



## **МС Решетки**

**Для расчета дифракционных решеток  
модальным методом  
и  
методом Шандезона**

**2011**

**Руководство пользователя**

Введение .....	- 2 -
Ограничения С-метода.....	- 3 -
Ограничения Модальных методов.....	- 4 -
Окно проекта и меню .....	- 5 -
Диалог установок (Settings) .....	- 6 -
General (основная) .....	- 7 -
Layers (слои).....	- 7 -
<sup>C</sup> Grating (решетка).....	- 8 -
Scanning (сканирование) .....	- 9 -
Resonance (резонанс).....	- 10 -
Fields (поля).....	- 11 -
Options (опции) .....	- 11 -
<sup>M</sup> Lamellar Modes (моды слоистой структуры) .....	- 14 -
Analysis Dialog (диалог анализа).....	- 14 -
Optimization Dialog (диалог оптимизации) .....	- 16 -
Variable parameters (параметры оптимизации) .....	- 17 -
Criterion Function (целевая функция).....	- 18 -
Optimization (оптимизация) .....	- 18 -
Graph (графика).....	- 20 -
Graph Dialog (диалог графики).....	- 20 -
3D Graph (трехмерная графика) .....	- 20 -
Slider Dialog (слайде диалог).....	- 21 -
Material (материал) .....	- 22 -
Material Editor (правка материала).....	- 22 -

## Введение

Данный программный пакет разработан Николаем Лындиным, к.ф.-м.н., старшим научным сотрудником Института Общей Физики Российской Академии Наук, [lyndin@ran.gpi.ru](mailto:lyndin@ran.gpi.ru)

Все права защищены.

Пакет программ MC Grating предназначен для работы в среде Windows® OS. Интерфейс пакета написан на языке программирования Delphi. Наиболее критичные матричные функции взяты из Lapack 3.1.1 пакета и транслированы на язык программирования C++. DLL код этих функций оптимизирован для Intel процессоров и обеспечивает скорость вычислений близкую к скорости оригинального Intel® Math Kernel Library (Intel® MKL) пакета. MC Grating коды имеют приборную защиту с помощью HASP HL USB ключа.

В этом пакете реализованы два метода расчета многослойных дифракционных структур.

Подпакет программ, в основе которого лежит C-метод [1-4], предназначен для расчета решеток с плавным профилем и включает два независимых кода для коллинеарной и конической геометрии, каждый из которых включает классический (classic) и расширенный (extended) методы:

- Коллинеарная (collinear) версия кода предназначена для расчета многослойных решеточных структур, когда волновой вектор падающей волны лежит в плоскости XZ, перпендикулярной структуре и штрихам решетки.
- Коническая (conical) версия кода расширяет возможности коллинеарной версии на коническую геометрию, т.е. любые углы падения и произвольную поляризацию. Эта версия может читать файлы, записанные с помощью коллинеарной версии, однако скорость расчетов этой версии приблизительно в восемь раз более медленная, чем по коллинеарной версии.

Подпакет программ модальных методов, включающий метод «реальных» мод [5-9] (TMM), а также метод Фурье мод [10-12] (FMM) известный как RCWA, предназначен для расчета решеток с прямоугольной формой гофра и включает два независимых кода:

- Коллинеарная версия предназначена для расчета многослойных решеточных структур в случаях, когда волновой вектор падающей волны лежит в плоскости XZ, перпендикулярной плоскости структуры и штрихам решетки.
- Коническая версия расширяет возможности коллинеарной версии на произвольные углы падения и произвольную поляризацию. Эта версия может читать файлы, записанные с помощью коллинеарной версии, однако, расчеты по этой версии осуществляются приблизительно в восемь раз более медленно, чем по коллинеарной версии.

С помощью кодов осуществляется расчет взаимодействия плоской электромагнитной волны с многослойной гофрированной структурой, в результате которого находятся эффективности (комплексные амплитуды и мощность) всех отраженных и проходящих дифракционных волн. Также рассчитывается распределение комплексного поля и компонент потока мощности в многослойной структуре и прилегающих средах. При расчетах используется комплексная диэлектрическая проницаемость сред структуры. Падающая волна имеет единичную амплитуду вектора  $E$ , ( $s$  – поляризация) или вектора  $H$ , ( $p$  – поляризация) для версий неконической геометрии или модуля вектора  $|E|$  (для версий конической геометрии) и

нулевую фазу при  $x = 0$  и  $z = 0$ . Поток мощности падающей волны во всех случаях равен единице.

Все коды имеют почти совпадающие интерфейсы, адаптированные под конкретные возможности кода. Основная форма является контейнером для текстовых окон редакции независимых проектов. В окне редакции проекта может отображаться текст с параметрами структуры или текстовая таблица с результатами вычислений. Графические средства используют данные из текстовой таблицы результатов. Этот подход представляется разумным, поскольку пользователь получает возможность редактировать результат, перед тем как отобразить его в графическом виде и использовать внешние файлы данных. Пользователь имеет возможность выбирать в табличных результатах число цифр и интересующие его дифракционные порядки. При этом не требуется повторных вычислений – полный набор данных хранится в памяти компьютера. Пользователю предоставлена возможность вносить перед текстом с параметрами структуры любые комментарии, не содержащие текстовый спецификатор первой строки текста структуры. Параметры структуры можно редактировать как в текстовом виде в окне текстового редактора, так и в диалоговом окне **Settings**. Диалоговые окна также используются для доступа к остальным средствам программного пакета.

Все коды включают:

1. Поиск волноводного резонанса.
2. Анализ отражения и прохождения ограниченного Гауссова пучка [13].
3. Возможность оптимизации в многомерном пространстве [14] при задании гибкой целевой функции.
4. Обычная и трехмерная графика для представления результатов сканирования по одному или двум параметрам.
5. Каталог показателей преломления материалов.

### **Ограничения C-метода**

Основным параметром, определяющим область применимости этого метода, является отношение полной глубины решетки к ее периоду.

Метод дает надежные результаты при полной глубине решетки, не превышающей двух периодов решетки в случае *TE* поляризации и не превышающей одного периода решетки в случае *TM* поляризации. При глубине решетки, приближающейся к критической величине, существует оптимальное число порядков в разложении поля волн в гармонический ряд, обеспечивающее наилучший результат. Практически было обнаружено, что при расчете глубоких решеток оптимальное число порядков не превышает 30. По всей видимости, данное ограничение метода аналогично проблеме сходимости метода Рэлея [1], а в практическом плане связано с конечной точностью вычислений амплитуд гармоник высокого порядка.

При расчете решеток большого периода требуется учет большого числа дифракционных порядков, при этом сохраняется ограничение на число учитываемых порядков, отмеченное выше.

Хорошим критерием для оценки надежности результата является баланс мощности по всем дифракционным порядкам. В случае структур без поглощения эта величина должна быть близка к единице, а для структур с поглощением не превышать единицу.

## Ограничения Модальных методов

Эти методы не имеют ограничений на глубину решетки.

Проблемой ТММ и FMM является нарушение непрерывности электромагнитного поля на границах раздела слоев. Теоретически, при учете неограниченного числа мод, поля на границах слоев сшиваются корректно. Всегда наблюдается сходимость методов при увеличении числа учитываемых мод. Скорость сходимости зависит от контраста показателей преломления сред дифракционной структуры и от поляризации. Чем меньше контраст показателей преломления, тем быстрее сходимость. При прочих равных условиях сходимость для *TE* поляризации превышает сходимость случая *TM* поляризации.

Наибольшие проблемы со сходимостью возникают в случае металлических решеток и *TM* поляризации. В этом случае помимо описанной выше проблемы непрерывности электромагнитного поля возникают дополнительные проблемы. В слоистых структурах с металлами могут существовать так называемые плазмонные моды. Эти моды, как правило, имеют аномально резкую зависимость поля от координаты в пределах слоя структуры. Кроме плазмонных мод в таких структурах существуют «скрытые» моды [9], имеющие распределение поля, отличающееся от регулярных мод, и распределенные парами по всему спектру мод. Эти обстоятельства приводят к ухудшению сходимости в зависимости от числа учитываемых мод и могут нарушать ее монотонность.

