МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ В. Н. КАРАЗІНА
НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ІНСТИТУТ
КОМП'ЮТЕРНОЇ ФІЗИКИ ТА ЕНЕРГЕТИКИ
Кафедра комп'ютерної фізики

ПОЯСНЮВАЛЬНА ЗАПИСКА

до кваліфікаційної роботи
за освітньо-кваліфікаційним рівнем магістр

«Наноструктуроване покриття сонячних панелей з селективним кольором та антибліковими властивостями»

Виконав: студент 2 курсу, групи НФ-64
Лаптєв Я. Д.
Спеціальність: 105 – «Прикладна фізика та наноматеріали»
Освітньо-наукова програма: «Комп'ютерна фізика»
Керівник: PhD, доцент Овчаренко А. І.
Рецензент:

Харків – 2025

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Навчально-науковий інститут комп'ютерної фізики та енергетики

Кафедра комп'ютерної фізики

Рівень вищої освіти (освітньо-кваліфікаційний рівень) магістр

Спеціальність 105 Прикладна фізика та наноматеріали

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри
_____ Костянтин НЄМЧЕНКО
підпис
"____"_____2025 року

ЗАВДАННЯ

НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ

Лаптєву Ярославу Дмитровичу

1. Тема роботи: «Наноструктуроване покриття сонячних панелей з селективним кольором та антибліковими властивостями», керівник роботи: Овчаренко Антон Ігорович, доцент кафедри, науковий консультант: Єрмаков Олег Євгенович, асистент кафедри. Затверджено наказом по університету від 20 січня 2025 року № 4201- 5/147.

2. Строк подання студентом роботи 19 травня 2025.

3. Перелік питань, які потрібно проробити:

1) зробити огляд літератури, проаналізувати сучасні методи зменшення оптичних втрат у фотонних структурах, дослідити наявні рішення створення різнобарвного покриття для сонячних панелей;

2) ознайомитися з методом оптимізації геометрії періодичних наноструктур на основі тренування генеративних штучних нейронних мереж, що використовує метод зв’язних хвиль для моделювання багатошарових періодичних структур;

3) адаптувати та розширити наявний метод для задачі знаходження геометрій з селективним розсіюванням. Розглянути різни топології структури, цільові функції втрат, архітектури нейронної мережі, запропонувати своє рішення.

4. План роботи

№ з/п	Назви етапів роботи
1	Проведення огляду літератури щодо використання наноструктур для покращення ефективності сонячних електрогенеруючих елементів
2	Ознайомлення з чисельними методами розрахунку параметрів оптичного відбиття і проходження багатошарових наноструктурованих поверхонь
3	Розробка комп’ютерної програми для оптимізацій багатошарових наноструктурованих поверхонь з властивістю структурного кольору
4	Застосування розробленої програми для пошуку наноструктур з селективним відбиттям у різних частинах спектра
5	Проведення аналізу отриманих результатів, оцінка ефективності отриманих структур
6	Формулювання висновків та формування списку цитованої літератури

5. Дата видачі завдання 15 січня 2025 року

Студент _____ Ярослав ЛАПТЄВ
підпис

Керівник роботи _____ Антон ОВЧАРЕНКО
підпис

РЕФЕРАТ

Лаптєв Ярослав «Наноструктуроване покриття сонячних панелей з селективним кольором та антибліковими властивостями». Кваліфікаційна робота магістра з прикладної фізики. – Харків: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2025. – 49 с.

Робота складається з вступу, трьох розділів, висновків. Робота містить 18 рисунки та 42 використаних літературних джерела.

У роботі розглянуто проблему втрат ефективності сонячних панелей через оптичне відбиття, а також підходи до її вирішення за допомогою нанесення функціональних наноструктурованих покриттів. Запропоновано концепцію покриття, яке водночас зменшує відбиття світла та забезпечує вигляд поверхні завдяки ефекту селективного кольору. Проведено аналіз фізичних принципів взаємодії світла з наноперіодичними структурами, моделювання оптичних властивостей таких структур, а також підбір геометричних параметрів для досягнення необхідних характеристик. Використано методи чисельного моделювання на основі повнохвильових розрахунків, що дозволяє ефективно аналізувати періодичні наноповерхні. Отримані результати можуть бути використані при проектуванні покриттів для фотоелектричних пристроїв нового покоління, де важливе поєднання енергоефективності та естетики.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: НАНОПОКРИТТЯ, СЕЛЕКТИВНЕ ВІДБИТТЯ, ГЕНЕРАТИВНА ОПТИМІЗАЦІЯ, МАШИННЕ НАВЧАННЯ, СОНЯЧНІ ПАНЕЛІ

