



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
Democratic and Popular Republic of Algeria
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
Ministry of Higher Education and Scientific Research

MASTER THESIS
EL-OUED UNIVERSITY

مذكرة ماستر
جامعة الوادي

Faculty of Exact Sciences
Departement of Physics

كلية العلوم الدقيقة
قسم الفيزياء

تحديد الثوابت الضوئية وسمك الاغشية الرقيقة من بيانات النفاذية الضوئية
بطرق التحسين الرياضية

أمام لجنة المناقشة

رئيس اللجنة
رئيساً

د. ايتيم فتحي
جامعة الوادي

مؤطر

د. بسير زوبير
جامعة الوادي

ممتحن

د. رشيد احميم
جامعة الوادي

نوقشت من طرف

باي الشيماء
فرحات حميدة جويده
يوم 12 جوان 2025

تخصص

فيزياء إشعاع

تحت رعاية مخبر

الكفاء الاكطناعي
وتطبيقاته

جامعة الشهيد حمه لخضر- الوادي

University Eshahid Hamma Lakhdar-El-Oued



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة الشهيد خبطة الوادي



كلية العلوم الدقيقة

قسم الفيزياء

مجال علوم المادة

مذكرة تخرج

مقدمة لنيل دبلوم

ماستر أكاديمي

تخصص: فيزياء إشعاع

تحديد الثوابت الضوئية وسمك الأغشية الرقيقة من بيانات النفاذية
الضوئية بطرق التحسين الرياضية

من إعداد:

باي الشيماء & فرحات حميدة جويكة

نوقشت علنا يوم: 2025/06/12

إمام لجنة المناقشة:

د. فتحي ليتيم	استاذ محاضر	جامعة الوادي	رئيسا
د. رشيد أحيم	استاذ محاضر ب	جامعة الوادي	ممتحنا
د. زوبير بسر	استاذ محاضر ب	جامعة الوادي	مؤطر

شكر وعرفان

كانه عالما ... فإنّه لم تستطع فكّنه متعلما ... فإنّه لم تستطع
فأحبّه العلماء ... فإنّه لم تستطع فلا تبغضهم.

الحمد لله ربّ العالمين، حمداً لا يحصى طيباً مبارکاً فيه، وصلى الله
وسلم وبارك على غير خلقه الله، سيدنا محمد وعلى آله وصحبه
الطيبين أجمعين.

بكله فخر واعتزاز، نتقدم بخالص الشكر والعرفان لكل من كان
له بصمة في مسيرتنا العلمية. لقد كان لأساتذتنا الكرام الفضل
الكبير في توجيهنا وإلهامنا، وما نخزنه نستذكر عرفانهم وإجلالهم كل
لحظة دعم وتشجيع.

نتقدم بأسمى عبارات الشكر والتقدير إلى الأستاذ بسر الزوير، الذي
لم يدخر جهداً في تزويدنا بالنصائح الثمينة والإرشادات السديدة، وكان
بمناخبة النور الذي أثار دربو البحث والعلم.

كما نتقدم بالشكر الجزيل إلى أساتذتنا أعضاء اللجنة المناقشة، وإفادتنا
بتصحيحاتهم وتوجيهاتهم القيمة. كل كلمة دعم وكل لسان تشجيع
كانت بمناسبة حجر أساس في بناء هذا الإنجاز.

هذا العمل هو ثمرة جهود مشتركة وعلم تحققه بفضل الله ثم
بفضل كل من آمن بنا وساندنا. وقبله وبعد فله الشكر
والحمد في الأول والأخير.

الإهداء

الحمد لله عند البدء وعند الختام.

ها نحن في اليوم نقطفه ثمار مسيرة أعوام وبيدنا شعلات العام، وبهذه المناسبة أقديو ثمرة جهديو إله منو كانتو دعواتهم سرّ نجاحي، ورضاهم نور فيو طريقيو، إله والديوّ الحبيبيو، إله منو علمانيو أنو الحالم لا ينالو إلا بالسعيو، وأنو العزيمة لا تحذلو أصحابها.

إله أمي، التي كانتو وما زالتو القلبو الذيو ينبضو عبأ وعطاء* وإله أبي، الذيو غرس فيو نفسيو قوة الإرادة وثباتو المظهو. إله منو عملوا عليو عاقبتهم رسالت العام، أساتذتيو الكرام، الذينو أناروا دريوي بمعارفهم، وألهمونيو عبأ البحثو والمعرفة.

وأخصو بجزيلو الشكر والعرفانو الأستاذ بسر الزوير، الذيو كانو لي مرشدًا وموجهًا فيو هذا البحثو، فبفضلو دعمه وتوجيهاته القيمة، استطعتو أنو أخطو بثباتو فيو مسيرتيو العلمية.

له مني كلو الاحترام والتقدير عليو جهوده النبيلة وكرم عطائه. إله شركاء دريوي، الذينو كانوا منذًا حينو امتدّ الطريقيو، إله كلو منو آمنو بيو، شجعنيو وأقدانيو كلمة دعم، إله منو كانو لي أثرًا طيبًا دونو أنو يدريو إخوتيو وأخواتيو،

إله كلو منو أضاء بعلمه عقلو غيره أو هديو بالجوابو الصحيح هيرة سائليو فأظهر بسماحته تواضع العلماء وبرحابته سماحة العارفينو.

إله كلو لهؤلاء القديو لهذا العملو وفقنيو الله وإياكم إله الخير

باي الشيهاء

الاهلء

أقديء تخريء وثمرء جهديء وفرعتيء التيء انظرتها طوالء حياتيء
إلء منء كانتء نور دريء، ومصدر عزيمتيء، وسندا ليء فيء
مشواربيء إلء أميء الحبيبة نبع المنانء والسكينء التيء لولا دعاؤها
ما وصلتء إلء هذه اللحظة.

إلء سديء الأءلء ومصدر قوتيء، منء علمنيء أنه الإءارة
تصنع المستحيلء وأنه النجاح لا يهدىء بلء ينتزع، إلء منء لا
أجد كلماتيء تعبر عنه قيمته إلء والديء الفالبيء حفظه الله ورعاه.
إلء رفيقء عمريء، زوعيء العزيز، الذيء احتملء عناء المسيرة فكلانء
راعميء فيء كلء لحظة، وسديء فيء كلء تعء.

إلء جوهريء الفالبيئيء: محمد جواد و جنيء زينء حياتيء و
بهجتها...أنتما النور الذيء يضيء اياميء، وجودكما فيء حياتيء هو
أعظم انجاز. إلء فرحة البيءة و قرء العينيء اخوانيء العزيزانيء: كوئر
، هبة ، و رعمة ، إلء مصدر القوة وسر العزيمة أنجيء الفالبيء:
أشرفء ، انتم الركنء الدافء، فيء حياتيء و مصدر ابتسامتيء وسط
التعبء.

إلء رفيقء العمر ومصدر الدعم فيء كلء لحظة صفيء، شكرا لبلائيء
وصبرك، وإلء الفالبيء اميء التيء كانتء غير أختء وصديقء،
أقديء لكما امتنانا لا تفيء الكلماتء ودعاء صادقا بأنء يجزيلكما الله غير
الجزاء.

إلء رفيقء الدربء فيء هذه المذكرة صديقتيء الوفيء شيماء، التيء
كانتء أكثر منء صديقء، بلء اختا تساند وتفهم دونء انه اشجع،
شكرا لوجودك الصادقء فيء حياتيء.

إلء كلء اساتذتيء وأخصء بالذكر الاستاذ بسر زوبير و زملائيء
الذينء جمعنيء بهم العلم، كنتم رفقاء لا ينسونء، وكانء لكلء منكم
بصمة فيء هذا المشوار.

فردات حبيدة جويدة

ملخص

يقدم هذا العمل طريقة دقيقة لتقدير معامل الامتصاص، معامل الانكسار، وسمك الأغشية الرقيقة باستخدام بيانات النفاذية البصرية فقط. كان المبرر الأساسي لهذا العمل، عدم توفر أجهزة قياس من قبيل الإليبيسوميتر أو البروفيلوميتر. تعتمد الطريقة المتبعة على نهج تحسين مقيد نقطيًا، حيث يتم تعريف مشكلة برمجة غير خطية مع قيود خطية تمثل المعرفة المسبقة عن الحل الفيزيائي. تنطبق الطريقة على جميع أنواع أطباف النفاذية ولا تعتمد على وجود أنماط تداخل أو شفافية. تم إثبات موثوقية الطريقة من خلال التجارب العددية مع أغشية تم إنشاؤها بواسطة الكمبيوتر ومن ثم تطبيقها على أغشية Cds بلورية تم ترسيبها في جامعة الوادي بتقنية الحمام الكيميائي عند جرعات متزايدة من الثوريا. مكنت الطريقة من استرداد الثوابت البصرية وسمك الأغشية بدقة مرضية جدا في المجال الطيفي الغالب في التطبيقات. تراوحت السُمك المستردة لهذه الاغشية بشكل متزايد مع زيادة تركيز الثوريا، بين 221.55 نانومتر في العينة ضعيفة التركيز، لتصل تدريجيًا إلى 247.84 نانومتر في العينة عالية التركيز، مع قيم وسط بلغت 238.39 نانومتر و241.85 نانومتر. ويعد هذا التزايد المتناسق في السمك مع التركيز داعما اخر لمدى موثوقية النموذج ودقة حساباته.

كلمات مفتاحية : غشاء رقيق، توصيف الأغشية الرقيقة، الثوابت البصرية، دالة العزل الكهربائي، التحسين الرياضي

Abstract

This thesis presented a robust method for retrieving the optical constants of thin films using only transmission spectra. The approach is based on a constrained point-wise optimization technique, where a nonlinear programming problem is formulated with linear constraints reflecting prior physical knowledge. Notably, the method does not rely on the presence of interference fringes in the data, making it suitable for a wide range of film types.

Optimization techniques such as Newton's method and gradient descent were used to minimize a nonlinear least squares cost function. The proposed method was validated through numerical experiments on synthetic data and applied to CdS thin films deposited via chemical bath deposition under various thiourea concentrations at El Oued University laboratories.

The optimization process enabled accurate retrieval of refractive index, absorption coefficient, and film thickness. The extracted thickness values ranged from 221.55 nm in sample 1 to 247.84 nm in sample 4, with intermediate values of 238.39 nm and 241.85 nm for samples 2 and 3. This consistent increase in thickness correlates well with thiourea dosage, validating the numerical model's physical accuracy.

Overall, this work demonstrates the effectiveness of combining physical modeling with constrained optimization in the analysis of thin films and provides a flexible MATLAB-based tool for further experimental and theoretical studies.

Keywords : Crystalline semiconductors; Optical properties; Dielectric function; thin-film characterization, optimization

الفهرس

i	شكر وعرفان
ii	الاهداء
iii	الاهداء
iv	ملخص
v	Abstract
ix	قائمة الجداول
x	قائمة الأشكال
1	مقدمة عامة
4	1. الدراسات السابقة
4	1-1. من الطرق التحليلية إلى تقنيات النمذجة العكسية
5	1-2. ملاءمة المربعات الصغرى للأعطية باستخدام نماذج التشتت
10	1-3. خوارزميات التحسين العالمية للنمذجة العكسية
10	1-3-1. الخوارزميات الجينية
11	1-3-2. خوارزميات سرب الجسيمات
13	1-4. مقارنة بين الطرق
13	1-4-1. المربعات الصغرى للأعطية (التحسين الموضعي):
13	1-4-2. الخوارزميات الجينية
13	1-4-3. خوارزميات سرب الجسيمات
14	1-4-4. وحدانية الحل وأهمية القيود
14	1-4-5. التكلفة الحسابية
14	1-4-6. ملخص الأهداء

16	مقدمة في علم التحسين والتحصين الرياضي
17	1-2 التحسين الرياضي :
19	2-2 التحسين المقيّد وغير المقيّد:
19	1-2-2 التحسين غير المقيّد:
19	2-2-2 التحسين المقيّد:
20	3-2 البرمجة الخطية وغير الخطية والمحدبة:
20	4-2 التحسين العالمي والمحلي:
21	5-2 التكدب:
22	6-2 القيم الدنيا والعظمى العالمية والمحلية:
26	7-2 شروط الأمثلية:
26	8-2 تطبيقات نموذجية:
27	9-2 خوارزميات التحسين
28	1-9-2 التعريفات الأساسية في التحسين الرياضي
29	2-9-2 طريقة نيوتن لمتغير واحد: Univariate Newton's Method
29	3-9-2 طريقة نيوتن متعددة المتغيرات: Multivariate Newton's Method
29	4-9-2 التدرج النازل: Gradient Descent
30	5-9-2 التدرج النازل العشوائي: Stochastic Gradient Descent
30	10-2 أمثلة على كوال ذات متغيرين
33	11-2 مقارنة بين طريقة نيوتن وطريقة التدرج النازل
33	12-2 مكدبة الطرق
35	3 حساب الثوابت البصرية وسمك الأغشية الرقيقة من بيانات الانعكاسية الضوئية
36	1-3 وصف طريقة التحسين
39	2-3 التجارب العددية مع الأغشية التي تم إنشاؤها بواسطة الكمبيوتر
44	3-3 التطبيق على أغشية CoS البلورية
46	1-3-3 استرداد الانعكاسية
47	2-3-3 قزينة الانكسار ومعامل الامتصاص وسمك الأغشية
49	4-3 المقارنة مع الطرق التقريبية
49	1-4-3 نظرة عامة على طريقة التغليف
57	الخاتمة العامة
59	الملحقات
63	المصادر

قائمة الجداول

صفحة

جداول

- 1-1 . ملخص الدراسات الرئيسية لاستخراج الثوابت البصرية وسُمك الأغشية الرقيقة من بيانات النفاذية باستخدام النمذجة العكسية 15
- 2-1 . مقارنة بين طريقة نيوتن وطريقة التدرج النازل من حيث الخصائص الرئيسية. 33
- 3-1 . نتائج التحسين على أغشية اصطناعية بالكمبيوتر. لاحظ الحضيض عند السمك المتوقعة. 41
- 3-2 . القيم المحسوبة ل λ , T_M , T_m , n_1 , n_{true} والخطأ المطلق والنسبي على قيم قرينة الانكسار. 51
- 3-3 . القيم المحسوبة ل λ_1 و λ_2 والسمك d_1 بالمعادلة (3-14). 52
- 3-4 . التقديرات المحسنة للسمك d_2 بدلالة رتب التداخل \tilde{m} والمحسوبة بدلالة λ و n 53
- 3-5 . نتائج تقديرات معامل الامتصاص ومقارنتها مع النتائج الفعلية للغشاء الاصطناعي. 55

قائمة الاشكال

أشكال	صفحة
1-1 . نموذج المذبذب لورنتز. تم رسم المركبات الحقيقية (الخط الأزرق المتصل) والتخيلية (الخط البرتقالي المتقطع) لدالة العزل باستخدام نموذج مذبذب واحد بمعاملات موافقة لخصائص كربيد السيليكون السداسي [20].	7
2-1 . نموذج فوروبي-بلومر. تم رسم المركبات الحقيقية (الخط الأزرق المتصل) والتخيلية (الخط البرتقالي المتقطع) لدالة العزل الكهربائي النسبية باستخدام المعاملات: $E_g = 1.3 \text{ eV}$, $A = 1.4910 \text{ eV}$, $B = 5.2139 \text{ eV}$, $C = 8.6170 \text{ eV}^2$, و $n_\infty = 1.5265$. موافقة لخصائص السيليكون غير متبلور	5
3-1 . نموذج تاوك-لورنتز. تم رسم المركبات الحقيقية (الخط الأزرق المتصل) والتخيلية (الخط البرتقالي المتقطع) لدالة العزل الكهربائي النسبية باستخدام المعاملات: $E_0 = 4.5 \text{ eV}$, $E_g = 3.2 \text{ eV}$	9
1-2 . التمثيل الهندسي لمسألة التحسين النموذجية الموصوفة بالمعادلة 2-2. المنطقة غير المضللة على اليمين تمثل فضاء البحث. الصورة الى اليسار تمثل رسم لدالة الهدف في ثلاثة ابعاد.	19
2-2 . امثلة هندسية بسيطة عن المجموعات المحدبة وغير المحدبة.	21
3-2 . تكون الدالة باللون الأزرق محدبة إذا وفقط إذا كانت المنطقة الواقعة فوق منحناها مجموعة محدبة. على يمين دالة غير محدبة، بينما الى اليسار دالة محدبة.	22
4-2 . صورة ثلاثية الابعاد للدالة في المعادلة (2-13) مع خطوط تساوي قيمها (خطوط الكنتور). لهذه الدالة قمة عالمية و حضيض عالمي يقعان عند $(x, y) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right)$ و $(x, y) = \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}\right)$ على الترتيب.	25
5-2 . نقاط الحضيض والقمم بانواعها للدالة الموصوفة بالمعادلة (2-14).	26
6-2 . خطوات البحث عن الحضيض للمسألة (2-25) بطريقة التدرج النازل باختيار خطوة ثابتة (الى اليمين) وخطوة معدلة بطريقة البحث الخطي الدقيق (الى اليسار).	32
7-2 . برنامج ماتلاب لطريقة التدرج النازل بطريقة البحث الخطي الدقيق.	33
1-3 . مخطط تمثيلي لنظام غشاء-ركيزة في حالة الورد الناظمي.	37
2-3 . النفاذية البصرية للغشاء الأول ($d_1 = 100$ نانومتر) والغشاء الثاني ($d_2 = 600$ نانومتر). تم تقنين النفاذية للوحدة في الحالتين بالقسمة على 100.	40

- 3-3 . عملية التحسين للأغشية الاصطناعية. نلاحظ التقارب الجديد نحو الحضيض في الحالتين. . . . 41
- 3-4 . نفاذية الأغشية الاصطناعية مقارنة بالنفاذية المستردة. نلاحظ تطابق تام. 42
- 3-5 . ثوابت البصرية المستردة للغشاء الأول بدلالة طاقة الفوتونات ومقارنة بالقيم الحقيقية والتخمينات الأولية 43
- 3-5 . ثوابت البصرية المستردة للغشاء الثاني بدلالة طاقة الفوتونات ومقارنة بالقيم الحقيقية والتخمينات الأولية 44
- 3-7 . مخطط انعراج الأشعة السينية لمختلف عينات CdS وكلها تظهر درجة تبلور مقبولة. 45
- 3-8 . نتائج قياسات النفاذية CdS 46
- 3-9 . نتائج ملائمة منحنيات النفاذية النظرية مع القياسات التجريبية CdS 47
- 3-10 . نتائج استخلاص قرينة الانكسار و معامل الانطفاء لشرائح CdS 48
- 3-11 . نتائج استخلاص معامل الامتصاص لشرائح CdS 49
- 3-12 . وصف لطريقة الغلاف. النفاذية هي لغشاء اصطناعي بسمك 600 نانومتر على ركيزة شفافة بنفاذية T_s . يعرض الغشاء اهداب واضحة للتداخل البناء. الاغلفة السلسلة تم الحصول عليها بمحاذاة تكعيبية للقيم العظمى والدنيا. المنحنيات T_i و T_g معرفة على الترتيب بـ $\sqrt{(T_M T_m)}$ و $2(T_M T_m)/(T_M + T_m)$ كما في مقال سانويويل. 50
- 3-13 . التوزيع الاحتمالي لقيم السمك محسوبا باهمال القيم المتطرفة. 52
- 3-14 . الثوابت البصرية المستردة للغشاء الثاني بدلالة طاقة الفوتونات باستخدام طريقة الغلاف ومقارنة بالقيم الحقيقية وتأثير ادراج بيانات النقاط المتطرفة في الحسابات. 55

مقدمة عامة

خلفية الدراسة

الأغشية الرقيقة هي طبقات من المواد يتراوح سمكها من بضعة نانومترات إلى عدة ميكرومترات. تؤدي هذه الأغشية وظائف تكنولوجية متنوعة تشمل الحماية البيئية، التعزيز الميكانيكي، وتحسين الأداء البصري للأسطح [1]. تتراوح تطبيقاتها من أجهزة أشباه الموصلات الإلكترونية، والطلاءات البصرية والخلايا الشمسية، إلى أجهزة الاستشعار، والشاشات وأجهزة تخزين الطاقة الحديثة.

يُعد استخدام الأغشية الرقيقة في البصريات ذا أهمية خاصة، حيث تُفضل الطلاءات العازلة - التي تُظهر امتصاصًا ضئيلاً - في أنظمة الليزر، وأجهزة التصوير، والفلاتر التداخلية. على النقيض من ذلك، تُستخدم الأغشية المعدنية - ذات الامتصاص الأعلى - في طلاء الأدوات الميكانيكية لزيادة عمرها. علاوة على ذلك، فإن الأغشية الرقيقة السيراميكية، المعروفة بصلابتها ومقاومتها للتآكل، تُعد ذات قيمة في الطلاءات الوقائية [2]. وقد سلطت التطورات الأخيرة الضوء أيضًا على تطبيقات الأغشية الرقيقة في تخزين الطاقة. فعلى سبيل المثال، برزت الأغشية الرقيقة من السيليكون غير المتبلور والخالي من الهيدروجين (a-Si) كمرشحين واعدنين لأقطاب بطاريات أيونات الليثيوم، حيث تقدم ساعات نظرية عالية للغاية تصل إلى 4200 ملي أمبير/غرام [3]. يتم إنتاج هذه الأغشية من خلال تقنيات منخفضة التكلفة مثل الترسيب بالرش في ظروف ضغط غاز مرتفع/منخفض، مما يجمع بين كثافة الطاقة العالية وإمكانية التوسع الصناعي [4].

كذلك من بين المواد المختلفة المستخدمة في الأغشية الرقيقة، يبرز كل من كبريتيد الكادميوم (CdS) وكبريتيد الرصاص (PbS) لما لهما من خصائص نطاق طاقة مناسبة وسهولة في التحضير. يُستخدم CdS ذو النطاق العريض ($\sim 2.4eV$)، عادةً كطبقة نافذة في الخلايا الكهروضوئية، بينما يُستخدم PbS ذو النطاق الضيق ($\sim 0.4eV$)، في كواشف الأشعة تحت الحمراء والأجهزة الحرارية الكهروضوئية [5].

تُظهر الأغشية الرقيقة خصائص بصرية وكهربائية متميزة عن المواد السائبة، ويعود ذلك إلى طبيعة ترسيبها، سمكها المتناهي الصغر، والبنية المجهرية الناتجة عن ظروف التصنيع مثل درجة حرارة الركيزة، معدل الترسيب، وتركيب الغاز أو المحلول المستخدم. فعلى سبيل المثال، يُعد التحكم في سمك الغشاء عاملاً مهمًا لتعديل حزم الانعكاس في المرايا العازلة أو لتحسين كفاءة امتصاص الضوء في الخلايا الشمسية [6].

تتطلب هذه التطبيقات معرفة دقيقة بالثوابت البصرية: معامل الانكسار الحقيقي (n)، معامل الامتصاص التخيلي (k)، وسماعة الغشاء (d). تحدد هذه المعاملات كيفية تفاعل الضوء مع الغشاء من حيث الانكسار، الامتصاص، والنفذية. وبالتالي فإن فهمها يُعد أمرًا حاسمًا في تصميم وتحسين الأداء الكلي للجهاز [7].

تحديات توصيف الأغشية الرقيقة

يُعد التوصيف البصري الدقيق أمرًا محوريًا لفهم سلوك الأغشية الرقيقة. كما وتُعتبر الإليبيسومترية والمطيافية من أبرز الأدوات المستخدمة لهذا الغرض. بينما تتعقب الإليبيسومترية تغير استقطاب الضوء المنعكس لاستخلاص خصائص المادة، تُقيّم المطيافية طيفي الانعكاس والنفذية عبر الأطوال الموجية لتحديد سمك الغشاء ومعامل الانكسار [9,8].

تعتمد الطرق التقليدية مثل طريقة التغليف التي طورها Swanepoel [10] على وجود هذه الأهداب لاستخلاص السمك ومعاملات الانكسار، مما يجعلها غير مناسبة في حالات مثل أغشية CdS المشبعة بالثيوربا أو أغشية PbS الرقيقة جدًا أو غير المتبلورة، حيث تكون الأطياف سلسلة وخالية من التذبذبات. إلى جانب ذلك، فإن التقنيات المتقدمة مثل الإليبيسومترية الطيفية تتطلب أجهزة دقيقة وغالية الثمن مثل الإليبيسوميتر أو البروفيلوميتر، والتي لا تتوفر في كثير من المختبرات الجامعية، ومنها جامعة الوادي. كما أن طرقًا متقدمة مثل الإليبيسومترية الطيفية بزواوية متغيرة (VASE) غالبًا ما تُستخدم بالتزامن مع بيانات المطيافية لنمذجة السلوكيات البصرية المعقدة، خاصة في الأنظمة الطبقة أو شبه الشفافة [7]. وقد استُخدمت هذه الاستراتيجيات المزدوجة في مواد مثل بيروفسكايت $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ و CsPbBr_3 في الخلايا الشمسية، باستخدام نماذج تذبذب مثل Tauc-Lorentz و Gaussian للملاءمة البيانات البصرية [11].

ومع ذلك، فإن مشكلة استخراج الثوابت البصرية الدقيقة من البيانات الطيفية تُعد شديدة التعقيد من الناحية الحسابية وغير خطية وغير جيدة التكيّف، حيث يمكن أن تتوافق أطياف مختلفة مع حلول متعددة من k و n و d ، مما يؤدي إلى غموض في التفسير الفيزيائي. وغالبًا ما تكون هذه المسألة غير محددة وتعاني من حساسية مفرطة تجاه الشروط التجريبية. لذلك، فإن تطوير طرق رقمية أكثر موثوقية، لا تعتمد على أهداب التداخل أو أجهزة معقدة، يُعد خطوة ضرورية.

في هذا السياق، يُقترح استخدام أسلوب تحسين نقطي مقيد، يتم تنفيذه بدقة ضمن بيئة MATLAB. يُعالج هذا الأسلوب كل نقطة طيفية على حدة مع فرض قيود فيزيائية مثل الإيجابية والنعمية وتدرج المعاملات (الوسائط). وقد ثبت أن هذا الأسلوب يتفوق على أساليب المطابقة غير الخطية التقليدية، ويوفر حلولًا دقيقة حتى في الحالات التي تفتقر إلى أهداب التداخل أو تكون البيانات فيها محدودة.

مبررات البحث

الحصول على قيم دقيقة للثوابت البصرية المعتمدة على الطول الموجي للأغشية الرقيقة له أهمية أكاديمية وتكنولوجية كبيرة. إذ توفر هذه الثوابت معلومات أساسية حول السلوك البصري، فجوة الطاقة، مستويات العيوب، ترددات الفونونات والبلازما في المواد. كما أن معامل الانكسار ضروري في تصميم ونمذجة المكونات والطلاءات البصرية مثل الفلاتر التداخلية والعدسات المضادة للانعكاس.

ومن هنا، فإن مشكلة استخراج الثوابت البصرية وسماكة الأغشية من بيانات النفذية فقط تُعد محورية. وبالرغم من وجود العديد من الطرق التقليدية مثل تحليل Kramers-Kronig [12, 13] أو النماذج الكلاسيكية، فإنها غير مناسبة للأغشية الشفافة أو الرقيقة، وقد تعاني من أخطاء ناجمة عن الاستقراء أو تتطلب وقت حسابي طويل. علاوة على ذلك، فإن غياب الأهداب في أطياف CdS المشبعة بالثيوربا يعوق تطبيق النماذج التقليدية مثل طريقة التغليف ل

Swanepoel. ونظرًا لعدم توفر أجهزة مثل الإليبيسوميتر في جامعة الوادي، فإن تطوير نموذج يعتمد فقط على بيانات النفاذية، باستخدام أسلوب تحسين نقطي مقيد في MATLAB يُمثل حلًا فعالًا وواقعيًا يمكن تطبيقه ضمن الإمكانيات المتاحة، مع توفير دقة عالية في استخراج n و k و d .

أهداف البحث

يهدف هذا البحث إلى تحديد الثوابت البصرية وسماكة الأغشية الرقيقة لمواد CdS من بيانات النفاذية الضوئية، وذلك باستخدام خوارزمية تحسين نقطي مقيد تم تطويرها ضمن بيئة MATLAB. تتضمن هذه الأهداف النقاط التالية:

- الحصول على بيانات نفاذية ضوئية تجريبية لأغشية CdS.
- بناء نموذج لنفاذية الضوء باستخدام طريقة مصفوفة الانتقال (Transfer Matrix Method).
- تطبيق خوارزمية تحسين نقطي مقيد لاستخلاص معامل الانكسار الحقيقي n ، معامل الامتصاص k ، وسماكة الغشاء d .
- التحقق من موثوقية البرنامج باستخلاص الوسائط الضوئية لأغشية اصطناعية معروفة الوسائط.
- مقارنة النتائج المستخرجة مع تلك المتوفرة في الأدبيات العلمية لتقييم دقة النموذج.