За исключением специального случая решеток в металлах с высокой проводимостью при *TM* поляризации, где FMM требует специального подхода, такого как фильтрация мод, оба метода имеют сравнимую скорость сходимости.

Несмотря на описанные выше проблемы относительно медленной сходимости методов, они дают практически приемлемые результаты (точность не хуже долей процента) при вполне умеренном числе учитываемых мод.

Для ТММ баланс мощности по всем дифракционным порядкам является хорошим критерием для оценки надежности результата, в то время как FMM, в случае структур без поглощения, всегда дает баланс равный единице.

При разработке программного пакета были использованы следующие источники:

1. J. Chandezon, D. Maestre, G. Raoult, "A new theoretical method for diffraction gratings and its numerical application", J. Optics (Paris), Vol. 11, No. 4, p. 235 (1980).
2. J. Chandezon, M. T. Dupuis, and G. Cornet, "Multicoated gratings: a differential formalism applicable in the entire optical region", J. Opt. Soc. Am. 72, p. 839-846 (1982).
3. Lifeng Li, "Multilayer-coated diffraction gratings: differential method of Chandezon et al. revisited", J. Opt. Soc. Am. 11, p. 2816-2828 (1994).
4. Lifeng Li, G. Granet, J. P. Plumey, and J. Chandezon, "Some topics in extending the C method to multilayer gratings of different profiles", Pure Appl. Opt. 5, p. 141-156 (1996).
5. L. C. Botten, M. S. Graig, R. C. Mcphedran, J. L. Adams, and J. R. Andrewartha, "The dielectric lamellar diffraction grating", Opt. Acta 28, p. 413-428 (1981);
6. L. C. Botten, M. S. Graig, R. C. Mcphedran, J. L. Adams, and J. R. Andrewartha, "The finitely conducting lamellar diffraction grating", Opt. Acta 28, p. 1087-1102 (1981);
7. L. C. Botten, M. S. Graig, R. C. Mcphedran, "Highly conducting lamellar diffraction gratings", Opt. Acta 28, p. 1103-1106 (1981);
8. Lifeng Li, "A modal analysis of lamella diffraction gratings in conical mountings", Journal of Modern Optics, 40, p. 553-573 (1993);

9. M. Foresti, L. Menez, A. V. Tishchenko, "Modal method in deep metal-dielectric gratings: the decisive role of hidden modes", J. Opt. Soc. Am. A, Vol. 23, No. 10, p. 2501 (2006)
10. P. Lalanne and G. M. Morris, "Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM polarization", J. Opt. Soc. Am. A 13, No. 4, p. 779 (1996).
11. L. Li, "Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures", J. Opt. Soc. Am. A 13, No. 9, p. 1870 (1996).
12. N. Lyndin, O. Parriaux and A.V. Tishchenko, "Modal analysis and suppression of the FMM instabilities in highly conductive gratings", J. Opt. Soc. Am. A, Vol. 24, No. 12, p. 3781 (2007).
13. S. M. Loktev, N. M. Lyndin, O. Parriaux, V. A. Sychugov, A. V. Tishchenko, "Reflection of a finite light beam from a finite waveguide grating", Sov. J. Quantum Electron. 27, p. 445-449 (1997).
14. R. Fletcher, M.J.D. Powell, "A rapidly convergent descent method for minimization", The Computer Journal, 6, p. 163-168 (1963).

## Окно проекта и меню

Пользователю предоставлено несколько способов открыть проект. Кликнуть в основном окне меню **File** и выбрать одну из трех возможностей:

- **Samples** предоставляет возможность выбора из двух примеров структур:  
*Коды C-метода* – пример решетки с синусоидальным профилем и пример поточечного задания треугольного профиля решетки с последующим представлением в виде суммы гармоник;  
*Коды модального метода* – пример простейшей прямоугольной решетки, включающей две ячейки и более сложный пример, включающий четыре ячейки.
- **Open** – стандартное меню.
- **Reopen** содержит список последних сохраненных файлов.

Окно проекта имеет тип текстового редактора и открывается с текстом параметров структуры. Внизу этого окна расположено несколько управляющих клавиш, имеющих очевидный смысл. Четыре функции этих клавиш: **Graph**, **Run**, **Settings**, **Analysis** и **Optimize** повторены в основном меню. Клавиша **Result/Structure** переключает текстовый редактор между параметрами структуры и таблицей результатов вычислений. Если активировано окно параметров структуры, то пользователь имеет возможность сохранить эти параметры и установки в файле с расширением **CHA** (*Коды C-метода*) или **MDL** (*Коды модального метода*). Если активировано окно результатов, то пользователь имеет возможность сохранить эти результаты в файл данных с расширением **DAT**. Окно редактора позволяет редактировать таблицу результатов и параметры структуры, однако для последней цели рекомендуется пользоваться специальным диалоговым окном **Settings** (установки).

После открытия окна проекта в главном меню появляются дополнительные позиции:

- **Edit** - эта стандартная функция не полностью функциональна пока редактор имеет атрибут только для чтения. Пользователь может изменять этот атрибут с помощью контроля **Read only**.
- **Character** – стандартная позиция для редактирования.
- **Settings** обеспечивает возможность редактирования параметров структуры, установок и опций вычислений.

- **Run** начинает процесс вычислений.
- **Optimize** открывает диалоговое окно для установки переменных параметров оптимизации, задания целевой функции и контроля процесса оптимизации.
- **Graph** служит для представления результатов вычислений в графической форме. Если результаты не могут быть представлены в графической форме или результатов вообще нет, то контроль **Graph** не активен.
- **Analysis** открывает диалоговое окно, обеспечивает возможность анализа отражения и прохождения ограниченного Гауссова пучка падающего на структуру, а также для анализа параметров полюсов резонанса.
- **Slider** присутствует только в конических версиях кодов. Соответствующий диалог обеспечивает экспресс анализ зависимости графических результатов от состояния входной поляризации.
- **Duplicate** позволяет создавать копию проекта в новом окне. Эта операция безопасна на любой стадии.
- **Service Window** постоянно содержит подменю **Structure Geometry** для визуализации системы координат и параметров плоских дифрагированных волн. В зависимости от состояния проекта могут появляться дополнительные ссылки на профиль решетки и графические окна результатов.
- **Window** – стандартная позиция.
- **Help** – стандартная позиция. Версия (*Version*) в *Help -> About* имеет ГТТГ-ММ-ДД формат даты компиляции.

## Диалог установок (Settings)

Этот диалог содержит несколько страниц:

- **General (основная)**
- **Layers (слои)**
- **<sup>C</sup>Grating (решетка)** (здесь и ниже префикс <sup>C</sup> означает, что соответствующая позиция присутствует только в кодах C-метода)
- **Scanning (сканирование)**
- **Resonance (резонанс)**
- **Fields (поля)**
- **Options (опции)**
- **<sup>M</sup>Lamellar** - моды слоистой структуры (здесь и ниже префикс <sup>M</sup> означает, что соответствующая позиция присутствует только в кодах модального метода)

Под страницами расположены три кнопки:

- **Ok** применяет все изменения в диалоговом окне и прячет его.
- **Run** применяет все изменения в диалоговом окне, прячет его и стартует вычисления. Если изменения касаются только формата таблицы результатов (число цифр, формат вывода: мощность или амплитуда, число дифракционных порядков), то результаты вычислений, хранящиеся в памяти компьютера, будут использованы для пересчета таблицы. Реальные вычисления структуры начнутся только, если изменены существенные параметры структуры или параметры сканирования.

- *Cancel* отменяет все изменения в диалоге и закрывает его.