ABSTRACT

Laptiev Yaroslav “Nanostructured solar cell coating with selective color and anti-reflective properties”. Master's thesis in applied physics. – Kharkiv. – V. N. Karazin KhNU, 2025. – 49 p.

The thesis consists of an introduction, three chapters, and conclusions. It includes 18 figures and 42 referenced sources.

The work addresses the problem of efficiency losses in solar panels due to optical reflection and explores approaches to mitigate this issue through the application of functional nanostructured coatings. A concept is proposed for a coating that simultaneously reduces light reflection and provides an aesthetically pleasing surface appearance through the effect of selective color. The study includes an analysis of the physical principles of light interaction with nanopatterned surfaces, optical modeling of such structures, and selection of geometric parameters to achieve the desired optical properties. Numerical simulations based on full-wave calculations were used to effectively analyze periodic nanostructures. The obtained results can be applied in the design of coatings for next-generation photovoltaic devices, where both energy efficiency and visual appeal are essential.

KEYWORDS: NANOSTRUCTURED COATING, SELECTIVE REFLECTION, GENERATIVE OPTIMIZATION, MACHINE LEARNING, SOLAR PANELS.

ЗМІСТ

ВСТУП 7
1. ОГЛЯД СУЧАСНОГО СТАНУ ПРОБЛЕМИ..... 9
1.1. Принцип роботи сонячних панелей..... 9
1.2. Фактор відбиття світла в сонячних панелях..... 12
1.3. Селективне кольорове покриття: естетика та ефективність……..... 14
1.4. Методи моделювання електромагнітних полів……..…….. 17
2. АРХІТЕКТУРА МОДЕЛІ ТА МЕТОДИ ОПТИМІЗАЦІЇ..... 20
2.1. Метод глобальної оптимізації фотонних структур..... 20
2.2 Генератор ResNet..... 21
2.3 Генератор Progressive Growing GAN……. 23
2.4 Функція втрат та процес навчання..... 24
3. РЕЗУЛЬТАТИ ПРОЄКТУВАННЯ НАНОСТРУКТУР..... 30
3.1 Підбір геометрії функціонального нанопокриття……... 30
3.2 Перехресна перевірка генераторів……..……..37
3.3 Визначення кольору на основі спектрального розподілу……41
ВИСНОВКИ 45
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ 46

ВСТУП

Сучасні виклики у сфері відновлюваної енергетики потребують постійного вдосконалення ефективності фотогальванічних пристроїв. Сонячні панелі, як один із ключових компонентів цієї галузі, усе ще стикаються з низкою проблем, що обмежують їх потенціал. Одним з найважливіших чинників втрат енергії залишається оптичне відбиття, внаслідок якого значна частина світлової енергії не поглинається, а віддзеркалюється назад у середовище[1]. Це особливо критично для умов змінного освітлення, низьких кутів падіння світла.

Одним із перспективних підходів до вирішення цієї проблеми є використання покриттів, які можуть зменшувати відбиття світла за рахунок резонансних або інтерференційних ефектів[2]. Окрім зниження втрат, такі покриття можуть виконувати додаткові функції — зокрема, надавати поверхні заданого вигляду завдяки ефекту селективного кольору, що відкриває можливості для поєднання естетики та функціональності у пристроях нового покоління[3].

Метою кваліфікаційної роботи є розробка та оптимізація функціонального нанопокриття для сонячної панелі, яке водночас знижує втрати на відбиття та формує заданий спектральний вигляд поверхні. Для досягнення цієї мети досліджено фізичні механізми взаємодії світла з періодичними наноструктурами, проаналізовано основні параметри впливу на спектральні характеристики та застосовано методи чисельного моделювання для пошуку оптимальних конфігурацій[4, 5].

