

一种新的膜系设计方法——Needle 法*

周 健 林永昌

(北京理工大学光电工程系, 北京 100081)

摘 要 Needle 法是一种先进的膜系设计方法, 它克服了传统优化方法容易陷入局部极值的缺点。通过在膜系中插入薄层, 使得评价函数降低, 优化设计可以从任意给定的一层膜开始。文中给出了其数学模型及详细的推导。

关键词 优化设计, 评价函数。

1 引 言

目前, 膜系的优化设计是一个难点。困难在于以膜系结构为参数的膜系的评价函数是一个非常复杂的多峰值函数。通常当膜层层数超过 6~ 8 层时, 膜系评价函数的峰值急剧增多, 使传统的优化方法(如梯度法、鲍威尔法、复合形法、蒙特卡洛法等)都容易陷入到局部极值中去, 从而无法得到一个满意的结果。例如: 梯度法以评价函数对膜系各参数的导数的平方和的大小作为判敛标准, 它将陷入较接近于初始结构的一个局部极值处, 寻优过程将无法继续。事实上, 在膜系的寻优过程中, 并不一定要找到全局极小值, 找到一个满足设计要求的局部极小值亦可。因此, 就需要一个连续的寻优过程。

本文讨论一种新的膜系设计方法——Needle 法。这种方法通过不断地插入薄层, 即增加变量的维数来形成一个连续的寻优过程。它并不是以寻找全局极小值为根本目的。它的基本思想是莫斯科大学的 Tikhonravov 于 1982 年提出的。1992 年产生了第一个 Needle 法的计算机代码。这是 Needle 法趋于成熟的标志。

2 原 理

Needle 法的特点是对任意给定的膜系计算其 P 函数(Permissible Function), 算出最佳插入位置, 然后在这一位置插入一极薄的膜层, 插入以后将导致评价函数的大幅度降低。持续这一过程, 可使膜层层数不断增多, 从而获得评价函数不断降低的膜系结构, 而最终得到满意的结果。这时膜系的层数可能较多, 且含有较多的薄层。但可通过调用别的优化方法(如共轭斜量法), 使评价函数进一步降低。再加入关于膜层厚度的约束条件, 合并掉那些较薄的膜层。

* 国家自然科学基金资助课题。

收稿日期: 1996 年 8 月 6 日; 收到修改稿日期: 1997 年 3 月 13 日

下面, 讨论在膜系的任意位置, 插入一薄层后对评价函数的影响。为简化讨论, 先研究正入射无吸收膜系的情况。假定膜层折射率分布是分段连续的, 则膜系的反射系数和反射率为:

$$r(\lambda) = [n_a - A(z_a, \lambda)] / [n_a + A(z_a, \lambda)] \tag{1}$$

$$R(\lambda) = |r(\lambda)|^2 = r(\lambda)r^*(\lambda) \tag{2}$$

式中, n_a 为出射介质的折射率, z_a 为膜系总的几何厚度, A 为膜系的等效导纳, 可由下面的微分方程获得

$$dA/dz = i(2\pi/\lambda) [n^2(z) - A^2(z, \lambda)] \tag{3}$$

其边界条件为 $A(0, \lambda) = n_0$ (4)

n_0 为基片的折射率。采用具有普遍意义的评价函数的表示形式

$$F[n(z)] = \sum_{l=1}^L v_l \{R[n(z), \lambda] - R'(\lambda)\}^2 \tag{5}$$

$R'(\lambda)$ 是各波点处的理想反射率。可以看出评价函数的值仅由 $n(z)$ 函数决定。

在插入膜层以前, 膜系的导纳用 A 表示, 折射率分布用 $n(z)$ 表示。插入膜层以后, 膜系的导纳用 A' 表示, 折射率分布用 $n'(z)$ 表示。如图 1 所示。

图 1 中, z 为膜系的几何坐标, 原点为极邻近基片的位置。 z' 为任意指定的插入位置, Δz 为插入层的厚度, 插入后膜系的折射率分布可以写为

$$n'(z) = \begin{cases} n(z) & z \notin [z', z' + \Delta z] \\ n' & z \in [z', z' + \Delta z] \end{cases}$$

Fig. 1 The refractive index function curve

由(3)式可知

$$dA'/dz = i2\pi/\lambda [n'^2(z) - A'^2(z, \lambda)] \tag{6}$$

其边界条件为

$$A'(0, \lambda) = n_0 \tag{7}$$

在 $[0, z']$ 区间上, $n(z)$ 和 $n'(z)$ 具有相同的分布, 因此(3)式和(6)式有相同的解, 即 $A = A'$ 。在 $[z', z' + \Delta z]$ 区间上, $A(z, \lambda)$ 和 $A'(z, \lambda)$ 的增量分别为 ΔA 和 $\Delta A'$, 由于 Δz 极小, 因此, 可忽略 Δz 的高次项的影响, 只考虑 Δz 的一次项。

$$\delta A = \Delta A' - \Delta A = i2\pi/\lambda [n'^2 - n^2(z')] \Delta z \tag{8}$$