## General (основная)

- <sup>C</sup> *Maximum Order of Field Decomposition* – максимальное число порядков в разложении поля в гармонический ряд определяет  $2 \cdot \text{Order} + 1$  Фурье компонент. Эта величина должна быть больше или равна максимально возможной абсолютной величине дифракционных порядков в прилегающих к структуре средах. Существует возможность автоматического выбора необходимого числа порядков (см. страницу *Options (опции)*).
- <sup>C</sup> *Method* – позволяет выбрать метод расчета Classic или Extended. Если выбран Classic метод, то по выходе из этого поля нулевая граница раздела будет применена для всех границ раздела сред.
- <sup>M</sup> *Method* – позволяет выбрать метод расчета TMM или FMM.
- <sup>M</sup> *Number of Modes* – число мод определяет число мод слоистой структуры учитываемых при вычислениях. Эта величина должна быть адекватна полному числу дифракционных порядков существующих в каждом слое. Существует возможность автоматического выбора необходимого числа мод (см. страницу *Options (опции)*).
- *Wavelength (длина волны)*, единицы измерения нанометры.
- <sup>M</sup> *Period (период решетки)*, единицы измерения нанометры.
- *Polarization (поляризация)*. При *TE (s)* поляризации вектор электрического поля лежит в плоскости *X-Y*, а при *TM (p)* поляризации в этой плоскости лежит вектор магнитного поля. В конической геометрии поляризация определяется двумя проекциями электрического поля в плоскости нормальной волновому вектору *k* падающей волны, т.е. проекцией *Es* (в плоскости *X-Y*) и проекцией *Ep* (перпендикулярной к *Es*). Амплитуды этих компонент определяются углом состояния поляризации *State* и углом фазового сдвига *Phase* компоненты *Ep* относительно компоненты *Es*. Единицы измерения - градусы.
- *Angle*, определение дано на рисунке *Structure Geometry (геометрия структуры)*. В конической геометрии ориентация падающей волны определяется двумя углами (определение зависит от системы координат *Coordinate System*). Смысл этих углов следует из рисунков, представленных на этой же странице. Единицы измерения - градусы.

## Layers (слои)

- Падение волны всегда происходит со стороны cover, и слои нумеруются от среды падения к подложке (substrate). Если пользователь желает иметь подложку в качестве среды падения, то необходимо поменять роли подложки (substrate) и среды падения (cover). Кнопка *C-S* изменяет роль cover и substrate, а также изменяет порядок слоев, включая решетки.
- Если пользователь для кодов Модального метода и кодов C - классического метода установит курсор на *Layer* контроль и нажмет правую клавишу мыши, то активируется *Контекстное меню*, позволяющее целиком копировать, вставлять и т.п. слои.

- <sup>M</sup> Каждая слоистая структура с толщиной слоя, определяемой контролем *Thickness* и с номером слоя, определяемым контролем *Layer* состоит из нескольких ячеек (*Cells*). Пользователь имеет возможность редактировать параметры ячеек индивидуально.
- <sup>M</sup> Нажатием правой клавиши мыши, при положении курсора на контроле *Cell Index*, пользователь активирует *Контекстное меню*, позволяющее манипулировать параметрами ячейки.
- <sup>M</sup> Нажатие клавиши *Convert* открывает *Layer Conversion (конверсия слоя)* диалоговое окно. Это окно предоставляет пользователю следующие возможности:
  - а) Объединить последовательную серию слоев в один слой с единственной ячейкой, сохраняя полную толщину серии;
  - б) Преобразовать текущий слой *Layer* в серию слоев представляющих *Sinus (синус)*, *Trapezium (трапеция)*, *Triangle (треугольник)* или *Profile from File (профиль из файла)* форму границы, разделяющей соседние среды. Полная толщина серии слоев равна толщине *Thickness* начального слоя *Layer*.
- Эта страница также содержит *Material (материал)* контроль. Если любое, соответствующее среде поле редактирования активировано, то установив курсор на *Material* контроль и нажав левую клавишу мыши, пользователь получает доступ к диалоговому окну каталога материалов. Если среде назначен материал, то *Material* контроль отражает название материала и программа всегда будет использовать показатель преломления этого материала для текущего значения длины волны, в противном случае пользователь видит приглашение *Select Material (выберите материал)* при этом показатель преломления фиксирован для всех длин волн.
- Если курсор указывает на *Material* контроль, то нажатие правой клавиши мыши активирует *Контекстное меню*, которое позволяет манипулировать уже назначенными материалами, минуя диалоговое окно каталога материалов.
- Смысл других полей контроля очевиден. Следует отметить практически полезное свойство полей *Permittivity (диэлектрическая проницаемость)* и *Refractive index (показатель преломления)*: после выхода из любого поля или после нажатия клавиши Enter, все другие поля в линии автоматически пересчитываются.
- <sup>C</sup> Расширенный метод имеет дополнительную клавишу *Split Layer to (разделить слой на)*. Эта клавиша может быть полезна при исследовании проблем сходимости метода.

**Note** Положительный знак мнимой части *Permittivity* и *Refractive index* соответствует поглощающим средам, в то время как отрицательный знак соответствует средам с усилением.

### <sup>C</sup> Grating (решетка)

- Значение поля *Period (период)* очевидно, единицы измерения нанометры.
- Поле *Grating Depth (глубина решетки)* определяет минимальную толщину воображаемого слоя целиком содержащего профиль решетки. После выхода из этого поля или после нажатия клавиши Enter, все синусоидальные гармоники и координаты точек в представлении профиля дифракционной решетки автоматически пересчитываются, сохраняя функциональную форму решетки.
- Состояние других полей определяется состоянием контроля *Conversion to (преобразовать к)* т.е. текстом под этим контролем. Если пользователь видит текст *Points Presentation*, то он может редактировать любую синусоидальную гармонику

(определяемую контролем **Harmonic Order (порядок гармоники)**) индивидуально. Пользователь также может изменять полное число гармоник в поле **Number of Sinus Harmonics (число синусоидальных гармоник)**. После нажатия клавиши **Conversion to** и смены текста под этим контролем на **Harmonics Presentation (гармоническое представление)**, пользователь имеет возможность вносить данные о профиле решетки поточечно (при этом первоначальный профиль решетки удаляется). Пользователь также должен выбрать **Number of Approximating Harmonics (число аппроксимирующих гармоник)** в разложении поточечной функции профиля в гармонический ряд. Если курсор расположен в поле **Point Index**, то нажатие правой клавиши мыши активирует **Контекстное меню**, которое помогает редактировать точки представления профиля решетки. По завершении ввода данных пользователь может конвертировать поточечное представление профиля решетки в сумму гармоник или оставить как есть. Последняя операция не влияет на результаты вычислений, но она необратима.

- Расширенный метод имеет дополнительное поле **Interface**, которое позволяет выбрать границу раздела сред для редактирования параметров соответствующего гофра. Границы раздела нумеруются, стартуя с "0" и заканчиваясь индексом, соответствующим последнему слою структуры.
- Если пользователь расширенного C - метода установит курсор на **Interface** поле и нажмет правую клавишу мыши, то активируется **Контекстное меню**, позволяющее целиком копировать, вставлять и т.п. профили границ раздела сред.
- Расширенный метод также имеет дополнительную клавишу **Remove Interface (удалить границу раздела)**. Эта клавиша активна, в случае если соседние слои имеют совпадающие диэлектрические проницаемости.

## Scanning (сканирование)

Сканирование по одному параметру может быть отображено в соответствующем графическом окне. См. диалоговое окно графики **Graph Dialog**.

Сканирование по двум параметрам может быть отображено в окне трехмерной графики **3D Graph window**.