نطاق البحث

يركز هذا البحث على توصيف الأغشية الرقيقة من مواد CdS المرسبة على ركائز شفافة، من خلال تحليل بيانات النفاذية الضوئية فقط. يتم استخدام برنامج MATLAB لتطبيق نموذج التحسين النقطي المقيد، والذي يتعامل مع كل نقطة طيفية بشكل منفصل مع فرض قيود فيزيائية. وقد تم اختيار هذا النموذج نظرًا لملاءمته لحالات غياب الأهداب التجريبية ومحدودية الموارد المختبرية. وقد نظمت هذه الدراسة في أربع فصول تتبعها خاتمة يمكن سردها كالتالي:

- الفصل الأول يتضمن دراسات سابقة
- الفصل الثاني يهتم بدراسة طرق التحسين الرياضية
- الفصل الثالث وسيتم فيه التطرق إلى محاكاة أغشية CdS المرسبة على ركائز شفافة، بعد التحقق من مصداقية الطريقة على أغشية اصطناعية
- الخاتمة العامة وتتضمن حوصلة النتائج والافاق المستقبلية

الفصل الأول

الدراسات السابقة

مقدمة

يعد تحديد الثوابت البصرية (معامل الانكسار n ومعامل الامتصاص k) وسماكة الأغشية الرقيقة المصنوعة من مواد شبه موصلة أو عازلة، أمرًا بالغ الأهمية في البصريات وعلوم المواد. وتعتمد الطرق التقليدية غالبًا على استخدام أطيايف النفاذية (Transmittance) والطيف المرتبط بها لاستنتاج هذه المعاملات. إلا أن استخلاص قيم k و n وسماكة الغشاء من بيانات النفاذية فقط يُعد مشكلة عكسية صعبة، حيث إن هناك مجموعات متعددة من القيم يمكنها أن تنتج أطيايفًا متشابهة، كما أن الأساليب التحليلية المبسطة تتطلب افتراضات صارمة، مثل ضرورة وجود أطيايف تداخل واضحة أو مناطق شفافة بوضوح في الطيف. على مدى الـ 25 عامًا الماضية، قام الباحثون بتطوير تقنيات النمذجة العكسية (Inverse modeling) لحل هذه المشكلة [14]. وتعتمد هذه الطرق على نماذج نظرية وحوسبة رقمية، بدلاً من المعادلات التحليلية المباشرة، لاستخراج المعلمات المطلوبة عن طريق مطابقة الأطيايف النظرية مع البيانات التجريبية. يركز هذا الفصل على الطرق النظرية التي تعتمد على النمذجة العكسية لاستخراج الثوابت البصرية وسماكة الأغشية الرقيقة في المجال الطيفي فوق البنفسجي والمرئي (UV-Visible) مع الاعتماد فقط على بيانات النفاذية عند السقوط العمودي (بدون استخدام تقنيات مثل الإليبيسومترية أو الانعكاسية)، وذلك للمواد شبه الموصلة والعازلة. كما نناقش ونقارن بين التقنيات المحلية والعالمية للتحسين، والتي تشمل طرق الملائمة بالمربعات الصغرى اللاخطية (Nonlinear Least-Squares) والخوارزميات التطورية مثل الخوارزميات الجينية (Genetic Algorithms)، وتحسين سرب الجسيمات (Particle Swarm Optimization)، مع إبراز مزايا وعيوب كل تقنية [15, 16, 17].

1-1 من الطرق التحليلية إلى تقنيات النمذجة العكسية

قبل انتشار الطرق الحاسوبية الحديثة، كان تحديد الثوابت البصرية وسماكة الأغشية الرقيقة يتم غالبًا بواسطة طرق تحليلية تعتمد على شروط مثالية. ومن أبرز هذه الطرق التقليدية طريقة التغليف (Envelope Method)، واشتهرت بإسم طريقة Swanepoel، والتي تم تطويرها في ثمانينيات القرن الماضي. تعتمد هذه الطريقة على وجود أطيايف تداخل واضحة ومميزة في طيف النفاذية للأغشية الشفافة أو شبه الشفافة. فمن خلال تحديد نقاط القمم والقيعان (لقيم العظمى والقيم الدنيا) في طيف النفاذية ثم من خلال إنشاء أغلفة سلسلة حولها

يمكن تقدير كل من السمك ومعامل الانكسار بشكل تحليلي مباشر. إلا أن هذه الطرق تفشل عندما تكون الأغشية ممتصة بشكل كبير، مما يؤدي إلى اختفاء أنماط التداخل أو في حالة وجود ضوضاء كبيرة في البيانات التجريبية مما يمنع تمييز القمم والقيعان بوضوح [10].

أدى هذا الواقع إلى الحاجة لطرق أكثر مرونة، تعتمد على نماذج نظرية (Model-based approaches) ، يمكن من خلالها استخدام كامل بيانات الطيف دون اشتراط وجود أنماط تداخل واضحة. تُعرف هذه الطرق بشكل عام باسم النمذجة العكسية (Inverse Modeling) ، حيث تتم صياغة المشكلة على أنها مسألة تحسين رياضية. بدلاً من استخلاص الثوابت مباشرة من الملامح الطيفية، يتم افتراض نموذج نظري لوصف سلوك الأغشية الرقيقة بصرياً، ثم تعديل معاملات هذا النموذج حتى يتوافق الطيف النظري مع بيانات النفاذية التجريبية [14].

في نماذج النمذجة العكسية، يُحسب الطيف النظري عادة باستخدام معادلات فرينل (Fresnel Equations) أو طرق مصفوفة الانتقال (Transfer-Matrix Method) [18] ، التي تصف نفاذ وانتقال الضوء خلال نظام مكون من غشاء أو مجموعة أغشية مكدسة على ركيزة. تمكن مثل هذه المعادلات أو المصفوفات من حساب طيف نفاذية نظري $T(n(\lambda), k(\lambda), d)$ يعتمد على سمك الغشاء d وكذلك على نماذج تشتت معينة مختارة لـ $n(\lambda)$ و $k(\lambda)$ (معرفة بدلالة وسائط أو معاملات) تصف تفاعل الضوء مع مادة الغشاء. ثم يتم ضبط المعاملات المجهولة (سمك الغشاء والثوابت البصرية المعتمدة على الطول الموجي $n(\lambda)$ ، $k(\lambda)$) لتقليل الفارق بين الطيف النظري والتجريبي. تُعتبر هذه المشكلة عكسية ولا خطية بطبيعتها، وعادةً ما تكون غير محددة بشكل جيد، وتتطلب تنفيذًا دقيقًا للحصول على نتائج ذات معنى فيزيائي واضح [14].

شهدت بداية القرن الحالي تحولاً واضحاً نحو هذه الطرق الحسابية المرنة والقادرة على التعامل مع الأطياف الواقعية المعقدة. أظهرت الدراسات المبكرة مثل دراسة شامبوليرون وزملائه إمكانية استخدام النمذجة العكسية بنجاح في استخلاص قيم معامل الامتصاص ومعامل الانكسار وسمك أغشية سيليكون غير متبلورة، حتى في حالة الأغشية الممتصة، وذلك من خلال إدخال قيود فيزيائية على الحلول لضمان التفرد والواقعية الفيزيائية [14]. في حين أن هذه الطريقة في عملهم أثبتت فعاليتها في تقديم نتائج موثوقة، إلا أنها تمثل تحدياً رياضياً كبيراً، لذلك قاموا بتحويل المسألة إلى تحسين غير مقيد من الناحية الرياضية والحسابية. وقد شكلت هذه الدراسات بداية التحول من الطرق التحليلية التقليدية إلى التقنيات الحسابية الحديثة القائمة على النمذجة العكسية.

2-1 ملاءمة المربعات الصغرى اللاخطية باستخدام نماذج التشتت

تُعتبر إحدى الطرق المباشرة والشائعة في استخلاص الثوابت البصرية للأغشية الرقيقة استخدام تقنية المربعات الصغرى اللاخطية (Nonlinear Least-Squares, NLS) من خلال تطبيق نموذج رياضي فيزيائي يصف تشتت معامل الانكسار والامتصاص. تعتمد هذه الطريقة على افتراض نموذج تشتت معين (مثل نموذج كوشي Cauchy model) للأغشية العازلة، أو نماذج مثل تاوك-لورنتز (Tauc-Lorentz) أو فروهي-بلومر (Forouhi-Bloomer) للمواد شبه الموصلية، بحيث تكون السماكة وثوابت النموذج هي المعاملات التي يتم ضبطها لتحسين توافق النموذج مع البيانات التجريبية [19]. في ما يلي نعرض النماذج الأساسية للتشتت والتي غالباً ما تستخدم مباشرة أو تستخدم تحويلات لها عند تعريف النموذج الرياضي للنفاذية الضوئية:

معادلات كوشي: هذه المعادلات تجريبية تمامًا وقد اقترحها كوشي لأول مرة (1789-1827). وهي ملائمة تمامًا لنموذج قرينة الانكسار للمواد الشفافة مثل: SiO_2 و Al_2O_3 و Si_3N_5 و الزجاج BK_7 وغيرها.

$$n(\lambda) = A_n + \frac{B_n}{\lambda^2} + \frac{C_n}{\lambda^4} + \dots \quad (1-1)$$

$$k(\lambda) = A_k + \frac{B_k}{\lambda^2} + \frac{C_k}{\lambda^4} + \dots \quad (2-1)$$

حيث تُعبّر الأطوال الموجية بوحدات الميكرومتر و $A_n, B_n, C_n, A_k, B_k, C_k$ وهي ستة معاملات مطابقة. في كثير من الأحيان يقتصر على الحدود الأولى من السلسلتين.

نموذج سيلماير: تم اشتقاق هذه الصيغة لأول مرة من قبل سيلماير (1871). وهي قابلة للتطبيق على المواد الشفافة (مثل معادلات كوشي) وعلى أشباه الموصلات (مثل Si و Ge و GaAs...) في منطقة الأشعة تحت الحمراء. نموذج سيلماير هي تعميم لصيغ كوشي. يتم استخدام نموذج سيلماير الأصلية للمواد الشفافة تمامًا (حيث $k = 0$) ومع ذلك يتم أحيانًا توسيعها لتغطية المنطقة الماصة باستخدام صيغة إضافية لـ $k(\lambda)$.

$$n(\lambda) = \left(A_n + \frac{B_n \lambda^2}{\lambda^2 - C_n^2} \right)^{1/2} \quad (3-1)$$

$$k(\lambda) = k(\lambda) = \left[n(\lambda) \left(B_1 \lambda + \frac{B_2}{\lambda^2} + \frac{B_3}{\lambda^3} \right) \right]^{-1} \quad (4-1)$$

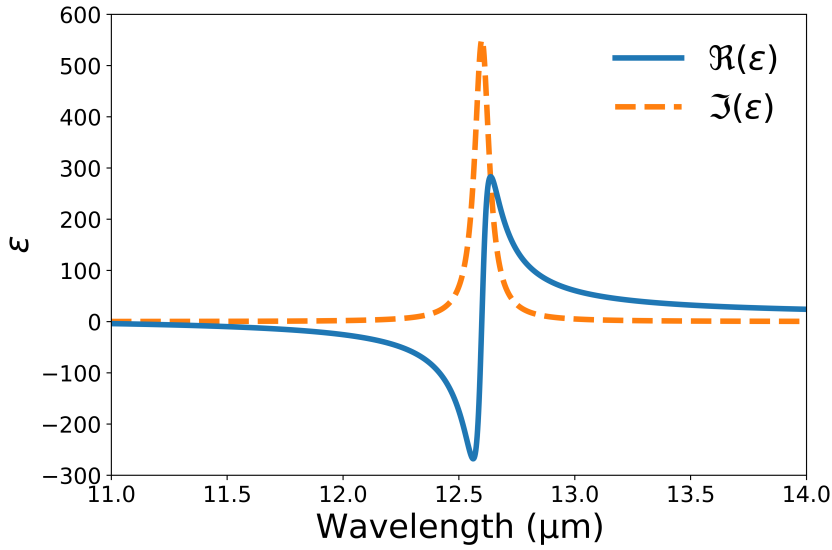
حيث $B_1, B_2, B_3, A_n, B_n, C_n$ هي المعاملات الستة التجريبية للنموذج.

نموذج المتذبذب الكلاسيكي لورنتز: يعطي هذا النموذج دالة العزل الكهربائي $\epsilon = \epsilon_1 - i\epsilon_2$ المركبة بمركبتها الحقيقية $\epsilon_1(\lambda)$ والمركبة $-i\epsilon_2(\lambda)$. وهما يرتبطان بقرينة الانكسار $n(\lambda)$ ومعامل الانطفاء $k(\lambda)$ بالعلاقتين عبر معادلات كرامرز-كرونينغ (KK) equations:

$$n^2 - k^2 = 1 + \frac{A\lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_0^2 + g\lambda^2/(\lambda^2 - \lambda_0^2)} \quad (5-1)$$

$$2nk = \frac{A\sqrt{g}\lambda^3}{(\lambda^2 - \lambda_0^2 + g\lambda^2)} \quad (6-1)$$

هنا يمثل λ_0 طول موجة الاهتزاز الاساسي للمتذبذب و g معامل التخميد و A قوة او سعة المتذبذب.



شكل 1-1. نموذج المذبذب لورنتز. تم رسم المركبات الحقيقية (الخط الأزرق المتصل) والتخيلية (الخط البرتقالي المتقطع) لدالة العزل باستخدام نموذج مذبذب واحد بمعاملات موافقة لخصائص كربيد السيليكون السداسي [20].

نموذج التشتت فوروي-بلومر-فوروي: تم تطويرها لنمذجة قرينة الانكسار المركبة للمواد شبه الموصلية البلورية والعوازل على أساس دقيق. يتم استنتاج الصيغة لـ $n(E)$ بشكل صريح من $k(E)$ باستخدام علاقات كرامرز-كرونينغ [23, 22, 21]:

$$k(E) = \sum_{i=1}^{\alpha} \frac{A_i (E - E_g)^2}{E^2 - B_i E + C_i} \quad (7-1)$$

$$n(E) = n(\infty) + \sum_{i=1}^{\alpha} \frac{B_{oi} E + C_{oi}}{E^2 - B_i E + C_i} \quad (8-1)$$

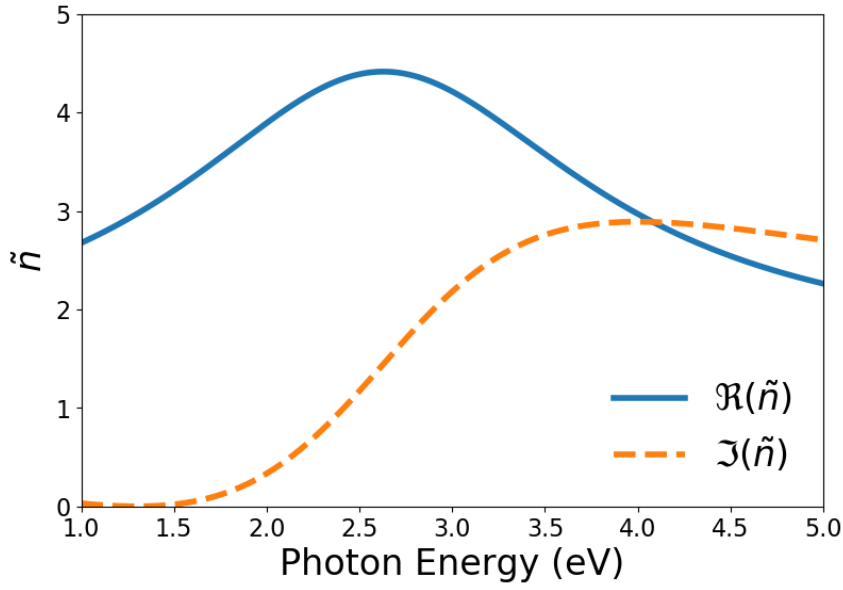
حيث $E = h\nu = hc/\lambda$ هي طاقة الفوتون و

$$B_{oi} = \frac{A_i}{Q_i} \left(-\frac{B_i^2}{2} + E_g B_i - E_g^2 + C_i \right) \quad (9-1)$$

$$C_{oi} = \frac{A_i}{Q_i} \left((E_g^2 + C_i) \frac{B_i}{2} - 2E_g C_i \right) \quad (10-1)$$

$$Q_i = \frac{1}{2} (4C_i - B_i^2)^{1/2} \quad (11-1)$$

ليس جميع الكميات في المعادلات السابقة مستقلة، يتم تعريف الارتباط بينها في المعادلات الثلاثة الاخيرة لذلك تظل فقط E_g و C_i و B_i و A_i و n_{∞} كمعاملات ملائمة مستقلة.



شكل 1-2. نموذج فوري-بلومر. تم رسم المركبات الحقيقية (الخط الأزرق المتصل) والتخيلية (الخط البرتقالي المتقطع) لدالة العزل الكهربائي النسبية باستخدام المعاملات: $A = 1.4910 \text{ eV}$ ، $E_g = 1.3 \text{ eV}$ ، $B = 5.2139 \text{ eV}$ ، $C = 8.6170 \text{ eV}^2$ ، و $n_\infty = 1.5265$. موافقة لخصائص السيليكون غير متبلور

نموذج التشتت تاوك-لورنتز Tauc-Lorentz: أستخدم هذا النموذج لنمذجة معامل الانكسار المركب للمواد شبه الموصلة غير المتبلورة عند ترددات أكبر من فجوة نطاقها الضوئي. وهو يعطي صيغة رياضية لتشتت دالة العزل الكهربائي المركب بدلالة تواتر الضوء $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$

$$\epsilon_2(E = h\omega) = \begin{cases} \frac{AE_0C(E-E_g)^2}{(E^2-E_g^2)^2+C^2E^2} \frac{1}{E} = \frac{A\omega_0C_i(\omega-\omega_g)^2}{(\omega^2-\omega_g^2)^2+C^2\omega^2} \frac{1}{\omega} & \text{for } E > E_g \\ 0 & \text{for } E \leq E_g \end{cases} \quad (12-1)$$

حيث تمثل E_0 و E_g و C و A طاقة الهزاز الأساسية، وطاقة فجوة النطاق، ومعامل التعريض، والعامل الذي يشمل شدة الاهتزاز، على التوالي؛ ω_0 و ω_g هما الترددان المقابلان للطاقتين E_0 و E_g . لحساب ϵ_1 من ϵ_2 ، يمكن استخدام علاقة كرامرز-كرونيج:

$$\epsilon_1(\omega) = \epsilon_1(\infty) + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\Omega \epsilon_2(\Omega)}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega \quad (13-1)$$

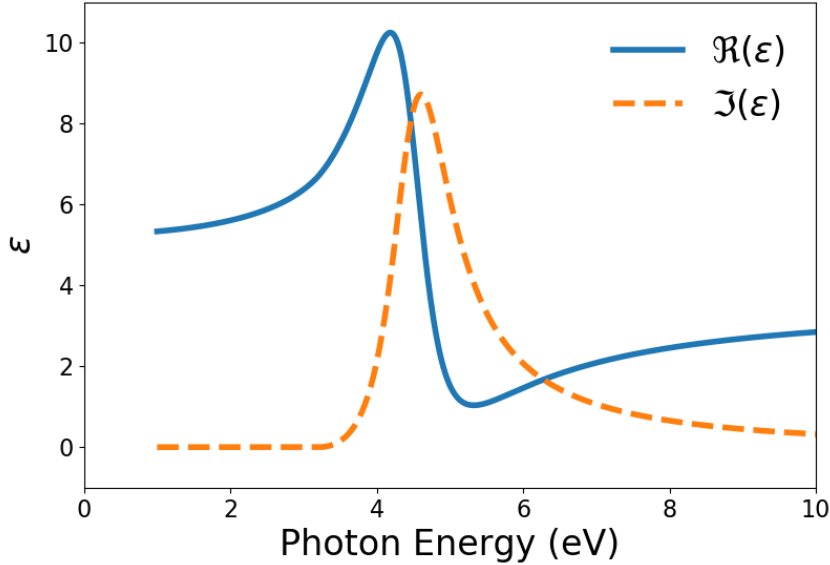
عملياً، يُختار الحد الأدنى للتكامل في المعادلة (1) ω_g بدلاً من 0، لأن نموذج تاك-لورنتز يتطلب أن تكون ϵ_2 صفراً لطاقات الفوتونات تحت فجوة النطاق. بما أن $\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2 = (n + ik)^2$ نجد:

$$\epsilon_1(\omega) = n^2(\omega) - k^2(\omega) \quad (14-1)$$

$$\epsilon_2(\omega) = 2n(\omega) \times k(\omega) \quad (15-1)$$

يؤدي تعويض المعادلة (15-1 و 14-1) في المعادلة (13-1) إلى كشف علاقة التشتت [12, 24] بين الأجزاء الحقيقية $n(\omega)$ والتخيلية $k(\omega)$ لقرينة الانكسار المركبة كما يلي:

$$n(\omega) = n(\infty) + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{k(\Omega)}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega \quad (16-1)$$



شكل 1-3. نموذج تاوك-لورنتز. تم رسم المركبات الحقيقية (الخط الأزرق المتصل) والتخيلية (الخط البرتقالي المتقطع) لدالة العزل الكهربائي النسبية باستخدام المعاملات: $E_g = 3.2 \text{ eV}$, $\varepsilon_{\infty} = 3.5$, و $C = 1 \text{ eV}$, $A = 100 \text{ eV}$, $E_0 = 4.5 \text{ eV}$.

نموذج درود Drude: في حالة المعادن يهيمن تفاعل الإلكترونات الحرة مع الإشعاع في سلوك وشكل دالة العزل الكهربائي. عموماً من أجل تواتر بلازما ω_p وتواتر ω_e لتشتت الكترون تأخذ دالة العزل لنموذج درود الشكل التالي:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\omega_e)} \quad (17-1)$$

لاحظ أن الثوابت البصرية المذكورة أعلاه، $n(\omega)$ و $k(\omega)$ ، يتم التعبير عنها على شكل $n(\lambda)$ و $k(\lambda)$ أثناء التنفيذ العددي. ونظرًا لأن $\omega = \frac{c}{\lambda}$ ، فإن ترتيب القيم في تسلسل n و k ينعكس عند تغيير المتغير المستقل من ω إلى λ .

يتم تنفيذ الحساب النظري للطيف $T_{theory}(n(\lambda), k(\lambda), d)$ لكل ثلاثية $n(\lambda), k(\lambda), d$ من خلال معاملات (وسائط) نماذج التشتت باستخدام معادلات فيرنل أو طريقة مصفوفة الانتقال، ثم تستخدم خوارزمية ملائمة مثل ليفنبرغ-ماركوارت (Levenberg–Marquardt) لتقليل الفرق بين الطيف المحسوب والطيف التجريبي. انتشرت هذه الطريقة منذ أوائل العقد الأول من القرن الحالي، إذ بينت الدراسات مثل دراسة لاي وآخرين [25] إمكانية استخلاص

سلك وثوابت أكسيد قصدير الإنديوم (ITO) بدقة عالية عبر تطبيق هذه الطريقة باستخدام نموذج تشتت مركب (فروهي-بلومر مع درود: يجمع بين تشتت فروهي-بلومر لنمذجة انتقالات النطاقات البينية المساهمة في n و k في نطاق الأشعة فوق البنفسجية-المرئية مع حد درود مُعدّل لتفسير امتصاص الموجات الحاملة الحرة في الأشعة تحت الحمراء)، وهو ما أتاح الحصول على الثوابت البصرية والسماكة بدقة، خصوصاً في النطاق الطيفي من الأشعة فوق البنفسجية إلى تحت الحمراء القريبة [17, 25].

تم تطبيق تقنيات ملائمة المربعات الصغرى اللاخطية أيضاً على الأغشية العازلة الصرفة (مثل TiO_2 و SiO_2 و Nb_2O_5) باستخدام صيغ تشتت في أبسط صورها (مثل معادلات كوشي أو سيلمير مع افتراض غالباً أن $k(\lambda) \approx 0$ في المنطقة الشفافة). بشكل عام، من خلال نمذجة أطيايف النفاذية باستخدام نماذج تشتت مناسبة وتطبيق تحسين المربعات الصغرى غير الخطية، تمكن الباحثون من استخراج الثوابت البصرية والسلك بدقة مقبولة. تتميز طريقة المربعات الصغرى اللاخطية بسرعة تقاربها عندما تتوفر تخمينات أولية جيدة وقريبة من القيم الحقيقية. كذلك، تسمح هذه الطريقة بافتراض نماذج تشتت فيزيائية واقعية. لكن من جهة أخرى، فإن هذه الطريقة قد تواجه مشكلات عديدة مثل الوصول إلى حلول محلية غير دقيقة إذا كانت التخمينات الأولية بعيدة عن القيم الفعلية، كما أن نجاح هذه الطريقة يعتمد بشدة على مدى ملائمة نموذج التشتت المفترض للخصائص البصرية الفعلية للمادة. لذلك، يتطلب الاستخدام الفعال لهذه الطريقة افتراضات مدروسة بعناية لتجنب النتائج المضللة [14, 19].

3-1 خوارزميات التحسين العالمية للنمذجة العكسية

تعاملت تقنيات التحسين العالمية مع مسألة النمذجة العكسية للأغشية الرقيقة باعتبارها مشكلة بحث استكشافي: حيث تستخدم خوارزميات تطويرية أو عشوائية لتوليد وتحديث مجموعة من الحلول المحتملة، وذلك بهدف إيجاد الحل الأمثل الذي يحقق أفضل توافق بين الطيف النظري والطيف التجريبي. منذ بداية الألفية، تم اعتماد العديد من هذه الخوارزميات في مجال استخلاص الثوابت البصرية وسماكة الأغشية، مثل: الخوارزميات الجينية (GA)، وتحسين سرب الجسيمات (PSO).

لا تتطلب هذه الخوارزميات تقديرات أولية دقيقة، وهي أقل عرضة للوقوع في الحلول المحلية الخاطئة، وإن كانت على حساب عدد أكبر من الحسابات المطلوبة. في ما يلي نستعرض أبرز الخوارزميات المستخدمة:

1-3-1 الخوارزميات الجينية

تستند الخوارزميات الجينية (Genetic Algorithms -GA) إلى مبادئ الطفرات، والتزاوج (العبور الوراثي)، والانتقاء الطبيعي لتطوير مجموعة من الحلول المحتملة. في سياق الأغشية الرقيقة، يمكن ترميز كل حل محتمل على شكل شعاع يحتوي على سماكة الغشاء ومجموعة من المعاملات التي تصف طيفي $n(\lambda)$ و $k(\lambda)$ في عمل مبكر قام به توريس كوستا Torres-Costa وآخرون [26]، تم استخدام ملائمة تعتمد على الخوارزمية الجينية لتحديد معامل الانكسار المركب وسماكة طبقات السيليكون المسامي، وإن كان ذلك باستخدام أطيايف الانعكاس. بعد فترة وجيزة، أظهر باحثون إمكانية استخدام الخوارزمية الجينية لاستخراج الثوابت البصرية استناداً فقط إلى بيانات النفاذية.

تُعد دراسة Gungor وآخرين [27] من الدراسات البارزة في هذا السياق، حيث طوروا خوارزمية جينية تعتمد على نموذج نظري لتوصيف أغشية ZnO النانوية من بيانات النفاذية في المجال الطيفي فوق البنفسجي-المرئي فقط. وقد أشاروا إلى أن طريقتهم لا تتطلب وجود أنماط تداخل واضحة – فحتى في حالة تلاشي هذه الأنماط (على سبيل المثال

بسبب خشونة السطح أو إذا كان الغشاء رقيقاً جداً)، يمكن للخوارزمية الجينية أن تتقارب إلى القيم الصحيحة للسماكة والثوابت البصرية. في منهجيتهم، كانت مجموعة الحلول في الخوارزمية الجينية تحتوي على معاملات نموذج تشتت خاص بـ ZnO (مع معاملات مرتبطة بفجوة الطاقة في عبارات $k(\lambda)$ و $n(\lambda)$) إلى جانب سماكة الغشاء. ومن خلال الأجيال المتعاقبة، (الحلول المنتخبة) قامت الخوارزمية الجينية بتقليل الخطأ بين الطيف المحاكى والطيف التجريبي. وكانت النتيجة استخراجاً سريعاً وموثوقاً للثوابت البصرية لغشاء ZnO ضمن المجال الطيفي 300–800 نانومتر، حتى في الحالات التي يكون فيها تحليل التداخل التقليدي غير ممكن. لقد ساعدت قدرة البحث الشامل لدى الخوارزمية الجينية في ضمان أن يكون الحل النهائي هو الحد الأدنى العام الحقيقي (أفضل توافق ممكن)، وليس حلاً زائفاً قد تقع فيه خوارزميات التحسين المحلية.

