

УДК 519.6+517.958+535.4

## ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД ОПТИМИЗАЦИИ ДИФРАКЦИОННОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ ТОНКОСЛОЙНЫХ ПОКРЫТИЙ С ДИФРАКЦИОННЫМИ РЕШЁТКАМИ

© 2023 г. В. Ю. Мартынова, Ю. Г. Смирнов, А. В. Тихонравов

Предложен метод оптимизации дифракционной эффективности многослойных диэлектрических решёток в задаче спектрального сложения сигналов в широком диапазоне длин волн. С физической точки зрения ставится прямая задача дифракции электромагнитной волны на многослойных диэлектрических решётках, для решения которой применён модифицированный метод разделения переменных. Для оптимизации дифракционной эффективности использован градиентный метод с постоянным шагом, при этом градиент вычислен аналитически. Представлены численные результаты.

DOI: 10.31857/S0374064123030111, EDN: QVNXBM

**Введение.** Оптические покрытия и дифракционные решётки являются важнейшими элементами современных лазерных и оптоэлектронных приборов. В последние годы показано, что их конструктивное объединение открывает широкие возможности в развитии новых технологических направлений. В качестве примера можно привести высокоэнергетические системы лазерной накачки установки термоядерного синтеза в Lawrence Livermore National Laboratory в США [1]. Другим важнейшим приложением покрытий с дифракционными решётками является спектральное сложение лазерного излучения, при котором многие некогерентные лазерные лучи с различной длиной волны складываются в один луч [2]. Спектральное сложение представляет собой эффективный метод для достижения чрезвычайно высокой непрерывной мощности лазерного излучения.

С помощью современных технологий можно получать диэлектрические дифракционные решётки очень высокого качества средствами интерференционной литографии со сканирующим пучком [3]. Эта технология позволяет создавать дифракционные решётки со сложной структурой решётки в её периоде. Однако используемые на практике покрытия с дифракционными решётками имеют только один штрих в периоде решётки. Такие элементы обладают высокой дифракционной эффективностью, но относительно небольшой спектральной полосой [4]. Так, коммерчески доступные элементы для длины волны  $\sim 1$  мкм имеют спектральную ширину порядка 30–40 нм [5, 6].

Применяемые в настоящее время тонкослойные покрытия с дифракционными решётками проектируются с помощью расчётов заданных простейших конструкций на основе периодических диэлектрических зеркал с решётками в одном-двух верхних слоях покрытия, имеющими один штрих в периоде решётки. Расчёты дифракционной эффективности проводятся с использованием коммерческого программного обеспечения (см., например, [7, 8]), в котором реализован какой-то из возможных методов решения прямой задачи о распространении волн в регулярной решётке (например, разложение по плоским волнам в [7]). При проектировании требуемых элементов оптимизируются оценочные функционалы по небольшому числу параметров с использованием алгоритмов, не требующих вычисления производных этих функционалов (генетических алгоритмов, алгоритмов имитации отжига).

Существенного прогресса в совершенствовании технологических элементов, основанных на тонкослойных покрытиях с дифракционными решётками в верхних слоях покрытия, можно добиться за счёт увеличения числа допускающих оптимизацию параметров решётки и применения более эффективных алгоритмов оптимизации функционалов, оценивающих качество решения задачи проектирования. Однако работы по созданию эффективных численных методов расчёта тонкоплёночных покрытий со сложными по структуре решётками и развитию

методов их оптимального проектирования до сих пор не проводились. Для успешного проектирования таких элементов требуется разработка специализированных методов оптимизации, опирающихся как на эффективные алгоритмы решения прямой задачи расчёта дифракционной эффективности, так и на столь же эффективные алгоритмы вычисления производных оценочных функционалов по всем основным параметрам разрабатываемых элементов. Этим вопросам и посвящена данная работа.

**1. Постановка задачи.** Рассмотрим многослойную дифракционную решётку (МДР), схематично изображённую на рис. 1. Электромагнитная волна с ТЕ-поляризацией падает на бинарную (с прямоугольной формой профиля) дифракционную решётку, помещённую на многослойное отражающее покрытие. Параметры рассматриваемого элемента изменяются только в плоскости  $Oxy$ . В представленных на рис. 1 обозначениях  $T > 0$  – период решётки,  $a$  – ширина штриха решётки,  $h > 0$  – высота решётки,  $DE_s$ ,  $s = -1, 0, 1$ , – значение дифракционной эффективности в  $s$ -м порядке дифракции.

Решается задача максимизации значения дифракционной эффективности в первом порядке дифракции при спектральном сложении сигналов в широком диапазоне длин волн. При этом угол направления для первого порядка дифракции  $\theta$  считается известным. ТЕ-поляризованная волна падает на структуру МДР под углом  $\varphi$ , который связан с углом  $\theta$  следующим образом:

$$\sin \varphi = \frac{T}{\lambda_0} - \sin \theta, \quad (1)$$

где  $\lambda_0$  – длина падающей волны.