Об’єкт дослідження – процеси взаємодії світла з наноструктурованими покриттями, які наносяться на поверхню сонячних елементів.

Предмет дослідження – геометричні та спектральні параметри періодичних нанопокриттів з вибірковими оптичними властивостями.

Методи дослідження – чисельне моделювання оптичної відповіді періодичних структур, варіаційна оптимізація параметрів покриття із залученням алгоритмів машинного навчання.

Наукова новизна отриманих результатів полягає у адаптації та застосування методу гобальної оптимізації геометрії періодичних структур на основі фізичного моделювання та елементів генеративної оптимізації дизайну структур з резонансом у відбиття для використання в якості кольорового антибліквого покриття сонячних панелей

Практичне значення результатів роботи полягає у створенні основи для проєктування нових функціональних покриттів, які поєднують енергоефективність, візуальні характеристики та можуть бути реалізовані з використанням сучасних технологій нанесення наноструктур.

РОЗДІЛ 1. ОГЛЯД СУЧАСНОГО СТАНУ ПРОБЛЕМИ

1.1 Принцип роботи сонячних панелей

Сонячні панелі перетворюють енергію сонячного світла в електричну за допомогою фотоелектричного ефекту — фізичного явища, при якому фотони, взаємодіючи з матеріалом, вибивають електрони з його атомів. Цей ефект був теоретично пояснений Альбертом Ейнштейном у 1905 році, за що він отримав Нобелівську премію з фізики в 1921 році [6].

Фундаментальне пояснення фотоефекту полягає в тому, що світло складається з квантів — фотонів, кожен з яких має енергію яка описується наступною формулою:

$$E = h\nu, \tag{1.1}$$

де E – енергія фотона, h – стала Планка (6.62607015×10^{-34} Дж·с),

ν – частота випромінювання.

Коли фотон поглинається електроном у матеріалі, ця енергія може бути достатньою для подолання так званої роботи виходу (W) — мінімальної енергії, необхідної для вивільнення електрона з атомної решітки. Якщо енергія фотона перевищує роботу виходу, електрон вибивається з поверхні, і надлишок енергії передається йому у вигляді кінетичної енергії:

$$K = h\nu + W \tag{1.2}$$

У сонячних елементах замість металів використовуються напівпровідникові матеріали (найчастіше кремній), і принцип залишається схожим: при поглинанні світла в області p-n переходу утворюються електронно-діркові пари.

Важливо відзначити, що лише фотони з енергією, більшою або рівною ширині забороненої зони напівпровідника, здатні ефективно генерувати носії

заряду. Для кремнію ця величина становить приблизно 1.12 еВ. Таким чином, фотони з меншою енергією не сприяють генерації постійного електричного струму і проходять крізь матеріал без взаємодії [7, 8].

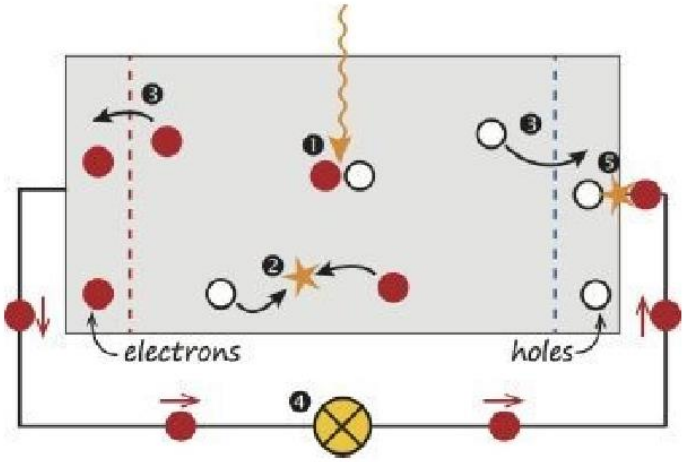


Рисунок 1.1. Модель сонячної батареї. 1)Поглинання фотона призводить до генерації електронно-діркової пари. 2)Зазвичай електрони та дірки рекомбінують. 3) У напівпроникних мембранах вони можуть бути розділені. 4) Розділені електрони можна використати для живлення електричного ланцюга. 5) Після проходження через коло електрони знову рекомбінують з дірками[9].