دمجت دراسات أخرى الخوارزميات الجينية مع استراتيجيات إضافية لتحسين الأداء. على سبيل المثال، يستخدم بعض الباحثين خوارزمية جينية ذاتية التكيف، تقوم بضبط معلماتها الجينية (مثل معدل الطفرات ومعدل التزاوج) بشكل ديناميكي لتجنب التقارب المبكر في فضاءات الخطأ المعقدة. كما تم استخدام نسخ معدلة من الخوارزمية الجينية في دراسة الأغشية متعددة الطبقات؛ فقد اقترحت إحدى الدراسات خوارزمية جينية معدلة (M-GA) لتحديد الثوابت البصرية لكل طبقة في بنية متعددة الطبقات من ZnO بشكل متسلسل. توضح هذه الدراسات مرونة الخوارزمية الجينية في معالجة مشاكل عكسية ذات أبعاد عالية. ومع ذلك، وفي نطاق هذه المراجعة التي تركز على الأغشية ذات الطبقة الواحدة، فإن النقطة الأساسية هي أن الخوارزميات الجينية أصبحت أداة مثبتة لاستخلاص معاملات $k(\lambda)$ و $n(\lambda)$ ، والسماكة من أطياف النفاذية، مقدمة بذلك متانة ضد التخمينات الأولية الضعيفة والبيانات المزعجة.

المزايا: تقوم الخوارزمية الجينية بعملية بحث شاملة مما يقلل من احتمالية تفويت الحل الأمثل العالمي. كما يمكنها التعامل مع نماذج معقدة متعددة المعاملات (بما في ذلك تمثيلات على مجالات محددة متعددة لـ $k(\lambda)$ و $n(\lambda)$ ، أو معاملات لمذبذبات متعددة) ويمكن دمج القيود بسهولة، مثل تضمين الاتساق مع علاقات كرامرز-كرونينغ أو حدود معروفة للمعاملات مباشرة في تمثيل الكروموسوم أو دالة الهدف. كما أن الخوارزمية الجينية قابلة للتوازي بطبيعتها؛ حيث يمكن تقييم عدة حلول مرشحة في وقت واحد، مما يسمح بتسريع التنفيذ على أنظمة حواسيب متعددة النوى multi-core systems.

العيوب: يمكن أن تكون الخوارزمية الجينية مكثفة حسابياً، إذ قد تتطلب آلاف التقييمات للنماذج الأمامية (حيث يكون كل تقييم حسابياً كاملاً للطيف باستخدام طرق المصفوفات) على مدار أجيال عديدة حتى تصل إلى التقارب، لا سيما إذا كان فضاء المعاملات كبيراً. كما أن ضبط معلمات الخوارزمية الجينية (مثل حجم السكان، احتمالية الطفرة، إلخ) يؤثر على النتائج، فقد تتقارب الخوارزمية ببطء أو تعلق في منطقة غير مثالية إذا لم تُضبط بشكل مناسب (مع أن هذا أقل احتمالاً مقارنة بالطرق المعتمدة على التدرج). بالإضافة إلى ذلك، وبمجرد الاقتراب من الحل الأمثل، قد تجعل الطبيعة العشوائية للخوارزمية الجينية عملية التنعيم والتعديل الدقيق أبطأ مقارنةً بأساليب التدرج. عملياً، يستخدم بعض الباحثين الخوارزمية الجينية لتحديد منطقة جيدة في فضاء المعاملات، ثم يتحولون إلى خوارزمية المربعات الصغرى اللاخطية المحلية (NLS) من أجل التكرير النهائي — وهو نهج هجين يجمع بين أفضل ما في الطريقتين.

1-3-2 خوارزميات سرب الجسيمات

يُعد تحسين سرب الجسيمات (Particle Swarm Optimization - PSO) طريقة تحسين عالمية قائمة على مجموعة من الحلول، مستوحاة من السلوك الاجتماعي للأسراب (مثل أسراب الطيور). في PSO، يمثل كل "جسيم"

حلاً مرشحاً (معاملات الغشاء)، حيث يتحرك عبر فضاء البحث ويعدل مساره بناءً على خبرته الشخصية وخبرة جيرانه. تم تطبيق PSO بنجاح لاستخلاص الخصائص البصرية للأغشية الرقيقة.

قدم Ruan وآخرون [15] نموذجاً عشوائياً لـ PSO (SPSO) في النمذجة العكسية لاستخلاص الثوابت البصرية وسماكة الأغشية الرقيقة. في عملهم، ركزوا على تحسين ملاءمة نموذج كوشي لبيانات النفاذية، وأظهروا أن PSO يمكنه استرجاع المعلمات بدقة دون الوقوع في الحد الأدنى المحلي — وهو خطر شائع في طرق التدرج البسيطة. كما درسوا قدرة الخوارزمية على مقاومة الأخطاء بإضافة ضوضاء تركيبية لبيانات النفاذية، فوجدوا أن النهج القائم على PSO قوي في وجود ضوضاء معتدلة، ويعطي نتائج صحيحة في الحالات التي تفشل فيها الطرق الأبسط.

يميل PSO إلى التقارب بشكل أسرع من الخوارزميات الجينية في كثير من الحالات، بفضل استخدامه للسرعة والذاكرة (حيث يتذكر الجسيم أفضل موقع تم العثور عليه حتى الآن). بالنسبة لمشاكل الأغشية الرقيقة، يعني هذا أن PSO قد يصل إلى حل جيد بعدد أقل من التقييمات مقارنة بـ GA، حيث تستغل الجسيمات المناطق الواعدة من فضاء المعلمات بشكل جماعي. تحوي الأدبيات العلمية تطبيقات متنوعة؛ يستخدم بعضها PSO الأساسي، بينما يستخدم البعض الآخر تنويعات هجينة مثل PSO مع التلدين المحاكى

(Simulated Annealing PSO - SA-PSO) لتعزيز قدرات البحث العالمي. عن الحل الأمثل أضافت التنويعات المحسنة تعديلات على وزن القصور الذاتي أو استخدام تسلسلات فوضوية لتجنب الركود.

بشكل عام، أُبلغ عن استخدام النمذجة العكسية القائمة على PSO في مواد تتراوح بين العوازل البسيطة إلى أشباه الموصلات الممتصة، وغالباً في نطاق الأشعة فوق البنفسجية-المرئية حيث يكون الحصول على $k(\lambda)$ من بيانات النفاذية فقط أمراً معقداً. من خلال استكشاف فضاء السماكة ومعاملات التشتت، يمكن لـ PSO اكتشاف حلول تطابق الطيف الكامل.

المزايا: يُعد PSO بسيطاً في التنفيذ ويحتوي على عدد قليل من المعاملات التي يجب ضبطها (أساساً معاملات الإدراك والاجتماع، بالإضافة إلى معامل القصور الذاتي). يتقارب بسرعة نسبية من خلال موازنة الاستكشاف والاستغلال — حيث تشارك الجسيمات المعلومات حول الحلول الجيدة، مما يسرع عملية البحث. مثل الخوارزميات الجينية، لا يتطلب PSO دوال هدف قابلة للاشتقاق، لذا فإنه يتعامل بشكل جيد مع النماذج المعقدة أو غير المستمرة. كما أنه سهل التوازي.

العيوب: قد يتقارب PSO أحياناً إلى حل دون الأمثل إذا فقد السرب تنوعه مبكراً (عندما تتجمع الجسيمات حول جاذب محلي). لذا، فإن الضبط الصحيح لوزن القصور الذاتي أو استخدام تقنيات مثل إعادة تهيئة الجسيمات المتوقفة ضروري للمشاكل الصعبة. بالإضافة إلى ذلك، ورغم كونه عادة أسرع من الخوارزميات الجينية، قد يحتاج PSO إلى عدد كبير من تقييمات الدالة في حالة المشاكل ذات الأبعاد العالية جداً (على سبيل المثال، إذا حاول المرء استخراج $n(\lambda)$ عند عشرات الأطوال الموجية المنفصلة دون وجود نموذج تحليلي بسيط، يصبح فضاء المعلمات كبيراً). وأخيراً، وبمثلما هو الحال مع الخوارزميات الجينية، يوفر PSO ضماناً عشوائياً (أي أنه من المحتمل أن يجد حلاً قريباً من الحل الأمثل العام مع عدد كافٍ من التكرارات) لكنه ليس ضماناً حتمياً — قد تكون هناك حاجة لتكرار التشغيل عدة مرات لتأكيد اتساق النتائج.

4-1 مقارنة بين الطرق

لكل تقنية من تقنيات النمذجة العكسية نقاط قوة وضعف، وقد يعتمد اختيار "أفضل" طريقة على خصائص نظام الغشاء وجودة البيانات المتوفرة. فيما يلي نقاش مقارن:

1-4-1 المربعات الصغرى الخطية (التحسين الموضعي):

• المزايا: تقارب سريع جداً عند بدء الحساب بتخمينات قريبة من الحل الصحيح؛ تنفيذها مباشر ويوجد العديد من المكتبات البرمجية المتاحة لها. تعطي ملاءمة دقيقة إذا كان النموذج قادراً على وصف البيانات بدقة، وعادةً ما توفر تقديرات عدم اليقين للمعاملات عبر تحليل التباين.

• القصور: تتطلب تخمينات أولية جيدة؛ وإلا فقد تتقارب إلى حلول خاطئة (حدود دنيا محلية). تعتمد بشدة على نموذج التشتت المختار؛ فإذا اختلف السلوك البصري الحقيقي عن النموذج، ستكون الملاءمة منحازة. غير متينة ضد الضوضاء الكبيرة أو غياب الخصائص الطيفية الواضحة (قد تعطي ملاءمة خاطئة إذا كان الطيف مسطحاً أو أحادي التوجه بدون تداخلات). في المناطق الممتصة بالكامل التي لا تظهر تداخلات، قد لا تتمكن الملاءمة الموضوعية من تحديد السماكة مقابل k بشكل مستقل بدون معلومات إضافية.

1-4-2 الخوارزميات الجينية

• المزايا: فعالة جداً في البحث العالمي — يمكنها إيجاد الحلول دون الحاجة إلى تقديرات أولية. تتعامل جيداً مع فضاءات المعلمات المنقطعة أو المختلطة (مثلاً، يمكن استخدامها لاختيار نوع النموذج أو عدد المذبذبات كجزء من الكروموسوم). قادرة على التعامل مع البيانات المزعجة أو غير المكتملة من خلال استكشاف العديد من الاحتمالات وربما استخدام متوسط اللياقة. أظهرت العديد من الحالات نجاحها في استخراج معلمات الأغشية الصحيحة حتى في حالة غياب أو تلاشي أنماط التداخل.

• القصور: مكلفة حسابياً — قد تتطلب عدداً كبيراً من السكان وأجيالاً عديدة، مما يعني آلاف المحاكاة الطيفية. دقة الحل محدودة بدقة السكان؛ وقد يكون التنعيم دقيقاً وبطيئاً. يتطلب ضبط معلمات الخوارزمية (مثل معدل الطفرات) والذي قد يحتاج إلى تكييف خاص بالمشكلة. كل تشغيل عشوائي؛ النتائج قد تختلف قليلاً بين التشغيلات (مع أنها عادةً ما تتقارب إلى قيم مماثلة إذا أُجريت بشكل صحيح).

1-4-3 خوارزميات سرب الجسيمات

• المزايا: عادةً ما يتقارب أسرع من GA باستخدام ذكاء السرب — حيث تقترب الجسيمات بسرعة من المناطق الجيدة. الفكرة والتنفيذ بسيطان. عدد قليل من المعلمات للتعديل؛ وغالباً ما تعمل جيداً مع الإعدادات الافتراضية. ثبتت قدرتها على استرجاع الثوابت البصرية بثبات ومقاومة جيدة للضوضاء.

• القصور: قد تحاصر أحياناً في حدود دنيا محلية إذا فقد السرب تنوعه (تجمع جميع الجسيمات خلف قائد فرعي). ليست مناسبة جوهرياً للمعلمات المنقطعة (مع أن مشاكل الأغشية الرقيقة عادةً ما تكون مستمرة). حساسة إلى حد ما لعوامل الوزن (القصور الذاتي، الإدراك، الاجتماعي) — إعدادات غير صحيحة قد تؤدي إلى تقارب بطيء أو تقارب مبكر. مثل GA، قد يُنصح بتشغيلها عدة مرات لضمان اتساق النتائج.

1-4-4-4 أهمية القيود

بغض النظر عن الخوارزمية المستخدمة، من المهم إدراك أنه بدون معلومات إضافية، قد تكون مشكلة النمذجة العكسية باستخدام بيانات النفاذية فقط غير فريدة. على سبيل المثال، قد ينقل غشاء أكثر سمكًا مع معامل انكسار أقل قليلاً الضوء بطريقة مشابهة لغشاء أرق مع معامل انكسار أعلى، لا سيما إذا تم قياس مدى طيفي محدود فقط. لمواجهة هذه المشكلة، تعد القيود الفيزيائية والمعرفة السابقة ضرورية للغاية. تدمج العديد من الطرق التي تم مراجعتها مثل هذه القيود، مثل اشتراط أن يكون $k(\lambda) \geq 0$ لجميع الأطوال الموجية، واستخدام صيغ تشتت متسقة مع علاقات كرامرز-كرونينغ، أو تثبيت بعض المعاملات (مثل معامل الانكسار المعروف للركيزة أو معامل الانكسار المعروف للغشاء عند طول موجي محدد). قدمت مقارنة شامبوليرون وزملائه في عام 1997 قيودًا خطية لإدماج المعرفة السابقة وضمان حلول ذات معنى فيزيائي. وبالمثل، كثيرًا ما تحدد التطبيقات الحديثة نطاقات البحث بناءً على خصائص المواد المعروفة (مثل نطاقات فجوات الطاقة). إن فرض هذه القيود لا يؤدي فقط إلى حلول ذات طابع فيزيائي واقعي، بل يقلل أيضًا من مساحة البحث، مما يسرع من عملية التقارب.

1-4-4-5 التكلفة الحسابية

مع قوة الحوسبة الحالية، أصبح البحث العالمي ممكنًا حتى في عمليات الانعكاس لأغشية ذات طبقة واحدة ضمن زمن معقول. تشير العديد من الدراسات إلى أن زمن الحساب يتراوح من ثوانٍ إلى دقائق لعمليات ملائمة المربعات الصغرى اللاخطية (NLS) ومن دقائق إلى ساعات لتشغيل الخوارزميات الجينية (GA) أو تحسين سرب الجسيمات (PSO)، وذلك حسب تعقيد المشكلة. على سبيل المثال، أشار Gungor وآخرون [27] إلى أن خوارزميتهم الجينية احتاجت فقط إلى بضع دقائق لتوصيف أغشية ZnO، ويرجع ذلك جزئيًا إلى بساطة النموذج والتقارب السريع للخوارزمية. من ناحية أخرى، قد تستغرق عملية ملائمة متعددة المذبذبات باستخدام CMA-ES (كما في دراسة دوتا Dutta [9] باستخدام بيانات الانعكاس والنفاذية) عدة ساعات على حاسوب شخصي عادي. ولحسن الحظ، يمكن توازي هذه المهام بسهولة والاستفادة من وحدات المعالجة المركزية والرسومومية الحديثة. في إعدادات الأطروحة أو المختبر، يمكن تشغيل تحسين عالمي مستمر طوال الليل للحصول على نتائج يصعب تحقيقها بالملاءمة اليدوية.

1-4-4-5 ملخص الأداء

باختصار، تعتبر طرق المربعات الصغرى اللاخطية المحلية مثالية عندما تتوفر بيانات عالية الجودة مع ميزات واضحة وتخمين أولي جيد — حيث تعطي نتائج دقيقة بسرعة وسهولة في التنفيذ. تتألق طرق النمذجة العكسية العالمية عندما تكون المشكلة أكثر تعقيدًا: قد تكون البيانات مشوشة، والميزات غير واضحة (مثل غياب التداخلات الواضحة)، أو فضاء المعلمات واسع ومتعدد النمط. توفر هذه الطرق ثقة أكبر في الوصول إلى الحل العالمي الحقيقي، ويمكنها دمج نماذج معقدة، على حساب الجهد الحاسوبي. كما أن الأساليب الهجينة (البحث العالمي متبوعًا بالتكرير المحلي) شائعة أيضًا، حيث تستفيد من مزايا كل من الطريقتين. يقدم الجدول 1-1 مقارنة موجزة للدراسات الرئيسية التي استخدمت هذه الطرق خلال الـ 25 سنة الماضية، موضحة نطاق المواد والخوارزميات والفترات الطيفية والنتائج. في الختام، نمت النمذجة العكسية لتصبح نهجًا أساسيًا في توصيف الخصائص البصرية للأغشية الرقيقة. من خلال الاعتماد فقط على بيانات الطيف الانتقالي والنمذجة النظرية، يمكن الحصول على فهم تفصيلي لثوابت الغشاء البصرية عبر الطيف فوق البنفسجي-المرئي. يُعد هذا مفيدًا بشكل خاص في حال عدم توفر قياسات أخرى مثل الانعكاس أو الإليبيسومترية، أو عندما يرغب الباحث في تقييم سريع وغير مدمر باستخدام جهاز مطياف بسيط.

جدول 1-1 . ملخص الدراسات الرئيسية لاستخراج الثوابت البصرية وسُمك الأغشية الرقيقة من بيانات النفاذية باستخدام النمذجة العكسية

المؤلفون	السنة	المواد المدروسة	التقنية المستخدمة	المدى الطيفي (nm)	النتائج الرئيسية
تشمبوليرون وآخرون [14]	1997	سيليكون غير متبلور	تحسين غير مقيد	900-400	استخراج المعاملات مع غياب التداخل الواضح
لاي وآخرون [25]	2007	أكسيد قصدير الإنديوم	مربعات صغرى لأخطية	1800-300	تحديد دقيق للسماكة والثوابت البصرية
غونغور وآخرون [27]	2016	أكسيد الزنك	خوارزمية جينية	800-300	استخراج البيانات دون تداخل واضح
روان وآخرون [15]	2016	مادة عامة	تحسين سرب الجسيمات	700-400	سرعة عالية ومقاومة جيدة للضوضاء
دوتا وآخرون [9]	2022	بيروفسكيت وسيليكون	خوارزميات هجينة	1000-350	دقة عالية في البيانات المعقدة

شهدت الفترة من 2000 إلى 2025 توسعًا في أدوات النمذجة، من ملاءمة المربعات الصغرى الأساسية إلى طرق بحث عالمية متقدمة، حيث وجدت كل طريقة مكانها في التطبيقات البحثية والصناعية. من المتوقع أن تستكشف التطورات المستقبلية تقنيات تعلم الآلة كبداية، وخوارزميات هجينة إضافية لتسريع وأتمتة عمليات النمذجة العكسية بشكل أكبر. لكن المبدأ الأساسي سيظل قائمًا: مقارنة الأطياف المحسوبة مع الأطياف المقاسة وتحسين المطابقة بشكل تكراري — وهو نموذج قوي يحول منحني نفاذية الضوء إلى خصائص مادية كمية.

الفصل الثاني

مقدمة في علم التحسين والتحسين الرياضي

يُعدّ التحسين أداة بالغة الأهمية في علم اتخاذ القرار وتحليل الأنظمة الفيزيائية [28]. فلكي نستفيد من هذه الأداة، يجب علينا أولاً تحديد هدف معين، وهو مقياس كمي لأداء النظام الذي ندرسه. قد يكون هذا الهدف هو الربح، أو الوقت، أو طاقة الوضع، أو أي كمية أو مجموعة من الكميات التي يمكن تمثيلها بقيمة سلمية اوعدد. ويعتمد هذا الهدف على خصائص معينة للنظام، تُسمى المتغيرات أو المجاهيل. وغايتنا هي إيجاد قيم للمتغيرات تُحسّن الهدف إلى أقصى أو أدنى حد ممكن. وغالباً ما تكون هذه المتغيرات مقيدة بطريقة ما، فمثلاً في الفيزياء، لا يمكن أن تكون كثافة الإلكترون في الجزيء سالبة، كما لا يمكن أن تتجاوز سرعة الجسم سرعة الضوء [29].

تتجلى تطبيقات التحسين بشكل واضح في مجال الفيزياء، حيث يمكننا استخدامه لحل مشكلات مثل إيجاد أقصر مسار للضوء بين نقطتين (مبدأ فيرمات)، أو تحديد توزيع الطاقة في المواد بحيث يكون أقل ما يمكن (حالة الاستقرار)، أو تحسين تصميم الأنظمة الميكانيكية لتعمل بأقصى كفاءة ممكنة. فعلى سبيل المثال، في الديناميكا الحرارية، نسعى لتحديد النقطة التي يكون عندها الإنتروبي في أقصى قيمة لها، وفي الميكانيكا الكلاسيكية، نبحث عن المسار الذي يُقلل من الفعل بين نقطتين في الزمكان. كما يلعب التحسين الرياضي دوراً محورياً في توصيف الخواص البصرية للأغشية الرقيقة، حيث يهدف إلى تحديد المعلمات غير المعروفة — مثل معاملات الانكسار $n(\lambda)$ ، ومعامل الامتصاص $k(\lambda)$ ، وسماكة الغشاء d — التي تحقق أفضل توافق مع الأطياف البصرية المقاسة، كبيانات الانتقال أو الانعكاس.

عملية تحديد الهدف والمتغيرات والقيود لمشكلة معينة تُعرف بالتمذجة. ويُعد بناء نموذج مناسب هو الخطوة الأولى - وربما الأهم - في عملية التحسين. إذا كان النموذج مبسطاً جداً، فلن يعطي رؤى مفيدة للمشكلة العملية. وإذا كان معقداً جداً، فقد يكون من الصعب للغاية حله. ففي الأغشية المتبلورة، على سبيل المثال، يمكن نمذجة الاستجابة البصرية باستخدام معادلات تعتمد على معلمات فيزيائية محددة، وبالتالي يصبح استرجاع هذه المعلمات مسألة تحسين تهدف إلى تقليل الفرق بين الطيف المقاس والنموذج النظري. وبعد صياغة النموذج، يمكن استخدام خوارزمية تحسين لإيجاد الحل، عادةً بمساعدة الحاسوب. ولا توجد خوارزمية تحسين عالمية واحدة، بل مجموعة من الخوارزميات،

كل منها مصمم لنوع معين من مشاكل التحسين، وتقع مسؤولية اختيار الخوارزمية المناسبة لتطبيق معين في كثير من الأحيان على عاتق المستخدم.

بعد تطبيق خوارزمية التحسين على النموذج، يجب أن نكون قادرين على تحديد ما إذا كانت قد نجحت في مهمتها في إيجاد الحل. في كثير من الحالات، توجد تعبيرات رياضية أنيقة تعرف باسم شروط الأمثلية للتحقق من أن مجموعة المتغيرات الحالية هي بالفعل حل المشكلة. إذا لم تكن شروط الأمثلية مستوفاة، فقد توفر معلومات مفيدة حول كيفية تحسين التقدير الحالي للحل. يمكن تحسين النموذج من خلال تطبيق تقنيات مثل تحليل الحساسية، الذي يكشف عن حساسية الحل للمتغيرات في النموذج والبيانات. كما قد يشير تفسير الحل من حيث التطبيق إلى طرق يمكن من خلالها تحسين النموذج أو تصحيحه. وإذا تم إجراء أي تغييرات على النموذج، يتم حل مشكلة التحسين من جديد، وتتكرر العملية.

يعرض هذا الفصل لمحة عامة عن طرق التحسين الرياضي وأشهر تقنياته الرياضية والعديد التي تستخدم في إيجاد الحلول. كما يشمل العرض امثلة توضيحية وبرمجة بلغة ماتلاب.

1-2 التحسين الرياضي :

التحسين الرياضي Mathematical Optimization أو ما يُعرف بالبرمجة الرياضية، هو اطار منهجي لدراسة المشاكل وإيجاد الحلول المثلى لها استنادًا إلى أساليب رياضية وتحليلية دقيقة [28, 30, 29]. رياضيا يمكن صياغة مشاكل التحسين ذات الأهداف الصريحة بالصيغة الرياضية العامة التالية:

$$\begin{aligned} & \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \text{ or } \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) \\ & \text{subject to :} \\ & \phi_i(\mathbf{x}) = 0 \quad (i = 1, \dots, N) \\ & \psi_k(\mathbf{x}) \leq 0 \quad (k = 1, \dots, M), \end{aligned} \quad (1-2)$$

حيث $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}$ و $f(\mathbf{x})$ و $\phi_i(\mathbf{x})$ و $\psi_i(\mathbf{x})$ هي في الغالب داول سلمية لمركبات الشعاع \mathbf{x} . يعني دوال معرفة على \mathbb{R}^n وصورها في \mathbb{R} . تمثل مركبات الشعاع \mathbf{x} متغيرات او وسائط التحسين في المسألة. يسمى الشعاع \mathbf{x} كذلك بشعاع القرار او شعاع التحسين ويأخذ بصفة عامة قيما مختلفة في فضاء عالي الابعاد بـ n بعد: \mathbb{R}^n . الدالة $f(\mathbf{x})$ تسمى بدالة الهدف وهي الدالة المراد تقليل قيمتها او تعظيمها بدلالة متغيرات التحسين. كذلك تسمى الدوال $\phi_i(\mathbf{x})$ و $\psi_i(\mathbf{x})$ بدوال القيود على متغيرات التحسين في شكل معادلات قيود عددها N و متراجحات قيود عددها M على الترتيب، وبالتالي بمجموع قيود على اختلافها عددها $N + M$. يُقال إن الشعاع \mathbf{x}^* هو الحل الأمثل أو اختصارا الحل لمسألة التحسين إذا كان يُفضي الى أصغر قيمة لدالة الهدف بين جميع الأشعة الأخرى التي تحقق نفس القيود [31].

الفضاء الذي تشغله متغيرات القرار يُسمى فضاء البحث (الفضاء \mathbb{R}^n)، بينما الفضاء المُشكَّل بواسطة صور دالة الهدف يُسمى فضاء الحل. مسألة التحسين تقوم بشكل أساسي بتحويل مجال أو فضاء متغيرات القرار \mathbb{R}^n إلى فضاء الحل (غالبا \mathbb{R}) بالدالة $f(\mathbf{x})$.

مثال: لتوضيح الافكار نعتبر مسألة التحسين التالية:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2} f(\mathbf{x}) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2 \quad (2-2)$$

subject to :

$$(x_1^2 - x_2) \leq 0 \quad (3-2)$$

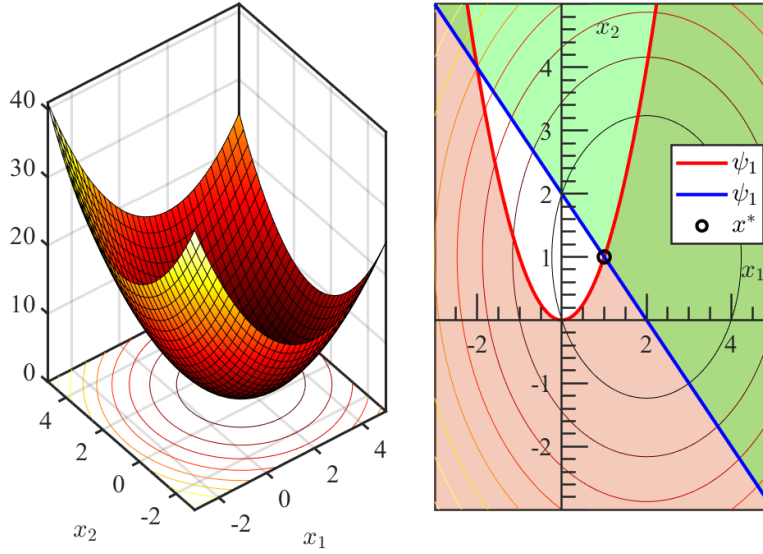
$$(x_1 + x_2) \leq 2, \quad (4-2)$$

هذه المسألة لا تتوفر على قيود معادلات مما يعني أن $\phi_i(\mathbf{x}) = \emptyset$ في حين يأخذ الشعاع \mathbf{x} وقيود المتراجحات $\psi_i(\mathbf{x})$ الشكل التالي:

$$\psi(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \psi_1(\mathbf{x}) \\ \psi_2(\mathbf{x}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} , x_2 - x_1^2 \leq 0 \\ x_1 + x_2 - 2 \leq 0 \end{bmatrix}, \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \quad M = \{1, 2\}, \quad N = \emptyset. \quad (5-2)$$

يوضح الشكل 1-2 خطوط تساوي دالة الهدف، أي مجموعة النقاط من الفضاء الثنائي التي تحافظ فيها الدالة على قيمة ثابتة. كما يوضح أيضاً منطقة فضاء البحث، وهي مجموعة النقاط التي تحقق جميع القيود (المساحة بين حدي القيدين). وكذلك النقطة \mathbf{x}^* المثلى.

