

MÔ PHỎNG MÀNG CHỐNG PHẢN XẠ AR CÓ CẤU TRÚC NGHIÊNG BẰNG THUẬT TOÁN GENETIC

Lê Vũ Tuấn Hùng⁽¹⁾, Hồ Văn Bình⁽¹⁾, Giang Văn Phúc⁽¹⁾, Dương Ai Phương⁽¹⁾,
Lê Sơn Hải⁽²⁾, Huỳnh Thành Đạt⁽³⁾

(1) Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM

(2) Trường Đại học Sư phạm Kỹ thuật Tp.HCM

(3) ĐHQG-HCM

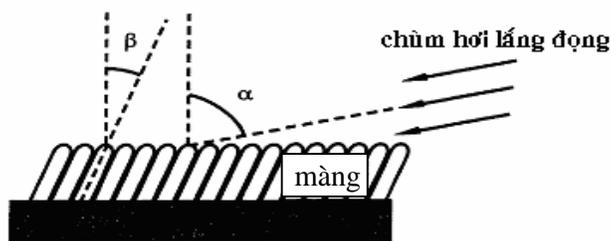
(Bài nhận ngày 13 tháng 08 năm 2007, hoàn chỉnh sửa chữa ngày 05 tháng 06 năm 2008)

TÓM TẮT: Màng có cấu trúc nghiêng (GLAD) đang được các nhà khoa học rất quan tâm trong những năm gần đây. Đặc biệt các màng GLAD có cấu trúc zigzag có tính chất quang học gần giống như màng đa lớp, hơn nữa với phương pháp chế tạo màng GLAD cũng khá đơn giản nên chúng đang được nghiên cứu để thay thế màng đa lớp cho các ứng dụng như các màng AR hay kính lọc... Trong báo cáo này, chúng tôi đã sử dụng thuật toán di truyền Genetic để mô phỏng và tính toán các thông số tối ưu cho màng GLAD ứng dụng để tạo màng AR trong vùng khả kiến. Việc viết chương trình mô phỏng là công việc thiết yếu không thể thiếu và nó sẽ hỗ trợ rất nhiều cho công việc chế tạo màng sau này.

Key words: cấu trúc nghiêng (GLAD), thuật toán Genetic (Genetic algorithm), màng chống phản xạ (AR), lai tạo, đột biến.

I. GIỚI THIỆU

Trong những năm gần đây, kỹ thuật chế tạo màng mỏng đã đạt được rất nhiều tiến bộ. Nhiều loại màng mỏng với các phương pháp chế tạo vật lý cũng như hóa học khác nhau đã được nghiên cứu nhằm đáp ứng cho các ứng dụng khác nhau trong khoa học kỹ thuật cũng như trong đời sống. Tuy nhiên hầu hết các phương pháp đều tạo ra các loại màng có cấu trúc bình thường (cấu trúc thẳng). Cùng với sự phát triển ngày càng cao của khoa học kỹ thuật, hiện nay một kỹ thuật tạo màng mới vừa ra đời và được sự quan tâm rất nhiều của các nhà khoa học, đó là kỹ thuật tạo màng có cấu trúc nghiêng (GLAD). Kỹ thuật này có thể chủ động điều khiển thay đổi cấu trúc của màng và tạo các màng có độ xốp vừa phải (semi-porous). Màng được tạo khi góc tới của chùm vật liệu lắng đọng từ bia (target) tới để có một góc nghiêng nhất định, như trong hình 1.



