

РОЗРОБЛЕННЯ ФІЛЬТРІВ УЛЬТРАФІОЛЕТУ З ВИКОРИСТАННЯМ МЕТОДУ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ

**В. Б. Капустяник^{1,2}, Б. І. Турко¹, Ю. В. Рудик¹, В. П. Рудик²,
А. П. Васьків², Л. Р. Топоровська¹**

¹Львівський національний університет імені Івана Франка,
м. Львів, Україна

²Науково-технічний і навчальний центр низькотемпературних досліджень
Львівського національного університету імені Івана Франка,
м. Львів, Україна

Надійшла до редакції 23.12.2016

За допомогою методу математичного моделювання визначено технологічний режим виготовлення фільтру ультрафіолетового випромінювання на основі плівки ZnO з оптимальними оптико-спектральними характеристиками.

Ключові слова: оксид цинку, фільтр ультрафіолетового випромінювання, коефіцієнт пропускання, математичне моделювання.

РАЗРАБОТКА ФИЛЬТРОВ УЛЬТРАФИОЛЕТА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

**В. Б. Капустяник, Б. И. Турко, Ю. В. Рудык, В. П. Рудык,
А. П. Васькив, Л. Р. Топоровская**

С помощью метода математического моделирования определен технологический режим изготовления фильтра ультрафиолетового излучения на основе пленки ZnO с оптимальными оптико-спектральными характеристиками.

Ключевые слова: оксид цинка, фильтр ультрафиолетового излучения, коэффициент пропускания, математическое моделирование.

DEVELOPMENT OF THE ULTRAVIOLET FILTERS USING THE METHOD OF MATHEMATICAL MODELING

**V. B. Kapustianyk, B. I. Turko, Y. V. Rudyk, V. P. Rudyk,
A. P. Vaskiv, L. R. Toporovska**

Using the mathematical modeling method there was proposed the technological mode of the ultraviolet filter manufacturing on the basis of ZnO film with optimized optical and spectral characteristics.

Keywords: zinc oxide, ultraviolet filter, transmission coefficient, mathematical modeling.

ВСТУП

Оксид цинку — прямозонний напівпровідник з шириною забороненої зони 3,37 eV за кімнатної температури [1]. Тонкі плівки ZnO, зокрема, як фільтри ультрафіолетового випромінювання, антикорозійні і просвітлюючі покриття, хвилеводи, прозорі провідні електроди, тощо, широко використовуються при виготовленні оптичних, оптоелектронних, акустооптичних та інших пристроїв [2–4].

Мета даної роботи — розроблення на основі оксиду цинку тонкоплівкового фільтру ультрафіолетового випромінювання

з максимальною прозорістю у видимій ділянці спектра довжин хвиль світла (приклад використання — сонцезахисні окуляри). Коефіцієнт пропускання при 350 нм не повинен перевищувати 25 %, а в максимумі спектральної характеристики у видимому діапазоні має складати не менше 90 %. При розробленні технологічного процесу отримання плівок методом високочастотного (ВЧ) магнетронного розпилення необхідно враховувати вплив різноманітних факторів, таких як: температура підкладки; склад і тиск робочого газу; потужність генератора ВЧ коливань; час розпилення; величина індукції

магнітного поля; відстань від мішені до підкладки; час, середовище і температура відпалу. Усі ці параметри впливають на величину коефіцієнта пропускання плівок. Тому, для мінімізації числа експериментів доцільно використати метод математичного моделювання [5–8].

ЕКСПЕРИМЕНТ

Тонкі плівки оксиду цинку отримували методом високочастотного (ВЧ) магнетронного розпилення мішені зі спресованого порошку ZnO марки ХЧ на скляних підкладках фірми «Fisher Scientific» з великою оптичною прозорістю (край поглинання — при 280 нм) в атмосфері робочого газу аргону за тиску 0,1 Па, потужності генератора ВЧ коливаль 100 Вт, відстані від мішені до підкладки 60 мм та індукції магнітного поля 0,1 Тл. Плівки ZnO осаджували за різних температур підкладки протягом різних проміжків часу.

Відпал плівок на повітрі здійснювався протягом 1 год. в керамічній муфельній електропечі «SNOL 0,2 / 1250» (Литва).

Спектри оптичного поглинання вимірювались за кімнатної температури спектрофотометром «Specord M-40» (ФРН).

РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХНЕ ОБГОВОРЕННЯ

Надзвичайно широке використання в математичному моделюванні експериментів знаходять моделі у вигляді алгебраїчних поліномів [5–8]. Їх будують за результатами експериментів, тобто визначають вибіркові оцінки коефіцієнтів $b_0, b_i, b_{ij}, b_{ii}, \dots$:

$$Y = b_0 + \sum b_i x_i + \sum b_{ij} x_i x_j + \sum b_{ii} x_i^2 + \dots, \quad (1)$$

де Y — параметр оптимізації; x_i, x_j — фактори, які визначають технологічний процес.

Виберемо параметром оптимізації відношення:

$$Y = (\tau_{45} + \tau_{75}) / (\tau_{30} + \tau_{38}), \quad (2)$$

де $\tau_{45}, \tau_{75}, \tau_{30}, \tau_{38}$ — пропускання плівки на довжинах хвиль 450, 750, 300 і 380 нм, відповідно.

В цій роботі вивчався вплив наступних параметрів: T_n — температури підкладки, T — часу розпилення, $T_{відп}$ — температури відпалу.

Для отримання оптимального значення функції Y використовувався метод «крутого сходження». При цьому використовувалася така модель [5–7]:

$$Y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3 + b_{123} x_1 x_2 x_3. \quad (3)$$

Виберемо основні рівні: $T_n = 250$ °С; $T = 20$ хв; $T_{відп} = 300$ °С; рівні варіації для факторів, котрі розглядаються: $T_n = 100$ °С; $T = 10$ хв; $T_{відп} = 50$ °С.

Для вибраної моделі нам необхідно провести $N = 2^3 = 8$ дослідів. Матриця повного експерименту буде мати вигляд, представлений в табл. 1. Абсолютні значення параметрів вказані в табл. 2.

Використовуючи результати експериментів, проведених за вказаних умов, проводимо розрахунок коефіцієнтів регресії за методом найменших квадратів [5–7].

Таблиця 1

Матриця повного факторного експерименту

№	x_1	x_2	x_3	$x_1 x_2$	$x_1 x_3$	$x_2 x_3$	$x_1 x_2 x_3$	Y
1	+	+	+	+	+	+	+	1,89
2	–	+	+	–	–	+	–	2,19
3	–	–	+	+	–	–	+	1,64
4	–	+	–	–	+	–	+	2,14
5	+	+	–	+	–	–	–	1,89
6	+	–	–	–	–	+	+	1,29
7	+	–	+	–	+	+	–	1,36
8	–	–	–	+	+	+	–	1,61

**Матриця повного факторного експерименту,
заповнена абсолютними значеннями факторів**

№	$T_{п}, ^\circ\text{C}$	$T, \text{хв.}$	$T_{\text{відп}}, ^\circ\text{C}$	Y
1	350	30	350	1,89
2	150	30	350	2,19
3	150	10	350	1,64
4	150	30	250	2,14
5	350	30	250	1,89
6	350	10	250	1,29
7	350	10	350	1,36
8	150	10	250	1,61

В результаті проведених досліджень ми отримали наступне рівняння для плівок ZnO, відпалених на повітрі:

$$\begin{aligned}
 Y = & 1,751 - 0,144 \left(\frac{T_{п} - 250}{100} \right) + 0,276 \left(\frac{T - 20}{10} \right) + \\
 & + 0,019 \left(\frac{T_{\text{відп}} - 300}{50} \right) + 0,006 \left(\frac{T_{п} - 250}{100} \right) \left(\frac{T - 20}{10} \right) + \\
 & + 0,334 \left(\frac{T - 20}{10} \right) \left(\frac{T_{\text{відп}} - 300}{50} \right) - \\
 & - 0,011 \left(\frac{T_{п} - 250}{100} \right) \left(\frac{T - 20}{10} \right) \left(\frac{T_{\text{відп}} - 300}{50} \right).
 \end{aligned} \quad (4)$$

Перед тим, як перейти до методу «крутого сходження» необхідно перевірити адекватність моделі. Використаємо для цієї мети критерій Фішера [5–8]. Наприклад, модель (1) може бути неадекватною через дві причини: внаслідок помилки експерименту чи непридатності моделі.

Однорідність дисперсій отриманих значень параметра оптимізації ми перевіряли, використовуючи критерій Кохрена [5–8]:

$$G = \frac{S_{\text{max}}^2}{\sum_{i=1}^8 S_i^2}, \quad (5)$$

де S_{max}^2 — максимальна дисперсія експериментальних значень, а $\sum_{i=1}^8 S_i^2$ — сума усіх дисперсій.