- Панель **Scanning Range (диапазон сканирования)** определяет начальное и конечное значение параметра сканирования и число интервалов, т.е. полное число точек сканирования минус одна точка.
- Панель **Scanning of** имеет очевидное значение. Первая опция **Fixed Parameters** соответствует параметрам **General**, **Layers**, **C Grating** страницы. Опция **Layer Thickness** активирует **Bunch** контроль. Галочка в этом контроле подразумевает сканирование полной толщины выделенных слоев при сохранении их относительных толщин. Если необходимо однократно изменить суммарную толщину выделенных слоев, нажмите **OK** → **Optimize** → **Variable Parameters**, отредактируйте **Bunch of Layers Thickness** и нажмите **Export** → **Settings** чтобы вернуться обратно.
- <sup>M</sup> Сканирование **Cell Length (длины ячейки)** подразумевает, что сумма длин данной и последней ячеек остается постоянной.

- Если на панели **2D scan of** в соответствующем поле стоит галочка, то пользователь может осуществить сканирование по двум различным параметрам, определяемым из списка панели **Scanning of**. Номер дифракционного порядка и компонента могут быть выбраны в поле **Diffraction Orders Output** и в Combo Box, расположенных на панели **2D scan of**. Параметры сканирования, диапазон сканирования и число точек сканирования выбираются индивидуально для строк и колонок при соответствующем состоянии **2D scan of** контроля.
- Остальные поля: **Output Format**, **Output Decimal Digits** и **Diffraction Orders Output** определяют формат таблицы результатов. В панели **Diffraction Orders Output** пользователь имеет возможность выбрать любой диапазон, отражаемых в таблице порядков дифракции в пределах минус-плюс **Maximum Order of Field Decomposition** (в случае *C-метода*) или минус-плюс половина **Number of Modes** (в случае *модального метода*). Рядом с соответствующими полями расположены подсказки, указывающие на предельные значения дифракционных порядков во всем диапазоне сканирования и обновляемые при изменении параметров сканирования.
- Версии конической геометрии содержат контроль **Output Polarizer (выходной поляризатор)**. Этот контроль влияет только на формат таблицы результатов. Более подробно эта функция описана в секции **Slider**.

## Resonance (резонанс)

- Поиск резонанса в основном ориентирован на волноводные моды исследуемой диэлектрической структуры. В результате поиска резонанса находятся эффективные показатели преломления мод и углы их возбуждения для данного периода решетки. При открытии страницы программа автоматически оценивает параметры резонанса, вычисляя эффективные показатели преломления мод многослойной структуры в предположении действительных значений показателей преломления сред. Слои с решеткой рассматриваются как соответственно усредненные однородные слои. Точные параметры резонанса для выбранной моды находятся с помощью клавиши **Find** и могут быть итеративно улучшены с помощью той же клавиши измененной на **Repeat**. Основные параметры резонанса вычисляются на основе феноменологического приближения резонансного отклика с помощью полюсных функций, для расчета которых используется пять (одиночный резонанс) или семь (двойной резонанс) эквидистантных по углу точек, расположенных в пределах четырех **Half Resonance Width** симметрично по отношению к **Angle (угол)** резонанса. Если стоит галочка в поле поиска **Double Resonance (двойной резонанс)**, то будут рассчитаны параметры двух соседних полюсов. Поиск двойного резонанса обязателен в двух случаях: во-первых, при нормальном падении и во-вторых, в случае двух близких резонансов (полюсов).
- Остальные поля и контроли этой страницы имеют очевидный смысл.

**Note** Пользователь может искать резонанс любого типа в дополнения к резонансам с модами, оцененными выше. Для этого необходимо вести предполагаемое положение резонанса и его ширину в поля **Angle** и **Half Resonance Width** и использовать эти значения как стартовые в поисках резонанса.

## Fields (поля)

Назначение этой страницы аналогично назначению страницы *Scanning* и функции большинства полей очевидны. Система координат иллюстрируется в *Service Window* затем *Structure Geometry*.

- Если нет галочки в контроле *2D (x, z) Scan of*, то в зависимости от опции *Scanning Direction* пользователь получает распределение всех компонент поля (или компонент потока мощности) по оси *Z* при заданном значении *X* или по оси *X* при заданном значении *Z*.
- Если в контроле *2D (x, z) Scan of* стоит галочка, то пользователь получает сканирование по двум осям *X* и *Z* заданной компоненты поля или потока мощности, выбираемой в Combo Box, расположенном справа от *2D (x, z) Scan of*. Диапазоны сканирования и число точек выбираются независимо для обоих направлений сканирования при соответствующей опции *Scanning Direction*. Последнее состояние этого контроля определяет строки в таблице данных.

Любые изменения на этой странице не требуют пересчета структуры. По умолчанию эта страница неактивна, чтобы активировать ее необходимо выбрать соответствующую опцию на странице *Options*.

## Options (опции)

Общие опции:

- Если стоит галочка в поле контроля *Save Settings (сохранить установки)*, тогда все параметры страниц *Scanning*, *Fields* и *Options* будут сохранены в файле в дополнение к параметрам структуры страниц *General*, *Layers* и <sup>C</sup> *Grating*. Часть текстового файла с установками скрыта от пользователя, однако доступна в любом внешнем текстовом редакторе.
- Для адекватного поведения других приложений windows не рекомендуется применять *Calculation Priority* выше, чем *Idle*.
- Если в поле *Background calculation* стоит галочка, то таблица результатов будет обновлена только по окончании вычислений.
- <sup>C</sup> Если в поле *Decomposition Order Correction* стоит галочка, то при необходимости программа автоматически увеличивает число *Minimal Order of Field Decomposition* до максимального абсолютного значения дифракционного порядка в прилегающих средах.
- <sup>M</sup> Если в поле *Number of Modes Correction* стоит галочка, то при необходимости программа автоматически увеличивает число *Number of Modes* до значения адекватного числу дифракционных порядков в среде падения и подложке.
- *Calculation Direction* опция полезна для структур, содержащих серию слоев без решетки. Вычисления осуществляются быстрее, если стартуют с этой серии слоев.
- Для того чтобы рассчитывать поля и активировать страницу *Fields* необходимо в поле *Field Calculation* поставить галочку, при этом страница *Scanning* становится неактивной. *Autoselect* поле позволяет пользователю разрешить или запретить появление подтверждающего диалога при открывании *Fields* или *Scanning* неактивной страницы. Поля рассчитываются в два этапа: расчет структуры при фиксированных

параметрах, за которым следует расчет распределения поля в соответствии с установками страницы *Fields*.

- Если в поле *Automatically Start Second Stage* не стоит галочка, то вычисления прерываются по выполнении первого этапа и пользователь необходимо повторно нажать клавишу *Run*, чтобы выполнить второй этап. Эта опция полезна в случаях, когда необходимо проконтролировать промежуточные результаты вычислений. Изменения на странице *Fields* не активируют первый этап.

C-метод опции:

- <sup>C</sup> Если в поле *Add Virtual Interfaces* стоит галочка, то к структуре добавляется два дополнительных скрытых для пользователя слоя, расположенных в среде падения и подложке с диэлектрическими проницаемостями соответствующими этим средам и границами раздела повторяющими реальные границы раздела. Толщины слоев равны глубине соответствующих решеток. Эта опция улучшает надежность согласования полей структуры с полями среды падения и подложки. В расширенном методе пользователь может заменить эту опцию вручную, поместив на достаточном расстоянии от реальных границ две виртуальные плоские границы раздела в среде падения и подложке.
- <sup>C</sup> *Method of Field Connection* (метод сшивания полей для расширенного метода) (см. ссылку 4 использованных источников во введении).