Электрическое поле можно представить, используя только продольную составляющую поля, которую обозначим через  $u_0(x, y)$ . Зависимость для него имеет вид

$$u_0(x, y) = \exp(-ik_0 n_0 (x \sin \varphi - (y - h) \cos \varphi)),$$

где  $k_0 = 2\pi/\lambda_0$  – волновое число,  $n_0$  – показатель преломления свободного пространства.

Введём показатель преломления  $n(x, y)$ , при  $y \in (0, h)$  равный  $n_0$  за пределами МДР и  $\tilde{n}_1$  – в штрихах решётки (см. рис. 1). При  $y < 0$   $n(x, y)$  равно  $n_j$  в слоях многослойной структуры (см. рис. 1), где  $j = \overline{1, J}$ , а  $J \geq 0$  – количество слоёв.

Прямая задача дифракции состоит в том, чтобы найти продольную составляющую полного электрического поля  $u(x, y)$ , удовлетворяющую уравнению Гельмгольца

$$(\Delta + k_0^2 n^2(x, y))u(x, y) = 0,$$

условиям непрерывности на поверхностях решётки и на границах слоёв, условию излучения на бесконечности, условию Флоке

$$u(x, y) = \exp(ik_0 n_0 T \sin \varphi) u(x + T, y)$$

и условию конечности энергии в каждой ограниченной области пространства. Также требуется определить дифракционную эффективность основных порядков дифракции [9; 10, с. 9].

Используя метод плоских волн [9], представим ненулевую составляющую электрического поля в виде

$$u^{(0)}(x, y) = u_0(x, y) + \sum_{l=-\infty}^{+\infty} r_l z_l(x) \exp(-ik_{0,yl}(y - h)), \quad y > h, \quad (2)$$

$$u^{(j)}(x, y) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} z_l(x) (p_l^{(j)} \exp(ik_{j,yl}(y - h_j)) + q_l^{(j)} \exp(-ik_{j,yl}(y - h_j))), \quad y \in (h_j, h_{j-1}), \quad (3)$$

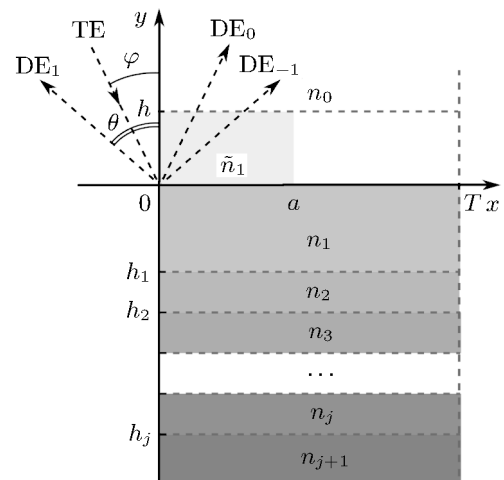


Рис. 1. Многослойное диэлектрическое покрытие с периодической дифракционной решёткой.

$$u^{(J+1)}(x, y) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} t_l z_l(x) \exp(ik_{J+1,yl}y), \quad 4y < h_J, \tag{4}$$

где

$$z_l(x) := \exp(-ik_{xl}x), \quad j = \overline{1, J}, \quad h_0 = 0, \quad k_{j,yl} = \begin{cases} \sqrt{k_0^2 n_j^2 - k_{xl}^2}, & k_0 n_j \geq |k_{xl}|, \\ -i\sqrt{k_{xl}^2 - k_0^2 n_j^2}, & k_0 n_j < |k_{xl}|, \end{cases} \quad j = \overline{0, J+1},$$

и значения  $k_{xl}$  определяются с использованием условия Флоке по формуле

$$k_{xl} = k_0 n_0 \sin \varphi - \frac{2\pi l}{T},$$

$l$  – целое. Из (4) следует, что  $p_l^{(J+1)} \equiv t_l$ ,  $q_l^{(J+1)} \equiv 0$ . Здесь  $r_l$  – неизвестные амплитудные коэффициенты отражения  $l$ -х мод в области  $y > h$ ,  $t_l$  – неизвестные амплитудные коэффициенты прохождения  $l$ -х мод в области  $y < h_{J+1}$ . В работе [11] показано, что все коэффициенты  $p_l^{(j)}$  и  $q_l^{(j)}$  можно представить с помощью  $t_l$ .

В прямоугольниках  $\Pi = (0, a) \times (0, h)$ ,  $\Pi_0 = (a, T) \times (0, h)$  значения волновых чисел различны:  $\kappa = k_0 \tilde{n}_1$ ,  $\kappa_0 = k_0 n_0$  (см. рис. 1).