يوضح المثال السابق أيضاً أن مجموعة من التحويلات على المسألة غالباً ما تكون ضرورية للتعبير عن مشكلة التحسين في الصيغة النموذجية الموصوفة في المعادلة (2-2). في كثير من الأحيان، يكون أكثر طبيعية أو ملاءمة تسمية المجاهيل باستخدام اثنين أو ثلاثة من الرموز الفرعية، أو الإشارة إلى متغيرات مختلفة بأسماء مختلفة تماماً، مما يجعل إعادة التسمية ضرورية لصياغة المشكلة في النموذج (2-2). من شائع ايضاً اننا قد نكون مطالبون بتعظيم دالة الهدف $f(\mathbf{x})$ بدلاً من تقليلها، في هذه الحالة يكفي تحويل المسألة بسهولة عن طريق تقليل الدالة $-f(\mathbf{x})$ بدلاً من تعظيم $f(\mathbf{x})$.



شكل 2-1 . التمثيل الهندسي لمسألة التحسين النموذجية الموصوفة بالمعادلة 2-2 . المنطقة غير المضللة على اليمين تمثل فضاء البحث. الصورة الى اليسار تمثل رسم لدالة الهدف في ثلاثة ابعاد.

2-2 التحسين المُقيّد وغير المُقيّد:

يمكن تصنيف مسائل التحسين ذات الصيغة العامة (2-2) وفقاً لطبيعة دالة الهدف والقيود (خطية، غير خطية، محدبة)، وعدد المتغيرات (كبير أو صغير)، ونعومة الدوال (قابلة للتفاضل أو غير قابلة للتفاضل)، وغير ذلك. ومن التمييزات المهمة هو ما إذا كانت المشكلة تحتوي قيوداً على المتغيرات أم لا [30, 32, 33].

2-2-1 التحسين غير المُقيّد:

تنشأ مسائل التحسين غير المُقيّد Unconstrained Optimisation ، والتي تكون فيها $N = M = \emptyset$ في المعادلة (2-2)، بشكل مباشر في العديد من التطبيقات العملية. حتى في بعض مسائل التي تحتوي على قيود طبيعية على المتغيرات، قد يكون من الآمن تجاهل هذه القيود إذا لم تؤثر على الحل ولم تتداخل مع عمل الخوارزميات. كما تنشأ مشكلات التحسين غير المُقيّد أيضاً كإعادة صياغة لمشكلات التحسين المُقيّد، حيث يتم استبدال القيود ببنود صارمة تُضاف إلى دالة الهدف بهدف التقليل من تأثير و انتهاكات القيود. [31, 34]

2-2-2 التحسين المُقيّد:

تنشأ مسائل التحسين المُقيّد Constrained Optimisation من نماذج تلعب فيها القيود دوراً أساسياً، على سبيل المثال عند فرض قيود الميزانية في مسألة اقتصادية أو قيود على الشكل في مسألة تصميم. وقد تكون هذه القيود بسيطة مثل قيود حدودية على الحدود: $0 \leq x_1 \leq 100$ أو قيوداً خطية أكثر تعميمًا مثل: $\sum x_i \leq 1$ أو قيوداً لا خطية تمثل علاقات معقدة بين المتغيرات [29, 31].

3-2 البرمجة الخطية وغير الخطية والمحدبة:

عندما تكون دالة الهدف وجميع القيود دوالاً خطية في x ، وجميعها بشكل مماثل للتالي تحقق :

$$\phi_i(\alpha \mathbf{x} + \beta \mathbf{y}) = \alpha \phi_i(\mathbf{x}) + \beta \phi_i(\mathbf{y}), \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbf{R}^n, \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbf{R}. \quad (6-2)$$

تُعد حينها المسألة مسألة برمجة خطية Linear programming¹ ويمكن صياغتها رياضياً بالمعادلة [29, 28, 30]:

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n} f(\mathbf{x}) &= \mathbf{c}^T \mathbf{x} + b \\ \text{subject to :} & \end{aligned} \quad (7-2)$$

$$\phi_i(\mathbf{x}) = \mathbf{a}_i^T \mathbf{x} - b_i = 0 \quad (i = 1, \dots, N)$$

$$\psi_k(\mathbf{x}) = \mathbf{a}_k^T \mathbf{x} - b_k \leq 0 \quad (k = 1, \dots, M),$$

هنا الأشعة $\mathbf{c}, \mathbf{a}_i, \mathbf{a}_k \in \mathbf{R}^n$ والقيم السلمية $b_i, b_k \in \mathbf{R}$ هي وسائط تدخل في تعريف دالة الهدف والقيود للمسألة الخطية. وتُعد مسائل هذا النوع من أكثر مسائل التحسين التي يتم صياغتها وحلها، خصوصاً في التطبيقات الإدارية والمالية والاقتصادية. أما مسائل البرمجة غير الخطية Nonlinear programming، والتي تحتوي على بعض القيود أو دالة الهدف كدوال غير خطية، فإنها تميل إلى الظهور بشكل طبيعي في العلوم الفيزيائية والهندسية، وتزداد استخداماً مؤخراً في العلوم الإدارية والاقتصادية. من الشائع أيضاً تداول مصطلح البرمجة المحدبة Convex programming وهو صنف من اصناف طرق التحسين تكون فيه دالة الهدف ودوال القيود محدبة، بمعنى أنها تحقق:

$$\phi_i(\alpha \mathbf{x} + \beta \mathbf{y}) \leq \alpha \phi_i(\mathbf{x}) + \beta \phi_i(\mathbf{y}), \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbf{R}^n, \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbf{R}. \quad (8-2)$$

with :

$$\alpha + \beta = 1, \quad \alpha \geq 0, \beta \geq 0 \quad (9-2)$$

4-2 التحسين العالمي والمحلي:

تسعى العديد من الخوارزميات المستخدمة في حل مسائل التحسين غير الخطي إلى إيجاد حل محلي Local فقط، وهو نقطة تكون فيها دالة الهدف أصغر من قيمتها في جميع النقاط المجاورة الممكنة الأخرى. هذه الخوارزميات لا تضمن دائماً إيجاد الحل العالمي Gobal، وهو النقطة التي تأخذ عندها الدالة أقل قيمة لها من بين جميع النقاط الممكنة. لذلك شاع استخدام مصطلح التحسين العالمي والمحلي Gobal and Local Optimisation في كثير من مسائل التحسين الرياضي.

في بعض التطبيقات، يكون من الضروري إيجاد الحل العالمي، ولكن في كثير من المشكلات، يصعب التعرف عليه، ويصعب بشكل أكبر تحديد موقعه. في مسائل البرمجة المحدبة، وخصوصاً في البرمجة الخطية، فإن الحلول المحلية تكون أيضاً حلولاً عالمية. أما في المسائل غير الخطية العامة، سواء كانت مقيدة أو غير مقيدة، فقد توجد حلول محلية لا تمثل حلولاً عالمية.

¹ من الجدير بالذكر أن مصطلح البرمجة هنا يعني التخطيط، ولا علاقة له ببرمجة الحاسوب، وتشابه الألفاظ مجرد صدفة بحتة.

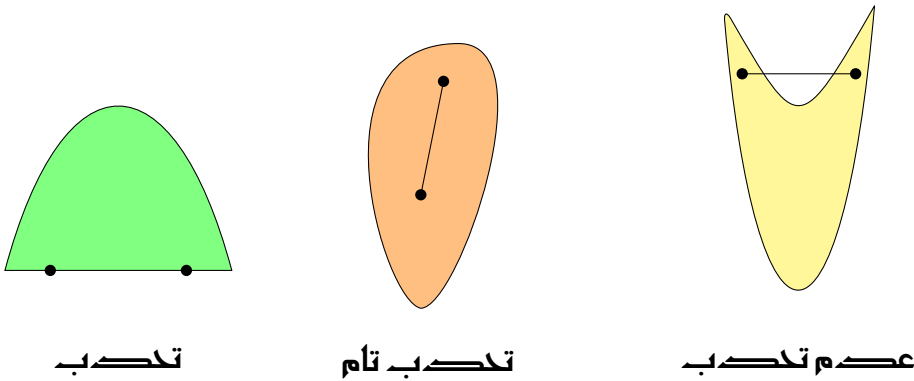
5-2 التحذب:

يُعتبر مفهوم التحذب Convexity من المفاهيم الأساسية في علم التحسين. فالعديد من المسائل العملية تمتلك هذه الخاصية، مما يجعلها عمومًا أسهل في الحل من الناحية النظرية والتطبيقية. تستخدم صفة محدب لوصف كل من المجموعات والدوال على حد سواء. يستخدم التحذب رياضياً كقياس لعدم الخطية الدوال والعلاقات. هندسياً، المجموعة $S \subset \mathbb{R}^n$ تُنعت مجموعة محدبة إذا كانت القطعة المستقيمة الواصلة بين أي نقطتين داخل S تقع بالكامل داخل S كما يبين الشكل 2-2. بشكل رياضي، لأي نقطتين $x \in S$ و $y \in S$ ، فإن: $\alpha x + (1-\alpha)y \in S \forall \alpha \in [0, 1]$. وتُعد الدالة $f(x)$ دالة محدبة إذا كان مجال تعريفها S مجموعة محدبة، وإذا تحققت مع ذلك الخاصية التالية لأي نقطتين x و y من S :

$$f(\alpha x + \beta y) \leq \alpha f(x) + \beta f(y), \quad \forall x, y \in S, \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbf{R}. \quad (10-2)$$

with :

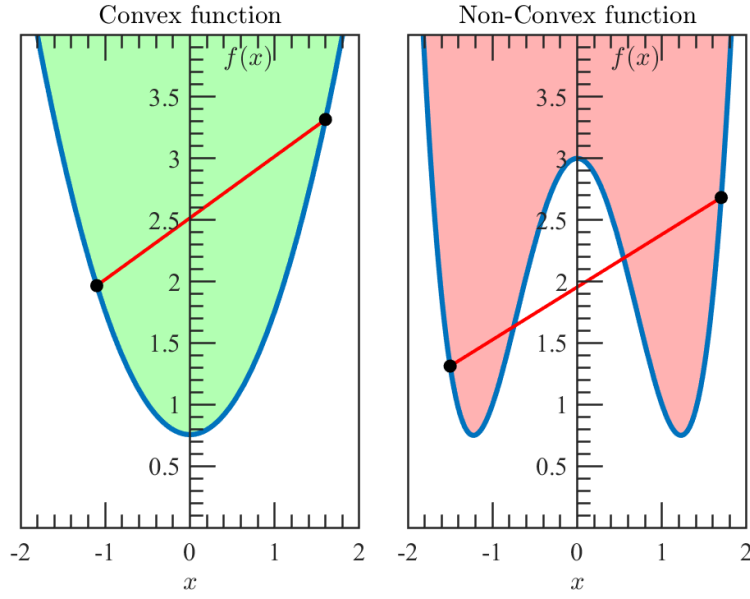
$$\alpha + \beta = 1, \quad \alpha \geq 0, \beta \geq 0 \quad (11-2)$$



شكل 2-2. امثلة هندسية بسيطة عن المجموعات المحدبة وغير المحدبة.

بعبارة مكافئة تماماً، تُسمى الدالة ذات القيم الحقيقية محدبة إذا كان القطعة المستقيمة الواصلة بين أي نقطتين مختلفتين على منحنى الدالة² تقع فوق المنحنى أو عليه بين هاتين النقطتين. وبصيغة مكافئة أيضاً، تكون الدالة محدبة إذا كان لرسم الفوقي³ لها epigraph (وهو مجموعة النقاط الواقعة على و فوق منحنى الدالة) يُشكل مجموعة محدبة كما يبين الشكل 3-2.

² من أجل دالة $f : X \rightarrow Y$ يعرف رسمها او منحنىها بـ: $\text{graph } f := \{(x, y) \in X \times Y : y = f(x)\}$
³ من أجل دالة $f : X \rightarrow [-\infty, \infty]$ يعرف رسمها الفوقي بـ: $\text{epi } f = \{(x, r) \in X \times \mathbf{R} : r \geq f(x)\}$



شكل 2-3. تكون الدالة باللون الأزرق محدبة إذا وفقط إذا كانت المنطقة الواقعة فوق منحناها مجموعة محدبة. على يمين دالة غير محدبة، بينما إلى اليسار دالة محدبة.

مثال: الدالة $f(x) = x^2 + 1$ هي دالة محدبة لأنها تحقق:

$$(\alpha x + \beta y)^2 - 1 \leq \alpha(x^2 - 1) + \beta(y^2 - 1), \quad \forall x, y \in \mathbf{R}, \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbf{R}. \quad (12-2)$$

using $\alpha + \beta = 1$:

$$\alpha x^2 + \beta y^2 - (\alpha x + \beta y)^2 \geq 0,$$

$$\alpha x^2 + \beta y^2 - \alpha^2 x^2 - 2\alpha\beta xy - \beta^2 y^2$$

$$= \alpha(1 - \alpha)(x - y)^2$$

$$= \alpha\beta(x - y)^2 \geq 0,$$

وهذا دائما محقق لان $\alpha, \beta \geq 0$ و $(x - y)^2 \geq 0$.

من بين الامثلة المشهورة عن الدوال المحدبة نذكر كذلك الدوال الخطية من الشكل $f(x) = a^T x + b$ ، من اجل $a \in \mathbf{R}^n$ و $b \in \mathbf{R}$ ، والدوال التربيعية ذات الصيغة $f(x) = x^T A x$ بشرط ان تكون المصفوفة A هي مصفوفة متناظرة شبه محددة موجبة .

6-2 القيم الدنيا والعظمى العالمية والمحلية:

في مسائل التحسين، يشير مصطلح القيم الدنيا المحلية والعالمية Gobaal and Local Optima إلى أدنى نقاط الدالة ضمن منطقة معينة أو على كامل مجال تعريفها، على التوالي. الحضيض المحلي أو المحلي إختصارا هو النقطة التي تكون فيها قيمة الدالة أصغر من قيمها عند النقاط المجاورة، بينما الحضيض العالمي أو الحضيض المطلق هو أدنى نقطة مطلقة على كامل المجال. في المقابل، القيم العظمى المحلية هي أعلى النقاط ضمن منطقة أو

مجال معين للدالة، في حين أن القيم العظمى العالمية أو القمم هي أعلى النقاط عبر المجال بأكمله للدالة. المجموعة S التي يتم فيها تنفيذ تحسين f تسمى أيضاً المجموعة الممكنة أو المتاحة feasible set، وأي نقطة $x \in S$ تسمى حلاً ممكناً أو حلاً متاحاً feasible solution. ونكتب رياضياً من أجل دالة $f : S \rightarrow \mathbf{R}$ معرفة على مجموعة $S \subset \mathbf{R}^n$:

حضيض محلي Local minimum: يكون $x^* \in S$ حضيض محلي للدالة f على S عندما تكون صورته بالدالة أقل من أو تساوي صورها عند جميع النقاط المجاورة له، أي:

$$f(x^*) \leq f(x) \quad \forall x \in \mathcal{N}(x^*),$$

حيث $\mathcal{N}(x^*)$ هو محيط صغير حول x^* .

حضيض محلي صارم Strict Local minimum: يكون $x^* \in S$ حضيض صارم محلي للدالة f على S عندما تكون صورته بالدالة أقل تماماً من صورها عند جميع النقاط المجاورة له، أي:

$$f(x^*) < f(x) \quad \forall x \in \mathcal{N}(x^*),$$

حيث $\mathcal{N}(x^*)$ هو محيط صغير حول x^* .

حضيض عالمي Gobal minimum: يكون $x^* \in S$ حضيض عالمي للدالة f على S عندما تكون صورته بالدالة أقل من أو تساوي صورها عند جميع النقاط المنتمية لـ S ، أي:

$$f(x^*) \leq f(x) \quad \forall x \in S,$$

حضيض عالمي صارم Strict global minimum: يكون $x^* \in S$ حضيض عالمي صارم للدالة f على S عندما تكون صورته بالدالة أقل تماماً من صورها عند جميع النقاط المنتمية لـ S ، أي:

$$f(x^*) < f(x) \quad \forall x \in S,$$

قمة محلية Local maxima: يكون $x^* \in S$ قمة محلية للدالة f على S عندما تكون صورته بالدالة أعلى من أو تساوي صورها عند جميع النقاط المجاورة له، أي:

$$f(x^*) \geq f(x) \quad \forall x \in \mathcal{N}(x^*),$$

حيث $\mathcal{N}(x^*)$ هو محيط صغير حول x^* .

قمة محلية صارمة Strict local maxima: يكون $x^* \in S$ قمة محلية صارمة للدالة f على S عندما تكون صورته بالدالة أعلى تماما من صورها عند جميع النقاط المجاورة له، أي:

$$f(x^*) > f(x) \quad \forall x \in \mathcal{N}(x^*),$$

حيث $\mathcal{N}(x^*)$ هو محيط صغير حول x^* .

قمة عالمية Golbal maxima: يكون $x^* \in S$ قمة عالمية للدالة f على S عندما تكون صورته بالدالة أعلى من أو تساوي صورها عند جميع النقاط المنتمية لـ S ، أي:

$$f(x^*) \geq f(x) \quad \forall x \in S,$$

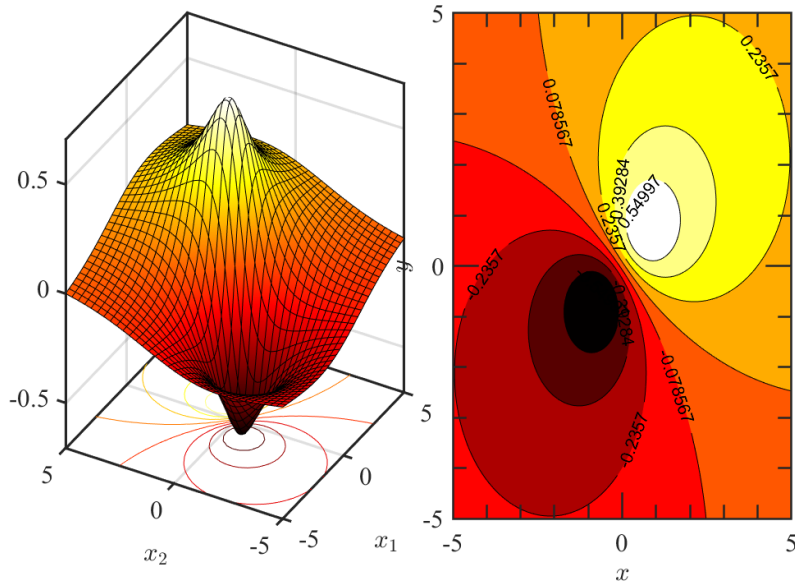
قمة عالمية صارمة Strict golbal maxima: يكون $x^* \in S$ قمة عالمية صارمة للدالة f على S عندما تكون صورته بالدالة أعلى تماما من صورها عند جميع النقاط المنتمية لـ S ، أي:

$$f(x^*) > f(x) \quad \forall x \in S,$$

يعرض الشكل صورة للدالة التالية معرفة على فضاء ثنائي البعد:

$$f(x, y) = \frac{x + y}{x^2 + y^2 + 1} \quad (13-2)$$

واضح أن للدالة حضيض عالمي يقع عند $(x, y) = \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}\right)$ وقمة عالمية عند $(x, y) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right)$. يمكن حساب هذه النقاط في هذه الحالة بالبحث عن نقاط اعدام مركبات شعاع التدرج للدالة، وهو أمر متاح في هذه المثال البسيط.

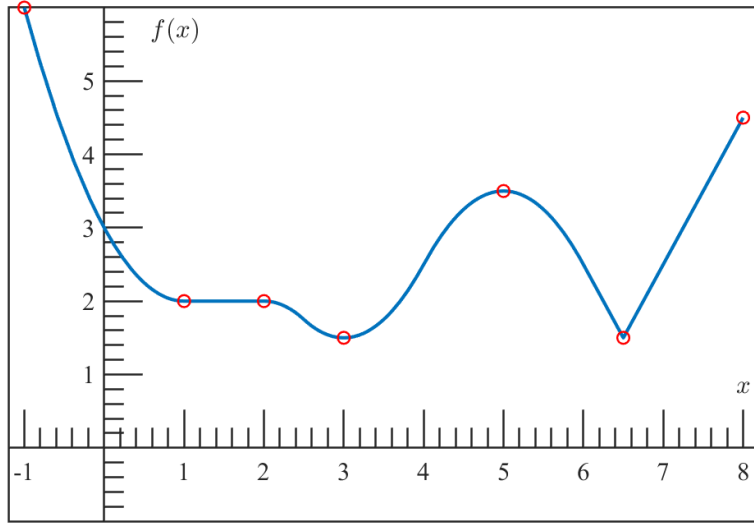


شكل 4-2. صورة ثلاثية الابعاد للدالة في المعادلة (13-2) مع خطوط تساوي قيمها (خطوط الكنتور). لهذه الدالة قمة عالمية و حضيض عالمي يقعان عند $(x, y) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right)$ و $(x, y) = \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}\right)$ على الترتيب.

يوضح الشكل (14-2) مختلف القيم الدنيا والعظمى بأصنافها المختلفة في الدالة التالية:

$$f(x) = \begin{cases} (x-1)^2 + 2, & -1 \leq x \leq 1 \\ 2, & 1 \leq x \leq 2 \\ -(x-2)^2 + 2, & 2 \leq x \leq 2.5 \\ (x-3)^2 + 1.5, & 2.5 \leq x \leq 4 \\ -(x-5)^2 + 3.5, & 4 \leq x \leq 6 \\ -2x + 14.5, & 6 \leq x \leq 6.5 \\ 2x - 11.5, & 6.5 \leq x \leq 8 \end{cases} \quad (14-2)$$

النقطة $x = -1$ هي قمة عالمية صارمة. أما النقطة $x = 1$ فهي نقطة حضيض محلي غير صارم. جميع النقاط في المجال $(1, 2)$ تُعد نقاط محلية غير صارم وكذلك قمم محلية غير صارمة. النقطة $x = 2$ تمثل قمة محلية، في حين أن النقطة $x = 3$ تُعد حضيض محلي صارم، وأيضاً حضيض عالمي غير صارم. أما النقطة $x = 5$ فهي قمة محلية صارمة، بينما النقطة $x = 6.5$ تُعد حضيض محلي صارم، وهي كذلك حضيض عالمي غير صارم. وأخيراً، النقطة $x = 8$ هي قمة محلية صارمة. من المهم ملاحظة أن كلاً من $x = 6.5$ و $x = 3$ هما نقطتا حضيض عالمي للدالة، وعلى الرغم من كونهما حضيض محلي صارم، إلا أنهما يُعتبران نقطتي حضيض عالمي غير صارم.



شكل 2-5. نقاط الحضيض والقمم بانواعها للدالة الموصوفة بالمعادلة (2-14).

7-2 شروط الامثلية:

من خلال التعريفات المذكورة أعلاه، قد يبدو أن الطريقة الوحيدة لمعرفة ما إذا كانت النقطة x^* تمثل حضيضاً محلياً أو قمة محلية هي فحص جميع النقاط المجاورة لها مباشرة، للتأكد من عدم وجود نقطة أخرى ذات قيمة دالة أقل أو أكبر. لكن عندما تكون الدالة f ناعمة أو سلسلة (أي قابلة للاشتقاق ومستمرة)، توجد طرق أكثر كفاءة وعملية لتمييز الحضيض أو القمة المحلية. على وجه الخصوص، إذا كانت الدالة f قابلة للاشتقاق مرتين بشكل مستمر، فقد نتمكن من تحديد أن x^* هي حضيض محلي (وربما حضيض محلي صارم) من خلال فحص تدرج الدالة $f(x^*)$ ومصفوفة هيسيان للمشتقات من الرتبة الثانية $H(x^*)$ فقط. مثل هذه المقاييس تعرف بمقاييس الامثلية أو شروط الامثلية Optimality Conditions. وعموماً يميز فيها نوعان: شروط الامثلية من الرتبة الأولى first order optimality conditions نسبة للمشتقات من الدرجة الأولى الداخلة في تعريفها، وكذلك شروط الامثلية من الرتبة الثانية second order optimality conditions، والتي تعتمد بالإضافة إلى ذلك على معلومات تتعلق بالمشتقات الجزئية من الدرجة الثانية.

8-2 تطبيقات نموذجية:

يلعب التحسين الرياضي دوراً محورياً في العديد من التطبيقات العلمية والهندسية. وتعددت استخداماته، منها على سبيل المثال تحديد أبعاد المركبات (الأجهزة) الإلكترونية في التصميم الإلكتروني، وهي مهمة اختيار عرض وطول كل مركب في دائرة إلكترونية. هنا تمثل المتغيرات عروض وأطوال المركبات. تمثل القيود مجموعة من المتطلبات الهندسية، مثل الحدود المفروضة على أحجام المركبات من قبل عملية التصنيع، ومتطلبات التوقيت التي تضمن أن الدارة تعمل بشكل موثوق عند سرعة محددة، وحدود على المساحة الكلية للدارة. الهدف الشائع في هذه المسائل هو تقليل إجمالي الطاقة المستهلكة من قبل الدارة. ومسألة التحسين (2-2) في هذه الحالة هي إيجاد أبعاد الأجهزة التي تلي متطلبات التصميم (من حيث التصنيع، التوقيت، والمساحة) وتحقق أعلى كفاءة ممكنة في استهلاك الطاقة.

مثال آخر هو في مسائل ملائمة المنحنيات مع بيانات تجريبية معينة. كما في بحثنا هذا، ننظر مثل هذه التطبيقات في تقدير الوسائط او المعاملات الداخلة في توصيف الخواص البصرية للأغشية الرقيقة. الهدف هو تحديد هذه الوسائط غير المعروفة --- مثل معاملات الانكسار $n(\lambda)$ ، ومعامل الامتصاص $k(\lambda)$ ، وسماكة الغشاء d --- التي تحقق أفضل توافق مع الأطياف البصرية المقاسة، عادة بيانات النفاذية أو الانعكاس. في الأغشية المتبلورة، يمكن نمذجة الاستجابة البصرية باستخدام معادلات تعتمد على هذه المعلمات، وبالتالي يصبح استرجاع المعلمات مسألة تحسين تهدف إلى تقليل الفرق بين الطيف المقاس والنموذج النظري.

عادة ما تُصاغ هذه المشكلة على شكل مسألة مربعات صغرى لخطية (Nonlinear Least Squares):

$$\min_{\mathbf{x}} S(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m [T_{\text{exp}}(\lambda_i) - T_{\text{model}}(\lambda_i; \mathbf{x})]^2, \quad (15-2)$$

حيث تمثل \mathbf{x} شعاع المتغيرات او الوسائط المجهولة (مثل معاملات نموذج التشتت ل n و k والسماكة d)، و T_{exp} البيانات التجريبية عند الأطوال الموجية λ_i ، و T_{model} هو الطيف المحسوب نظريًا بناءً على الوسائط.

9-2 خوارزميات التحسين

خوارزمية أو تقنية الحل أو طريقة الحل لفئة من مسائل التحسين هي خوارزمية تقوم بحساب حل للمسألة (بدقة معينة)، وذلك عند إعطائها مسألة محددة من هذه الفئة. منذ أواخر الأربعينيات، بُذلت جهود كبيرة في تطوير خوارزميات لحل فئات مختلفة من مسائل التحسين، وتحليل خصائصها، وتطوير تطبيقات برمجية فعالة لها. تختلف فعالية هذه الخوارزميات — أي قدرتنا على حل مسألة التحسين (2-2) — بشكل كبير، وتعتمد على عوامل مثل الصيغ المحددة لدالة الهدف ودوال القيود، وعدد المتغيرات والقيود، ووجود بني خاصة مثل التناثر (Sparsity) (تُعد المسألة متناثرة إذا كانت كل دالة قيد تعتمد على عدد صغير فقط من المتغيرات).

حتى عندما تكون دوال الهدف والقيود ناعمة (مثل كثيرات الحدود)، فإن المسألة العامة للتحسين (2-2) تُعد صعبة الحل بشكل كبير. لذلك، فإن الأساليب المستخدمة لحل المسألة العامة تنطوي غالبًا على نوع من التسوية، مثل الحاجة إلى وقت حسابي طويل جدًا، أو احتمال عدم إيجاد الحل على الإطلاق.