TMM опции:

- <sup>M</sup> Если в поле *Extended Regime* стоит галочка, то программа идентифицирует ситуацию, когда моды слоистой структуры низшего порядка становятся независимыми от величины угла падения и информирует пользователя какую из ячеек необходимо разделить на две. Эта ситуация возникает в случае решеток с высоким контрастом показателя преломления или в случае больших периодов. Без специальной обработки такие ситуации приводят к потере точности вычислений. Если в дополнение в поле *Auto* стоит галочка, то программа временно автоматически делит необходимые ячейки и применяет специальный метод ортогонализации мод. При расчете полей (*Fields*) или мод слоистой структуры (*Lamellar Modes*) деление ячеек сохраняется.
- <sup>M</sup> *Interface Fields Matching Basis* контроль определяет базисный набор собственных функций, по которому происходит сшивание поля на границах раздела сред. Опция *Adjacent Layers* означает, что применен комбинированный способ сшивания полей с использованием собственных функций соседних слоев, в то время как опция *Cover Medium* означает, что в качестве базиса используются собственные функции в среде падения.
- <sup>M</sup> Если TMM метод в случае ТМ поляризации и металлической решетки приводит к абсурдным результатам (например баланс по всем дифракционным порядкам превышает единицу), то наиболее вероятная причина заключается в том, что при поиске мод некоторые из них были пропущены. В этом случае нижеследующие параметры позволяют расширить область поиска собственных мод в комплексной плоскости диэлектрической проницаемости или/и изменить параметры алгоритма поиска.  
*Delta Argument* параметр определяет степень фрагментации замкнутого контура при поиске мод. Если в соответствующем поле стоит галочка, то эта величина

фиксирована, в противном случае, если в процессе поиска мод фиксируется ошибка, то программа автоматически повторяет поиск при меньшем значении **Delta Argument** вплоть до минимального значения, определенного в соответствующем поле.

**Segment Sub Divisions** параметр определяет число последовательных сегментов контура, одновременно удовлетворяющих условию **Delta Argument**, по которому прекращается дальнейшая фрагментация этих сегментов.

**Real Axis Extension** параметр применяется только в случае **TM** поляризации и если в слое имеется среда, у которой отрицательна реальная часть диэлектрической проницаемости. Положительная граница области поиска равна максимальному значению реальной части диэлектрической проницаемости сред слоя плюс значение параметра.

**Imagine Axis Extension** параметр определяет область поиска мод по мнимой оси от минимального значения мнимой части диэлектрической проницаемости сред слоя минус значение параметра до максимального значения этой части плюс значение параметра. В случае **TE** поляризации этот параметр фиксирован и равен единице. В случае **TM** поляризации, если в соответствующем поле стоит галочка, то этот параметр также фиксирован, в противном случае, при обнаружении ошибки в поиске мод, программа автоматически повторяет поиск мод при увеличенном значении

**Imagine Axis Extension** вплоть до максимального значения, определяемого в соответствующем поле.

Если показатели преломления всех сред слоя действительны, то программа применяет альтернативный, более быстрый алгоритм поиска мод и в этом случае параметры:

**Delta Argument, Segment Sub Divisions, Real Axis Extension** и **Imagine Axis Extension** не используются.

FMM опции:

- В случае **TM** поляризации и бинарной металлической решетки высокой проводимости усечение Фурье разложения уравнений Максвелла приводит к возникновению паразитных мод плазмонного типа. Эти моды имеют аномально высокий эффективный показатель преломления и ответственны за так называемые нестабильности метода. Эти моды не присутствуют в спектре мод (ТММ) бинарной слоистой структуры. Если стоит галочка в поле **Neff Filter Level**, то моды, имеющие эффективный показатель преломления, превышающий заданное значение исключаются из распространения в решеточном слое. Тем не менее, эти моды используются при шивании полей на границах раздела. Эта опция может быть использована для подавления так называемых нестабильностей. Детали можно найти в работе [12].
- Если в поле **Max Permittivity Order** стоит галочка, то число Фурье гармоник в разложении прямой и обратной диэлектрической проницаемости фиксируется в соответствии с заданным значением. Эта опция может быть использована для представления плавного профиля изменения диэлектрической проницаемости (см. *Note*).
- Если в поле **Smoothing Walls** стоит галочка, то в представлении профиля прямой и обратной диэлектрической проницаемости вводится специальный переходный слой в виде отрезка синусоиды. Если одна из соседних ячеек имеет длину меньше длины переходного слоя, то в этой ситуации длина переходного слоя принимается равной длине данной ячейки. Эта опция также может быть использована для представления плавного профиля изменения диэлектрической проницаемости (см. *Note*).
- Другие функции панели **Fourier Modes Method Options** позволяют проконтролировать распределение диэлектрической проницаемости, учитываемое при вычислениях.

**Note** Специальные *Permittivity Order* и *Smoothing Walls* FMM опции пока не имеют строгого математического обоснования, поэтому интерпретация результатов, полученных при этих опциях, остается за пользователем.

## ***M* Lamellar Modes (моды слоистой структуры)**

Эта страница предоставляет пользователю возможность рассчитывать только моды слоистой структуры, анализировать эффективные показатели преломления и распределения поля этих мод, а также анализировать интегралы перекрытия мод и коэффициенты матриц рассеяния дифракционной структуры. Большинство функций этой страницы имеют очевидный смысл, и только некоторые из них требуют пояснения:

- **Matrix** контроль позволяет выбирать соответствующий тип коэффициентов (*Перекрытие* или *рассеяние*).
- **Incidence Layer** определяет слой структуры, в котором выбирается мода распространяющаяся от одной из границ раздела сред этого слоя, а **Mode N/M** контроли определяют порядок этой моды. Эффективный показатель преломления моды или его квадрат отображается под **Mode Propagation** контролем.
- **Output Layer** определяет какой слой структуры, граничащий с выбранным выше или совпадающий с ним, содержит “рассеянную” моду порядка **Mode M**.
- **Output** информирует, которая часть (рассеяние *Up* (вверх) или *Down* (вниз)) матрицы рассеяния **Field Coupling N->M coefficient** отражается в соответствующем поле. Если **Incidence Layer** и **Output Layer** совпадают, то *Up* опция означает рассеяние на нижней границе раздела, а опция *Down* соответствует рассеянию на верхней границе раздела сред.
- **Polarization** служит для выбора типа поляризации (присутствует в версиях конической геометрии).
- Клавиша **Save Modes / Save Matrix** дает возможность сохранить в текстовом файле данных таблицу эффективных показателей преломления и эффективных диэлектрических проницаемостей мод для выбранного **Incidence Layer** или сохранить соответствующую четверть таблицы **Overlapping/Scattering** матрицы (выбор определяется состоянием контроля **Modes**).

**Note** Если индекс слоя равен 0 или  $N+1$  (где  $N$  это число слоев структуры), то эти индексы соответствуют среде падения (cover) или подложке (substrate) соответственно.

## **Analysis Dialog (диалог анализа)**

Этот диалог позволяет пользователю анализировать отражение от структуры и прохождение через нее ограниченного Гауссова пучка. При вычислениях используется FFT (быстрое преобразование Фурье) или полюсные функции, найденные при поиске резонанса. Клавиша **Analysis** активна только в случае, когда данные результата представляют собой сканирование по углу падения или, когда был успешно найден резонанс (**Resonance**). Этот диалог включает несколько страниц:

- Главная страница **General** информирует пользователя о геометрии, дает определение полюсных функций и входных параметров. Пользователь имеет возможность

выбирать соответствующие рисунки с помощью клавиши **Picture**. Если данные загружены с внешнего файла, то активируются поля редакции входных параметров. Необходимо заполнить эти поля соответствующими значениями и нажать клавишу **Ok General**. Пользователь может добавить эти параметры в конец файла данных после пустой строки построчно в следующем формате: значение, двойной пробел или табулятор и в конце строки соответствующий спецификатор (Wl, Per, Nc, Ns, Pol).

- Страница **Gauss (FFT)** доступна, только если данные результатов представляют собой сканирование в зависимости от угла падения.
- Страница **Gauss (Pole)** доступна всякий раз, когда предварительно был успешно найден резонанс **Resonance**.

Под страницами расположены три клавиши:

- **Calculate** имеет очевидный смысл. Если процесс вычислений занимает много времени, то пользователь имеет возможность остановить процесс с помощью этой же клавиши, изменив название на **Terminate**.
- **OK** сохраняет состояние диалога и прячет его.
- **Cancel** закрывает диалог.