Для визначення значень S_i^2 і S_{max}^2 було повторно проведено вісім дослідів за умов,

вказаних в табл. 2. Значення S_i рівне половині різниці відповідних параметрів Y , отриманих у двох різних серіях дослідів за однакових умов. Розраховане за результатами експериментів значення критерію Кохрена $G = 0,25$ не перевищує табличне значення $G = 0,68$ [8]. Відповідно, дисперсії можна вважати однорідними.

Дисперсія відтворюваності рівна:

$$S_{\{y\}}^2 = \frac{2 \sum_{i=1}^8 (Y_{iq} - \bar{Y}_i)^2}{8} = 0,0441, \quad (6)$$

де Y_{iq} — значення параметра оптимізації, \bar{Y}_i — середнє значення параметра оптимізації.

Мірою адекватності моделі є залишкова дисперсія або дисперсія адекватності $S_{\text{ад}}^2$:

$$S_{\text{ад}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^8 \Delta Y_i^2}{f}, \quad (7)$$

де ΔY_i — різниця між отриманим та очікуваним значенням параметра оптимізації, f — число ступенів вільності.

У нашому випадку $f = N - (k + 1) = 8 - (6 + 1) = 1$, $k + 1$ — кількість коефіцієнтів в моделі. Розрахунок суми проводився з врахуванням значень, приведених у табл. 1. Отримуємо $S_{\text{ад}}^2 = 0,887$. В цьому випадку критерій Фішера:

$$F = \frac{S_{\text{ад}}^2}{S_{\{y\}}^2} = \frac{0,887}{0,0441} = 20,1. \quad (8)$$

Отримане значення менше вказаного у таблиці [5, 7, 8]: $F = 164,4$ за 5 % рівня значущості.

Таким чином, нашу модель ми можемо вважати адекватною і використовувати для наближення до оптимуму. При цьому нам необхідно змінювати параметри пропорційно величині коефіцієнтів регресії. Задані умови і результати експериментів представлені в табл. 3.

При збільшенні параметрів T і $T_{\text{відп}}$ в перших двох дослідях отримуємо ріст Y . Його максимальне значення отримується за $T_{\text{п}} = 200$ °С, $T = 28$ хв, $T_{\text{відп}} = 302$ °С. За подальшого їхнього збільшення (досліди № 3 та № 4) параметр оптимізації зменшується. Таким чином, дослід № 2 дає оптимальне значення Y у випадку відпалу на повітрі. Спектральна залежність коефіцієнта пропускання отриманого фільтра показана на рис. 1.

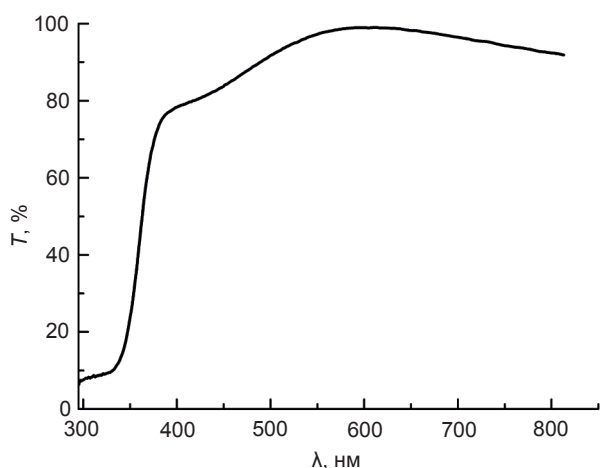


Рис. 1. Спектральна залежність коефіцієнта пропускання оптимізованого фільтра ультрафіолету на основі оксиду цинку

ВИСНОВОК

Метод математичного моделювання виявився ефективним у даному випадку, так

як отримано фільтр з оптимальною спектральною характеристикою. Для досягнення оптимуму ми провели 20 експериментів (16 попередніх і 4 за методом «крутого сходження»). Якщо використати комбінації вибраних параметрів, кожен з яких приймає 4 значення, знадобилося б 64 досліди. Особливо важливого значення метод математичного моделювання набуває при розробленні технологічних процесів, залежних від великої кількості змінних факторів.