**2. Аналитическое решение задачи дифракции.** Представим решение задачи в прямоугольниках  $\Pi$ ,  $\Pi_0$  в виде

$$u(x, y) = \sum_{l=0}^{+\infty} X_l(x) Y_l(y), \tag{5}$$

учитывая, что  $u(x, y)$  удовлетворяет уравнению Гельмгольца в каждом прямоугольнике, а также условиям сопряжения на сторонах прямоугольников и условию Флоке.

Применяя метод разделения переменных, получаем, что функции  $Y_l(y)$  имеют вид

$$Y_l(y) = b_l^{(1)} \exp(i\sqrt{\lambda_l}y) + b_l^{(2)} \exp(-i\sqrt{\lambda_l}(y - h)). \tag{6}$$

Функции  $X_l(x)$  являются решениями следующих задач на собственные значения:

$$\begin{cases} X_l'' + (\kappa^2 - \lambda_l)X_l = 0, & x \in (0, a), \\ X_l'' + (\kappa_0^2 - \lambda_l)X_l = 0, & x \in (a, T), \end{cases} \tag{7}$$

$$X_l(0) = AX_l(T), \quad X_l'(0) = AX_l'(T); \quad [X_l]|_{x=a} = [X_l']|_{x=a} = 0, \quad i = \overline{1, N-1}, \tag{8}$$

где  $\lambda_l$  – собственные числа задачи,

$$A = \exp(ik_0 n_0 T \sin \varphi) \tag{9}$$

– постоянная, входящая в условие Флоке ( $|A| = 1$ ), и

$$[f]|_{x=x_0} = \lim_{x \rightarrow x_0-0} f(x) - \lim_{x \rightarrow x_0+0} f(x).$$

Решение (5)–(9) называется *точным решением* задачи дифракции, полученным модифицированным методом разделения переменных [11, 12].

Решение задачи (7), (8) определяется по формуле

$$\begin{cases} X_l(x) = c_{0,l} \sin(\gamma_1 x) + d_{0,l} \cos(\gamma_1 x), & x \in (0, a), \\ X_l(x) = c_{1,l} \sin(\gamma_0(x - a)) + d_{1,l} \cos(\gamma_0(x - a)), & x \in (a, T). \end{cases} \tag{10}$$

Пусть  $M$  – положительная чётная постоянная такая, что  $M + 1$  – число найденных собственных значений  $\lambda_l$ . Введём обозначения

$$\gamma_0(\lambda_l) = \sqrt{\kappa_0^2 - \lambda_l}, \quad \gamma_1(\lambda_l) = \sqrt{\kappa^2 - \lambda_l}.$$

Используя модифицированный метод разделения переменных [11–13], задачу об отыскании собственных чисел  $\lambda_l$ ,  $l = \overline{-M/2, M/2}$ , задачи (5)–(9) можно свести к задаче вычисления корней уравнения

$$F(\lambda_l) \equiv (\gamma_0(\lambda_l)\gamma_1(\lambda_l))^{-1}(\gamma_0(\lambda_l)\gamma_1(\lambda_l)(A^2 + 1 - 2A \cos(\gamma_0(\lambda_l)(T - a)) \cos(\gamma_1(\lambda_l)a) - A(2\lambda_l - \kappa^2 - \kappa_0^2) \sin(\gamma_0(\lambda_l)(T - a)) \sin(\gamma_1(\lambda_l)a)) = 0. \quad (11)$$

Левая часть уравнения (11) является комплекснозначной функцией. В то же время его решения  $\lambda = \lambda_l$ ,  $l = \overline{-M/2, M/2}$ , являются вещественными величинами. Поэтому уравнение (11) можно представить в виде системы

$$\operatorname{Re}(F(\lambda_l)) = 0, \quad \operatorname{Im}(F(\lambda_l)) = 0. \quad (12)$$

Для определения решений системы (12) используется модифицированный метод пристрелки [11], основанный на поиске одновременной смены знака левых частей её уравнений.