Здесь же доступны функции управления форматом данных для графики **Graph** и для окна результатов **Result window**. По умолчанию формат данных всегда содержит Power (мощность) опцию.

В зависимости от типа резонанса (одиночный или двойной) становятся доступными **Single Resonance** и **Pole** или **Double Resonance** и **Poles** страницы. На этих страницах приводятся соответствующие параметры резонанса и полюсов. Под этими страницами клавиша **Calculate** заменяется клавишей **Data Window**, которая позволяет сохранять информацию страницы в текстовом файле данных.

**Note** Иногда **Graph** или **Result window** окна недоступны при открытом **Analysis dialog**. В этом случае пользователь может нажать **OK** клавишу, чтобы спрятать диалоговое окно.

### **Gauss (FFT)**

Входные данные пересчитываются с использованием параболической аппроксимации, чтобы соответствовать требованию поля **Number of FFT Points**. Эта величина влияет на угловое разрешение. Падающий Гауссов пучок описывается двумя присущими ему параметрами: **Waist Radius (радиус перетяжки)** и **Defocus (дефокусировка)**, а также внешним параметром – углом падения (**Fixed Beam Angle**), рассчитываемым относительно оси пучка.

Минимальное значение **Waist Radius** определяется диапазоном угла сканирования входных данных: большему диапазону соответствует меньшее возможное значение **Waist Radius**. Максимальное значение **Waist Radius** увеличивается пропорционально **Number of FFT Points**. Величина **Defocus** определяется как расстояние вдоль оси пучка от точки его пересечения с границей раздела среды падения и первого слоя до положения перетяжки пучка. Если перетяжка расположена в среде падения, то знак дефокусировки отрицателен, в противном случае дефокусировка имеет положительный знак.

Пользователю предоставлена возможность выбора нескольких типов отклика структуры на падение Гауссова пучка, определяемых **Output Type** и **Output (Reflection/Transmission)** контролями в виде графика или в окне текстового редактора в форме таблицы в формате,

определяемом *Output Decimal Digits* и *Output (Real; Imagine/Module; Phase)* контролями, расположенными под областью страниц.

Если клавиши *Graph* и *Result Window* активны, то это означает, что результаты вычислений обновлены, в противном случае пользователю необходимо нажать клавишу *Calculate*.

Эта страница включает внутренние проверки вводимых данных на соответствие параметрам входных данных. Этот контроль имеет справочный характер и за пользователем остается ответственность за разумность вводимых данных.

### ***Gauss (Pole)***

На этой странице применено феноменологическое приближение резонансного отклика отражения и прохождения с помощью полюсных функций. Детали пользователь может найти в работе 9 (см. использованные источники во введении).

Пользователь вправе принять решение, какой тип резонанса применим в конкретной ситуации (одиночный или двойной). Остальные функции этой страницы аналогичны функциям страницы *Gauss(FFT)* за одним исключением: эта страница не включает встроенных проверок вводимых параметров.

### ***Optimization Dialog (диалог оптимизации)***

В основе метода оптимизации лежит подход, предложенный Davidon (1959), и в дальнейшем развитый Fletcher и Powell [10]. Метод Davidon - Fletcher - Powell относится к Quasi-Newton методам и также известен как Variable Metrics Method (метод переменной метрики).

При первом старте диалога в него копируется начальная структура соответствующего проекта. Диалог включает три страницы:

- Страница *Variable Parameters (оптимизируемые параметры)* предназначена для задания набора параметров структуры подлежащих оптимизации, а также для задания их стартовых значений. Пользователь может устанавливать стартовые значения исходя из своего желания и интуиции.
- Страница *Criterion Function (целевая функция)* предназначена для задания целевой функции, определяющей конечные мощности дифрагированных волн или угловые положения резонансов при заданных условиях (аргументы). Вторая возможность целевой функции присутствует только в коллинеарных версиях.
- Страница *Optimization (оптимизация)* предназначена для задания параметров процесса оптимизации и его контроля.

Ниже области страниц расположены три клавиши:

- *Export* заменяет структуру в основном окне проекта текущей структурой диалога оптимизации и прячет этот диалог. Только аргументы активных полей текущей точки целевой функции будут экспортированы как параметры структуры основного окна проекта. Это действие также экспортирует остальное содержание всех страниц диалога, которое будет добавлено к текстовому файлу структуры в форме скрытой от пользователя, но доступной с помощью любого внешнего текстового редактора.
- *Ok* прячет данный диалог.

- **Clear** отменяет все изменения в диалогом окне, удаляет соответствующую часть в текстовом файле структуры и закрывает диалог.

**Note** Если диалог оптимизации существует, но скрыт и пользователь открывает его нажимая **Optimize** контроль, то может появиться предупреждающее или подтверждающее диалоговое окно. Предупреждающее диалоговое окно соответствует случаю, когда изменения основного проекта несовместимы с параметрами диалога оптимизации, например, изменено число слоев структуры. Подтверждающее диалоговое окно соответствует случаю, когда изменения основного проекта влияют на результат оптимизации, например, была изменена толщина не варьированного слоя.

## Variable parameters (параметры оптимизации)

Наличие галочки у соответствующего параметра (*Wavelength, Period, Angle (Normal Angle и Plane Angle* в версиях конической геометрии)) означает, что этот параметр будет варьироваться с целью оптимизации **Criterion Function (целевой функции)**. Это также означает, что пользователь может задавать стартовое значение соответствующего параметра. Если в поле параметра нет галочки, то соответствующее поле редакции параметра неактивно и отражает значение этого параметра как аргумента текущей точки **Criterion Function (целевой функции)**. Выше указанные параметры могут устанавливаться в качестве варьироваемых, только если в **Criterion function (целевой функции)** этот параметр имеет одно и то же значение для всех **Criterion points** (точек).

Пользователь может проконтролировать параметры структуры подлежащей оптимизации, используя **Settings Dialog** после операции **Export**.

Среды структуры с совпадающими показателями преломления могут быть объединены в группу, идентифицируемую ее индексом. Для этого необходимо поставить галочку в соответствующем поле **Material Group** контроля. Если в контроле **Material Group** выбрана опция **Add To Group**, то **Group** контроль отражает индекс группы соответствующей выбранному слою (и ячейки для модальных кодов), в то время как **Members** контроль отражает полное число элементов в данной группе. Максимально возможный индекс группы **Group Index** всегда соответствует пустой группе; этот индекс автоматически увеличивается, если выбран первый член группы или уменьшается, если последний член группы удален. Если в контроле **Material Group** выбрана опция **Set group Parameters**, то пользователь получает возможность устанавливать показатель преломления группы как целого и выбирать этот параметр как варьироваемый, в то время как **Member** контроль позволяет инспектировать другие параметры элементов данной группы. При запуске процесса оптимизации все ссылки на каталог материалов в группе сред удаляются.

**Note 1** В процессе оптимизации поля редакции неактивны, однако в них каждую секунду отражаются соответствующие текущие значения. В дополнение, эти значения обновляются немедленно при изменении **Group Index, Layer Index** или <sup>C</sup> **Interface Index**.

<sup>C</sup> **Note 2** *Wavelength, Period, Angle (Normal Angle и Plane Angle* (в версиях конической геометрии) и *Layer Thickness* относятся к параметрам структуры, хранящейся в **Optimization Dialog**, в то время как *Grating Depth (Grating Shift* в расширенном методе) рассчитываются относительно исходных (скопированных в диалог при его открытии) параметров соответствующего проекта. Например, после оптимизации величина *Grating Depth* может быть отрицательной. Это просто означает, что все гармоники в представлении профиля структуры хранящейся в **Optimization Dialog** имеют знак противоположный знаку соответствующих гармоник исходного проекта.