Hình 1. Sự phát triển cấu trúc nghiêng của màng

Mối liên hệ giữa góc tới α của chùm vật liệu lắng đọng với góc nghiêng của các cấu trúc cột tinh thể β có thể được diễn tả qua công thức thực nghiệm [1]:

$$2 \tan b = \tan a \tag{1}$$

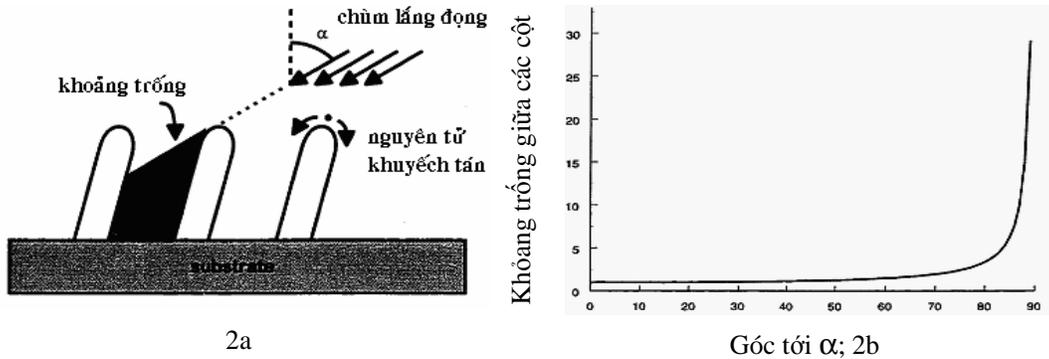
Hoặc công thức:

$$b = 1 - a \sin \left[\frac{1 - \cos a}{2} \right] \tag{2}$$

Mật độ của màng:

Từ công thức (1) và (2) ở trên, ta nhận thấy cấu trúc nghiêng của màng phụ thuộc rất nhiều vào góc tới α , dẫn đến mật độ màng cũng bị phụ thuộc rất nhiều vào góc tới α . Người ta nhận thấy khi góc tới α càng lớn (càng xiên), càng xuất hiện nhiều khoảng trống nằm giữa các cấu trúc cột và tạo nên màng có độ xốp cao. Từ đó dẫn đến chiết suất của màng giảm. Việc tạo thành các khoảng trống có thể được minh họa qua hình 2.

Về mặt kỹ thuật, để tạo các chùm hơi lắng đọng của vật liệu có góc tới thay đổi, thay vì thay đổi hướng tới của chùm vật liệu, người ta cho để quay thông qua một bộ phận điều khiển đế (hình 3). Ngoài ra, chúng ta còn có thể tạo ra màng có các cấu trúc nghiêng theo nhiều tầng (lớp) liên tiếp, mỗi lớp có những độ nghiêng khác nhau. Chúng có thể tạo nên những cấu trúc hình xoắn ốc, hình zigzag, hình cầu thang (staircase)...



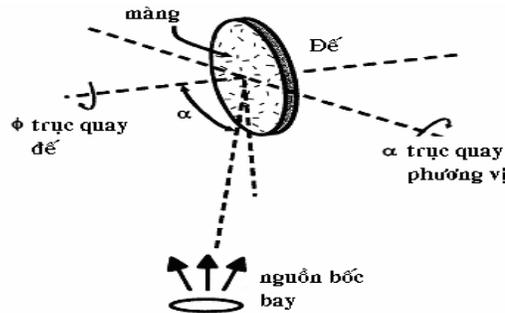
2a

Góc tới α ; 2b

Hình 2. (a) Sự hình thành khoảng trống giữa các cột nghiêng

(b) Khoảng trống giữa các cột nghiêng thay đổi theo góc tới α từ kết quả thực nghiệm Tait [2]

Qua các cấu trúc trên, màng có chiết suất thay đổi liên tiếp qua mỗi lớp. Khi xét về tính chất quang, việc này tương tự như sự thay đổi chiết suất qua mỗi lớp màng trong màng đa lớp. Do tính chất tương tự này, mà màng cấu trúc nghiêng được dùng để thay thế màng đa lớp trong việc chế tạo các loại màng quang học như màng chống phản xạ AR, kính lọc (filter)...