Учитывая систему (10) и условия Флоке, можно определить  $d_{0,l}$ ,  $l = \overline{-M/2, M/2}$ , по формуле

$$d_{0,l}(\lambda_l) = c_{0,l}(\gamma_1(\lambda_l) \cos(\gamma_0(\lambda_l)(T - a)) \cos(\gamma_1(\lambda_l)a) + \gamma_0(\lambda_l) \sin(\gamma_0(\lambda_l)(T - a)) \sin(\gamma_1(\lambda_l)a)^{-1}(\gamma_1(\lambda_l) \cos(\gamma_0(\lambda_l)(T - a)) \cos(\gamma_1(\lambda_l)a - \gamma_0(\lambda_l) \sin(\gamma_0(\lambda_l)(T - a)) \sin(\gamma_1(\lambda_l)a) - \gamma_1(\lambda_l)A^{-1}), \quad (13)$$

где  $c_{0,l}$  – заданная постоянная. Далее, учитывая систему (10) и условия сопряжения при  $x = a$ , значения  $c_{1,l}$ ,  $d_{1,l}$  находим по формулам

$$c_{1,l}(\lambda_l) = \frac{\gamma_1(\lambda_l)}{\gamma_0(\lambda_l)}(c_{0,l} \cos(\gamma_1(\lambda_l)a) - d_{0,l} \sin(\gamma_1(\lambda_l)a)),$$

$$d_{1,l}(\lambda_l) = c_{0,l} \sin(\gamma_1(\lambda_l)a) + d_{0,l} \cos(\gamma_1(\lambda_l)a). \quad (14)$$

На следующем шаге необходимо определить  $b_l^{(1)}$ ,  $b_l^{(2)}$ ,  $l = \overline{-M/2, M/2}$ , как решение системы, представленной в матричной форме

$$W(\lambda)\mathbf{b} = \mathbf{f}, \quad (15)$$

где  $\mathbf{b} = (b_{-M/2}^{(1)}, \dots, b_{M/2}^{(1)}, b_{-M/2}^{(2)}, \dots, b_{M/2}^{(2)})^T$ ,  $\lambda = (\lambda_{-M/2}, \dots, \lambda_{M/2})^T$ , а коэффициенты матрицы  $W = (w_{i,j})_{(2M+2) \times (2M+2)}$  и вектор  $\mathbf{f} = (f_1, f_2, \dots, f_{2M+2})^T$  определяются в следующем виде:

$$w_{j,p} = i \exp(ih\sqrt{\lambda_m})X_{m,l}(k_{0,yl} + \sqrt{\lambda_m}),$$

$$w_{j,M+1+p} = iX_{m,l}(k_{0,yl} - \sqrt{\lambda_m}),$$

$$w_{M+1+j,p} = iX_{m,l}(k_{1,yl}(\tilde{p}_l - \tilde{q}_l) - (\tilde{p}_l + \tilde{q}_l)\sqrt{\lambda_m}),$$

$$w_{M+1+j,M+1+p} = i \exp(ih\sqrt{\lambda_m})X_{m,l}(k_{1,yl}(\tilde{p}_l - \tilde{q}_l) + (\tilde{p}_l + \tilde{q}_l)\sqrt{\lambda_m}),$$

где  $l = -M/2 + j$ ,  $m = -M/2 + p$ ,  $j, p = \overline{0, M}$ ,

$$f_j = 0, \quad j = 1, 2, \dots, M/2, M/2 + 2, \dots, 2M + 2, \quad f_{M/2+1} = iT(k_{0,yl} + \cos \varphi),$$

$$X_{m,l} = T((T^2\gamma_1^2(\lambda_m) - v_l^2)^{-1}(-c_{0,m}z_l(a)(iv_l \sin(\gamma_1(\lambda_m)a) + T\gamma_1(\lambda_m) \cos(\gamma_1(\lambda_m)a)) -$$

$$- d_{0,m}z_l(a)(iv_l \cos(\gamma_1(\lambda_m)a) - T\gamma_1(\lambda_l) \sin(\gamma_1(\lambda_m)a)) + c_{0,m}\gamma_1(\lambda_m)T + d_{0,m}iv_l) +$$

$$+ z_l(a)(T^2\gamma_0^2(\lambda_m) - v_l^2)^{-1}(-c_{1,m}z_l(T-a)(iv_l \sin(\gamma_0(\lambda_m)(T-a)) + T\gamma_0(\lambda_m) \cos(\gamma_0(\lambda_m)(T-a))) -$$

$$- d_{1,m}z_l(T-a)(iv_l \cos(\gamma_0(\lambda_m)(T-a)) - T\gamma_0(\lambda_m) \sin(\gamma_0(\lambda_m)(T-a))) + c_{1,m}\gamma_0(\lambda_m)T + d_{1,m}iv_l),$$
 $v_l = 2\pi l - T \sin \varphi$ . Постоянные  $\tilde{p}_l$ ,  $\tilde{q}_l$  определяются соотношениями, приведёнными в работе [11].

