосредственное экспериментальное определение свойств вещества оказывается невозможным. С другой стороны, при этих условиях зачастую неприменимы упрощенные модели вроде идеального газа, которые изучены в теоретической физике. Поэтому определение свойств веществ, как говорят, «физическое оснащение» математической модели представляет собой крупную самостоятельную научную проблему. Она сводится к решению сложных квантово - механических задач, которое оказывается возможным лишь при использовании численных методов на ЭВМ и фактически требует проведения специальных вычислительных экспериментов, опирающихся на физические эксперименты.

Для анализа сформулированной математической модели с помощью ЭВМ необходимы экономичные вычислительные алгоритмы,

позволяющие получать решение задачи за допустимое (по возможности минимальное) время. Такое требование приобретает особую важность в связи с многовариантным характером вычислительного эксперимента.

Если существует аналитическое решение задачи, то зависимость от параметров выступает в явном виде. В вычислительном эксперименте необходимо проводить большие серии однотипных расчетов для изучения влияния различных параметров задачи. Поэтому необходимое условие вычислительного эксперимента - экономичность лежащего в его основе алгоритма. Конструирование вычислительного алгоритма подразумевает два этапа: построение разностной схемы для математической модели, то есть аппроксимацию исходной системы дифференциальных уравнений системой разностных сеточных (алгебраических) уравнений, и построение метода для быстрого решения полученных разностных сеточных уравнений.

Построение разностной схемы можно рассматривать как замену непрерывной среды некоторым ее дискретным аналогом. При этом возникают новые параметры - шаги разностной сетки (по времени и пространству), вводимой для замены области непрерывного изменения аргументов, в которой ведется поиск решения исходной задачи, множеством точек, (узлов) сетки. Представляется естественным желание использовать грубые сетки с большими шагами (с небольшим числом узлов), так как машинное время, необходимое для решения разностных уравнений, возрастает с увеличением числа узлов (с уменьшением шага сетки). Однако при неограниченном уменьшении шагов сетки разностная схема близка к исходной дифференциальной задаче лишь асимптотически. При конечных же шагах сетки разностные уравнения, представляющие собой законы, в соответствии с которыми происходит эволюция «дискретной среды», могут заметно отличаться от дифференциальных уравнений, описывающих поведение непрерывной среды. Возможно

возникновение различных, нежелательных эффектов разностного происхождения.

Для избежания подобных явлений необходимы специальные меры. В настоящее время сформулирован ряд принципов, которые следует соблюдать при построении разностных схем. Так, при дискретизации задачи сплошной среды, то есть при переходе от дифференциальных уравнений к разностным, естественно требовать, чтобы полученная дискретная модель правильно отражала основные свойства сплошной среды. В первую очередь в модели должны выполняться основные законы сохранения - массы, импульса, полной энергии. Разностные схемы, обладающие таким качеством, называют консервативными. Развитие принципа консервативности привело к понятию полной консервативности: в полностью консервативных схемах при конечных величинах шагов сетки помимо основных законов сохранения соблюдаются также балансы в отдельных видах энергии (кинетической, тепловой, магнитной). Практика показала весьма высокую эффективность полностью консервативных схем.

Как отмечалось выше, разностная схема представляет собой систему алгебраических, вообще говоря, нелинейных уравнений. Для их решения применяются различные итерационные методы, что приводит к необходимости решать на каждой итерации систему линейных алгебраических (специального вида) уравнений высокого порядка (10^2 - 10^6 уравнений). Таким образом, разработка экономичных методов решения таких систем становится серьезной проблемой и представляет собой одну из главных задач теории численных методов. Построение алгоритма, позволяющего сократить время решения системы хотя бы в несколько раз, имеет очень важное значение.

Прежде чем широко использовать алгоритм на практике, надо теоретически оценить его качества (экономичность, точность,

универсальность и т.д.). Этим занимается теория численных методов - один из интенсивно развивающихся разделов вычислительной математики.

С точки зрения программирования, вычислительный эксперимент характерен тем, что для каждой модели необходимо решать большое число вариантов (варьируя определяющие параметры задачи) и, кроме того, изменять (уточнять) саму математическую модель. Эта особенность - "многовариантность" и "многомодельность" - вычислительного эксперимента проявляется в многократных изменениях реализующей алгоритм программы, причем изменения касаются и структуры программы в целом, и отдельных ее частей.

Таким образом, вопрос об организации вычислений, о технологии программирования выступает на первый план. Новая технология строится на основе модульной (блочной) структуры математической модели и алгоритма. Сборку программы из модулей можно проводить автоматически, с помощью специальной программы. В настоящее время важное направление - создание проблемно-ориентированных программных комплексов и систем, называемых пакетами прикладных программ. Характерная особенность пакетов состоит в возможности постоянного развития, расширения благодаря включению новых модулей, реализующих новые возможности. При создании пакетов прикладных программ помимо их функционального наполнения, большое значение имеют работы по системному обеспечению пакета.

Последний этап в технологическом цикле вычислительного эксперимента - обработка, анализ, интерпретация расчетных данных и их сопоставление с результатами физических экспериментов.

Следует заметить, что физический эксперимент сам нуждается в математической обработке результатов. Причем речь идет не о первичной, например статистической, а о полной обработке, цель которой - отыскание основных физических параметров (температуры, плотности, давления,

скорости и др.). В самом деле, в современном физическом эксперименте, где среда подвергается сверхсильным воздействиям, и параметры вещества имеют экстремальные значения, прямое измерение физических характеристик затруднено или вообще невозможно. Информацию приходится извлекать из косвенных данных путем соответствующей обработки фотоснимков, осциллограмм, интерферограмм и т.д. При этом оказывается, что необходимо проводить фактически самостоятельный вычислительный эксперимент. В настоящее время созданы и опробованы первые автоматизированные системы полной систематической обработки ряда физических экспериментов.

После окончания анализа расчетных данных и сравнения с физическим экспериментом может оказаться, что необходимо принять во внимание некоторые новые физические данные (например, учесть двумерность, от однотемпературной модели перейти к двухтемпературной, различая температуры ионов и электронов и т.д). Это приводит к новой математической модели, для которой повторяется весь технологический цикл вычислительного эксперимента. Процесс вычислений может повторяться также из-за необходимости совершенствовать алгоритм расчета.

В настоящее время вычислительный эксперимент стал уже новым мощным средством теоретических исследований в физике. Фактически речь идет о новой системе организации физических теоретических исследований на основе вычислительного эксперимента, которая органически связывает математическую модель, вычислительный алгоритм, расчеты на ЭВМ и физический эксперимент. Сам вычислительный эксперимент носит итерационный характер, так как в процессе его проведения уточняется математическая модель, совершенствуется вычислительный алгоритм, пересматривается организация вычислительного процесса. Очевидно, по сравнению с

натурным экспериментом вычислительный эксперимент значительно дешевле и доступнее, его подготовка и проведение занимают меньше времени, он легко управляем. В то же время вычислительный эксперимент дает более подробную информацию, нежели собственно физические эксперименты. Большие возможности вычислительного эксперимента были продемонстрированы при решении таких крупнейших научно-технических программ, как овладение ядерной энергией и освоение космического пространства. Собственно, в процессе работы над этими программами (когда были созданы и впервые применены ЭВМ) и начал складываться новый стиль исследования, сформировавшийся впоследствии как вычислительный эксперимент.

Наиболее доступное изложение современного состояния вычислительного эксперимента и математического моделирования можно найти на сайте института Математического моделирования РАН [3] и в книге [4].

1.2. Современное состояние математического моделирования и вычислительного эксперимента

В настоящее время сложилась новая методология научных исследований - математическое моделирование и вычислительный эксперимент. Сущность этой методологии состоит в замене исходного объекта его математической моделью и исследовании современными вычислительными средствами математических моделей. Методология математического моделирования бурно развивается, охватывая все новые сферы - от разработки больших технических систем и управления ими до анализа сложнейших экономических и социальных процессов.

Широкое применение математических методов позволяет поднять общий уровень теоретических исследований, дает возможность проводить их в более тесной связи с экспериментальными исследованиями.

Математическое моделирование может рассматриваться как новый метод познания, который сочетает в себе многие достоинства как теории, так и эксперимента. Работа не с самим объектом (явлением, процессом), а с его моделью дает возможность безболезненно, относительно быстро и без существенных затрат исследовать его свойства и поведение в любых мыслимых ситуациях (преимущества теории). В то же время вычислительные (компьютерные, имитационные) эксперименты с моделями объектов позволяют подробно и глубоко изучать объекты в достаточной полноте, недоступной чисто теоретическим подходам (преимущества эксперимента).

Технические, экологические, экономические и иные системы, изучаемые современной наукой, больше не поддаются исследованию обычными теоретическими методами. Прямой натурный эксперимент над ними долог, дорог, часто либо опасен, либо попросту невозможен. Вычислительный эксперимент позволяет провести исследование быстрее и дешевле. Без применения этой методологии в развитых странах не реализуется ни один крупномасштабный технологический, экологический или экономический проект.

Рождение и становление методологии математического моделирования пришлось на конец 40 - начало 50-х г. XX века и было обусловлено двумя причинами. Первым, но не основным, побудительным мотивом послужило появление компьютеров, которые избавили исследователей от огромной по объему рутинной вычислительной работы. Второй, более важной, причиной явился беспрецедентный социальный заказ - выполнение национальных программ СССР и США по созданию ракетно-ядерного щита. Эти сложнейшие научно-технические проблемы не могли быть реализованы традиционными методами без широкого использования вычислительных средств. Ядерные взрывы и полеты ракет

и спутников были промоделированы сначала на компьютерах и лишь затем претворены на практике.

Основу математического моделирования составляет триада: модель - алгоритм - программа. Математические модели реальных исследуемых процессов сложны и включают системы нелинейных функционально-дифференциальных уравнений. Ядро математической модели составляют уравнения с частными производными.

На первом этапе вычислительного эксперимента выбирается (или строится) модель исследуемого объекта, отражающая в математической форме важнейшие его свойства - законы, которым он подчиняется, связи, присущие составляющим его частям, и т. д. Математическая модель (ее основные фрагменты) исследуется традиционными аналитическими средствами прикладной математики для получения предварительных знаний об объекте.

Второй этап связан с выбором (или разработкой) вычислительного алгоритма для реализации модели на компьютере. Необходимо получить искомые величины с заданной точностью на имеющейся вычислительной технике. Вычислительные алгоритмы должны не искажать основные свойства модели и, следовательно, исходного объекта, они должны быть адаптирующимися к особенностям решаемых задач и используемых вычислительных средств. Изучение математических моделей проводится методами вычислительной математики, основу которых составляют численные методы решения задач математической физики - краевых задач для уравнений с частными производными.

На третьем этапе создается программное обеспечение для реализации модели и алгоритма на компьютере. Программный продукт должен учитывать важнейшую специфику математического моделирования, связанную с использованием ряда (иерархии) математических моделей, многовариантностью расчетов. Это

подразумевает широкое использование комплексов и пакетов прикладных программ, разрабатываемых, в частности, на основе объектно-ориентированного программирования.

Успех математического моделирования определяется одинаково глубокой проработкой всех основных звеньев вычислительного эксперимента. Опираясь на триаду модель - алгоритм - программа, исследователь получает в руки универсальный, гибкий и недорогой инструмент, который вначале отлаживается, тестируется и калибруется на решении содержательного набора пробных задач. После этого проводится широкомасштабное исследование математической модели для получения необходимых качественных и количественных свойств и характеристик исследуемого объекта.

Вычислительный эксперимент по своей природе носит междисциплинарный характер. В совместных исследованиях участвуют специалисты в прикладной области, прикладной и вычислительной математике, по прикладному и системному программному обеспечению. Вычислительный эксперимент проводится с опорой на широкое использование самых разных методов и подходов - от качественного анализа нелинейных математических моделей до современных языков программирования.

Решение проблем жизнеобеспечения на современном этапе основывается на широком использовании математического моделирования и вычислительного эксперимента. Вычислительные средства (компьютеры и численные методы) традиционно хорошо представлены в естественно - научных исследованиях, прежде всего в физике и механике. Идет активный процесс математизации химии и биологии, наук о земле, гуманитарных наук и т.д.

Современные информационные технологии используются в медицине. Сбор и анализ диагностических данных позволяет провести

своевременную диагностику заболеваний. Например, компьютерный томограф является примером того, как использование математических методов обработки больших массивов данных позволило получить качественно новый медицинский инструментарий.

1.3. Математическое моделирование

Математизация знаний

На эмпирическом уровне развития науки описываются наблюдаемые явления, проводятся опыты, собираются и классифицируются экспериментальные данные. Для теоретического уровня характерно введение новых абстракций и идеализаций, понятий, формулировка основных законов, образующих ядро теории. При этом достигается целостный взгляд на исследуемый объект, дается единое истолкование всей совокупности экспериментальных данных.

Большая эвристическая роль теории проявляется в том, что она позволяет предсказать новые, ранее не известные характеристики объекта, явления или процесса. История развития науки содержит блестящие иллюстрации этого: открытие Нептуна, открытие позитрона и т.д. Математические идеи и методы служат не просто математическими украшениями, а действенными средствами количественного и качественного анализа.

Мы являемся свидетелями все более широкого использования математических идей в экономике, истории и других гуманитарных науках. Процесс математизации наук идет чрезвычайно быстро благодаря опыту, накопленному при математизации механики и физики, достигнутому уровню развития самой математики. Применение математики в химии и биологии в большой степени базируется на уже разработанном ранее математическом аппарате. Поэтому темпы математизации этих наук в значительной степени сдерживаются только

уровнем развития самой химии, самой биологии. Успешное применение математических методов требует прежде всего глубокого овладения содержанием исследуемого процесса или явления, необходимо быть, прежде всего, специалистом в прикладной области, а потом уже математиком.

Единство природы проявляется в том, что для описания различных физических, химических, биологических и т.д. процессов и явлений применяются одни и те же математические модели. Это свойство конечного числа математических моделей отражает прежде всего их абстрактность. Одно и то же математическое выражение (понятие) может описывать совершенно различные процессы, характеристики. Это позволяет, в частности, при исследовании одного конкретного явления или процесса использовать результаты, полученные при исследовании другого явления или процесса. В такой общности, единстве математических моделей проявляется интегрирующая роль математики, ее методов.

Использование математических моделей

При математизации научных знаний выделяется этап абстрагирования от конкретной природы явления, идеализации и выделения его математической формы (строится математическая модель).

Вторым этапом математизации является исследование математических моделей как математических (абстрактных) объектов.

Третий этап применения математики в прикладных исследованиях характеризуется интерпретацией - приданием конкретного прикладного содержания математическим абстракциям. Специалист по прикладному математическому моделированию, работая бок о бок со специалистами в прикладной области, всегда за математическими абстракциями видит конкретное прикладное содержание.

Эвристическая роль математического моделирования проявляется в том, что вместо натурального эксперимента проводится математический

эксперимент. Вместо исследования проявления того или иного воздействия на исследуемый объект используется параметрическое изучение математической модели, устанавливается зависимость решения от того или иного параметра. Такой эксперимент, дополняя натурный, позволяет значительно глубже исследовать явление или процесс.

1.4. Компьютеры в математическом моделировании

Новые возможности математики

Вычислительные средства, под которыми мы понимаем компьютеры и вычислительные методы, позволили решить с приемлемой точностью и за разумное время задачи, которые ранее были недоступны для исследования, дали возможность реализовать крупнейшие научно-технические проекты.

Аналитические методы исследования математических моделей

Сама математическая модель может быть достаточно сложной, нелинейной. Это зачастую делает невозможным ее качественное исследование традиционными методами прикладной математики. Именно поэтому в громадном большинстве случаев проводится качественное исследование на более простых, но обязательно содержательных по отношению к исходной математической модели задачах. В этом случае мы должны говорить о модельных (упрощенных) задачах для основной математической модели (моделей для модели).

Большое внимание при качественном исследовании математических моделей (или модельных задач для них) уделяется вопросам корректности. Прежде всего рассматривается проблема существования решения. Соответствующие строгие результаты (теоремы существования) дают уверенность в корректности математической модели. Кроме того, конструктивные доказательства теорем существования могут быть положены в основу приближенных методов решения поставленной задачи.

При прикладном математическом моделировании важным является вопрос об устойчивости решения относительно малых возмущений входных данных. Неустойчивость (неограниченный рост решения при малых возмущениях) наиболее характерна для обратных задач и должна учитываться при построении приближенного решения.

Для нелинейных математических моделей может быть характерна множественность, неединственность решения. При качественном исследовании математических моделей изучаются точки ветвления, бифуркации решения, вопросы выделения нужного искомого решения и многое другое.

Методы качественного исследования для различных типов математических моделей разработаны с неодинаковой полнотой. Среди моделей, где качественные методы принесли наиболее впечатляющие результаты, отметим обыкновенные дифференциальные уравнения. В теории уравнений с частными производными качественные методы также используются, хотя и не в такой большой степени.

Точное или приближенное решение находится с использованием аналитических и численных методов. В этой связи среди классических примеров аналитических методов отметим методы разделения переменных, интегральных преобразований для линейных задач математической физики.

Для нелинейных математических моделей особое значение имеют методы линеаризации, различные варианты методов возмущений. Теория возмущений базируется на использовании асимптотических разложений по выделенному малому параметру.

Сложные нелинейные многопараметрические модели могут быть исследованы на компьютере численными методами. В отличие от аналитического решения, которое может давать явную параметрическую зависимость решения от тех или иных условий задачи, при численном

решении требуется многократное решение задачи при изменении того или иного параметра. Но ведь численное решение может быть получено и для тех задач, для которых аналитического решения нет.

Использование компьютеров

Применять компьютеры можно и на этапе качественного исследования математической модели, этапе отыскания аналитических решений модельных задач. Например, компьютер можно использовать для нахождения автомодельных решений. При выделении автомодельной переменной исходная задача для уравнения в частных производных сводится, например, к обыкновенному дифференциальному уравнению, происходит понижение размерности. Общее решение последнего находится на основе использования систем аналитических вычислений на компьютере (методов вычислительной алгебры), широко представленных в современных математических пакетах.

В применении компьютеров при математическом моделировании можно выделить, по крайней мере, два этапа, два уровня. Первый из них характеризуется исследованием достаточно простых математических моделей. На этом этапе (уровне) применения компьютеров вычислительные средства используются наряду и наравне с другими методами (чисто математическими) прикладной математики. Для этого уровня применения компьютеров в прикладном математическом моделировании характерен лозунг Р. Хеминга: "Цель расчетов - понимание, а не числа".

Второй этап (уровень) применения компьютеров характеризуется исследованием сложных нелинейных математических моделей. В этих условиях вычислительные средства становятся основными, абсолютно преобладающими. Традиционные средства прикладного математического моделирования выполняют вспомогательную, обслуживающую роль

(качественное исследование задачи в сильно упрощенных постановках - модельные задачи, тестирование вычислительных алгоритмов и т.д.).

Именно возможность исследования сложных математических моделей на основе численных методов и компьютеров позволяет с новых позиций рассмотреть методологию научных исследований. Мощные компьютеры, высокоэффективные вычислительные алгоритмы, современное программное обеспечение позволяют в настоящее время организовать научные исследования в рамках единой технологии вычислительного эксперимента, который включает в себя теоретические и экспериментальные исследования.

Обработка экспериментальных данных

Экспериментатор в самой общей схеме своего исследования воздействует на исследуемый объект, получает информацию о результатах этого воздействия и обрабатывает ее. Эти данные зашумлены случайными погрешностями измерений. В силу этого при первичной обработке экспериментальных данных основной математический аппарат базируется на теории вероятностей и математической статистике. Экспериментальные исследования все чаще ведутся с помощью измерительно-вычислительных комплексов, которые позволяют получать, хранить и обрабатывать экспериментальные данные.

Математическая модель прибора

Настоящий уровень развития экспериментальных исследований характеризуется возрастающим применением все более совершенных приборов. Сами приборы с неизбежностью вносят возмущения в исследуемое явление или процесс. С целью избавления от этих погрешностей строится математическая модель прибора.

При проведении экспериментов необходимо иметь в виду две принципиально различные ситуации. Первая из них связана с ситуацией, когда для исследуемого явления или объекта нет теоретического описания,

нет математической модели, и ставится задача накопления экспериментального материала с тем, чтобы в последующем дать теоретическое описание. В этом случае математические методы используются для хранения и переработки информации, в частности, для получения эмпирических зависимостей.

По массе экспериментальных данных необходимо подобрать параметры аппроксимационных моделей так, чтобы с приемлемой точностью можно было описать экспериментальные данные. В этом случае мы сталкиваемся с необходимостью приближенного решения соответствующих задач минимизации.

Второй класс экспериментов проводится в условиях, когда есть теоретическое описание исследуемого объекта. Структура математической модели определена и ставится задача определения параметров модели. Сам натуральный эксперимент направлен на то, чтобы определить те или иные свойства объекта, на конкретизацию математической модели объекта.

При обработке опытных данных таких экспериментов часто приходится иметь дело с обратными задачами. Такие задачи могут быть некорректными в классическом смысле и поэтому трудными для численного исследования.

1.5. Вычислительный эксперимент

Основные этапы вычислительного эксперимента

В широком (методологическом) смысле под вычислительным экспериментом мы понимаем новую технологию научных исследований.

Для исследуемого объекта сначала строится математическая модель. Она базируется на известных фундаментальных моделях. Вычислительный эксперимент, по своей сути, предусматривает исследование группы близких моделей. Вначале строится простая, но достаточно

содержательная и полная с точки зрения описания исследуемых процессов и близости к экспериментальным данным модель.

В процессе проведения вычислительного эксперимента, на его последующих циклах модель уточняется, учитываются новые факторы и т.д. Поэтому мы всегда можем говорить (более того, должны говорить) о наборе, упорядоченном наборе (об иерархии) математических моделей, каждая из которых с той или иной точностью описывает действительность. И в рамках наиболее простой модели необходимо добиваться согласия с экспериментом. Это и является, в конце концов, целью вычислительного эксперимента.

Суть вычислительного эксперимента, его содержательное зерно состоит в исследовании на компьютере математических моделей численными методами.

Основное содержание предварительного исследования математической модели состоит в выделении более простых (модельных) задач и их всестороннем исследовании, так как полная математическая модель слишком сложна. Модельные математические задачи в цикле вычислительного эксперимента строятся для двух различных целей: во-первых, для качественного исследования полной задачи (а опосредованно и исследуемого объекта), во-вторых - для проверки, тестирования вычислительных алгоритмов приближенного решения полной задачи.

Программное обеспечение вычислительного эксперимента базируется на использовании комплексов и пакетов прикладных программ. Комплекс программ предназначен для решения близких по своей математической природе задач из одной предметной области. Он включает в себя библиотеку программных модулей (в большой или меньшей степени независимых), из которых комплектуются рабочие программы. В комплексах прикладных программ сборка программ из модулей осуществляется вручную.

Затем в цикле вычислительного эксперимента проводится серия расчетов на компьютерах при изменении тех или иных параметров задачи. Полученные данные анализируются и интерпретируются с участием специалистов в прикладной области. Обработка результатов проводится с учетом имеющихся теоретических представлений и экспериментальных данных. Она осуществляется во многом в традициях классического натурального эксперимента. Сами опытные данные представляются в виде таблиц, графиков, фотографий с дисплея, кинофильмов и т.д.

Надо только всегда иметь в виду, что объем обрабатываемой информации, детализация полученных результатов в вычислительном эксперименте несравненно больше. В вычислительном эксперименте проблемы хранения и обработки информации имеют все возрастающее значение.

На этапе анализа результатов становится ясным, удачно ли выбрана математическая модель, ее вычислительная реализация. Если есть необходимость, модели и численные методы уточняются, и весь цикл вычислительного эксперимента повторяется, то есть совершается новый виток спирали в познании истины.

Основные особенности новой технологии научных исследований

Чрезвычайно важно отметить универсальность вычислительного эксперимента, которая позволяет легко переносить эту технологию на исследование других объектов. Это обстоятельство порождено тем, что многие явления и процессы имеют одни и те же математические модели.

Второй особенностью вычислительного эксперимента как технологии научных исследований является его междисциплинарный характер. Мы постоянно подчеркиваем это обстоятельство, говоря о том, что прикладной математик объединил теоретика и экспериментатора для более быстрого достижения общей цели.

Можно отметить следующие отличительные особенности и преимущества вычислительного эксперимента перед натурным экспериментом.

Во-первых, вычислительный эксперимент проводится даже тогда, когда натуральный эксперимент невозможен. Такая ситуация имеет место с крупномасштабными экологическими экспериментами. Отметим в этой связи моделирование глобальных климатических изменений при использовании атомного оружия. Другой пример - исследование процессов при термоядерных параметрах (кроме взрыва атомной бомбы пока нет других возможностей достичь их).

Во-вторых, при использовании вычислительного эксперимента резко снижается стоимость разработок и экономится время. Это обеспечивается многовариантностью выполняемых расчетов, простотой модификации математических моделей для имитации тех или иных реальных условий.

В традициях экспериментального исследования мы воздействуем на математическую модель и обрабатываем результаты (вот почему мы говорим об эксперименте, хотя и вычислительном). И лишь изредка мы контролируем точность своего "прибора", сравнивая его с эталоном. В традициях теоретического исследования в вычислительном эксперименте мы имеем дело с математической моделью, а не с самим объектом.

1.6. Вычислительный эксперимент в науке и технологии

Области применения вычислительного эксперимента

Математическое моделирование традиционно развивается в недрах фундаментальных наук: механике и физике, для которых отмечается наивысший уровень теоретических исследований (другими словами, уровень математизации).

Значительно менее совершенен математический арсенал инженера и технолога. В современных условиях необходимо обеспечить повсеместное

непосредственное внедрение математических методов в науку и технологию. Математическое моделирование технологических процессов сулит огромную выгоду, переход на новый качественный уровень самой технологии. Наиболее благодатное поле для приложения методов математического моделирования и вычислительного эксперимента - техника и промышленность, технология. Особое внимание заслуживают отрасли, определяющие научно-технический прогресс сегодня, и прежде всего микроэлектроника и нанотехнологии.

Отметим еще один аспект в применении вычислительного эксперимента. В настоящее время мировая общественность совершенно справедливо обеспокоена экологическими последствиями крупномасштабных проектов, обеспечением безопасности функционирования работающих установок и проектируемых объектов. Вычислительный эксперимент на базе адекватных моделей позволяет испытать модель экологически опасного объекта в мыслимых и немыслимых условиях, дать практические рекомендации обеспечения условий безопасной работы, дать, если хотите, гарантии такой работы.

Различные типы вычислительного эксперимента

При исследовании нового процесса или явления обычный подход связан с построением математической модели и проведением расчетов при изменении параметров задачи. В этом случае мы имеем поисковый вычислительный эксперимент.

В результате проведения поискового вычислительного эксперимента дается описание наблюдаемым явлениям, прогнозируется поведение исследуемого объекта в тех или иных условиях, возможно и не достижимых в реальных условиях. Такой тип вычислительного эксперимента характерен при проведении теоретических исследований в фундаментальных науках.

С другой стороны, при математическом моделировании технологических процессов в качестве основного может быть выбран оптимизационный вычислительный эксперимент. Для него характерно решение задачи оптимизации по уменьшению затрат, облегчению конструкции и т.д. Для сформулированной математической модели ставится соответствующая задача оптимального управления, задача оптимизации.

При обработке данных натуральных экспериментов используется диагностический вычислительный эксперимент. По дополнительным косвенным измерениям делается вывод о внутренних связях явления или процесса. В условиях, когда структура математической модели исследуемого процесса известна, ставится задача идентификации модели, например, определяются коэффициенты уравнений. Диагностическому вычислительному эксперименту обычно ставится в соответствие обратная задача математической физики.

Часто приходится сталкиваться с положением, когда математической модели исследуемого процесса или явления нет и создать ее не представляется возможным. Такая ситуация характерна, в частности, при обработке данных натурального эксперимента. Тогда обработка проводится в режиме "черного ящика" и мы имеем дело с аппроксимационными моделями. При отсутствии математических моделей на основе широкого использования компьютеров проводится имитационное моделирование.

Тема 2. Вычислительный эксперимент синтеза экранирующей маски для напыления тонкопленочной волноводной линзы.

2.1. Пример технического устройства, основанного на волноводной линзе.

Впечатляющей реализацией многоэлементной интегрально-оптической системы является гибридный вариант ВЧ-спектроанализатора, работающий в реальном масштабе времени. Цель спектроанализатора – дать возможность пилоту военного самолета получать мгновенный спектральный анализ входящего радиолокационного сигнала, чтобы определить, чем отслеживается его самолет: наземной станцией, ракетой воздух-воздух или чем-то еще. Очевидно, что такая информация является очень ценной, если летчику необходимо предпринять эффективные контрмеры. Разумеется, необходимо иметь для сравнения частотный состав всех вражеских радиолокационных сигналов (с которыми вероятно встреча), хранящихся в памяти бортового компьютера самолета.

Схема интегрально-оптического спектроанализатора состоит в следующем. Свет от лазерного источника вводится в планарный волновод, в котором он проходит вначале через коллимирующую линзу, а затем через акустооптический модулятор брэгговского типа [5, 6].

Высокочастотный (ВЧ) сигнал, спектр которого необходимо проанализировать, подается на акустический преобразователь, который генерирует звуковые волны с изменяемым периодом. Таким образом, угол отклонения оптического луча на выходе модулятора зависит от ВЧ сигнала. Для фокусировки оптического луча на линейку фотодетекторов используется вторая линза – тонкопленочная волноводная линза Люнеберга. Если в ВЧ сигнале присутствует более одной частотной компоненты, луч света разделяется на соответствующие компоненты, которые фокусируются на различные детекторные элементы. Каждый

детекторный элемент представляет собой определенный частотный канал, и, поскольку фотодиоды обычно имеют квадратичные характеристики, выходной сигнал с каждого канала пропорционален ВЧ-мощности на данной частоте. Преимущество интегрально-оптического спектроанализатора по сравнению с электронным состоит в том, что требуется лишь несколько оптических элементов для выполнения тех функций, которые в противном случае требовали бы тысячи электронных элементов.

Разработка рабочих моделей интегрально-оптического ВЧ-спектроанализатора велась в нескольких различных лабораториях. Первая работающая модель была изготовлена в Westinghouse Advanced Technology Laboratories в 1980 г. Проектирование и разработка технологии изготовления элементов аналогичного интегрально-оптического устройства проводилась в то же время в РУДН с участием авторов данного учебного пособия.

2.2 Принципиальные проблемы реализации вычислительного эксперимента.

Технологический цикл вычислительного эксперимента условно разбивается [1, 2] на этапы:

- выбор физического приближения (отбор учитываемых в модели эффектов) изучаемого явления или процесса;
- выбор (или построение) математической модели соответствующего физического приближения;
- выбор (или разработка) численных алгоритмов, продиктованных физическими свойствами изучаемого явления (процесса);
- реализация алгоритма в виде программы приближенных вычислений на компьютере;

- проведение расчетов на компьютере, приближенно моделирующих характерные черты и особенности изучаемого явления (процесса);
- сравнение результатов численных экспериментов с результатами натуральных экспериментов (если последние осуществимы), интерпретация и анализ результатов расчетов, выработка вывода о состоятельности моделей (физической и математической) и достоверности результатов вычислений на компьютере, о необходимости продолжения (и развития) вычислительного эксперимента или его завершения.

Продемонстрируем реализацию вычислительного эксперимента на примере решения следующей технологической задачи: нанесение (методом экранируемого вакуумного высокочастотного распыления) тонкой диэлектрической пленки заданного (в рамках некоторой математической модели) профиля толщины на волноводную диэлектрическую пленку равномерной толщины с целью изготовления тонкопленочной волноводной линзы Люнеберга. Последняя обеспечивает преобразование линейного волнового фронта (задача носит двухмерный характер) монохроматического лазерного сигнала, распространяющегося вдоль волноводной пленки и пересекающую на своем пути волноводную линзу, по мере прохождения через территорию линзы в круговой, сходящийся без aberrаций в точку фокуса волновой фронт. Т.е. тонкопленочная волноводная линза Люнеберга обеспечивает безабберационную фокусировку набегающего на линзу с одной стороны параллельного пучка лучей в точке фокуса на противоположной стороне. Причем, это свойство линза Люнеберга сохраняет при возможных поворотах, т.е. она обладает свойством круговой (в плане) или цилиндрической (в пространстве) симметрии. Все фокальные точки расположены на окружности радиуса $F = SR$, где R - радиус утолщения

волноводной пленки, обеспечивающего фокусировку, а S -нормированное на радиус линзы фокусное расстояние.

Первый ключевой вопрос – вопрос о проектировании (математическом синтезе) тонкопленочной волноводной линзы, о задании профиля толщины волноводного слоя, обеспечивающего нужные фокусирующие свойства линзы. Задача синтеза может быть решена в рамках модели геометрической оптики и в рамках модовой (волновой) модели распространения монохроматического света (электромагнитного сигнала в видимом диапазоне частот) в многослойном диэлектрическом волноводе. В работах [7, 8] первая модель использовалась без обоснования. В работах [9-11] обоснованы вторая и первая модель и показаны границы их применимости.

Второй ключевой вопрос – об управлении процессом экранируемого вакуумного напыления с целью изготовления заданного (синтезированного математически) профиля толщины тонкой диэлектрической пленки. Вопрос об эффективном управлении процессом напыления, т.е. о выборе экранирующей маски, решается в рамках двух моделей: предварительной модели Яо или Хатакоши [12-15], опирающейся на предполагаемое известное фиксированное распределение частиц напыляемого вещества в области входа экранирующей маски; и окончательной модели, оперирующей с эффективным распределением частиц напыляемого вещества, слабо зависящим от формы экранирующей маски, и тем самым обеспечивающим обратную связь (медленную по параметрам отверстия маски), в обсуждаемом управлении процессом напыления.

В работе [9] изложено решение этого вопроса – анализ физического содержания экранируемого напыления, изучению возможностей формализовать участвующие физические параметры в рамках единой математической модели и, наконец, формулировке этой модели –

интегрального уравнения первого рода, использующей вспомогательное понятие об эффективном распределении частиц напыляемого вещества.

Третьим ключевым вопросом вычислительного эксперимента является вопрос измерения напыленной тонкопленочной волноводной линзы Люнеберга и интерпретация данных измерений. Здесь следует отметить существование использовавшихся методов и методик измерения толщины тонких диэлектрических пленок. Они разрабатывались для своих специфических нужд и там работали достаточно хорошо. Например, профилометрия хороша для измерения толщины резкого обрыва тонкой пленки или для измерения толщины равномерной (по толщине) тонкой пленки. Профилоинтерферометрия хороша для отслеживания, не изменяется ли вдоль контролируемой линии толщина тонкой диэлектрической пленки на величину, сравнимую с полудлиной используемого лазерного излучения.

Хотя тонкие пленки широко используются в течение многих лет в научных исследованиях, до 80-х г. XX века не было представлено ни одного метода, универсально приспособленного для оптической характеристики тонкой пленки. Большинство экспериментальных работ описывало процесс приготовления пленки и результирующие данные, но лишь очень немногие делали попытки характеристики тонкой пленки более общим способом, чем специфический способ, которому посвящена работа.

Экспериментальные результаты по тонким пленкам являются трудновоспроизводимыми и малодостоверными, т.к. до сих пор не существует их универсального описания, учитывающего изменение их оптических свойств от такого множества факторов, как жесткость (твердость) поверхности, кристаллическое строение и температура подложки, кристаллическая структура пленки, ее химическая чистота, а также метод нанесения пленки на подложку.

Несмотря на то, что многие работы (представленные в них методы) претендуют на описание оптических констант пленки, лишь очень редкие сообщают, насколько точно эти константы подтверждаются другими методами.

В работе [16] неоднородная анизотропная пленка с зависящим от точки коэффициентом преломления $n_{ij}(\vec{r})$ представляется пакетом плоскопараллельных изотропных однородных пленок. Затем с использованием формул Френеля моделируются ее характеристики. Метод основан на явлении полного внутреннего отражения, сопровождающегося временами сдвигом фазы на 180° .

В профилометрическом способе измеряется физическая толщина напыленного слоя вдоль центрального сечения (по диаметру) области неоднородности [17, 18].

В профилоинтерферометрическом способе, называемом еще фотометрическим способом, узкий лазерный пучок направляется на волновод перпендикулярно его подложке [19]. После отражения возникает интерференция, вызванная наличием разности хода лучей, отраженных от границ: воздух - напыленный слой и напыленный слой - подложка.

Интенсивность интерференционной картинке отраженного света измеряется с помощью фотометра в зависимости от положения вдоль центрального сечения неоднородности. Для тех значений аргумента, где достигаются экстремальные значения (максимумы и минимумы) интенсивности освещенности, значения оптической толщины волновода кратны четверти длины волны света, используемого для зондирования.

Предполагается, что напыленный волноводный слой оптически неоднороден по глубине и имеет показатель преломления n_l равный показателю преломления напыляемого материала, мы получаем, что

значения толщины волноводного слоя в точках экстремумов равны $\frac{k\lambda}{4n_1}$,

где $k=1$ для первых с краю максимумов и возрастает на единицу при переходе к следующему экстремуму в направлении центра (обычно толщина напыленного слоя монотонно возрастает с краев к центру).

В точках кривой зависимости интенсивности от положения вдоль сечения, промежуточных между экстремумами, значения интенсивности также могут быть пересчитаны в значения толщины волноводного слоя, но значительно менее точно [20].

В результате обработки профилометрических и профилоинтерферометрических измерений получаются приближенные значения функции профиля восстанавливаемой толщины на одномерной сетке с малым числом точек.

В интерферометрическом способе используется тот же эффект, что и в профилоинтерферометрическом. В нем лазерный пучок, опускаемый перпендикулярно на поверхность волновода с помощью коллиматора расширяется настолько, чтобы он накрыл всю область неоднородности с некоторым запасом. Отраженный широкий пучок создает типичную картину интерференционных полос-колец на плоскости. Картина фиксируется на фотопластинку или ПЗС-матрицу.

Преимуществом по сравнению с профилоинтерферометрией является то, что снимается двухмерная картина. Недостатком - существенно худшая точность измерения интенсивности в точках плоскости. (Сюда же добавляются нелинейные искажения интенсивности пучка при коллимации.)

В большинстве случаев из-за плохо поддающейся учету нелинейной светочувствительности фотоматериалов приходится ограничиваться оцифровкой только линий экстремальной яркости: минимальной и максимальной. Разность толщин напыленного слоя между точками

соседних линий составляет постоянную величину $\Delta = \frac{\lambda}{4n_l}$. Нулевой интерференционной полосой является граница области неоднородности - здесь нулевое утолщение волноводного слоя по сравнению с его толщиной вне области неоднородности. Каждой последующей по направлению к центру неоднородности полосе (линии) экстремальной интенсивности приписывается утолщение $\Delta = \frac{\lambda}{4n_l}$ по сравнению с предыдущей. Затем исследуемая поверхность аппроксимируется по дискретным приближенным значениям на двумерной сетке.

