

光学薄膜膜系设计方法及发展趋势*

刘梦夏, 强西林

(西安工业学院 仪器工程系, 陕西 西安 710032)

摘 要: 概述了当前光学薄膜膜系设计所采用的方法. 从所采用的方法来看, 膜系设计正从基于光学干涉原理的解析设计向基于数学最优化理论的优化设计方向发展, 从采用单一技术向采用混合技术方向发展.

关键词: 薄膜; 膜系设计; 优化设计

中图分类号: O484.41 文献标识码: A 文章编号: 1000-5714(2000)03-0194-06

Method and developing trend in optical thin film design

LIU Meng-xia, QIANG Xi-lin

(Dept of Instr Engr, Xi'an Inst of Tech, Xi'an 710032, China)

Abstract: Techniques and methods used in the current optical thin film design system are analyzed and summarized in this paper. The result shows that the method is developing from analytical design based on the interference effects theory to optimized design based on the optimization theory, and the technique from using single technique to using hybrid techniques.

Key Words: thin film; thin film design; optimization design

引 言

光学薄膜在光学、光谱学、激光、太阳能利用以及航天等技术领域的应用范围的不断扩大, 不仅对光学薄膜的光谱透射率、反射率提出了各种不同的要求, 而且对薄膜的光谱吸收、位相及偏振状态的变化也不断提出新的要求, 这些无疑都促使了薄膜设计理论的发展.

膜系设计最早使用的是试凑法、图解法, 以后又逐步发展了各种解析设计方法^[1]. 60 年代, 杨和西利把光学多层膜看成电路网络, 在膜系设计理论中引入网络设计理论, 到了 80 年代中期, 出现了计算速度很快的导纳矩阵法, 多层膜的计算问题由此变得相当简单. 至此, 薄膜光学中光学特性计算问题得以解决^[2]. 同时, 关于各种膜系优化设计方法纷纷涌现, 薄膜光学中

* 收稿日期: 1999-12-28

作者简介: 刘梦夏(1976-), 女(汉族), 西安工业学院硕士研究生.

的膜系设计问题也有望得以解决。

由于膜系设计中各个量之间的关系,难以用直观的公式表示,因此膜系设计向优化设计方向发展是十分必要的也是必然的。关于光学薄膜的优化设计问题,最早是由 P. Baumeister 在 1958 年作为一个优化问题提出的^[3]。当设计问题成为优化问题时,就能利用现代计算数学这一有利工具。然而,由于膜系设计的优化函数是一个极其复杂的多峰函数,它在优化函数中会存在大量的局部极小值。因此在许多情况中,优化问题中的数值解决是十分困难的。事实上,几乎所有的优化方法都会遇到收敛于局部极值这一情形,因此寻找全局极小值或是最优解或是次优解是一急待解决的问题。国内外许多研究者都在这方面进行了有益的探索,将多种优化方法应用于实际膜系设计,本文将目前广泛应用及很有发展潜力的一些算法作一介绍。

1 膜系优化设计基本原理及评价函数的构成

膜系优化设计的本质就是通过建立各类评价函数把薄膜最优设计归结为求评价函数的极值问题。我们知道,一个多层膜系光学性能的结构参数有:各层膜的几何厚度 d_1, d_2, \dots, d_k ; 入射介质,各层膜和基底的折射率 $n_0, n_1, n_2, \dots, n_k, n_{k+1}$; 多层膜系中包含的总的膜层数 N ; 光波入射角 θ_0 和波长 λ_j 等。