خوارزميات التحسين هي في الأساس خوارزميات تكرارية. تبدأ بتخمين أولي لقيمة المتغير x ، ثم تُؤد سلسلة من التقديرات المحسنة (تُسمى "التكرارات") حتى تنتهي، على أمل أن تصل إلى حل. الاستراتيجية المستخدمة للانتقال من تكرار إلى آخر هي ما يميز خوارزمية عن أخرى. تعتمد معظم الاستراتيجيات على قيم دالة الهدف f ، ودوال القيود ϕ ، وربما أيضًا على المشتقات الأولى والثانية لهذه الدوال. تقوم بعض الخوارزميات بتجميع المعلومات التي تم الحصول عليها في التكرارات السابقة، في حين تعتمد خوارزميات أخرى فقط على المعلومات المحلية المتوفرة في النقطة الحالية. في إطار هذه المذكرة ونظرًا لتعقيد وعدم خطية نماذج ملائمة البيانات فيما يتعلق باستيفاء وسائط النماذج فإن الحلول العددية تكون ضرورية. ونظرًا لأن مسألة المربعات الصغرى لخطية متعددة المتغيرات تتطلب تقديرات أولية جيدة، فإن الطرق المحلية التي تستغل معلومات المشتقات تكون مفضلة، لما تتمتع به من كفاءة وسرعة تقارب [29, 35].

يركز هذه الفصل على ثلاث تقنيات تحسين محلية أساسية تُستخدم في استرجاع الوسائط البصرية:

- طريقة نيوتن متعددة المتغيرات: تعتمد على المشتقات الثانية لتحقيق سرعة تقارب عالية [36].

• طريقة التدرج النازل (Gradient-Descent): تعتمد على المشتقات الأولى، أبسط ولكن أبطأ تقاربًا [30].

• التدرج النازل العشوائي (Stochastic-Gradient-Descent): نسخة معدلة من هبوط التدرج تناسب البيانات الكبيرة أو الحالات التي تحتوي على ضوضاء [37].

تُستخدم هذه الطرق على نطاق واسع في عمليات التحسين بشكل عام وفي مسائل توصيف الأغشية الرقيقة على حد سواء، حيث يعتبر الملاءمة القائمة على النماذج (2-15) الأسلوب الأكثر شيوعًا [14, 19].
قبل الخوض في تفاصيل الطرق العددية، من المهم توضيح بعض المفاهيم الأساسية التي تُستخدم في مجال التحسين الرياضي.

2-9-1 التعريفات الأساسية في التحسين الرياضي

شعاع التدرج Gradient vector: هو شعاع مركباته المشتقات الجزئية الأولى لدالة الهدف:

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right]^T, \quad (16-2)$$

ويدل على اتجاه أكبر زيادة في قيمة الدالة عند نقطة معينة.

مصفوفة الهيسيان Hessian matrix: هي مصفوفة المشتقات الجزئية الثانية، وتصف انحناء الدالة عند نقطة معينة. مثلاً من أجل دالة $f: S \rightarrow \mathbb{R}$ معرفة على مجموعة $S \subset \mathbb{R}^n$ تعرف هذه المصفوفة بالعبارة التالية:

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}) = \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right]_{i,j=1}^n. \quad (17-2)$$

كما وتكتب بشكل موسع:

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}) \equiv \nabla^2 f(\mathbf{x}) \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}, \quad (18-2)$$

وهي مصفوفة متناظرة بالتعريف. وجود هذه المصفوفة موجبة التعريف عند نقطة ما يدل على أن النقطة \mathbf{x} هي نقطة دنيا محلية.

مصفوفة اليعقوبي Jacobian matrix: لدوال شعاعية $F(\mathbf{x})$ ، تمثل هذه المصفوفة مشتقات الجزئية الأولى لكل مركبة من مركبات F بالنسبة لمتغيرات \mathbf{x} :

$$\mathbf{J} = \left[\frac{\partial F_i}{\partial x_j} \right]_{i=1, \dots, m; j=1, \dots, n}. \quad (19-2)$$

تستخدم هذه المصفوفة في عمليات النشر الخطي والاشتقاق في مسائل المربعات الصغرى.

حجم الخطوة learning rate or Step size : هو عدد حقيقي موجب α يحدد مدى تقدم الخطوة في كل تكرار أثناء عملية التحسين.

2-9-2 طريقة نيوتن لمتغير واحد: Univariate Newton's Method

تقوم طريقة نيوتن بشكل تكراري بتحسين تقدير قيمة الحضيض (القيمة التي تحقق الحد الأدنى) لدالة $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ يشترط فيها ان تكون قابلة للاشتقاق على الاقل مرتين. تعتمد الطريقة على إيجاد جذور مشتقة الدالة $f'(x) = 0$ ، والتي تمثل نقاط الاستقرار التي يمكن أن تكون نقاط حد أدنى. بدءًا من تقدير مبدئي x_0 ، يكون تحديث التقدير وفقًا للقاعدة التالية [38, 39]:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}. \quad (20-2)$$

تستند هذه القاعدة الى تمثيل الدالة المعقدة f محليا بكثير حدود من الدرجة الثانية وذلك عن طريق استخدام نشر تايلور [39] الى غاية الرتبة الثانية لها بجوار النقطة x_k :

$$f(x) \approx f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k) + \frac{1}{2}f''(x_k)(x - x_k)^2.$$

باشتقاق الطرف الايمن للمعادلة السابقة بالنسبة لـ x وتعيينها للصفر لإيجاد النقطة الحرجة، نحصل على معادلة التحديث السابقة [40].

3-9-2 طريقة نيوتن متعددة المتغيرات: Multivariate Newton's Method

عندما تعتمد الدالة على شعاع من الوسائط اوالمعلمات $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ ، يتم تعميم طريقة نيوتن باستخدام التدرج ومصفوفة الهيسيان. يفضي استخدام نشر تايلور من الدرجة الثانية للدالة f حول النقطة \mathbf{x}_k الى العبارة [40, 41]:

$$f(\mathbf{x}) \approx f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k)^T \mathbf{H}(\mathbf{x}_k) (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k).$$

لتحديد النقطة التي تحقق الحد الأدنى (الحضيض) لهذه التقريب، نضع مشتقته تساوي صفر:

$$\nabla f(\mathbf{x}) \approx \nabla f(\mathbf{x}_k) + \mathbf{H}(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) = 0,$$

ويُستنتج تحديث النقطة:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{H}(\mathbf{x}_k)^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k). \quad (21-2)$$

في سياق مسألة المربعات الصغرى اللاخطية، يرتبط التدرج والهيسيان بمصفوفة اليعقوبي للمتبقيات.

4-9-2 التدرج النازل: Gradient Descent

تقوم طريقة التدرج النازل بتحديث وسائط التحسين بالتحرك في فضاء الوسائط عكس اتجاه تدرج الدالة: [32, 42]

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha \nabla f(\mathbf{x}_k), \quad (22-2)$$

حيث α هو معدل التعلم أو حجم الخطوة.

أهم خاصية لهذه الطريقة هي أن اتخاذ خطوات صغيرة بما فيه الكفاية على طول اتجاهات النزول يؤدي إلى تخفيض في قيمة دالة الهدف. تتميز كذلك هذه الطريقة بالسهولة في التنفيذ وحساب التدرج فقط بدون الحاجة للحساب المكثف لمصفوفة الهيسيان، لكنها تميل للتقارب بشكل أبطأ مقارنة بطريقة نيوتن. يعد اختيار الخطوة أو معدل التعلم خطوة حساسة جدا في عملية البحث عن الحضيض، لذلك استحدثت الكثير من التقنيات منها ما يعتبرها ثابتة ومنها ما يختارها بخوارزمية تحسين خطي دقيق في بعد واحد (Exact Line Search) تستخدم فيها مثلا طريقة نيوتن، ومنها كذلك من يختار خطوة معينة من اصل خطوات منتخبة بطريقة معينة. لكل من هذه الخوارزميات عيوب وإيجابيات تزرعها الأدبيات العلمية.

5-9-2 التدرج النازل العشوائي: Stochastic Gradient Descent

في المسائل التي تحتوي على عدد كبير من متغيرات التحسين، يكون حساب شعاع التدرج الكامل مكلفًا. تقوم طريقة التدرج النازل العشوائي بتقدير التدرج باستخدام عينة فرعية عشوائية (mini-batch) من البيانات في كل تكرار:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha \nabla f_{i_k}(\mathbf{x}_k), \quad (23-2)$$

حيث i_k يشير إلى العينة المختارة في التكرار k .

تعمل هذه الطريقة على تقليل الكلفة الحسابية لكل تحديث، وتضيف ضوضاء تساعد في تجاوز النقاط الدنيا المحلية الضحلة، لكنها تحتاج لضبط جيد لمعدل التعلم.

10-2 أمثلة على دوال ذات متغيرين

مثال تحليلي: نأخذ المثال التالي لدالة تربيعية بسيطة في متغيرين:

$$f(x, y) = (x - 2)^2 + (y - 3)^2,$$

حيث يقع الحضيض عند $(2, 3)$.

• شعاع التدرج لهذه الدالة هو:

$$\nabla f = \begin{bmatrix} 2(x - 2) \\ 2(y - 3) \end{bmatrix}.$$

• مصفوفة الهيسيان (مصفوفة المشتقات الثانية) هي:

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

• تحديث طريقة نيوتن لهذه الدالة يكون كالتالي:

$$\begin{bmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_k \\ y_k \end{bmatrix} - \mathbf{H}^{-1} \nabla f = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

هذا يعني أن طريقة نيوتن تصل إلى الحل في خطوة واحدة بسبب طبيعة الدالة التربيعية.

• تحديث طريقة التدرج النازل بخطوة ذات حجم α يكون:

$$\begin{bmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_k - 2\alpha(x_k - 2) \\ y_k - 2\alpha(y_k - 3) \end{bmatrix}.$$

مثال بالبرمجة: نأخذ مسألة التحسين التالية لدالة تربيعية بسيطة في متغيرين:

$$\min_{x,y} f(x, y) = x^2 + 2y^2, \quad (24-2)$$

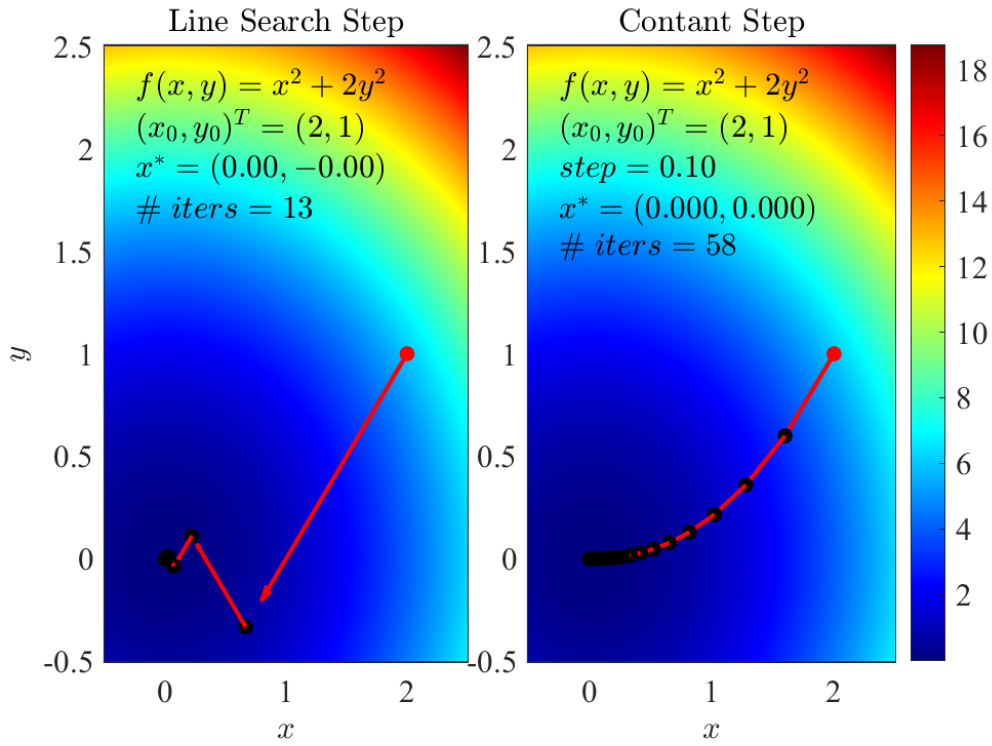
حيث نقطة الحضيض تقع عند $(0, 0)$. يمكن اعادة صياغة هذه المسألة باستخدام الصيغة التربيعية بالشكل:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2} f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + 2\mathbf{c}^T \mathbf{x} \quad (25-2)$$

حيث:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}, \quad \mathbf{c} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

لتنفيذ طريقة التدرج النازل مع اختيار حجم الخطوة مرة بشكل ثابت ومرة باستخدام البحث الخطي الدقيق (Exact Line Search)، قمنا بإنشاء برنامج لـ MATLAB يقوم (في حدود دقة معينة تضاهي 10^{-5}) بإيجاد الحل الأمثل لمسألة تربيعية بالشكل الأخير المذكور. يعرض الشكل 7-2 خطوات الوصول الى الحل مع صورة للدالة بتدرج لوني. نلاحظ ان الخوارزمية مع الخطوة الثابتة بمقدار $h = 0.1$ تتقارب للحل الامثل بشكل بطيء بعد 58 خطوة، في حين استخدام خوارزمية البحث الخطي الدقيق عن الخطوة، تقارب البحث بشكل سريع نسبيا في 13 خطوة فقط.



شكل 2-5. خطوات البحث عن الحضيض للمسألة (25-2) بطريقة التدرج النازل باختيار خطوة ثابتة (الى اليمين) وخطوة معدلة بطريقة البحث الخطي الدقيق (الى اليسار).

من السلوك الواضح لطريقة التدرج، كما يبين الشكل (7-2)، هو الانحدار المتعرج (zig-zag) نحو الهدف، ويعني أن الاتجاه الذي يتم إيجاده في التكرار رقم k ، وهو $x_{k+1} - x_k$ ، يكون متعامداً مع الاتجاه الذي يتم إيجاده في التكرار التالي $(k + 1)$ ، وهو $x_{k+2} - x_{k+1}$.

```

clc
clear
%% fxy=@(x,y) x.^2+2*y.^2; % Just for plot
%% fcontour(fxy);hold on
%% This code requires the function to be defined as a quadratic form:
A=[1,0;0,2]; c=[0;0];
f=@(x) x'*A*x+2*c'*x;
df=@(x) 2*(A*x+c);
%% Initial Guess and Tolerance
x0=[2;1]; Tol=1e-5;
x=x0;
iter=0;
while (norm(df(x))>Tol)
    iter=iter+1;
    h=norm(df(x))^2/(2*df(x)'*A*df(x));
    %h=0.1; % uncomment this line to switch to constant step method
    x=x-h*df(x);
    %% plot displacement_____
    v=-h*df(x);
    quiver(x0(1),x0(2),v(1),v(2),'r','linewidth',2)
    scatter(x(1),x(2),50,'filled','k');drawnow
    x0=x;
    %% _____
    fval=x'*A*x+2*c'*x;
    fprintf('iter = %3d ||df|| = %2.6f fval = %2.6f\n',iter,norm(df(x)),
        fval);
end

```

شكل 2-7. برنامج ماتلاب لطريقة التدرج النازل بطريقة البحث الخطي الدقيق.

11-2 مقارنة بين طريقة نيوتن وطريقة التدرج النازل

جدول 2-1. مقارنة بين طريقة نيوتن وطريقة التدرج النازل من حيث الخصائص الرئيسية.

الميزة	طريقة نيوتن	طريقة التدرج النازل
استخدام المشتقات الثانية سرعة التقارب الحساب في كل تكرار الحساسية للتخمين الأولي متطلبات مصفوفة الهيسيان سهولة التنفيذ	نعم (مصفوفة الهيسيان) تقارب تربيعي (سريع جداً بالقرب من الحد الأدنى) مكثف (حساب معكوس الهيسيان) عالية؛ قد تتباعد إذا كان التخمين بعيداً يجب أن تكون موجبة التعريف لضمان النزول معقدة نسبياً	لا تقارب خطي (أبطأ) بسيط (حساب التدرج فقط) أقل حساسية؛ لكن التقارب قد يكون بطيئاً غير مطلوبة سهولة التنفيذ

12-2 محدودية الطرق

• طريقة نيوتن:

- حساب مصفوفة الهيسيان وعكسها قد يكون مكلفاً حسابياً وغير مستقر عددياً في المشاكل ذات الأبعاد العالية.

- قد تتباعد الطريقة إذا لم تكن مصفوفة الهيسيان موجبة التعريف أو إذا كان التخمين الأولي بعيداً عن الحل الصحيح [36].

• طريقة التدرج النازل:

- تتطلب اختياراً دقيقاً لحجم الخطوة للحفاظ على الاستقرار، مما قد يبطئ التقارب.

- حساسة لضعف التهيئة أو وجود مناطق مسطحة أو نقاط سرجية في الدالة، مما قد يعيق الوصول إلى الحل الأمثل.

• طريقة التدرج النازل العشوائي:

- تضيف ضوضاء للتحديثات مما قد يسبب تذبذباً في الحلول.

- تحتاج إلى جدولة مناسبة لتقليل حجم الخطوة تدريجياً لضمان التقارب [37].

الفصل الثالث

حساب الثوابت البصرية وسمك الأغشية الرقيقة من بيانات النفاذية الضوئية

مقدمة

مع ظهور الإلكترونيات الدقيقة والأجهزة البصرية المتقدمة، زاد استخدام الأغشية الرقيقة العازلة وأشباه الموصلات بشكل كبير [7]. تتطلب تطبيقات مثل الترانزستورات الأغشية الرقيقة والخلايا الشمسية المصنعة من أشباه الموصلات البلورية وغير المتبلورة [3] والمرشحات البصرية المصممة خصيصًا للقياسات التداخلية [6]، معرفة دقيقة بسمك الغشاء d وبالخصائص البصرية المعرفة بقريئة الانكسار العقديية $\hat{n}(\lambda) = n(\lambda) + ik(\lambda)$ ، حيث $n(\lambda)$ هو معامل او قريئة الانكسار الحقيقية و $k(\lambda)$ هو معامل الانطفاء. يهتم المختصون بالقياسات الدقيقة لهذه الكميات بشكل كبير لاجل تحسين أداء الأجهزة وتصميم اجهزة جديدة [7].

غالبًا ما تتم مثل هذه القياسات باستخدام أجهزة القياسات الاهليلجية مثل الإلييسومتر أو أجهزة ميكانيكية مثل جهاز البروفيلوميتر. يركز مبدأ عمل القياسات الاهليلجية على قياس شدة الضوء النافذ عبر الأغشية المرسبة على ركائز شفافة ذات معامل انكسار معروف أو من خلال قياس شدة الضوء المنعكس عند زوايا ورود عمودية أو مائلة على كل من سطحي الغشاء والركيزة، أو عبر توليفات مختلفة لهذه الظروف. فهي بهذا تتيح التحديد المباشر لكل من السمك والثوابت البصرية عبر نطاق طيفي واسع [43]. لكنها تتطلب أجهزة دقيقة وغالية الثمن وغير متوفرة في جامعة الوادي ويعد هذا المبرر الاساسي والمحفز لهذا البحث.

توفر بيانات النفاذية البصرية معلومات سريعة ودقيقة كفاية لوصف الأغشية الرقيقة، خاصة في النطاق الطيفي القريب من حافة الامتصاص الأساسية، حيث تنتقل المادة من حالة العتامة إلى الشفافية. لذلك تم خلال العقدين الاخيرين تكريس جهود كبيرة لتطوير طرق تُمكن من استخراج كل من السمك والثوابت البصرية للأغشية الرقيقة استنادًا إلى بيانات النفاذية فقط. تعتمد الطرق التقليدية لتقدير سمك الغشاء والثوابت البصرية على وجود اهداب التداخل في أطيايف النفاذية [10]. ومع ذلك، فإن هذه الطرق محدودة بالأغشية التي تحتوي على منطقة طيفية شفافة وغير صالحة للأغشية ذات الامتصاص القوي أو الأغشية الرقيقة جدًا التي لا تظهر أنماط تداخل. وغالبًا ما تفضي الى تقديرات غير دقيقة لمعامل الامتصاص.

تجدر الإشارة هنا أن الأهداب تظهر بسبب توفر سُمْك كافٍ ومنتظم لحدوث تداخل بناء بين الامواج النافذة بعد الانعكاسات المتعددة لها عند الاسطح البينية وتميُز الغشاء بمنطقة ذات شفافية عالية تحت حافة الامتصاص الأساسية. خلاف ذلك تهدم التداخلات وتأخذ النفاذية شكلا سلسلا بدلالة الطول الموجي [10].

يقدم هذا الفصل طريقة دقيقة لتقدير معامل الامتصاص، معامل الانكسار، وسمك الأغشية الرقيقة باستخدام بيانات النفاذية البصرية فقط. تعتمد الطريقة على نهج تحسين مقيد نقطيًا، حيث يتم تعريف مشكلة برمجة غير خطية مع قيود خطية تمثل المعرفة المسبقة عن الحل الفيزيائي. تنطبق الطريقة على جميع أنواع أطيايف النفاذية ولا تعتمد على وجود أنماط تداخل أو شفافية. تم إثبات موثوقية الطريقة من خلال التجارب العددية مع أغشية إصطناعية تم إنشاؤها بواسطة الكمبيوتر ومن ثم تطبيقها على أغشية Cds البلورية المترسبة باستخدام ترسيب الحمام الكيميائي. ثم انشاء هذه الاغشية في مخابر جامعة الوادي تحت ظروف وشروط ترسيب مختلفة. في مايلي من الأقسام سنعرض النموذج الرياضي للنفاذية الضوئية المستخدم في عملية التحسين الرياضية وعملية تطبيق قيود فيزيائية لها. يليه استخدام هذه المعلومات في استرداد الثوابت البصرية باستخدام برنامج طورناه في بيئة ماتلاب خصيصا لهذا الغرض.

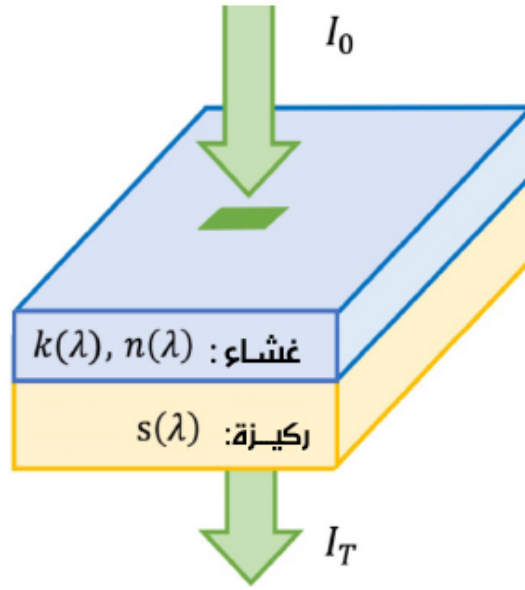
1-3 وصف طريقة التحسين

بداية، نحتاج الى تعريف نموذج نظري للنفاذية الطيفية للنظام البصري غشاء-ركيزة في حالة الورد الناظمي لضوء وحيد اللون وانتظام السطوح كما هو موضح في الشكل 1-3. بالخذ في الاعتبار الانعكاسات المتعددة والتي تحدث عند الاسطح الثلاث البينية المكونة لهذا النظام (وهي: هواء-غشاء، غشاء-ركيزة، وركيزة-هواء)، تفضي حسابات مصفوفة الانتقال أن النفاذية الطيفية T تُعطى بالتعبير الدقيق التالي [10, 43]:

$$T(\lambda; n, k, s, d) = \frac{Ax}{B + x(C \sin \varphi - D \cos \varphi) + Ex^2}, \quad (1-3)$$

حيث

$$\begin{aligned} A &= 16(n^2 + k^2)s, \\ B &= ((n+1)^2 + k^2)((n+1)(n+s^2) + k^2), \\ B &= [(n+1)^2 + k^2][(n+1)(n+s^2) + k^2], \\ C &= -2k(2(n^2 + k^2 - s^2) + (n^2 + k^2 - 1)(s^2 + 1)), \\ D &= 2((n^2 + k^2 - 1)(n^2 + k^2 - s^2) - 2k^2(s^2 + 1))((n-1)(n-s^2) + k^2), \\ E &= [(n-1)^2 + k^2][(n-1)(n-s^2) + k^2], \\ \varphi &= 4\pi nd/\lambda \quad x = \exp(-\alpha d), \quad \alpha = 4\pi k/\lambda. \end{aligned} \quad (2-3)$$



شكل 3-1. مخطط تمثيلي لنظام غشاء-ركيزة في حالة الورد الناظمي.

هنا، λ هو الطول الموجي، $n(\lambda)$ هو الجزء الحقيقي من معامل انكسار الغشاء، $\alpha(\lambda)$ هو معامل الامتصاص، و d هو سمك الغشاء المنتظم والمتجانس، و $s(\lambda)$ هو معامل انكسار الركيزة الشفافة السميكة وهو دالة تتغير ببطء مع λ ويمكن حسابه من خلال نفاذية الركيزة T_s بالعلاقة [10]:

$$T_s = \frac{2s}{s^2 + 1}, \quad \text{or} \quad s = \frac{1}{T_s} + \left(\frac{1}{T_s^2} - 1 \right)^{1/2} \quad (3-3)$$

بالنظر إلى مجموعة من بيانات النفاذية التجريبية (λ_i, T_i^{exp}) عددها N ، الهدف هو تحديد السمك و الثوابت البصرية $d, n(\lambda)$ ، و $k(\lambda)$ أو $\alpha(\lambda)$. للوهلة الأولى تبدو المشكلة غير محددة بشكل كبير، لأنه حتى مع افتراض أن d معروف، يجب أن تتحقق المعادلة التالية لكل نقطة λ_i حيث $(i = 1, \dots, N)$:

$$\Delta T = T\{\lambda_i, s(\lambda_i), d, n(\lambda_i), \alpha(\lambda_i)\} - T_i^{exp} \quad (4-3)$$

وهي معادلة بمجهولين $(n(\lambda_i)$ و $\alpha(\lambda_i)$) لكل قياس (i) ومجموعة الحلول الكلية لها عبارة عن منحني في الفضاء $[n(\lambda_i), \alpha(\lambda_i)]$ لكل قيمة ل (d) لذلك فحلولها عديدة لانهاية وتمثل بشكل تقريبي متشعبًا غير خطي (Nonlinear-Manifold) بعده N في \mathbf{R}^{2N} .

تعتمد الطرق التقليدية كما رأينا في الفصل الأول على افتراض أشكال وظيفية (دالية) لعلاقات التششت $n(\lambda)$ و $\alpha(\lambda)$ أو $k(\lambda)$ بعدد برامترات محدود ثم تقدير هذه البارامترات باستخدام طرق المربعات الصغرى غير الخطية بدون قيود. ومع ذلك، غالبًا ما تعطي هذه الطرق نتائج غير دقيقة إذا كانت الأشكال الوظيفية المفترضة لا تتطابق مع الثوابت البصرية الحقيقية.

تعتمد الطريقة المقترحة على نهج مختلف من خلال فرض قيود فيزيائية على $n(\lambda)$ و $\alpha(\lambda)$ بناءً على المعرفة المسبقة لسلوك المادة البصري. بالنسبة لأشباه الموصلات البلورية يتم تطبيق القيود التالية:

1. قيود حدودية:

$$n(\lambda) \geq 1, \text{ and } \alpha(\lambda) \geq 0, \text{ or } k(\lambda) \geq 0, \quad (5-3)$$

أو بشكل متقطع لجميع قيم i :

$$n_i \geq 1, \quad \alpha_i \geq 0.$$

2. $n(\lambda)$ و $\alpha(\lambda)$ هما دالتان متناقصتان:

$$\frac{dn}{d\lambda} \leq 0, \quad \frac{d\alpha}{d\lambda} \leq 0 \quad (6-3)$$

أو بشكل متقطع:

$$n_{i+1} \leq n_i, \quad \alpha_{i+1} \leq \alpha_i.$$

3. $n(\lambda)$ هي دالة محدبة في المنطقة الشفافة:

$$\frac{d^2n}{d\lambda^2} \geq 0. \quad (7-3)$$

أو بتقريب المشتق الثاني بطريقة الفروق المنتهية باستخدام ثلاثة نقاط متتالية (λ_i, n_i) ، (λ_{i-1}, n_{i-1}) و (λ_{i+1}, n_{i+1}) :

$$n_i \leq n_{i-1} + \frac{n_{i+1} - n_{i-1}}{\lambda_{i+1} - \lambda_{i-1}} (\lambda_i - \lambda_{i-1}).$$

4. $\alpha(\lambda)$ هي دالة محدبة في منطقة حافة الامتصاص الأسية.

$$\frac{d^2\alpha}{d\lambda^2} \geq 0. \quad (8-3)$$

أو بشكل متقطع:

$$\alpha_i \leq \alpha_{i-1} + \frac{\alpha_{i+1} - \alpha_{i-1}}{\lambda_{i+1} - \lambda_{i-1}} (\lambda_i - \lambda_{i-1}).$$

كما يمكن التعبير عن هذا القيد أيضا بدلالة k باستعمال العلاقة $\alpha = 4\pi k/\lambda$ لنجد:

$$k_i \leq \lambda_i \left[\frac{k_{i-1}}{\lambda_{i-1}} + \left(\frac{k_{i+1}}{\lambda_{i+1}} - \frac{k_{i-1}}{\lambda_{i-1}} \right) \frac{\lambda_i - \lambda_{i-1}}{\lambda_{i+1} - \lambda_{i-1}} \right].$$

تُقلل هذه القيود من درجات الحرية في المعادلة (4-3) ، وتُتيح صياغة المسألة على أنها مسألة تحسين نقطية مقيدة بعدد متغيرات قدره $2N$ لكل قيمة (d) وعدد قيود قدره $4N - 6 = 2(N - 1) + 2(N - 2)$ بالشكل:

$$\min_{\mathbf{n}, \alpha \in \mathbf{R}^N} \sum_{i=1}^N [T(\lambda_i, s, d, n_i, \alpha_i) - T_i^{exp}]^2, \quad (9-3)$$

لحل مسألة التحسين غير الخطية (9-3) لكل قيمة (d) في ظل القيود الموصوفة بالمعادلات (5-3) - (8-3) قمنا بتطوير برنامج في بيئة ماتلاب. يقوم البرنامج بتغيير قيمة السمك ومن أجلها يقوم بالتحسين في قيم الوسائط باستخدام المعادلة (9-3) . تجدر الإشارة هنا أنه يمكن اعتبار السمك كمتغير تحسين مع جملة البرامترات الأخرى، لكن بسبب تطرف مجال قيمه عن قيم (n) و (k) تم فصله عنهم ومن ثم تحسينه بشكل مستقل بطريقة تحسين خطية في بعد واحد.