Два последних перечисленных метода измерения профиля толщины напыленной пленки обладают общими недостатками. Во-первых, большая погрешность аппроксимации восстанавливаемой непрерывной функции профиля по малому числу точек (число экстремумов и число интерференционных полос-колец определяется толщиной имеющейся пленки и не может быть увеличено). Во-вторых, модель предполагает однородную по глубине изотропную диэлектрическую проницаемость напыленной пленки. (Реально напыленные на установке высокочастотного катодного распыления на аморфную подложку пленки аморфны и однородны по структуре в основной своей толще, но на границе «пленка-подложка» имеется «вскипевший» пограничный, неоднородный по составу и молекулярной структуре, тонкий слой.)

При решении поставленной задачи пришлось разрабатывать специальные методы измерения, т.к. предыдущие давали 2-10 числовых данных на изготовленный образец - число данных заведомо неприемлемое. Попытки увеличить число измеренных данных в рамках применяемых ранее методов приводили к использованию дополнительных модельных предположений, которые были либо непроверяемы, либо неприемлемы. Для нескольких методов измерительной процедуры готового образца

можно предложить адекватные математические модели. Таковыми явились - метод лучевого зондирования (уже использованного успешно много лет назад), поставляющего один-два десятка кривых (лучей на территории линзы), которые можно оцифровать с приборной точностью (одна-две сотни точек на кривой) измерительной аппаратуры (фотография, ПЗС-матрица).

Заключительный метод - метод интерференции адиабатических мод и разработанная для него математическая модель, во-первых, повышает количество цифровых данных для измеряемого образца в сотни раз и, во-вторых, поставляет данные, дополнительные к данным лучевого зондирования: лучи - волновые фронты постоянной фазы.

Тема 3. Первый этап реализации вычислительного эксперимента.

3.1. Синтез обобщенной линзы Люнеберга с полной и неполной апертурой.

Одним из основных элементов оптоэлектроники является планарная линза, назначение которой состоит в фокусировке пучка света, распространяющегося вдоль волновода. Вне зависимости от способа изготовления планарной линзы ее свойства как плоской оптической системы определяются распределением приведенного эффективного показателя преломления $n(x, y)$ [20]. Планарные линзы суть планарные оптические системы специального вида, обладающие следующими свойствами:

- планарные линзы являются планарными оптическими системами островного типа, т.е. их эффективный показатель преломления n постоянен везде, кроме некоторой ограниченной области Q плоскости: $n(p) = n_0$ для точек p вне области Q ; область Q называется областью неоднородности, а дополнение к ней регулярной частью планарной линзы;

- эффективный показатель преломления n является гладкой (непрерывно дифференцируемой) функцией точки плоскости, т.е. в каждой точке p плоскости существует градиент $\vec{\nabla}n$ эффективного показателя преломления и компоненты $\vec{\nabla}n$ непрерывно зависят от декартовых координат точки плоскости.

Планарная линза называется круговой, если она обладает круговой симметрией, т.е. существует точка O - центр линзы, такая, что значение приведенного эффективного показателя преломления в точке зависит только от расстояния от этой точки до центра. Пусть (x, y) - декартовы координаты, $n(x, y)$ - приведенный эффективный показатель преломления.

Приведенный эффективный показатель преломления круговой линзы характеризуется положением (x_0, y_0) центра O линзы и функцией профиля $n(r)$:

$$n(x, y) = n(r) \quad (3.1)$$

где r - расстояние от точки (x, y) до центра линзы:

$$r = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}.$$

Круговая симметрия линзы обеспечивает ей следующее весьма ценное свойство: при изменении угла набегания пучка лучей на круговую линзу точка фокусировки смещается по окружности фокусов, но длина фокусного расстояния не меняется.

Все лучи, параллельные оси Ox , на входе в линзу однозначно определяются своими прицельными расстояниями. Прицельное расстояние h луча - это расстояние от центра линзы до прямой, являющейся продолжением прямолинейного начала луча. Лучи с прицельными расстояниями больше радиуса неоднородности линзы заведомо будут прямыми и не сфокусируются. Центральный луч ($h = 0$) в круговой линзе обязательно является прямым и проходит через фокус.

Для удобства будем предполагать, что система координат выбрана с началом в центре O линзы, радиус круга неоднородности Q взят за единицу измерения расстояния. Радиус круга неоднородности называют просто радиусом линзы. Пусть $n(r)$ - функция профиля приведенного эффективного показателя преломления (круговой) линзы, s - длина фокусного расстояния в единицах радиуса линзы. Вне круга неоднородности $n = 1$, т.е. при $r \geq 1$ функция профиля $n(r)$ тождественно равна единице.

Говорят, что планарная линза с функцией профиля $n(r)$ является идеальной обобщенной линзой Люнеберга с приведенным фокусным

расстоянием $s, s > 1$ и полушириной рабочей апертуры a , если пучок параллельных лучей с прицельными расстояниями h , не превосходящими a , сфокусируется на расстоянии s от центра линзы. При этом лучи с прицельными расстояниями больше a могут вести себя как угодно (рис. 1). В оптоэлектронике интересуются линзами с $s \leq 2$.

Замечание. В случае, если $a = 1$, планарная линза называется идеальной обобщенной линзой Люнеберга с полной апертурой. Функция распределения приведенного эффективного показателя преломления планарной линзы с полной апертурой имеет особую точку $r = 1$, где производная функции профиля $n'(r)$ терпит разрыв. Физически реализуемы только планарные линзы с непрерывно дифференцируемыми функциями профиля, поэтому мы остановимся на рассмотрении случая $a < 1$.

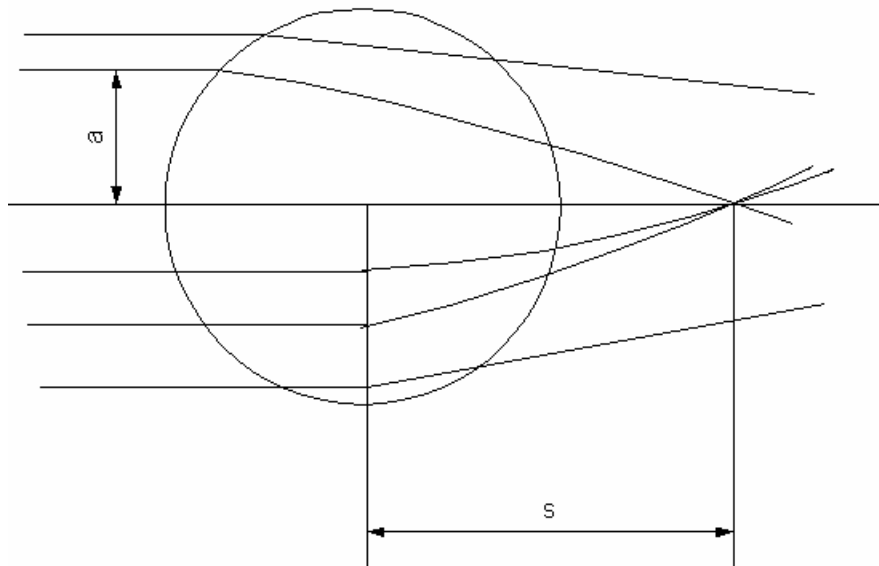


Рис. 1. Следы лучей, проходящих через идеальную обобщенную линзу Люнеберга с апертурой a и фокусным расстоянием s

Для выбранных приведенного фокусного расстояния s и полуширины рабочей апертуры a теоретически можно построить много функций профиля $n(r)$, таких, что планарная оптическая система с построенной функцией профиля является идеальной обобщенной линзой

Люнеберга с заданными значениями s и a . Однако практически можно реализовать только планарные линзы с непрерывно дифференцируемым эффективным показателем преломления. Соответственно искомая функция профиля должна быть непрерывно дифференцируема и иметь нулевую производную в нуле. Непрерывно дифференцируемые функции профиля, дающие идеальной обобщенной линзой Люнеберга с наперед заданными значениями s и a , были найдены в работах [21, 22]. Они различаются между собой. Функции профиля из [22] вычисляется несколько проще. Ниже приводится алгоритм вычисления этой функции профиля. Для удобства дальнейшего изложения введем функцию

$$p(r) = n(r)r, \quad 0 \leq r, \quad (3.2)$$

которую можно условно называть производящей функцией профиля эффективного показателя преломления. Гладкие профили, обеспечивающие фокусировку в практически интересных случаях, являются строго монотонно возрастающими функциями, следовательно, имеющими обратные. В случае монотонной производящей функцией профиля соотношение (3.2) определяет неявно функцию зависимости n от p :

$$n = f(p), \quad 0 \leq p. \quad (3.3)$$

Наоборот, если известна функция (3.3), то (3.2) вместе с (3.3) неявно определяют зависимость n от r . Практически для определения зависимости n от r приходится численно решать уравнение

$$n = f(rn). \quad (3.4)$$

Введем параметр b - число из интервала $[0,1]$, которое связано с размером рабочей апертуры линзы соотношением $a = n(b)b$. Круг $0 \leq r \leq b$ - внутренняя часть линзы, кольцо $b \leq r \leq 1$ - периферийная (рис. 2).

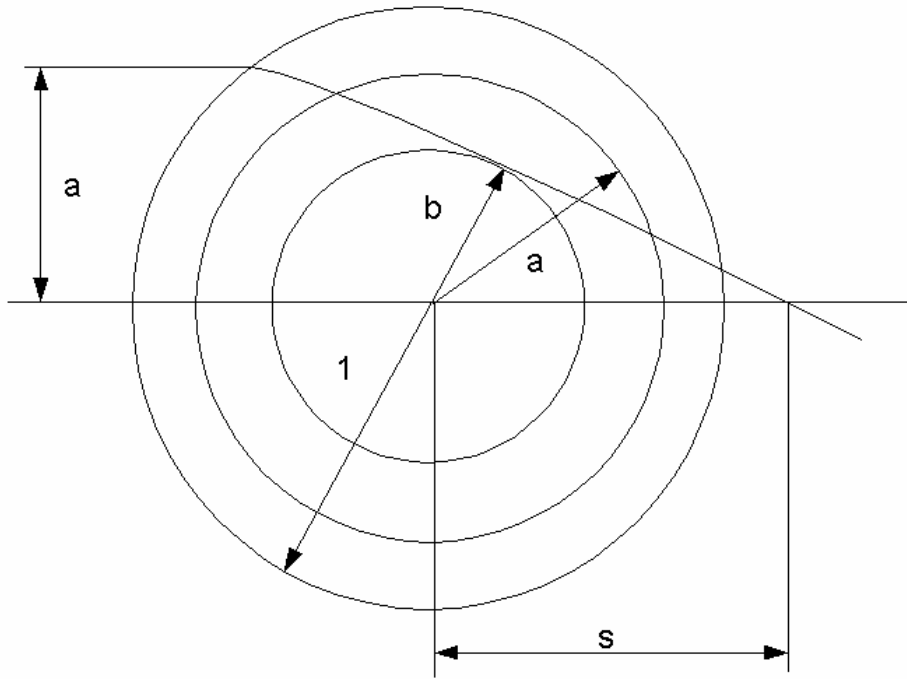


Рис. 2. Схема идеальной обобщенной линзы Лунеберга с неполной апертурой

Зададим для периферийной части линзы монотонно возрастающую непрерывно дифференцируемую производящую функцию профиля $\vec{p}(r)$ $b \leq r \leq 1$. Соответствующая ей функция профиля выражается

$$\vec{n}(r) = \vec{p}(r) / r. \quad (3.5)$$

Тогда искомая производящая функция профиля

$$p(r), \quad 0 \leq r \leq b \quad (3.6)$$

во внутренней части линзы определяется из интегрального уравнения, выражающего условие фокусировки пучка параллельных лучей с прицельными расстояниями $h \leq a$ на расстоянии s от центра линзы:

$$\int_{r^*(h)}^a \frac{h dr}{r [p^2(x) - h^2]^{1/2}} + \int_a^1 \frac{h dr}{r [p^2(x) - h^2]^{1/2}} = f(h),$$

где $f(h) = \frac{1}{2} \left[\arcsin\left(\frac{h}{s}\right) + 2 \arccos(h) \right]$, а $r^*(h)$ - минимальное расстояние от

луча с прицельным параметром h до центра линзы.

Сохацкий и Гомез-Рейно [22] предложили определить в периферийной части линзы профиль $n(r)$ неявно с помощью соотношения типа (3.4) в виде

$$f(p) = \exp\left\{q^* \left(1 - \bar{p}^2\right) + \left(1 - \bar{p}\right) + \ln \bar{p}\right\}, a \leq p \leq 1, q = \text{const}, \quad (3.7)$$

где $\bar{p} = \bar{n}r$. Из (3.7) может быть получена явная зависимость n от r в периферийной части линзы:

$$n(r) = \frac{1}{r} + \frac{1 - \sqrt{1 - 4q \ln r}}{2qr}, b \leq r \leq 1. \quad (3.8)$$

Для любого значения константы q выполняется $n(1) = 1$ и $\left.\frac{dn(r)}{dr}\right|_{r=1} = 0$. Константа q выбирается из условия непрерывности производной функции профиля:

$$q = \frac{aB - \frac{1}{2} \arcsin(a/s) - \arccos a}{2a(A - B)}, \quad (3.9)$$

где $A = \sqrt{1 - a^2}$, $B = \ln((1 + A)/a)$.

Пусть $C = \sqrt{a^2 - p^2}$. Искомая производящая функция профиля задается неявно уравнением

$$\begin{aligned} f(p) = & f(a) \left(1 + \sqrt{1 - (p/a)^2}\right) \cdot \\ & \cdot \exp\left\{w(p/a, s/a) - 2w(p/a, 1/a) - qC^2 - (2q + 1)(a - p) + \right. \\ & + 2\frac{q}{\bar{n}} \left(CA + \sqrt{1 - p^2} \arctg(C/A)\right) + \\ & \left. + \frac{2(2q + 1)}{\bar{n}} \left(CB + \arctg(C/A) - P \arcsin\left(\frac{C}{A(1 - p^2)^{1/2}}\right)\right)\right\}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

где

$$w(p, s) = \frac{1}{\tilde{n}_p} \int_p^1 \frac{\arcsin(t/s)}{(t^2 - p^2)^{1/2}} dt - \quad (3.11)$$

классический интеграл Люнеберга [23], способы вычисления которого известны [21, 22]. Наиболее точный и необременительный по машинным ресурсам метод вычисления (3.11) дан в [21]. Метод основан на представлении (3.11) в виде ряда

$$w(p, s) = \frac{(1 - p^2)^{1/2}}{\tilde{n}} \sum_{m=0}^{\infty} (2m+1)^{-2} s^{-(2m+1)} \sum_{n=0}^m \frac{(2n)! p^{2(m-n)}}{4^n (n!)^2}. \quad (3.12)$$

Если ограничиться числом слагаемых M , то сумма отброшенных членов $E(M)$ мажорируется легко вычисляемым выражением:

$$\bar{E}(M) = \frac{1}{2(2M-1)(1-p^2)^{1/2} (1+\ln s) s^{(2M+1)}}.$$

Поэтому при заданных аргументах p, s интеграла (3.11), $0 \leq p \leq 1, s \leq 1$ и заданной точности ε , с которой надо вычислить (3.11), можно выбрать подходящее значение M числа слагаемых в ряде (3.12) для получения требуемой точности.

Соотношение (3.10) вместе с (3.4) неявно задает непрерывно дифференцируемую функцию профиля $n = n(r)$ эффективного показателя преломления линзы с приведенным фокусным расстоянием s и полушириной рабочей апертуры a . Переход от неявного задания функции профиля в виде (3.10), (3.4) к явному заданию в виде $n = n(r)$ осуществляется путем численного поиска корней уравнения (3.10) для фиксированных значений радиуса r . Для быстрого поиска корней системы (3.10), (3.4) можно использовать метод Ньютона. При этом полезно использовать выражение для частной производной интеграла Люнеберга по первому аргументу через элементарные функции [21]

$$\frac{\partial w(p, s)}{\partial p} = \frac{1}{\tilde{n}p} \left[\frac{\tilde{n}}{4} - \frac{1}{2} \arcsin \left(\frac{p^2 + s^2 - 2}{s^2 - p^2} \right) - \frac{\arcsin(1/s)}{(1-p^2)^{1/2}} \right].$$

**Идеальная обобщенная линза Люнеберга с неполной апертурой.
Приближенное решение.**

Соотношения (3.10), (3.11) позволяют в принципе находить функцию профиля идеальной обобщенной линзы Люнеберга с наперед заданной точностью. Однако формулы (3.10), (3.11) достаточно сложны для вычислений. Кроме того, функция профиля в них задается неявно, следовательно, требуется составить итерационный процесс для нахождения $n(r)$. В связи с этим [21] была предпринята попытка найти приближенное выражение для функции профиля, которое значительно упрощало бы расчеты. Рассмотрим предложенный в [21] метод приближенного решения задачи нахождения функции профиля идеальной обобщенной линзы Люнеберга.

Для того чтобы наглядно продемонстрировать сущность описываемого метода, остановимся сначала на линзе с полной апертурой. Запишем упрощенную форму уравнения для лучей [21]:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = \frac{\partial n}{\partial y}. \quad (3.13)$$

Угол фокусировки $Q = Q(y)$ можно выразить через интеграл

$$\operatorname{tg} Q(y) = \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial n}{\partial y} dx, \quad (3.14)$$

где X_1 , это координата точки, где луч входит в линзу, а X_2 - координата точки, где луч выходит из линзы (рис. 3). Теперь сделаем следующее допущение: луч от точки X_1 до точки X_2 распространяется прямолинейно. Это допущение незначительно снизит точность, если фокусное расстояние линзы достаточно велико [21]. Координату x теперь можно связать с y и

r соотношением $x = (r^2 - y^2)^{1/2}$.

Поскольку n является функцией аргумента r , то можно записать

$$dx = \frac{r dr}{(r^2 - y^2)^{1/2}}, \quad \frac{\partial n}{\partial y} = \frac{y}{r} \frac{dn}{dr}. \quad (3.15)$$

Следовательно, уравнение (3.2) приобретает форму

$$\operatorname{tg} Q(y) = 2 \int_y^1 \frac{dn/dr \cdot y \cdot dr}{(r^2 - y^2)^{1/2}}, \quad 0 \leq r \leq 1. \quad (3.16)$$

Такое интегральное уравнение (типа Абеля) может быть решено известными методами и решение

$$n(r) = 1 + \frac{1}{\tilde{n}} \int_r^1 \frac{\operatorname{tg} Q(y) dy}{(r^2 - y^2)^{1/2}}, \quad 0 \leq r \leq 1 \quad (3.17)$$

выражает функцию профиля через функцию угла фокусировки $Q(y)$.

Предполагая Q малым (фокусное расстояние большое) запишем $\operatorname{tg} Q \approx y/s$. После этого можно записать окончательный результат

$$n(r) = 1 + \frac{(1 - r^2)^{1/2}}{\tilde{n}s}, \quad 0 \leq r \leq 1. \quad (3.18)$$

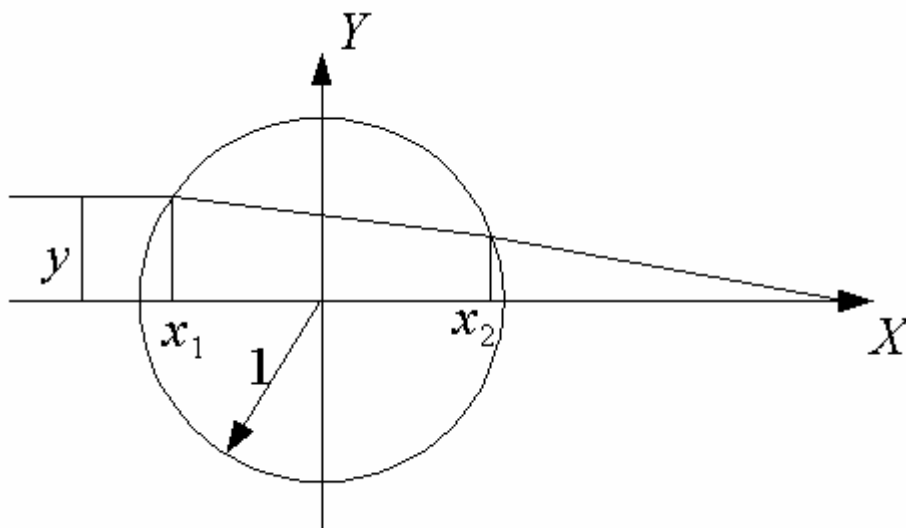


Рис.3. Схема прохождения луча через круговую тонкопленочную волноводную линзу

По проведенным авторами [21] расчетам полученная аппроксимация функции профиля дает хорошие результаты для линз с фокусными расстояниями $s \geq 5$.

Теперь рассмотрим случай линзы с неполной апертурой, которая обеспечивает гладкость функции профиля $n(r)$. Для линз с неполной апертурой помимо условия фокусировки лучей должно выполняться условие непрерывности функции профиля и ее производной, в частности на границе линзы. Вместо того, чтобы вводить специальную функцию для внешней части линзы, мы предположим, что функция угла фокусировки является непрерывной и запишем несколько измененное условие фокусировки:

$$\operatorname{tg}Q(y) = \begin{cases} y/s, & 0 \leq y \leq a; \\ \frac{a}{s(1-a)}(1-y), & a \leq y \leq 1 \end{cases}, \quad (3.19)$$

где a обозначает рабочую апертуру линзы. Непрерывность функции угла фокусировки обеспечивает гладкость функции профиля $n(r)$:

$$n(r) = 1 + \frac{a}{\tilde{n}s(1-a)} \left[\ln \left(\frac{1 + (1-r^2)^{1/2}}{r} \right) - (1-r^2)^{1/2} \right], \quad a \leq r \leq 1, \quad (3.20)$$

$$n(r) = 1 + \frac{a}{\tilde{n}f(1-a)} \left[\ln \left(\frac{1 + (1-r^2)^{1/2}}{a + (a^2 - r^2)^{1/2}} \right) + \frac{(a^2 - r^2)^{1/2}}{a} - (1-r^2)^{1/2} \right], \quad 0 \leq r \leq a$$

$$n(0) = 1 + \frac{a \ln a}{ns(a-1)};$$

$$n(1) = 1.$$

Производная функции профиля описывается соотношениями:

$$n'(r) = \begin{cases} 1 + \frac{a}{\tilde{n}s(1-a)} \frac{(1-r^2)^{1/2}}{r}, & a \leq r \leq 1 \\ -\frac{a}{\tilde{n}f(1-a)} \frac{(1-r^2)^{1/2}}{r} \left[1 - \frac{1}{a} \left(\frac{a^2 - r^2}{1-r^2} \right)^{1/2} \right], & 0 \leq r \leq a \end{cases} \quad (3.21)$$

Простота приведенных формул по сравнению с точными решениями [8, 20] очевидна. Точность аппроксимации функции профиля зависит от фокусного расстояния линзы и является достаточно хорошей для линз с фокусным расстоянием больше $s > 5$.

3.2. Синтез профиля толщины напыленного слоя тонкопленочной волноводной линзы

В предыдущем пункте учебного пособия мы получили выражения (аналитические и численные) для распределения коэффициента преломления обобщенной линзы Люнеберга $n(\rho, s)$ и линзы Люнеберга с неполной апертурой $n(\rho, a, s)$. Им однозначно соответствуют распределения n_f в зависимости от нормированного радиуса линзы:

$$n_{eff}(r, s), n_{eff}(r, b, s), 0 \leq r \leq 1, 0 < b < 1, s \geq 1.$$

Если интересоваться только распространением электромагнитных волн вдоль координат y и z , то возможно рассматривать задачу распространения электромагнитных волн вдоль волновода в рамках геометрической оптики. В этом случае от трехмерной модели волновода переходят к двумерной (см., например, [24-29]), где:

- волновод рассматривается в виде плоской оптической среды с заданным распределением эффективного показателя преломления $n_m^{E,H}(y, z)$;
- лучи света распространяются вдоль плоскости yOz ;

- траектории лучей, распространяющихся вдоль волновода зависят от $n_m^{E,H}(y,z)$.

Эффективный показатель преломления является такой характеристикой волновода, которая в рамках названной модели заключает в себе зависимость распространения электромагнитных волн от толщины волноводного слоя, химического состава волноводного слоя и подложки, качества поверхностей соприкосновения волноводного слоя с подложкой и с внешней средой. Таким образом, для каждого частного решения уравнений Максвелла эффективный показатель преломления полностью определяет характер распространения света в волноводе, а следовательно, и свойства волновода. Функция $n(y,z)$, каждой точке плоскости ставящая в соответствие значение эффективного показателя преломления, называется распределением эффективного показателя преломления. Распределение эффективного показателя преломления является основной характеристикой тонкопленочных волноводов.

Связь между профилем толщины $n(y,z)$ и распределением коэффициента замедления $\beta(y,z)$ обеспечивают дисперсионные соотношения для трехслойного волновода и дисперсионные соотношения для четырехслойного волновода [9-11].

Дисперсионные уравнения для тонкопленочной волноводной линзы, записанные в виде равенства нулю детерминанта матрицы размерности 12 [9-11], отличаются от пары уравнений работы [7] на величины первого порядка малости по $\frac{\partial h}{\partial y}$ и $\frac{\partial h}{\partial z}$. Если эти малые члены отбросить, то система из двенадцати уравнений распадается на две независимые системы по шесть уравнений. Равенство нулю соответствующих детерминантов с точностью до величин первого порядка малости по δ совпадают с дисперсионными уравнениями работы [7]. Этими уравнениями мы и будем

пользоваться в настоящем пункте с целью синтеза толщины дополнительных (напыленных) волноводных слоев для каждой из регулярных волноводных мод, чтобы она распространялась вдоль семейства лучей.

Рассмотрим для этого подробно m -ую ТМ-моду (регулярную моду регулярного участка волновода), которой соответствует дисперсионное уравнение для коэффициента замедления $\beta_m^E = const$.

В выражениях для m -ой ТМ-моды следует положить:

$$\gamma_s = \sqrt{\beta_m^2 n_{eff}^2 - k^2 n_s^2};$$

$$\gamma_c = \sqrt{\beta_m^2 n_{eff}^2 - k^2 n_c^2};$$

$$\chi_l = \sqrt{k^2 n_l^2 - \beta_m^2 n_{eff}^2};$$

для основного же волноводного слоя n_f возможны два случая:

- на периферии линзы

$$kn_f \leq \beta_m n_{eff} \Rightarrow \gamma_f = \sqrt{\beta_m^2 n_{eff}^2 - k^2 n_f^2};$$

- в центральной части линзы

$$kn_f > \beta_m n_{eff} \Rightarrow \chi_f = \sqrt{k^2 n_f^2 - \beta_m^2 n_{eff}^2}.$$

Обозначим через r_c (критическое значение нормированного радиуса линзы) точку, в которой $kn_f = \beta_m n_{eff}$. Ясно, что для каждой моды это своя точка $r_c^m(E, H)$, а для некоторых мод ее может и не быть, т.к. при малых

β_m может оказаться $n_{eff}(0) < \frac{kn_f}{\beta_m}$.

В докритичной области $r_{cr} \leq r \leq 1$ дисперсионное уравнение для m -й ТМ-моды (m -й адиабатической моды) имеет вид (см. [9])

$$\begin{aligned}
& \arctg \left\{ \frac{n_f^2 \left(k^2 n_l^2 - \beta_m^2 n_{eff}^2(y, z) \right)^{1/2}}{n_l^2 \left(k^2 n_f^2 - \beta_m^2 n_{eff}^2(y, z) \right)} \times \right. \\
& \quad \left. \times \operatorname{tg} \left[d \sqrt{k^2 n_f^2 - \beta_m^2 n_{eff}^2(y, z)} + \arctg \left\{ \frac{n_s^2 \left(k^2 n_f^2 - \beta_m^2 n_{eff}^2(y, z) \right)^{1/2}}{n_f^2 \left(\beta_m^2 n_{eff}^2(y, z) - k^2 n_s^2 \right)} \right\} \right] \right\} = (3.22) \\
& = m\pi - \\
& \quad - \arctg \left\{ \frac{n_c^2 \left(k^2 n_l^2 - \beta_m^2 n_{eff}^2(y, z) \right)^{1/2}}{n_l^2 \left(\beta_m^2 n_{eff}^2(y, z) - k^2 n_c^2 \right)} \right\} - h(y, z) \sqrt{k^2 n_l^2 - \beta_m^2 n_{eff}^2(y, z)}.
\end{aligned}$$

В закритичной области $0 \leq r \leq r_{cr}$ -

$$\begin{aligned}
& \arctg \left\{ - \frac{n_f^2 \left(k^2 n_l^2 - \beta_m^2 n_{eff}^2(y, z) \right)^{1/2}}{n_l^2 \left(\beta_m^2 n_{eff}^2(y, z) - k^2 n_f^2 \right)} \times \right. \\
& \quad \left. \times \operatorname{th} \left[d \sqrt{\beta_m^2 n_{eff}^2(y, z) - k^2 n_f^2} + \operatorname{arcth} \left\{ - \frac{n_s^2 \left(\beta_m^2 n_{eff}^2(y, z) - k^2 n_f^2 \right)^{1/2}}{n_f^2 \left(\beta_m^2 n_{eff}^2(y, z) - k^2 n_s^2 \right)} \right\} \right] \right\} = (3.23) \\
& = m\pi - \\
& \quad - \arctg \left\{ \frac{n_c^2 \left(k^2 n_l^2 - \beta_m^2 n_{eff}^2(y, z) \right)^{1/2}}{n_l^2 \left(\beta_m^2 n_{eff}^2(y, z) - k^2 n_c^2 \right)} \right\} - h(y, z) \sqrt{k^2 n_l^2 - \beta_m^2 n_{eff}^2(y, z)}.
\end{aligned}$$

Аналогично для m -й ТМ-моды в докритичной области $r_{cr} \leq r \leq 1$ дисперсионные уравнения имеют вид

$$\begin{aligned}
& \arctg \left\{ \left(\frac{k^2 n_l^2 - \beta_m^2 n_{eff}^2(y, z)}{k^2 n_f^2 - \beta_m^2 n_{eff}^2(y, z)} \right)^{1/2} \times \right. \\
& \quad \left. \times \operatorname{tg} \left[d \sqrt{k^2 n_f^2 - \beta_m^2 n_{eff}^2(y, z)} + \arctg \left\{ \left(\frac{k^2 n_f^2 - \beta_m^2 n_{eff}^2(y, z)}{\beta_m^2 n_{eff}^2(y, z) - k^2 n_s^2} \right)^{1/2} \right\} \right] \right\} = (3.24) \\
& = m\pi - \\
& \quad - \arctg \left\{ \left(\frac{k^2 n_l^2 - \beta_m^2 n_{eff}^2(y, z)}{\beta_m^2 n_{eff}^2(y, z) - k^2 n_c^2} \right)^{1/2} \right\} - h(y, z) \sqrt{k^2 n_l^2 - \beta_m^2 n_{eff}^2(y, z)}.
\end{aligned}$$

В закритичной области $0 \leq r \leq r_{cr}$ -

$$\begin{aligned}
& \operatorname{arctg} \left\{ - \left(\frac{k^2 n_i^2 - \beta_m^2 n_{eff}^2(y, z)}{\beta_m^2 n_{eff}^2(y, z) - k^2 n_f^2} \right)^{1/2} \times \right. \\
& \left. \times \operatorname{th} \left[d \sqrt{\beta_m^2 n_{eff}^2(y, z) - k^2 n_f^2} + \operatorname{arctg} \left\{ - \left(\frac{\beta_m^2 n_{eff}^2(y, z) - k^2 n_f^2}{\beta_m^2 n_{eff}^2(y, z) - k^2 n_s^2} \right)^{1/2} \right\} \right] \right\} = (3.25) \\
& = m\pi - \\
& - \operatorname{arctg} \left\{ \left(\frac{k^2 n_i^2 - \beta_m^2 n_{eff}^2(y, z)}{\beta_m^2 n_{eff}^2(y, z) - k^2 n_c^2} \right)^{1/2} \right\} - h(y, z) \sqrt{k^2 n_i^2 - \beta_m^2 n_{eff}^2(y, z)}.
\end{aligned}$$

Разрешая уравнение (3.22) в докритичной области и уравнения (3.23) (3.24) в закритичной области относительно $h(y, z)$ при заданном приведенном эффективном показателе преломления обобщенной линзы Люнеберга (с полной или неполной апертурой), мы получаем распределение толщины напыленного слоя $h_m^E(y, z)$, при котором m -ая ТМ-мода преобразуется нерегулярным участком волновода как планарной линзой Люнеберга. Аналогично, разрешая (3.24) и (3.25) относительно $h(y, z)$, получаем профиль толщины $h_m^E(y, z)$, при котором m -ая ТМ-мода преобразуется нерегулярным участком волновода как планарной линзой Люнеберга.

3.3. Способы измерения профиля толщины напыленного слоя.

Первые же попытки Цернике и его сотрудников [30-32] изготовить подобие волноводной тонкопленочной линзы Люнеберга в вакуумной установке термического напыления смеси B_aO и S_iO_2 (показатель преломления 1.59) через механическую экранирующую маску с коническим отверстием на волноводный слой Nb_2O_5 (индекс 2.29), расположенный на стеклянной подложке (показатель преломления 1.52) показали принципиальную возможность разрешения проблемы изготовления тонкопленочной линзы Люнеберга таким путем. Однако в

случае этой простейшей экранирующей маски аберрации оказались ненулевыми. Для достижения безабберационности форма отверстия маски должна быть сложнее и функционально связана с процессом прохождения электромагнитного сигнала вдоль волноводного слоя через линзу.

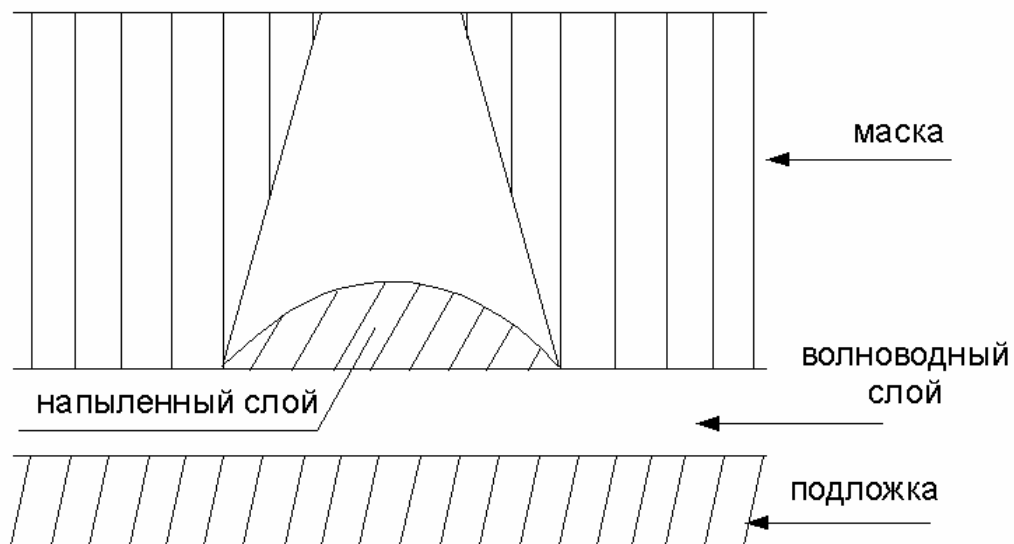


Рис. 4. Напыление через коническую маску

Так что одновременно эти попытки привели к двум равновелико сложным проблемам:

- как рассчитывать параметры экранирующей маски по техническому паспорту напылительной установки и по синтезированному ранее [21-23] профилю толщины тонкопленочной линзы Люнеберга;
- как практически проверить, получилась ли в результате напылительного эксперимента требуемая волноводная тонкопленочная линза Люнеберга.

Итак, имеется две связанные задачи: с одной стороны, проблема построения математической модели экранируемого вакуумного напыления, и последующее решение задачи синтеза параметров маски по параметрам тонкопленочной линзы Люнеберга в рамках модели.

С другой стороны, имеется проблема формулировки физических эффектов прямого или косвенного метода измерения волноводных характеристик напыленной диэлектрической пленки относительно проходящего вдоль нее лазерного излучения.

Под руководством Цернике Ф. на подложку, изготовленную Гоуллом, через коническое отверстие в экранирующей маске (рис. 4) Мак Гроу напылил почти тонкопленочную линзу Люнеберга. Цернике провел диагностику напыленного слоя, пропуская вначале серию лазерных пучков через полученное утолщение и фиксируя их следы на одной фотографии, а затем пропуская широкий параллельный пучок монохроматического конкретного света перпендикулярно плоскости подложки.

Точность этих измерений обеспечивает лишь качественный характер описания. Отсюда и вывод: принципиальная возможность и рекомендация улучшить качество диагностики.

В трехмерной оптике фокусирующие свойства оптических линз можно проверить сканированием фокальной плоскости. Однако для планарных оптических устройств техника измерений должна быть модифицирована в силу погруженности тонкопленочных оптических волноводных линз в окружающее волноводное тонкопленочное окружение. Прямое сканирование фокальной окрестности будет сильно зашумлено нерегулярностями рассеивающих неоднородностей в тонкой пленке.

Для приспособления волноводной пленки к традиционным устройствам оптических измерений нужны две призмы: одна вводит лазерный пучок в пленку, другая выводит его в пространство. Выведенный из окрестности фокальной линии световой сигнал усиливается трехмерной оптической системой. Затем через узкую щель направляется на фотодетектор, щель сканирует фокальную окрестность.

Интерферометрия является достаточно развитой и широко используемой методикой исследования. В интерферометрах различными способами создаются, а затем интерферируют два волновых фронта (две волны): эталонный и полученный от контролируемой поверхности. Принципы образования интерференционной картины достаточно подробно описаны в литературе [33-34]. Кратко суть явления состоит в том, что при сложении когерентных световых волн (двух и более) интенсивность результирующей волны зависит от разности фаз складывающихся волн. Реализуются в основном два случая интерференции, при которых наблюдаются полосы (кольца) равного наклона или полосы равной толщины [34]. Интерферометрия позволяет проводить измерения в белом и монохроматическом свете.