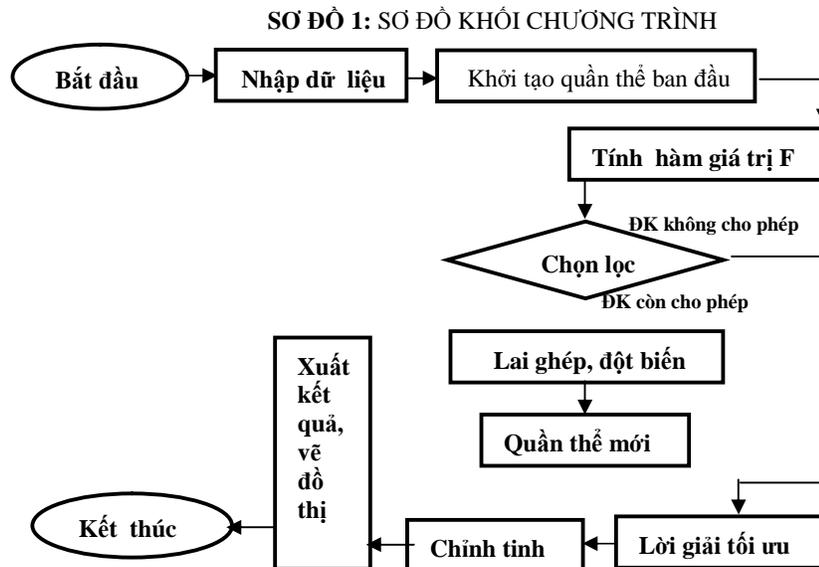
Hình 3. Sơ đồ quay đế

Hầu hết các vật liệu đều thích hợp cho kỹ thuật GLAD: như kim loại, oxyt kim loại, các chất florit, và các chất bán dẫn. Trong khuôn khổ bài báo này, chúng tôi chú trọng vào 2 chất điện môi là TiO_2 và MgF_2 để tính toán mô phỏng màng chống phản xạ AR trong vùng khả kiến.

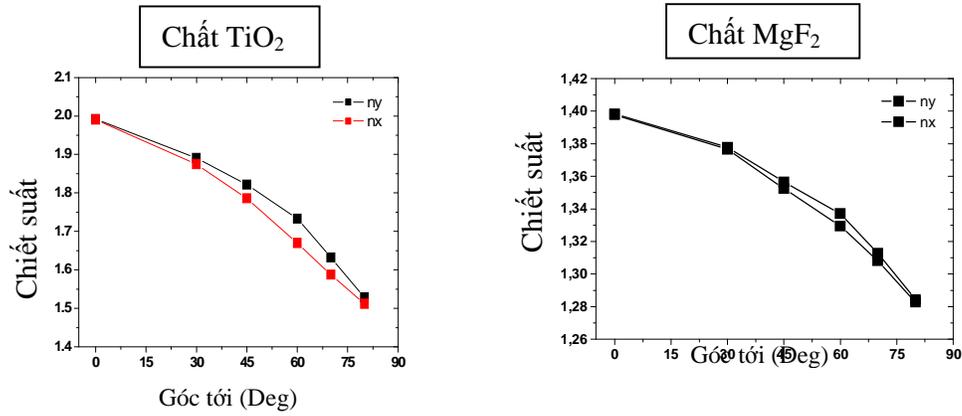
2.THỰC NGHIỆM

Như đã trình bày trong phần giới thiệu, màng có cấu trúc nghiêng (đặc biệt là màng có cấu trúc zigzag) có nhiều lớp nghiêng theo dạng zigzag, đã tạo ra nhiều lớp có chiết suất thay đổi xen kẽ nhau. Nếu chúng ta áp dụng tính chất thay đổi chiết suất liên tục này để chế tạo màng quang AR thì rất tiện lợi. Tuy vậy, cũng như đối với màng đa lớp, việc chọn số lớp tối ưu là bao nhiêu, cũng như chiết suất và độ dày cho từng lớp là một công việc rất khó giải quyết trong thực tế, vì số lời giải cho tổ hợp này là rất lớn. Đòi hỏi phải có sự can thiệp của kỹ thuật mô phỏng để tìm ra được lời giải tối ưu. Vì lý do trên, phần thực nghiệm trong bài báo này chúng tôi đã tiến hành mô phỏng tính toán các thông số tối ưu cho màng có cấu trúc nghiêng: như tính độ nghiêng của từng lớp màng, độ dày từng lớp nghiêng, chiết suất của chúng cũng như số lớp tối ưu để tạo ra được các loại màng chống phản xạ AR trong vùng khả kiến.