Одна сонячна елементна клітинка зазвичай видає приблизно 0.5–0.7 В, тому для досягнення корисної напруги елементи з’єднуються послідовно та паралельно. Типова побутова панель має 36–72 елементи та генерує 18–40 В постійного струму [9].

Матеріали, які використовуються у сонячних елементах, прийнято класифікувати за поколіннями відповідно до етапів технологічного розвитку, конструкції та типу напівпровідників, що лежать в основі їхньої роботи.

Першому поколінню належать традиційні сонячні елементи на основі кремнієвих пластин — як монокристалічних, так і полікристалічних. Ці елементи стали основою масового ринку фотоелектрики завдяки своїй стабільності,

високій ефективності та тривалому терміну служби. Монокристалічний кремній характеризується високим рівнем впорядкування атомної решітки, що забезпечує кращу мобільність носіїв заряду та має коефіцієнт перетворення сонячного світла, що може перевищувати 22%. Полікристалічний варіант дещо дешевший у виробництві, проте має нижчу ефективність через наявність проміжків між кристалами, що ускладнюють рух електронів [10].

Друге покоління — це так звані тонкоплівкові сонячні елементи, які зазвичай виготовляються шляхом нанесення шарів напівпровідника товщиною лише кілька мікрометрів на скляну або гнучку підкладку. Найбільш відомими серед них є комірки на основі кадмій-телуриду (CdTe) та мідно-індій-галій-селеніду (CIGS). Ці матеріали мають вищий коефіцієнт поглинання світла порівняно з кремнієм, що дозволяє зменшити товщину активного шару без значних втрат ефективності. Їхня головне перевага — у дешевшій технології виробництва та потенційній можливості гнучкої інтеграції в поверхні різної форми. Водночас ці технології мають і суттєві обмеження, зокрема екологічні та ресурсні (токсичність Cd, обмеженість індію), що стримують їх широке розповсюдження [11].

Третє покоління об’єднує новітні, експериментальні або ще не повністю комерціалізовані фотоелектричні технології. До них належать органічні сонячні елементи, перовськітні структури, елементи на основі квантових точок та мультиспектральні пристрої. Основною ідеєю цього покоління є подолання традиційних обмежень ККД за рахунок нових механізмів перетворення енергії, включаючи багатофотонні переходи, використання багаторівневих зон або багатошарових структур, які оптимізовані для поглинання світла в ширшому спектральному діапазоні. Особливу увагу привертають перовськітні сонячні елементи, що показали надзвичайно швидке зростання ефективності — з менше 4% у 2009 році до понад 25% у лабораторних умовах [12].

Кожне з поколінь має свої переваги і виклики, але загальна мета лишається сталою — досягнення максимальної ефективності перетворення світла на

електроенергію при мінімальній вартості виробництва та екологічному навантаженні. У рамках сучасного матеріалознавства та нанофотоніки також активно розробляються гібридні підходи, які комбінують найкращі характеристики з різних технологій — наприклад, кремнієві базові елементи з перовськітним верхнім шаром, що утворює комбіновану структуру з ефективністю понад 30% [13].

1.2 Фактор відбиття світла в сонячних панелях

Одна з основних причин втрат енергії в сонячних елементах — це відбиття частини сонячного випромінювання ще до того, як воно встигає досягти активного шару пристрою. Коли світло падає на поверхню сонячної панелі, не вся його енергія переходить у внутрішню частину — частина променів повертається назад у простір, особливо при падінні під кутом. У результаті значна частина енергії просто втрачається.

Навіть за умови, що внутрішня частина сонячного елемента працює з високою ефективністю, втрата світла ще на вході призводить до суттєвого зниження загальної продуктивності. Згідно з оцінками, без використання спеціальних оптичних рішень до 30–35% сонячного випромінювання може не бути залученим у процес перетворення [14]. Особливо актуальною ця проблема стає за умов змінного освітлення, хмарності або в ранковий та вечірній час, коли сонячне світло падає під великим кутом.