Механическая профилометрия является широко используемым методом контроля качества обработки различных поверхностей. В отличие от других методов механическая профилометрия является принципиально контактным методом по своей сути: измерение профиля поверхности осуществляется путем перемещения механического жесткого щупа (например, алмазной иглы) по поверхности. Полученные щупом вертикальные микроперемещения с помощью оптико-рычажной системы воспроизводятся в увеличенном масштабе.

Простейший механический профилометр – ближайший родственник граммафона, с той лишь разницей, что сигнал не преобразуется в звуковой, а выводится на дисплей в виде профиля; образец не вращается, а перемещается прямолинейно. Состыковка отдельных профилей с помощью программного обеспечения дает возможность получать 3D изображение поверхности.

Механические профилометры серии Dektak предназначены для измерения шероховатости поверхности, высоты ступенек, планарности и прогиба пластин, деформаций, возникающих при нанесении тонких

пленок, контроля качества микросхем и мелкотраншейной изоляции. Автоматизированное и программируемое основание позволяют собирать статистику со множества точек на образце, что в сочетании со специальными вакуумными держателями делает профилометры Dektak незаменимыми для производителей полупроводниковых пластин, микросхем и микроэлектромеханических систем.

Важным преимуществом оптических профилометров (интерференционных микроскопов) является то, что они создают 3D изображение без контакта с исследуемой поверхностью. Это позволяет работать с образцами вне зависимости от жесткости поверхности: мягкими пленками, лакокрасочными покрытиями, смазками, тканями, биологическими объектами. Метод позволяет регистрировать особенности рельефа, начиная от шероховатости нанометрового масштаба до ступенек миллиметровой высоты. Разрешение по нормали к образцу для метода интерферометрии фазового контраста составляет десятые доли нанометра. Оптические профилометры фирмы «Veeco NT» могут исследовать практически любые образцы с коэффициентом отражения от 1 до 100%. Специально разработанное программное обеспечение позволяет определять толщину толстых (3-25 мкм) и тонких (0,05-3 мкм) полупрозрачных пленок.



Новый профилометр Dektak 150

Новый профилометр Dektak 150, самый мощный и продвинутый профилометр на сегодняшний день, поставляется в трех возможных конфигурациях:

- стандартная конфигурация с основанием 4x4 дюйма (100 мм) и ручным перемещением и поворотом основания дает 2D профили поверхности;
- конфигурация с основанием, автоматизированным по Y, дает 3D профили поверхности;
- наличие 6-дюймового основания (150x150 мм) добавляет автоматизацию и возможность программирования для получения данных с множества участков (до 200).

Новый дизайн позволяет увеличить толщину образца до 6 дюймов, длину скана – до 55 мм, максимальную высоту рельефа – до 512 мкм в стандартном исполнении (до 1 мм – опция). Повторяемость измерений высоты ступени улучшена до 6 Ангстрем.

3.4. Синтез параметров экранирующей маски (для напыления тонкопленочной волноводной линзы Люнеберга)

В работах [31, 32, 35] показано, что в большинстве установок вакуумного напыления частицы напыляемого вещества, оторвавшись с большой энергией от источника после столкновений с частицами среды (разреженный газ, низкий вакуум) или между собой, замедляют свою скорость до попадания на подложку, и процесс напыления можно считать диффузионным [35]. Таким образом, каждая точка протяженного источника эквивалентна Ламбертовому точечному источнику [12-14], т.е. распределение частиц в потоке по направлениям косинусоидально. Средний свободный пробег частицы считается [12-14, 35] большим, чем расстояние от входа в маску до подложки. Следовательно, траектории частиц на этом участке можно считать прямолинейными.

В типичной напылительной системе с точечным источником, изображенным на рис. 5, распределение напыляемых частиц в точке, удаленной от источника, определяется лишь направлением от источника к данной точке и является пропорциональным $\cos\theta$, где θ - угол между нормалью к поверхности источника и траектории частицы. В случае протяженного источника это распределение надо проинтегрировать по поверхности источника. В результате получается распределение частиц в коническом телесном угле, под которым источник виден из обсуждаемой точки через отверстие маски, подчиняющееся косинусоидальному закону.

Физический процесс вакуумного напыления во многом удовлетворяет условиям для точечного источника, изображенного на рис. 5, а. Предполагая, что точечный источник расположен в точке (x, y) на высоте d_1 над маской и входное отверстие маски задано функцией $M(x_1, y_1)$, получим, что профиль толщины напыленной пленки может быть описан формулой

$$D(x_0, x; y_0, y) = M\left(\frac{d_1 x_0 - d_2 x}{d_1 + d_2}, \frac{d_1 y_0 - d_2 y}{d_1 + d_2}\right) \cos\theta \cdot A(\theta), \quad (3.26)$$

которая задает не что иное, как масштабированную и сдвинутую реплику функции отверстия маски M . В формуле (3.26) d_2 - расстояние между листовой маской и подложкой, (x, y) - координаты в плоскости $z = d_1 + d_2$, (x_0, y_0) - координаты в плоскости $z = 0$, а $A(\theta)$ - угловое распределение напыляемых частиц в окрестности точки (x, y) источника. Отметим, что $A(\theta) = \cos\theta$ для источника с Ламбертовым распределением. Для частиц, прибывающих к поверхности подложки под углом θ , скорость напыления уменьшается на множитель $\cos\theta$ в формуле (3.26) за счет увеличения принимающего участка поверхности подложки.

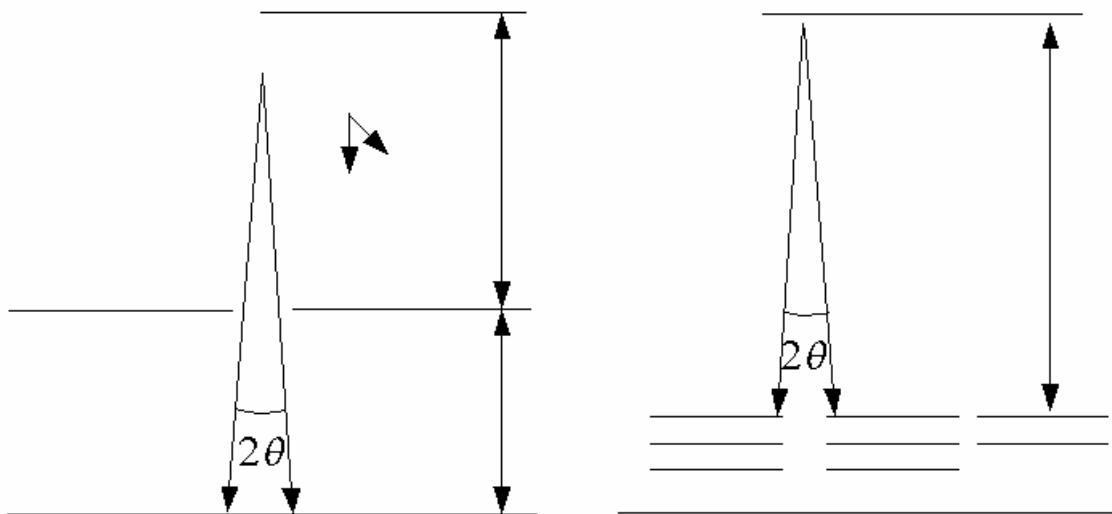


Рис. 5. Схема теневого экранирования точечного источника

Формула (3.26) может быть модифицирована для применения к пакету листовых масок, приближающему объемную маску, изображенную на рис. 5, *b*. Для пакета из N листовых масок с отверстиями, заданными функциями M_i , профиль толщины напыленного слоя описывается формулой

$$D^g(x_0, x; y_0, y) = A(\theta) \cos \theta \cdot \prod_{i=1}^n M_i \left(\frac{\sum_{n=1}^i d_n x_0 - \sum_{n=i+1}^{n+1} d_n x}{\sum_{n=1}^{n+1} d_n}, \frac{\sum_{n=1}^i d_n y_0 - \sum_{n=i+1}^{n+1} d_n y}{\sum_{n=1}^{n+1} d_n} \right), \quad (3.27)$$

где d_i - расстояние между листами (см. рис. 5, *b*).

Естественно ожидать, что геометрия протяженного источника существенно изменит распределение частиц на входе в отверстие маски и, следовательно, породит заметный теневой эффект. В общем случае тень будет с размытым профилем вместо четкой реплики отверстия маски.

Реальное физическое напыление из протяженного источника можно рассмотреть как суперпозицию напылений из точечных источников (без интерференции). В таком случае профиль толщины напыленного через листовую маску слоя равен

$$D(x_0, y_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \int D(x_0, x; y_0, y) S(x, y) dx dy, \quad (3.28)$$

через многолистовую маску

$$D^g(x_0, y_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \int D^g(x_0, x; y_0, y) S(x, y) dx dy, \quad (3.29)$$

где $S(x, y)$ - функция распределения для протяженного источника.

В случае круговых масок может быть получена более простая модель вычисления эффектов экранирования в процессе напыления с помощью траекторий частиц через толстую маску. Как отмечалось ранее, распределение потока частиц, прибывающих ко входу в маску по направлениям в каждой точке $P_1(x_1, y_1)$, является Ламбертовым, т.е.

$$A(\theta) = \left\{ \begin{array}{l} \cos \theta, \quad \varphi_1 < \theta < \varphi_2 \\ 0, \quad \varphi_1 > \theta \text{ и } \theta < \varphi_2 \end{array} \right\}, \quad (3.30)$$

где φ_1 и φ_2 углы видимости границ протяженного источника из точки $P_1(x_1, y_1)$ через отверстие маски. Отметим, что $A(\theta)$ приближается к $\cos \theta$, при размерах источника значительно превышающих расстояние между источником и подложкой. В случае, когда частицы испытывают столкновения по пути от источника ко входу в маску (случай установок термического вакуумного напыления, в отличие от установок высокочастотного вакуумного распыления), множитель $A(\theta)$ отклоняется от выражения (3.30) появлением полутеней на границах раскрыва телесного угла (φ_1, φ_2) . Распределение частиц от такого источника очень

близко к Ламбертову при больших размерах источника. Далее при большом отношении толщины маски к диаметру входного отверстия $A(\theta)$ отлично от нуля при малых углах и даже в случае термического напыления распределение близко к Ламбертову. Важность множителя $A(\theta)$ не только в предсказательности, но и в измеримости. Определив однажды $A(\theta)$, можно вычислить скорость напыления в любой точке $P_0(x_0, y_0, 0)$ поверхности подложки по формуле

$$T(x_0, y_0, 0) = \iint_{\chi} \frac{A(\theta) \cos \theta}{R^2} dx dy,$$

где $\theta = \arccos \frac{z_1}{R}$, $R = [(x_1 - x_0)^2 + (y_1 - y_0)^2 + z_1^2]^{1/2}$, (dx, dy) - малая площадка отверстия входа маски, χ - часть входа маски, видимая из точки P_0 . Расстояние z_1 отсчитывается от плоскости входа маски до плоскости подложки. Остается проблема определения эффективного отверстия χ каждой точки подложки $P_0(x_0, y_0)$. Часто для этого требуется вычислительная процедура. Эту проблему можно упростить для круглого отверстия экранирующей маски.

Экранируемое напыление от протяженного источника.

На основе описанного алгоритма просчитаны варианты зависимости скорости роста напыленного слоя в зависимости от параметров объемных масок с прямоугольными и круглыми отверстиями. В работах [12-14] вначале была рассчитана маска с коническим отверстием, чтобы напыленный через нее слой приближенно следовал заданному профилю толщины. Дополнительный конический сегмент был помещен сверху первоначальной маски, чтобы улучшить гладкость (первую производную) профиля напыленного слоя. Еще один дополнительный конический сегмент был помещен снизу первоначальной маски с целью сгладить

острые углы на периферии напыленного слоя. Окончательный проект маски содержит двенадцать сегментов.

В работе [15] для получения идеального профиля толщины напыленного слоя была предложена и рассмотрена двухлистовая маска: с круговым отверстием лист, ближний к подложке, и с кольцевым дальний от подложки.

Толщина пленки $h(r)$ в точке r к подложки вычисляется по формуле

$$h(r) = \text{const} \iint_A \frac{1}{p^2} \left(\frac{l}{p} \right)^2 dA. \quad (3.31)$$

Здесь p - расстояние между точкой на источнике частиц и точкой на подложке, l - расстояние от источника до подложки. Интегрирование производится по области A источника (протяженного), не перекрытого от точки r подложки ни «кольцевым», ни «круговым» листами маски. Желаемый профиль толщины получался подбором параметров отверстий. Если для полученных (рассчитанных с помощью двухлистных масок) напыленных слоев вычислить траектории лучей, то для линз с неполной апертурой результат численного моделирования экранирующей маски удастся лучше, чем для линз с полной апертурой.

3.5. Проверка состоятельности первого этапа вычислительного эксперимента

Теперь, когда мы двумя способами синтезировали экранирующую маску для напыления тонкопленочной волноводной линзы Люнеберга:

- двенадцатисегментную (из конических сегментов с выпуклым в сторону оси профилем отверстия ($R(z): z_0, R_0; z_1, R_1; \dots; z_n = H, R_n$)) маску (рис. 6) в модели Yao и др. [12-14];

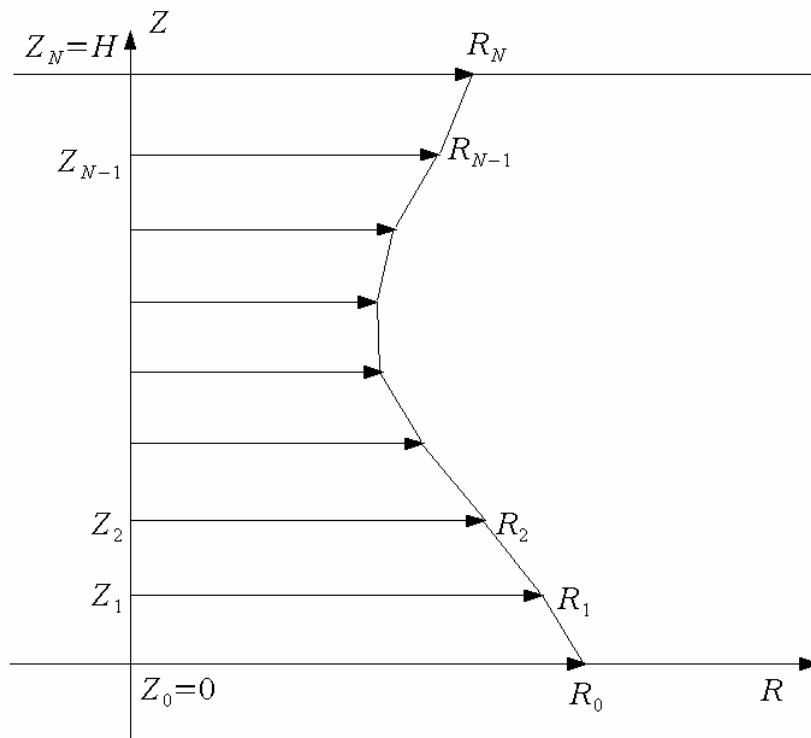


Рис.6. Разрез многосегментного конического отверстия экранирующей маски

- двухлистовую (ближний к подложке лист с круговым отверстием и дальний лист с кольцевым отверстием) маску в модели Хатакоши и др. [15];
- Затем проделали одну из операций:
- рассчитали в рамках соответствующей модели, каким будет напыленный слой;
 - выточили и изготовили экранирующую маску, поместили ее в напылительную установку, провели серию (в разных режимах работы установки) напылительных экспериментов;
 - одним из описанных в пункте 2.4 методов (или двумя, или даже тремя методами) измерили напыленную пленку, а затем аппроксимировали данные измерительных экспериментов гладкой модельной функцией.

После расчета двенадцатисегментной маски мы можем убедиться, что правильно решили задачу синтеза экранирующей маски (обратную задачу в рамках рассматриваемой модели) - провели проверку правильности решения обратной задачи решением прямой задачи. Никакой информации о соответствии математической модели реальному напылительному эксперименту мы не приобрели, а по-прежнему существуем в среде теоретических рассуждений о реальных процессах.

Другое дело, расчет двухлистовой маски перед выполнением напылительных экспериментов. Здесь следует отметить два этапа:

- точность изготовления отдельных деталей маски и контроль этой точности;
- точность монтажа экранирующей маски внутри напылительной установки (юстировка комплекса).

С учетом всех привнесенных погрешностей параметров экранирующей маски в напылительной установке можно говорить о погрешностях реализации синтезированной маски. Теперь поговорим о самих напылительных экспериментах, производимых в различных режимах функционирования вакуумной напылительной установки: паспортные данные установки, конкретные параметры и их стабильность и точность в процессе напыления - все эти факторы в большей или меньшей степени скажутся на параметрах напыленного слоя и на соответствии их расчетным параметрам.

В отличие от «численно-экспериментальных» профилей напыленного слоя, рассмотренных в работах [12-15], мы воспользовались результатами натуральных напылительных экспериментов.

Параметры экранирующих масок были переданы на кафедру радиофизики РУДН с целью экспериментальной проверки на установке катодного распыления, данные о которой были использованы при решении вспомогательной обратной задачи. После изготовления соответствующей

маски в лаборатории произвели напыление тонкопленочной линзы. Исследования этой линзы показали, что она обладает свойствами линзы Люнеберга в пределах точности эксперимента.

Для их проведения было выточено фрезой трехsegmentное отверстие с промежуточным профилем, полученным в процессе численного синтезирования двенадцатисegmentной маски. Можно было бы сразу точить двенадцатисegmentный профиль, однако фрезеровка двенадцатисegmentного отверстия по численным результатам синтеза заранее (по данным технического паспорта фрезерного станка) обещала отклонение от расчетного большее, чем фрезеровка трехsegmentного отверстия. Таким образом (урок на будущее), задачу синтеза (численного) следует решать с точностью согласованной, с точностью будущей реализации синтезированного проекта в жизнь.

Через экранирующую маску, закрепленную в установке вакуумного катодного высокочастотного распыления, была произведена серия напылений в разных режимах работы установки:

- в случае плотного прилегания маски к подложке;
- в случае наличия зазора между ними.

Эти случаи давали два различных распределения объемного электрического заряда.

Замеры напыленного слоя производились, чтобы выяснить, во-первых, сильно ли отличаются напыленные при разных режимах слои. Т.к. интересно было бы напылять серийные (промышленные) образцы в «промышленных» стабильных режимах. Выяснилось, что от режима к режиму профиль изменялся настолько, что измерительные эксперименты не фиксировали достоверно этих изменений.

Во-вторых, измерялось отличие напыленных образцов от рассчитанных (синтезированных математически) профилей толщины тонкопленочной волноводной линзы. Оказалось, что при плотном

прилегании маски к подложке получается слой, более похожий на линзу Люнеберга с полной апертурой. В случае же наличия зазора между маской и подложкой получался слой, более похожий на линзу Люнеберга с неполной апертурой. И в том, и в другом случае измеренные профили отличались от профилей, синтезированных численно, и требовалось продолжение вычислительного эксперимента.

Тема 4. Последующие этапы реализации вычислительного эксперимента

4.1. Предсказание результатов напыления при заданных масках с использованием найденных функций установки

Найденное решение задачи используем для решения прямой задачи - задачи прогноза результатов напыления по известной функции установки (найденной при решении вспомогательной задачи) и известной функции прозрачности маски. Эта задача решается двумя способами в соответствии с двумя способами решения вспомогательной задачи.

Решение вспомогательной задачи конечно-разностным методом.

Вспомогательная задача решена конечно-разностным методом, т.е. получена таблица значений функции установки на заданной сетке аргументов области определения: $X_j = X(\rho_j)$, $j = 0, 1, \dots, L, L+1$, причем $X_0 = X(0) = 0$, $X_{L+1} = X(1) = 0$. Вспомогательная задача решена по результатам

$$Y_j^1 = Y^1(\sigma_j); \quad j = 1, \dots, M, \sigma_1 = 0, \sigma_L = 1$$

напылительного эксперимента с экранирующей маской M_1 , функция маски которой A_1 вычислена в точках сетки:

$$A_{ij}^1 = A_1(\sigma_i, \rho_j), \quad i, j = 1, \dots, L.$$

Прямая задача заключается в предсказании результатов напыления $Y_j^2 = Y^2(\sigma_j)$, $j = 1, \dots, L$; через экранирующую маску M_2 , с функцией маски A_2 , принимающей в точках заданной прежде сетки значения $A_{jk}^2 = A_2(\sigma_j, \rho_k)$, $j, k = 1, \dots, L$ в предположении, что функция установки X_2 в этом случае совпадает с функцией установки X_1 , вычисленной по результатам описанного выше напылительного эксперимента. Интеграл

$$\int_0^1 A(\sigma, \rho) X(\rho) d\rho = Y(\sigma)$$

заменяется интегральной суммой по формуле трапеций на сетке:

$$\rho_j = \Delta\rho \frac{j-1}{L+1}, \Delta\rho = \frac{1}{L+1}, j = 0, 1, \dots, L+1,$$

с учетом граничных условий $X(0) = X(1) = 0$:

$$Y_k^2 = \Delta\rho \left\{ \sum_{j=1}^M A_{kj}^2 X_j^1 \right\}.$$

Результаты численного прогноза сравниваются с результатами напылительного эксперимента, произведенного с использованием экранирующей маски M_2 . Экспериментальные данные h^j профиля толщины $h(r)$ напыленного слоя, измеренного в точках r_j с помощью сплайн-аппроксимации, пересчитываются на заданную сетку:

$$\sigma_j = \Delta\sigma \frac{k-1}{L-1}, \Delta\sigma = \frac{1}{L-1}, k = 0, 1, \dots, L.$$

Эти обработанные экспериментальные данные \tilde{Y}_k^2 сравниваются с результатами численного прогноза Y_k^2 . Многочисленные вычисления, произведенные на основании предложенной модели, отличаются от обработанных экспериментальных данных не более, чем на один процент, что свидетельствует о состоятельности обсуждаемой в данной работе математической модели экранирования корпускулярных потоков в приложении к процессам напыления.

Решение вспомогательной задачи с помощью разложения функций установки в ряд Фурье

Вспомогательная задача решена с помощью разложения функций установки в ряд Фурье, т.е. получены коэффициенты Фурье:

$$X_1(\rho) = \sum_{n=1}^L a_n^1 \frac{n}{2\pi} / \left[1 + (\mu\rho)^2 \right]^{\frac{n+2}{2}},$$

представления функции установки в виде конечного отрезка ряда Фурье. Коэффициенты Фурье $a_n^1, n=1, \dots, L$ получены при решении вспомогательной задачи по результатам Y_1 эксперимента с экранирующей маской M_1 , с функцией прозрачности A_1 . Прямая задача в предсказании результатов Y_2 напыления через маску M_2 с функцией прозрачности A_2 в предположении, что функции установок для обоих экспериментов совпадают. Следовательно, для решения прямой задачи надо восстановить

Y_2 по формуле: $Y(\sigma) = \sum_{n=1}^M \tilde{a}_n^1 A_n^2(\sigma)$, где

$$A_n^2(\sigma_j) = \frac{n\Delta\rho}{2\pi} \left\{ \frac{1}{2} \frac{A_2(\sigma_j, \rho_1) \rho_1}{\left[1 + (\mu\rho_1)^2\right]^{\frac{n+2}{2}}} + \sum_{k=2}^{L-1} \frac{A_2(\sigma_j, \rho_k) \rho_k}{\left[1 + (\mu\rho_k)^2\right]^{\frac{n+2}{2}}} + \frac{1}{2} \frac{A_2(\sigma_j, \rho_M) \rho_M}{\left[1 + \mu^2\right]^{\frac{n+2}{2}}} \right\};$$

$$\rho_k = \Delta\rho \frac{k}{L+1}, \Delta\rho = \frac{1}{L+1}.$$

При этом $A_n^2(\sigma_j)$ вычисляется на сетке значений

$$\sigma_j = \frac{j-1}{L-1}, j=1, \dots, L.$$

Для устойчивого суммирования отрезка ряда Фурье коэффициенты \tilde{a}_n^1 выбираются в виде [36]:

$$\tilde{a}_n^1 = a_n^1 / (1 + a\xi_n).$$

При этом последовательность ξ_n выбираем в виде $\xi_k = k^2$ и параметр регуляризации a подбираем экспериментально.

Численные эксперименты по решению прямой задачи этим вторым способом приводят к аналогичным (по сравнению с первым способом) результатам, что еще раз свидетельствует в пользу состоятельности обсуждаемой математической модели экранирования корпускулярных потоков к процессам напыления.

4.2. Измерение профиля толщины напыленного слоя методом лучевого зондирования

Математическая постановка задачи восстановления характеристик тонкопленочных волноводных линз по результатам лучевого зондирования

В [37, 38] был предложен метод восстановления эффективного показателя преломления $n(x, y)$ по результатам лучевого зондирования. Лучевое зондирование состоит в том, что вдоль волновода пропускается семейство параллельных на входе узких лазерных пучков (лучей). Траектории лучей становятся видимыми сверху благодаря мелким неоднородностям волноводного слоя и регистрируются. Зарегистрированные точки траекторий лучей являются входными данными для нахождения эффективного показателя преломления $n(x, y)$ - основной характеристики оптических свойств волновода.

В рамках рассматриваемой модели волновода поставим математическую задачу восстановления эффективного показателя преломления по данным лучевого зондирования.

Рассмотрим прямоугольную область G на плоскости, определяемую прямыми $x = x_-, x = x_+, y = y_-, y = y_+$ (рис. 7).

Математическим описанием семейства зондирующих лучей, которые наблюдаются в методе лучевого зондирования, служит функция

$$y(x) = Y(x, h), \quad (4.1)$$

где $y = y(x)$ описывает след луча, проходящего через волновод, а h - параметр, однозначно определяющий луч

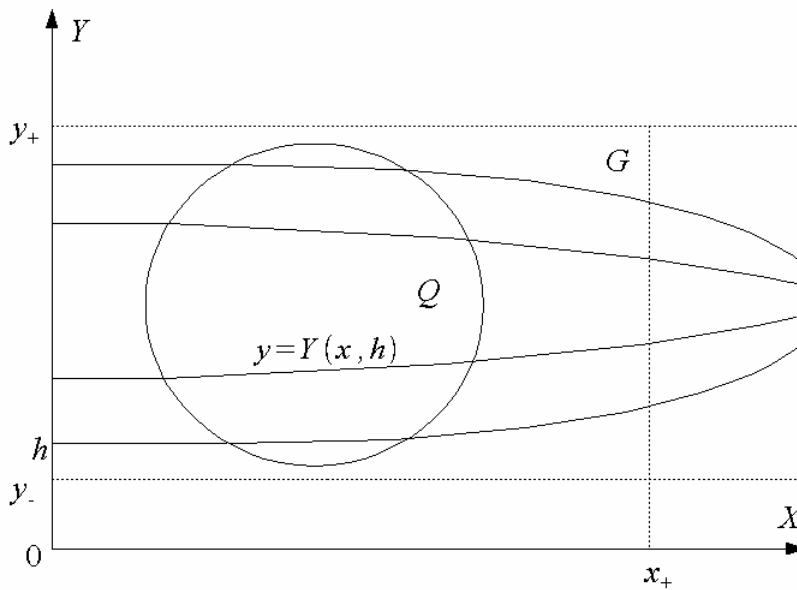


Рис.7. Область восстановления эффективного показателя преломления $n(x, y)$

В качестве параметра h удобно взять ординату точки, в которой луч входит в оптическую систему (см. рис. 7). Семейство кривых

$$\{y(x) = Y(x, h), y_- \leq h \leq y_+\} \quad (4.2)$$

удобно называть зондирующим пучком лучей. В начальных точках (x, h) направления всех лучей совпадают: лучи ортогональны отрезку прямой $\{(x_-, h) : y_- \leq h \leq y_+\}$, в точках которого они заданы.

Задача диагностики тонкопленочной волноводной линзы по результатам лучевого зондирования состоит в следующем.

Задача 1

Найти такое распределение эффективного показателя преломления $n(x, y)$, что для каждого луча из зондирующего пучка (4.2) выполнялось бы уравнение (4.3).

Пусть функция $Y(x, h)$ удовлетворяет следующим трем условиям:

- существует непрерывная вторая производная $Y_{xx}(x, y)$;

- существует непрерывная $Y_h(x, y)$ и $Y_h(x, y) \neq 0$ в исследуемой области G ;
- существует непрерывная смешанная производная $Y_{xh}(x, y)$.

Покажем, что в этом случае справедлива теорема:

Теорема 1. Задача диагностики тонкопленочной волноводной линзы по результатам лучевого зондирования имеет бесконечное множество решений.

Доказательство. Функция $Y(x, h)$ связана с логарифмом приведенного эффективного показателя преломления $w(x, y) = \ln n(x, y)$ в уравнении

$$-\frac{dy}{dx} \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial y} = \frac{d^2 y / dx^2}{1 + (dy/dx)^2}, \quad (4.3)$$

где $w(x, y) = \ln n(x, y)$ или в эквивалентной системе обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{dx}{dy} = C(x, y) \quad (4.4)$$

$$\frac{dw}{dy} = F(x, y), \quad (4.5)$$

где правые части $C(x, y), F(x, y)$ выражаются через частные производные функций $Y(x, h)$ из (4.2):

$$C(x, y) = -Y_x(x, h) \Big|_{h=h(x, y)} \quad (4.6)$$

$$F(x, y) = \frac{Y_{xx}(x, h)}{1 + Y_x^2(x, h)} \Big|_{h=h(x, y)}, \quad (4.7)$$

а $h = h(x, y)$ - прицельный параметр того единственного луча, который проходит через точку (x, y) .

Докажем существование решения. Если задано семейство следов лучей (4.2), удовлетворяющих трем условиям теоремы, то это семейство однозначно определяет семейство волновых фронтов $x(y) = X(y, S)$ [39], т.е. семейство функций, которые являются интегральными кривыми уравнения (4.4) (Здесь S - параметр, однозначно определяющий волновой фронт.)

Для того чтобы найти функцию $w(x, y)$ в области G , следует найти решения уравнения (4.5) на семействе волновых фронтов, плотно покрывающих область G (рис. 8). На волновом фронте $x(y) = X(y, S)$ функция w определяется следующим образом:

$$w(x, y) = \int_{y_0}^y F(x, y) dy + C|_{x=X(y, S)} \quad (4.8)$$

В выражение (4.8) входит произвольная постоянная C , которую невозможно определить только исходя из информации о зондирующем пучке (4.2). Решение $w(x, y)$ на одном волновом фронте $x(y) = X(y, S_1)$ не зависит от решения $w(x, y)$, полученного на другом волновом фронте $x(y) = X(y, S_2)$ в силу произвольности выбора C . Таким образом, функция $w(x, y)$ в исследуемой области G , плотно покрываемой семейством волновых фронтов $x(y) = X(y, S)$, определяется с точностью до произвольной функции волнового фронта $\Phi(S)$, а функция $n(x, y) = \exp w(x, y)$ - с точностью до множителя - произвольной положительной функции волнового фронта. Теорема доказана.

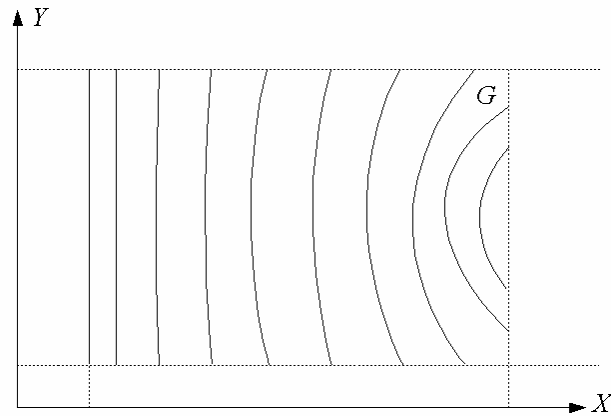


Рис. 8. Семейство волновых фронтов $x(y) = X(y, S)$, покрывающих область G

Проанализируем полученный результат с другой стороны. В рамках геометрической оптики фронт волны, распространяющейся в среде с эффективным показателем преломления $n(\vec{r})$, представляется семейством линий равной фазы $S(\vec{r}) = const$, причем функция $S(\vec{r})$ связана с эффективным показателем преломления $n(\vec{r})$ в известном уравнении эйконала [40]

$$(\nabla S(\vec{r}))^2 = n^2(\vec{r}). \quad (4.9)$$

В [40] показано, что если известна неоднородная среда $n_1(\vec{r})$, в которой фронт распространяющейся волны определяется семейством $S_1(\vec{r}) = const$, то в любой другой среде $n(\vec{r}) = n_1(\vec{r})\Phi(S_1(\vec{r}))$ фронт волны определяется тем же семейством функций (Φ обозначает произвольную функцию волнового фронта).

Для доказательства этого факта рассмотрим неоднородную среду с эффективным показателем преломления $n = n_1(\vec{r})$. Фронт распространяющейся волны представляется семейством

$$S_1(\vec{r}) = const \quad (4.10)$$

Очевидно, что линии равной фазы, т.е. линии, определяющие фронт волны, останутся теми же, если семейство их написать в виде

$$\varphi(S_1(\vec{r})) = const, \quad (4.11)$$

поскольку из (4.11) неизбежно вытекает (4.10). Здесь Φ - любая дифференцируемая функция с монотонным возрастанием в интервале изменения $S_1(\vec{r})$. Подставляя (4.11) в (4.9), получим

$$\varphi'(S_1(\vec{r})) \left[(\nabla S_1(\vec{r}))^2 \right]^{1/2} = n(\vec{r}), \quad (4.12)$$

где штрихом выделена производная по аргументу S_1 .

Используя теперь (4.9) и обозначая $\varphi'(S_1(\vec{r}))$ через $\Phi(S_1(\vec{r}))$, где Φ произвольная функция, $\Phi > 0$, приведем (4.12) к виду

$$n(\vec{r}) = n_1(\vec{r}) \Phi(S_1(\vec{r})). \quad (4.13)$$

Итак, по зондирующему пучку лучей (4.2) функция распределения эффективного показателя преломления определяется с точностью до произвольной положительной функции волнового фронта.

Поскольку семейство фронтов $x(y) = X(y, S)$ однозначно определяется по зондирующему пучку (4.2), то отсутствие единственности решения задачи 1 кроется в неоднозначном определении $w(x, y)$ на волновом фронте из формулы (4.8). Если положить

$$w(x, y_0) = w_0 \quad (4.14)$$

в одной точке (x, y_0) кривой $x(y) = X(y, S)$, на которой ищется w , то w определяется единственным образом, что следует из единственности решения задачи Коши для обыкновенного дифференциального уравнения (4.5) с начальным условием (4.14).

Для того чтобы однозначным образом определить функцию w во всей области G , следует задать начальные условия на w таким образом, что на каждом волновом фронте, проходящем через G , оказалась бы одна точка с известным значением w .

Для рассматриваемого практически важного класса островных тонкопленочных линз, где эффективный показатель преломления постоянен везде, за исключением области неоднородности, целиком принадлежащей G , выбирают $n=1$ на крайнем луче $y(x)=Y(x, y_-)$, который проходит мимо области неоднородности [20].

Таким образом, справедлива

Теорема 2. Задача диагностики тонкопленочных волноводных линз островного типа по результатам лучевого зондирования имеет единственное решение.

Численное решение задачи диагностики тонкопленочных волноводных линз по результатам лучевого зондирования.

Перейдем к вопросу о решении поставленной задачи диагностики тонкопленочной волноводной линзы по результатам лучевого зондирования.

Пусть имеется зондирующий пучок

$$\{y(x) = Y(x, h), y \leq h \leq y\}, \quad (4.15)$$

удовлетворяющий условиям непрерывности задачи 1, и, кроме того, заданы значения функции w на крайнем луче $y(x)=Y(x, h)$ из пучка (4.15)

Задача восстановления функции $w(x, y)$ по семейству траекторий (4.15) сводится к решению задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений [41]

$$\begin{cases} \frac{dx}{dy} = C(x, y) \\ \frac{dw}{dy} = F(x, y) \end{cases} \quad (4.16)$$

с начальными условиями

$$x|_{y=y_0} = x_0, \quad (4.17)$$

$$w|_{y=y_0} = w_0, \quad (4.18)$$

где $C(x, y), F(x, y)$ функции выражаются через формулы (4.6), (4.7).

Рассмотрим вопрос о численном решении задачи (4.16)-(4.18) по известным коэффициентам $C(x, y), F(x, y)$.

Поскольку правая часть $C(x, y)$ первого уравнения системы (4.16) не зависит явно от w , то предлагается интегрировать уравнения системы (4.16) последовательно: сначала первое, а затем второе. Это позволит применить для интегрирования первого и второго уравнений системы (4.16) различные методы, каждый из которых отвечал бы специфике уравнения и входных данных.

Для интегрирования первого уравнения применяется метод из семейства методов Рунге-Кутты, который использует значения правой части уравнения только на траекториях лучей; т.е. в тех точках, где она задана [42-43]. После того, как найдено решение первого уравнения системы (4.16), т.е. волновой фронт $x(y) = X(y, S)$, в точках некоторой сетки значений y (более точно, в точках пересечения волнового фронта с лучами из зондирующего пучка (4.15), (рис. 9), а также затабулированы значения $F(x(y), y)$ в узлах той же сетки) интегрирование второго уравнения системы (4.16) производится с помощью методов сплайн функций. По значениям $F(x(y), y)$ в узлах указанной сетки значений y строится кусочно-кубический интерполяционный сплайн, а значение

$w(x(y), y)$ на вычисленном волновом фронте $x(y)$ находится интегрированием сплайна.

Описанный метод численного интегрирования задачи (4.16)-(4.18) имеет хорошую точность (третий порядок по шагу dy) и не требует аппроксимаций $C(x, y), F(x, y)$ между лучами из зондирующего пучка (4.15). Он является наиболее приспособленным к специфике решаемой задачи, а также превосходит по скорости стандартные методы решения задачи (4.16)-(4.18) [44-46].