2-3 التجارب العددية مع الأغشية التي تم إنشاؤها بواسطة الكمبيوتر

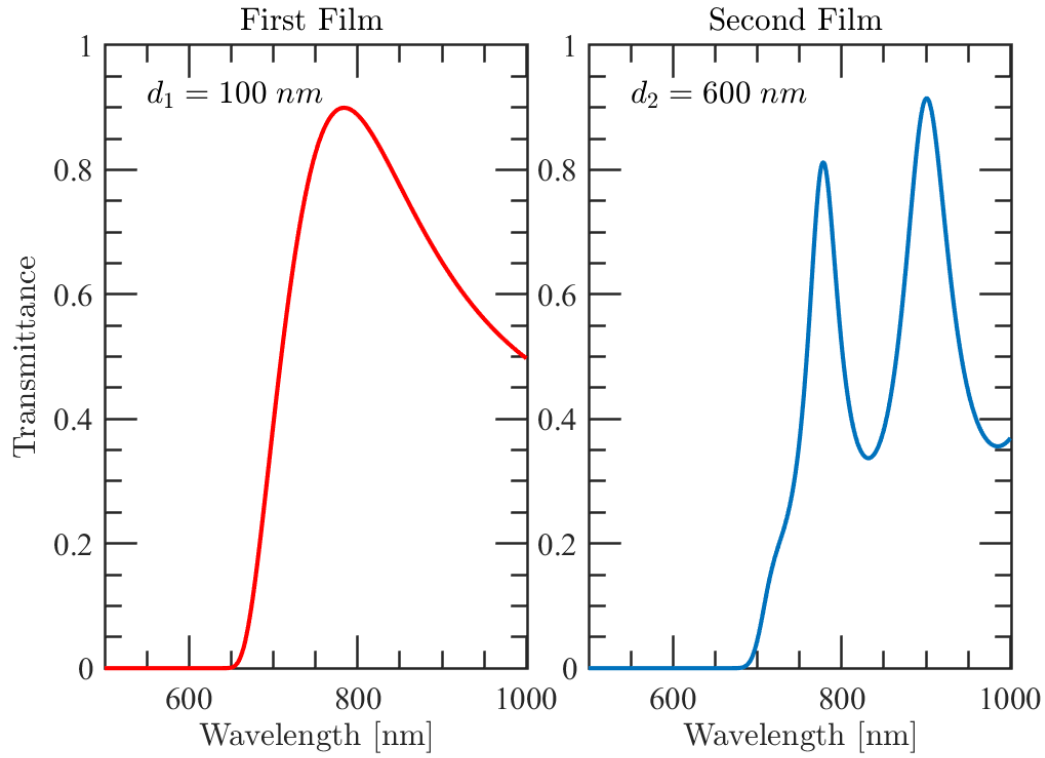
لتحقق من صحة الطريقة، تم إنشاء بيانات النفاذية لأغشية تم إنشاؤها بواسطة الكمبيوتر بثوابت بصرية وسمك معروف ($d_1 = 100$ نانومتر و $d_2 = 600$ نانومتر). تم إنشاء الأطياف الطيفية في نطاق الطول الموجي 500-1000 نانومتر بخطوة قدرها واحد نانومتر، وباستخدام المعادلات (1-3) و (12-3) ، مع تقريب البيانات إلى ثلاث منازل عشرية لمحاكاة دقة البيانات التجريبية. تم افتراض أن الأغشية تم ترسيبها على ركيزة زجاجية شفافة وفقاً للشكل التالي للثوابت البصرية للغشاء والركيزة على الترتيب:

$$n(\lambda) = [1 + (0.09195 - 12600/\lambda^2)^{-1}]^{1/2}, \quad (10-3)$$

$$\alpha(\lambda)[nm^{-1}] = 10^{-3} \times \exp[24780/\lambda - 34], \quad (11-3)$$

$$s(\lambda) = [1 + (0.7568 - 7930/\lambda^2)^{-1}]^{1/2}. \quad (12-3)$$

يعرض الشكل 2-3 النفاذية البصرية للغشاء الأول والغشاء الثاني. كما هو متوقع، لا يُظهر الغشاء الأول أي نمط تداخل في هذا المجال الطيفي. نظراً لاعتماد معامل الامتصاص المختار على طاقة الفوتون وسمك الغشاء، لم يتم تسجيل أي نفاذية ممتدة في مجال الأطوال الموجية الأقل من 650 نانومتر. كذلك بما أن بيانات النفاذية تم توليدها لكل واحد نانومتر، فإنه يتبقى لدينا 350 معادلة في عملية التحسين.

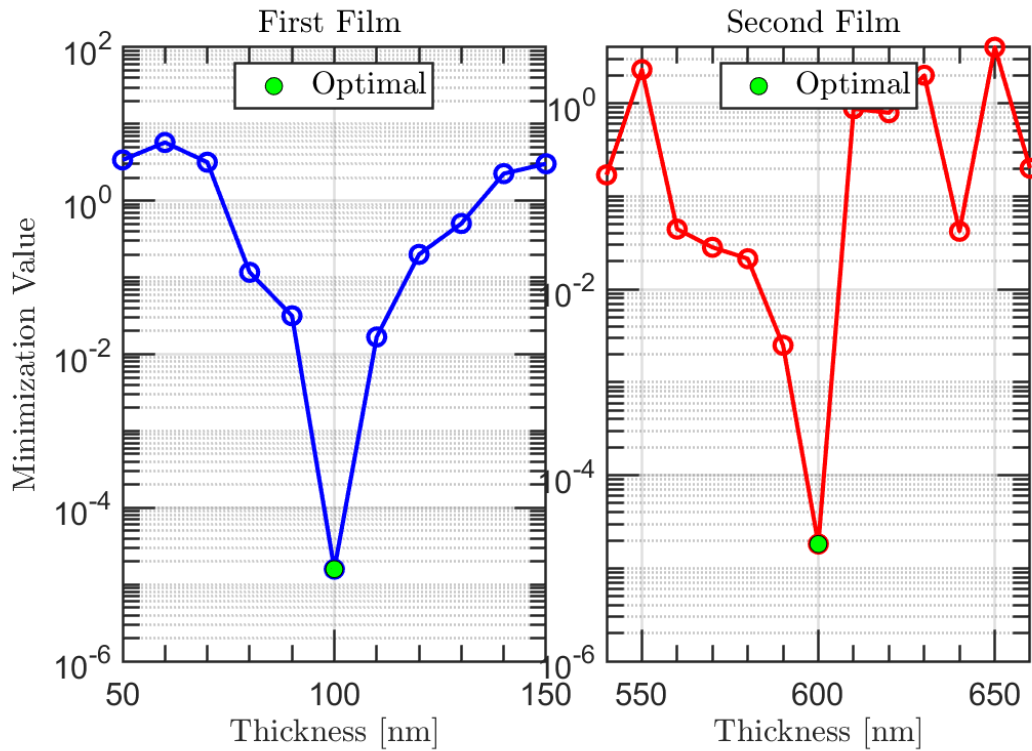


شكل 3-2. النفاذية البصرية للغشاء الأول ($d_1 = 100$ نانومتر) والغشاء الثاني ($d_2 = 600$ نانومتر). تم تقنين النفاذية للوحدة في الحالتين بالقسمة على 100.

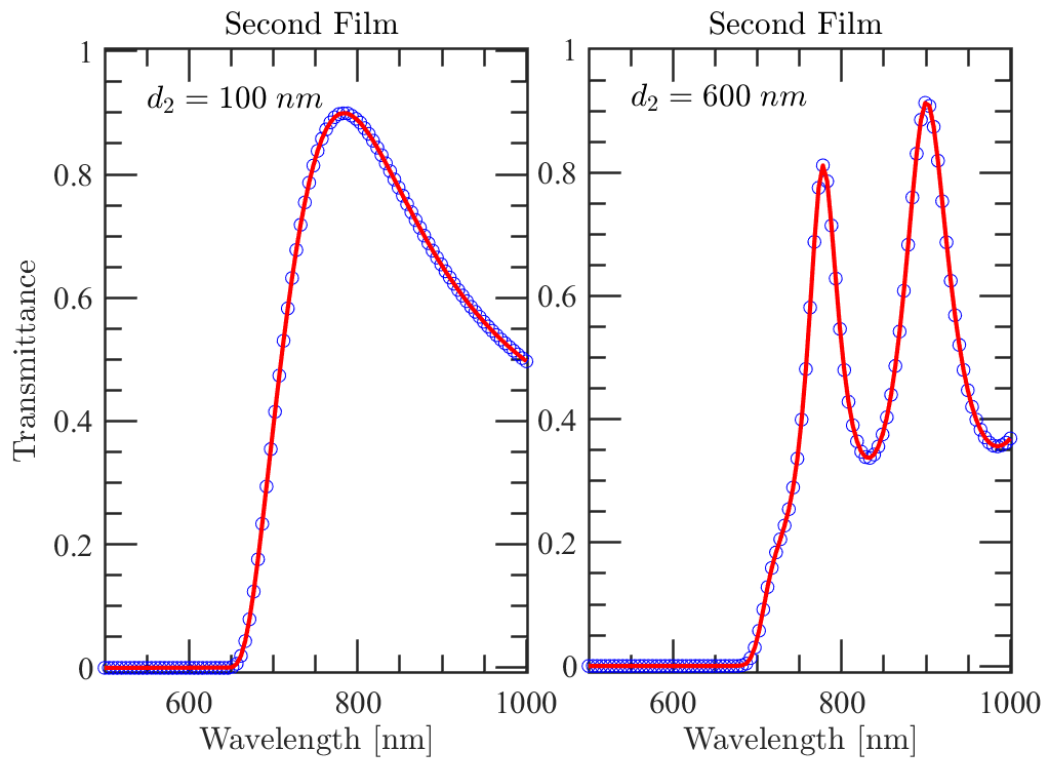
تم تنفيذ عملية التحسين لقيم سمك مختلفة، وتم تلخيص النتائج في الجدول (3-1) وعرضها في الشكل 3-3. تم استرداد سمك الغشاء بدقة، حيث كانت القيمة الدنيا للخطأ تتوافق مع قيم السمك المعروفة. تُظهر الأشكال 3-4 و 3-5 و 3-6 النفاذية والثوابت البصرية المستردة مقارنة بالقيم الحقيقية والتخمينات الأولية. نجحت الطريقة في استرداد معامل الامتصاص والانكسار ونلاحظ مدى التطابق بين كلاهما بشكل عام مقبول لحد كبير.

جدول 3-1. نتائج التحسين على أغشية اصطناعية بالكمبيوتر. لاحظ الحضيض عند السمك المتوقعة.

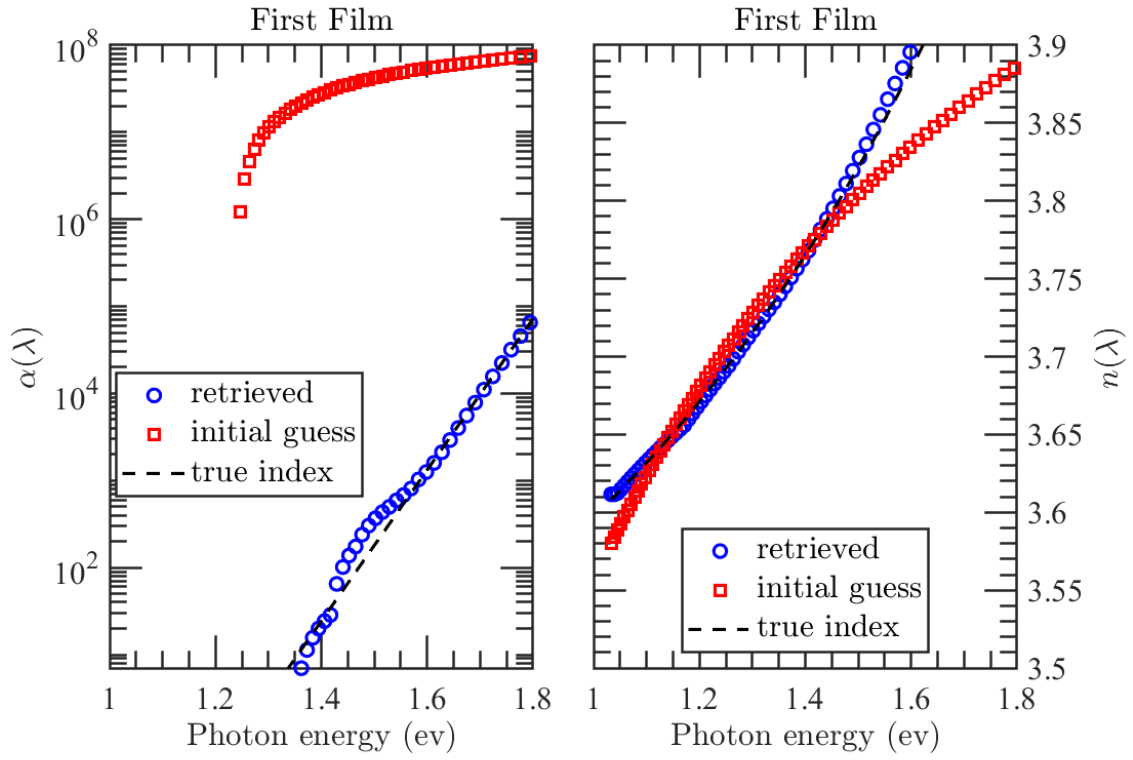
الغشاء الثاني		الغشاء الأول	
التحسين	السمك (nm)	التحسين	السمك (nm)
0.1698	540	3.403	50
2.3013	550	5.752	60
0.044325	560	3.180	70
0.02827	570	0.117	80
0.02131	580	0.03173	90
0.0025	590	1.685×10^{-5}	≈ 100
1.917×10^{-5}	≈ 600	0.01681	110
0.8725	610	0.2001	120
0.791	620	0.5061	130
2.0012	630	2.2581	140
0.042	640	3.0352	150
4.001	650		
0.20000	660		



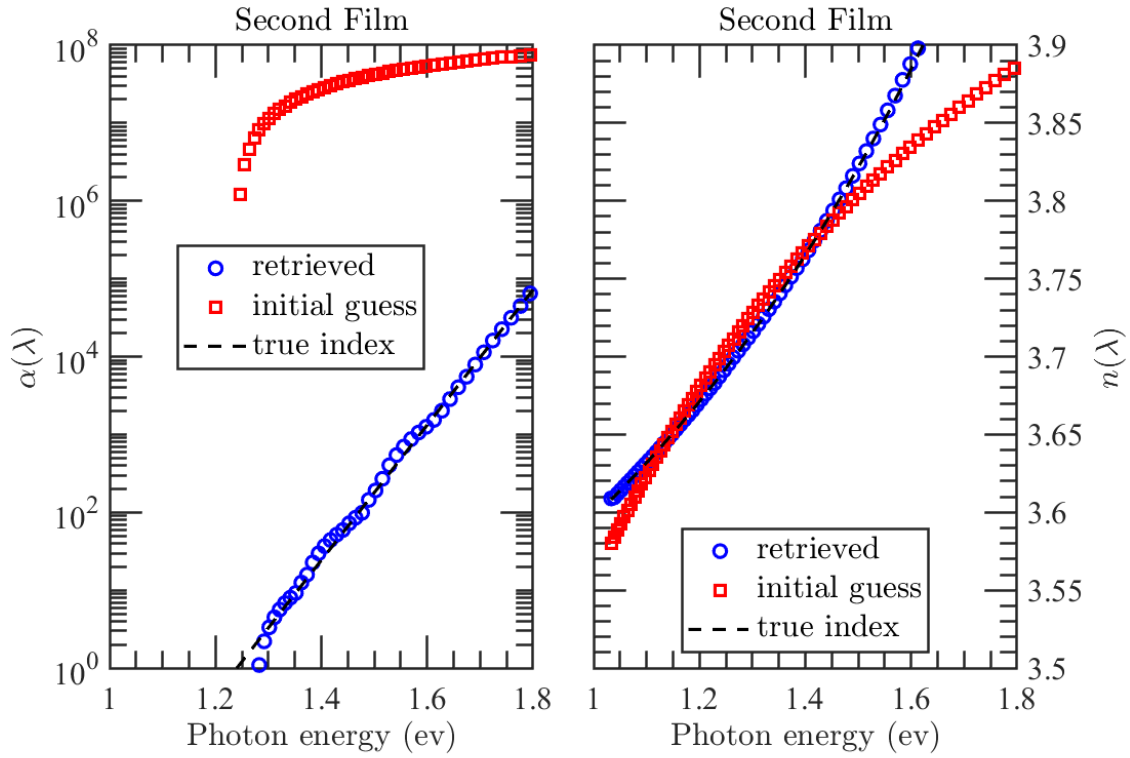
شكل 3-3. عملية التحسين للأغشية الاصطناعية. نلاحظ التقارب الجديد نحو الحضيض في الحالتين.



شكل 3-4. نفاذية الأغشية الأصطناعية مقارنة بالنفاذية المستردة. نلاحظ تطابق تام.



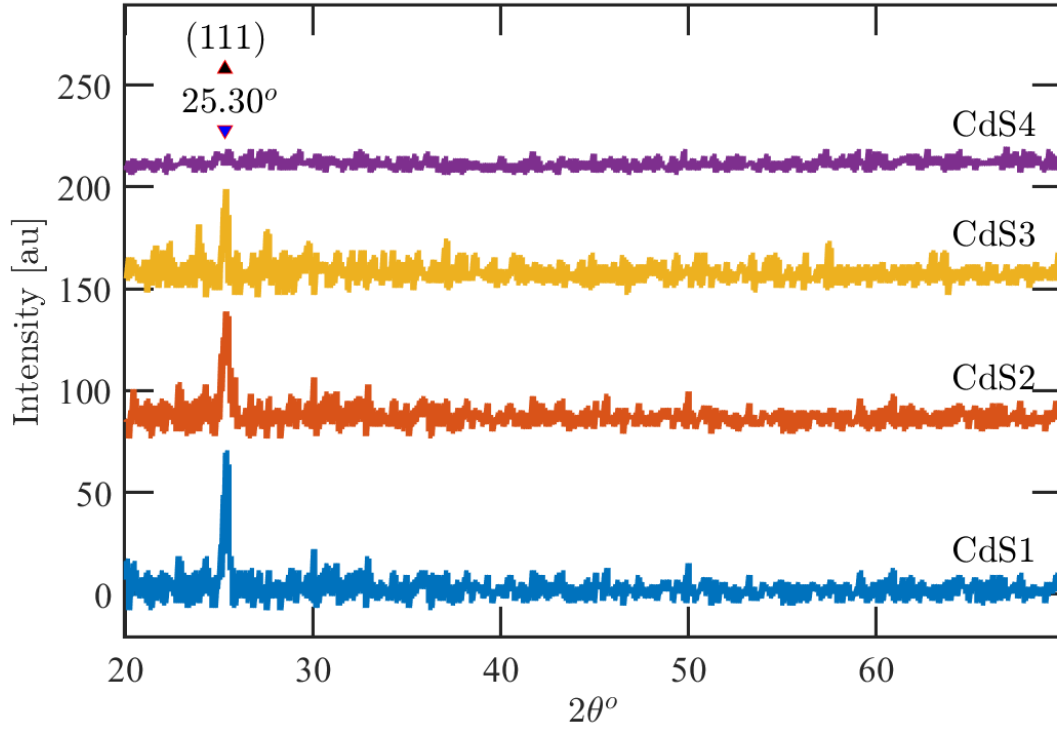
شكل 3-5. ثوابت البصرية المستردة للغشاء الأول بدلالة طاقة الفوتونات ومقارنة بالقيم الحقيقية والتخمينات الأولية



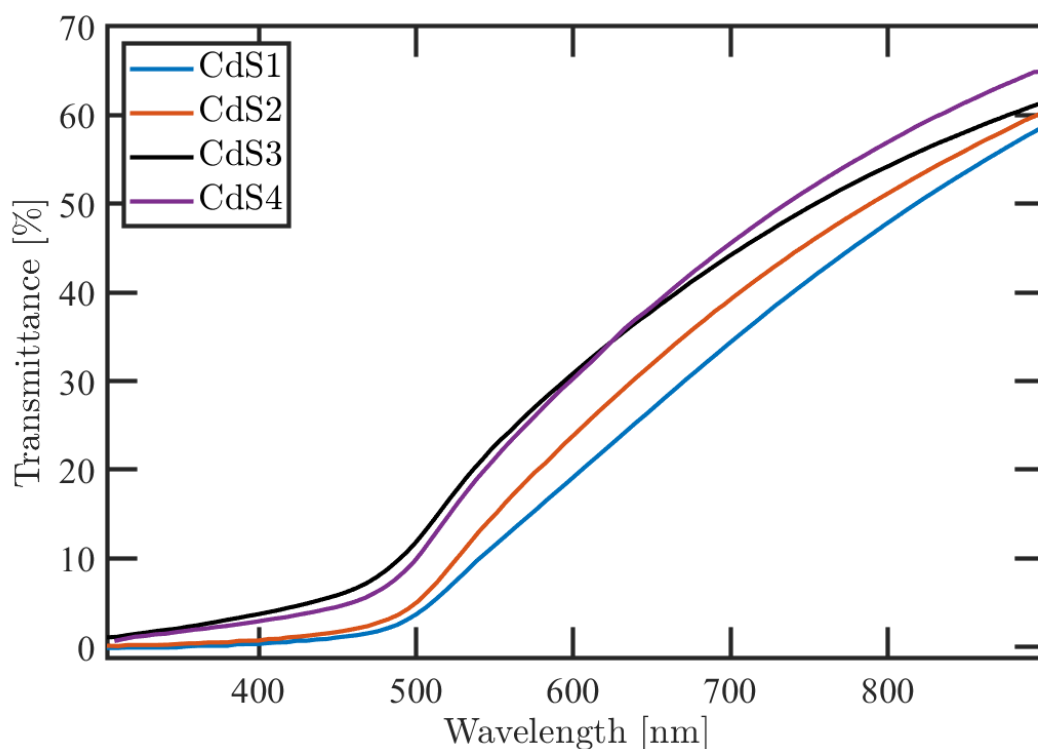
شكل 3-5. ثوابت البصرية المستردة للغشاء الثاني بدلالة طاقة الفوتونات ومقارنة بالقيم الحقيقية والتخمينات الأولية

3-3 التطبيق على أغشية CdS البلورية

تم ترسيب أغشية CdS على ركائز زجاجية وعند تراكيز تطعيم مختلفة باستخدام ترسيب الحمام الكيميائي. ثم هذا العمل التجريبي على مستوى مخابر جامعة الوادي و قد بينت تحاليل الأشعة السينية ان جميع الاغشية المرسبة بلورية كما يبين الشكل 3-7. تم كذلك انجاز قياسات النفاذية في نطاق الطول الموجي 300-900 نانومتر كما يبينها الشكل 3-8. يوضح الشكل 3-8 سلوك النفاذية الطيفية لأغشية CdS الرقيقة المحضرة باستخدام جرعات مختلفة من الثيوربا، والمُسجَّلة عبر نطاق الأشعة فوق البنفسجية – المرئية. يُلاحظ مستوى عالٍ من النفاذية بعد الطول الموجي 500 نانومتر لجميع الأغشية، مما يشير إلى شفافية كبيرة في نطاق الضوء المرئي. ومع ذلك، ومع ازدياد جرعة الثيوربا، يظهر انخفاض في النفاذية في منطقة الأطوال الموجية الأطول. يمكن عزو هذا التناقص إلى زيادة سماكة الغشاء وعدم انتظام السطح، وكلاهما يُساهم في زيادة تشتت وامتصاص الفوتونات.



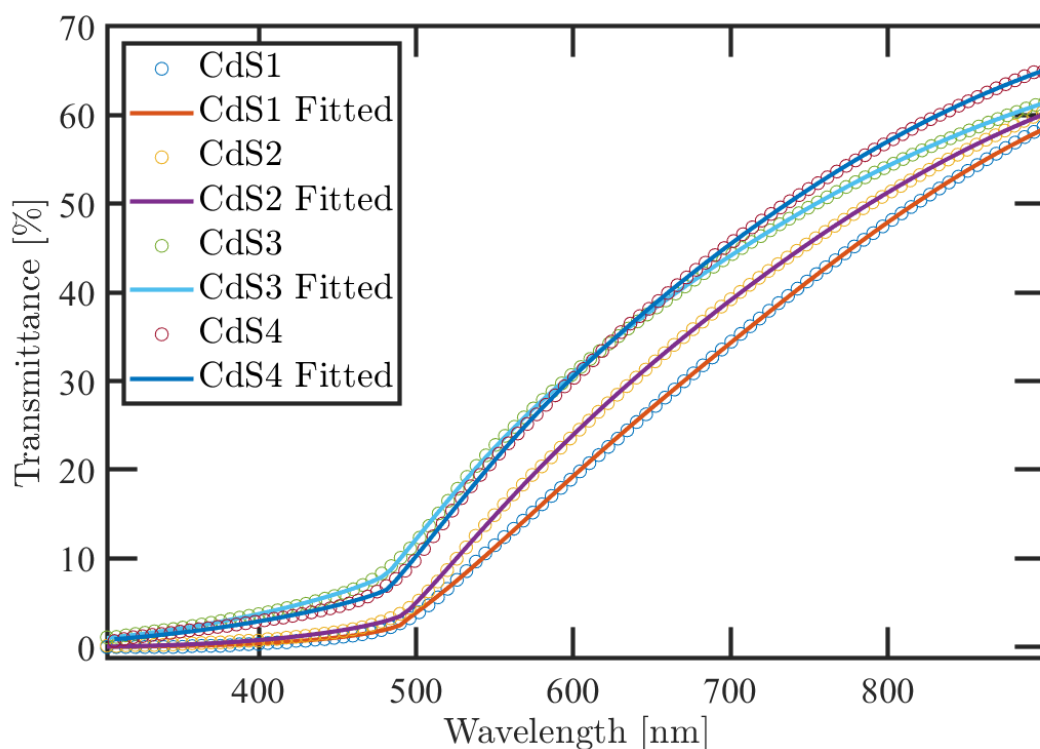
شكل 3-7. مخطط انعراج الاشعة السينية لمختلف عينات CdS وكلها تظهر درجة تبلور مقبولة.