(8)式中 δA 就是(6)式与(3)式的解在 $z' + \Delta z$ 处的差值。如图 1 所示。在 $[z' + \Delta z, z_a]$ 上 $n(z)$ 和 $n'(z)$ 是相同的, 但是(3)式和(6)式的解将不再一样, 因为它们在起始点 $z' + \Delta z$ 处具有不同的初始值。将(3)式和(6)式的解的差记为

$$\delta A(z, \lambda) = A'(z, \lambda) - A(z, \lambda)$$

函数 $\delta A(z, \lambda)$ 的值是一个很小的量, 因为引入的是极薄层。对上式两边求导并将(3)式和(6)式代入, 并忽略 $\delta A(z, \lambda)$ 的二次项, 得

$$\frac{d(\delta A)}{dz} = i \frac{2\pi}{\lambda} [A^2(z, \lambda) - A'^2(z, \lambda)] \approx - i \frac{4\pi}{\lambda} A(z, \lambda) \delta A(z, \lambda) \tag{9}$$

这是一个关于 δA 的线性微分方程。边界条件为(8)式(在 $z' + \Delta z$ 处)。将边界条件设在 $z' + \Delta z$ 处显然不如设在 z' 处方便。(9)式的解与 Δz 具有相同的阶, 初始条件(8)式也同样如此。

因此忽略 Δz 的高次项，初始条件可以写为：

$$\delta A(z', \lambda) = i2\pi/\lambda [n^2 - n^2(z')] \Delta z \tag{10}$$

(9) 式, (10) 式的重要意义在于：在膜系的任意位置 z' 处插入极薄层后，可以求出膜系等效导纳的变化。(9) 式的解也可以用显函数的形式表示出来，即 $A(z, \lambda)$ 的积分形式。然而，根据后面讨论可以看出，并不需要这种形式。

当极薄层插入以后，膜系的等效导纳发生变化，因此反射率与评价函数的值随之而变化。将(1)、(2)式两边对 $A(z_0, \lambda)$ 求导得

$$\delta r(\lambda) = - \{ [1 + r(\lambda)]^2 / 2n_a \} \delta A(z_0, \lambda) \tag{11}$$

$$\delta R(\lambda) = 2 \operatorname{Re}\{r^*(\lambda) \delta r(\lambda)\} = - (1/n_0) \operatorname{Re}\{r^*(\lambda) [1 + r(\lambda)]^2 \delta A(z_a, \lambda)\} \tag{12}$$

对(5)式求导，并将(12)式代入得

$$\begin{aligned} \delta F &= 2 \sum_{l=1}^L v_l [R(\lambda) - R'(\lambda)] \delta R(\lambda) \\ &= - \frac{2}{n_a} \sum_{l=1}^L v_l [R(\lambda) - R'(\lambda)] \operatorname{Re}\{r^*(\lambda) [1 + r(\lambda)]^2 \delta A(z_a, \lambda)\} \end{aligned} \tag{13}$$

为了简化(13)式，现构造一个与 $A(z, \lambda)$ 函数具有共轭关系的函数 $\Psi(z, \lambda)$

$$d\Psi/dz = (i4\pi/\lambda) A(z, \lambda) \Psi(z, \lambda) \tag{14}$$

这是一个关于 Ψ 的线性微分方程。它和(9)式非常相似。(3)式的解是这个微分方程的系数。将(14)式的边界条件设在点 z_a 处。共有 L 个波点，所以共有 L 个边界条件。

$$\Psi(z_a, \lambda) = \frac{2}{n_a} \sum_{l=1}^L v_l [R(\lambda) - R'(\lambda)] r^*(\lambda) [1 + r(\lambda)]^2 \tag{15}$$

这样(13)式可以写为

$$\delta F = - \sum_{l=1}^L \operatorname{Re}\{\Psi(z_a, \lambda) \delta A(z_a, \lambda)\} \tag{16}$$

在 $[z', z_a]$ 区间讨论 $\Psi(z, \lambda) \delta A(z, \lambda)$ 的乘积。考虑到(9)式和(14)式得

$$d[\Psi(z, \lambda) \delta A(z, \lambda)]/dz = 0$$

这说明 $\Psi(z, \lambda) \delta A(z, \lambda)$ 的乘积是一个和 z 无关的量，因此有

$$\Psi(z_a, \lambda) \delta A(z_a, \lambda) = \Psi(z', \lambda) \delta A(z', \lambda),$$

z' 是任意插入点。将此式代入(16)式，并考虑到(10)式，得

$$\delta F = 2\pi \sum_{l=1}^L \frac{1}{\lambda} \operatorname{Im}\{\Psi(z', \lambda)\} [n^2 - n^2(z')] \Delta z \tag{17}$$