Для решения системы  $2M+2$  линейных уравнений (15) используется метод Гаусса–Жордана. Используя (2)–(4), можно вычислить амплитуды  $t_l$  и  $r_l$ :

$$t_l = T^{-1}(\tilde{p}_l - \tilde{q}_l)^{-1} \sum_{p=0}^M X_{p,l} Y_p(0), \quad l = \overline{-M/2, M/2},$$

$$r_l = T^{-1} \sum_{p=0}^M X_{p,l} Y_p(h), \quad l = -M/2, \dots, -1, 1, \dots, M/2,$$

$$r_0 = T^{-1} \sum_{p=0}^M X_{p,0} Y_p(h) - 1.$$

В результате получаем дифракционную эффективность в  $l$ -м порядке дифракции, определяемую формулой

$$DE_l = |r_l|^2 \operatorname{Re} \left( \frac{k_{0,yl}}{k_0 n_0 \cos \varphi} \right) + |t_l|^2 \operatorname{Re} \left( \frac{k_{J+1,yl}}{k_0 n_0 \cos \varphi} \right).$$

**3. Оптимизация.** Решается задача спектрального сложения сигналов в широком диапазоне длин волн. Пусть  $L$  – количество выбранных длин волн, для которых будут проводиться расчёты. Минимизировать будем среднеквадратичное отклонение дифракционной эффективности в первом порядке от значения 1:

$$\sigma = \sqrt{L^{-1} \sum_{j=1}^L (1 - DE_1^{(j)})^2}, \quad (16)$$

где  $DE_1^{(j)}$  – значение дифракционной эффективности в первом порядке при  $j$ -й длине волны.

Поиск минимума среднеквадратичного отклонения  $\sigma$  по выбранному набору параметров  $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots, p_K)^T$  осуществляется итерационным методом:

$$\mathbf{p}^{(j+1)} = \mathbf{p}^{(j)} + \alpha \nabla \sigma(\mathbf{p}^{(j)}),$$

где параметр  $\alpha > 0$  – фиксированная постоянная, поскольку подбор оптимального значения данного параметра на каждой итерации приводит к дополнительным вычислениям собственных значений  $\lambda = \lambda_l$ ,  $l = \overline{-M/2, M/2}$ , что многократно увеличивает время работы программы. При этом единое для всех итераций значение параметра  $\alpha$  подбирается в процессе вычислений с учётом среднего значения  $\nabla \sigma(\mathbf{p}^{(j)})$ . В качестве параметров  $p_k$ ,  $k = \overline{1, K}$ , могут выступать любые характеристики МДР (например, значения ширины штрихов в периоде решётки, их высота и толщины слоёв многослойного зеркала),  $K$  – количество выбранных параметров. В данной работе будет рассмотрена оптимизация по двум параметрам:  $p_1 = a$ ,  $p_2 = h$ . Критерием выхода из оптимизационной задачи выступает условие

$$|\sigma(\mathbf{p}^{(j)}) - \sigma(\mathbf{p}^{(j+1)})| < \varepsilon,$$

где  $\varepsilon > 0$  – заданная точность для нахождения локального минимума.

Для нахождения  $\partial\sigma/\partial a$ , где  $a$  соответствует ширине штриха решётки, необходимо сначала вычислить производные  $d\lambda_l/da$  по формуле

$$\frac{d\lambda_l}{da} = -\frac{\partial F(\lambda_l(a), a)}{\partial a} \left( \frac{\partial F(\lambda_l(a), a)}{\partial \lambda_l} \right)^{-1}, \quad l = \overline{-M/2, M/2}.$$

Функция  $F(\lambda_l(a), a)$  определена формулой (11), а  $\partial F/\partial a$ ,  $\partial F/\partial \lambda_l$  вычисляются аналитически и имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial a} &= A\gamma_0^{-1}(\lambda_l)\gamma_1^{-1}(\lambda_l)(\kappa_0^2 - \kappa^2)(\cos(\gamma_1(\lambda_l)a) \sin(\gamma_0(\lambda_l)(T - a))\gamma_1(\lambda_l) + \\ &\quad + \sin(\gamma_1(\lambda_l)a) \cos(\gamma_0(\lambda_l)(T - a))\gamma_0(\lambda_l)), \\ \frac{\partial F}{\partial \lambda_l} &= A\gamma_0^{-3}(\lambda_l)\gamma_1^{-3}(\lambda_l) \left( \left( \frac{1}{2}(\kappa_0^2 - \kappa^2)^2 \sin(\gamma_0(\lambda_l)(T - a)) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \cos(\gamma_0(\lambda_l)(T - a))\gamma_1^2(\lambda_l) \left( (T - a)\frac{1}{2}(2\lambda_l - \kappa^2 - \kappa_0^2)\gamma_0(\lambda_l) - a\gamma_0^3(\lambda_l) \right) \right) \sin(\gamma_1(\lambda_l)a) + \right. \\ &\quad \left. + \left( a\frac{1}{2}(2\lambda_l - \kappa^2 - \kappa_0^2)\gamma_1(\lambda_l) - (T - a)\gamma_1^3(\lambda_l) \right) \sin(\gamma_0(\lambda_l)(T - a)) \cos(\gamma_1(\lambda_l)a)\gamma_0^2(\lambda_l) \right). \end{aligned}$$

Кроме того, так как значения  $d_{0,l}$ ,  $d_{1,l}$ ,  $c_{1,l}$  зависят от  $\lambda_l$  и  $a$ , необходимо определить  $\partial d_{0,l}/\partial a$ ,  $\partial d_{1,l}/\partial a$ ,  $\partial c_{1,l}/\partial a$ . Данные производные можно вычислить аналитически, учитывая формулы (13), (14).