膜系的光学性能,如反射率 R ,则取决于这些膜层结构参数。通常, n_0, \dots, n_{k+1} 是给定的, θ_0 和波长 λ_j 亦是由光学系统事先给定的,因此膜系的反射率可通过调整 $n_i d_i (i = 1, 2, \dots, k)$ 来达到预先要求的理想值。

$$\text{令 } x_i = n_i d_i \quad (i = 1, 2, \dots, k) \quad (1)$$

$$\text{于是 } R = R(x_1, x_2, \dots, x_k) \quad (2)$$

$$\text{记 } X = (x_1, x_2, \dots, x_k)^T \quad (3)$$

则 X 就表示膜系的一种设计方案。光学多层膜的设计,就是根据在工作波段内所要求的理想分光特性 $\hat{R}(\lambda_j), j = 1, 2, \dots, L (L$ 为考虑的波长点数,通常取值 80),按照预先给定的精度 ϵ_j ,设计出结构参数

$$X^D = (x_1^D, x_2^D, \dots, x_k^D)^T \quad (4)$$

使之满足

$$|R(X^D, \lambda_j) - \hat{R}(\lambda_j)| < \epsilon_j \quad (5)$$

$$\lambda_a \leq \lambda_j \leq \lambda_b \quad (6)$$

式中, λ_a, λ_b 分别为起始波长和终止波长。我们称 X^D 为最优设计方案。

对于给定的理想分光特性 $\hat{R}(\lambda_j)$ 和初始结构参数 $X = (x_1, x_2, \dots, x_k)^T$,根据膜系设计理论和数学上的最优化设计方法,采用一定的设计手段让计算机自动修改结构参数,第一次求得 $X' = (x'_1, x'_2, \dots, x'_k)^T$,再计算 $R(X', \lambda_j)$,看它是否已达到所要求的分光特性,若不满足,再重复上述步骤,直到满足要求为止。

适当的评价函数,可以表示期望的响应特性和特定多层膜结构的响应特性之间的拟合程度。评价函数必须是多层膜系的结构参数的连续函数,下面介绍几种形式^[4]。

$$F = \left[\sum_{i=1}^L w_i |P_i - \hat{P}_i|^k \Delta \lambda_i \right]^{\frac{1}{k}} \quad (7)$$

式中, L 为考虑的波长点数, w_i 为权重因子, P_i 为在波长 λ_i 处膜系的计算性质, 而 \hat{P}_i 则是所要求的性质. 取 $k=1$ 且 $w_i=1$ 时, F 便是计算曲线与要求曲线之间所包围的面积, 简称面积型. 取 $k=2$ 时, 就是平方型, 此时 F 用最小平方偏差准则来评价膜系的质量, 其表达式为

$$F = \left[\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \left(\frac{|P_i - \hat{P}_i|}{\Delta_i} \right)^k \right]^{\frac{1}{k}} \quad (8)$$

式中, Δ_i 为容限. 当构成评价函数的各种性质 P_i 均在其各自预定的容限内时, 评价数值为 1, k 为整数, 可以取 $k=1, 2, 4, 16$. 对于不同的问题规定不同的 k 值是十分有用的. 高的 k 值得使得各种特性有同等的修正程度, 低的 k 值允许很少几种特性出现修正不良.

显然, 还可以将评价函数写成如下形式

$$F = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \left[\frac{|P_i - \hat{P}_i| - \Delta_i}{\Delta_i} \right]^2 \quad (9)$$

当某个性质进入容限 Δ_i 时, 对评价函数的贡献为零, 于是将只对没有进入容限那一部分进行新的校正. 这一形式的另一特点是可以使不同量纲的各种性质化为同一数量级, 共同参加评价. 在利用优化设计方法设计光学薄膜时, 确定哪些指标参与评价, 以何种方式构成评价函数, 是导致设计成败的关键步骤之一, 尤其是在某些特殊膜系的设计中更重要.

2 优化方法

2.1 单纯形法(DA法)

Nelder 和 Mead 于 1965 年提出非线性的单纯形法来进行极小化, 这种方法不需要计算评价函数的导数, 也不需要假定评价函数在我们关心的区间上连续可微, 另一个突出的优点, 就是使用者易于保证仅取正值的设计参数.