令
$$P(z) = 2\pi \sum_{l=1}^L \frac{1}{\lambda} \operatorname{Im}\{\Psi(z', \lambda)\} \tag{18}$$

所以
$$\delta F = P(z') [n^2 - n^2(z')] \Delta z \tag{19}$$

这是本文最终的结论。为了使评价函数得到最大的降低， δF 应是负值，且越小越好。由(19)式可以看出：当 $n^2 - n^2(z') > 0$ 时(即在低折射率膜层中插入高折射率的薄层)，应求得 $P(z)$ 的最小值，反之，应求得 $P(z)$ 的最大值。根据(18)式，运用一维搜索法(如黄金分割法)，可以在 $[0, z_a]$ 找到一点 z' ，使得 $P(z')$ 最大或最小。这一点就是最佳插入位置。根据上面所述，有了

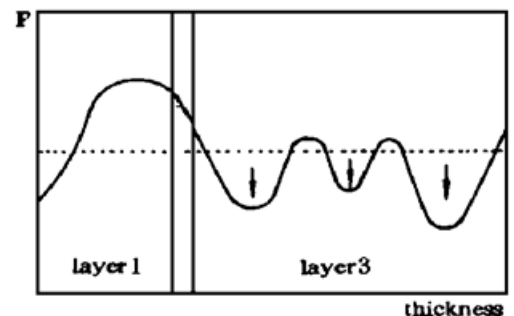


Fig. 2 The admittance function curve

(3)、(14)、(18) 三式，寻找这一点毫无困难。Needle 法的一种变形是同时寻找多个插入位置，然后在这些位置同时插入薄层。如图 2 所示，箭头所示为插入位置。

需要强调的是， Δz 并非越大越好，因为推导上述公式时作了近似，忽略了 Δz 的高次项，只考虑 Δz 的一次项。只有在 Δz 比较小的情况下，上述公式才成立。在可见光区 Δz 一般取 10 nm，在中远红外区， Δz 可以取得稍大。如果插入 Δz 的薄层以后，评价函数并未降低，则应该连续减小 Δz 的值，直至评价函数降低为止。

至此，已完成了 Needle 法的数学模型的建立。对于非垂直入射、含吸收的膜系，则上述推导过程稍作改动，即分别考虑 S 分量和 P 分量。这里不再赘述。

3 实际应用

本文作者根据上述模型，构造了计算机算法。并以此算法为核心编制了基于 Windows 环境的“光学薄膜 CAD 软件”。在软件的设计模块中提供了 4 种方法：Needle 法、共轭斜量法、复合形法和蒙特卡洛法。后三种方法在优化过程中变量的维数是确定的，Needle 法的变量维数是可变化的。从自动设计这一点来说，它具有极大的优越性。下面对优化设计的初始结构作一些讨论。是否可以不依赖于膜系设计理论进行膜系设计？可以说随着计算科学的发展，这一问题可能在今后的若干年内得以解决。对于某些类型的膜系设计来说，目前已可不依赖传统膜系设计理论，而仅用自动设计方法即可。现提出 3 种类型的初始结构：1) 几个较薄的膜层组成的初始结构(例如每层膜厚为 1/4 波长或更薄)；2) 一层或两层较厚膜层组成的初始结构(例如每层膜厚为几个波长)；3) 综合 1) 和 2)。

第一种初始结构对减反膜的设计极为有效。第二种初始结构对于用 Needle 法设计高反膜时较为有效。

下面给出 Needle 法的设计实例。图 3 是 400 nm~ 800 nm、0°入射、宽带减反射膜的设计；图 4 是 400 nm~ 800 nm、45°入射、 $R \cdot T = 1 \cdot 1$ 分光膜的设计；图 5 是 400 nm~ 800 nm、0°入射的短波滤光片的设计，要求 400 nm~ 600 nm 区间透过，600 nm~ 800 nm 区间截止。设计时初始结构为任意给定的一层或两层膜系结构。