Вычисление частных производных  $b$  по любым выбранным параметрам осуществляется по следующей схеме. Домножим (15) слева на  $W^{-1}$  и найдём производную по выбранному параметру:

$$\frac{\partial b(p)}{\partial p_k} = -W^{-1}(\lambda, p) \frac{\partial W'(\lambda, p)}{\partial p_k} W^{-1}(\lambda, p) f(p),$$

где  $k = 1, 2$ . Учитывая, что  $W^{-1}(\lambda, p) f(p) = b(p)$ , получаем

$$\frac{\partial b(p)}{\partial p_k} = -W^{-1}(\lambda, p) \frac{\partial W'(\lambda, p)}{\partial p_k} b(p).$$

Умножив слева последнее уравнение на матрицу  $W(\lambda, p)$ , находим матричное уравнение

$$W(\lambda, p) \frac{\partial b(p)}{\partial p_k} = -\frac{\partial W'(\lambda, p)}{\partial p_k} b(p) \tag{17}$$

для вычисления  $\partial b(p)/\partial p_k$ . При этом производные коэффициентов матрицы  $W(\lambda, p)$  по любому выбранному параметру можно вычислить аналитически. Как и прежде, для решения системы  $2M + 2$  линейных уравнений (17) используется метод Гаусса–Жордана.

**4. Численные результаты.** Предлагаемый алгоритм реализован в виде кода на языке программирования C++ с использованием параллельных вычислений. Собственные значения  $\lambda = \lambda_l$ ,  $l = \overline{-M/2, M/2}$ , определяются параллельно на нескольких потоках. Количество потоков зависит от характеристик процессора. Для 10 потоков и  $M = 6$  время выполнения программы составляет 0.2 с.

Для расчётов была выбрана МДР, состоящая из пары тонкоплёночных материалов: легированный водородом кремний (Si:H) и диоксид кремния (SiO<sub>2</sub>). Общая конфигурация рассматриваемой МДР представлена на рис. 2. Угол направления для первого порядка дифракции  $\theta = 45^\circ$ . Исходя из этого значения, диапазон углов падения ТЕ-волны  $\varphi$  для выбранного диапазона длин волн с учётом формулы (1) составляет от  $10.47^\circ$  до  $38.77^\circ$ .

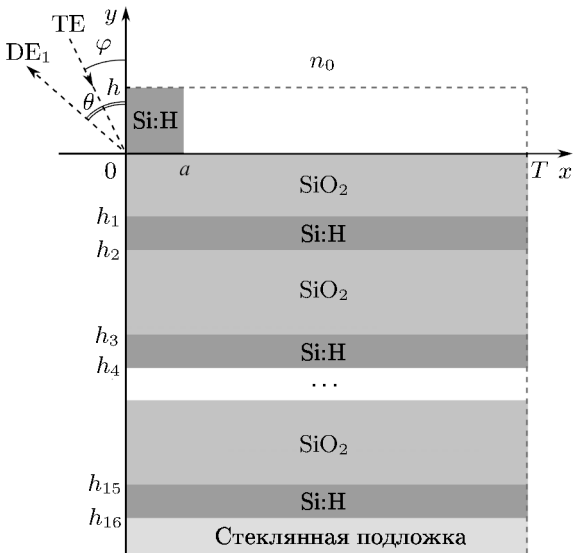


Рис. 2. Многослойная дифракционная решётка с одним штрихом в периоде.