شكل 3-5. نتائج قياسات النفاذية CdS

1-3-3 استزاد النفاذية

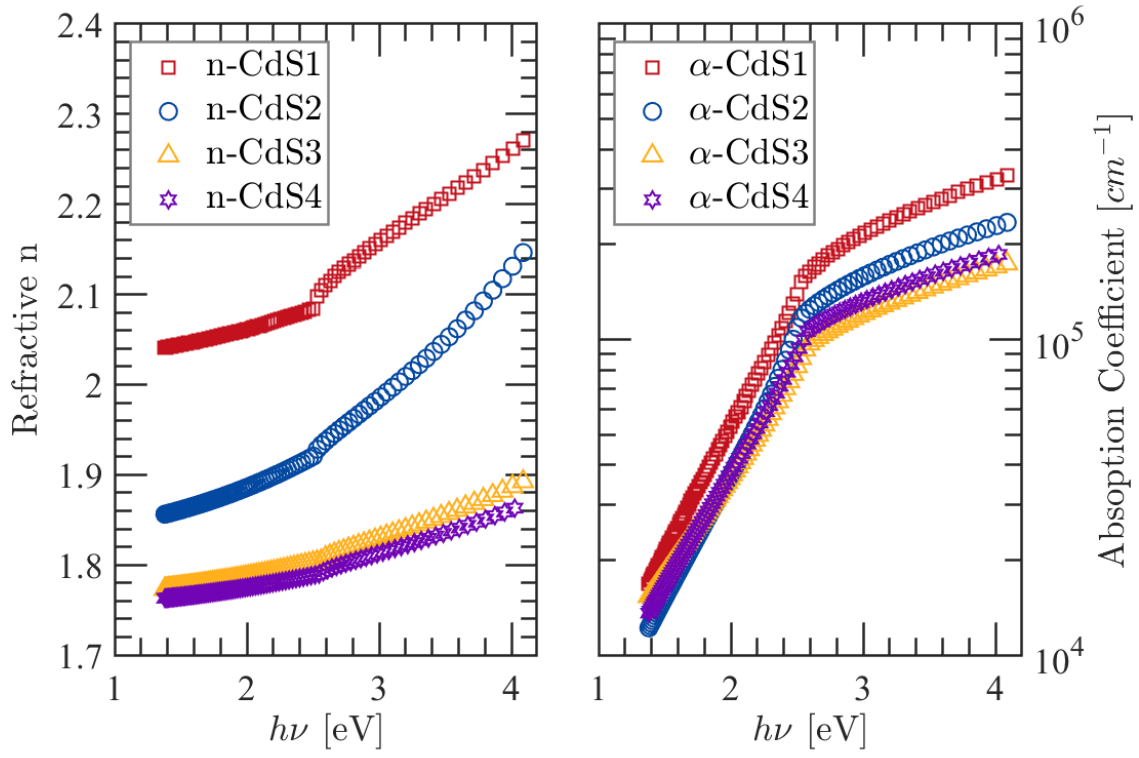
لم تظهر أطيف النفاذية لعينات CdS نمط تداخل واضح بسبب الامتصاص القوي للأغشية في المنطقة المرئية. ومع ذلك، تمكنت عملية التحسين من استرداد النفاذية وسمك الأغشية والثوابت البصرية من خلال تطبيق القيود الفيزيائية. تم تنفيذ عملية التحسين على أطيف النفاذية المقاسة لأغشية CdS البلورية على خطوتين: أولاً، تم تقدير سمك الغشاء باستخدام البيانات في المنطقة الشفافة، ثم تم استرداد الثوابت البصرية للنطاق الطيفي بأكمله. يعرض الشكل 3-9 نتيجة استرداد النفاذية ونلاحظ أنها متوافق تماماً مع القياسات التجريبية لجميع العينات.



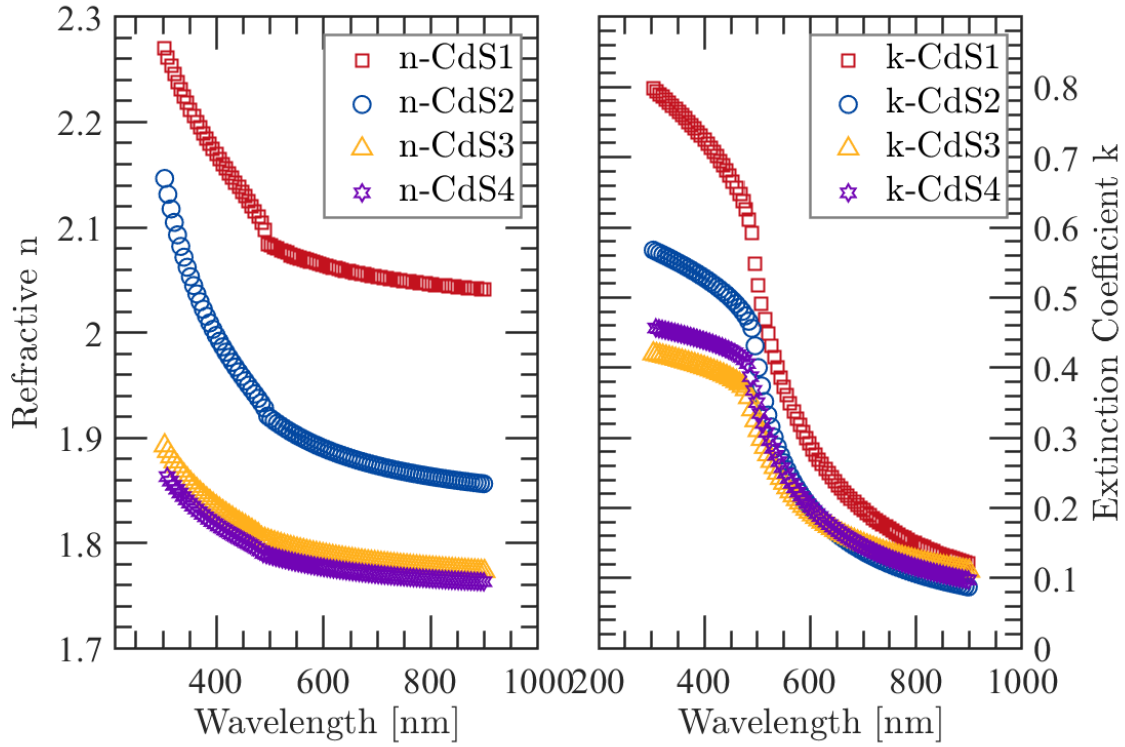
شكل 3-9. نتائج ملائمة منحنيات النفاذية النظرية مع القياسات التجريبية CdS

3-3-2 [استرداد قرينة الانكسار ومعامل الامتصاص وسمك الأغشية]

مكثنا عملية التحسين من استرداد قرينة الانكسار ومعامل الامتصاص وسمك الأغشية لجميع العينات. يعرض الشكل 3-10 قرينة الانكسار ومعامل الامتصاص بدلالة طاقة الفوتونات. مع زيادة تركيز الثوربا نلاحظ معامل الامتصاص يزداد تدريجياً وهذه إشارة أولية لزيادة معدل الترسيب وسمك الأغشية مع التراكيز. تراوحت سمك الأغشية المستخرجة للعينات الأربع بشكل منتظم، حيث بلغت 221.55 نانومتر في العينة 1، وارتفعت تدريجياً لتصل إلى 247.84 نانومتر في العينة 4، مع قيم وسط بلغت 238.39 نانومتر و241.85 نانومتر للعينة 2 و3 على التوالي. هذا الارتفاع التدريجي في سمك الغشاء يتوافق مع التغيرات في جرعة الثيوربا أثناء عملية الترسيب الكيميائي بالحمام.



شكل 3-10. نتائج استخراج قرينة الانكسار و عوامل الانطفاء لشرائح CdS



شكل 3-11. نتائج استخلاص معامل الامتصاص لشرائح CdS

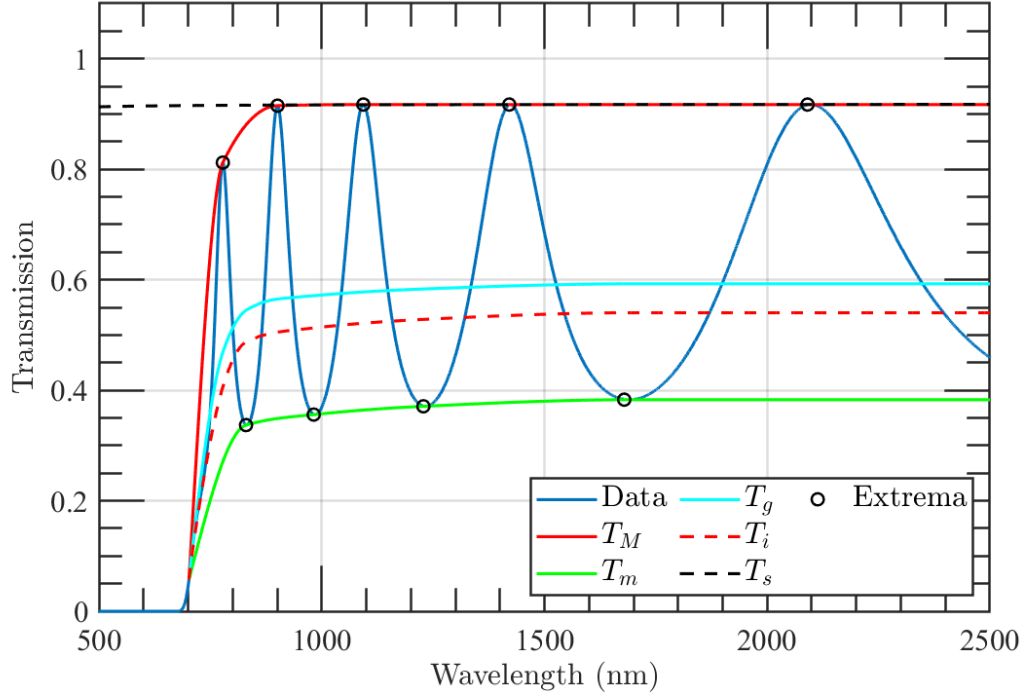
4-3 المقارنة مع الطرق التقريبية

نحاول في هذا القسم ان نقارن نتائجنا مع نتائج طريقة الغلاف التقريبية والتي تعتمد على وجود هامش التداخل في أطباف النفاذية لتقدير سمك الغشاء ومعامل الانكسار. لسوء الحظ العينات التجريبية التي في متناولنا لاتعرض اهداب تداخل. لذلك سنكتفي بالمقارنة مع الأغشية الاصطناعية التي تبدي اهدابا في طيفها. تعتبر طريقة التغليف ل Swanepoel [10] فعالة بشكل خاص للأغشية التي تظهر أنماط تداخل في أطباف النفاذية، حيث تعتمد على وجود نقاط حرجة (قيم عظمى وصغرى) في منحني النفاذية لتقدير سمك الغشاء وقيرينة الانكسار.

3-4-1 نظرة عامة على طريقة التغليف

تعتمد طريقة الغلاف لسوانيبويل [10] على تحليل هامش التداخل في طيف النفاذية لغشاء رقيق. تفترض الطريقة أن الغشاء يحتوي على منطقة شفافة نسبياً، مما يسمح بملاحظة عدة قيم عظمى وصغرى للتداخل. يعرض الشكل 3-12 نفاذية غشاء اصطناعي بسمك 600 نانومتر، تم الحصول عليها باستخدام المعادلات (3-1) و (3-12) على طول المجال الموجي 500-2500 نانومتر. هذا السمك المعروف والثوابت البصرية المعرفة بالمعادلات السابقة الذكر يمكن استخدامها للتحقق من التقديرات المتحصل عليها بطريقة الغلاف. المغلفان السلسان T_m و T_M يتم إنشاؤهما استناداً إلى هذا الطيف الاصطناعي، وتستخدم هذه القيم المستخرجة في الحسابات في الأقسام الموالية. الخطوات الرئيسية في طريقة Swanepoel هي كما يلي:

أولا تحديد النقاط الحدية: بداية يجب تحديد القيم العظمى والصغرى في طيف النفاذية. تتوافق هذه النقاط مع التداخل البناء والهدام على التوالي. تمثل البيانات عند الدوائر السوداء في الشكل 3-12 هذه النقاط الحدية وقد تم تحديدها ليا ببرنامج خاص لذلك. المغلفان السلسان T_m و T_M تم انشاءهما بمحاذاة تكعيبية للقيم الحدية العظمى والصغرى على الترتيب، لينفتح بذلك الباب لاستقراء اي قيمة بينية للنفاذية عند أي طول موجي بيني بين القيم الاصلية.



شكل 3-12. وصف لطريقة الغلاف. النفاذية هي لغشاء اصطناعي بسمك 600 نانومتر على ركيزة شفافة بنفاذية T_s . يعرض الغشاء اهداب واضحة للتداخل البناء. الاغلفة السلسة تم الحصول عليها بمحاذاة تكعيبية للقيم العظمى والدنيا. المنحنيات T_i و T_g معرفة على الترتيب بـ $\sqrt{(T_M T_m)}$ و $2(T_M T_m)/(T_M + T_m)$ كما في مقال سانوبويل.

ثانيا تقدير قرينة الانكسار: يتم تقدير قرينة الانكسار $n(\lambda)$ عند الأطوال الموجية المقابلة للنقاط الحدية باستخدام الصيغة:

$$n(\lambda) = \sqrt{N + \sqrt{N^2 - s^2}}, \quad (13-3)$$

حيث $N = 2s \frac{T_M - T_m}{T_M T_m} + \frac{s^2 + 1}{2}$ ، و T_m و T_M هما قيم النفاذية عند القيم العظمى والصغرى على التوالي، و s هي قرينة انكسار الركيزة، والتي يمكن تحديدها من خلال قياس طيف النفاذية للركيزة لوحدها فقط، ثم استخدام المعادلة (3-3) لحساب s . في هذا العمل، تم افتراض أن تكون $s(\lambda)$ على الشكل المعطى في المعادلة (3-12)، مما يؤدي إلى منحنى نفاذية كما هو موضح بـ T_s في الشكل 3-12.

يعرض الجدول (2-3) قيم النفاذية T_m و T_M والأطوال الموجية الموافقة عند القيم الحدية والتي تم الحصول عليها من الشكل 12-3. قيم قرينة الانكسار المحسوبة باستخدام المعادلة تم رصدها في نفس الجدول (2-3). هناك توافق جيد مع القيم الحقيقية n_{true} . نشير هنا أنه عند طول موجي معين يجب قراءة قيم النفاذية من المنحنيات الخاصة بـ T_m و T_M ، وليس من الطيف الفعلي. بمعنى أنه عند طولي موجي مثلاً موافق لقيمة عظمى نقرأ قيم النفاذية الموافقة من منحنى $T_m(\lambda)$ و $T_M(\lambda)$ ، لنحصل على قيمتين لها عند نفس الطول الموجي كما هو واضح من الجدول (2-3). كذلك، قيم n المرصودة في الجدول (2-3) محسوبة عند القيم الحدية للطيف سواء المباشرة أو المقابلة لها عند الاغلفة السلسلة للطيف، وهذا بغرض التوضيح فقط، ولكن يمكن حسابها كذلك عند أي قيمة لـ λ باستخدام الاغلفة السلسلة $T_m(\lambda)$ و $T_M(\lambda)$.

جدول 2-3. القيم المحسوبة لـ $\lambda, T_m, T_M, n_1, n_{true}$ والخطأ المطلق والنسبي على قيم قرينة الانكسار.

λ (nm)	T_M	T_m	n	n_{true}	$\Delta_a n$	$\Delta_r n$ (%)
2090.5	0.9170	0.38300	3.5228	3.4968	0.026	0.74
1679.1	0.9170	0.38300	3.5235	3.5258	0.002	0.07
1421.0	0.9170	0.37793	3.5550	3.5591	0.004	0.12
1228.2	0.9170	0.37100	3.5988	3.6003	0.002	0.04
1093.5	0.9170	0.36418	3.6429	3.6446	0.002	0.05
982.16	0.91637	0.35600	3.6968	3.6981	0.001	0.04
900.8	0.9150	0.34893	3.7440	3.7530	0.009	0.24
830.11	0.88016	0.33700	3.7932	3.8177	0.025	0.64
778.09	0.8120	0.27079	4.2769	3.8804	0.397	10.22

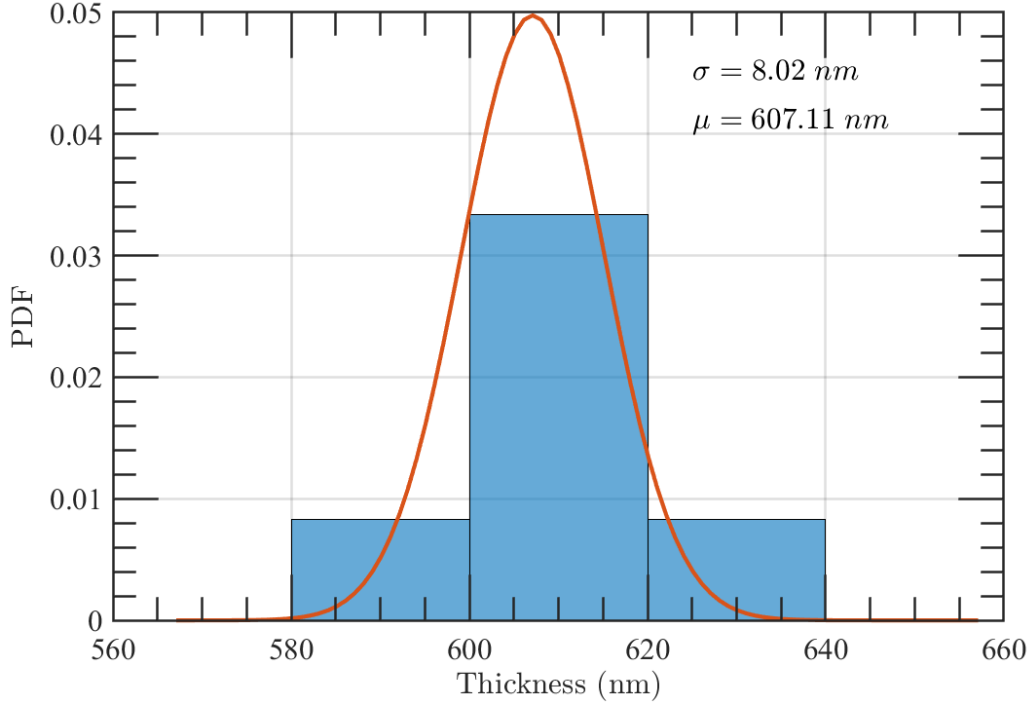
ثالثاً تقدير سمك الغشاء: يتم تقدير سمك الغشاء d باستخدام مواقع القيم العظمى والصغرى للتداخل وذلك باستخدام الصيغة:

$$d = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{2(\lambda_1 n_2 - \lambda_2 n_1)} \quad (14-3)$$

حيث λ_1 و λ_2 هما الطولين الموجيين لنقطتين متجاورتين من القيم العظمى أو الصغرى، و n_1 و n_2 هما قرينتا الانكسار عند هذين الطولين الموجيين.

تعد المعادلة (14-3) حساسة جداً للخطأ في حساب قيمة n وليست دقيقة جداً. تم رصد القيم المحسوبة للسمك d من خلال المعادلة (14-3) في الجدول (3-3) تحت الرمز d_1 . نلاحظ في هذا الجدول بعض التشتت في قيم السمك، لكن القيمتين المحسوبتين عند الطرف الأدنى للطيف تنحرفان بشكل واضح عن القيم الأخرى. هذا الانحراف مؤشر على أن قيمة قرينة الانكسار المحسوبة من المعادلة (13-3) و قيمة λ ليست دقيقة بما فيه الكفاية، ويجب رفض هذه القيم. وكقاعدة عامة، يجب عدم استخدام القيم الطرفية للطيف في حساب السمك وان يحوي الطيف كذلك عدد كافي من اهداب التداخل حتى يتسنى رصد القيم الشاذة بشكل احصائي واضح ومقبول. يعرض الشكل (13-3)

التوزيع الاحتمالي لقيم السمك محسوبا باهمال القيم المتطرفة، ونلاحظ ان القيم تتوزع حول القيمة المتوقعة 607 ± 8 نانومتر.



شكل 3-3. التوزيع الاحتمالي لقيم السمك محسوبا باهمال القيم المتطرفة.

جدول 3-3. القيم المحسوبة ل λ_1 و λ_2 والسمك d_1 بالمعادلة (3-14).

λ_1 (nm)	λ_2 (nm)	n_1	n_2	d_1 (nm)
2090.5	1421	3.5228	3.555	612.24
1679.1	1228.2	3.5235	3.5988	601.32
1421	1093.5	3.555	3.6429	602.72
1228.2	982.16	3.5988	3.6968	599.58
1093.5	900.8	3.6429	3.744	606.11
982.16	830.11	3.6968	3.7932	620.7
900.8	778.09	3.744	4.2769	373.02
				$\bar{d}_1 = 607 \pm 8$ (nm)

القيمة المتوسطة للسمك بإهمال القيم المتطرفة تساوي $\bar{d}_1 = 607 \pm 8 \text{ nm}$ هذه القيمة ل \bar{d}_1 يمكن استخدامها مع قيم n مرة أخرى من الجدول (3-2) لتحسين تقدير السمك، وهذا عن طريق حساب رتب الاهداف من معادلة شرط التداخل $2nd_1 = m\lambda$. يؤدي ذلك إلى زيادة كبيرة في الدقة عند أخذ فقط القيم الصحيحة أو نصف الصحيحة ل m لكل λ ، ثم حساب السمك d_2 من نفس المعادلة $2nd_2 = \tilde{m}\lambda$. تختار مجموعة الرتب ل \tilde{m} التي

تفضي الى أقل تشتت في d_2 . يعرض الجدول (4-3) نتائج هذه الحسابات والقيمة المتوسطة لـ d_2 من هذا الجدول تساوي $\bar{d}_2 = 598 \pm 3nm$ ، مما يعني انه تم قياس السمك بدقة نسبية $0.5\% = 0.005 = 3/598$ وهي أقل من 1% . باستخدام القيم الدقيقة للسمك d_2 والرتب \tilde{m} ، يمكن تحسين تقدير القرينة n باستخدام معادلة شرط التداخل مرة اخرى، والنتائج تم رصدها في الجدول 4-3 تحت الرمز n_2 . نلاحظ هذه المرة تقارب جيد جدا مع بعض النقاط من القيم الحقيقية.

جدول 4-3. التقديرات المحسنة للسمك d_2 بدلالة رتب التداخل \tilde{m} والمحسوبة بدلالة λ و n .

λ (nm)	n	m	\tilde{m}	d_2 (nm)	\tilde{d}_2 (nm)	n_2
2090.5	3.5228	2.0457	2	593.44	593	3.4959
1679.1	3.5235	2.5476	2.5	595.67	596	3.5097
1421.0	3.5550	3.0372	3	599.57	600	3.5643
1228.2	3.5988	3.5570	3.5	597.27	597	3.5944
1093.5	3.6429	4.0443	4	600.36	600	3.6573
982.16	3.6968	4.5694	4.5	597.78	598	3.6954
900.8	3.7440	5.0457	5	601.5	601	3.7659
830.11	3.7932	5.5473	5.5	601.82	602	3.8174
778.09	4.2769	6.6730	6.5	591.27	591	4.2288
					$\bar{d}_2 = 598 \pm 3$ (nm)	

رابعا استقرار قرينة الانكسار: يتم تركيب قيم قرينة الانكسار عند النقاط العظمى والدنيا على دالة من الشكل:

$$n(\lambda) = A\frac{1}{\lambda^4} + B\frac{1}{\lambda^2} + C \quad (15-3)$$

$$= Ax^2 + Bx + C$$

حيث A ، B ، و C هي ثوابت و $x = \lambda^{-2}$. يتم استخدام هذه الدالة لاستقراء قرينة الانكسار إلى النطاق الطيفي بأكمله. بتطبيق محاذات غير خطية على قيم قرينة الانكسار من الجدول (4-3) وباستخدام التعبير السابق نجد المعاملات التالية للتعبير المختار:

$$n(\lambda) = 3.4554 \times 10^{10} \frac{1}{\lambda^4} + 1.7897 \times 10^5 \frac{1}{\lambda^2} + 3.4667 \quad (16-3)$$

يعرض الشكل 14-3 قرينة الانكسار المستردة المعبر عنها بالمعادلة (16-3) بدلالة طاقة الفوتونات مقارنة مع القرينة الفعلية. نلاحظ تقارب مقبول بين الحالتين. لاحظ كذلك تأثير ادراج القيم المتطرفة على دقة الاسترداد، الامر الذي يؤكد مرة ثانية على ضرورة استثنائكم في الحسابات. على الرغم من امكانية الاسترداد بطريقة الغلاف، الا انها في الحالة العامة و في ظل غياب اي معلومات مسبقة عن الثوابت البصرية، تحتاج لنقاط تداخل كبيرة حتى تتمكن من استيفاء معلومات عن التوجه العام للثوابت البصرية ومن ثم استثناء النقاط التي تشتت كثير في النتائج المتحصل عليها.

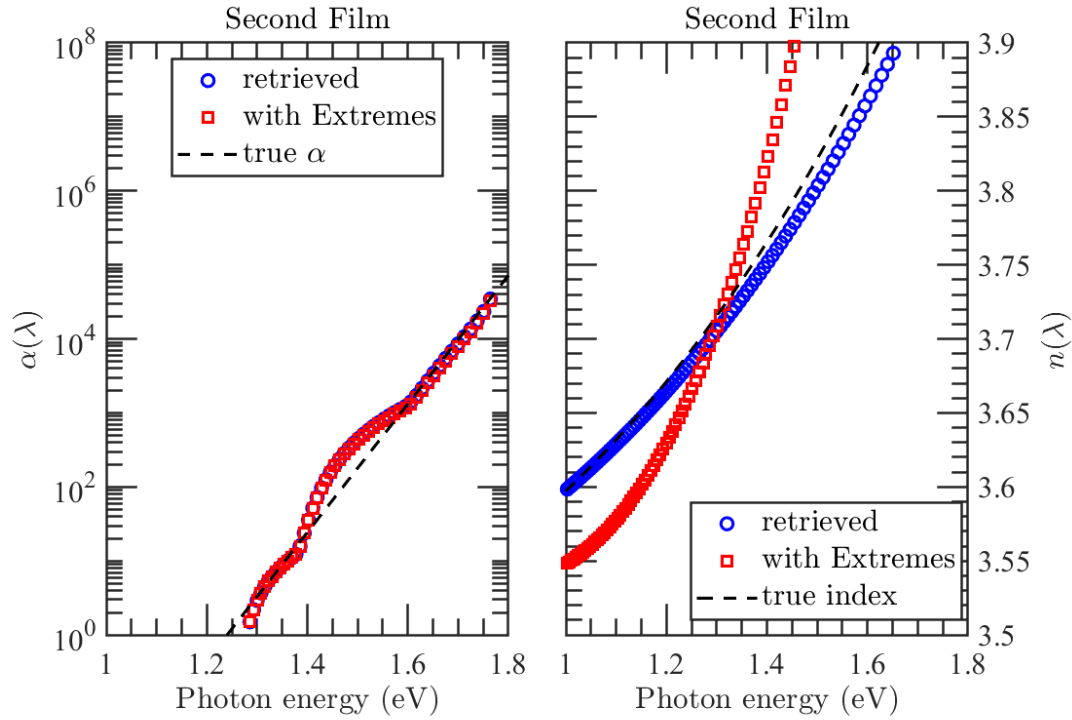
خامساً تقدير معامل الامتصاص: يتم تقدير معامل الامتصاص $\alpha(\lambda)$ باستخدام احد المنحنيات السلسلة للنفاذية $T_M(\lambda)$ أو $T_m(\lambda)$ أو $T_g(\lambda)$ أو $T_i(\lambda)$ كما هي موصوفة في مقال سوانيبويل، مع الأخذ في الاعتبار السمك \bar{d}_2 وقرينة الانكسار المستقرقة والموصوفة بالمعادلة (16-3). باستخدام $T_M(\lambda)$ يمكن تحديد معامل الامتصاص $\alpha(\lambda)$ من العبارة $x = \exp(-\alpha\bar{d}_2)$ حيث يحسب x بالمعادلة التالية (انظر المعادلة 12 من مقال سوانيبويل [10]):

$$x = \frac{E_M - \left[E_M^2 - (n^2 - 1)^3 (n^2 - s^4) \right]^{1/2}}{(n - 1)^3 (n - s^2)}, \quad (17-3)$$

حيث

$$E_M = \frac{8n^2s}{T_M} + (n^2 - 1)(n^2 - s^2) \quad (18-3)$$

يعرض الشكل 14-3 نتائج تطبيق طريقة الغلاف في استرداد معامل الامتصاص للغشاء الاصطناعي، ويقارن الجدول 5-3 قيم هذا المعامل مع قيمه الحقيقية الموصوفة بالمعادلة (11-3). إن مقارنة معامل الامتصاص تُظهر أن الاسترداد باستخدام طريقة الغلاف جيد نسبياً في المجال ($10^3 \sim 10^{58} \text{ cm}^{-1}$)، لكنه يفشل عند القيم الصغيرة لـ α . نلاحظ على الرغم من التقارب ملحوظ في النتائج الا اننا نجد طريقة التحسين النقطية المقيدة اكثر دقة، الامر الذي يدعمه الشكل 6-3. بخصوص السمك نجد طريقة التحسين اكثر دقة إذ اسفرت عن سُمك $d = 600$ نانومتر عند حضيض لدالة الهدف يضاهي 1.9×10^{-5} ، في حين أن طريقة التغليف كما رأينا أسفرت عن سُمك نانومتر $d = 598 \pm 3$. نوكد مرة اخرى ان قابلية ودقة طريقة الغلاف مرهون بتوفر منطقة شفافة وسمك كبير نسبيا حتى يتحقق التداخل البناء وظهور اهداب التداخل. أضف اليه أن دقة الحسابات تتعلق بدقة حساب مواقع الاهداب ودقة حساب المنحنيات السلسلة. مثل هذه القيود والشروط غير مطلوبة مع طريقة التحسين النقطية لذلك نعتناها بالمباشرة.