所谓单纯形, 是指 N 维空间 E^N 中具有 $(N+1)$ 个顶点的凸多面体. 例如, 一维空间中的线段, 二维空间中的三角形, 三维空间中的四面体等, 都是相应空间中的单纯形. DA 设计的基本思想就是: 对于给定的评价函数 $F(x)$, 选取 $x_j = x_0 + hI_j$ ($j=1, 2, \dots, k$), 其中 x_0 为初始膜系结构, h 为给定步长, I_j 为第 j 个单位坐标矢量. 计算并比较这 k 个点的评价函数值, 确定出最大、次最大和最小三个函数值点, 分别记为 F_H, F_G, F_L ; 这三个点构成一个初始单纯形. 然后通过向最低点收缩, 寻找新的 F_H, F_G, F_L 以构成一个新的单纯形, 如此反复, 按照 $|(F_H - F_L)/F_L| < \epsilon$ 的收敛准则进行判断 (ϵ 为人工给定的参数), 逐步逼近函数的极小点.

DA 应用于膜系设计, 方法比较简单, 容易采用程序实现. 然而, 数值比较表明, 它远不如其它一些也不要求计算评价函数导数的方法有效, 尤其是 Powell 法. DA 是下降速度很慢的一种直接下降算法, 在实际应用中, 设计一个简单的膜系也需要几小时.

2.2 Powell 算法(PA法)

PA 是 1964 年 M. J. D. Powell 首先提出的一种直接搜索法, 它也是一种不要求计算评价函数导数的方法, 这种方法在迭代过程中直接利用迭代值逐次生成共轭搜索方向进行迭代搜索, 故又称 Powell 共轭方向法或方向加速度法. 目前, PA 是直接算法中最有效的算法, 也是我国在膜系设计领域最早程序实现并得以广泛应用的一种优化方法.

早期 PA 的基本算法是:首先采用坐标轮换法顺次沿 N 个坐标方向 e^1, e^2, \dots, e^N , 进行一维搜索, 然后以始点 $x_1^{(0)}$ 和终点 $x_1^{(N)}$ 构成一个新的方向, 并沿此方向作一维搜索得极小点 $x_1^{(N+1)}$ 至此完成第一轮迭代. 进行第二轮迭代时, 取始点 $x_2^{(0)} = x_1^{(N+1)}$, 并去掉原方向组中的第一个方向 e^1 , 而将第一轮构成的新方向作为最末一个方向, 以此进行下去, 反复迭代, 按照评价函数的收敛准则进行判断, 逐步逼近满足精度要求的近似极小点.

早期算法还不能实际应用, 因为它存在一个明显的缺陷, 即可能在某一轮迭代中组成线性相关的搜索方向组, 导致随后的迭代在降维的空间中进行, 算法不能收敛到原问题的真正极小点. M. J. D. Powell 对上述基本算法进行了修正, 以保证每一轮的搜索方向组线性无关, 通常所说的 Powell 算法就是指其修正算法.

PA 要求必须有一个好的初始设计才能得到较满意的结果, 这也说明了 PA 并不能找到全局极小点. PA 还可以用来优化其它方法提供的设计结果. 在应用平方和评价函数进行设计时, 这种方法显得更为有效.

2.3 遗传算法(GA法)

GA 是建立在自然选择和自然遗传学机理基础上的迭代自适应概率性搜索算法, 广泛应用于解决各种优化问题. 传统的单点搜索算法, 对于多峰分布的搜索空间常常会陷于局部的某个单峰的优解, 而 GA 是并行地爬过多个峰, 即同时对搜索空间中的多个解进行评估. GA 的最大特点是在搜索过程中不易陷入局部极值, 此外 GA 易于和别的技术相结合, 形成性能更优的问题求解方法. GA 主要是通过遗传算子, 按一定概率, 对群体内的个体施加结构重组处理以不断搜索出群体内的优良个体, 逐渐逼近最优解. 根据 De. Jong^[5]的研究结果, 群体大小一般取值为 60~200, 重组概率为 0.6~0.8, 变异概率为 0.01~0.02. GA 的整个演化过程可描述如下^[6].

从任意初始集合开始, 称为群, 群中每一个个体都被定义为一串编码, 称为基因串; 每一次迭代过程称为一代进化. 在当前群中使用适应度准则来评价个体性能, 在 GA 应用于膜系设计时, 采用评价函数作为适应度准则; 一些个体被两两选出, 分别称为父个体和母个体(适应的个体被选择的概率较大), 被选出的父母个体放入匹配集中.