Việc tính toán mô phỏng được chúng tôi áp dụng thuật giải Genetic và viết bằng chương trình matlab. Hai chất điện môi được chúng tôi sử dụng trong chương trình mô phỏng này là TiO_2 và MgF_2 . Áp dụng thuật toán di truyền để giải bài toán mô phỏng màng chống phản xạ AR như trong sơ đồ 1.

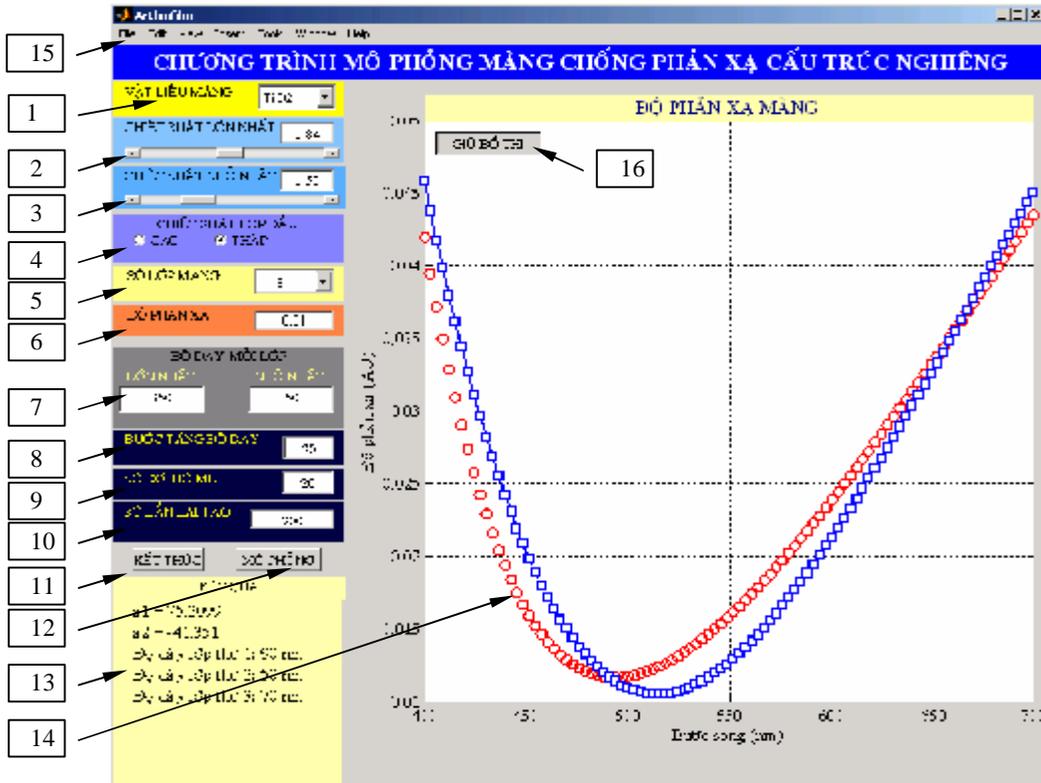


Dữ liệu nhập vào để mô phỏng chương trình là các dữ liệu thực nghiệm từ [2], trong đó thể hiện mối liên hệ giữa góc tới của chùm lăng động với chiết suất của lớp nghiêng. Tham số chiết suất liên hệ với độ nghiêng của cấu trúc màng bằng phương pháp xấp xỉ bình phương tối thiểu với đường cong chiết suất thực nghiệm (hình 4) và kết quả thu được từ chương trình xấp xỉ (cũng do chúng tôi viết bằng ngôn ngữ matlab) được trình bày trong hình 6.