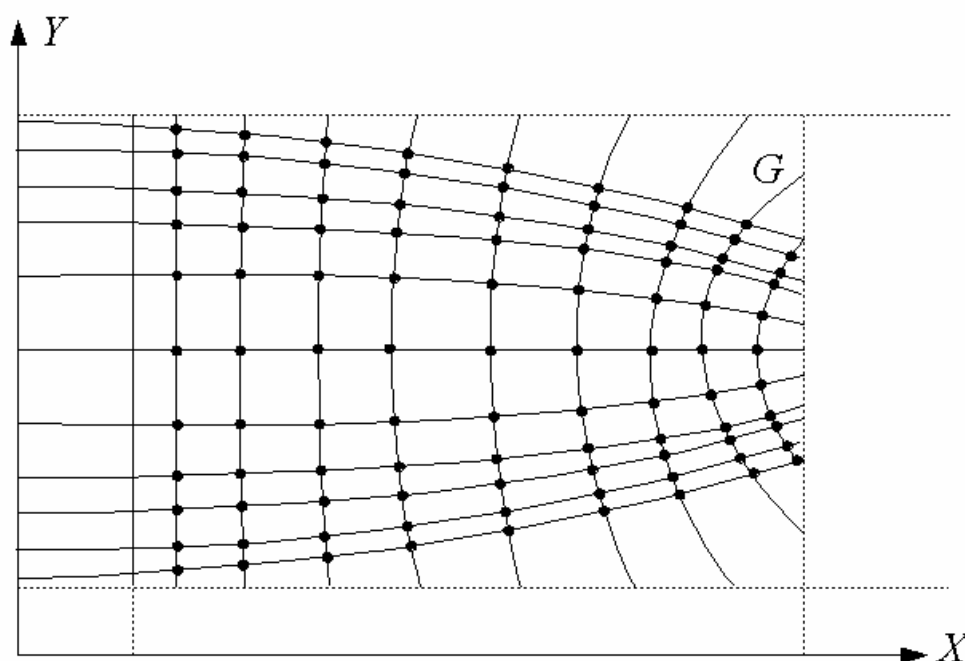


Рис. 9. Точки пересечения лучей из зондирующего пучка с волновыми фронтами

Практическая задача восстановления приведенного эффективного показателя преломления планарной линзы по результатам лучевого зондирования должна исходить из дискретных входных данных о траекториях лучей

$$\{(x_n, y_n^k) : n = 1, 2, \dots, N; k = 1, 2, \dots, K\}; y_1^k = h^k \quad (4.19)$$

Здесь k обозначает номер луча, n - номер точки на k -том луче.

Поэтому рассмотрим вопрос о вычислении функций $C(x, y)$ и по дискретным входным данным метода лучевого зондирования. Коэффициенты C и F в точке (x, y) вычисляются через производные функции $Y(x, y)$ по первому аргументу

$$\begin{cases} C(x, y) = -Y_x(x, h) \Big|_{h=h(x, y)} \\ F(x, y) = \frac{Y_{xx}(x, h)}{1 + Y_x^2(x, h)} \Big|_{h=h(x, y)} \end{cases}, \quad (4.20)$$

где $h(x, y)$ - прицельный параметр того единственного луча из зондирующего пучка, который проходит через точку (x, y) .

Таким образом для нахождения C и F по дискретным данным о лучах (4.19) следует вычислить производные $Y_x(x, h), Y_{xx}(x, h)$ по приближенным значениям функции $Y(x, h)$ на сетке значений аргумента

$$\{x_n, n = 1, 2, \dots, N\}. \quad (4.21)$$

Как известно, задача численного дифференцирования, которую требуется решить для вычисления $C(x, y), F(x, y)$, является некорректной [36, 47]. Воспользуемся устойчивым методом численного дифференцирования с помощью сглаживающих кусочно-полиномиальных сплайнов. Кусочно-полиномиальным сплайном степени $n = 2m - 1$ на отрезке $[x_1, x_N]$ с разбиением (4.21) называется функция $s(x)$ на этом отрезке, такая, что она является полиномом степени n $s_i(x)$ на каждом подынтервале $[x_i, x_{i+1}]$ разбиения (4.21), $i = 1, \dots, N - 1$.

Существует много различных представлений кусочно-полиномиального сплайна $s(x)$. Нам будет удобнее использовать представление сплайна через конечные разности. Для построения сглаживающего сплайна $s(x)$ степени $n = 2m - 1$ по точкам

$$\{(x_n, y_n), n = 1, 2, \dots, N \quad N \geq 2m - 1\} \quad (4.22)$$

следует задать параметр p , который определяет степень доверия ко входным данным и называется параметром сглаживания. При заданном p сплайн $s(x)$ будет построен таким образом, чтобы минимизировать функционал [33]

$$F(s) = p \int_{x_1}^{x_N} (s^{(m)}(x))^2 dx + \sum_{i=1}^N (s(x_i) - y_i)^2. \quad (4.23)$$

Здесь $s^{(m)}$ обозначает производную сплайна порядка m .

Параметр сглаживания заранее обычно неизвестен. Его можно найти по:

- известному значению уровня шума во входных данных;
- методу перекрестного оценивания (cross-validation), если уровень шума в данных неизвестен.

Построенный таким образом сплайн имеет естественные граничные условия, т.е. $s^{(m+i)}(x_1) = s^{(m+i)}(x_N) = 0, i = 0, 1, \dots, m - 1$. В частности, для кусочно-кубического сплайна ($m = 2$) вторая производная сплайна равна 0 на концах интервала, что соответствует решаемой задаче (лучи на границах области G являются прямыми).

Таким образом, сформулируем устойчивый алгоритм вычисления функций $C(x, y), F(x, y)$ по таблично заданным входным данным (4.19).

Алгоритм 1

По входным данным (4.19) построить сглаживающий кусочно-кубический сплайн $s^k(x)$ с параметром сглаживания p , соответствующим шуму в данных.

Найти значения C и F в точке $(x, s^k(x))$ по формулам

$$\begin{cases} C(x, y) = -s_x^k(x) \\ F(x, y) = \frac{s_x^k(x)}{1 + (s_x^k(x))^2} \end{cases} \quad (4.24)$$

Если шум в данных невелик ($\delta_y < 1\%$ характерного размера линзы R), то приведенный алгоритм позволяет достаточно точно аппроксимировать C и F и решать задачу (4.16)-(4.18). Модельные данные формировались следующим образом. По известной функции $n(x, y)$ путем трассировки лучей формировались данные о результатах лучевого зондирования в виде семейства точек (4.19). Затем на модельные данные накладывался шум с помощью генератора псевдослучайных чисел. По полученной информации о следах лучей восстанавливались функции $C(x, y), F(x, y)$ согласно алгоритму 1. После этого $n(x, y) = \exp w(x, y)$ находилось с помощью описанного выше метода численного решения задачи (4.16)-(4.18).

Теперь остановимся на вопросе о нахождении правых частей $C(x, y)$ и $F(x, y)$ системы (4.16) по входным данным (4.19), имеющим более высокий уровень шума ($\delta_y < 1\%$ характерного размера линзы R), как это встречается на практике. Численные эксперименты показали, что в этом случае наблюдается сильная зависимость получаемого решения от правильности выбора параметра сглаживания p . Если p велик, то решение задачи (4.16)-(4.18) $w(x, y)$ получается слишком сглаженное, если параметр p мал, то $w(x, y)$ содержит шум, осциллирует. Поскольку алгоритмы нахождения p [41], основываясь на косвенных данных, не позволяют подобрать p точно, то использование классических кусочно-кубических сплайнов для нахождения C и F представляется нецелесообразным при уровне шума выше, чем 1 %.

Для того чтобы с приемлемой точностью восстанавливать $w(x, y)$ по результатам лучевого зондирования при уровне шума $\delta_y < 1\%$, необходимо найти другой устойчивый метод численного дифференцирования функций из (4.15), отличающийся от классических кусочно-кубических сплайнов более высокой точностью. Методом вычислительного эксперимента были исследованы причины падения точности восстановления $w(x, y)$ при численном дифференцировании функций из (4.15) с помощью сплайнов. Оказалось, что функции $y(x) = Y(x, h)$ из зондирующего пучка (4.15) имеют тонкую структуру (рис. 10). Полученные при трассировке лучей через планарную линзу характерные графики второй производной $Y_{xx}(x)$ имеют вид

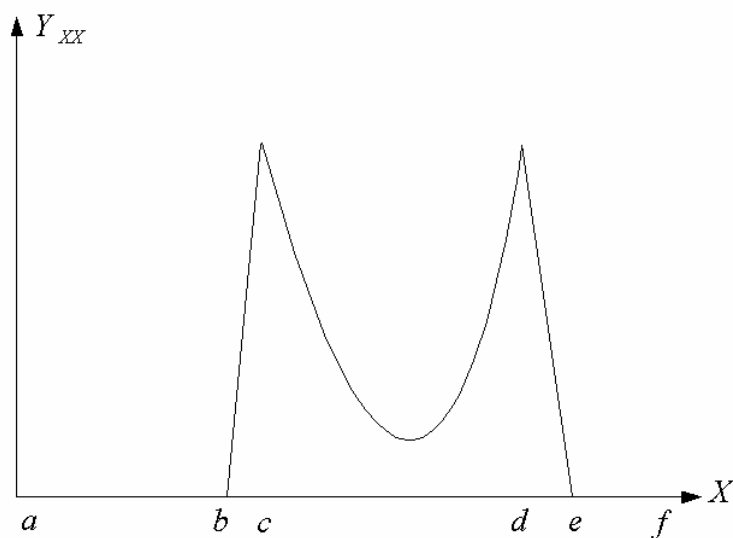


Рис. 10. Характерный вид второй производной функции $y(x) = Y(x, h)$

Это соответствует тому, что искривление лучей происходит, главным образом, на границе линзы. Если для аппроксимации $y(x)$ и ее производных использовать кусочно-кубический сплайн, то выделить

структуру второй производной $Y_{xx}(x)$ из шумов при использовании классических сплайнов не представляется возможным.

Как видно из формул (4.20), именно вторая производная $Y_{xx}(x)$ определяет поведение логарифма приведенного эффективного показателя преломления $w(x, y)$. Следовательно, вопрос повышения точности восстановления $w(x, y)$ зависит от точности аппроксимации второй производной функции $y(x) = Y(x, h)$.

4.3. Восстановление функции источника

На втором цикле проведения вычислительного эксперимента мы начали пользоваться разработанной нами математической моделью экранируемого напыления с обратной связью, в которой эффективное распределение потока напыляемых частиц от источника (протяженного) зависит от возмущающей истинное распределение частиц экранирующей маски [48-60]. В рамках этой модели, напылив через экранирующую маску с профилем цилиндрического отверстия $R^\circ(z)$ дополнительный волноводный слой с профилем толщины $h^\circ(r)$ (в действительности цилиндрическая симметрия процесса могла быть нарушена неподконтрольными внешними факторами, и отрицать заранее такую возможность было бы неразумно), мы можем восстановить параметры эффективного распределения источника, зависящего от формы отверстия маски.

В случае цилиндрической симметрии установки напыления и экранирующей маски с одним входным отверстием, т.е. в случае, когда установка и маска переходят в себя при повороте на произвольный угол вокруг вертикальной оси симметрии (такие условия выполняются при напылении участков тонкой пленки с круговой симметрией, например,

линз Люнеберга), основное уравнение процесса напыления в канонических переменных записывается следующим образом (см. [9]):

$$Y(\sigma) = 2 \int_0^1 \left\{ \pi - \arccos \min_z \frac{\pi(z)^2 - \sigma^2 - (v(z)\rho)^2}{2\sigma v(z)\rho} \right\} X(\rho) d\rho. \quad (4.25)$$

Восстановление функции источника конечно-разностным методом.

Каноническое уравнение (4.25) является одномерным интегральным уравнением Фредгольма первого рода

$$\mathcal{A}X = Y$$

с квадратично-интегрируемым ядром $A(\sigma, \rho)$:

$$A \in L_2(I^2), Y \in L_2(I^2), X \in C(I^2), I = [0, 1], I^2 = [0, 1] \times [0, 1],$$

так что \mathcal{A} - вполне непрерывный оператор.

Решение задачи (4.25) с приближенно заданными $\mathcal{A}_\sigma, Y_\gamma$ находим минимизацией тихоновского функционала [36]

$$\begin{aligned} M^\alpha[x] = & \int_0^1 \left\{ \int_0^1 A(\sigma, \rho) X(\rho) d\rho - Y(\sigma) \right\}^2 d\sigma + \\ & + \alpha \int_0^1 \left\{ q(\rho) X^2(\rho) + p(\rho) \left(\frac{dX}{d\rho}(\rho) \right)^2 \right\} d\rho. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Уравнением Эйлера для задачи (4.26) является интегро-дифференциальное уравнение

$$\begin{aligned} & \int_0^1 A(\sigma, \rho) \left\{ \int_0^1 A(\sigma, \tau) X(\tau) d\tau - Y(\sigma) \right\}^2 d\sigma + \\ & + \alpha \left\{ q(\rho) X(\rho) - \frac{d}{d\rho} \left[p(\rho) \frac{dX}{d\rho}(\rho) \right] \right\} = 0. \end{aligned} \quad (4.27)$$

с граничными условиями

$$X(0) = 0, X(1) = 0. \quad (4.28)$$

Задачу (4.26) решаем с автоматическим выбором параметра регуляризации методом, изложенным в [61, 62], т.е. отыскиваем точку равновесия по Нэшу пары функционалов:

$$M[X, \alpha] = \int_0^1 \left\{ \int_0^1 A(\sigma, \rho) X(\rho) d\rho - Y(\sigma) \right\}^2 d\sigma, \quad (4.29)$$

$$N[X, \alpha] = \int_0^1 \alpha^2(\rho) \left\{ q(\rho) X^2(\rho) + p(\rho) \left[\frac{dX}{d\rho}(\rho) \right]^2 \right\} d\rho. \quad (4.30)$$

Одним из наиболее эффективных методов решения задачи (4.29), (4.30) является [63] итеративный поиск последовательности (X^k, α^k) , сходящийся к паре (X^*, α^*) , первая компонента которой X^* , является решением задачи (4.26), т.е. искомой функции источника. Этот поиск осуществляется пошаговой минимизацией функционалов:

$$\tau_k M[X, \alpha^k] + (\tau_k \alpha^k - 1) \int_0^1 \{X(\rho) - X^k(\rho)\}^2 d\rho,$$

$$\tau_k N[X^{k+1}, \alpha] + \int_0^1 \{\alpha(\rho) - \alpha^k(\rho)\}^2 d\rho.$$

с параметрами τ_k , выбранными из условия сходимости итеративного поиска. Таким образом, на каждом шаге с номером k поиска решения (X^*, α^*) решается пара уравнений Эйлера:

$$\int_0^1 A(\sigma, \rho) \left\{ \int_0^1 A(\sigma, \rho) X(\tau) d\tau - Y(\sigma) \right\} d\sigma +$$

$$+ \left(\alpha^k(\rho) + \frac{1}{\tau_k} \right) \cdot$$

$$\cdot \left\{ q(\rho) [X(\rho) - X^k(\rho)] - \frac{d}{d\rho} \left[p(\rho) \frac{d}{d\rho} (X(\rho) - X^k(\rho)) \right] \right\} = 0, \quad (4.31)$$

$$\alpha(\rho) \left\{ q(\rho) [X^{k+1}(\rho)]^2 + p(\rho) \left[\frac{dX^{k+1}}{d\rho}(\rho) \right]^2 \right\} + [\alpha(\rho) - \alpha^k(\rho)] \frac{1}{\tau_k} = 0. \quad (4.32)$$

Сходимость алгоритма и принадлежность решения X^* пространству непрерывных функций с квадратично интегрируемыми производными обеспечивается, в частности, и при $\tau_k \equiv 1$, $q(\rho) \equiv 1$, $p(\rho) \equiv const$. Такие параметры были выбраны для численной реализации поиска функции источника.

Переход к дискретной модели осуществляется конечно-разностным методом. Область интегрирования по переменным ρ, τ разбивалась на N_1 участков равной длины $\Delta\rho = \Delta\tau = 1/N_1$, область интегрирования по σ разбивалась на $N_2 = N_1 - 2$ участков равной длины $\Delta\sigma = 1/N_2$. Интегралы заменялись интегральными суммами по формуле трапеций, а вторые производные - конечно-разностными выражениями:

$$\left[X(\rho_{j+1}) - 2X(\rho_j) + X(\rho_{j-1}) \right] / (\Delta\rho)^2.$$

Граничные условия (4.28) позволяют разрешить два крайних уравнения возникающей при дискретизации уравнения (4.31) системы линейных алгебраических уравнений и привести систему к виду:

$$\sum_{j=1}^{N_2} \left(A_{ij} + \left(\alpha_j^k + \frac{1}{\tau_k} \right) B_{ij} \right) X_j = U, i = 1, \dots, N_2. \quad (4.33)$$

Здесь $X_j = X(\rho_j), i = 1, \dots, N_2$;

$$U_i = U(\rho_i) = \Delta\sigma \left\{ \frac{1}{2} A(\sigma_1, \rho_i) Y(\sigma_1) + \sum_{j=2}^{N_2-1} A(\sigma_j, \rho_i) Y(\sigma_j) + \frac{1}{2} A(\sigma_{N_2}, \rho_i) Y(\sigma_{N_2}) \right\};$$

$$A_{ij} = \Delta\sigma \left\{ \frac{1}{2} A(\sigma_1, \rho_i) A(\sigma_1, \rho_j) + \sum_{k=2}^{N_2-1} A(\sigma_k, \rho_i) A(\sigma_k, \rho_j) + \frac{1}{2} A(\sigma_{N_2}, \rho_i) A(\sigma_{N_2}, \rho_j) \right\};$$

$$B_{jj} = q + p/(\Delta\rho)^2, j = 1, \dots, N_2;$$

$$B_{j,j+1} = -p/(\Delta\rho)^2, j = 1, \dots, N_2 - 1; B_{j-1,j} = -p/(\Delta\rho)^2, j = 2, \dots, N_2.$$

При дискретизации уравнения (4.32) получается система линейных алгебраических уравнений, которая с учетом граничных условий (4.28) приводится к виду

$$\alpha_j (X_j^{k+1}) - p^2 \alpha_j (X_{j+1}^{k+1} - 2X_j^{k+1} + X_{j-1}^{k+1}) / (\Delta\rho)^4 + \frac{\alpha_j - \alpha_j^k}{\tau_k} = 0. \quad (4.34)$$

Пару систем линейных алгебраических уравнений решаем пошаговым методом, решая, каждую из них:

- 1) методом обращения матрицы,
- 2) методом Холесского [64] (в силу симметричности систем линейных алгебраических уравнений).

Расчеты проводились с помощью пакета программ, реализующего указанный алгоритм на Фортране. Предварительная обработка экспериментальных данных осуществлялась методом сплайн аппроксимации с помощью соответствующего комплекса программ. Все параметры r_k были выбраны тождественно равными 1, параметр q был выбран равным 1. Параметр p и начальное приближение α_0 параметра регуляризации варьировались при проведении серии численных экспериментов. В результате были найдены допустимые области выбора p и α_0 , При любых p и α_0 из области допустимых значений решение задачи (4.33), (4.34) (дискретный аналог функции источника) получалось с двойной машинной точностью за число шагов, меньше десяти.

Алгоритм восстановления функции источника методом разложения в ряд Фурье

В [58] было показано, что в случае однородного по координатам эффективного распределения и цилиндрической симметрии задачи справедливо соотношение

$$h(\vec{r}) = T \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n+1}{2\pi} a_n \int_{-\infty}^{\infty} \int \frac{\Theta_M(\vec{r}, \vec{\eta}) d\vec{\eta}}{\left(1 + \frac{|\vec{\eta}|^2}{H^2}\right)^{\frac{n+3}{2}}}. \quad (4.35)$$

При этом аппаратная функция маски имеет вид

$$\Theta_M(\vec{r}, \vec{\eta}) = \prod_{z=0}^H \Theta\left(R^2(z) - |\vec{r}|^2 - \left|\frac{z}{H}\vec{\eta}\right|^2 - 2\frac{z}{H}(\vec{r}, \vec{\eta})\right).$$

Эти соотношения можно записать в канонических переменных

$$Y(\sigma) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n A_n(\sigma),$$

$$\text{где } A_n(\sigma) = \frac{n+1}{2\pi} \int_0^1 \frac{A(\sigma, \rho) \rho d\rho}{\left[1 + (\mu\rho)^2\right]^{\frac{n+3}{2}}}.$$

Функция источника $X(\rho)$ при этом представляется в виде ряда Фурье:

$$X(\sigma) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \frac{n+1}{2\pi} \frac{1}{\left[1 + (\mu\rho)^2\right]^{\frac{n+3}{2}}}.$$

Поиск функции источника в этом случае означает поиск коэффициентов a_n разложения $X(\rho)$ в ряд Фурье, который осуществляется минимизацией тихоновского функционала

$$\int_0^1 \left\{ Y(\sigma) - \sum_{n=0}^{\infty} a_n A_n(\sigma) \right\}^2 d\sigma + a \sum_{n=0}^{\infty} a_n^2. \quad (4.36)$$

Уравнение Эйлера задачи (4.36) имеет вид

$$\int_0^1 A_k(\sigma) \left\{ Y(\sigma) - \sum_{n=0}^{\infty} a_n A_n(\sigma) \right\} d\sigma - \alpha a_k = 0. \quad (4.37)$$

Конечномерную аппроксимацию интегро-дифференциального уравнения (4.36) производим заменой ряда Фурье его конечным отрезком и заменой интегралов интегральными суммами. Тогда уравнение (4.37) записывается в виде

$$\sum_{n=0}^L (C_{kn} + \alpha \delta_{kn}) a_n = Y_k, \quad k = 0, 1, \dots, L. \quad (4.38)$$

Здесь

$$Y_k = \Delta\sigma \left\{ \frac{1}{2} \tilde{A}_k(\sigma_1) Y(\sigma_1) + \sum_{j=2}^{L-1} \tilde{A}_k(\sigma_j) Y(\sigma_j) + \frac{1}{2} \tilde{A}_k(\sigma_L) Y(\sigma_L) \right\},$$

$$C_{kn} = \Delta\sigma \left\{ \frac{1}{2} \tilde{A}_k(\sigma_1) \tilde{A}_n(\sigma_1) + \sum_{j=2}^{L-1} \tilde{A}_k(\sigma_j) \tilde{A}_n(\sigma_j) + \frac{1}{2} \tilde{A}_k(\sigma_L) \tilde{A}_n(\sigma_L) \right\},$$

$$\tilde{A}_k(\sigma) = \Delta\rho \frac{k+1}{2\pi} \left\{ \frac{1}{2} \frac{A(\sigma, \rho_1) \rho_1}{[1 + (\mu\rho_1)^2]^{\frac{k+3}{2}}} + \sum_{j=2}^{L-1} \frac{A(\sigma, \rho_j) \rho_j}{[1 + (\mu\rho_j)^2]^{\frac{k+3}{2}}} + \frac{1}{2} \frac{A(\sigma, \rho_L) \rho_L}{[1 + (\mu\rho_L)^2]^{\frac{k+3}{2}}} \right\}$$

Так же, как и в предыдущем разделе, конечномерный аналог регуляризованного решения задач (4.36) и (4.37), т.е. решение системы линейных алгебраических уравнений (4.38), находим методом итераций с автоматическим выбором параметра регуляризации α . А именно, решаем задачу:

$$\sum_{m=0}^L \left\{ C_{ml} + \left(\alpha_l^k + \frac{1}{r_k} \right) \delta_{lm} \right\} a_m = Y_l, \quad l = 0, 1, \dots, L;$$

$$\alpha_l^k = \alpha_l^{k-1} / \left[r_k (\alpha_l^k)^2 + 1 \right], \quad l = 0, 1, \dots, L.$$

Расчеты проводились с помощью соответствующего комплекса программ, реализующих описанный алгоритм на Фортране.

4.4. Восстановление параметров трех- и пяти-сегментных масок прямыми методами условной минимизации.

Теперь в нашем распоряжении имеется функция источника напылительной установки, соответствующая эффективному распределению, отражающему влияние экранирующей маски на истинное распределение частиц напыляемого вещества. Она реализована в двух (альтернативно вычисленных) функциональных представлениях: в виде кусочно-линейной функции и в виде отрезка ряда Фурье по базису $\cos^n\left(\frac{u}{v}\right)$. В рамках математической модели экранируемого напыления, изложенной ранее, и опираясь на предложенные там теоретические методы, перейдем к практической реализации соответствующих алгоритмов численного решения задачи синтеза экранирующей маски.

Алгоритм решения задачи синтеза

Вторая обратная задача отыскания маски для напыления слоя заданной конфигурации не является корректной по следующим причинам. Во-первых, может не существовать маски, формирующей на данной установке напыления нужную конфигурацию слоя. Во-вторых, заданной конфигурации слоя могут отвечать различные формы масок. Например, в работах [12-14] с помощью последовательной серии вычисляющих и уточняющих численных экспериментов авторы определили форму двенадцатисекционной объемной маски, обеспечивающей напыление линзы Люнеберга, а в работе [15] для напыления линзы Люнеберга предложена трехлистная маска с двумя круговыми и одним кольцевым отверстиями. Наконец, не всякая теоретически вычисленная форма маски практически реализуема, что следует учесть при постановке условно корректной задачи.

В работах [54-56] рассмотрено решение в классе N -листных масок, т.е. искали нужную форму маски в виде набора N горизонтальных пластин (листов) с отверстиями ρ_j ($1 \leq j \leq N$), заданными k параметрами. При этом высоты расположения листов z_j изменялись в пределах $z_1 \geq z_2 \geq \dots \geq z_N \geq 0$, параметры отверстий R_{lm} ($1 \leq l \leq N, 1 \leq m \leq k$) изменялись в некоторой замкнутой области B (например, для круговых отверстий $k=1, 0 \leq R_{l1} \leq R$, для кольцевых отверстий $k=2, 0 \leq R_{l1} \leq R_{l2} \leq R$, и т.п.).

Искомую форму маски мы описывали n -мерным ($n=(k+1)N$) вектором w :

$$w = (z_1, z_2, \dots, z_N, R_{11}, \dots, R_{N1}, \dots, R_{1k}, \dots, R_{Nk}).$$

Пусть $Y(\xi)$ - задающая конфигурацию слоя, непрерывная в круге Q радиуса R_0 функция. Интегральное уравнение, моделирующее экранируемое напыление каждому вектору w сопоставляет некоторую функцию $Y(w, \xi)$. Если $z_1 \geq z_2 \geq \dots \geq z_N \geq 0$, $R_{lm} \in B$, $1 \leq l \leq N, 1 \leq m \leq k$, то функция задает конфигурацию слоя вещества, напыленного через маску, описываемую вектором w .

Пусть $D_n = \{w \in \mathfrak{R}^n : z_1 \geq z_2 \geq \dots \geq z_N \geq 0, R_{lm} \in B, \}$ замкнутое выпуклое множество в евклидовом пространстве \mathfrak{R}^n . Определим расстояние между $Y(w, \xi)$ и $Y(\xi)$ в метрике

$$\mu(Y(w), Y) = \int_Q \{Y(w, \xi) - Y(\xi)\}^2 d\xi, \quad w \in D_n. \quad (4.39)$$

Обозначим через $\varepsilon_N = \inf_{w \in D_n} \mu(Y(w), Y)$. Ясно, что $\varepsilon_1 \geq \varepsilon_2 \geq \dots \geq \varepsilon_n \dots \geq 0$, $\varepsilon_0 = \lim_{n \rightarrow \infty} \varepsilon_N$ будем называть предельно достижимой точностью.

Основная задача состоит в том, чтобы приблизить в метрике (4.39) требуемую характеристику с некоторой наперед заданной точностью ε

(такая задача имеет смысл при $\varepsilon > \varepsilon_0$) при дополнительных ограничениях на искомую форму маски. Такими дополнительными требованиями являются: минимальность числа листов синтезируемой маски ($N \rightarrow \min$), минимальность общей толщины маски ($z_1 \rightarrow \min$), ограничения на соотношения между параметрами R_{lm} . Перечисленные ограничения определяются возможностью изготовить синтезируемую маску. Сформулируем основную задачу. Пусть

$$M_N^\alpha[w] = \mu(Y(w), Y)^2 + \alpha \Omega[w], \quad (4.40)$$

где Q - стабилизирующий функционал [36]. Требуется определить вектор w , минимизирующий функционал (4.40) при условиях:

$$\mu(Y(w), Y) = \varepsilon; \quad N = \min; \quad z_1 = \min.$$

Сформулированная задача является условно корректной по Тихонову [36].

Задача решается следующим образом. Последовательно увеличивая число листов маски, ищем такое N , при котором удается достиг заданной точности ε . Затем минимизируем функционал $M_N^\alpha[w]$ на множестве D_n , причем параметр регуляризации α выбирается из условия: $\mu(Y(w), Y) = \varepsilon$. Соответствующий минимизирующий вектор w_N^α существует, т.к. D_n - замкнутое выпуклое множество конечномерного евклидова пространства.

Для вычисления $Y(w, \xi)$ и явного выражения его производной воспользуемся результатами работы [55] для многолистовой экранирующей маски:

$$Y(w, \xi) = \int A(w; \xi, \eta) x(\xi + \eta, \eta) d\eta.$$

При этом функция A имеет вид:

$$A(w; \xi, \eta) = \prod_{j=1}^N \theta(\xi + \eta z_j; s_j), \quad \text{где } \theta(b, s) = \begin{cases} 1, & \text{при } b \in s \\ 0, & \text{при } b \notin s \end{cases}.$$

Частные производные $\partial Y/\partial w_p$ можем записать в виде:

$$\frac{\partial Y(w, \xi)}{\partial z_l} = \int \prod_{j \neq l} \theta(\xi + \eta z_j; s_j) \frac{\partial \theta(\xi + \eta z_l; s_l)}{\partial z_l} x(\xi + \eta, \eta) d\eta,$$

$$\frac{\partial Y(w, \xi)}{\partial R_{lm}} = \int \prod_{j \neq l} \theta(\xi + \eta z_j; s_j) \frac{\partial \theta(\xi + \eta z_l; s_l)}{\partial z_{lm}} x(\xi + \eta, \eta) d\eta.$$

Производная функционала (4.40) может быть представлена в аналитическом виде:

$$\frac{\partial M_N^\alpha[w]}{\partial w_p} = 2 \int_Q \{Y(w, \xi) - Y(\xi)\} \frac{\partial Y(w, \xi)}{\partial w_p} d\xi + \alpha \frac{\partial \Omega[w]}{\partial w_p}.$$

Функционал (4.40) может обладать большим количеством локальных минимумов. Следовательно, алгоритм минимизации M_N^α должен включать в себя поиск локальных минимумов по случайно заданным начальным приближениям, затем сравнение полученных результатов. Полученный таким образом самый глубокий минимум можно считать соответствующим искомому решению.

Поиск локальных минимумов можно производить методом проекции градиента:

$$w^{g+1} = p(w^g - \gamma^g F(w^g)),$$

где p - проектор на множество D_n , F - градиент функционала (4.40), определяется из условия минимальности M_N^α по заданному направлению градиента.

Вычислим частные производные минимизируемого функционала $M^\alpha(v^k, \pi^k)$.

Задача минимизации записывается в виде:

$$M^\alpha(v^k, \pi^k) = \int_0^1 d\sigma \left\{ Y(\sigma) - \int_0^1 A(\sigma, \rho; v_k, \pi_k) X(\rho) d\rho \right\}^2 + \\ + \alpha \sum_{k=1}^{n-1} (v_k^2 + \pi_k^2) \rightarrow \min_{v^k, \pi^k}$$

Частная производная по v^k :

$$\frac{\partial M^\alpha}{\partial v_k} = -2 \int_0^1 d\sigma \left\{ Y(\sigma) - \int_0^1 A(\sigma, \rho; v_k, \pi_k) X(\rho) d\rho \right\} \times \\ \times \int_0^1 \frac{\partial A(\sigma, \rho; v_k, \pi_k)}{\partial v_k} X(\rho) d\rho + 2\alpha v_k. \quad (4.41)$$

Частная производная по π^k :

$$\frac{\partial M^\alpha}{\partial \pi_k} = -2 \int_0^1 d\sigma \left\{ Y(\sigma) - \int_0^1 A(\sigma, \rho; v_k, \pi_k) X(\rho) d\rho \right\} \times \\ \times \int_0^1 \frac{\partial A(\sigma, \rho; v_k, \pi_k)}{\partial \pi_k} X(\rho) d\rho + 2\alpha \pi_k. \quad (4.42)$$

В этих формулах введены обозначения:

$$A(\sigma, \rho; v_k, \pi_k) = \frac{\mu}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \prod_{k=1}^{n-1} \vartheta \left(\pi_k^2 - \sigma^2 - (v_k \rho)^2 - 2\sigma v_k \rho \right) \cos \varphi, \quad (4.43)$$

$$X(\rho) = X(\rho \mu H) \cdot \rho \cdot 2\pi \cdot \mu \cdot v_0,$$

$$Y(\sigma) = h(\sigma R_n) / T.$$

Производные функции $A(\sigma, \rho; v_k, \pi_k)$ вычисляются следующим образом:

$$\frac{\partial A(\sigma, \rho; v_k, \pi_k)}{\partial v_k} = \frac{\mu}{2\pi} \frac{1}{2\sigma v_k \rho \sqrt{1 - \cos^2 \varphi_k}} \left\{ -2v_k \rho^2 - \frac{\pi_k^2 - \sigma^2 - (v_k \rho)^2}{v_k} \right\} \times \\ \times \prod_{j \neq k}^{n-1} \vartheta \left(\pi_j^2 - \sigma^2 - (v_j \rho)^2 - \left(\pi_k^2 - \sigma^2 - (v_k \rho)^2 \right) \frac{v_j}{v_k} \right) =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\mu}{2\pi} \frac{1}{2\sigma v_k \rho \sqrt{1 - \cos^2 \varphi_k}} \frac{1}{v_k} \left\{ -2v_k \rho^2 - \pi_k^2 + \sigma^2 - v_k^2 \rho^2 \right\} \times \\
&\quad \times \prod_{j \neq k}^{n-1} \vartheta \left(\pi_j^2 - \sigma^2 - (v_j \rho)^2 - \left(\pi_k^2 - \sigma^2 - (v_k \rho)^2 \right) \frac{v_j}{v_k} \right) = \\
&= \frac{\mu}{2\pi} \frac{-\left(\pi_k^2 - \sigma^2 - (v_k \rho)^2 \right)}{2\sigma v_k \rho \sqrt{1 - \cos^2 \varphi_k}} \frac{1}{v_k} \times \\
&\quad \times \prod_{j \neq k}^{n-1} \vartheta \left(\pi_j^2 - \sigma^2 - (v_j \rho)^2 - \left(\pi_k^2 - \sigma^2 - (v_k \rho)^2 \right) \frac{v_j}{v_k} \right) = \\
&= -\frac{\mu}{2\pi v_k} \frac{\prod_{j \neq k}^{n-1} \vartheta \left(\pi_j^2 - \sigma^2 - (v_j \rho)^2 - \left(\pi_k^2 - \sigma^2 - (v_k \rho)^2 \right) \frac{v_j}{v_k} \right)}{\sqrt{-\frac{\left(\pi_k^2 - \sigma^2 + v_k^2 \rho^2 \right)^2}{\left(\pi_k^2 - \sigma^2 + v_k^2 \rho^2 \right)^2} + \frac{4(\pi_k v_k \rho)^2}{\left(\pi_k^2 - \sigma^2 + v_k^2 \rho^2 \right)^2}}}.
\end{aligned}$$

Окончательный вид частной производной $A(\sigma, \rho; v_k, \pi_k)$ по v^k может быть записан следующим образом:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial A(\sigma, \rho; v_k, \pi_k)}{\partial v_k} &= -\frac{\mu}{2\pi v_k} \left(\pi_k^2 - \sigma^2 + v_k^2 \rho^2 \right) \times \\
&\quad \times \frac{\prod_{j \neq k}^{n-1} \vartheta \left(\pi_j^2 - \sigma^2 - (v_j \rho)^2 - \left(\pi_k^2 - \sigma^2 - (v_k \rho)^2 \right) \frac{v_j}{v_k} \right)}{\sqrt{(2\pi_k v_k \rho)^2 - \left(\pi_k^2 - \sigma^2 + v_k^2 \rho^2 \right)^2}} \quad (4.44)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial A(\sigma, \rho; v_k, \pi_k)}{\partial \pi_k} &= \\
&= -\frac{\mu}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \prod_{j \neq 1}^{n-1} \vartheta \left(\pi_j^2 - \sigma^2 - (v_j \rho)^2 - 2\sigma v_j \rho \cos \varphi \right) \times \\
&\quad \times \delta \left(\pi_k^2 - \sigma^2 - (v_k \rho)^2 - 2\sigma v_k \rho \cos \varphi \right) 2\pi_k = \quad (4.45) \\
&= \frac{\mu}{2\pi} \frac{2\pi_k}{2\sigma v_k \rho \sqrt{1 - \cos^2 \varphi_k}} \frac{1}{v_k} \times \\
&\quad \times \prod_{j \neq k}^{n-1} \vartheta \left(\pi_j^2 - \sigma^2 - (v_j \rho)^2 - \left(\pi_k^2 - \sigma^2 - (v_k \rho)^2 \right) \frac{v_j}{v_k} \right)
\end{aligned}$$

Поскольку

$$\begin{aligned}
& \int_0^{2\pi} d\varphi \delta(f_k(\varphi)) F(\varphi) = \\
& = \int_0^{2\pi} \left[\frac{df_k(\varphi)}{d\varphi} \right]^{-1} df_k(\varphi) \delta(f_k(\varphi)) F(\varphi) = \\
& = \left[\frac{df_k(\varphi)}{d\varphi} \right]^{-1} \Big|_{f_k=0} F(\varphi|_{f_k=0})
\end{aligned} \tag{4.46}$$

$$f_k(\varphi) = \pi_k^2 - \sigma^2 - (v_k \rho)^2 - 2\sigma v_k \rho \cos \varphi = 0 \Leftrightarrow \cos \varphi_k = \frac{\pi_k^2 - \sigma^2 - (v_k \rho)^2}{2\sigma v_k \rho},$$

$$\begin{aligned}
\frac{df_k}{d\varphi} \Big|_{f_k=0} & = 2\sigma v_k \rho \sin \varphi \Big|_{\varphi_k} = 2\sigma v_k \rho \sqrt{1 - \cos^2 \varphi_k} = \\
& = \sqrt{(2\sigma v_k \rho)^2 - \pi_k^4 - \sigma^4 - (v_k \rho)^4 - 2\pi_k^2 \sigma^2 + 2(2\pi_k v_k \rho)^2 - 2(\sigma v_k \rho)^2} = \\
& = \sqrt{(2\sigma v_k \rho)^2 + 2(\pi_k \sigma)^2 + 2(2\pi_k v_k \rho)^2 - (\pi_k^4 + \sigma^4 + (v_k \rho)^4)} = \\
& = \sqrt{-(\pi_k^2 - \sigma^2)^2 - (v_k \rho)^4 + 2(\rho v_k)^2 (\pi_k^2 + \sigma^2)} = \\
& = \sqrt{2\sigma^2 \left[(v_k \rho)^2 + \pi_k^2 \right] - \left[\pi_k^2 - (v_k \rho)^2 \right]^2 - \sigma^4} \times \\
& \times \frac{\partial A(\sigma, \rho; v_k, \pi_k)}{\partial v_k} = \frac{\mu}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \prod_{j \neq 1}^{n-1} \vartheta \left(\pi_k^2 - \sigma^2 - (v_j \rho)^2 - 2\sigma v_j \rho \right) \cos \varphi \times \\
& \times \delta \left(\pi_k^2 - \sigma^2 - (v_j \rho)^2 - 2\sigma v_j \rho \right) \cos \varphi \times (2v_k \rho^2 - 2\sigma \rho \cos \varphi).
\end{aligned} \tag{4.47}$$

Конкретный вид частных производных функционала $M^\alpha(v^k, \pi^k)$ по коническим переменным v^k и π^k вычисляется по формулам (4.41), (4.42). С учетом (4.43) эти выражения зависят от частных производных $\partial A / \partial v^k$, $\partial A / \partial \pi^k$, имеющих вид (4.44) и (4.45), благодаря соотношениям (4.46), участвующим в формуле (4.47) для $\partial A / \partial v^k$ и в аналогичной формуле для $\partial A / \partial \pi^k$.