Одним із найпоширеніших рішень для зменшення відбиття є антивідбивні покриття (anti-reflective coatings). Ці покриття працюють за наступним принципом, тонкий шар матеріалу з проміжним показником заломлення наноситься на поверхню сонячного елемента, викликаючи інтерференцію хвиль, відбитих від верхньої та нижньої межі плівки. При правильному виборі товщини шару (зазвичай $\lambda/4$ для певної довжини хвилі) і матеріалу, відбиті хвилі можуть взаємно гаситися, що значно знижує загальне відбиття світла. Найбільш популярними матеріалами є оксид кремнію (SiO_2), оксид титану (TiO_2), а також багатошарові

комбінації з них, які дозволяють ефективно знижувати відбиття в широкому спектральному діапазоні [15]. Такі покриття вже стали стандартом для більшості комерційних панелей.

Іншим широко використовуваним методом є текстурування поверхні кремнію, що базується на створенні наноструктурованого рельєфу. Наприклад, у монокристалічному кремнії застосовують анізотропне травлення для утворення пірамідальних структур, які зменшують відбиття завдяки багаторазовим внутрішнім відбиттям фотонів у структурах. Такий підхід дозволяє спрямовувати більше світла всередину матеріалу, збільшуючи його шлях у поглинаючому шарі й зрештою — шанси бути поглинутим. У полікристалічному кремнії використовують ізотропні методи травлення, які формують напівсферичні текстури. Ці техніки ефективні, але мають межі в можливості оптимізації при коротших довжинах хвиль або при різних кутах падіння [16].

Більш прогресивним підходом є застосування нанофотонних структур і біоінспірованих поверхонь, що відтворюють природні моделі ефективного захоплення світла. Наприклад, мікроскопічна структура очей нічних метеликів надихнула дослідників на створення так званого “чорного кремнію” (black silicon). Цей матеріал отримують шляхом травлення або лазерної обробки поверхні, що утворює опуклу структуру. Вони практично не відбивають світло завдяки плавному переходу ефективного показника заломлення між повітрям і кремнієм. Це дозволяє знижувати відбиття до менш ніж 1% у широкому спектральному та кутовому діапазоні [17]. Такі структури ще не повністю комерціалізовані, але активно досліджуються як складова майбутніх високоефективних сонячних елементів.

Останнім із популярних способів зниження втрат на відбиття є використання сонячних трекінгових систем. Вони дозволяють механічно або електронно змінювати орієнтацію сонячної панелі протягом дня, забезпечуючи перпендикулярне або близьке до нього падіння світла на поверхню. Це важливо, оскільки при збільшенні кута падіння — тобто коли сонце знаходиться низько

над горизонтом — рівень відбиття зростає, що погіршує ефективність. Одновісні трекери регулюють орієнтацію в одному напрямку (наприклад, схід-захід), тоді як двовісні дозволяють оптимізувати положення за обома кутами, підвищуючи ефективність системи до 25–30% порівняно зі стаціонарними установками [18]. Проте варто враховувати й додаткові витрати на встановлення, обслуговування та споживання енергії самими трекерами.

1.3 Селективне кольорове покриття: естетика та ефективність

На сьогодні все більше уваги приділяється не лише підвищенню ефективності перетворення сонячної енергії, але й зовнішньому вигляду самих пристроїв. Це особливо актуально в контексті розвитку концепції BIPV (Building-Integrated Photovoltaics) — архітектурної інтеграції сонячних елементів у конструкції будівель. Ідея полягає в тому, щоб сонячні модулі не лише виконували енергетичну функцію, але й були візуально привабливими або навіть повністю непомітними в фасаді будівлі. У зв’язку з цим зростає інтерес до технологій селективного оптичного забарвлення — нанесення покриттів, які дозволяють змінювати сприйнятий колір сонячної панелі без суттєвих втрат ефективності [19].

Селективне кольорове покриття функціонує на основі керованого відбиття видимого світла певної довжини хвилі, пропускаючи інші діапазони, особливо ближній інфрачервоний, який є критично важливим для генерації електроенергії. Завдяки цьому можна створювати сонячні елементи з бажаним кольором — синім, червоним, зеленим тощо — не змінюючи суттєво характеристик поглинання в робочому спектрі. Такі покриття часто реалізуються у вигляді багатошарових діелектричних структур, в яких відбиваються певні довжини хвиль завдяки оптичній інтерференції. Результатом є структурний колір — забарвлення, що виникає внаслідок взаємодії світла з періодичними наноструктурами, а не за рахунок пігментів або фарб.