Hình 4. Mối liên hệ giữa góc tới với chiết suất của màng TiO₂ và MgF₂ [2]

Để tạo dễ dàng cho người sử dụng, chúng tôi đã viết chương trình giao diện như trong hình 5 như sau:



Hình 5. Giao diện chương trình mô phỏng màng chống phản xạ đa lớp cấu trúc nghiệm

2.1. Nhập dữ liệu

Sau khi khởi động chương trình, chương trình đòi hỏi chúng ta nhập một số thông số ban đầu:

Chọn một chất điện môi muốn chế tạo cấu trúc nghiêng: TiO_2 hoặc MgF_2 . (nút lệnh 1)

Chọn chiết suất cao và chiết suất thấp cho các lớp nghiêng.....(thanh trượt 2 và 3)

Vùng bước sóng hoạt động được chọn nằm trong vùng khả kiến.

Chọn chiết suất cho lớp màng đầu tiên (tùy chọn 4).

Nhập số lớp màng (cửa sổ 5).

Nhập độ phản xạ mong muốn (cửa sổ 6).

Chọn bề dày lớn nhất, nhỏ nhất, đơn vị nm (ô nhập liệu 7).

Bước tiến độ dày của lớp nghiêng, đơn vị nm (ô nhập liệu 8).

Số cá thể trong quần thể ban đầu (ô nhập liệu 9).

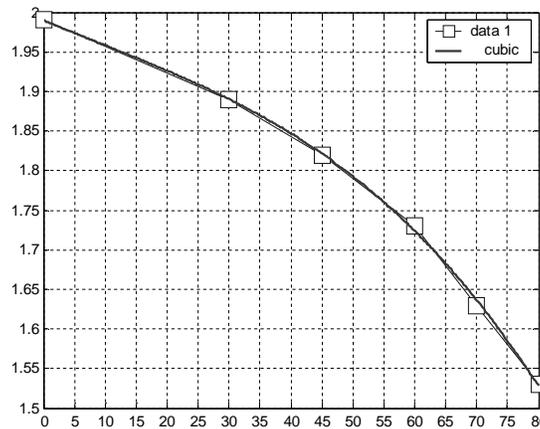
Số thế hệ lai tạo (ô nhập liệu 10).

Ấn nút mô phỏng (nút 12), chương trình sẽ tính toán và hiển thị kết quả số trên cửa sổ 13

Kết quả trực quan bằng đường cong phản xạ hiển thị trên cửa sổ 14.

Một thực đơn (15) được cài đặt để có thể hiệu chỉnh các chi tiết của đường cong sao cho trực quan và phân biệt.

Đặc biệt nút chọn giữ (16) được cài đặt cho phép lưu đồ thị của nhiều lần mô phỏng để dễ dàng so sánh, giải đoán và trích xuất vào báo cáo.



Hình 6: Đường cong xấp xỉ chiết suất theo độ nghiêng sử dụng đa thức gần đúng bậc 3

$$n_{\text{TiO}_2} = -8,19 \cdot 10^{-7} \cdot \alpha^3 + 4,597 \cdot 10^{-5} \cdot \alpha^2 - 4,3 \cdot 10^{-3} \cdot \alpha + 1,995 \quad (3)$$

2.2. Tạo nguồn cho đời cha mẹ (khởi tạo quần thể ban đầu)

Khởi đầu ta tạo ba ma trận ban đầu ngẫu nhiên tương ứng với 3 cá thể ban đầu. Sau đó, ta tính hàm mục tiêu F của các cá thể này. Trong đó, ta chọn ra cá thể ứng với giá trị F lớn nhất (nghĩa là cá thể kém thích nghi nhất) và thay thế nó bởi một ma trận ngẫu nhiên (cá thể) khác. Rồi lặp lại việc loại bỏ cá thể kém thích nghi nhất và phát sinh một cá thể mới.