Отыскание формы маски, необходимой для напыления линзы Люнеберга

Теперь воспользуемся тем фактом, что нас интересуют параметры экранирующей маски для напыления в вакуумной установке с цилиндрической симметрией волнового слоя, также обладающего цилиндрической симметрией. Естественно и экранирующую маску искать в классе масок, обладающих цилиндрической симметрией. Таким образом, задача редуцируется, как это описано в п. 2. 8, к одномерному интегральному уравнению Фредгольма первого рода. Поиск параметров маски конкретизируется коническим видом функции маски $A(\sigma, \rho)$. В связи с этим поиск формы маски M осуществляется устойчивой минимизацией функционала:

$$F^\alpha[A] = \int_0^1 \left\{ Y(\sigma) - \int_0^1 A(\sigma, \rho) x(\rho) d\rho \right\}^2 d\sigma + \alpha \Omega.$$

Стабилизирующий функционал Ω выбираем, исходя из дополнительной информации о задаче.

Поиск нужной маски осуществляется в классе цилиндрических многосегментных масок, вертикальный разрез которых представлен на рис. 11.

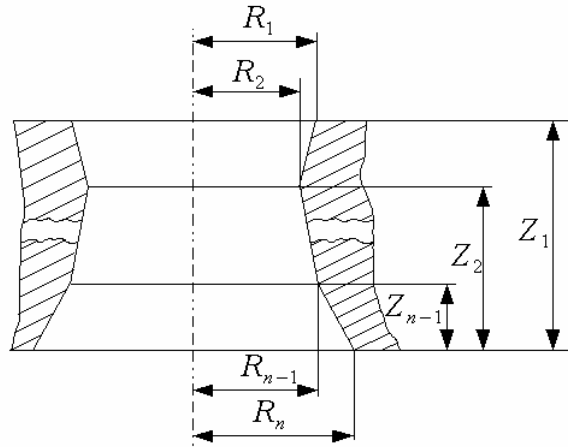


Рис. 11. Вертикальный разрез n -сегментной цилиндрической маски

В таком случае аппаратная функция маски принимает вид

$$A(\sigma, \rho; R_k, z_k) = \frac{\mu}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \prod_{k=1}^{n-1} \theta / R_k^2 - (\sigma R_n)^2 - (\rho \mu z_k)^2 - 2\sigma R_n \rho \mu z_k \cos \phi.$$

Стабилизирующий функционал выбираем равным

$$\Omega[R_k, z_k] = \sum_{k=1}^{n-1} (R_k^2 + z_k^2), \text{ т.е. ищем экранирующую маску с минимальной}$$

толщиной и минимальным входным отверстием, обеспечивающую заданный эффект экранирования.

В итоге решаем задачу минимизации функционала

$$F^\alpha[R_k, z_k] = \int_0^1 \left\{ Y(\sigma) - \int_0^1 A(\sigma, \rho; R_k, z_k) X(\rho) d\rho \right\}^2 d\sigma + \alpha \sum_{k=1}^{n-1} (R_k^2 + z_k^2).$$

При этом $(2n-2)$ - мерный вектор $(R_1, \dots, R_{n-1}, z_1, \dots, z_{n-1})$ будет соответствовать параметрам физической экранирующей маски в случае, если выполняются условия

$$z_j > z_{j+1}, R_j > 0, j = 1, \dots, n-1. \quad (4.48)$$

Заметим еще, что не любая маска с параметрами, удовлетворяющими условиям (4.48), может быть изготовлена на практике. Дополнительные ограничения реализуемости маски можно представить в виде

$$z_j > z_{j+1}, R_j \geq R_0, j = 1, \dots, n-1.$$

Итак, форма искомой маски находится минимизацией функционала:

$$\begin{aligned} F^\alpha [R_k, z_k] = \Delta\sigma \left\{ \frac{1}{2} [Y(\sigma_1) - Y(\sigma_1; R_k, z_k)]^2 + \right. \\ \left. + \sum_{j=2}^{L-1} [Y(\sigma_j) - Y(\sigma_j; R_k, z_k)]^2 \right\} + \\ + \left\{ \frac{1}{2} [Y(\sigma_L) - Y(\sigma_L; R_k, z_k)]^2 \right\} + \alpha \sum_{k=1}^{n-1} (R_k^2 + z_k^2) \end{aligned} \quad (4.49)$$

в области D_n векторного пространства R^{2n-2} :

$$D_n = \left\{ (R_k, z_k) \in R^{2n-2} \mid R_k \geq R_0, z_k \geq z_{k+1} + h_0, k = 1, \dots, n-1 \right\}. \quad (4.50)$$

Здесь $\Delta\sigma = 1/(L-1)$, $\Delta\rho = 1/(L+1)$, $Y(\sigma, \rho_j; R_k, z_k) X(\rho_j) \Delta\rho$.

Минимум функционала (4.49) зависит от n , а также от R_0, h_0 из (4.50). При этом чем больше n , тем меньшего значения достигает функционал (4.49). Практически число сегментов n маски M выбираем минимальным из тех, при которых достигается заданная точность поиска. Минимизацию функционала проводим методом деформированного многогранника с дополнительным проектированием на область D_n допустимых значений параметров R_k, h_k . Проектирование можно осуществлять методом деформированного многогранника или случайным способом; соответствующие методики известны под названиями: "метод скользящего допуска" и "комплексный метод Бокса" [65, 66]. Расчеты проводились с помощью двух комплексов программ, реализующих эти методы в классе трехсегментных масок.

Замечание 1. В работе [55] показано, что такая экранирующая маска с кусочно-линейной функцией $R(z)$ при $n \rightarrow \infty$ приближает экранирующую маску с произвольной непрерывной функцией

$R(z), z \in [0, H]$, и может служить хорошей моделью произвольной цилиндрически симметричной экранирующей маски с одним отверстием.

Замечание 2. Кусочно-линейная непрерывная выпуклая в сторону оси Oz функция $R(z): R(z_k) = R_k$ задает ту же функцию маски $A[R(z)](\sigma, \rho)$ и ту же правую часть $Y[R(z)](\sigma)$, что и любая невыпуклая в сторону Oz функция $R'(z): R'(z_k) = R_k$, т.е. $A[R'(z)](\sigma, \rho) = A[R(z)](\sigma, \rho) = A[R_k, z_k](\sigma, \rho)$ и $Y[R'(z)](\sigma) \equiv Y[R(z)](\sigma) = Y[R_k, z_k](\sigma)$.

А именно функция маски

$$A[R_k, z_k](\sigma, \rho) = 2\{\pi - \arccos b_N(\sigma, \rho)\}, \quad (4.51)$$

где $b_N(\sigma, \rho) = \min_{k \in 1, N} \frac{\pi_k^2 - \sigma^2 - (v_k \rho)^2}{2\sigma v_k \rho}$, $\pi_k = \pi(z_k)$, $v_k = v(z_k)$,

а функция слоя

$$Y[R_k, z_k](\sigma) = \int_0^1 A[R_k, z_k](\sigma, \rho) X(\rho) d\rho. \quad (4.52)$$

Вышеописанная N -сегментная маска с параметрами $[R_k, z_k], k = 1, \dots, N$ (также, как и N -листовая маска с теми же параметрами) описывается $2N$ -мерным вектором $w = (z_1, \dots, z_N, R_1, \dots, R_N)$. Соотношение (4.52) сопоставляет любому $2N$ -мерному вектору w некоторую функцию $Y[w](\sigma)$. Если $H = z_N \geq z_{N-1} \geq \dots \geq z_1 \geq 0$, функция $R(z): R(z_k) = R_k$ - кусочно-линейная положительно определенная функция на $[0, H]$, то $w \in R^{2N}$ описывает экранирующую маску, а $Y[w](\sigma)$ описывает функцию слоя, напыленную через эту маску в круге радиуса R_0 . Обозначим через D_n замкнутое подмножество в R^{2N}

$$D_n = \{w \in (R_k, z_k) : z_N \geq z_{N-1} \geq \dots \geq z_1 = 0, R_j \geq 0, j = 1, \dots, N\}.$$

Определим расстояние $\rho(Y, Y[w])$ между $Y(\sigma)$ и $Y[w](\sigma)$ в метрике $L_2[0,1]$:

$$\rho^2(Y, Y[w]) = \int_0^1 \{Y[w](\sigma) - Y(\sigma)\}^2 d\sigma, \quad w \in D_n. \quad (4.53)$$

Назовем $\delta_N = \inf_{w \in D_n} \rho(Y[w], Y)$ максимально достижимой точностью приближения функций слоя, полученных с помощью N -сегментных масок. Ясно, что $\delta_1 \geq \delta_2 \geq \dots \geq \delta_N \geq \dots \geq 0$. Назовем $\delta = \lim_{N \rightarrow \infty} \delta_N$ предельно достижимой точностью. Задача состоит в том, чтобы приблизить в метрике (4.53) заданную функцию слоя $Y(\sigma)$ с некоторой априорно заданной точностью δ (такая задача имеет смысл при $\delta > \delta_0$) при дополнительных (технологических) ограничениях на синтезируемый профиль $w = \{R_k, z_k\}$.

К таким ограничениям относятся минимальность числа сегментов N и наличие минимально осуществимой толщины конического сегмента $z_0 : z_j \geq z_{j+1} + z_0, j = 1, \dots, N$. К ним можно отнести минимальность толщины

маски, а значит минимальность суммы $\sum_{j=1}^N z_j^2$; а также минимальность

отверстия маски, т.е. минимальность суммы $\sum_{j=1}^N R_j^2$. Если обозначить через

$$D_N^0 = \{w \in D_N : z_j \geq z_{j-1} + z_0, j = 1, \dots, N\}$$
 замкнутое подмножество $D_N \subset R^{2N}$,

то задача состоит в минимизации функционала

$$F^\alpha[w] = \rho^2(Y[w], Y) + \alpha \sum_{k=1}^N (R_k^2 + z_k^2) \quad (4.54)$$

на множестве D_N^0 при условиях

$$\rho(Y[w], Y) = \sigma, \quad N = \min_{k=1, 2, \dots} k \quad (4.55)$$

Дискретный аналог функционала (4.54) получается заменой интеграла(4.53) интегральной суммой по формуле трапеций

$$\begin{aligned}
 F^\alpha [R_k, z_k] = & \Delta\sigma \left\{ \frac{1}{2} [Y(\sigma_1) - Y(\sigma_1; R_k, z_k)]^2 + \right. \\
 & \left. + \sum_{j=2}^{L-1} [Y(\sigma_j) - Y(\sigma_j; R_k, z_k)]^2 \right\} + \\
 & \left\{ \frac{1}{2} [Y(\sigma_L) - Y(\sigma_L; R_k, z_k)]^2 \right\} + \alpha \sum_{k=1}^{n-1} (R_k^2 + z_k^2),
 \end{aligned} \tag{4.56}$$

где

$$\Delta\sigma = 1/(L-1),$$

$$Y(\sigma; R_k, z_k) = \sum_{j=1}^{L-1} A(\sigma, \rho_j; R_k, z_k) X(\rho_j) \Delta\rho,$$

$$\Delta\rho = 1/(L+1).$$

Последовательно увеличивая число N сегментов маски, находим такое N^* , при котором достигается заданная точность δ . После чего функционал $F_L^\alpha(w)$ минимизируется на $D_{N^*}^0$ с параметром α , выбранным из условия (4.55). Соответствующий минимизирующий вектор w_α^* существует, т.к. $D_{N^*}^0$ замкнутое ограниченное подмножество конечномерного пространства.

Минимизацию функционала (4.56) проводим методом деформируемого многогранника [65] с дополнительным проектированием на область $D_{N^*}^0$ допустимых значений параметров $\{R_k, z_k\}$. Проектирование осуществляется методом деформируемого многогранника или случайным способом [66]; соответствующие способы известны под названиями: "метод скользящего допуска" и "комплексный метод Бокса". Расчеты проводились обоими методами в классе трехсегментных масок (рис. 12).

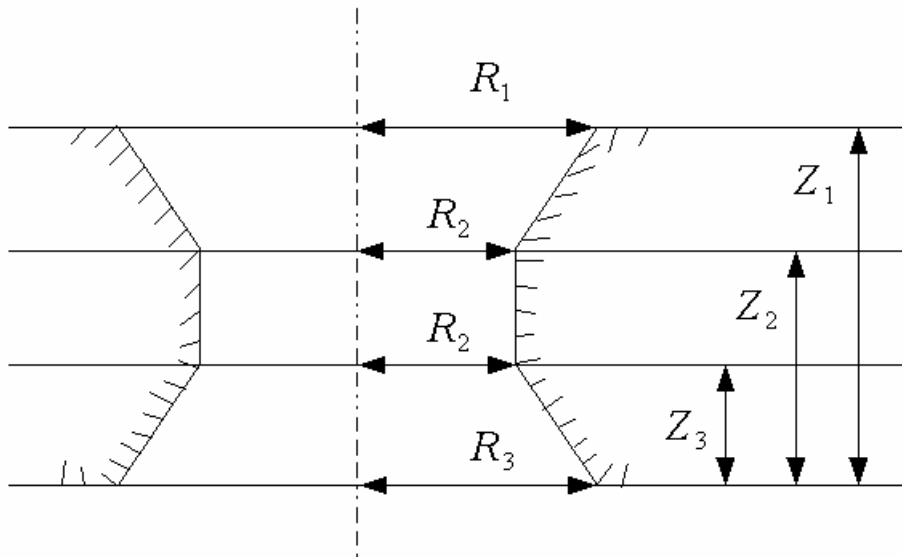


Рис. 12. Разрез трехсегментной маски

В обоих случаях достигается заданная точность вычисления канонических параметров ν_i, π_i , по которым вычисляются возможные физические параметры R_i, z_i искомой экранирующей маски.

Тема 5. Завершающий этап реализации вычислительного эксперимента

5.1. Анализ состоятельности вычислительного эксперимента и принятие решения о его завершении

Последний этап в технологическом цикле вычислительного эксперимента - это обработка, анализ, интерпретация расчетных данных и их сопоставление с результатами натуральных экспериментов.

Следует заметить, что натуральный (физический) эксперимент сам нуждается в математической обработке результатов. Причем речь идет не о первичной (например, статистической), а о полной обработке, цель которой - отыскание значений основных физических параметров (температуры, плотности, давления, скорости и др., а в нашем случае - параметров (макропараметров) эффективного распределения и функции источника). На самом деле, в современном натурном (физическом) эксперименте прямое измерение физических характеристик затруднено или вообще невозможно. Информацию приходится извлекать из косвенных данных путем соответствующей обработки фотоснимков, интерферограмм, реплик с ПЗС-матриц и т.д. При этом необходимо проводить (вспомогательный) вычислительный эксперимент (по решению вспомогательной обратной задачи в нашем случае).

После окончания анализа расчетных данных и сравнения с физическим экспериментом может оказаться, что необходимо принять во внимание некоторые новые физические факторы (зависимости формы отверстий экранирующей маски от режима работы напылительной установки, т.е. от функции источника, в нашем случае). Это приводит к новой математической модели (нашей модели, новой по сравнению с теневыми моделями Yao и Hatakoshi), для которой повторяется весь

технологический цикл вычислительного эксперимента (синтеза параметров экранирующей маски в нашем случае).

Если на некотором этапе вычислительного эксперимента (например, на этапе синтеза параметров экранирующей маски с учетом данных о функции источника, полученных путем математической обработки (полной) данных натурального (физического) эксперимента с предыдущей (синтезированной на предыдущем этапе вычислительного эксперимента) маской) достигнуто необходимое понимание особенностей физического процесса (экранируемого вакуумного напыления) и получено удовлетворительное согласие численных расчетов (решения прямой задачи) с данными (математически обработанными) натурального (напылительного через синтезированную экранирующую маску) эксперимента, вычислительный эксперимент можно считать законченным.

5.2. Теоретические аспекты итеративного алгоритма, реализующего вычислительный эксперимент

Теоретическое описание процесса экранируемого напыления имеет дело с тремя характеристиками: функцией установки R , отражающей распределение потока частиц в напылительной установке; функцией маски M , отражающей экранирующую способность маски; функцией слоя H , описывающей конфигурацию напыленного на подложке слоя. Эти характеристики связаны нелинейным функциональным соотношением

$$H = F(R, M), \quad (5.1)$$

установить явный вид которого не представляется возможным ввиду сложности приводящихся в процесс физических явлений.

Однако в работах [56, 59] показано, что эффекты экранирования в процессе напыления приближенно описываются интегральным уравнением

$$\int R(x + y, x) M(x, y) dx = H(y). \quad (5.2)$$

Эта линейная зависимость является точной лишь при описании процесса экранирования потока невзаимодействующих частиц [55, 58]. В случае реального процесса напыления эффекты экранирования описываются возмущенной (нелинейной) зависимостью (5.1).

В работах [9, 52] показано, что переход от (5.2) к (5.1), т.е. возмущение линейной (5.2) зависимости H от R до нелинейной зависимости (5.1), можно заменить переходом к линейной зависимости H от возмущенной функции установки $R[M]$

$$\int R[M](x+y, x)M(x, y)dx = H(y) \quad (5.3)$$

с неизвестной функциональной зависимостью R от M .

Задача, стоящая перед нами, - определение параметров экранирующей маски, необходимой для напыления на данной установке (с неизвестной функцией R) слоя заданной конфигурации.

Соотношения (5.2) и (5.3) позволяют сформулировать математическую задачу отыскания функции маски M^* для получения функции слоя H^* с помощью функции установки R^* .

В силу своей физической обусловленности функции H, R, M можно считать квадратично-интегрируемыми с компактными носителями [54], т.е. элементами гильбертовых пространств $L_2(Q_1), L_2(Q_2), L_2(Q_3)$ с нормами $\|\cdot\|_1, \|\cdot\|_2, \|\cdot\|_3$ соответственно. По аналогии с результатами [57] справедливы следующие утверждения.

Предложение 1. Интегральный оператор $R[M]$ с ядром $R[M](z, x)$ в (5.3) является вполне непрерывным:

$$RM = H. \quad (5.4)$$

Предложение 2. Интегральный оператор M с ядром $M(x, y)$ в (5.3) является вполне непрерывным:

$$M(R[M]) = H. \quad (5.5)$$

Для решения поставленной математической задачи мы отыскиваем последовательность H_k, R_k, M_k , сходящуюся к решению H^*, R^*, M^* задачи на совместную минимизацию по аргументам [36] системы функционалов

$$F_1(H, R, M) = \|F(R, M) - H\|_1^2 + \alpha \|H\|_1^2, \quad (5.6)$$

$$F_2(H, R, M) = \|M(R) - H\|_1^2 + \beta \|R\|_2^2, \quad (5.7)$$

$$F_3(H, R, M) = \|R(M) - H\|_1^2 + \gamma \|M\|_3^2. \quad (5.8)$$

Константы α, β, γ выбираем минимальными среди тех, которые обеспечивают строгую выпуклость функционалов F_1, F_2, F_3 по переменным H, R, M в пространствах $L_2(Q_1), L_2(Q_2), L_2(Q_3)$ соответственно. (Это возможно вследствие квадратичной зависимости F_i от соответствующей переменной.)

Минимизирующая последовательность H_k, R_k, M_k получается в результате последовательной минимизации системы вспомогательных функционалов [53]

$$F_1^\rho(H, R^*, M_k) = F_1(H, R^*, M_k) + \rho_k \|H - H_k\|_1^2;$$

$$F_2^\sigma(H_{k+1}, R, M_k) = F_2(H_{k+1}, R, M_k) + \sigma_k \|R - R_k\|_2^2;$$

$$F_3^\tau(H^*, R_{k+1}, M) = F_3(H^*, R_{k+1}, M) + \tau_k \|M - M_k\|_3^2.$$

Предложение 3. Минимизирующая последовательность H_k, R_k, M_k сходится к решению H^*, R^*, M^* , если выполняются оценки:

$$\sum_k \rho_k = \sum_k \sigma_k = \sum_k \tau_k = +\infty,$$

где $\bar{\rho} < \rho_k \leq \bar{\rho}, \bar{\sigma} < \sigma_k \leq \bar{\sigma}, \bar{\tau} < \tau_k \leq \bar{\tau}$, при $\bar{\rho}, \bar{\rho}, \bar{\sigma}, \bar{\sigma}, \bar{\tau}, \bar{\tau}$, некоторых положительных константах.

Доказательство опирается на теорему 3.1 работы [63]. В качестве исходных данных выбираем:

- требующуюся конфигурацию напыленного на подложке слоя, задающую функцию слоя H^* ;
- диффузионное распределение потока частиц в установке вакуумного напыления, задающее начальное приближение функции установки R_0 ;
- по тем или иным соображениям выбирается функция маски M_0 . Например, $M[\vec{b}]$, найденная в результате минимизации по аргументу функционала (12) в работе [50].

Использование в алгоритме экспериментальных данных $H_k^{эксн} = F(R^*, M_k)$, так что $F_1(H, R^*, M_k) = \|H_k^{эксн} - H\|_1^2$, гарантирует при сходимости $\|M_k - M^*\|_3 \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0$ сходимость $\|H_k - H^*\|_1 \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0$, что решает поставленную задачу.

5.3. Реализация итеративного алгоритма

Адаптивное управление имеет дело с тремя характеристиками процесса напыления: функцией установки R , отражающей распределение потока молекул, испускаемых установкой напыления на уровне входа экранирующей маски; функцией маски M , отражающей пропускную способность экранирующей маски по отношению к потоку молекул; функцией H , описывающей конфигурацию слоя напыленного вещества. Эти три характеристики связаны между собой соотношением:

$$R(M) = H. \quad (5.9)$$

Принцип адаптивного управления заключается в следующем: по заданной правой части H определить величину M методом итераций (последовательных приближений) с использованием экспериментов. При

этом соотношение (5.9) аппроксимируется последовательностью соотношений:

$$R(M_i) = H_i; \quad (5.10)$$

$$R_{i+1}(M_i) = H_i; \quad (5.11)$$

$$R_{i+1}(M_{i+1}) = H. \quad (5.12)$$

Соотношения (5.10) описывают реальную зависимость измеренной с точностью ε конфигурации напыленного слоя H_i на установке R с маской M_i . Соотношения (5.11) описывают линейную зависимость между M_i и H_i , позволяющую определить с точностью β функцию установки R_{i+1} . Соотношения (5.12) описывают линейную зависимость конфигурации слоя от маски, позволяющую вычислить с точностью α форму маски M_{i+1} . Точности измерений ε и вычислений α и β согласовываются между собой таким образом, что последовательность (M_i, H_i) сходится к паре (M, H) , связанной соотношением (5.9), т.е. доставляет решение исходной задачи.

Принцип адаптивного управления позволяет аппроксимировать неизвестную зависимость (5.9) последовательностью приближенных линейных уравнений. Приближенную линейную зависимость конфигурации напыленного слоя H от функции маски M и от функции установки R позволяет установить концепции эффективного распределения молекул потока по координатам и скоростям на входе маски. Последовательность линейных зависимостей RM приводит к аппроксимации вблизи искомой точки зависимости $R(M)$ ее касательной $\lim_{i \rightarrow \infty} R_i M_i$ - эффективным распределением $\lim_{i \rightarrow \infty} R_i$ в точке $\lim_{i \rightarrow \infty} M_i$.

Линейную зависимость между R, M и H получаем [9] при рассмотрении кинетического процесса прохождения молекул напыляемого

вещества в среде между источником молекул и подложкой, пренебрегая взаимодействием молекул между собой и с поверхностями маски, подложки и самой установки. Результатом служит интегральное уравнение, связывающее между собой функцию установки, функцию маски и функцию конфигурации:

$$R_{\beta}(M_{\alpha}) = H_{\varepsilon},$$

и являющееся операторным уравнением первого рода. Обратные задачи для него являются некорректными, и получись их устойчивые решения, согласованные по точности с приближенными данными, можно методом тихоновской регуляризации сведением к последовательности двух вариационных задач (см. также выражения (5.13) и (5.14)).

Поиск маски нужной формы производим следующим образом:

1. На имеющейся в нашем распоряжении установке напыления проводим эксперимент с некоторой маской M_0 простейшей формы (M_0 - начальная точка поиска, заданная с точностью α). Конфигурация напыленного слоя вещества, получившегося в результате эксперимента, измеряется с точностью ε :

$$H_0 = R_{\varepsilon}(M_0).$$

Положим $k = 1$.

2. Функцию установки R_k , задающую линейную зависимость между M_{k-1} и H_{k-1} , вычисляем, решая вариационную задачу:

$$\sum_{i=1}^k \|R_i M_{i-1} - H_{i-1}\|^2 + \beta \Omega_1(R_k) \rightarrow \min. \quad (5.13)$$

При этом параметр регуляризации β определяется по принципу обобщенной невязки $\beta = \beta(\alpha, \varepsilon)$:

$$R_k = R_{\beta}(M_{k-1}, H_{k-1}).$$

3. Функцию маски M_k , линейно связанную вычисленной функцией установки R_k с заданной функцией H , находим, решая вариационную задачу:

$$\|R_k M_k - H\|^2 + \alpha \Omega_2(M_k) \rightarrow \min. \quad (5.14)$$

При этом параметр регуляризации α определяется по принципу обобщенной невязки $\alpha = \alpha(\beta, \varepsilon)$,

$$M_k = R_\alpha(R_k, H).$$

4. На данной установке производится напылительный эксперимент с вычисленным k -им приближением функции маски M_k :
 $H_k = R_\varepsilon(M_k)$.

5. Если полученная экспериментально конфигурация H_k совпадает с заданной H с точностью ε , поиск считаем законченным. В противном случае, полагая $k = k + 1$, переходим вновь к пункту 2.

Таким образом, блок-схема поиска экранирующей маски имеет вид, приведенный на рис. 13.

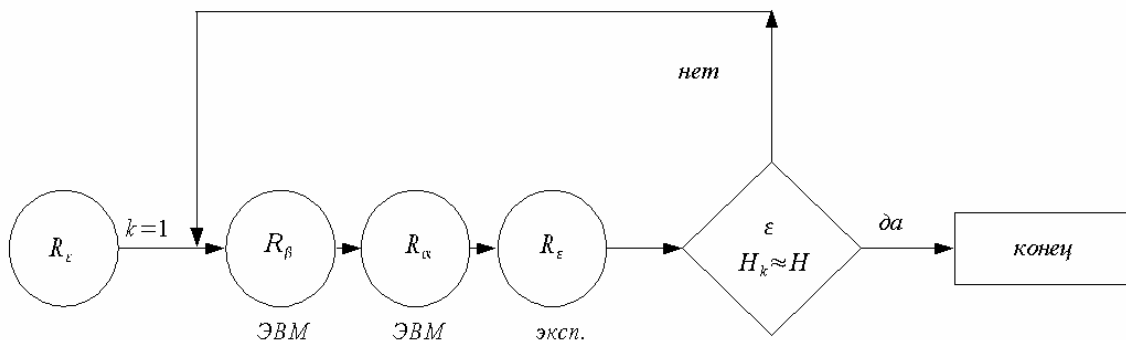


Рис. 13. Блок-схема вычислительного эксперимента

Технологическая задача, сформулированная в начале работы, теоретически и практически решена. Практическое решение задачи может быть осуществлено на ЭВМ с использованием пакета прикладных

программ и экспериментов на конкретной напылительной установке согласно приведенной блок-схеме алгоритма.

6. Приложение. Плоский оптический волновод

Изучение свойств плоского оптического волновода является необходимым условием для понимания физических процессов, лежащих в основе работы устройств интегральной оптики. Простейший плоский оптический волновод представляет собой слой диэлектрика, окруженный с двух сторон полубесконечными диэлектриками, имеющими показатели преломления меньше, нежели центральный слой. Оптическая волна, введенная в волновод, распространяется вдоль волновода, при этом энергия волны сосредоточена в центральном слое и в некоторой его окрестности. Таким образом, в плоском волноводе происходит распространение волны не в трех, а в двух измерениях вдоль его центрального слоя.

Простейший пленочный волновод не является единственным вариантом плоского оптического волновода. В настоящее время известны и широко используются также и другие типы волнопроводов, полученные, например методами диффузии, ионного обмена, протонной бомбардировки и др. Наряду с плоскими волноводами получили распространение полосковые волноводы, которые представляют собой узкие (порядка одной или нескольких длин волн) полоски, обладающие волноводными свойствами и расположенные на поверхности подложки. Теоретический анализ волн в этих волноводах является весьма сложной задачей. Вместе с тем, изучение свойств простейшего плоского тонкопленочного волновода формирует необходимую базу для понимания физических процессов, происходящих в различных типах волнопроводов, применяемых в устройствах интегральной оптики.

Теория плоского несимметричного диэлектрического волновода была разработана на кафедре радиофизики Российского университета

дружбы народов профессором Дерюгиным Л.Н. совместно с научными сотрудниками кафедры А.Н. Марчуком и В.Е. Сотиным и опубликована в журнале «Известия ВУЗов СССР – радиоэлектроника» в 1967 году [67]. В этот же период времени (1965 – 1967 гг.) были созданы первые экспериментальные образцы оптических волноводов и сформулирован ряд основных идей интегральной оптики.

В 1969 году в американском журнале «Bell System Technical Journal» была опубликована обширная статья, освещающая результаты исследований по интегральной оптике, проведенных в лабораториях этой кампании. В течение 70-х и 80-х годов исследования в области интегральной оптики проводились с большой интенсивностью. С основными результатами этих исследований можно ознакомиться в ряде монографий и обзоров [69-77].

Для студентов, впервые приступающих к изучению интегральной оптики, предназначены эти несколько лекций, которые по существу являются введением в теорию оптических волноводов и ограничиваются рассмотрением следующих вопросов: типы волн, дисперсионные уравнения и энергетические характеристики плоских диэлектрических оптических волноводов.

Для дальнейшего изучения интегральной оптики можно рекомендовать литературу, список которой приведен в конце текста.

Лекция 1. Уравнения распространения электромагнитных волн в плоском оптическом волноводе. Анализ возможного вида решения

В пассивных оптических волноводах отсутствуют сторонние токи и заряды, поэтому уравнения Максвелла имеют нулевую правую часть. Считая, что электромагнитное поле изменяется во времени по гармоническому закону, т.е.

$$\vec{E} = \vec{E}_m \cdot \exp(j\omega t), \quad \vec{H} = \vec{H}_m \cdot \exp(j\omega t),$$

уравнения Максвелла для комплексных амплитуд можно записать:

$$\text{rot}\vec{H} - j\epsilon_a\omega\vec{E} = 0, \quad (6.1)$$

$$\text{rot}\vec{E} + j\mu_a\omega\vec{H} = 0. \quad (6.2)$$

Здесь ϵ_a и μ_a - абсолютные диэлектрическая и магнитная проницаемости среды.

Рассмотрим плоский волновод (рис. 14), образованный диэлектрической пленкой, однородной в направлениях X и Z . Структура волновода неоднородна в направлении Y . В подобной системе могут существовать электромагнитные волны типа H и типа E (см. [79] глава 3, раздел 28.3, глава 5, раздел 45.3). Положим, что волны распространяются вдоль оси OZ , тогда волны типа H характерны тем, что продольная компонента (т.е. направленная вдоль направления распространения волны) $H_z \neq 0$, а продольная компонента $E_z = 0$. Из-за отсутствия продольной компоненты поля E_z такую волну называют поперечной электрической (transversal electrical), или ТЕ-волной. Аналогично волна, у которой $H_z = 0$, называется поперечной магнитной (transversal magnetical) или ТМ-волной. Как и в задаче отражения волн от границы раздела двух сред [79], здесь можно выделить два независимых типа волн: ТЕ- и ТМ-волны.

Для ТЕ-волн, распространяющихся вдоль оси Z

$$E_x \neq 0, \quad E_y = 0, \quad E_z = 0,$$

$$H_x = 0, \quad H_y \neq 0, \quad H_z \neq 0.$$

Для ТМ-волн, распространяющихся вдоль оси Z

$$E_x = 0, \quad E_y \neq 0, \quad E_z \neq 0,$$

$$H_x \neq 0, \quad H_y = 0, \quad H_z = 0.$$

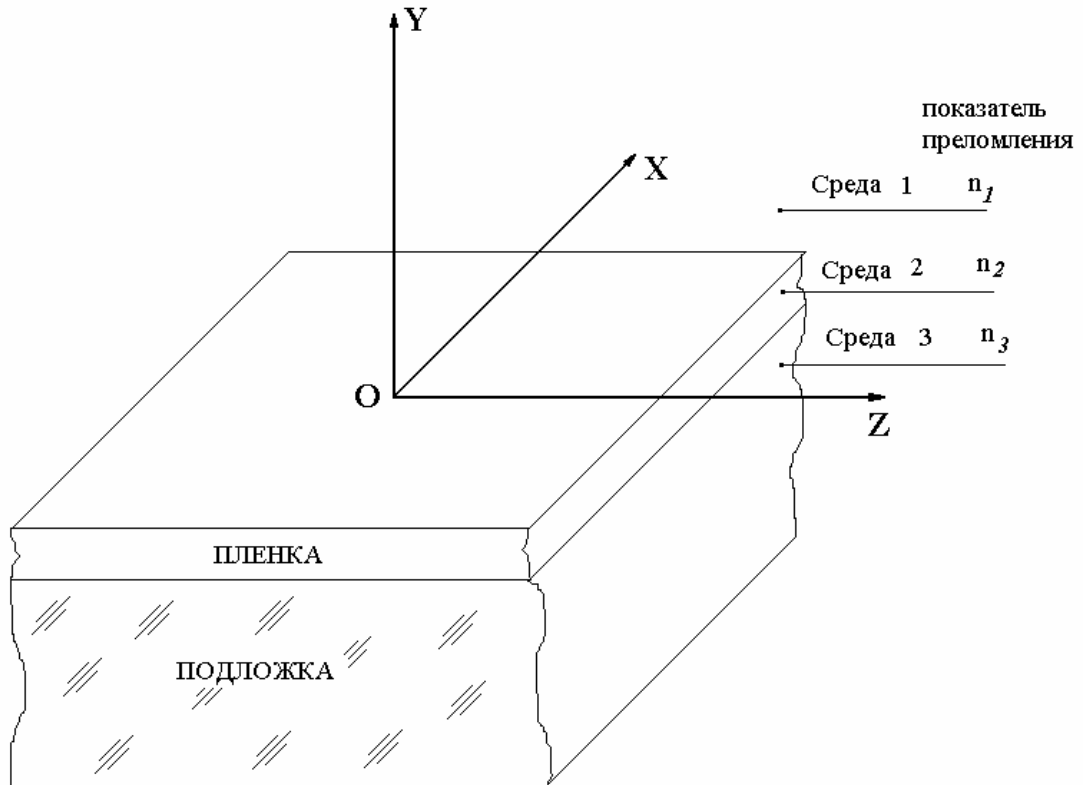


Рис 14. Схема плоского оптического волновода.

Пленка и подложка однородны, но в направлениях X и Z подложка обычно имеет существенно большую толщину по сравнению с пленкой.

Запишем уравнения Максвелла в развернутом виде:

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} - j\epsilon_a \omega E_x = 0, \quad (6.3)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} - j\epsilon_a \omega E_y = 0, \quad (6.4)$$

$$\frac{\partial H_Y}{\partial x} - \frac{\partial H_X}{\partial y} - j\epsilon_a \omega E_Z = 0, \quad (6.5)$$

$$\frac{\partial E_Z}{\partial y} - \frac{\partial E_Y}{\partial z} + j\mu_a \omega H_X = 0, \quad (6.6)$$

$$\frac{\partial E_X}{\partial z} - \frac{\partial E_Z}{\partial x} + j\mu_a \omega H_Y = 0, \quad (6.7)$$

$$\frac{\partial E_Y}{\partial x} - \frac{\partial E_X}{\partial y} + j\mu_a \omega H_Z = 0. \quad (6.8)$$

Проанализируем случай ТЕ-волн. Положим для определенности, что волна распространяется вдоль оси OZ. Как уже было указано выше, для этого случая $E_X \neq 0$, $E_Y = 0$, $E_Z = 0$ и ряд членов уравнений (6.3) и (6.8) обращается в нуль. Следует отметить, что для плоской волны, распространяющейся вдоль оси OZ, распределение полей вдоль оси OX является однородным, следовательно $\frac{\partial}{\partial x} = 0$. С учетом этого из (6.6) получаем, что $H_X = 0$, а из (6.7) и (6.8) имеем соотношения, выражающие связь проекций векторов электрического и магнитного полей в волноводе для ТЕ-волн:

$$H_Y = j \frac{1}{\omega \mu_a} \frac{\partial E_X}{\partial z}, \quad (6.9)$$

$$H_Z = -j \frac{1}{\omega \mu_a} \frac{\partial E_X}{\partial y}.$$

В результате подстановки (6.9) в (6.3) можно получить волновое уравнение для электрической компоненты поля ТЕ-волны:

$$\frac{\partial^2 E_X}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_X}{\partial z^2} + \omega^2 \mu_a \epsilon_a E_X = 0. \quad (6.10)$$

Можно записать соотношения $\mu_a = \mu_{отн} \cdot \mu_0$ и $\epsilon_a = \epsilon_{отн} \cdot \epsilon_0$, где $\mu_{отн}$, $\epsilon_{отн}$ - относительные магнитная и диэлектрическая проницаемости, а

μ_0, ε_0 абсолютные магнитная и диэлектрические проницаемости вакуума.