<sup>M</sup> **Note 3** Для заданного слоя сумма длин всех варьируемых ячеек плюс длина последней ячейки остается неизменной. При невозможности выполнения этого условия появляется сообщение об ошибке.

*Bunch of Layers, Thickness* контроли видимы только тогда, когда была включена опция сканирования *Bunch* в исходном проекте использованном при создании Optimization dialog.

## Criterion Function (целевая функция)

Цель оптимизации достичь минимального среднеквадратичного отклонения значений заданных пользователем в целевой функции от вычисленных значений. Пользователь определяет целевую функцию в виде набора (*Number of Points*) совершенно независимых целевых точек. *Point* контроль служит для выбора целевой точки соответствующего индекса. Нажатие правой клавиши мыши, при положении курсора на данном контроле, открывает *Контекстное меню* для редактирования целевых точек.

Пользователю предоставляется два вида целевой функции, т.е. одна функция для дифракционных эффективностей и другая для угловых положений резонансов в структуре. Выбор определяется состоянием контроля *Optimization Type* (присутствует только в коллинеарных версиях).

В целевой функции первого типа каждая целевая точка определяет целевое значение дифракционной эффективности *Value* с учетом весового коэффициента *Weighting Factor* данной точки при заданных значениях дифракционного порядка и среды его распространения (*Diffraction Order* и *Cover/Substrate* распространение). В версиях конической геометрии используется дополнительная характеристика целевой точки – *Output Polarizer* и угол его ориентации *Angle*. Все эти характеристики помещены на панели *Criterion Diffraction Order Power*. Расположенная правее панель *Criterion Arguments* содержит другие параметры. К этим параметрам относятся: тип поляризации, условия падения (*Angle* или *Normal Angle* и *Plane Angle* в версиях конической геометрии), *Wavelength* и период *Period* решетки. Окна редакции соответствующих варьируемых (*Variable parameters*) параметров неактивны.

В процессе оптимизации эти две панели неактивны, однако под левой панелью под надписью *Current Power Value (текущее значение)* пользователь может наблюдать, обновляемые каждую секунду (или немедленно при изменении индекса целевой точки) значения дифракционной эффективности соответствующей волны.

В целевой функции второго типа каждая целевая точка определяет целевое угловое положение резонанса в структуре (положение резонанса может определяться как по максимальному резонансному отражению, так и по максимальному возбуждению волноводной моды). Для целевой функции этого типа показатель преломления среды падения является дополнительным параметром (панель *Criterion Arguments*).

**Note** В процессе оптимизации справа от надписи *Point* может появиться звездочка. Это означает, что для этой целевой точки превышен предел числа итераций при поиске резонанса. В этом случае можно посоветовать выбрать для этой целевой точки альтернативный тип поиска резонанса *Resonance Type*.

## Optimization (оптимизация)

Эта страница позволяет задавать значения параметров, определяющих процесс оптимизации:

- *Iterations in Trial: N Variables plus* контроль определяет полное число итераций в одном цикле. В соответствии с теорией метода оптимизации, в идеальном случае

параболической зависимости целевой функции от переменных оптимизации, процесс сходится после  $N$  итераций, число которых совпадает с числом варьируемых переменных. В большинстве реальных случаев процесс продолжается значительно дольше и скорость сходимости понижается. После заданного числа итераций, программа продолжает процесс в направлении максимального градиента, используя текущие параметры как стартовые.

- **Accuracy (точность)** определяет величину шага при численном нахождении градиента, а также определяет размер многомерной области, в которой целевая функция имеет абсолютный минимум по отношению ко всем варьируемым переменным. Если упомянутое условие выполнено, то процесс оптимизации заканчивается с сообщением “Optimized!”
- **Correction Coefficient** является простым множителем перед целевой функцией. Эта опция полезна, поскольку процесс оптимизации в некоторой степени зависит от абсолютного значения целевой функции.
- **Factor**. По умолчанию этот параметр равен начальному значению детерминанта основной *Hessian* матрицы.
- **Automatic Scale**. По умолчанию одинаковый шаг **Accuracy** применяется для всех переменных оптимизации, однако зависимость целевой функции от переменных может сильно различаться. Если в поле **Automatic Scale** стоит галочка, то программа по окончании цикла итераций анализирует указанные зависимости и стартуем следующий цикл с индивидуальными значениями шага, чтобы уравнивать зависимости. Эта операция также изменяет величину **Correction Coefficient**, имея целью сохранить значение величины **Factor** близким к единице.
- Клавиша **Terminate** останавливает процесс оптимизации, однако достигнутые текущие значения переменных оптимизации могут быть использованы в качестве стартовых в следующей оптимизации.

Под надписью *Mean-square Error (средне квадратичная ошибка)* помещается информация о текущем значении средне квадратичного отклонения текущих значений от значений заданных в целевой функции (усреднение берется с учетом весовых коэффициентов *Weighting factors*).

**Note 1 Automatic Scale** режим не всегда обеспечивает наилучшую сходимость и, кроме того по завершении процесса оптимизации точность результата остается неизвестной. В этом случае можно посоветовать завершить процесс оптимизации с убранный галочкой в поле **Automatic Scale**.

**Note 2** Иногда процесс оптимизации заканчивается в локальном экстремуме. В этом случае можно попытаться повторить оптимизацию при других значения стартовых параметров или с другим значением точности **Accuracy**.

**Note 3** Если варьируемый параметр принимает отрицательное значение и это противоречит физическому смыслу этого параметра, то появляется сообщение об ошибке и процесс оптимизации останавливается.

## Graph (графика)

### Graph Dialog (диалог графики)

В случае сканирования по одному параметру, после нажатия клавиши **Graph** открывается окно *Graph Dialog*. Это окно дает возможность поставить в соответствие колонки таблицы результатов осей графика *X* и *Y*, а также выбрать цвет кривой и ее толщину.

Это диалог также содержит поле **Smooth Phase**. Это поле активно, если выбрана колонка с данными фазы и если в этом поле стоит галочка, то все скачки фазы равные  $2\pi$  будут удалены из графика.

В случае данных для распределения поля структуры, в диалоге появляется дополнительное поле **Add Interfaces**. Если в этом поле стоит галочка, то к кривой добавляются вертикальные линии в точках соответствующих границам раздела сред.

После нажатия клавиши **OK** данный диалог закрывается и открывается окно *Graph*. Имеется несколько независимых окон *Graph* для различных опций сканирования **Scanning of** и **Scanning Direction**, а также для внешних данных. Эти окна являются общими для всех проектов.

Окно *Graph* имеет меню **Edit** включающее следующие опции:

- **Clear All** удаляет все кривые и закрывает окно.
- **Titles** предоставляет возможность редактировать подписи к осям *X* и *Y*.
- **Copy** копирует изображение в *Clipboard*.
- **Save as** сохраняет график в форматах *Bitmap*, *JPEG* и *Windows metafile*.
- **Print**.

Второе меню **Curves** содержит список кривых. Клик мыши на названии кривой открывает диалоговое окно для редактирования свойств кривой (цвет, толщина и название). Выделенная кривая также может быть удалена (клавиша **Delete**) или сохранена в файле данных (при нажатии клавиши с иконкой дискеты открывается соответствующий диалог).

### 3D Graph (трехмерная графика)

В случае сканирования по двум параметрам, после нажатия клавиши **Graph** открывается окно трехмерной графики.

Это окно является общим для всех проектов.

**Edit** меню имеет следующие опции:

- **Titles** предоставляет возможность редактировать подписи к осям *Value* (значение), *Row* (строка) и *Column* (колонка).
- **Copy** копирует изображение в *Clipboard*.
- **Save as** сохраняет график в форматах *Bitmap*, *JPEG* и *Windows metafile*.
- **Print**.