2.3. Tính giá trị hàm mục tiêu F

Hàm mục tiêu F ở đây, chúng tôi dùng phương pháp tối thiểu bình phương. Đối với màng chống phản xạ:

$$F(x) = \left[\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (R_0(\lambda_k) - R(x, \lambda_k))^2 \right]^{\frac{1}{2}} \tag{4}$$

Trong đó:

x: vector biến thiết kế thay đổi theo độ dày; $R_0(\lambda_k)$: giá trị phản xạ mong muốn tại bước sóng λ_k ; $R(\lambda_k)$: giá trị phản xạ tính toán được tại λ_k ; n: số điểm thay đổi bước sóng. Giá trị phản xạ R được tính toán theo lý thuyết ma trận đã được chứng minh trong các báo cáo trước đây.

2.4. Lai ghép và đột biến

2.4.1. Lai ghép

Trong chương trình chúng tôi sử dụng quy tắc lai ghép đơn điểm. Từ 2 cá thể tốt nhất đã được chọn từ đời cha mẹ, ta tiến hành quá trình lai ghép chúng với nhau theo từng lớp tương ứng như mô tả trong ví dụ dưới đây. Sau mỗi lần lai ghép ta lại được 4 cá thể mới ứng với 4 giá trị F mới. Trong 6 giá trị F (2 F của cá thể đời cha mẹ và 4 F của đời con) ta tìm 2 giá trị F nhỏ nhất ứng với 2 cá thể tốt nhất làm cá thể cha mẹ tiếp theo để lai ghép (sinh sản) tiếp.

Giả sử ta được 2 cá thể tốt nhất với gen như sau:

0	0	1	0	0	0	1	0
0	1	0	1	0	0	1	0
1	0	1	0	0	1	0	1

Cá thể (1)

1	1	0	0	1	0	1	0
0	0	1	1	0	1	0	1
1	1	1	0	1	1	0	0

Cá thể (2)

Từ 2 cá thể tốt nhất có thể lai tạo ra 4 cá thể con ứng với một lớp (chẳng hạn lớp thứ 1) và tại một vị trí hoán vị xác định (chẳng hạn vị trí số 3) như sau:

1	1	0	0	0	0	1	0
0	1	0	1	0	0	1	0
1	0	1	0	0	1	0	1

Cá thể (3)

0	0	1	0	1	0	1	0
0	0	1	1	0	1	0	1
1	1	1	0	1	1	0	0

Cá thể (4)

0	0	1	0	1	0	1	0
0	1	0	1	0	0	1	0
1	0	1	0	0	1	0	1

Cá thể (5)

1	1	0	0	0	0	1	0
0	0	1	1	0	1	0	1
1	1	1	0	1	1	0	0

Cá thể (6)

Bên cạnh việc tạo cá thể mới bằng phương pháp lai ghép ta còn dùng phương pháp đột biến.

2.4.2.Đột biến

Đột biến là lật (tức thay đổi) giá trị tại vị trí ngẫu nhiên trong gen và xảy ra với tần suất rất thấp.

Ví dụ: vị trí đột biến là hàng 2 cột 3 của A thì ta được A' có gen sau:

0	0	1	0	1	0	1	0
0	1	0	1	0	0	1	0
1	0	1	0	0	1	0	1

0	0	1	0	1	0	1	0
0	1	1	1	0	0	1	0
1	0	1	0	0	1	0	1

Tuy gen A' chỉ thay đổi có một giá trị so với gen A nhưng ảnh hưởng của nó đến toàn bộ cá thể là rất lớn.