Введем обозначения:

$$n^2 = \varepsilon_{\text{отн}} \cdot \mu_{\text{отн}} \text{ и при } \mu_{\text{отн}} = 1, n^2 = \varepsilon_{\text{отн}}, \quad (6.11)$$

$$\omega^2 \varepsilon_0 \mu_0 = \frac{\omega^2}{c^2} = \left(\frac{2\pi}{\lambda_0} \right)^2 = k_0^2. \quad (6.12)$$

С учетом этих соотношений имеем

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} + n^2 k_0^2 E_x = 0. \quad (6.13)$$

Это уравнение описывает распространение волн в оптическом волноводе. Уравнение (6.13) с разделяющимися переменными и его решение следует искать в виде произведения двух функций, одна из которых зависит только от y , а вторая только от z . Распределение амплитуды поля по координате x предполагается равномерным.

$$E_x(y, z) = Y(y) \cdot Z(z). \quad (6.14)$$

После подстановки в (6.13) получим:

$$Z(z) \frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2} + Y(y) \frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2} + n^2 k_0^2 Y(y) Z(z) = 0 \quad (6.15)$$

или

$$\frac{1}{Z(z)} \frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2} = - \left(\frac{1}{Y(y)} \frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2} + n^2 k_0^2 \right). \quad (6.16)$$

Поскольку левая и правая части выражения (6.16) зависят от различных переменных, то равенство может выполняться только в том случае, когда каждая из частей этого равенства является константой.

Обозначим эту константу как k_z^2 . Тогда

$$\frac{1}{Z(z)} \frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2} = -k_z^2 \quad (6.17)$$

Уравнение (6.17) имеет решение вида

$$Z(z) = C \cdot \exp(\pm jk_z z). \quad (6.18)$$

Приравнивая правую часть уравнения (6.16) к константе $-k_z^2$, получим

$$\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2} + (n^2 k_0^2 - k_z^2) Y(y) = 0. \quad (6.19)$$

Конкретный вид функции $Y(y)$ определяется из уравнения (6.19) с учетом граничных условий и описывает распределение амплитуд и фаз в поперечном сечении волноводного слоя и прилегающих сред. Полный же вид решения определяется как произведение $Y(y)Z(z)$ и с учетом временной зависимости $\exp(j\omega t)$ выглядит следующим образом:

$$E_x(y, z) = CY(y) \exp(\omega t \pm k_z z).$$

Таким образом, решение имеет вид гармонической волны, распространяющейся вдоль оси OZ и имеющей амплитудное распределение $Y(y)$ в направлении, поперечном по отношению к направлению распространения. Заметим, что направление OZ в однородном плоском волноводе, где все направления в плоскости XZ равноправны, было выбрано произвольно и распространение волны может происходить в любом направлении в плоскости XZ .

Итак, после разделения переменных мы можем искать распределение комплексных амплитуд поля ТЕ-волны в зависимости от координаты y исходя из следующих уравнений:

для области 1:

$$\frac{\partial^2 E_x(y)}{\partial y^2} + (k_0^2 n_1^2 - k_z^2) E_x(y) = 0, \quad (6.20)$$

для области 2:

$$\frac{\partial^2 E_x(y)}{\partial y^2} + (k_0^2 n_2^2 - k_z^2) E_x(y) = 0, \quad (6.21)$$

для области 3:

$$\frac{\partial^2 E_x(y)}{\partial y^2} + (k_0^2 n_3^2 - k_z^2) E_x(y) = 0. \quad (6.22)$$

Записав выражения для распределения поля, необходимо будет «сшить» их на границах раздела сред, т.е. найти такие коэффициенты, которые будут удовлетворять граничным условиям. Граничные условия представляют собой уравнения непрерывности касательных составляющих векторов электромагнитного поля E и H и для ТЕ-волн имеют вид:

$$E_{x1} = E_{x2}, \quad H_{z1} = H_{z2} \quad \text{при } y = 0. \quad (6.23)$$

$$E_{x2} = E_{x3}, \quad H_{z2} = H_{z3} \quad \text{при } y = h, \quad (h - \text{толщина пленки}) \quad (6.24)$$

Заметим, что условия непрерывности H -составляющих на границах раздела эквивалентны (как это следует из (6.9)) условиям непрерывности производных от распределения E -составляющих поля на границе раздела сред 1 и 2 и сред 2 и 3. Пусть в рассматриваемой системе из трех сред выполняется условие существования волноводного режима, т.е. $n_2 > n_1$, $n_2 > n_3$. Физически это означает, что волны, бегущие в слое 2 могут испытывать полное внутренне отражение от границ со средами 1 и 3. Рассматривая уравнения (6.20)-(6.22), можно заметить, что вид решения существенно зависит от соотношения между величиной коэффициента k_z и величинами $k_0 n_1$, $k_0 n_2$, $k_0 n_3$. Если величина $k_0^2 n_i^2 - k_z^2$ оказывается отрицательной, то решение представляет собой экспоненту с действительным показателем, если же $(k_0^2 n_i^2 - k_z^2) > 0$, то решение имеет осциллирующий характер и представляет собой гармоническую функцию или экспоненту с мнимым показателем. Рассмотрим свойства решений, соответствующих разным областям значений k_z , чтобы выявить физически нереализуемые и, отбросив их, найти значения k_z и виды решений, соответствующие волноводному режиму в рассматриваемой трехслойной

системе. Характер возможных решений при различных k_z иллюстрируется графиком рис. 15.

УСЛОВИЕ А. $k_z > k_0 n_2$.

При этом условии заведомо выполняются условия $k_z > k_0 n_3$ и $k_z > k_0 n_1$, и из уравнений (6.20)-(6.22) следует, что $\frac{1}{E_x(y)} \frac{\partial^2 E_x(y)}{\partial y^2} > 0$ во всех трех областях. Очевидно, что $E_x(y)$ является экспоненциальной функцией во всех трех областях. Учитывая необходимость непрерывности производной распределения поля на границах раздела между средами, получим распределение поля, неограниченно возрастающее при удалении от границы между средами, образующими волновод. Следовательно, решение, соответствующее области А, физически неосуществимо.

УСЛОВИЕ В. $k_0 n_2 > k_z > k_0 n_1, k_0 n_3$.

В области 2 решение может быть представлено в виде гармонической функции, поскольку $\frac{1}{E_x(y)} \frac{\partial^2 E_x(y)}{\partial y^2} < 0$, при этом распределение поля по координате y в сечении слоя 2 может иметь характер четной или нечетной функции. В областях 1 и 3 решение будет иметь вид экспонент с действительным показателем. Очевидно, что физически реализуемый случай соответствует экспонентам, спадающим при удалении от границы 1 в положительном направлении и от границы 3 в отрицательном направлении. Как видно, в этом случае максимальная напряженность поля наблюдается внутри центрального слоя волновода. Напряженность поля спадает при удалении от его границ, при этом основная доля энергии волны переносится в самом слое 2 и в близлежащих областях обрамляющих сред 1 и 3, без излучения в окружающее

пространство. Такой режим называется волноводным, а центральный слой 2 часто называют несущим слоем волновода.

УСЛОВИЕ С. $k_0 n_3 > k_z > k_0 n_1$ и, очевидно, $k_0 n_2 > k_z$.

Решение имеет экспоненциальный характер в области 1 и гармонический характер в областях 2 и 3. Поле является экспоненциально спадающим при удалении от границ в среде 1. Появление осцилляций в среде 3 может быть интерпретировано как результат интерференции двух бегущих плоских электромагнитных волн: одной волны – излучаемой из волновода, другой, равной по амплитуде, набегающей на волновод из бесконечности. Предположение о существовании набегающей волны понадобилось здесь, чтобы сохранить стационарность задачи вдоль оси OZ, т.е. как бы скомпенсировать потери энергии на излучение, которое появляется при $k_0 n_3 > k_z$. Такие моды называют излучательными модами подложки.

УСЛОВИЕ D. $k_0 n_1 > k_z$.

Решение имеет синусоидальный характер для всех трех областей; имеет место излучение из волновода, как в третью, так и в первую обрамляющие среды. Такие моды называют излучательными модами волновода.

Основные результаты анализа: в системе, состоящей из трех диэлектрических областей с показателями преломления n_1 , n_2 , n_3 при условии $n_2 > n_1$ и $n_2 > n_3$ возможно распространения волноводной волны вдоль слоя 2, при этом распределение электромагнитного поля в поперечном сечении имеет максимальное значение внутри центрального слоя 2 (возможно существование нескольких максимумов поля) и

экспоненциально спадает при удалении от границ слоя 2 в направлении OY и $-OY$. Волна с неоднородным распределением по координате y распространяется вдоль плоскости волновода и характеризуется постоянной распространения k_z , при этом $k_0 n_3 < k_z < k_0 n_2$.

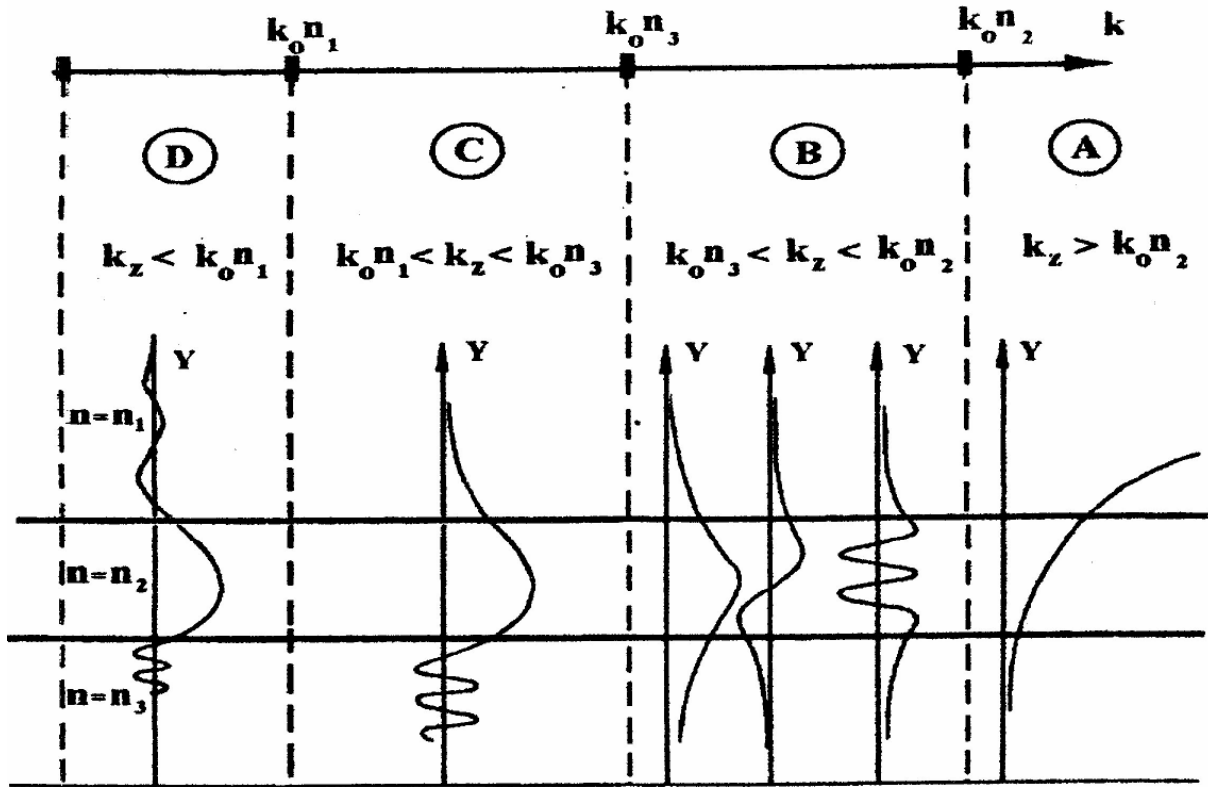


Рис. 15. Характер возможных решений волнового уравнения при различных значениях константы k_z .

На рис. 15 условие В соответствует волноводному режиму распространения волны. три кривых, изображенных на рисунке, соответствующем условию В, показывают вид распределения поля в поперечном сечении для разных поперечных мод.

Лекция 2. Дисперсионное уравнение трехслойного диэлектрического волновода

Рассмотрим трехслойный волновод, работающий в волноводном режиме без излучения, когда выполняется условие:

$$k_0 n_2 > k_z > k_0 n_3, k_0 n_1. \quad (6.25)$$

Как следует из качественного анализа, проведенного в лекции 1, распределение поля в средах 1 и 3 в направлении оси ОУ будет иметь экспоненциально убывающий характер, а в слое 2 – гармонический характер. Учитывая это, можно записать решение для ТЕ-волн ($E_x \neq 0, E_y = 0, E_z = 0$) в виде следующих формул:

$$E_x^{(1)}(y) = A_{TE} \exp(-\rho y) \quad 0 < y < \infty \quad (6.26)$$

$$E_x^{(2)}(y) = B_{TE} \cos(\beta_{TE} y + \Phi_{TE}) \quad -h < y < 0 \quad (6.27)$$

$$E_x^{(3)}(y) = D_{TE} \exp[\eta_{TE}(y + h)] \quad -\infty < y < -h. \quad (6.28)$$

Здесь $A_{TE}, B_{TE}, D_{TE}, \Phi_{TE}, \rho, \beta_{TE}, \eta_{TE}$ - параметры распределений, которые предстоит найти, используя ранее записанные уравнения и граничные условия. Индексы (1), (2) и (3) при E_x указывают номер среды, для которой записано соответствующее выражение. Индексы ТЕ в дальнейшем опустим. Подставив выражения (6.26)-(6.28) в уравнения (6.20)-(6.22), получим:

$$\rho^2 + k_0^2 n_1^2 - k_z^2 = 0 \quad \rightarrow \quad \rho = \sqrt{k_z^2 - k_0^2 n_1^2}, \quad (6.29)$$

$$-\beta^2 + k_0^2 n_2^2 - k_z^2 = 0 \quad \rightarrow \quad \beta = \sqrt{k_0^2 n_2^2 - k_z^2}, \quad (6.30)$$

$$\eta^2 + k_0^2 n_3^2 - k_z^2 = 0 \quad \rightarrow \quad \eta = \sqrt{k_z^2 - k_0^2 n_3^2}. \quad (6.31)$$

Уравнения (6.26)-(6.31) дополним уравнениями, получаемыми из граничных условий. Для этого проведем так называемое «сшивание» полей на границах раздела сред, образующих волновод. Приравнявая

касательные E-составляющие поля на границах раздела сред 1 и 2, а также 2 и 3, получим:

$$E_x^{(1)}(y=0) = E_x^{(2)}(y=0), \quad \rightarrow \quad A = B \cos(\Phi), \quad (6.32)$$

$$E_x^{(2)}(y=-h) = E_x^{(3)}(y=-h), \quad \rightarrow \quad B \cos(-\beta h + \Phi) = D. \quad (6.33)$$

Выразим касательные H-составляющие из (6.26)-(6.28) с помощью соотношений (6.9)

$$H_z^{(1)}(y) = \frac{j}{\omega \mu_a} \rho A \exp(-\rho y), \quad (6.34)$$

$$H_z^{(2)}(y) = \frac{j}{\omega \mu_a} \beta B \sin(\beta y + \Phi), \quad (6.35)$$

$$H_z^{(3)}(y) = -\frac{j}{\omega \mu_a} \eta D \exp[\eta(y+h)]. \quad (6.36)$$

Приравнивая касательные H-составляющие поля на границах областей 1 и 2, а также 2 и 3, получим:

$$H_z^{(1)}(y=0) = H_z^{(2)}(y=0), \quad \rightarrow \quad \rho A = \beta B \sin(\Phi), \quad (6.37)$$

$$H_z^{(2)}(y=-h) = H_z^{(3)}(y=-h) \quad \rightarrow \quad \beta B \sin(-\beta h + \Phi) = -D\eta. \quad (6.38)$$

Поделив уравнение (6.37) на (6.32), получим

$$\rho = \beta \operatorname{tg}(\Phi). \quad (6.39)$$

Поделив уравнение (6.38) на (6.33), получим

$$\beta \operatorname{tg}(\beta h - \Phi) = \eta \quad (6.40)$$

или

$$\beta \frac{\operatorname{tg}(\beta h) - \operatorname{tg}(\Phi)}{1 + \operatorname{tg}(\beta h)\operatorname{tg}(\Phi)} = \eta. \quad (6.41)$$

Подстановка (6.39) в (6.41) приводит к уравнению, которое принято называть дисперсионным уравнением:

$$\operatorname{tg}(\beta h) = \frac{\rho + \eta}{\beta \left(1 - \frac{\eta \rho}{\beta^2}\right)} = \beta \frac{\rho + \eta}{\beta^2 - \eta \rho}, \quad (6.42)$$

или

$$\beta h = \operatorname{arctg} \left(\beta \frac{\rho + \eta}{\beta^2 - \eta \rho} \right) + (m - 1)\pi. \quad (6.43)$$

Полученное уравнение можно представить в более компактной форме. Используем тождество

$$\operatorname{tg}(q_1 + q_2) = \frac{\operatorname{tg}(q_1) + \operatorname{tg}(q_2)}{1 - \operatorname{tg}(q_1)\operatorname{tg}(q_2)}.$$

Обозначим $\operatorname{tg}(q_1) = \frac{\rho}{\beta}$, $\operatorname{tg}(q_2) = \frac{\eta}{\beta}$, тогда из (6.42) получим тождество $\operatorname{tg}(q_1 + q_2) = \operatorname{tg}(\beta h)$, т.е. $\beta h = q_1 + q_2 + (m - 1)\pi$ и следующую форму для дисперсионного уравнения:

$$\beta h = \operatorname{arctg} \left(\frac{\rho}{\beta} \right) + \operatorname{arctg} \left(\frac{\eta}{\beta} \right) + (m - 1)\pi. \quad (6.44)$$

Здесь m – целое число ($m = 1, 2, \dots$).

Неизвестные величины ρ , β , η выражаются через известные величины показателей преломления и одну неизвестную величину k_z с помощью соотношений (6.29)-(6.31), а если подставить (6.29)-(6.31) в (6.43), то получим трансцендентное уравнение относительно неизвестной k_z . Величину k_z обычно представляют в виде $k_z = \gamma k_0$, где $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\omega}{c}$ – волновое число электромагнитной волны в свободном пространстве. Если выразить k_z через фазовую скорость волны в волноводе $k_z = \frac{\omega}{V_\phi}$, то коэффициент γ равен отношению скорости волны в свободном пространстве к фазовой скорости волны в волноводе, и его часто называют замедлением волновода

$$\gamma = \frac{c}{V_\phi}.$$

Эта формула аналогична соотношению, определяющему коэффициент преломления среды, поэтому коэффициент γ нередко интерпретируют как некоторый эквивалентный показатель преломления волновода как среды, в которой распространяется электромагнитная волна. Уравнение (6.43), выраженное через γ , имеет вид

$$k_0 h \sqrt{n_2^2 - \gamma^2} = \arctg \sqrt{n_2^2 - \gamma^2} \cdot \frac{\sqrt{\gamma^2 - n_1^2} + \sqrt{\gamma^2 - n_3^2}}{(n_2^2 - \gamma^2) - \sqrt{\gamma^2 - n_1^2} \cdot \sqrt{\gamma^2 - n_3^2}} + (m-1)\pi. \quad (6.45)$$

Корни этого уравнения $\gamma^{(m)}$ определяют собственные значения постоянной распространения $k_Z^{(m)} = k_0 \gamma^{(m)}$. Различные значения $k_Z^{(m)}$ соответствуют различным модам, т.е. различным типам волн, распространяющимся в волноводе. Уравнение типа (6.43) носит название дисперсионного уравнения, так как оно, по существу, *связывает скорость волноводной волны с длиной волны*, а также с параметрами волновода: толщиной волноводного слоя, показателями преломления сред, образующих волновод.

Аналогичные соотношения можно получить для волн типа ТМ. Выражения, определяющие распределение составляющей $H_X^{(n)}$, запишутся следующим образом:

$$H_X^{(1)}(y) = A_{TM} \exp(-\rho_{TM} y) \quad 0 < y < \infty \quad (6.46)$$

$$H_X^{(2)}(y) = B_{TM} \cos(\beta_{TM} y + \Phi_{TM}) \quad -h < y < 0 \quad (6.47)$$

$$H_X^{(3)}(y) = D_{TM} \exp[\eta_{TM} (y + h)] \quad -\infty < y < -h. \quad (6.48)$$

Здесь A_{TM} - напряженность магнитного поля $H_X^{(1,2)}$ на границе между областями 1 и 2. Выражения для ρ_{TM} , β_{TM} , η_{TM} имеют вид (индекс ТМ в дальнейшем опущен для сокращения записи)

$$\rho = \sqrt{k_Z^2 - k_0^2 n_1^2}, \quad (6.49)$$

$$\beta = \sqrt{k_0^2 n_2^2 - k_Z^2}, \quad (6.50)$$

$$\eta = \sqrt{k_z^2 - k_0^2 n_3^2}. \quad (6.51)$$

Из граничных условий следует:

$$H_x^{(1)}(y=0) = H_x^{(2)}, \quad \rightarrow \quad A = B \cos(\Phi) \quad (6.52)$$

$$H_x^{(2)}(y=-h) = H_x^{(3)}(y=-h), \rightarrow B \cos(-\beta h + \Phi) = D. \quad (6.53)$$

Касательные E-составляющие выражаются через H_x :

$$E_z = \frac{j}{\omega \epsilon_a} \frac{\partial H_x}{\partial y}, \quad (6.54)$$

$$E_z^{(1)} = -\frac{j}{\omega \epsilon_1} \rho A \exp(-\rho y), \quad (6.55)$$

$$E_z^{(2)} = -\frac{j}{\omega \epsilon_2} \beta B \sin(\beta y + \Phi), \quad (6.56)$$

$$E_z^{(3)} = \frac{j}{\omega \epsilon_3} \eta D \exp[\rho(y+h)]. \quad (6.57)$$

Используя граничные условия для касательных E компонент, получим

$$E_z^{(1)}(y=0) = E_z^{(2)}(y=0), \quad \rightarrow \quad \frac{A\rho}{\epsilon_1} = \frac{\beta B}{\epsilon_2} \sin(\Phi), \quad (6.58)$$

$$E_z^{(2)}(y=-h) = E_z^{(3)}(y=-h), \rightarrow \frac{\beta B}{\epsilon_2} \sin(\beta h - \Phi) = \frac{\eta D}{\epsilon_3}. \quad (6.59)$$

Проводя преобразования, аналогичные преобразованиям уравнений для ТЕ-волн, из уравнений (6.52), (6.53), (6.58), (6.59) можно получить дисперсионное уравнение для ТМ-волн.

$$\operatorname{tg}(\beta h) = \frac{\beta}{n_2^2} \frac{\frac{\rho}{n_1^2} + \frac{\eta}{n_3^2}}{\frac{\beta^2}{n_2^4} - \frac{\rho\eta}{n_1^2 n_3^2}} \quad (6.60)$$

ИЛИ

$$\beta h = \arctg\left(\frac{n_2^2 \rho}{n_1^2 \beta}\right) + \arctg\left(\frac{n_2^2 \eta}{n_3^2 \beta}\right) + (m-1)\pi. \quad (6.61)$$

Если подставить в (6.60) выражения (6.49)-(6.51), то получим запись дисперсионного уравнения для ТМ-волн в развернутой форме:

$$k_0 h \sqrt{n_2^2 - \gamma^2} = \arctg \frac{\sqrt{n_2^2 - \gamma^2}}{n_2} \cdot \frac{\frac{\sqrt{\gamma^2 - n_1^2}}{n_1^2} + \frac{\sqrt{\gamma^2 - n_3^2}}{n_3^2}}{\frac{n_2^2 - \gamma^2}{n_2^4} - \frac{\sqrt{\gamma^2 - n_1^2} \cdot \sqrt{\gamma^2 - n_3^2}}{n_1^2 n_3^2}} + (m-1)\pi. \quad (6.62)$$

СИММЕТРИЧНЫЙ ПЛОСКИЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ВОЛНОВОД.
Как частный случай, из полученных выражений вытекают дисперсионные уравнения симметричного волновода, т.е. волновода, у которого слой с наиболее высоким показателем преломления n_2 размещен между двумя полубесконечными средами с одинаковыми показателями преломления $n_1 = n_3 = n$. Учитывая это из (6.43) и (6.61) получим:

для ТЕ-волн

$$\beta h = 2 \arctg \frac{\rho}{\beta} + (m-1)\pi, \quad (6.63)$$

или

$$k_0 h \sqrt{n_2^2 - \gamma^2} = 2 \arctg \frac{\sqrt{\gamma^2 - n^2}}{\sqrt{n_2^2 - \gamma^2}} + (m-1)\pi. \quad (6.64)$$

для ТМ-волн

$$\beta h = 2 \arctg \frac{n_2^2 \rho}{n^2 \beta} + (m-1)\pi, \quad (6.65)$$

или

$$k_0 h \sqrt{n_2^2 - \gamma^2} = 2 \arctg \frac{n_2^2}{n^2} \frac{\sqrt{\gamma^2 - n^2}}{\sqrt{n_2^2 - \gamma^2}} + (m-1)\pi. \quad (6.66)$$

Дисперсионные уравнения для ТЕ- и ТМ-волн представляют собой трансцендентные уравнения относительно переменной γ . Значения γ , удовлетворяющие уравнению, можно найти, применяя численные методы решения. Если найдено действительное значение величины замедления γ , соответствующее заданному набору значений показателей преломления сред n_1, n_2, n_3 и заданной толщине слоя h при заданной длине волны λ_0 для какого-либо целого числа m , то это значение $\gamma^{(m)}$ определяет фазовую скорость распространения m -ой моды в волноводе в направлении оси Z , а соответствующее волновое число будет равно:

$$k_z^{(m)} = \gamma^{(m)} k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0} \gamma^{(m)}.$$

Как уже отмечалось выше, физический смысл коэффициента γ может быть интерпретирован как значение некоторого эквивалентного показателя преломления $n_{\text{экв}}$ среды, в которой волна распространяется с той же фазовой скоростью, что и неоднородная волна в волноводе. В научной литературе также широко распространен термин «эффективный показатель преломления», используемый для обозначения величины замедления волновода (т.е. $\gamma \equiv n_{\text{эфф}} \equiv n_{\text{экв}}$).

Лекция 3. Анализ дисперсионных зависимостей, волноводные моды плоского трехслойного волновода

1. *Дисперсионные зависимости.* Для наглядности удобно представить решение дисперсионного уравнения в виде графиков зависимостей $\gamma^{(m)}$ от толщины волноводного слоя h . Для их построения необходимо задать значения n_1 , n_2 , n_3 и длины волны λ_0 . После этого по формулам (6.45) и (6.52) легко рассчитать и построить зависимости $\gamma^{(m)} = f(h)$ для каждого числа $m = 1, 2, \dots$. Эти семейства кривых, рассчитанные для $\lambda_0 = 0,6328$ мкм., для двух типов волноводов, различающихся параметрами n_1 , n_2 , n_3 , приведены на рис. 16. Первый волновод ($n_1 = 1$, $n_2 = 1,59$, $n_3 = 1,51$) представляет собой пленку, изготовленную из полистирола, на подложке из стекла. Поверхность пленки граничит с воздухом. Второй волновод ($n_1 = 1$, $n_2 = 2,15$, $n_3 = 1,51$) представляет собой пленку окиси тантала (Ta_2O_5) на подложке из стекла. Поверхность пленки также граничит с воздухом. Первый волновод является типичным представителем семейства волноводов с небольшой разницей показателей преломления пленки и подложки. Второй волновод имеет большое различие показателей преломления пленки и подложки.

Из приведенных на рис. 16 дисперсионных зависимостей видно, что величина эквивалентного (эффективного) показателя преломления (замедления) $n_{\text{экс}}^{(m)} = \gamma^{(m)}$ может принимать значения в диапазоне от величины показателя преломления подложки n_3 до показателя преломления несущего слоя n_2 . Если толщина волноводной пленки неограниченно возрастает, волноводные свойства слоя сохраняются, а величина $n_{\text{экс}}$ приближается к показателю преломления вещества волноводного слоя n_2 ($n_{\text{эфф}} \rightarrow n_2$).

При уменьшении толщины волноводного слоя величина $n_{\text{экв}}$ уменьшается, и значение ее может достичь n_3 . Этот рубеж ($n_{\text{экв}} = n_3$) достигается при определенном значении толщины волноводного слоя, которое называется *критическим*. При толщине пленки меньше критической слой теряет волноводные свойства.

2. *Критическая толщина*, одномодовый и многомодовый волноводы. Найти значение критической толщины для ТЕ и ТМ-волн можно приравняв $\gamma = n_3$ в выражениях (6.45) и (6.62).

Для ТЕ-волн

$$h_{\text{кр}}^{(TE)} = \frac{\lambda_0}{2\pi\sqrt{n_2^2 - n_3^2}} \left[\text{arctg} \frac{\sqrt{n_3^2 - n_1^2}}{\sqrt{n_2^2 - n_3^2}} + (m-1)\pi \right]. \quad (6.67)$$

Для ТМ-волн

$$h_{\text{кр}}^{(TM)} = \frac{\lambda_0}{2\pi\sqrt{n_2^2 - n_3^2}} \left[\text{arctg} \frac{n_2^2 \sqrt{n_3^2 - n_1^2}}{n_1^2 \sqrt{n_2^2 - n_3^2}} + (m-1)\pi \right]. \quad (6.68)$$

Поскольку $n_2 > n_1$, значение критической толщины в случае ТМ-волн больше, нежели значение критической толщины для ТЕ-волн при одном и том же номере m . Когда

$$h_{\text{кр}}^{(TM1)} > h > h_{\text{кр}}^{(TE1)}, \quad (6.69)$$

в волноводе может распространяться только одна мода ТЕ₁. Для волны ТМ₁ при толщине пленки, ограниченной условием (6.69), условия волноводного режима еще не выполняются. Такой волновод называют *одномодовым волноводом*.

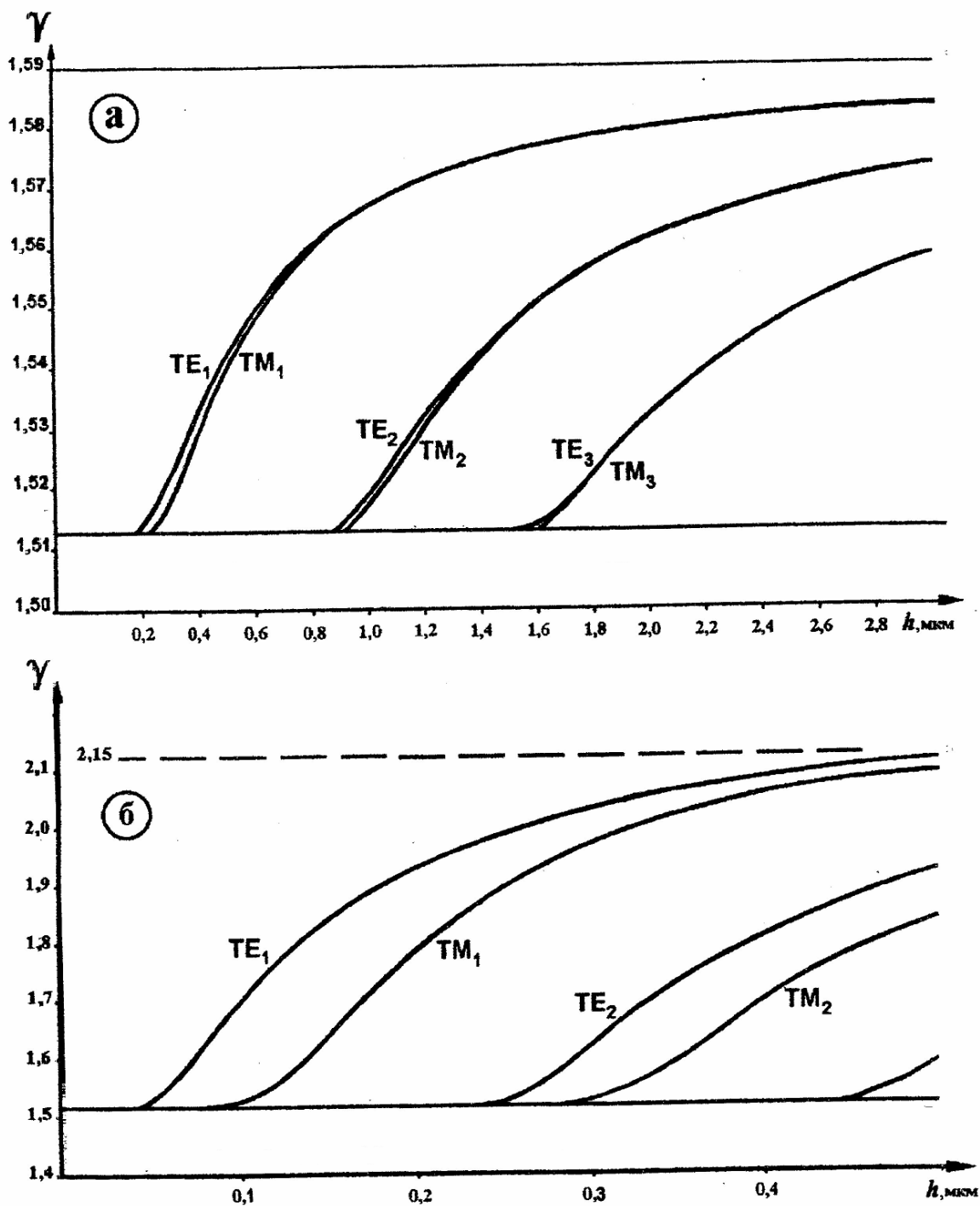


Рис. 16. Зависимости замедления от толщины слоя оптического волновода для двух характерных типов волноводов.

На рис. 16 рассматриваются два случая. В случае *а* имеется волновод из пленки полистирола на стеклянной подложке ($n_1 = 1, n_2 = 1.59, n_3 = 1.51; \lambda = 0.6328 \text{ мкм}$), а в случае *б* - волновод из пленки Ta_2O_5 на стеклянной подложке ($n_1 = 1, n_2 = 2.15, n_3 = 1.51; \lambda = 0.6328 \text{ мкм}$).

При увеличении толщины волноводного слоя 2 будут последовательно удовлетворяться условия существования высших мод (TE_2 , TM_2 , TE_3 , TM_3 и т.д.). Волновод, в котором существуют высшие моды, называется многомодовым. Как следует из (6.67) и (6.68), соответствующие критические толщины для мод с номерами m и $(m+1)$ одинаковой поляризации отличаются на величину, равную

$$(\Delta h)_{кр}^{(m,m+1)} = h_{кр}^{(m)} - h_{кр}^{(m+1)} = \frac{\lambda_0}{2\sqrt{n_2^2 - n_3^2}}. \quad (6.70)$$

Расположение значений критической толщины на оси возможных толщин слоя 2 иллюстрируется графиком рис. 17.

Как видно из полученных выражений (6.67), (6.68) и (6.70) значения критической толщины и разности критических толщин двух соседних мод с разными номерами m будут уменьшаться с увеличением разности показателей преломления ($n_2 - n_3$) волноводного слоя и подложки.

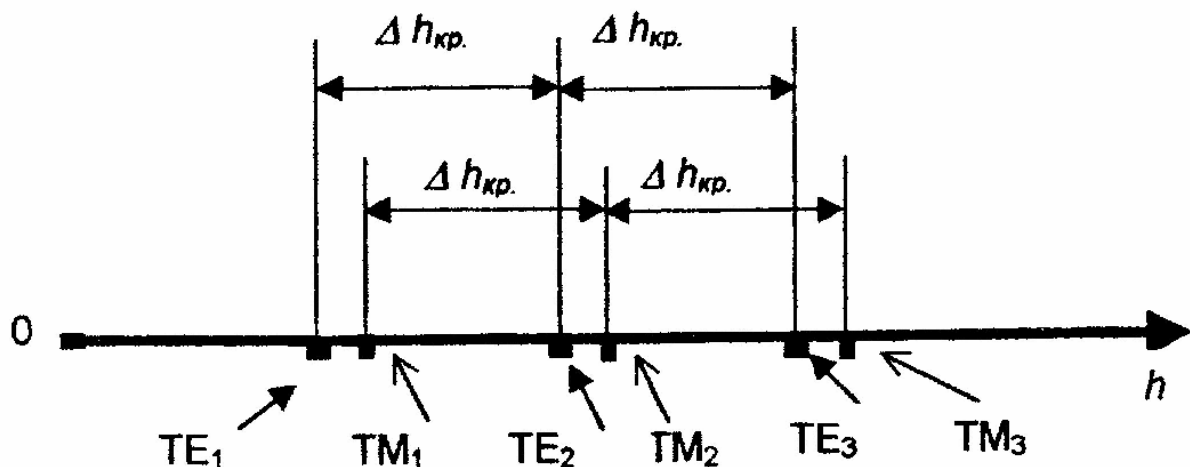


Рис. 17. Расположение критических частот TE и TM волн пленочного волновода.

Интересно отметить особый случай – *симметричный волновод*. Симметричным волноводом называют волновод, у которого одинаковы показатели преломления обрамляющих сред $n_1 = n_3$. Как следует из (6.67) и (6.68) критические толщины TE_1 и TM_1 мод равны нулю, т.е. волноводный режим существует принципиально при сколь угодно малой

толщине волноводного слоя. Критические толщины высших мод ($m=2, 3, \dots$) симметричного волновода для ТЕ и ТМ-волн одинаковы и равны

$$h_{кр} = (m-1) \frac{\lambda_0}{2\sqrt{n_2^2 - n_3^2}}. \quad (6.71)$$

3. *Распределение поля* в сечении волновода (рис. 3.3) для различных мод задается выражениями (6.26)-(6.28) и (6.34)-(6.36) для ТЕ мод и аналогичными выражениями (6.46)-(6.48) и (6.55)-(6.57) для ТМ мод. Для конкретности возьмем распределение E_x компоненты в ТЕ-волне

$$E_x^{(1)}(y) = A_{TE} \exp\left(\frac{2\pi}{\lambda_0} \sqrt{\gamma^2 - n_1^2} y\right) \quad 0 < y < +\infty, \quad (6.72)$$

$$E_x^{(2)}(y) = B_{TE} \cos(\beta y + \Phi_{TE}) \quad -h < y < 0, \quad (6.73)$$

$$E_x^{(3)}(y) = D_{TE} \exp\left[\frac{2\pi}{\lambda_0} \sqrt{\gamma^2 - n_3^2} (y-h)\right] \quad -\infty < y < -h. \quad (6.74)$$

Величины B_{TE} и D_{TE} можно выразить через величину A_{TE} и величину Φ_{TE} , а величину β через k_z или γ (см. лекцию 2). Величину A_{TE} можно найти, если задать мощность волны, которая распространяется по волноводу (см. лекцию 4).