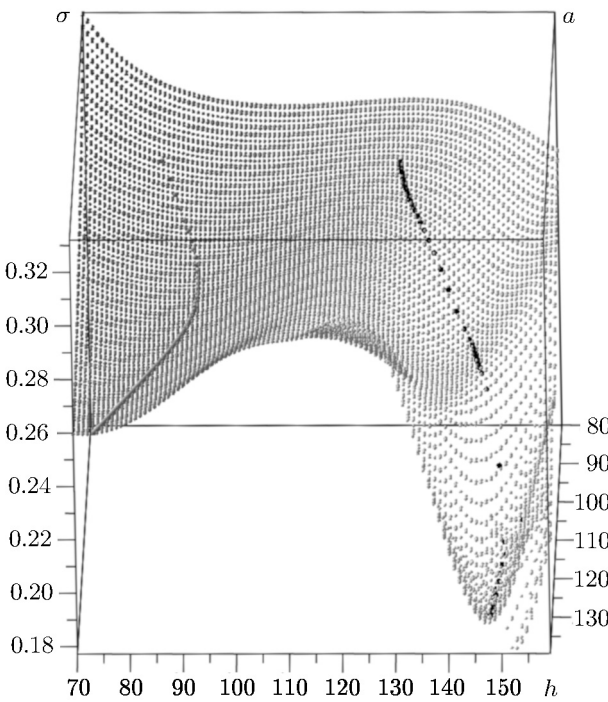


Рис. 3. Зависимость среднеквадратичного отклонения  $\sigma$  от параметров  $a, h$ .

среднеквадратичного отклонения  $\sigma$ . Для наборов параметров, соответствующих найденным минимумам, дифракционная эффективность в первом порядке дифракции показана на рис. 4.

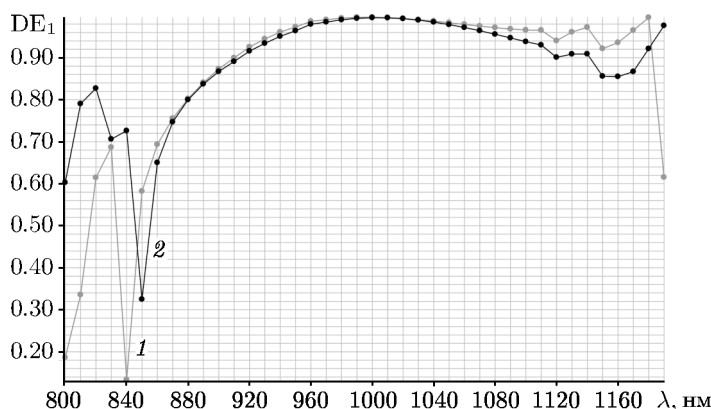
Для расчёта “серого” пути использовался градиентный метод при  $\alpha = 12$ , начальными данными являлись значения  $a = 90$  нм,  $h = 85$  нм,  $\sigma = 0.2908$ . Для достижения результата с точностью  $\varepsilon = 0.0001$  понадобилось 107 итераций, при этом оптимальным стал набор параметров  $a = 139.14$  нм,  $h = 73.98$  нм,  $\sigma = 0.25989$ , а время работы программы составило 337 с. Дифракционная эффективность в первом порядке дифракции в диапазоне длин волн от 800 нм до 1190 нм для полученного данным способом набора параметров представлена на рис. 4 точками серого цвета.

На основании экспериментальных результатов [14], полученных в Университете Тундзи, использовались следующие показатели преломления для выбранных материалов:  $n = 1.48$  для  $\text{SiO}_2$ ,  $n = 3.52$  для Si:H и  $n = 1.458$  для стеклянной подложки. Показатель преломления  $n_0$  за пределами решётки равен единице. Период решётки  $T = 900$  нм, при этом параметр  $a$ , определяющий ширину штриха, варьируется для оптимизации среднеквадратичного отклонения  $\sigma$  в пределах 80–140 нм. Вторым параметром оптимизации выступает высота данного штриха  $h$ , которая изменяется от 70 до 160 нм. Толщины первых двух слоёв многослойного зеркала составляют 140 и 76 нм соответственно. Начиная с третьего слоя, все нечётные слои имеют толщину 189.2 нм, а чётные – 75.6 нм. Многослойное зеркало состоит из 16 слоёв, т.е.  $J = 16$ .

Цель проводимых расчётов – проверка возможности применения градиентных методов оптимизации к решению задач проектирования МДР. В связи с этим в первую очередь надо проверить эффективность аналитического подхода к вычислению градиента минимизируемого функционала (16). Наиболее трудоёмким в вычислительном плане является вычисление производных по параметрам решётки, поскольку оно требует нахождения собственных значений матрицы краевой задачи и производных собственных значений по этим параметрам. Нахождение по аналитическим формулам производных функционала по параметрам многослойного покрытия значительно менее затратно в вычислительном плане. Поэтому для проверки эффективности предложенных алгоритмов была рассмотрена задача оптимизации по двум параметрам: ширине  $a$  и высоте  $h$  штриха решётки.