شكل 3-14. الثوابت البصرية المستردة للغشاء الثاني بدلالة طاقة الفوتونات باستخدام طريقة الغلاف ومقارنة بالقيم الحقيقية وتأثير ادراج بيانات النقاط المتطرفة في الحسابات.

جدول 3-5. نتائج تقديرات معامل الامتصاص ومقارنتها مع النتائج الفعلية للغشاء الاصطناعي.

λ (nm)	n_2 (eq 16-3)	n_{true}	$\alpha_{true} \times 10^3$ (cm ⁻¹)	$\alpha \times 10^3$ (cm ⁻¹)
2090.5	3.5094	3.4968	$2.4092E - 09$	0.0023936
1679.1	3.5345	3.5258	$4.3996E - 08$	0.00079548
1421	3.5638	3.5591	$6.42E - 07$	0.00097303
1228.2	3.6005	3.6003	$9.9071E - 06$	0.0030588
1093.5	3.6405	3.6446	0.00011894	0.0051874
982.16	3.6893	3.6981	0.0015534	0.00058183
900.8	3.7397	3.753	0.015169	0.012113
830.11	3.7991	3.8177	0.15788	0.39901
778.09	3.8565	3.8804	1.1615	1.208

يسرد الملحق 3-4-1 برنامج تطبيق طريقة الغلاف والذي يمكن استخدامه مع اي بيانات اخرى. الملف المُستدعى يجب أن يحوي عمودين، الاول لطول الموجة بوحدات النانومتر، والثاني للقيم النفاذية الموافقة. اذا كانت قيم النفاذية ليست في المجال من 0 الى 1، وجب تقنينها للوحدة بالقسمة على 100.

خاتمة

قدم هذا الفصل طريقة تحسين دقيقة لتقدير الثوابت البصرية وسمك الاغشية الرقيقة باستخدام بيانات النفاذية البصرية فقط. تعتمد الطريقة على نهج تحسين مقيد نقطيًا، والذي ينطبق على جميع أنواع أطيايف النفاذية،

بغض النظر عن وجود هامش التداخل أو الشفافية. تم إثبات موثوقية الطريقة من خلال التجارب العددية مع أغشية تم إنشاؤها بواسطة الكمبيوتر وتطبيقها على أغشية بلورية لكبريت الكادميوم CdS المرسبة بتقنية الحمام الكيميائي. أظهرت النتائج توافقًا ممتازًا مع القياسات الاصطناعية مما يبرز إمكانات الطريقة في توصيف الأغشية الرقيقة في التطبيقات المختلفة، بما في ذلك الإلكترونيات الدقيقة والخلايا الكهروضوئية. أثبتت كذلك نتائج المقارنة مع طريقة الغلاف، أن طريقة التحسين النقطة أكثر موثوقية ومباشرة على الرغم من تكلفتها البرمجية مقارنة بطريقة الغلاف.

الخاتمة العامة

في هذا العمل، تناولنا مسألة استرجاع الخصائص البصرية للأغشية الرقيقة من خلال بيانات النفاذية الطيفية فقط، وذلك باستخدام نموذج فيزيائي دقيق وتقنيات تحسين عددية متقدمة. قدمنا طريقة تعتمد على تقنية تحسين نقطي مقيد، حيث يتم تشكيل مسألة تحسين غير خطية مع قيود خطية تمثل المعرفة المسبقة عن الخصائص الفيزيائية للوسط المدروس. تتميز هذه الطريقة بأنها لا تعتمد على وجود أنماط التداخل في أطيف النفاذية، مما يتيح تطبيقها على مختلف أنواع الأغشية، سواء أظهرت أنماط شفاقة أو غير شفاقة، وبالتالي تعزز من عموميتها ودقتها. أضف لذلك أنها لا تعتمد على استخدام شكل دالي لعلاقات التشتت n و k بعدد برامترات محدود كما درج الحال مع الطرق التقليدية مثل طريقة الغلاف، وتعد هذه الميزة الأساسية للنهج المتبع في هذه المذكرة.

استعرضنا في الفصل الثاني المبادئ الأساسية للتحسين الرياضي، وبيننا أهمية النمذجة الدقيقة وشروط الأمثلية، كما قارنا بين أبرز خوارزميات التحسين المحلية مثل طريقة نيوتن، وطريقة التدرج النازل، والتدرج النازل العشوائي. أظهرت النتائج النظرية والمبرمجة أن اختيار الخوارزمية المناسبة يلعب دورًا حاسمًا في دقة وكفاءة الحل، خاصة عند التعامل مع بيانات تجريبية حقيقية.

في الفصول التالية، طُبقت الخوارزميات على بيانات أطيف نفاذية لأغشية بصرية ذات خصائص فيزيائية معقدة. كما اعتمدنا في أسلوب التحسين على دالة هدف من نوع مربعات صغرى مع مجموعة من القيود، وقمنا بتطبيق خوارزميات تحسين محلية تعتمد على المشتقات مثل خوارزمية نيوتن والتدرج النازل. أثبتت الطريقة فعاليتها من خلال التجارب العددية على أغشية اصطناعية تم توليدها حاسوبيًا، كما تم تطبيقها عمليًا على أغشية CdS بلورية محضرة في مخبر جامعة الوادي باستخدام تقنية الترسيب الكيميائي بالحمام تحت شروط ترسيب مختلفة.

مكنتنا عملية التحسين من استرداد كل من معامل الانكسار، معامل الامتصاص، وسماكة الأغشية بشكل دقيق. لوحظ أن معامل الامتصاص يزداد تدريجيًا مع زيادة تركيز الثيوريا، وهو ما يشير إلى ارتفاع معدل الترسيب وبالتالي زيادة تدريجية في سمك الأغشية. تراوحت السماكات المستخرجة من 221.55 نانومتر في العينة 1 إلى 247.84 نانومتر في العينة 4، مع قيم وسطية قدرها 238.39 نانومتر و 241.85 نانومتر للعينة 2 و 3 على التوالي. هذا التدرج في السماكة يعكس بوضوح تأثير جرعة الثيوريا على خصائص الغشاء خلال عملية التصنيع.

تؤكد النتائج أن النموذج العددي المطور قادر على محاكاة الظواهر البصرية بدقة، وأن منهجية التحسين المقيد النقطي تمثل أداة قوية لاسترجاع المعلومات البصرية، خاصة في الحالات التي لا تتوفر فيها بيانات تداخل واضحة. كما أن البرنامج المطور في بيئة MATLAB لهذا الغرض يوفر منصة عملية لدراسة وتحليل الأغشية البصرية بدقة ومرونة.

توصيات و آفاق مستقبلية

نقترح في إطار تطوير هذا العمل مستقبلاً ما يلي:

- دراسة تأثير الضجيج في بيانات النفاذية على دقة الحل واستقراره، وتطوير تقنيات تصحيح الخطأ.
- استخدام خوارزميات تحسين شاملة (Global-Optimization) لتجنب الوقوع في النقاط الدنيا المحلية.
- توسيع النماذج لتشمل الأغشية متعددة الطبقات أو الوسائط غير المتجانسة.
- دمج تقنيات تعلم الآلة لتحسين جودة النقطة الابتدائية أو لتقريب الدالة الهدف.
- تطوير أدوات مفتوحة المصدر لتحليل الأغشية البصرية ونشرها للباحثين في هذا المجال.

الملفات

يعرض هذا الملحق برنامج MATLAB تم تطويره لتطبيق طريقة الغلاف لـ سوانيبويل [10] وهو يتبع نفس الخطوات كما يعرضها هذا المقال. في حساب معامل الامتصاص $\alpha(\lambda)$ تم الاعتماد على المعادلة رقم 12 من نفس المقال وهي الأكثر مصداقية كما يدعي سوانيبويل.

SwanepoelMethod.m

```
function [d, n, alpha, Lam] = swanepoel_method(filename, Lam0, Extremes
)
% SWANEPOEL_METHOD Calculate thin film parameters using Swanepoel
% 's method
% Inputs:
% filename - path to data file containing two columns:
% wavelength
% (nm) and transmission(normalized to one)
% Lam0- where the envelopes startes
% Etremes index of Etremes to be removed
% Output:
% d - film thickness (nm)
% n - refractive index as function of wavelength
% alpha - absorption coefficient (cm^-1)
% Lam - wavelengths of extrema points
% Examples:
% swanepoel_method('Film2.txt',702,[7])
% swanepoel_method('swanepoel.txt',535,[8,9])

% Load data from file
data = load(filename);
Lam = data(:,1); % wavelength in nm
T = data(:,2); % transmission (0-1)
%% actual refractive index (make sure to change it according to
% youe choice
% Example1
ntrue=@(x) sqrt(1+ 1./((0.09195 -12600./x.^2)));
s = @(x) sqrt(1.0 + 1.0 ./ (0.7568 - 7930.0 ./ (x .* x)));
alpha0=@(x) 1e-3*exp(24780./x -34); % nm^-1

% Example2 (Swanopowel)
%ntrue=@(x) 3e5./(x.^2) + 2.6;
%s = @(x) 1.51*ones(size(x));
```

```

%alpha0 = @(x) exp((1.5*1e6./x.^2 -8)*log(10)); % nm^-1

% Step 1: Find maxima and minima in transmission spectrum
[TM, MLam] = findpeaks(T, Lam, 'MinPeakProminence', 0.02);
[Tm, mLam] = findpeaks(-T, Lam, 'MinPeakProminence', 0.02);
Tm = -Tm;
% Step 2: Create envelopes using cubic spline interpolation

iLam=find(Lam>=Lam0); iLam0=iLam(1);
Lamc=Lam(iLam0:end);
T0=T(iLam0);

TMcFun = @(x) interp1([Lam0;MLam], [T0;TM], x, 'pchip');
TmcFun = @(x) interp1([Lam0;mLam], [T0;Tm], x, 'pchip',0.383);
% Step 3: Create function handles for N and n and errors
Nfun =@(x) 2*s(x).*(TMcFun(x)-TmcFun(x))./(TMcFun(x).*TmcFun(x))
    + (s(x).^2 + 1)/2;
nfun=@(x) sqrt(Nfun(x) + sqrt(Nfun(x).^2 - s(x).^2));
ErrFun = @(x) abs(nfun(x)-ntrue(x))./ntrue(x)*100;

% Step 4: Calculate smooth Transmission curves: TM,Tm, Ti,Tg and
Ts
Ts=2*s(Lam)./(s(Lam).^2+1);
TMc = TMcFun(Lamc);
Tmc = TmcFun(Lamc);
Tg = sqrt(TMc.*Tmc);
Ti = 2*(TMc.*Tmc)./(TMc+Tmc);
% Plot curves
plot(Lam,T,Lamc,TMc,'r',Lamc,Tmc,'g','LineWidth', 1.5);hold on
plot(Lamc,Tg,'c','LineWidth', 1.5);hold on
plot(Lamc,Ti,'r--','LineWidth', 1.5);hold on
plot(Lam,Ts,'k--','LineWidth', 1.5)
plot(mLam, Tm, 'ko',MLam,TM, 'ko','LineWidth', 1.2);

xlabel('Wavelength (nm)');
ylabel('Transmission');
legend('Data', '$T_{M}$', '$T_{m}$','$T_{g}$','$T_{i}$','$T_{s}$',
    '$', 'Extrema','location','southeast','NumColumns',3,'
    interpreter','latex')
grid on;
% Step 4: first estimate of refractive index and thickness
xLam=sort([MLam;mLam],'descend');% combine all peaks lambda's in
one vector

format shortg
Lam1 = xLam(1:end-2);
Lam2 = xLam(3:end);

d1vec=(Lam1.*Lam2)./(2*(Lam1.*nfun(Lam2) -Lam2.*nfun(Lam1)));

```

```

% Remove Extremes data
d1=d1vec;
d1(Extremes)=[];
d1Avg=sum(d1)/(length(d1));
m=2*round(d1Avg)*nfun(xLam)./xLam;
roundh=@(x) (abs(fix(x)-x )>=0.4).*(fix(x)+0.5) + (abs(fix(x)-x )
    <0.4).*fix(x);
mr=roundh(m);
d2vec=(mr.*xLam)./(2*nfun(xLam));
d2vecr=round(d2vec);
d = mean(d2vecr(1:end-1));
fprintf('Retrieved Thickness:d= %f5.2\n',d);
n=(mr.*xLam)./(2*round(d));
Errorr2=abs(n-ntrue(xLam))./ntrue(xLam)*100;

table(Lam1,Lam2,nfun(Lam1),nfun(Lam2),d1vec,'VariableNames',{'Lam1
    ','Lam2','n1','n2','d1vec'})
table(xLam,nfun(xLam),m,mr,d2vec,d2vecr,n,ntrue(xLam),ErrFun(xLam)
    ,Errorr2,'VariableNames',{'Lam','n','m','mr','d2','d2r','n2','
    ntrue','Er1','Er2'})

% Step 5: Fit refractive index to dispersion relation
% n = A + B/Lam^2 + C/Lam^4
Pn=polyfit(1./(xLam(1:end-1).^2),n(1:end-1),2);

n2fun = @(x) polyval(Pn,1./x.^2);
% Step 6: Calculate absorption coefficient
EM=@(x) 8*n2fun(x).^2.*s(x)./TmcFun(x) +(n2fun(x).^2-1).*(n2fun(x)
    ).^2-s(x).^2);
x12=@(x) (EM(x)-sqrt(EM(x).^2-(n2fun(x).^2-1).^3.*(n2fun(x).^2-s(
    x).^4) ))./((n2fun(x)-1).^3.*(n2fun(x)-s(x).^2) );
alpha=@(x) -log(x12(x))/d*1e7; %(1e7 factor is for Convert alpha
    from nm^-1 to cm^-1

table(xLam,n2fun(xLam),ntrue(xLam),alpha0(xLam)*1e7/1000,alpha(
    xLam)/1000,'VariableNames',{'Lam','n2','ntrue','alpha0 [/cm]',
    'alpha [/cm]'})
%% Plot retrieved alpha and n
figure
Lamp=Lam(1:8:end);
E=(1239.8)./Lamp; % [eV]
semilogy(E,alpha(Lamp), 'bo', 'LineWidth', 1.5);hold on
semilogy(E,alpha0(Lamp)*1e7, 'k--', 'LineWidth', 1.5);hold on
legend('retrieved','true $\alpha$','Interpreter','latex')
xlabel('Photon energy (eV)','Interpreter','latex','fontname',
    'Times New Roman','fontsize',14,'interpreter','latex')
ylabel('$\alpha(\lambda)$','fontname','Times New Roman','
    fontsize',14,'interpreter','latex')
figure

```

```
plot(E, n2fun(Lamp), 'bo', 'LineWidth', 1.5);hold on
plot(E, ntrue(Lamp), 'k--', 'LineWidth', 1.5);hold on
legend('retrieved','true index')
xlabel('Photon energy (eV)','Interpreter','latex','fontname',
       'Times New Roman','fontsize',14,'interpreter','latex')
ylabel('$n(\lambda)$','fontname','Times New Roman','fontsize'
       ,14,'interpreter','latex')
```

```
end
```

- [1] Y-K Choi, Y-K Ha, J-E Kim, HY Park, and K Kim. Improved transmittance in one-dimensional metallic photonic crystals. *Physica B: Condensed Matter*, ,135--132:(1)338 2003.
- [2] Ronald R Willey. *Practical design and production of optical thin films*. CRC press, 2002.
- [3] B. A. Boukamp, G. C. Lesh, and R. A. Huggins. All solid lithium electrodes with mixed conductor matrix. *Journal of The Electrochemical Society*, 128(4):725, apr 1981.
- [4] T Karabacak and M.T Demirkan. Density modulated thin film electrodes, methods of making same, and applications of same. *U.S. Patent 10,333,148*, ,(148-333)10 2019.
- [5] Azzeddine Beggas, Z. Becer, R. Ahmim, and Mohamed Salah Aida. Structural and optical properties of pbs thin films deposited by chemical bath. *Defect and Diffusion Forum*, ,140--397:125 11 2019.
- [6] Olayinka Oluwatosin Abegunde, Esther Titilayo Akinlabi, Oluseyi Philip Oladijo, Stephen Akinlabi, and Ahuizechukwu U Ude. Overview of thin film deposition techniques. *AIMS Materials Science*, ,199--174:(2)6 2019.
- [7] Wensheng Yan, Lingyun Mao, Peiyang Zhao, Adrian Mertens, Stephan Dottermusch, Hang Hu, Zhong Jin, and Bryce S. Richards. Determination of complex optical constants and photovoltaic device design of all-inorganic cspbbr₃ perovskite thin films. *Opt. Express*, ,15717--15706:(10)28 May 2020.
- [8] S Bhattacharyya, R Gayen, R Paul, and A Pal. Determination of optical constants of thin films from transmittance trace. *Thin Solid Films*, ,5536--5530:(18)517 2009.
- [9] Arghyadeep Dutta, Ville Tiainen, Hassan Ali Qureshi, Liliana Duarte, and J Jussi Toppari. Modeling optical constants from the absorption of organic thin films using a modified lorentz oscillator model. *Optical materials express*, ,2869--2855:(7)12 2022.
- [10] R Swanepoel. Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon. *Journal of Physics E: Scientific Instruments*, 16(12):1214, 1983.

- [11] Maarten van Eerden, Manoj Jaysankar, Afshin Hadipour, Tamara Merckx, John J. Schermer, Tom Aernouts, Jef Poortmans, and Ulrich W. Paetzold. Optical analysis of planar multicrystalline perovskite solar cells. *Advanced Optical Materials*, 5(18):1700151, 2017.
- [12] A. R. Forouhi and I. Bloomer. Optical dispersion relations for amorphous semiconductors and amorphous dielectrics. *Phys. Rev. B*, 7026--34:7018 Nov 1986.
- [13] Peiponen KE Lucarini V, Saarinen JJ and Vartiainen EM. *Kramers-kronig relations in optical materialsresearch*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005.
- [14] I Chambouleyron, J Martínez, A Moretti, and M Mulato. Optical constants of thin films by means of a pointwise constrained optimization approach. *Thin Solid Films*, --133:(2-1)317,136 1998.
- [15] Zhao-Hui Ruan, Yuan Yuan, Xiao-Xian Zhang, Yong Shuai, and He-Ping Tan. Determination of optical properties and thickness of optical thin film using stochastic particle swarm optimization. *Solar Energy*, ,158--127:147 2016.
- [16] Kheawhom S Bumroongsri P. Simultaneous estimation of thin film thickness and optical properties using two stage optimization. *J Glob Optim*, ,597--54:583 Nov 2012.
- [17] Ali Abdolazadeh Ziabari, A. H. Refahi Sheikhan, Reza Vatani Nezafat, and Kasra Monsef Haghghidoust. Optical modeling and electrical properties of cadmium oxide nanofilms: Developing a meta-heuristic calculation process model. *Journal of Applied Physics*, 117(13):135303, 04 2015.
- [18] Charalambos C. Katsidis and Dimitrios I. Siapkas. General transfer-matrix method for optical multilayer systems with coherent, partially coherent, and incoherent interference. *Appl. Opt.*, ,3987--3978:(19)41 Jul 2002.
- [19] Jian Huang, Yong He, and Jian Xu. Retrieval of optical constants via nonlinear least squares. *Thin Solid Films*, ,6148--6143:(15)515 2007.
- [20] W. G. Spitzer, D. Kleinman, and D. Walsh. Infrared properties of hexagonal silicon carbide. *Phys. Rev.*, ,132--113:127 Jan 1959.
- [21] Mark Fox. *Optical Properties of Solids*. Academic Press, Cambridge, USA, 2010.
- [22] Olaf Stenzel and Steffen Wilbrandt. Theoretical aspects of thin film optical spectra: Underlying models, model restrictions and inadequacies, algorithms, and challenges. *Applied Sciences*, 15(4):2187, 2025.
- [23] James N Hilfiker and Tom Tiwald. Dielectric function modeling. In Hiroyuki Fujiwara and Robert W Collins, editors, *Spectroscopic Ellipsometry for Photovoltaics: Volume 1: Fundamental Principles and Solar Cell Characterization*, pages .153--115 Springer International Publishing, 2018.

- [24] Koji Ohta and Hatsuo Ishida. Comparison among several numerical integration methods for kramers-kronig transformation. *Applied Spectroscopy*, 957--952:(6)42 1988.
- [25] Fachun Lai, Limei Lin, Rongquan Gai, Yongzhong Lin, and Zhigao Huang. Determination of optical constants and thicknesses of $\text{In}_2\text{O}_3/\text{Sn}$ films from transmittance data. *Thin Solid Films*, 7392--7387:(18)515 2007.
- [26] V. Torres-Costa, R. J. Martin-Palma, and J. M. Martinez-Duart. Optical constants of porous silicon films and multilayers determined by genetic algorithms. *Journal of Applied Physics*, 4203--4197:(8)96 10 2004.
- [27] Gungor E Gungor T and Saka B. Fast and interference fringe independent optical characterization of zinc oxide nano thin films using model-based genetic algorithm for optoelectronic applications. *Nanomaterials and Nanotechnology*, 6, 10 2016.
- [28] Xin-She Yang. *Introduction to mathematical optimization*. From linear programming to metaheuristics, 2008.
- [29] Jorge Nocedal and Stephen J. Wright. *Numerical Optimization*. Springer, 2nd edition, 2006.
- [30] Stephen Boyd and Lieven Vandenberghe. *Convex Optimization*. Cambridge University Press, 2004.
- [31] Michel Bierlaire. *Optimization: Principles and Algorithms*. EPFL Press, 2nd edition, 2018.
- [32] Edwin KP Chong and Stanislaw H Żak. *An introduction to optimization*. John Wiley & Sons, 2013.
- [33] R Tyrrell Rockafellar. Lagrange multipliers and optimality. *SIAM review*, 238--183:(2)35 1993.
- [34] A Samson. Nonlinear programming: Theories and algorithms of some unconstrained optimization methods (steepest descent and newton's method). *International Journal of Engineering and Management Research*, e-ISSN:2250--0758, 2020.
- [35] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery. *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 3rd edition, 2007.
- [36] John E. Dennis and Robert B. Schnabel. *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*. SIAM, 2nd edition, 1996.
- [37] Léon Bottou. Large-scale machine learning with stochastic gradient descent. In *Proceedings of COMPSTAT*, pages 186--177 Springer, 2010.

- [38] S Akram and QU Ann. Newton raphson method. *International Journal of Scientific & Engineering Research*, ,1752--1748:(7)6 2015.
- [39] JC Ehiwario and SO Aghamie. Comparative study of bisection, newton-raphson and secant methods of root--finding problems. *IOSR J. of Engineering*, ,7--1:(4)4 2014.
- [40] A Walia and B Singh. Solution of non-linear equations using newton raphson and quasi-newton method and application in engineering field. *AIJR Abstracts*, page 22, 2022.
- [41] F Filippone, S Meloni, and M Parrinello. A novel implicit newton--raphson geometry optimization method for density functional theory calculations. *The Journal of Chemical Physics*, ,642--636:(2)115 2001.
- [42] N Andrei. A new gradient descent method for unconstrained optimization. *Submitted for Publication to Journal of Mathematics of Computation*, 2004.
- [43] OS Heavens. *Optical properties of thin solid films*. Courier Corporation, 1991.

يقدم هذا العمل طريقة دقيقة لتقدير معامل الامتصاص، معامل الانكسار، وسمك الأغشية الرقيقة باستخدام بيانات النفاذية البصرية فقط. كان المبرر الأساسي لهذا العمل، عدم توفر أجهزة قياس من قبيل الإلييسوميتر أو البروفيلوميتر. تعتمد الطريقة المتبعة على نهج تحسين مقيد نقطيًا، حيث يتم تعريف مشكلة برمجة غير خطية مع قيود خطية تمثل المعرفة المسبقة عن الحل الفيزيائي. تنطبق الطريقة على جميع أنواع أطيايف النفاذية ولا تعتمد على وجود أنماط تداخل أو شفافية. تم إثبات موثوقية الطريقة من خلال التجارب العددية مع أغشية تم إنشاؤها بواسطة الكمبيوتر ومن ثم تطبيقها على أغشية CdS بلورية تم ترسيبها في جامعة الوادي بتقنية الحمام الكيميائي عند جرعات متزايدة من الثيوريا. مكنت الطريقة من استرداد الثوابت البصرية وسمك الأغشية بدقة مرضية جدا في المجال الطيفي الغالب في التطبيقات. تراوحت السمك المستردة لهذه الأغشية بشكل متزايد مع زيادة تركيز الثوريا، بين 221.55 نانومتر في العينة ضعيفة التركيز، لتصل تدريجيًا إلى 247.84 نانومتر في العينة عالية التركيز، مع قيم وسط بلغت 238.39 نانومتر و241.85 نانومتر. ويعد هذا التزايد المتناسق في السمك مع التركيز داعما اخر لمدى موثوقية النموذج ودقة حساباته. بشكل عام، يُظهر هذا العمل فعالية الجمع بين النمذجة الفيزيائية والتحسين المقيد في تحليل الأغشية الرقيقة، ويوفر أداة مرنة تعتمد على برنامج MATLAB لدراسات تجريبية ونظرية مستقبلية. .

كلمات مفتاحية

غشاء رقيق، توصيف الأغشية الرقيقة، الثوابت البصرية، دالة العزل الكهربائي، التحسين الرياضي، أشباه النواقل البلورية

ABSTRACT

This thesis presented a robust method for retrieving the optical constants of thin films using only transmission spectra. The main motivation for this work was the lack of measuring devices such as an ellipsometer or a profilometer. The approach is based on a constrained point-wise optimization technique, where a nonlinear programming problem is formulated with linear constraints reflecting prior physical knowledge. Notably, the method does not rely on the presence of interference fringes in the data, making it suitable for a wide range of film types.

Optimization techniques such as Newton's method and gradient descent were used to minimize a nonlinear least squares cost function. The proposed method was validated through numerical experiments on synthetic data and applied to CdS thin films deposited via chemical bath deposition under various thiourea concentrations at El Oued University laboratories. The optimization process enabled accurate retrieval of refractive index, absorption coefficient, and film thickness. The extracted thickness values ranged from 221.55 nm in sample 1 to 247.84 nm in sample 4, with intermediate values of 238.39 nm and 241.85 nm for samples 2 and 3. This consistent increase in thickness correlates well with thiourea dosage, validating the numerical model's physical accuracy.

Overall, this work demonstrates the effectiveness of combining physical modeling with constrained optimization in the analysis of thin films and provides a flexible MATLAB-based tool for further experimental and theoretical studies.

KEYWORDS

Crystalline semiconductors; Optical properties; Dielectric function; thin-film characterization, optimization.

RÉSUMÉ

Cette thèse a présenté une méthode robuste pour extraire les constantes optiques de films minces en utilisant uniquement les spectres de transmission. La motivation principale de ce travail était l'absence d'appareils de mesure tels que l'ellipsomètre ou le profilomètre. L'approche repose sur une technique d'optimisation ponctuelle contrainte, dans laquelle un problème de programmation non linéaire est formulé avec des contraintes linéaires reflétant des connaissances physiques préalables. Notamment, la méthode ne dépend pas de la présence de franges d'interférence dans les données, ce qui la rend adaptée à un large éventail de types de films.

Des techniques d'optimisation telles que la méthode de Newton et la descente de gradient ont été utilisées pour minimiser une fonction de coût de type moindres carrés non linéaires. La méthode proposée a été validée par des expériences numériques sur des données synthétiques et appliquée à des films minces de CdS déposés par bain chimique avec différentes concentrations de thiourée dans les laboratoires de l'Université d'El Oued.

Le processus d'optimisation a permis une extraction précise de l'indice de réfraction, du coefficient d'absorption et de l'épaisseur du film. Les valeurs d'épaisseur extraites allaient de 221,55 nm pour l'échantillon 1 à 247,84 nm pour l'échantillon 4, avec des valeurs intermédiaires de 238,39 nm et 241,85 nm pour les échantillons 2 et 3. Cette augmentation constante de l'épaisseur est en bonne corrélation avec la quantité de thiourée, validant ainsi la précision physique du modèle numérique. Dans l'ensemble, ce travail démontre l'efficacité de la combinaison entre modélisation physique et optimisation contrainte pour l'analyse des films minces, et fournit un outil flexible basé sur MATLAB pour des études expérimentales et théoriques ultérieures.

MOTS CLÉS

Semi-conducteurs cristallins ; Propriétés optiques ; Fonction diélectrique ; Caractérisation des films minces ; Optimisation.