Характер распределения поля, описываемого выражениями (6.72)-(6.74), изображен на рис 18.

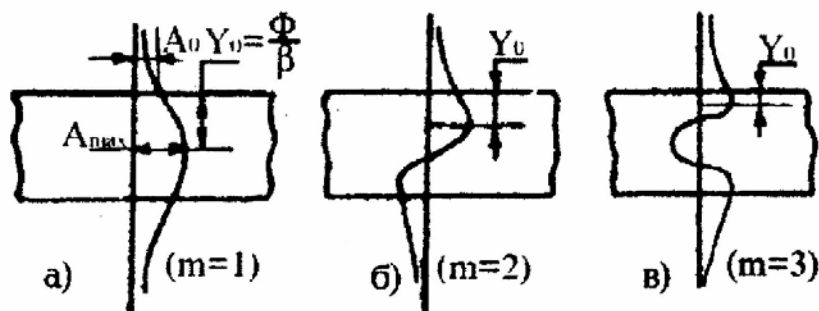


Рис. 18. Вид распределения поля в поперечном сечении волновода для различных волновых мод

В волноводном режиме величина γ изменяется от n_3 до n_2 ($n_3 > n_1$, причем $n_2 > n_3$) Отсюда видно, что распределение поля в среде 1 довольно

резко убывает на расстояниях порядка длины волны, если разница между n_3 и n_1 не слишком мала. Распределение поля в подложке также экспоненциально убывает, однако при $\gamma \rightarrow n_3$, т.е. когда режим волновода приближается к критическому, показатель экспоненты стремится к нулю. Распределение поля при этом вытягивается в подложку. Эффективную глубину проникновения поля в подложку можно определить из выражения (6.74) как глубину, на которой амплитуда напряженности поля уменьшается в e -раз ($\approx 2,7$) по сравнению с амплитудой поля на границе областей 2 и 3

$$l_{эфф} = \frac{\lambda_0}{2\pi\sqrt{\gamma^2 - n_3^2}}. \quad (6.75)$$

При $(\gamma - n_3)$ порядка 10^{-4} эта величина составляет более десятка длин волн, что намного превышает саму толщину центрального волноводного слоя. При удалении от критического режима поле в подложке становится быстро убывающим, Так, при $(\gamma - n_3) = 0,1$ эффективная глубина проникновения составит уже долю длины волны.

Распределение поля в центральном слое – гармоническое, вида $\cos(\beta y + \Phi) = \cos \beta \left(y + \frac{\Phi}{\beta} \right)$. Максимум этого распределения сдвинут в область отрицательных значений y (т.е. в область центрального слоя) на величину $y_0 = -\frac{\Phi}{\beta}$. Область значений y простирается от 0 до $-h$, величина βy изменяется от 0 до βh . Величину βh можно определить из дисперсионного уравнения как

$$\beta h = \text{arctg} \frac{\rho}{\beta} + \text{arctg} \frac{\eta}{\beta} + (m - 1)\pi.$$

Отсюда видно, что в случае низших мод ($m = 1$) βh не превышает π и, следовательно, на толщине слоя укладывается менее полупериода

функции $\cos(\beta h)$. Если же $m = 2$, то на толщине слоя может укладываться от 0,5 до 1 периода функции βh , так как $\pi < \beta h < 2\pi$ и так далее. При произвольном m на толщине h укладывается без малого m пространственных полупериодов функции βh . Распределение поля высших мод в центральном слое оказывается знакопеременным и имеет $(m - 1)$ переходов через ноль в пределах толщины слоя, как это показано на рис. 18а, б, в.

4. *Представление волноводной волны в виде двух парциальных волн.* Неоднородную волну в центральном слое плоского волновода с распределением поля в поперечном сечении (6.73) можно представить в виде двух плоских парциальных волн, распространяющихся по волноводу. Представим волну с распределением (6.73) в виде

$$\begin{aligned} \dot{E}_x^{(2)} &= B \cos(\beta y + \Phi) \exp(jk_z z) = \\ &= \frac{1}{2} B [\exp[j(k_z z + \beta y)] \exp(j\Phi) + \exp[j(k_z z - \beta y)] \exp(-j\Phi)] \end{aligned} \quad (6.76)$$

Как видно из (6.76), распределение поля в слое 2 представляет собой суперпозицию двух плоских волн с волновыми векторами

$$\vec{k}' = k_z \vec{z}_0 + \beta \vec{y}_0 \quad \text{и} \quad \vec{k}'' = k_z \vec{z}_0 - \beta \vec{y}_0$$

и с комплексными амплитудами, равными

$$\begin{aligned} \dot{E}_x' &= \frac{1}{2} B \exp(j\Phi) = \frac{1}{2} B \left(\cos \arctg \frac{\rho}{\beta} + j \sin \arctg \frac{\rho}{\beta} \right) = \\ &= \frac{1}{2} \frac{\beta B}{\sqrt{\rho^2 + \beta^2}} \left(1 + j \frac{\rho}{\beta} \right), \end{aligned} \quad (6.77)$$

$$\begin{aligned} \dot{E}_x'' &= \frac{1}{2} B \exp(-j\Phi) = \frac{1}{2} B \left(\cos \arctg \frac{\rho}{\beta} - j \sin \arctg \frac{\rho}{\beta} \right) = \\ &= \frac{1}{2} \frac{\beta B}{\sqrt{\rho^2 + \beta^2}} \left(1 - j \frac{\rho}{\beta} \right), \end{aligned} \quad (6.78)$$

Направления движения волн можно легко определить, зная составляющие волновых векторов в направлениях \vec{z}_0 и \vec{y}_0 .

Диаграмма векторов \vec{k}_z и \vec{k}_y изображена на рис 19.

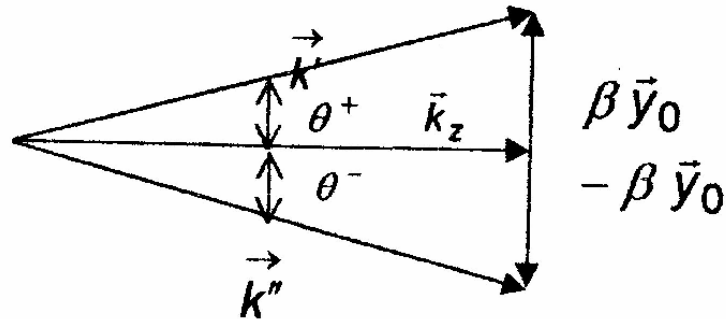


Рис. 19. Векторные диаграммы волновых векторов парциальных волн.

Из построения, приведенного на рис 19, находим, что парциальные волны имеют постоянные распространения k' и k''

$$(k')^2 = k_z^2 + \beta^2, \quad (6.79)$$

но из соотношения (6.30) имеем $k_z^2 + \beta^2 = k_0^2 n_2^2$, следовательно, модуль постоянной распространения парциальной волны равен модулю постоянной распространения плоской волны в пространстве, заполненным диэлектриком с показателем преломления n_2

$$|k'| = |k''| = k_0 n_2. \quad (6.80)$$

Как видно из векторной диаграммы, приведенной на рис 19, каждая из двух парциальных волн распространяется под углом θ^+ и θ^- по отношению к плоскости волновода

$$|\theta^+| = |\theta^-| = \arctg \frac{\beta}{k_z} = \arctg \frac{\sqrt{n_2^2 - \gamma^2}}{\gamma}. \quad (6.81)$$

Поскольку показатель преломления центрального слоя n_2 больше, чем n_1 и n_3 , то при падении парциальной волны на границу раздела этих сред может выполняться условие полного внутреннего отражения, т.е.

$$\cos \theta > \frac{n_1}{n_2}, \quad (6.82)$$

$$\cos \theta > \frac{n_3}{n_2}. \quad (6.83)$$

Подставим (6.81) в (6.82) и (6.83), чтобы выяснить, при каких условиях наблюдается полное внутреннее отражение

$$\cos \arctg \frac{\sqrt{n_2^2 - \gamma^2}}{\gamma} > \frac{n_1}{n_2}, \quad (6.84)$$

$$\cos \arctg \frac{\sqrt{n_2^2 - \gamma^2}}{\gamma} > \frac{n_3}{n_2}. \quad (6.85)$$

Учитывая, что $\cos \arctg(x) = \frac{1}{\sqrt{1+x^2}}$ из (6.84) и (6.85) получим

следующие условия:

$$\gamma > n_1, \quad (6.86)$$

$$\gamma > n_3. \quad (6.87)$$

Отсюда видно, что условие полного внутреннего отражения парциальных волн от границ слоя 2 с областями 1 и 3 в точности совпадает с условием существования волноводного режима в волноводе.

Таким образом, мы показали, что волноводные волны можно рассматривать как сумму двух парциальных волн, распространяющихся в центральном слое под углами θ^+ и θ^- по отношению к плоскости волновода и испытывающих полное внутреннее отражение на границах слоя 2.

Рассмотрим изменение хода парциальных волн при изменении параметров волновода. Пусть в волноводе существует волноводный режим. Будем уменьшать толщину волноводного слоя. При этом величина γ для данной моды монотонно уменьшается, и, как видно из формулы (6.81), угол θ при этом монотонно растет. Пока $\gamma > n_3$, выполняется

условие полного внутреннего отражения и волна, падающая на границу, не может излучиться в среду 3. Аналогичное условие $\gamma > n_1$ выполняется и для среды 1, так как мы положили $n_3 > n_1$. Как только величина γ достигнет n_3 , условие полного внутреннего отражения больше не будет выполняться и волна, бегущая по волноводу, должна излучиться в среду 3. Из условия (6.87) следует, что это достигается, когда $\gamma = n_3$ и угол

$$\theta = \arctg \frac{\sqrt{n_2^2 - n_3^2}}{n_3}. \quad (6.88)$$

как мы уже установили ранее, этот рубеж $\gamma = n_3$ достигается при критической толщине $h_{кр}$, определяемой соотношениями (6.67) или (6.68).

Явление излучения света из плоского волновода при уменьшении толщины волновода меньше критической можно наблюдать, если изготовить волновод переменной толщины (рис. 20)

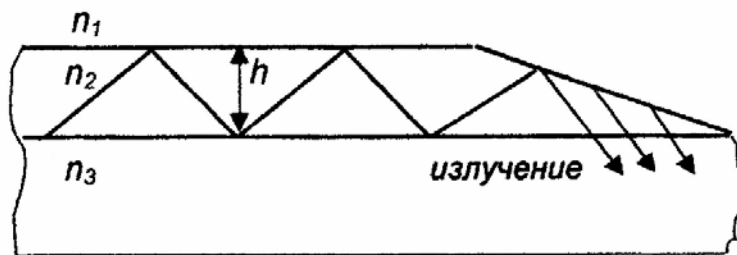


Рис. 20. Картина, иллюстрирующая распространение парциальной волны и излучение из диэлектрического волновода переменной толщины.

Волна, набегающая на клинообразный участок волновода, излучается в подложку, поскольку условие $\gamma = n_3$ достигается при уменьшении толщины ранее, чем условие $\gamma > n_1$, при котором излучение происходит в воздух.

Лекция 4. Перенос энергии волной в плоском диэлектрическом волноводе

Распространяясь вдоль волноводного слоя, волноводные волны переносят энергию в направлении распространения (ось OZ на рис. 21). Для расчета переносимой мощности используем ранее найденные (лекция 2) выражения, определяющие распределение поля в волноводе. Выделим элементарную площадку $\Delta S'$ в плоскости, перпендикулярной направлению распространения волны, с размером dy в направлении оси OY и с единичным размером в направлении оси OX (по оси OX волновод однороден и бесконечен). Поток мощности, проходящий через такую площадку в направлении \vec{z}_0 , равен

$$P_{\Delta S} = \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left[\dot{\vec{E}} \times \vec{H}^* \right] \cdot \vec{z}_0 dy. \quad (6.89)$$

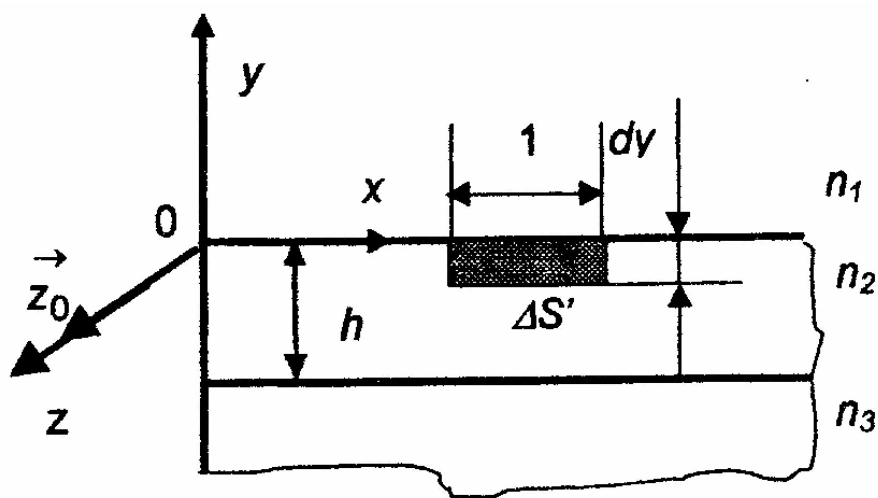


Рис. 21. К расчету переноса энергии волной по волноводу.

Полный поток мощности P_B , проходящий через сечение волновода единичной ширины, получим, интегрируя (6.89) по y .

Для TE-волн ($E_x \neq 0$, $E_{y,z} = 0$, $H_{y,z} \neq 0$, $H_x = 0$) имеем

$$P_B^{(TE)} = \frac{1}{2} \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{E}_X H_Y^* dy. \quad (6.90)$$

Для ТМ-волн ($H_X \neq 0$, $H_{Y,Z} = 0$, $E_{Y,Z} \neq 0$, $E_X = 0$) имеем

$$P_B^{(TM)} = -\frac{1}{2} \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{E}_Y H_X^* dy. \quad (6.91)$$

Принимая во внимание ранее полученные выражения (см. лекцию 2) для распределения поля в волноводе для ТЕ-волн

$$\begin{aligned} \dot{E}_X &= E_X(y) \exp(-jk_Z z), \\ \dot{H}_Y &= \frac{j}{\omega \mu_a} \frac{\partial E_X}{\partial z} = \frac{k_Z}{\omega \mu_a} E_X(y) \exp(-jk_Z z), \end{aligned}$$

получим

$$P_B^{(TE)} = \frac{1}{2} \frac{k_Z}{\omega \mu_a} \int_{-\infty}^{+\infty} E_X^2(y) dy, \quad (6.92)$$

аналогично для ТМ-волн

$$\begin{aligned} \dot{H}_X &= H_X(y) \exp(-jk_Z z), \\ \dot{E}_Y &= -\frac{j}{\omega \epsilon_a} \frac{\partial H_X}{\partial z} = -\frac{k_Z}{\omega \epsilon_a} H_X(y) \exp(-jk_Z z), \\ P_B^{(TM)} &= \frac{1}{2} \frac{k_Z}{\omega \epsilon_a} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{H_X^2(y)}{\epsilon_{отн}} dy. \end{aligned} \quad (6.93)$$

Для дальнейших вычислений $P_B^{(TE)}$ подставим в (6.92) выражения, определяющие $E_X^2(y)$ из (6.26) - (6.28), предварительно выразив величины B_{TE} и D_{TE} через величину $A = A_{TE}$, т.е. через амплитуду напряженности электрического поля $E_X^{(1,2)}$ на границе слоев 1 и 2. Область интегрирования разбиваем на 3 части, соответствующие трем средам волновода. Опуская индекс (TE), запишем:

$$P_B^{(1)} = \frac{1}{2} \frac{k_z}{\omega \mu_a} \int_0^{+\infty} A^2 \exp(-2\rho y) dy \quad 0 < y < +\infty. \quad (6.94)$$

$$P_B^{(2)} = \frac{1}{2} \frac{k_z}{\omega \mu_a} \int_{-h}^0 A^2 \left(\cos \beta y - \frac{\rho}{\beta} \sin \beta y \right)^2 dy \quad -h < y < 0 \quad (6.95)$$

$$P_B^{(3)} = \frac{1}{2} \frac{k_z}{\omega \mu_a} \int_{-\infty}^{-h} A^2 \left(\cos \beta - \frac{\rho}{\beta} \sin \beta \right)^2 \exp[2\eta(y+h)] dy, \quad -\infty < y < -h \quad (6.96)$$

Множитель перед интегралами можно преобразовать

$$k_z = \gamma k_0 = \gamma \frac{\omega}{c} = \gamma \omega \sqrt{\mu_0 \varepsilon_0},$$

$$\frac{k_z}{\omega \mu} = \frac{\gamma \omega \sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}}{\omega \mu} = \frac{\gamma}{\mu_{\text{отн}}} \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} = \frac{\gamma}{W_0}, \quad \mu_{\text{отн}} = 1.$$

$W_0 = \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}}$ - это волновое сопротивление свободного пространства,

$W_0 = 120\pi$. В результате интегрирования (6.94)-(6.96) получим

$$P_B^{(1)} = A^2 \frac{\gamma}{4W_0} \frac{1}{\rho}, \quad (6.97)$$

$$P_B^{(2)} = A^2 \frac{\gamma}{4W_0} \left[h \left(1 + \frac{\rho^2}{\beta^2} \right) + \frac{1}{\beta} \left(1 - \frac{\rho^2}{\beta^2} \right) \sin(\beta h) \cos(\beta h) + \frac{2\rho}{\beta^2} \sin^2 \beta h \right], \quad (6.98)$$

$$P_B^{(3)} = A^2 \frac{\gamma}{4W_0} \left(\cos(\beta h) + \frac{\rho}{\beta} \sin(\beta h) \right)^2 \frac{1}{\eta}. \quad (6.99)$$

Полученные выражения можно преобразовать к виду, более удобному для физической интерпретации, используя дисперсионное уравнение для ТЕ-волн:

$$\beta h = \arctg \frac{\rho}{\beta} + \arctg \frac{\eta}{\beta} + (m-1)\pi.$$

Подставляя βh в (6.98)-(6.99) и используя тригонометрические тождества

$$\sin(\operatorname{arctg} x) = \frac{x}{\sqrt{1+x^2}}, \quad \cos(\operatorname{arctg} x) = \frac{1}{\sqrt{1+x^2}},$$

получим следующие выражения:

$$P_B^{(1)} = A^2 \frac{\gamma}{4W_0} \frac{1}{\rho},$$

$$P_B^{(2)} = A^2 \frac{\gamma}{4W_0} \frac{\beta^2 + \rho^2}{\beta^2} \left[h + \frac{\rho}{\rho^2 + \beta^2} + \frac{\eta}{\eta^2 + \beta^2} \right],$$

$$P_B^{(3)} = A^2 \frac{\gamma}{4W_0} \frac{\beta^2 + \rho^2}{\beta^2 + \eta^2} \frac{1}{\eta}.$$

Суммируя найденные парциальные мощности, переносимые волной в средах 1, 2, 3, получим выражение, определяющее полную мощность, переносимую ТЕ-волной по волноводу в расчете на единицу его ширины.

$$P_{B(TE)}^\Sigma = A^2 \frac{\gamma}{4W_0} \frac{(\beta^2 + \rho^2)}{\beta^2} \left[h + \frac{1}{\rho} + \frac{1}{\eta} \right]. \quad (6.100)$$

Аналогичные соотношения можно получить и для ТМ-волны. Для этого в интеграл (6.93) следует подставить формулы (6.46)-(6.48), выразив в них коэффициенты B_{TM} и D_{TM} через A_{TM} , и используя дисперсионное уравнение для ТМ-волн:

$$\beta h = \operatorname{arctg} \frac{\bar{\rho}}{\beta} + \operatorname{arctg} \frac{\bar{\eta}}{\beta} + (m-1)\pi.$$

Здесь использованы обозначения: $\bar{\rho} = \frac{n_2^2}{n_1^2} \rho$, $\bar{\eta} = \frac{n_2^2}{n_3^2} \eta$, которые

позволяют привести форму записи дисперсионного уравнения ТМ-волн к форме записи для ТЕ-волн. В результате интегрирования и последующих алгебраических преобразований получим следующие соотношения для парциальных мощностей, переносимых ТМ-волной по различным областям волновода:

$$P_B^{(1)} = A^2 \frac{\gamma W_0}{4} \frac{1}{n_1^2 \rho}, \quad (6.101)$$

$$P_B^{(2)} = A^2 \frac{\gamma W_0}{4} \frac{\beta^2 + \bar{\rho}^2}{\beta^2} \left[h + \frac{\bar{\rho}}{\beta^2 + \bar{\rho}^2} + \frac{\bar{\eta}}{\beta^2 + \bar{\eta}^2} \right], \quad (6.102)$$

$$P_B^{(3)} = A^2 \frac{\gamma W_0}{4} \frac{\beta^2 + \bar{\rho}^2}{\beta^2 + \bar{\eta}^2} \frac{1}{n_3^2 \eta}. \quad (6.103)$$

Суммируя (6.101)-(6.103), получим выражение, определяющее полную мощность, переносимую по волноводу ТМ-волной:

$$P_{B(TM)}^\Sigma = A^2 \frac{\gamma W_0}{4} \frac{\beta^2 + \bar{\rho}^2}{\beta^2} \left[\frac{h}{n_2^2} + \frac{\beta^2 + \bar{\rho}^2}{\beta^2 + \bar{\rho}^2} \frac{1}{n_1^2 \rho} + \frac{\beta^2 + \bar{\eta}^2}{\beta^2 + \bar{\eta}^2} \frac{1}{n_3^2 \eta} \right]. \quad (6.104)$$

Заметим, что параметры β , ρ , η для ТМ-волн имеют значения, отличные от соответствующих параметров для ТЕ-волн, соответствующие индексы здесь опущены для сокращения записи. Здесь $A = A_{TM}$ - напряженность магнитного поля $H_X^{(1,2)}$ на границе областей 1 и 2.

Полученные соотношения (6.100) и (6.104) связывают мощность, переносимую по волноводу P_B^Σ , с амплитудой электрического A_{TE} или магнитного A_{TM} поля на границе раздела первой и второй областей волновода. Все же остальные параметры, входящие в формулы (6.100) и (6.104), определяются параметрами волновода. Таким образом, если известна, т.е. задана или экспериментально измерена, передаваемая по волноводу мощность, то можно легко рассчитать амплитуду поля на границе между областями 1 и 2. Обозначим ее в этом расчете как $A_{1,2}$. Тогда по величине $A_{1,2}$ легко найти напряженность поля в любой другой точке волновода и, в частности, максимальную напряженность поля A_{\max} в волноводе. Максимум распределения поля расположен внутри слоя 2 и сдвинут относительно границы областей 1 и 2 (см. рис. 21 пунктирная кривая) на величину

$$y_0 = -\frac{\Phi}{\beta}, \text{ где } \Phi = \text{arctg} \frac{\rho}{\beta}. \quad (6.105)$$

Поскольку распределение поля в слое 2 описывается функцией $A = A_{\max} \cos(\beta y + \Phi)$, то положив $y = 0$, можно записать

$$A_{\max} = \frac{A_{1,2}}{\cos \Phi}, \quad (6.106)$$

с другой стороны

$$A_{\max}^2 = \frac{A_{1,2}^2}{\cos^2 \Phi} = A_{1,2}^2 (1 + \text{tg}^2 \Phi) = A_{1,2}^2 \left(1 + \frac{\rho^2}{\beta^2} \right). \quad (6.107)$$

Перепишем (4.12) с учетом (4.19)

$$P_B^{\Sigma} = A_{\max}^2 \frac{\gamma}{4W_0} \left(h + \frac{1}{\rho} + \frac{1}{\eta} \right) = A_{\max}^2 \frac{\gamma}{4W_0} h_{\text{эфф}}. \quad (6.108)$$

Здесь

$$h_{\text{эфф}} = h + \frac{1}{\rho} + \frac{1}{\eta} \quad (6.109)$$

так называемая эффективная толщина волновода.

Поясним физический смысл введенного параметра $h_{\text{эфф}}$. В формуле (6.108) величина $A_{\max}^2 \frac{\gamma}{4W_0}$ имеет смысл плотности потока мощности, переносимой волной с напряженностью поля, равной A_{\max} . Согласно (6.108), полная мощность, переносимая по волноводу шириной в 1 ед. длины, равна произведению этой величины на площадь, равную $h_{\text{эфф}} \times 1$ ед. длины. Следовательно, величину $h_{\text{эфф}}$ можно истолковать как некоторую эффективную эквивалентную толщину слоя с показателем преломления, равным $n_{\text{экс}} = \gamma$, который переносил бы ту же мощность, что и трехслойный волновод при условии, что распределение амплитуд было бы равномерно по всему слою, а напряженность поля равна максимальной напряженности, существующей в волноводе. Интересно отметить, что

толщина $h_{эфф}$ для ТЕ-волн численно равна сумме толщины слоя 2 и эффективных глубин $\left(\frac{1}{\rho}\right)$ и $\left(\frac{1}{\eta}\right)$ проникновения поля в области 1 и 3, которые обрамляют центральный слой волновода.

В случае ТМ-волн формула, определяющая эффективную толщину волновода, имеет, как это видно из (6.104), несколько более сложный вид:

$$h_{эфф}^{(TM)} = \frac{h}{n_2^2} + \frac{\beta^2 + \rho^2}{\beta^2 + \bar{\rho}^2} \frac{1}{n_1^2 \rho} + \frac{\beta^2 + \eta^2}{\beta^2 + \bar{\eta}^2} \frac{1}{n_3^2 \eta}. \quad (6.110)$$

Рассмотрим, как изменяется эффективная толщина волновода при изменении толщины центрального слоя (рис. 22). При приближении толщины центрального слоя к критической толщине эффективная толщина неограниченно возрастает, что связано с резким увеличением глубины проникновения поля в подложку. При увеличении толщины слоя наблюдается резко выраженный минимум эффективной толщины волноводного слоя, а затем ее возрастание вместе с реальной толщиной центрального волноводного слоя. При этом эффективная толщина волноводного слоя будет всегда несколько больше, чем физическая, реальная толщина слоя 2, за счет проникновения экспоненциально убывающих полей в области 1 и 3. Область минимума кривой $h_{эфф}$ соответствует максимуму плотности мощности волны в волноводе. Таким образом, если требуется достичь наибольшей плотности мощности волны в волноводе, толщину центрального слоя следует выбрать так, чтобы попасть в область минимума $h_{эфф}$. Подобные требования могут предъявляться, например, в том случае, когда волновод используется для реализации нелинейных оптических эффектов, требующих высоких плотностей мощности излучения.

Пример. Рассчитаем наибольшую плотность мощности поля в волноводе из пленки Ta_2O_5 на стекле при переносе волной TE_1 мощности $P_\Sigma = 1$ Вт и ширине светового пучка в волноводе $d = 0,1$ см.

Наибольшая напряженность при заданной полной мощности будет достигаться при минимальной эквивалентной толщине волновода, т.е. когда толщина пленки $h = 0,12$ мкм, а $h_{эфф} = 0,3$ мкм. Отсюда максимальная плотность мощности будет равна

$$P_{\max} = \frac{P_\Sigma}{h_{эфф} d} = \frac{1 \text{ Вт}}{0,3 \cdot 10^{-4} \text{ см} \cdot 0,1 \text{ см}} = 3,3 \cdot 10^5 \text{ Вт} / \text{см}^2,$$

а напряженность поля

$$E_{\max} = A_{\max} = \sqrt{\frac{P_{\max} 4W_0}{\gamma}} = \sqrt{\frac{3,3 \cdot 10^5 \cdot 4 \cdot 120 \cdot \pi}{1,75}} = 1,68 \cdot 10^4 \text{ в} / \text{см}.$$

Здесь $W_0 = 120\pi$, а величину $\gamma = f(h)$ находим из ранее рассчитанных дисперсионных зависимостей (см. лекцию 3).

Из приведенного примера видно, что плотность мощности и напряженность поля могут быть весьма значительными даже при сравнительно небольшой мощности источников излучения.

Представляет интерес проанализировать, как изменяются парциальные мощности и эффективная толщина волновода при изменении толщины волноводного слоя. На рис 23 приведены графики зависимостей парциальных мощностей, переносимых в областях 1, 2, 3 от толщины волноводного слоя. Для расчета взяты два типа волноводов: один с большой, а другой с малой разницей показателей преломления волноводного слоя и подложки. В области толщин волноводного слоя, близких к критической толщине, большая часть мощности переносится по подложке, и лишь небольшая доля переносится по центральному слою волновода (слою 2) и по воздуху. Этот факт хорошо согласуется с картиной распределения поля в волноводе при режимах, близких к

критическому. Распределение поля в этих режимах сильно вытянуто в подложку за счет того, что величина $\eta = k_0 \sqrt{\gamma^2 - n_3^2}$ мала и стремится к нулю при приближении толщины волновода к критической.

При увеличении толщины волноводного слоя доля мощности, переносимой по подложке, быстро уменьшается, а доля мощности, переносимой по центральному слою, монотонно увеличивается и становится преобладающей, когда толщина волноводного слоя примерно в 2 раза превышает критическую толщину.

Доля мощности, переносимой по воздуху (область 1), вначале возрастает при увеличении толщины слоя 2, достигает максимума, расположенного в области, где доли P_1 и P_2 равны, и затем медленно убывает. В волноводах с большой разницей показателей преломления n_2 и n_3 доля мощности, переносимой по воздуху, может быть довольно большой. Так, в волноводе из пленки Ta_2O_5 на стекле она достигает 17,9% от полной мощности P_Σ (см. рис. 23а). В волноводах с малой разницей показателей преломления эта доля незначительна. Так, в волноводе из полистирола на стекле наибольшая ее величина достигает всего лишь 0,48% от полной мощности P_Σ (см. рис. 23б).

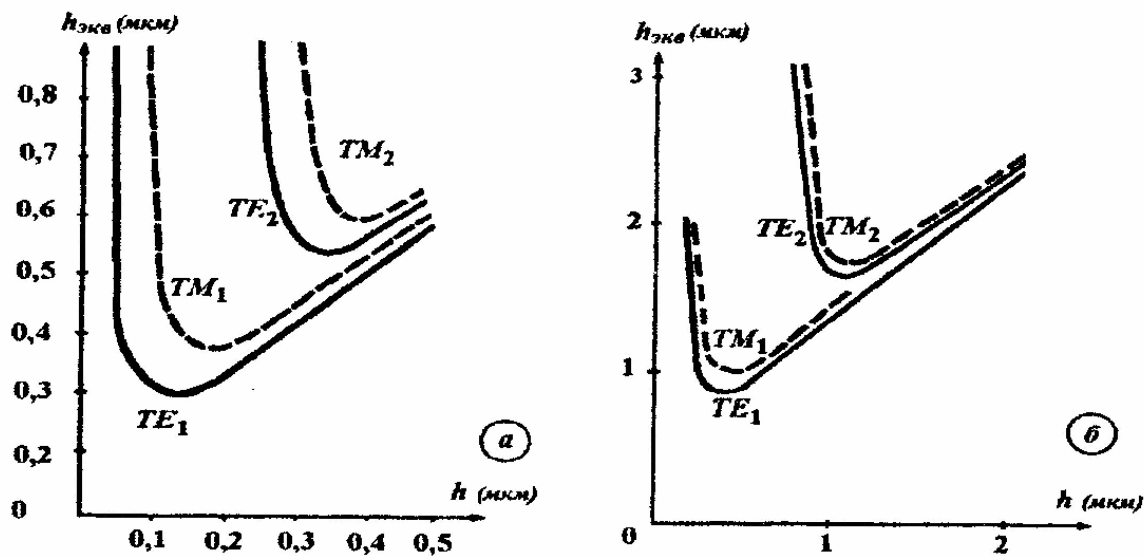


Рис. 22. Зависимость $h_{эфф}$ от толщины волноводного слоя.

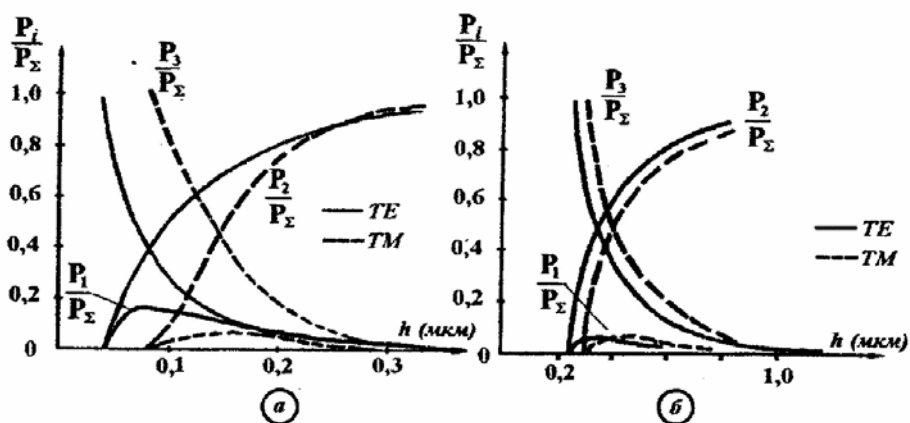


Рис. 23. Зависимость относительных парциальных мощностей, переносимых по различным слоям волновода, от толщины волноводного слоя.

На рис. 22 и 23 рассмотрены два случая. В случае *a* рассматривается Ta_2O_5 на стекле, в случае *б* - пленка полистирола на стекле.

Литература

1. Самарский А.А. Математическое моделирование и вычислительный эксперимент //Вестник АН СССР,- 1979,- №5.- С. 38-49.
2. Самарский А.А. Современная прикладная математика и вычислительный эксперимент //Коммунист, 1983,- №18.- С.31-42.
3. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Математическое моделирование и вычислительный эксперимент, ИММ РАН, 2000.
<http://www.imamod.ru/~vab/matmod/MatMod.htm>
4. Вабищевич П.Н.. Численное моделирование.- М., МГУ, 1993
5. Севастьянов Л.А., Ловецкий К.П., Бикеев О.Н., Горобец А.П. Методы и алгоритмы решения задач в моделях оптических покрытий. - М.: Изд. РУДН (в печати)
6. Ловецкий К.П., Севастьянов Л.А., Бикеев О.Н., Горобец А.П. Математическое моделирование и методы расчета оптических наноструктур. - М.: Изд. РУДН (в печати)
7. Southwell W.H. Inhomogeneous optical waveguide lens analysis. //JOSA, 1977, v.67, No.8, p. 1004-1009.
8. Southwell W.H. Index profiles for generalized Luneburg lenses and their use in planar optical waveguides//JOSA, 1977, v.67, No.8, p. 1010-1014.
9. Севастьянов Л.А. Математическая модель экранируемого напыления: вычислительный эксперимент, использующий результаты натуральных экспериментов// Докт. дис. - М.: Изд. УДН, 1999, 259 с.
10. Груба В.Д., Пискарев Ю.В., Половинкин А.Н., Севастьянов Л.А. Квазиволновые уравнения и адиабатические инварианты для адиабатически волноводных мод в плавных неоднородностях

плоских многослойных диэлектрических структур// Вестник РУДН, серия Физика, 2000, Т. 8(1). С. 102-109.

11. Груба В.Д., Пискарев Ю.В., Половинкин А.Н., Равин А.Р., Севастьянов Л.А. Асимптотический метод решения волноводных уравнений для собственных мод в плавных неоднородностях плоских многослойных диэлектрических волноводных структурах// Вестник РУДН, серия Физика, 2000, Т. 8(1). С.110-113.
12. Yao S.K., Anderson D.B. Shadow sputtered diffraction-limited waveguide Luneburg lenses.// Appl.Phys.Lett., 1978, v.33, №4, p.307-309.
13. Yao S.K. Theoretical model of thin-film deposition profile with shadow effect.// J.Fppl.Phys., 1979, v.50, №5, p.3390-3395.
14. Yao S.K., Anderson D.B., August R.R., Youmans B.R., Oania C.M. Guided-wave optical thin-film Luneburg lenses: fabrication technique and properties.// Appl.Optics, 1979, v.18, №24, p.4067-4079.
15. Hatakoshi G., Inoue H., Naito K., Umegaki S., Tanaka S. Optical waveguide lenses.// Optica acta, 1979, v.28, №8, p.961-968.
16. Anderson W.J., Hansen W.N.. Optical characterization of thin films. // JOSA, 1977, v.67, №8, p.1051-1058.
17. Garratt J.D. A new stylus instrument with a wide dynamic range for use in surface metrology. // Precision Engineering, 1982, v.4, No 3, p. 145-151.
18. Williames T.L. A scanning gange for measuring the form of spherical and aspherical surfaces.// Optica acta, 1978, v.25, №12, p. 1156-1166.
19. Пуряев Д.Т. Методы контроля оптических асферических поверхностей. - М.: Машиностроение, 1976, 262 с.
20. Микулч А.В. Математическое моделирование неразрушающей

- диагностики тонкопленочных волноводных линз// Канд. дис. - М.: Изд. УДН, 1988, 136 с.
21. *Doric S., Munro E.* General solution of the nonfull-aperture Luneburg lens problem. //JOSA, 1983, v. 73, №8, p. 1083-1086.
22. *Sochacki J., Gomez-Reino C.* Nonfull-aperture Luneburg lenses: a novel solution//Appl. Opt., 1985, v.24, p. 1371-1373.
23. *Morgan S.P.* General solution of the Luneburg problem. //J. Appl. Phys., 1958, v.29, No.9, p. 1358-1368.
24. *Маркузе Д.* Оптические волноводы. - М.: Мир, 1974, 567 с.
25. *Гончаренко А.М., Редько В.П.* Введение в интегральную оптику. - Минск: Наука и техника, 1975, 152 с.
26. Введение в интегральную оптику/ Под ред. М. Барноски. - М.: Мир, 1977, 368 с.
27. Интегральная оптика/ Под ред. Т.Тамира. - М.: Мир, 1978, 344 с.
28. *Адамс М.* Введение в теорию оптических волноводов. М.: Мир, 1984, 512 с.
29. *Снайдер А., Лав Дж.* Теория оптических волноводов. - М.: Радио и связь, 1987, 656 с.
30. *Zernike F.* Luneburg lens for optical wave guide use. //Opt.Comm., 1974, v.12, №4, p. 379-381.
31. *McGraw R.B., Zernike F.* //76-th ann. meet. Amer. Ceramic Soc, Chicago Illinois.
32. *Goell J.E.* //Appl. Opt., 1973, v.12,p.737.
33. *Кулагин С.В.* и др. Оптико-механические приборы. - М.: Машиностроение, 1984, 352 с.