2.5.Chính tinh

Tuy ta đã có được kết quả tốt nhất theo GAs nhưng để phát huy triệt để khả năng của GAs thì ta cần có bước chính tinh. Quá trình chính tinh được thực hiện như sau:

Sau khi ta có được kết quả tốt nhất của quá trình tiến hoá thì ta lấy kết quả đó làm tròn (do kết quả là số không nguyên), tiếp đó ta thêm vào hay bớt đi một vài đơn vị độ dày (nm) để tìm tối ưu ở lân cận kết quả trên. Nếu nó còn cho kết quả tốt hơn được thì ta tiếp tục cho thay đổi độ dày đến khi nó không cho kết quả tốt hơn hoặc sau khi thay đổi hết lượt độ dày các lớp thì ta chấm dứt quá trình chính tinh. Rồi xuất ra độ dày sau cùng.

** Kết quả tính toán được trả về theo 02 dạng*

Ấn nút mô phỏng (nút 12), chương trình sẽ tính toán và hiển thị kết quả số trên cửa sổ 13.

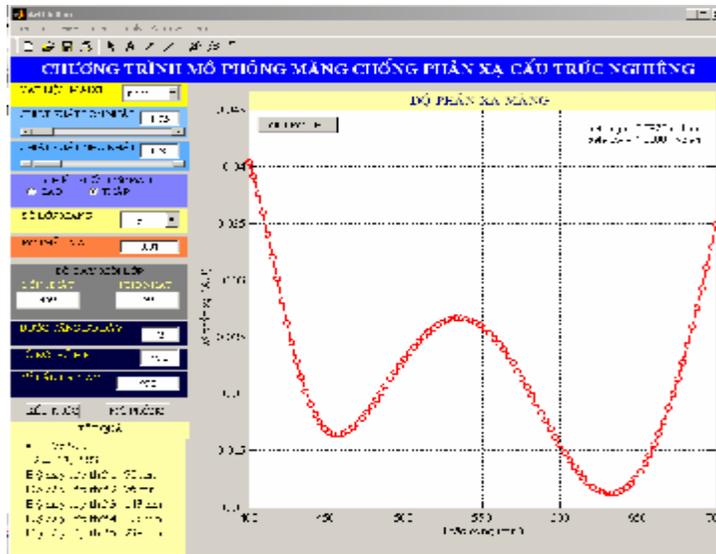
3.KẾT QUẢ VÀ BÀN LUẬN

Sau khi chạy chương trình mô phỏng được mô tả ở trên, chúng ta sẽ thu được các kết quả theo yêu cầu cũng như các thông số đầu vào. Ví dụ chúng ta trở lại kết quả thu được ở hình 5, với các thông số ban đầu của màng có cấu trúc nghiêng 3 lớp TiO₂ như trong hình, chúng ta thu được phổ phản xạ khá thấp khoảng 1% tại bước sóng 500 nm và độ dày của từng lớp là 90/50/70 nm. Kết quả trực quan bằng đường cong phản xạ hiển thị trên cửa sổ 14.

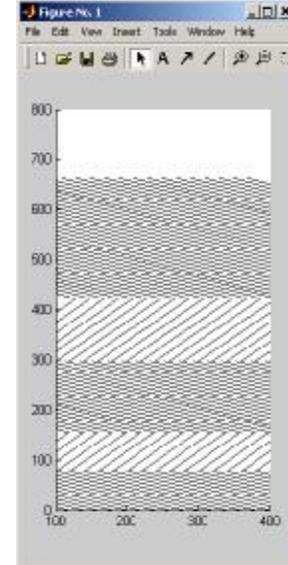
Cũng với chương trình đã mô phỏng ở trên, chúng ta cũng có thể chạy chương trình với màng có cấu trúc nghiêng 5 lớp như trong hình 7 với các thông số như sau:

Giả sử chúng ta chọn chiết suất cao là 1.75, chiết suất thấp là 1.58. Chương trình tính sẽ tính được góc xiên chùm hạt tới ứng với chiết suất cao do là $\alpha_{\text{high}} = 1.1170$ radian, và góc xiên thứ vật liệu $\beta_{\text{high}} = 0.79780$ radian. Tương tự góc xiên chùm hạt tới ứng với với chiết suất thấp là $\alpha_{\text{low}} = 1.3788$ radian và góc xiên thứ vật liệu $\beta_{\text{low}} = 1.21$ radian.