母个体被选出后, 由基因重组算子按重组百分比进行重组, 得到新的个体; 再由变异算子, 按变异百分比, 继续得到新的个体, 产生的新个体放入匹配集中. 在演化进程中经自然选择、基因重组、个体变异三过程后, 当前匹配集中已是新旧个体混杂.

为保证群中的个体数目为一固定值, 则在当前匹配集中再经选择产生下一代群. 选择的方法与演化过程开始时父母个体的选择方法相同. 通常的方法有三种: 竞争选择、任意选择和随机选择. 考虑到计算时间等多方面因素, 采用竞争选择和任意选择相混合的方法较好.

群的一代演化结束后, 若评价函数仍未满足要求, 则继续进行下一代的演化. 事实上, 性能高的个体更有可能被保留在群中, 其它的个体趋于消失. 通过基因重组, 可以从两个个体中选出至少一个性能更好的个体. 变异则防止了算法转换太快以致陷入评价函数的局部极值. 当然, 算法的实际行为更大地依赖于这些算子构造的好坏, 参数的选择对算法的有效性亦是至关重要的.

GA 应用于膜系设计时, 不需要初始设计, 其初始个体集合(群)是随机产生的. 搜索区间

定为 $2N$ 维, N 是膜系中总的膜层数, 个体 X 是 $2N$ 维的向量, $X = \{(d_1, n_1)(d_2, n_2), \dots, (d_N, n_N)\}$. d_i 代表膜层厚度, n_i 代表折射率. 为了获得可靠的解决方案, 在程序运行前, 必须给定膜层厚度的变化范围 $[d_{\min}, d_{\max}]$ 和折射率的变化范围 $[n_L, n_H]$.

GA 在理论上是可以找到全局极值的, 但要求群中的个体数目和更新换代的次数足够大, 这无疑使计算量很大. 对此可通过变换搜索域来改进算法, 以加快收敛速度, 还可以将 GA 作为一种并行算法, 以及和其他方法相结合的方法提高计算速度.

2.4 针形算法(NA法)

NA 是在原有的折射率分布中通过不断插入极薄的膜层, 从而引起折射率分布的微小变化——这一变化象针一样微小^[7].

与其它的优化算法不同, NA 是针对光学膜系的优化设计而提出的一种优化方法, 其基本思想是由莫斯科大学的 A. V. Tikhonravov 于 1982 年提出的, 程序实现在 1992 年完成. 该算法的突出优点是: 对任意初始设计, 评价函数下降迅速, 优化速度快; 不仅可以优化膜系的膜层厚度和折射率, 还可以优化整个膜系的层数. 它从单层膜开始优化, 降低了膜系设计的专业性和难度.

NA 优化算法的原理是对任意给定的膜系计算其 P 函数^[8], 算出最佳插入点, 然后在该点插入极薄的膜层, 使评价函数大幅度降低. 持续这一过程, 使膜系的层数不断增多, 膜系结构的评价函数不断降低, 直到最终得到满意的结果. 这时膜系的层数可能较多, 调用别的算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, 合并那些较薄的膜层.

NA 的主要优点: 初始设计的选择并不重要; 能处理各种各样吸收或非吸收的膜材料; 新膜层的插入方式既可以是串行插入也可以是并行插入; 膜层或基底是否散射, 对计算时间影响不大; NA 的基本分析公式及其应用独立于特定的分析目标. NA 的缺点是数学算法十分复杂, 即使是数值计算中很小的不准确或是基本分析公式应用的很小不一致, 都将严重影响 NA 的有效性.

一些研究者已对 NA 作了有益的改进. 如改进输入方法, 采用模糊输入即输入的理想光谱是区间而不是点; 对评价函数作一改造^[9], 使它可根据输入情况的不同作相应的变形; 应用隧行技术^[10], 摆脱设计过程中陷入局部极值的麻烦. NA 及其设计程序的卓越性能目前已经得到了光学薄膜界的公认.