Второе меню **View** (обзор) имеет следующие опции:

- **Front** (спереди)

- **Back** (сзади)
- **Top Color Image** (сверху – цветовые уровни)
- **Node's Hint** (подсказка к узлам)
- **Color Scale** (цветовая шкала)
- **Interfaces** (границы раздела сред)

Смысл **Front**, **Back** и **Top Color Image** позиций очевиден. Если в поле **Node's Hint** стоит галочка, то пользователь, позиционируя курсор на узле, может инспектировать значение в узле и его координаты. Позиции **Color Scale** и **Interfaces** относятся только к **Top Color Image** опции. Позиция **Interfaces** недоступна для внешнего графика.

**Дополнительные обзорные опции (Front и Back):**

- Опция горизонтального вида. Если пользователь удерживает нажатой левую клавишу мыши, а курсор находится в области трехмерной графики, то в этой области появляется вертикальная линия, пересекающая передний угол горизонтальной координатной плоскости. Удерживая клавишу нажатой, пользователь может привязать положение курсора к этой линии (при этом курсор меняет свой вид, а линия исчезает), а затем изменять горизонтальное положение указанного угла координатной плоскости, что эквивалентно вращению графика в горизонтальной плоскости в пределах от -90 до 90 градусов.
- Опция вертикального вида. С помощью правой клавиши мыши, аналогичным образом, пользователь может изменять вертикальное положение дальнего угла указанной координатной плоскости. Это эквивалентно изменению вида в пределах от горизонтального до вертикального.

**Дополнительные обзорные опции (Top Color Image)**

Нажатие левой клавиши мыши в области изображения открывает *PopUp Up Menu* для выбора цветовой шкалы (Голубой-Зеленый-Красный; Черный-Фиолетовый-Голубой-Зеленый-Красный-Белый; Черный-Серый-Белый).

### **Slider Dialog (слайде диалог)**

Этот диалог присутствует только в программах конической геометрии. Открывающий этот диалог контроль активен только в том случае, когда имеются результаты расчетов любого типа. Для результатов сканирования по параметру пользователь имеет возможность экспресс анализа поведения соответствующего отклика структуры в зависимости от состояния поляризации падающей волны и относительно ориентации выходного поляризатора. Для результата с **Fixed Parameters (фиксированные параметры)**, включая распределение поля **Field Calculation**, слайде график имеет зависимость от угла выходного поляризатора. Выходной поляризатор всегда помещен в плоскости перпендикулярной волновому вектору **k** волны, падающей на него. Угол ориентации поляризатора равен углу между **Es** проекцией падающей волны и вектором **E** волны, прошедшей поляризатор.

Под областью контролей, управляющих поляризацией, расположены дополнительные контроли, имеющие очевидное назначение и две клавиши:

- **Ok** прячет Slider Dialog, оставляя доступным графическое окно.

- *Cancel* закрывает Slider Dialog и графическое окно.

## Material (материал)

- Пользователю предоставляется два каталога материалов: основной каталог и каталог пользователя, доступных через диалог материала.
- В соответствующем окне диалога выводится список материалов текущего каталога. *Refractive index* отражает значение показателя преломления материала, с именем выбранным из списка, для длины волны, определяемой на странице *General* и указанной над значением показателя преломления. Пользователь также может открыть окно с зависимостью показателя преломления от длины волны (клавиша *Graph*).
- Если курсор находится в поле списка материалов, то нажатие правой клавиши мыши открывает *Контекстное меню*, имеющее следующие опции:  
*Add Material (добавить материал),*  
*Edit Material (редактировать материал),*  
*Copy Material (копировать материал),*  
*Remove Material (удалить материал)* и  
*Insert Material (вставить материал).*  
 Первые две опции открывают диалоговое окно *Material Edit*.  
 Остальные опции позволяют для удобства пользователя изменять порядок материалов в списке и копировать материалы из одного каталога в другой.  
 Для защиты основного каталога от случайных изменений функция *Edit Material* активна только для каталога пользователя. Для редактирования записи основного каталога скопируйте ее в каталог пользователя и после редактирования скопируйте запись обратно в основной каталог.
- Клавиша *Clear Selection* удаляет ссылку на материал для соответствующей среды страницы *Layers*, сохраняя текущее значение показателя преломления.
- Клавиша *Sort* сортирует список материалов в алфавитном порядке.
- Клавиша *Ok* принимает изменения в диалоге как описано ниже и прячет его.  
 Если в списке выделено название материала, то этот материал будет назначен соответствующей среде, которая будет иметь показатель преломления материала для любой заданной длины волны, в противном случае текущее значение показателя преломления среды будет использовано для всех длин волн.  
 Все изменения, касающиеся материалов, будут сохранены в обоих каталогах материалов.
- *Cancel* отменяет все текущие изменения в диалоге и прячет его.

## Material Editor (правка материала)

В каталоге материалов используются три модели, описывающие спектральную зависимость показателя преломления: *Drude*, *Schott*, и *Таблица*. В Моделях *Drude* и в *Таблице* используются комплексные показатели преломления, в то время как в *Schott* модели только действительные.

Модель *Drude* использует только два параметра. Показатель преломления  $n$  находится по следующей формуле:

$$n = \sqrt{1 + \frac{-C_2 + i \lambda C_1 C_2}{C_1^2 + \lambda^{-2}}}$$

Модель *Schott* использует шесть параметров. Эта модель предполагает, что мнимая часть показателя преломления равна нулю и дает значение  $n$  в соответствии с формулой:

$$n = C_1 + C_2 \lambda^2 + C_3 \lambda^{-2} + C_4 \lambda^{-4} + C_5 \lambda^{-6} + C_6 \lambda^{-8}$$

Для *Таблицы* необходима по крайней мере одна точка данных. При наличии двух точек данных в Таблице используется линейная аппроксимация показателя преломления, если число точек превышает две, то применяется параболическая аппроксимация.

По умолчанию каталог материалов содержит данные для вычисления показателя преломления воздуха по специальной формуле:

$$n = C_1 + C_2 + \frac{C_3}{C_4 - \lambda^{-2}} + \frac{C_5}{C_6 - \lambda^{-2}}$$

Единицы измерения коэффициентов всех моделей, описанных выше, микрометры.

Следующие позиции диалогового окна требуют пояснения:

- Поля редакции длины волны **Minimum** и **Maximum** определяют диапазон длин волн, в котором применимы формулы и данные *Таблицы*. За пределами этого диапазона показатель преломления устанавливается равным показателю преломления для ближайшей граничной длины волны. В случае *Таблицы* поля **Minimum** и **Maximum** и отражают минимальную и максимальную длину волны представленную в *Таблице*.
- Клавиша **Convert** предоставляет пользователю возможность преобразовать данные *Таблицы* в новую запись материала, в которой показатели преломления рассчитываются в соответствии с *Drude* или *Schott* моделями. В случае *Drude* модели находятся коэффициенты для каждой точки *Таблицы* с последующим усреднением. В этом случае *Таблица* должна содержать по крайней мере одну точку. В случае *Schott* модели коэффициенты находятся в предположении минимального средне квадратичного отклонения показателей преломления из модели и табличных значений. В этом случае *Таблица* должна содержать по крайней мере шесть точек.
- **Ok** применяет все изменения в этом диалоге и закрывает его. Данные *Таблицы* автоматически сортируются по длине волны.
- **Cancel** отменяет все изменения в диалоге и закрывает его.

Данный диалог был использован при составлении основного каталога материалов.

При этом выборочные значения показателей преломления брались из следующих источников информации:

1. Из справочника Физические величины, ЭНЕРГОАТОМИЗДАТ, Москва (1991)  
Ссылка в каталоге: (Table Ru) и (Schott Ru)

2. Из GratingSolver 4.20 Demo, <http://www.gsolver.com>  
Ссылка в каталоге: (Table GS) и (Drude GS)
3. С <http://www.luxpop.com/#index%20of%20refraction%A0>  
Ссылка в каталоге: (Table)
4. Из статьи Applied Optics Vol. 32 No. 28 p.5587 (1993)  
Ссылка в каталоге: Film (Table)