Từ đó, chương trình Genetic sẽ tính toán tiếp được các bề dày tối ưu cho mỗi lớp lần lượt là: 78, 76, 143, 172, 238 nm và kết quả phổ phản xạ R được mô tả như trong hình 7.



Hình 7a



Hình 7b

Hình 7: (a) giao diện mô phỏng màng 5 lớp. (b) mô phỏng thứ vật liệu màng.

Từ hình 7, ta nhận được phổ phản xạ khá thấp (khoảng 2%) trong miền bước sóng 450–650 nm. Nếu so sánh kết quả thu được từ màng có cấu trúc nghiêng với màng đa lớp (cũng do chúng tôi viết chương trình trước đây [3]), ta nhận thấy, tuy chúng không tốt bằng kết quả màng đa lớp nhưng về mặt thực nghiệm, cũng như hiệu quả kinh tế thì nó tiện lợi hơn hẳn. Vì màng có cấu trúc nghiêng chỉ sử dụng duy nhất 1 chất.

Các kết quả mô phỏng trong chương trình này sẽ tạo cho chúng ta rất nhiều thuận lợi trong thực nghiệm chế tạo màng chống phản xạ có cấu trúc nghiêng.

4.KẾT LUẬN

Chúng tôi đã dùng thuật toán Genetic mô phỏng thành công màng chống phản xạ AR có cấu trúc nghiêng. Chương trình được chúng tôi viết cho hai đối tượng là MgF_2 và TiO_2 và có thể mở rộng cho các vật liệu khác trong tương lai. Ngoài ra, chúng tôi viết chương trình dưới dạng giao diện đồ họa nên tạo rất nhiều thuận lợi cho người sử dụng. Các kết quả thu được trong chương trình này có thể được áp dụng chế tạo các màng trong thực nghiệm.

SIMULATION ANTI- REFLECTION (AR) THIN FILM FROM GLANCING ANGLE DEPOSITION BY GENETIC ALGORITHMS

Le Vu Tuan Hung⁽¹⁾, Ho Van Binh⁽¹⁾, Giang Van Phuc⁽¹⁾, Duong Ai Phuong⁽¹⁾
Le Son Hai⁽²⁾, Huynh Thanh Dat⁽³⁾

(1) University of Natural Sciences, VNU-HCM

(2) University of Technical Education, HCMc; (3) VNU-HCM

ABSTRACT: *In recent years, glancing angle deposition technic (GLAD) is interested by many scientists. GLAD can fabricate many thin films which are used in various applications. GLAD thin films with zigzag structure have the same optical characteristics with multi-layer thin films, so we can use them to fabricate optical thin films, such as AR or filters. In this report, basing on GLAD, we use Genetic algorithms to simulate AR thin film in visible region with TiO₂ and MgF₂ materials. The results from our simulating program can create a lot of advantages in studying optical thin films.*

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. Kevin Robbie, *Glancing Angle Deposition*, PhD.Thesis, Department of Electrical and Engineering, Edmonton University, Alberta, Canada, (1998).
- [2]. Chang Kwon Hwango, *Optical and structural properties of optical thin film various columnar microstructures*, Department of Physics, Inha University, Korea, (2006).
- [3]. Le Vu Tuan Hung, *Designing the optical dielectric multilayer thin film by genetic algorithms*, gởi đăng tạp chí communication Physics, V.16, No.4, 2006, pp.244-251.
- [4]. Hoàng Kiếm, Lê Hoàng Thái, *Thuật giải di truyền cách giải tự nhiên các bài toán trên máy tính*, NXB Giáo dục, (2001).
- [5]. Hoàng Kiếm, *Giải một bài toán trên máy tính như thế nào (tập 1)*, NXB Giáo dục, (2003).