2.5 综合比较

上述四种优化方法应用于膜系设计, 都能设计出多种光学薄膜, 如常见的增透膜、反射膜、滤光膜、分光膜等等, 可使用的膜材料包括金属材料 and 介质材料.

前两种方法属于精炼法^[11], 优化设计的结果强烈依赖于初始结构的提出, 因此良好的初始设计相当重要. 后两种方法属于综合法^[12], 优化设计从任意一种初始结构出发, 都能得到满意的设计结果.

膜系的光学特性不仅与各膜层的厚度和折射率有关, 还决定于膜系的层数. 但是前三种方法只能优化膜层厚度和折射率, 只有针形算法不仅可以优化膜层厚度和折射率还可以优化整个膜系的层数, 它会随着寻优过程的进行, 自动加减膜层层数. 目前遗传算法应用于膜系设计

还不能优化膜系的层数,但作者分析后认为,通过使用变长遗传模式来改进遗传算法,也能优化整个膜系的层数.

3 发展趋势

膜系设计是薄膜技术发展的基础环节之一,由于早期镀制工艺的限制,传统的膜系设计方法大多采用规整膜系设计,随着科学技术的发展,特别是一些先进的膜厚控制方法的出现,例如石英晶振膜厚控制方法、椭圆在线膜厚控制技术,使得镀制任意膜厚的膜层成为可能,这也为膜系优化设计的发展创造了必要条件(优化设计得出的膜层厚度是非常不规整的).传统的膜系设计,针对不同的光学薄膜需要不同的方法,而优化设计不仅简单易行,而且可应用于各种膜系设计.

由于需要设计的膜系日趋复杂,其初始结构很难提出,因此今后膜系优化设计方法的发展主流是可以从任意膜层开始设计,膜层厚度、折射率和总的膜层数共同参与优化.为了得到最好的设计,必将采用多种方法混合使用的技术,例如先采用一种方法来优化总的膜层数,再采用另一种方法优化每一层的膜层厚度.现在无论国内还是国外都提出这样一个思想,理想的膜系设计软件应该是:毫无经验的新手也能用它设计出令人满意的光学膜系,这一软件在设计完用户所要求的膜系后,能够自动控制镀膜机完成整个镀膜工艺过程,最后将实际镀制成的薄膜的各项光学特性进行测试并打印输出测试结果.

参考文献:

- [1] 林永昌,卢维强.光学薄膜原理[M].北京:国防工业出版社,1990
- [2] (英)HEATHER M LIDDEL 著.多层膜设计中的计算机辅助技术[M].唐晋发,顾培夫译.杭州:浙江大学出版社,1984
- [3] BAUMEISTER P. Design of multilayer filters by successive approximations[J]. J Opt Soc Am, 1958(48):955
- [4] 唐晋发,蒋百川,郑权.光学薄膜自动设计[J].浙江大学学报,1979(4):13
- [5] DE JONG K A. Analysis initial population size for binary coded genetic algorithms[A]. TGGG Rept 85001. Univ of Alabama. Tuscaloosa. 1985
- [6] MARTIN S, RIVORY J, SCHOENAUER M. Synthesis of optical multilayer systems using genetic algorithms[J]. Applied Optics, 1995, 34(13):2247
- [7] TIKHONRAVOV A V. Application of the needle optimization technique to the design of optical coatings[J]. Applied Optics, 1996, 35(28):5493
- [8] TIKHONRAVOV A V. On the optimality of thin film optical coating design[J]. SPIE, 1990(1270):28
- [9] 李芳,张诚,林永昌.膜系优化设计中的模糊输入及评价函数的改进[J].光学仪器,1999,21(4-5):5
- [10] 张诚,林永昌.膜系自动设计中的隧行方法[J].光子学报,1999,28(1):61
- [11] DOBROWOLSKI J A, KEMP R A. Refinement of optical multilayer systems with different optimization procedures[J]. Applied Optics, 1990, 29(19):2876
- [12] LI Li, DOBROWOLSKI J A. Computation speeds of different optical thin film synthesis methods[J]. Applied Optics, 1992, 31(19):3790