34. *Коломийцев Ю.В.* Интерферометры. Основы инженерной теории, применение. –Л., 1976, 296 с.
35. *Westwood W.D.* Calculation of deposition rates in diode sputtering system. // *J. Vac. Sci. Technol.*, 1978, v.15, №1, p.1-9.
36. *Тихонов А.Н., Арсенин В.Я.* Методы решения некорректных задач - М.: Наука, 1979.
37. *Жидков Е.П., Курьшин В.В., Микулич А.В.* Восстановление параметров планарной линзы по следам лучей // *Вычислительная физика и математическое моделирование: Тез. докл. Волгоград, 12-18 сент. 1988 г.* - М.: Изд-во УДН, 1989. С. 32-33.
38. *Курьшин В.В., Микулич А.В., Швачка А.Б.* Восстановление эффективного показателя преломления круговой волноводной линзы. - Дубна: ОИЯИ, 1986, 14 с. (Сообщ. Объед. ин-та ядерн. исслед.; P5-86-665).
39. *Luneburg R.K.* The Mathematical Theory of Optics. - Berkely: Univ. Of California Press, 1964.
40. *Микаэлян А.Л.* Об одном способе решения обратной задач геометрической оптики // *ДАН*, 1952, т. 86, №5, С. 933-936.
41. *Беляков Г.В.* Исследование математической модели восстановления эффективного показателя преломления плавно нерегулярного тонкопленочного волновода по результатам лучевого зондирования. // *Канд. дис.* - М.: Изд. РУДН, 1992, 86 с.
42. *Беляков Г.В., Микулич А.В., Севастьянов Л.А.* Трассировка лучей в обобщенной линзе Лунеберга с неполной апертурой. // *Проблемы теоретической физики.* - М.: Изд-во УДН, 1990, с. 63-70.
43. *Беляков Г.В., Ланеев Е.Б., Микулич А.В.* Численные решения задачи восстановления распределения коэффициента замедления планарной

линзы по данным лучевого теста. //Математическое моделирование систем. - М.: Изд-во УДН, 1990.- С. 52-59.

44. *Калиткин Н.Н.* Численные методы. - М.: Наука, 1978.

45. *Самарский А.А.* Введение в численные методы. - М.: Наука, 1987.

46. *Бахвалов Н.С., Жидков К.П., Кобельков Г.М.* Численные методы: Уч. пособие для вузов. - М.: Наука, 1987.

47. *Морозов В.А.* Регулярные методы решения некорректно поставленных задач. - М.: Наука, 1987, 240 с.

48. *Севастьянов Л.А.* Об экранировании корпускулярных потоков // Изв. вузов. Физика, 1983, №7, с.126-127.

49. *Курьшкин В.В., Севастьянов Л.А., Швачка А.Б.* О математической модели экранирования корпускулярных потоков. Препринт ОИЯИ, P11-84-102, Дубна, ОИЯИ, 1984, 8 с.

50. *Курьшкин В.В., Севастьянов Л.А., Швачка А.Б.* Алгоритмизация математической модели корпускулярного экранирования. Препринт ОИЯИ, P11-84-866, Дубна, ОИЯИ, 1984, 8 с.

51. *Курьшкин В.В., Севастьянов Л.А.* Каноническое уравнение процесса напыления // Численные методы в задачах математической физики. – М.: Изд. УДН, 1985, с.14-18.

52. *Аникин В.И., Курьшкин В.В., Микулич А.В., Севастьянов Л.А., Швачка А.Б., Шokol С.В.* Расчет экранирующей маски для напыления линзы Люнеберга // Тезисы докладов Межвузовской конференции «Вычислительная физика и математическое моделирование» (Волгоград, сентябрь 1988). – М.: Изд. УДН, 1989, с. 8-12.

53. *Севастьянов Л.А.* Решение задачи экранируемого напыления //

Теоретическая физика. - М.: Изд. РУДН, 1992, с 221-224.

54. *Севастьянов Л.А.* Устойчивые методы решения обратных задач в рамках математической модели экранируемого вакуумного напыления // Вестник РУДН. Прикладная математика и информатика, 1997, №1, с. 111-116.
55. *Севастьянов Л.А.* Математическая модель эффектов экранирования невзаимодействующих корпускулярных потоков // Математическое моделирование, 1998, т. 10, №4, с. 3-12.
56. *Севастьянов Л.А.* Математическая модель экранируемого напыления // Математическое моделирование, 1998, т. 10, №4, с. 13-22.
57. *Жидков Е.П., Севастьянов Л.А.* Свойства интегральных операторов математической модели экранируемого напыления // Математическое моделирование, 1998, т. 10, №9, с. 35-40.
58. *Жидков Е.П., Севастьянов Л.А.* Макропараметры эффективного распределения и функции источника в математической модели экранируемого напыления // Математическое моделирование, 1998, т.10, №9, с. 35-40.
59. *Sevastianov L.A.* The probability scheme of constructing the mathematical model of shadowed spattering. // Comp. Phys. Comm., 2000, V.130, № 1-2, p.41-46.
60. *Sevastianov L.A., Zhidkov E.P.* Analysis of problems in mathematical model for shadowed sputtering. // Comp. Phys. Comm., 2000, V.130, № 1-2, p.47-53.
61. *Ловецкий К.П.* Об одном методе выбора параметра регуляризации. // Численные методы решения задач математической физики и теории систем. - М.: УДН, 1978, с. 34.
62. *Ловецкий К.П.* Регуляризованные методы решения некорректных

задач, основанные на строгой выпуклости тихоновского функционала и точках равновесия по Нэш. // Канд. дис. - М.: Изд. УДН, 1982, 132 с.

63. Бенсусан А., Лионс Ж.-Л., Темам Р. Методы декомпозиции, децентрализации, координации и их приложения. // Методы вычислительной математики.- Новосибирск: Наука, 1975, с. 232.
64. Уилкинсон Дж.Х. Алгебраическая проблема собственных значений. - М.: Наука, 1970.
65. Химмельблау Х. Нелинейное программирование. - М.: Мир, 1969.
66. Численные методы условной минимизации. /Под ред. Ф. Гилла и У. Мюррея.- М.: Мир, 1977.
67. Дерюгин Л.Н., Марчук А.Н., Сотин В.Е. Свойства плоских несимметричных диэлектрических волноводов на подложке из диэлектрика //Изв. ВУЗов СССР – радиоэлектроника. – 1967. том X. №2. С. 134
68. Дерюгин Л.Н. Интегральная оптика. – М.: - «Машиностроение», 1978.
69. Тейлор Г.Ф., Ярив А. Волноводная оптика. // ТИИЭР, 1974, Т. 62, №8. — С. 4.
70. Золотов Е.М., Киселев В.А., Сычугов В.А. Оптические явления в тонкопленочных волноводах //Успехи физических наук, 1974, Т.112, вып. 2. — С. 231.
71. Гончаренко А.М., Дерюгин Л.Н., Прохоров А.М., Шипуло Г.П. О развитии интегральной оптики в СССР //Ж. прикладной спектроскопии, 1978, Т.29, вып 2. — С. 987.
72. Дерюгин Л.Н. Возможности, ограничения и проблемы развития

планарной волноводной оптики. (Обзор) //Изв ВУЗов СССР – радиоэлектроника, 1982, Т. 25, №2. —С. 4.

73. *Гончаренко А.М., Редько В.П.* Введение в интегральную оптику. — Минск: Наука и техника, 1975.

74. *Барноски М.* Введение в интегральную оптику. — М.: Мир, 1977.

75. Интегральная оптика / Под ред. Тамира/. — М.: Мир, 1978.

76. *Хаспенджер Р.* Интегральная оптика. Теория и технология. — М.: Мир, 1985.

77. *Маркузе Д.* Оптические волноводы. — М.: Мир, 1974.

78. *Дерюгин Л.Н., Комоцкий В.А.* Оптические волноводы. — М.: РУДН, 1981.

79. *Никольский В.В.* Электродинамика и распространение радиоволн. — М.: Наука, 1978.

ОПИСАНИЕ КУРСА И ПРОГРАММА

Цели и задачи магистерской программы «Алгоритмы вычислительного эксперимента для проектирования оптических наноструктур»

Целью учебно-методического комплекса магистерской программы «Оптика наноструктур» является формирование у студентов четкого представления об основных принципах функционирования современных дифракционных оптических элементов и устройств, тонкопленочных многослойных покрытий; о законах взаимодействия электромагнитного излучения видимого диапазона с материалом. Целью является также изучение способов и возможностей математического синтеза и компьютерного проектирования дифракционных оптических покрытий. Полученные знания закрепляются в оптической лаборатории и дисплейном классе на примерах изучения конкретных дифракционных оптических элементов и многослойных покрытий со сложной геометрией.

Задачей учебно-методического комплекса магистерской программы «Оптика наноструктур» является обучение студентов навыкам самостоятельного анализа технических заданий на проектирование дифракционных оптических элементов и устройств. Они должны научиться выбирать из имеющихся в наличии алгоритмов и программ математического синтеза или разрабатывать их самостоятельно. В результате обучения обретут навыки ориентации в научной и бизнес информации с целью выбора нужной функции или нужного инструмента для реализации известной функции в области проектирования и создания дифракционных оптических наноструктур.

Цели и задача курса «Алгоритмы вычислительного эксперимента для проектирования оптических наноструктур»

Курс «Алгоритмы вычислительного эксперимента для проектирования оптических наноструктур» является составной частью магистерской программы «Оптика наноструктур». Магистерская программа «Оптика наноструктур» реализуется в рамках направления «Прикладная математика и информатика» и направления «Прикладная математика и физика», а возможно и других направлений. В составе магистерской программы «Оптика наноструктур» курс «Алгоритмы вычислительного эксперимента для проектирования оптических наноструктур» является обязательным, привязанным к семестру. Для других магистерских программ этот курс может быть курсом по выбору без привязки к семестру или факультативным на усмотрение методической комиссии программы. Курс носит теоретический и практический характер.

Целью курса является обучение студентов основным приемам математического моделирования и основным принципам реализации вычислительного эксперимента с использованием методов численного решения математических задач, возникающих при изучении взаимодействия электромагнитного излучения в области светового диапазона с веществом, в особенности с наноструктурами. Эта технологическая область особенно быстро развивается в последние годы в связи с широким применением наноэлементов и тонких пленок в производстве жидкокристаллических дисплеев, солнечных батарей на основе диэлектриков, фотоэмиссионных диодов, просветляющих покрытий, поляризаторов, миниатюрных лазеров, управляемых оптических элементов.

Задачи проектирования оптических наноструктур практически не поддаются аналитическому решению, а технология вычислительного

эксперимента хорошо зарекомендовала себя при проектировании сложных технических устройств в различных областях применения. Поэтому основной задачей курса «Алгоритмы вычислительного эксперимента для проектирования оптических наноструктур» является не только освоение теоретического материала, но и приобретение навыков проектирования дифракционных оптических покрытий методом вычислительного эксперимента. В результате обучения они получают умение и навыки правильно оценить сложность научно-исследовательских и конструкторских заданий на разработку дифракционных оптических элементов и устройств, аргументированно выбрать метод решения конструкторской задачи, а затем экономично и эффективно выполнить компьютерный дизайн требуемого дифракционного оптического элемента или устройства.

Трудоемкость курса составляет 3 кредита; 2 часа лекций и 2 часа лабораторных занятий в дисплейном классе в неделю.

Курс является инновационным по содержанию и по литературе, он включает в себя последние научные достижения в области решения задач дифракционной оптики, когда характерные размеры исследуемых объектов не превышают либо сравнимы с длиной волны оптического излучения. Эта область знаний интенсивно развивалась в последнее время, но лишь недавно были созданы устойчивые алгоритмы и разработаны численные методы решения задач для многослойных решеток. Следует отметить, что для оптических однослойных и многослойных решеток с характерными размерами больше длины волны оптического излучения устойчивые методы решения известны с середины прошлого века. Сейчас алгоритмы решения оптических задач в субволновой области распространяются на объекты со сложной геометрией, такие как

двумерные решетки с произвольным профилем, трехмерные решетки (фотонные кристаллы) и на анизотропные материалы. Они востребованы, поскольку позволяют создавать математические модели взаимодействия излучения с веществом в наномасштабах, а затем с их помощью проектировать новые эффективные устройства в высокотехнологичных областях медицины, энергетики, инфокоммуникаций и приборостроения.

В ходе проведения занятий по этому курсу разработчики предполагают использование традиционных методик преподавания, принятой в странах болонской системы образования, то есть с использованием кредитной системы оценки знаний.

Наряду с традиционными элементами преподавания математических методов решения прикладных задач разработчики курса предполагают воспользоваться хорошо зарекомендовавшим себя опытом МФТИ и подобных вузов. А именно, в рамках подпрограммы «Оптика наноструктур» осуществляется закупка уникального аналитического оборудования для измерения разнообразных характеристик оптических наноструктур с целью использования этого оборудования в учебном процессе и для проведения научно-исследовательских работ преподавателями, аспирантами и студентами.

По окончании магистратуры по направлению «Оптика наноструктур» выпускники Российского университета дружбы народов станут конкурентно-способными специалистами в области проектирования современных оптических устройств, которые не будут испытывать затруднений при последующем трудоустройстве.

В настоящее время бурно развивается новая методология научных исследований - математическое моделирование и вычислительный эксперимент. Сущность этой методологии состоит в замене исходного объекта его математической моделью и исследовании современными

вычислительными средствами математических моделей. Методология математического моделирования охватывает все новые сферы - от разработки больших технических систем и управления ими до анализа сложнейших экономических и социальных процессов.

Особенно важно применение вычислительного эксперимента при проектировании нанообъектов, поскольку часто только с помощью вычислительных методов и численного моделирования процессов можно представить, как взаимодействует электромагнитное излучение с нанообъектами.

Широкое применение математического моделирования и вычислительного эксперимента позволяет поднять общий уровень теоретических исследований, дает возможность проводить их в более тесной связи с экспериментальными исследованиями. Математическое моделирование может рассматриваться как новый метод познания, конструирования, проектирования, который сочетает в себе многие достоинства как теории, так и эксперимента. Работа не с самим объектом (явлением, процессом), а с его моделью дает возможность безболезненно, относительно быстро и часто без существенных затрат исследовать его свойства и поведение в любых мыслимых ситуациях (преимущества теории). В то же время вычислительные (компьютерные, имитационные) эксперименты с моделями объектов позволяют, опираясь на мощь современных вычислительных методов и технических инструментов, подробно и глубоко изучать объекты в достаточной полноте, недоступной чисто теоретическим подходам (преимущества эксперимента).

Разрабатываемое в рамках инновационной программы «Оптика наноструктур» учебное пособие по методам вычислительного эксперимента поможет слушателям курса и студентам освоить новые прогрессивные методики проведения научно исследовательских и опытно-

конструкторских работ с использованием самого современного оборудования. Вместе с тем необходимо, конечно же, использовать учебники и монографии, вышедшие в свет к настоящему времени, особенно работы Самарского и др., которые являются фактическими создателями этого нового направления в науке и технологии.

В список дополнительной и рекомендуемой литературы включены все научно-исследовательские публикации, положенные в основу предлагаемого курса.

В качестве практических заданий, курсовых работ и тем рефератов слушателям магистерской программы будут предложены актуальные проблемы и задачи, решение которых востребовано современным уровнем развития высокотехнологичных отраслей промышленности и научно-исследовательских лабораторий.

Структура курса (с указанием количества часов аудиторных/самостоятельной работы на темы)

Технологический цикл вычислительного эксперимента условно разбивается на этапы:

- выбор физического приближения (отбор учитываемых в модели эффектов) изучаемого явления или процесса;
- выбор (или построение) математической модели соответствующего физического приближения;
- выбор (или разработка) численных алгоритмов, продиктованных физическими свойствами изучаемого явления (процесса);
- реализация алгоритмы в виде программы приближенных вычислений на компьютере;

- проведение расчетов на компьютере, приближенно моделирующих характерные черты и особенности изучаемого явления (процесса);
- сравнение результатов численных экспериментов с результатами натуральных экспериментов (если последние осуществимы), интерпретация и анализ результатов расчетов, выработка вывода о состоятельности моделей (физической и математической) и достоверности результатов вычислений на компьютере, о необходимости продолжения (и развития) вычислительного эксперимента или его завершения.

Темы лекций

Тема 1. Введение – Общее представление о новой методологии научных исследований и проектирования (оптических наноструктур) – математическом моделировании и вычислительном эксперименте. (Линейные и нелинейные задачи, геометрия решеток - ДООЭ, LED, солнечные батареи.) Основа математического моделирования – триада: модель, алгоритм, программа. Междисциплинарный характер природы вычислительного эксперимента. Современная компьютерная техника – основной инструмент реализации вычислительного эксперимента (2 пары).

Тема 2. Синтез оптических систем в виде многослойных покрытий с заданными энергетическими коэффициентами пропускания и отражения в видимом диапазоне длин волн. Физическая модель задачи синтеза. Математическая модель задачи синтеза - задача условной минимизации в ограниченной области конечномерного пространства. Градиентный метод с ограничениями типа равенств и неравенств. Алгоритм минимизации. Реализация вычислительного эксперимента. (3 пары).

Тема 3. Конструктивный анализ необходимых условий оптимальности в волновых задачах синтеза неоднородных структур.

Качественные закономерности структуры оптимальных конструкций:

- Верхние оценки для числа различных материалов дискретного набора, которые могут входить в оптимальную конструкцию;
- Оценки оптимального числа слоев конструкции;
- Система рекуррентных соотношений, позволяющих априори выделить материалы допустимого набора;
- Характер сочленения слоев с различными физическими свойствами в оптимальной конструкции;
- Условия, при выполнении которых в оптимальную конструкцию могут входить только два материала из допустимого набора;
- Свойство внутренней симметрии во взаимосвязи параметров в оптимальных структурах.

(2 пары).

Тема 4. Решение методом вычислительного эксперимента сложной технологической задачи: на диэлектрическую пленку равномерной толщины нанести методом экранируемого вакуумного высокочастотного распыления через экранирующую маску тонкую диэлектрическую пленку заданного (в рамках некоторой математической модели) профиля толщины с целью изготовления тонкопленочной волноводной линзы Люнеберга. Напыленная пленка обеспечивает преобразование линейного волнового фронта (модель распространения света в волноводе является двумерной) монохроматического лазерного сигнала, распространяющегося вдоль волноводной пленки и пересекающего на своем пути волноводную линзу, по мере прохождения через территорию линзы в круговой, т.е. сходящийся без aberrаций в точку фокуса волновой фронт.

Математическая модель экранируемого напыления тонкой пленки сложного профиля описывается нелинейным интегральным уравнением первого рода

$$\int A(b, c) \cdot X(b + c, b) db = Y(c),$$

все три фактора которого подлежат уточняющемуся моделированию в процессе реализации вычислительного эксперимента по разработке технологии изготовления профиля пленок, обеспечивающего необходимые оптические свойства.

Задача проектирования (математического синтеза) тонкопленочной волноводной линзы Люнеберга, т.е. о вычислении профиля толщины волноводного слоя, обеспечивающего фокусирующие свойства линзы, может быть решена:

- в рамках модели геометрической оптики;
- в рамках модовой (волновой) модели распространения монохроматического света (электромагнитного сигнала в видимом диапазоне частот) в многослойном диэлектрическом волноводе.

В последнем случае математический синтез тонкопленочной волноводной линзы Люнеберга:

- методом дисперсионных соотношений для волноводных мод волноводов сравнения;
- методом дисперсионных соотношений для адиабатических мод плавнонерегулярного волноводного слоя.

Задача синтеза экранирующей маски может быть решена:

- В рамках модели однолиствого экранирования невзаимодействующих корпускулярных потоков;
- В рамках модели многолиствого экранирования невзаимодействующих корпускулярных потоков;
- В рамках модели экранирования трехмерной маской невзаимодействующих корпускулярных потоков;

- В рамках обобщенной модели экранирования взаимодействующих корпускулярных потоков трехмерной маской с адаптивной формой отверстия, в которой взаимодействие частиц между собой и с поверхностями маски и подложки включено в изменение формы отверстия маски;

Задача моделирования процесса измерения профиля толщины напыленного слоя (его волноводных фокусирующих свойств) и интерпретация результатов измерений в рамках используемой модели может быть реализована следующими способами:

- Профилометрический способ измерения геометрической толщины слоя;
- Профилоинтерферометрический способ измерения оптической толщины слоя;
- Метод лучевого зондирования фокусирующих свойств волноводного слоя;
- Метод интерференции адиабатических мод, распространяющихся вдоль волноводного слоя.

Вычислительный эксперимент реализует последовательное усложнение моделей всех трех факторов с соблюдением согласования точности используемых данных. Результатом проведения вычислительного эксперимента является синтезированная экранирующая маска, которая на конкретной напылительной установке, работающей в конкретном режиме, обеспечивает стабильное изготовление тонкопленочных волноводных линз Люнеберга для спектрального анализатора. (5 пар)

Тема 5. Вычислительный эксперимент как последовательное улучшение алгоритмов и численных методов решения задачи о взаимодействии электромагнитного излучения с диэлектрическими

многослойными решетками. В качестве математической модели явления выбран метод связанных волн в виде бесконечной системы линейных обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами. Все известные к настоящему времени алгоритмы оставляют конечное число уравнений в системе. Для расчета ТЕ-моды методы практически совпадают, поскольку эта задача относительно устойчива, а для ТМ-моды – первые алгоритмы были неустойчивы, затем происходило постепенное улучшение постановок задачи и алгоритмов численного решения. Предлагается реализация вычислительного эксперимента, включающая последовательную разработку и реализацию этих методов в едином комплексе. (4 пары)

Темы семинарских и практических занятий

Лабораторные работы (эксплуатация программного комплекса, созданного преподавательским коллективом).

1. Матрица Джонса 2×2 . Непоглощающее изотропное покрытие.
2. Матрица Джонса 4×4 . Матрица Мюллера. Непоглощающее изотропное покрытие.
3. Метод Берремана. Точный (в рамках применимости уравнений Максвелла) метод. Анизотропные и поглощающие покрытия.
4. Первая задача из УМК №7. Проектирование зеркала с 99% отражения заданной линейной поляризации в наиболее широком (в области видимого света) диапазоне (типа поляризационных очков) С помощью многослойной системы анизотропных слоев с заданными коэффициентами преломления (варианты: $n \div 0.01 - 0.5$). Подбор толщин и количества слоев. (В то же время это будет фильтром-поляризатором для волн перпендикулярной поляризации).

5. Математическая модель №1. Метод Джонса 2x2 (чем пренебрегаем в этой модели – упрощения). Описание задачи, методы решения, алгоритмы, программное сопровождение. Расчет многослойного зеркала; сравнение с экспериментом (или с точным решением по Берреману). Объяснение имеющихся отклонений от точного решения. Создание процедуры расчета пропускания и отражения света от многослойной структуры по методу Джонса 2x2. Отладка программы и проведение численных расчетов.
6. Математическая модель №2. Метод Джонса 4x4 (чем пренебрегаем в этой модели – упрощения). Описание задачи, методы решения, алгоритмы, программное сопровождение. Расчет многослойного зеркала; сравнение с экспериментом (или с точным решением по Берреману). Объяснение имеющихся отклонений от точного решения.
7. Математическая модель №3. Метод Берремана (чем пренебрегаем в этой модели – упрощения). Описание задачи, методы решения, алгоритмы, программное сопровождение. Расчет многослойного зеркала; сравнение с экспериментом. Объяснение имеющихся отклонений от экспериментальных данных – неточность измерений, неровность поверхности образца.

Темы коллоквиумов и контрольных работ

Коллоквиумы и контроль знаний проводится на основании выполненных в дисплейном классе работ.

Описание системы контроля знаний:

Общие правила выполнения контрольных заданий;

Требования к оформлению работы

Постановка задачи.

1. Краткая формулировка задачи.
2. Развернутая постановка задачи с указанием основных режимов работы и их сценариев.

Алгоритм решения.

1. Математическое описание алгоритма.
2. Структура алгоритма ядра программы (укрупненная блок-схема).

Тестирование.

1. Описание основных режимов тестирования алгоритма и программы и результатов работы программы.
2. Список возможных ошибок и аномалий, описание реакции программы на них.

Заключение.

Содержит общие комментарии и замечания исполнителя о выполненной работе.

Приложение.

Приложение должно содержать текст программы (полная распечатка или распечатка алгоритма ядра программы).

Работа должна быть представлена в виде распечатанного текста и на дискете (Word + Delphi и/или C++).

Рекомендации к составлению отчета

Оформление.

отчет по работе должен быть оформлен в форме Word-файла.

Содержание отчета.

Каждый пункт задания вычислительного эксперимента должен найти свое отражение в отчете.

Каждый раздел отчета должен содержать:

формулировку цели эксперимента

описание исходных данных - приближаемая функция, интервал и порядок приближения, метод приближения и т.п.

результаты эксперимента, представленные в форме таблиц, гистограмм и графиков

иллюстрационный материал в виде копий экрана с графиками зависимостей погрешности приближения, вида приближаемой функции и т.п.

выводы, следующие из результатов эксперимента в контексте его цели.

Шкала оценок, итоговые оценки (методика выставления)

Бально-рейтинговая методика оценки уровня знаний по обязательной дисциплине «Алгоритмы вычислительного эксперимента для проектирования оптических наноструктур», привязанной к семестру

Порядок начисления баллов за семестр.

Контрольная работа № 1: 0 – 40 баллов

Теоретические вопросы: 0 – 10 баллов

Практические задания: 0 – 30 баллов

Контрольная работа № 2: 0 – 40 баллов

Теоретические вопросы: 0 – 10 баллов

Практические задания: 0 – 30 баллов

Контрольная работа № 3: 0 – 20 баллов

Теоретические вопросы: 0 – 20 баллов

Шкала бально-рейтинговой системы.

Баллы за семестр	Автоматическая оценка		Баллы за итоговый контроль знаний	Общая сумма баллов	Итоговая оценка
	Итоговая оценка	Дополнительные баллы			
78 – 80	зачет	по 5 баллов за каждый свыше 76**	0 – 20*	86 – 100	зачет
41 – 77	Нет	Нет	0 – 20	51 – 97	зачет
			0 – 20	41 – 50	незачет
< 41	незачет	Нет	Нет	Нет	незачет

* студент имеет право не проходить итоговый контроль знаний.

** дополнительные баллы начисляются автоматически:

за 86 баллов, набранных в семестре, начисляется дополнительно 6 баллов (общая сумма баллов – 92);

за 87 баллов – 12 баллов (99);

за 88 баллов – 18 баллов (106);

за 89 баллов – 24 балла (113);

за 90 баллов – 30 баллов (120).

Академическая этика, соблюдение авторских прав.

Все имеющиеся в тексте сноски тщательно выверены и снабжены «адресами». Авторы не включали в свою работу выдержки из работ других авторов без указания на это, не пересказывали чужих работ близко к

тексту без отсылки к ним. Авторы также не использовали чужих идей без указания первоисточников. Это касается и источников, найденных в интернете. В необходимых случаях указан полный адрес сайта.

Программа курса УМК:

Аннотированное содержание курса.

Первый модуль трудоемкостью в 1 кредит составляют:

- теоретический материал, излагаемый в первых трех темах,
- практическими занятиями в дисплейном классе в течение 14 академических часов,
- самостоятельные занятия над рефератами и курсовыми работами.

В конце этого модуля проводится промежуточный контроль знаний.

Второй модуль трудоемкостью в 1 кредит составляют:

- теоретический материал, излагаемый в четвертой теме,
- практическими занятиями в дисплейном классе в течение 10 академических часов,
- самостоятельные занятия над рефератами и курсовыми работами.

В конце этого модуля проводится промежуточный контроль знаний.

Третий модуль трудоемкостью в 1 кредит составляют:

- теоретический материал, излагаемый в пятой теме,
- практическими занятиями в дисплейном классе в течение 8 академических часов,
- самостоятельные занятия над рефератами и курсовыми работами.

В конце этого модуля проводится итоговый контроль знаний.

Список обязательной и дополнительной литературы с указанием соответствия разделов источника (постранично) разделам читаемого курса

Список обязательной литературы.

1. Алгоритмы вычислительного эксперимента для проектирования оптических наноструктур/ Под ред. Л.А. Севастьянова: Учебное пособие. - М.: Изд-во РУДН (готовится к печати).
2. Самарский А.А. Математическое моделирование и вычислительный эксперимент // Вестник АН СССР, 1979, № 5, с. 38-49.
3. Самарский А.А. Вычислительный эксперимент в задачах технологии // Вестник АН СССР, 1984, № 11, с. 17-29.
4. П.Н.Вабищевич. Численное моделирование. М.: Изд. МГУ, 1993. 152 с.
5. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование, идеи и методы. М.: Физматлит, 2003.
6. Гласко В.Б., Тихонов А.Н, Тихонравов А.В. – О синтезе многослойных покрытий. // ЖВМиМФ, 1974, том 14, с. 135-143.
7. Е.Л. Гусев. Априорное сужение области поиска в волновых задачах синтеза неоднородных структур. Математическое моделирование, т.12, №4, 2000г. с.117-127.
8. Севастьянов Л.А. Математическая модель экранируемого напыления: вычислительный эксперимент, использующий результаты натуральных экспериментов. Дисс. ... Докт. Физ.-мат. Наук, 1999, ОИЯИ, Дубна.

9. Ловецкий К.П., Жуков А.А. Методы расчета рефракционных индексов тонких кристаллических пленок. // Вестник РУДН, сер. Прикладная и компьютерная математика, 2005, т.4, с. 56-66.

Список дополнительной литературы и источников в интернете.

10. Методы компьютерной оптики/Под ред. В.А. Сойфера: Учеб. для вузов. — 2-е изд., испр. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. - 688 с.
11. M. Neviere, E. Popov. Light Propagation in Periodic Media: Differential Theory and Design Marcel Dekker Inc, 2002, 432 p. M.
12. В.Н. Бакулин, Е.Л. Гусев, В.Г. Марков. Методы оптимального проектирования конструкций из композиционных и традиционных материалов. Математическое моделирование, т.12, №5, 2000г. с.28-32.
13. Е.Л. Гусев. Качественные закономерности структуры оптимальных композиционных конструкций при волновых воздействиях. // Математическое моделирование, т.12, №7, 2000г. с.7-10. См. ссылки.
14. Севастьянов Л.А. Математическая модель эффектов экранирования невзаимодействующих корпускулярных потоков // Математическое моделирование, 1998, т.10, № 4, с. 3-12.
15. Севастьянов Л.А. Математическая модель экранируемого напыления // Математическое моделирование, 1998, т.10, № 4, с. 13-22.
16. Жидков Е.П., Севастьянов Л.А. Свойства интегральных операторов математической модели экранируемого напыления // Математическое моделирование, 1998, т.10, № 9, с. 35-40.

17. Жидков Е.П., Севастьянов Л.А. Макропараметры эффективного распределения и функции источника в математической модели экранируемого напыления // Математическое моделирование, 1998, т.10, № 10, с. 3-7.
18. Sevastianov L.A. The probability scheme of constructing the mathematical model of shadowed spattering.// Comp. Phys. Comm., 2000, V.130, № 1-2, P.41-46.
19. Sevastianov L.A., Zhidkov E.P. Analysis of problems in mathematical model for shadowed sputtering.// Comp. Phys. Comm., 2000, V.130, № 1-2, P.47-53.
20. Севастьянов Л.А. и др. Квазиволновые уравнения и адиабатические инварианты для адиабатически волноводных мод в плавных неоднородностях плоских многослойных диэлектрических структур.// Вестник РУДН, серия Физика, 2000, Т. 8(1), С. 102-109.
21. Севастьянов Л.А. и др. Асимптотический метод решения волноводных уравнений для собственных мод в плавных неоднородностях плоских многослойных диэлектрических волноводных структурах.// Вестник РУДН, серия Физика, 2000, Т. 8(1), С.110-113.
22. Moharam, M. G., E. B. Grann, D. A. Pommet, and T. K. Gaylord, "Formulation for stable and efficient implementation of rigorous coupled-wave analysis of binary gratings," J. Opt. Soc. Am. A, Vol. 12, No. 5, 1068-1076, 1995.
23. Moharam, M. G., D. A. Pommet, E. B. Grann, and T. K. Gaylord, "Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings: enhanced transmittance matrix approach," J. Opt. Soc. Am. A, Vol. 12, No. 5, 1077-1086, 1995.

- 24.L. Li, "Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures," J. Opt. Soc. Am. A 13, 1870-1876 (1996)
- 25.P. Lalanne, "Improved formulation of the coupled-wave method for two-dimensional gratings," J. Opt. Soc. Am. A 14, 1592-1598 (1997)
- 26.P. Lalanne and G. M. Morris, "Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM polarization," J. Opt. Soc. Am. A 13, 779- (1996)
- 27.C. Sauvan, G. Lecamp, P. Lalanne, and J. Hugonin, "Modal-reflectivity enhancement by geometry tuning in Photonic Crystal microcavities," Opt. Express 13, 245-255 (2005)

Темы рефератов, курсовых работ, эссе

Темы рефератов.

- Математические модели Саутвелловского типа дисперсионных соотношений для волноводных мод сравнения плавнонерегулярных волноводов.
- Метод Крылова-Боголюбова решения осцилляторных задач с плавным изменением параметров задачи.
- Адиабатическая модель собственных мод плавнонерегулярных волноводов.

Темы курсовых работ

Курсовые работы повторяют перечисленные темы занятий.

1. Создание программы (с графическим интерфейсом) расчета пропускания и отражения света от многослойной структуры по методу Джонса 2x2. Отладка программы и проведение численных расчетов. Описание задачи, методы решения, алгоритмы, программное сопровождение. Расчет многослойного зеркала; сравнение с экспериментом (или с точным решением по

- Берреману). Объяснение имеющихся отклонений от точного решения.
2. Создание программы (с графическим интерфейсом) расчета пропускания и отражения света от многослойной структуры по методу Джонса 4x4. Отладка программы и проведение численных расчетов. Описание задачи, методы решения, алгоритмы, программное сопровождение. Расчет многослойного зеркала; сравнение с экспериментом (или с точным решением по Берреману). Объяснение имеющихся отклонений от точного решения.
 3. Создание программы (с графическим интерфейсом) расчета пропускания и отражения света от многослойной структуры по методу Берремана. Отладка программы и проведение численных расчетов. Описание задачи, методы решения, алгоритмы, программное сопровождение. Расчет многослойного зеркала; сравнение с экспериментом. Объяснение имеющихся отклонений от точного решения.
 4. Моделирование дисперсионных соотношений для адиабатических собственных мод плавнонерегулярных волноводов.
 5. Моделирование адиабатических собственных мод плавнонерегулярных волноводов.
 6. Моделирование системы резистивно связанных нелинейных осцилляторов.
 7. Моделирование системы индуктивно связанных нелинейных осцилляторов.

Учебный тематический план курса УМК (календарный план,
структурированный по видам учебных занятий)

Календарный план (20 недель) учебных занятий по обязательной дисциплине «Алгоритмы вычислительного эксперимента для проектирования оптических наноструктур», привязанный к третьему семестру магистратуры.

Виды и содержание учебных занятий				
Неделя	Лекции	Число часов	Лабораторные занятия	Число часов
1	Общее представление о математическом моделировании и вычислительном эксперименте по проектированию оптических наноструктур.	2	Проведение 1-ой лабораторной работы.	2
2	Основные этапы реализации вычислительного эксперимента.	2	Сдача отчета по 1-ой лабораторной работе.	2
3	Синтез оптических систем в виде многослойных покрытий с заданными энергетическими коэффициентами пропускания и отражения в видимом диапазоне длин волн. Физическая модель задачи синтеза.	2	Проведение 2-ой лабораторной работы.	2

4	Математическая модель задачи синтеза - задача условной минимизации в ограниченной области конечномерного пространства. Градиентный метод с ограничениями типа равенств и неравенств.	2	Сдача отчета по 2-ой лабораторной работе.	2
5	Алгоритм минимизации. Реализация вычислительного эксперимента.	2	Проведение 3-ей лабораторной работы.	2
6	Конструктивный анализ необходимых условий оптимальности в волновых задачах синтеза неоднородных структур. Система рекуррентных соотношений, позволяющих априори выделить материалы допустимого набора.	2	Сдача отчета по 3-ой лабораторной работе.	2
7	Качественные закономерности структуры оптимальных конструкций: верхние оценки для числа различных материалов дискретного набора, которые могут входить в оптимальную конструкцию; оценки оптимального числа слоев конструкции; Условия, при выполнении которых в оптимальную конструкцию могут входить только два	2	Анализ результатов лабораторных работ в рамках концепции вычислительного эксперимента.	2

	материала из допустимого набора.			
8	Промежуточный контроль знаний (Контрольная работа №1)			2
9	Синтез тонкопленочной волноводной линзы Люнеберга методом Саутвелла.	2	Постановка задачи проектирования многослойных зеркал с заданными оптическими характеристиками.	2
10	Синтез тонкопленочной волноводной линзы Люнеберга методом адиабатических дисперсионных соотношений.	2	Создание процедуры расчета пропускания и отражения света от многослойной структуры по методу Джонса 2x2.	2
11	Математические модели методов измерения геометрической и оптической толщин слоя, коэффициента замедления адиабатической волноводной моды.	2	Отладка процедуры расчета пропускания и отражения света от многослойной структуры по методу Джонса 2x2 и проведение численных расчетов.	2
12	Математические модели экранируемого напыления.	2	Создание процедуры расчета пропускания и отражения света от многослойной структуры по методу Джонса 4x4.	2
13	Реализация вычислительного эксперимента по проектированию экранирующей маски для напыления ТВЛЛ.	2	Отладка процедуры расчета пропускания и отражения света от многослойной структуры по методу Джонса 4x4 и проведение численных расчетов.	2
14	Промежуточный контроль знаний (Контрольная работа №2)			2
15	Математическая модель – метод связанных волн в виде бесконечной системы линейных обыкновенных	2	Создание процедуры расчета пропускания и отражения света от многослойной структуры по методу Берремана.	2

	дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами. Алгоритм Досколовича.			
16	Алгоритм Ф. Лаланна, Л. Ли. Решения бесконечной системы линейных обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами	2	Отладка процедуры расчета пропускания и отражения света от многослойной структуры по методу Берремана и проведение численных расчетов.	2
17	Подход М. Мохарама к решению бесконечной системы линейных обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами	2	Реализация вычислительного эксперимента на основе разработанных алгоритмов и программ.	2
18	Реализация вычислительного алгоритма	2	Отладка процедуры вычислительного эксперимента на основе разработанных алгоритмов и программ.	2
19	Заключительный обзор курса. Консультации по подготовке к итоговому контролю знаний.	2	Анализ алгоритмических особенностей реализации вычислительного эксперимента.	2
20	Итоговый контроль знаний			2