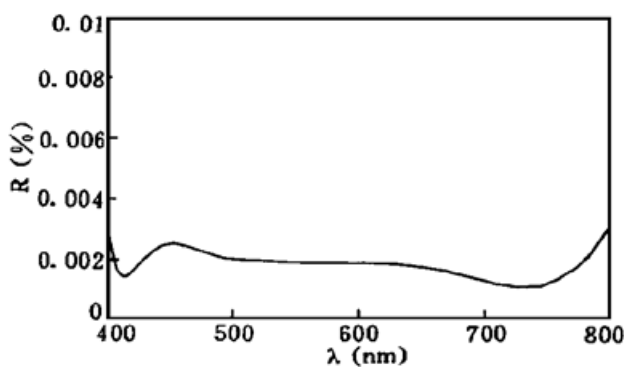


Fig. 3 Antireflective coating's curve with Needle method. Refractive indexes of glass, H and L correspond to 1.52, 2.35, 1.38 respectively. layer = 10, glass/0.130H 0.436L 0.424H 0.215L 1.201H 0.085L 0.131H 0.063L 0.369H 0.972L/air. centre wavelength: 600 nm

选用两种膜料 $n_H = 2.35$ 和 $n_L = 1.38$ 。上述设计在 Pentium-120 机上 7 分钟以内可以完成。如采用另三种方法，除非给出很好的初始结构，否则，优化结果无法达到图 3、4、5 的设计结果。根据作者对各种优化方法的研究及使用经验，在薄膜自动设计领域内，尚缺乏有力的全局寻优的手段。Needle 法的思想超越了传统优化方法，具有很好的前景。由于 Needle 法是以在当前膜系中插入薄层为基本手段，因此设计出的膜系有可能比目前已成熟的膜系结构要复杂。需要指出的是：方法的有效性是由算法构造的科学性与程序的高效性及健壮性保证的。限于篇幅，这里不讨论。

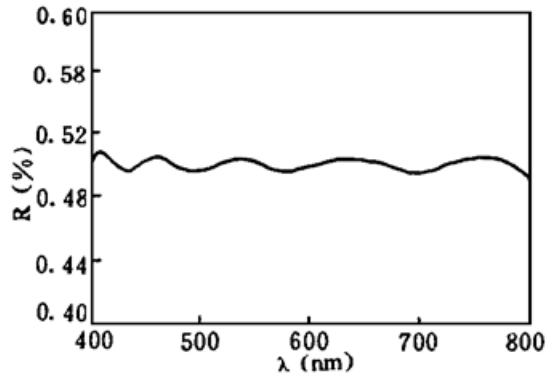


Fig. 4 The split beam mirror with Needle method.

Refractive indexes of glass, H and L correspond to 1.52, 2.35, 1.38 respectively. layer = 15. glass/0.109H 0.120L 0.116H 0.305L 0.417H 0.112L 2.039H 0.093L 2.526H 0.254L 0.738H 0.145L 1.351H 0.889L 1.076H/air. centre wavelength: 600 nm

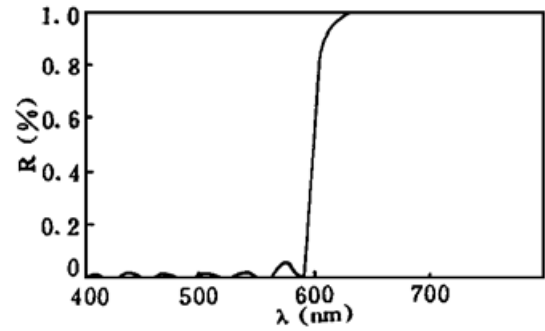


Fig. 5 The edge filter with Needle method. Refractive

indexes of glass, H and L correspond to 1.52, 2.35, 1.38 respectively. layer = 23. glass/0.345L 0.149H 0.122L 0.965H 1.079L 0.922H 1.060L 0.867H 1.074L 0.922H 1.060L 0.867H 1.074L 0.855H 1.054L 0.910H 0.982L 0.994H 0.925L 1.112H 0.741L 0.171H 0.166L 1.112H 0.250L 0.304H 0.780L/air. centre wavelength: 740 nm

参 考 文 献

- [1] A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov, Development of needle optimization technique and new features of optilayer design software. *Proc. SPIE*, 1994, **2252** : 63~ 66
- [2] A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov, Thin film coating design using second order optimization method. *Proc. Soc. Photo-Opt Instrum. Eng.*, 1992, (1782) : 156~ 164
- [3] B. T. Sullivan, J. A. Dobrowolski, Implementation of a numerical needle method for thin film design. *Optical Interference Coatings*, OSA Technical Digest Series. 1995, **7** : 72~ 74

A New Method of Coatings Design —— Needle Method

Zhou Jian Lin Yongchang

(Optical Engineering Department, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081)

(Received 6 August 1996; revised 13 March 1997)

Abstract The Needle method of coatings design method, overcomes the shortage of the conventional optimum methods which always meet too many local minimum. It makes the merit function decrease by insert new thin layer. Design can start with one layer chosen randomly. The mathematical model and explanations of this method are presented.

Key words optimum design. merit function.