ЛІТЕРАТУРА

1. Wang Z. L. Zinc Oxide Nanostructures: Growth, Properties and Applications // J. Phys.: Condens. Matter. — 2004. — Vol. 16. — P. 829–858.
2. Ruppel C. C. W., Fjeldly T. A. Advances in Surface Acoustic Wave Technology Systems and Applications. — Singapore: «World Scientific». — 2000. — Vol 1. — 324 p.
3. Jagadish C., Pearton S. Zinc Oxide Bulk, Thin Films and Nanostructures: Processing, Properties and Applications. — Amsterdam: «Elsevier Science», 2006. — 600 p.
4. Ozgur U., Alivov Y., Liu C., Teke A., Reshchikov M., Dogan S., Avrutin V., Cho S., Morkoc H. A. A Comprehensive Review of ZnO Materials and Devices // J. Appl. Phys. — 2005. — No. 98. — P. 041301-1–041301-103.
5. Адлер Ю. П., Маркова Е. В., Грановский Ю. В. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. — М.: «Наука», 1976. — 279 с.
6. Бурак М. М., Миколайчук А. Г., Капустянык В. Б. Разработка инфракрасных фильтров с применением метода математического моделирования // ОМП. — 1989. — № 2. — С. 34–36.
7. Протасевич Г. Ф., Мельниченко В. В.,

Таблиця 3

Задані умови і результати експериментів

№	$T_{\text{п}}$, °С	T , хв.	$T_{\text{відп}}$, °С	Y (експериментальне)	Y (очікуване)
1	225	24	301	2,10	1,90
2	200	28	302	2,20	2,05
3	175	30	303	2,19	2,15
4	150	30	304	2,11	2,19

- Сметкин В. А., Михлюк А. И. Основы научных исследований. Математическое моделирование технологических процессов. В 2 ч. Ч. 1: учебно-методическое пособие для студентов специальностей 1-42 01 01 «Металлургическое производство и материалобработка» и 1-36 01 02 «Материаловедение в машиностроении». — Минск: «БНТУ», 2009. — 92 с.
8. Штопоров Д. А., Перфильев П. И. Экспериментальный способ получения математических моделей для определения держащей силы якорей на основе полных факторных планов: методические указания к выполнению курсовой работы. — Архангельск: «ИПЦ САФУ», 2012. — 20 с.
4. Ozgur U., Alivov Y., Liu C., Teke A., Reshchikov M., Dogan S., Avrutin V., Cho S., Morkoc H. A. A Comprehensive Review of ZnO Materials and Devices // *J. Appl. Phys.* — 2005. — No. 98. — P. 041301-1–041301-103.
5. Adler Yu. P., Markova E. V., Granovskij Yu. V. *Planirovanie eksperimenta pri poiske optimal'nyh uslovij.* — М.: «Nauka», 1976. — 279 p.
6. Burak M. M., Mikolajchuk A. G., Kapustyanyk V. B. *Razrabotka infrakrasnyh fil'trov s primeneniem metoda matematicheskogo modelirovaniya* // *OMP.* — 1989. — No. 2. — P. 34–36.
7. Protasevich G. F., Mel'nichenko V. V., Smetkin V. A., Mihlyuk A. I. *Osnovy nauchnyh issledovaniy. Matematicheskoe modelirovanie tehnologicheskikh processov. V 2 ch. Ch. 1: uchebno-metodicheskoe posobie dlya studentov special'nostej 1-42 01 01 «Metallurgicheskoe proizvodstvo i materialoobrabotka» i 1-36 01 02 «Materialovedenie v mashinostroenii.* — Minsk: «BNTU», 2009. — 92 p.
8. Shtoporov D. A., Perfil'ev P. I. *Eksperimental'nyj sposob polucheniya matematicheskikh modelej dlya opredeleniya derzhashchej sily yakorej na osnove polnyh faktornyh planov: metodicheskie ukazaniya k vypolneniyu kursovoj raboty.* — Arhangel'sk: «IPC SAFU», 2012. — 20 p.

REFERENCES

1. Wang Z. L. Zinc Oxide Nanostructures: Growth, Properties and Applications // *J. Phys.: Condens. Matter.* — 2004. — Vol. 16. — P. 829–858.
2. Ruppel C. C. W., Fjeldly T. A. *Advances in Surface Acoustic Wave Technology Systems and Applications.* — Singapore: «World Scientific». — 2000. — Vol. 1. — 324 p.
3. Jagadish C., Pearton S. *Zinc Oxide Bulk, Thin Films and Nanostructures: Processing, Properties and Applications.* — Amsterdam: «Elsevier Science», 2006. — 600 p.