На рис. 3, 4 представлены результаты решения задачи оптимизации. На рис. 3 показаны процессы сходимости предложенного метода к двум различным точкам минимума

Для расчёта “черного” пути использовался градиентный метод при  $\alpha = 5$ , начальными данными являлись  $a = 90$  нм,  $h = 130$  нм. Для достижения результата с точностью  $\varepsilon = 0.00001$  понадобилось 52 итерации, а время работы программы составило 156 с. При этом итогом работы программы стали следующие оптимальные параметры:  $a = 129.24$  нм,  $h = 147.62$  нм,  $\sigma = 0.17722$ . Дифракционная эффективность в первом порядке дифракции в диапазоне длин волн от 800 до 1190 нм для полученного численно самого оптимального набора параметров представлена на рис. 4 точками черного цвета.



**Рис. 4.** Зависимость дифракционной эффективности в первом порядке дифракции от длины волны для наборов параметров, соответствующих двум локальным минимумам среднеквадратичного отклонения  $\sigma$ : 1 –  $a = 139.14$  нм,  $h = 73.98$  нм,  $\sigma = 0.25989$ ; 2 –  $a = 129.24$  нм,  $h = 147.62$  нм,  $\sigma = 0.17722$ . Цвета графиков соответствуют цветам точек на рис. 3.

**Заключение.** В работах [11, 12] предложен новый численно эффективный метод решения прямой задачи расчёта дифракционной эффективности многослойных покрытий с дифракционными решётками. На основе этого метода в настоящей статье впервые разработана схема получения аналитических выражений для градиента функционала, оценивающего качество решения задачи оптимизации МДР элементов. Проведена проверка численной эффективности применения полученных аналитических выражений для построения градиентных методов оптимизации. Полученные результаты открывают возможность применения современных методов оптимизации первого порядка для решения различных задач проектирования МДР элементов, в частности, задач проектирования многослойных покрытий с дифракционными решётками для спектрального сложения лазерного излучения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Государственного фонда естественных наук Китая (проект 21-57-53001).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Nguyen H.T., Britten J.A., Carlson T.C., Nissen J.D., Summers L.J., Hoaglan C.R., Aasen M.D., Peterson J.E., Jovanovic I.* Gratings for high-energy petawatt-class lasers // Proc. Of SPIE. 2005. V. 5991. P. 59911M.
2. *Zheng Y., Yang Y., Wang J. et al.* 10.8 kW spectral beam combination of eight all-fiber superfluorescent sources and their dispersion compensation // Optics Express. 2016. V. 24. № 11. P. 12063–12071.
3. *Smith D.J., McCullough M., Xu B. et al.* Large area pulse compression gratings fabricated onto fused silica substrates using scanning beam interference lithography // 3rd Intern. Conf. Ultrahigh Intens. Lasers: Dev. Sci. Emerg. Appl. 2008.
4. *Rumpel M., Moeller M., Moormann C., Graf T., Ahmed M.A.* Broadband pulse compression gratings with measured 99.7% diffraction efficiency // Opt. Lett. 2014. V. 39. P. 323–326.
5. <http://www.horiba.com/scientific/products/diffraction-gratings/for-scientific-applications/laser-pulse-compression/dielectric>.
6. <http://www.plymouthgrating.com/Products>.



7. [www.gsolver.com](http://www.gsolver.com).
8. [www.lighttrans.com](http://www.lighttrans.com).
9. *Moharam M.G., Grann E.B., Pommet D.A., Gaylord T.K.* Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings // J. of the Optical Soc. of America. A. 1995. V. 12. № 5. P. 1068–1076.
10. *Popov E.* Gratings: Theory and Numeric Applications. Marseille, 2014.
11. *Smirnov Yu.G., Martynova V.Yu., Wei Zeyong, Cheng Xinbin, Tikhonravov A.V.* Computationally efficient algorithm for designing multilayer dielectric gratings // Lobachevskii J. of Math. 2022. V. 43. № 5. P. 1277–1284.
12. *Smirnov Yu.G., Martynova V.Yu., Moskaleva M.A., Tikhonravov A.V.* Modified method of separation of variables for solving diffraction problems on multilayer dielectric gratings // Eurasian J. of Math. and Comput. Appl. 2021. V. 9. № 4. P. 76–88.
13. *Смирнов Ю.Г., Мартынова В.Ю., Москалева М.А., Цунак А.А.* Анализ дифракционной эффективности дифракционных решеток модифицированным методом разделения переменных // Изв. вузов. Поволжский регион. Физ.-мат. науки. 2021. № 4 (60). С. 57–70.
14. *Tao He, Jinlong Zhang, Hongfei Jiao, Zhanshan Wang, Xinbin Cheng.* Near-infrared broadband Si:H/SiO<sub>2</sub> multilayer gratings with high tolerance to fabrication errors // Nanotechnology. 2020. V. 31. № 315203. P. 1–5.

Пензенский государственный университет,  
Московский государственный университет  
имени М.В. Ломоносова

Поступила в редакцию 23.09.2022 г.  
После доработки 22.01.2023 г.  
Принята к публикации 14.02.2023 г.