Цікавими є рішення, натхненні “природним дизайном” — так звані біоінспіровані метаповерхні. Наприклад, у природі яскраві та насичені кольори крила метелика Morpho або пір’я павича виникають саме завдяки нанорозмірним структурам[20].

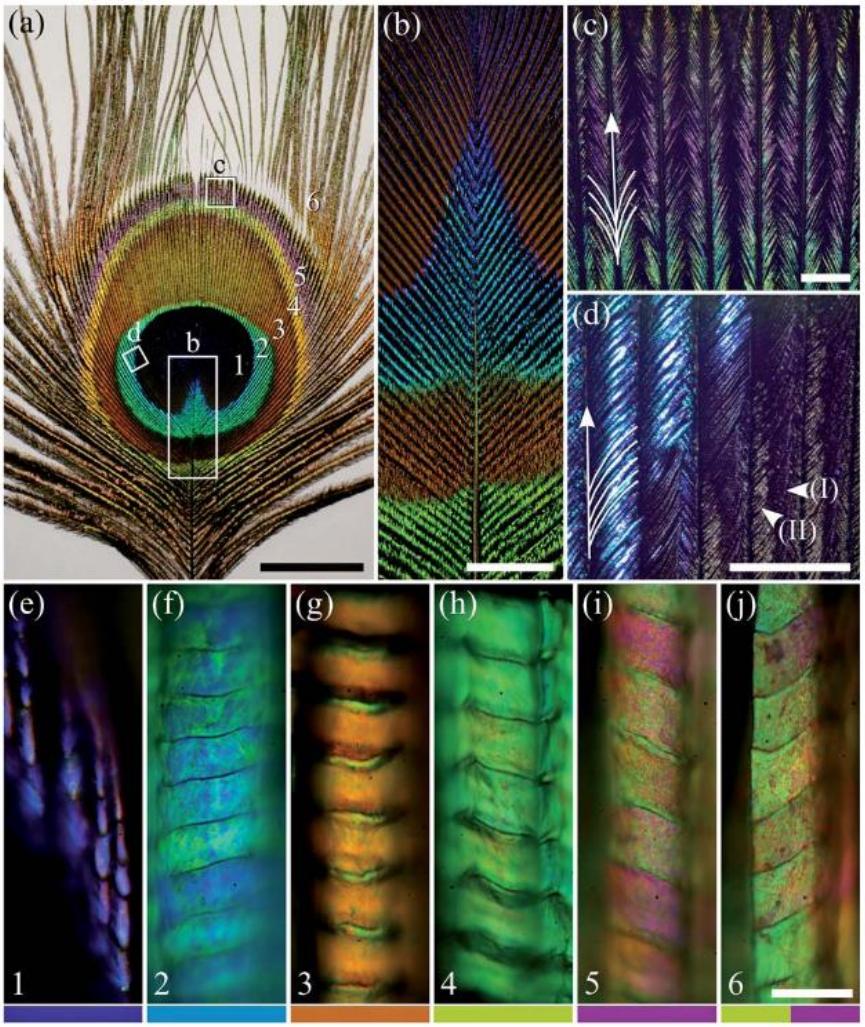


Рисунок 1.2 Хвіст павича та його опахала(barbs). (a) Візерунок "ока" на хвості павича. (b) Стержень пера (rachis) із гілками багатобарвних опахал (великий прямокутник b на панелі (a)). (c) Опахала в кольоровій зоні 5 (квадрат c на панелі (a)) (d) Опахала в перехідній зоні між регіонами 1 та 2 (нахилений квадрат d на панелі (a)); (e–j) Мікрофотографії окремих опахал з регіонів 1–6. Масштаб шкали: (a) 2 см, (b) 5 мм, (c і d) 1 мм, (e–j) 50 нм[20].

Серед комерційно доступних рішень варто згадати систему Kromatix, яка використовує інтерференційне забарвлення, нанесене на спеціальне скло. Цей

підхід дозволяє досягти стійкого кольору, який зберігається при різних кутах огляду, а також забезпечує антиблікові властивості [21]. Водночас наявність додаткового шару скла збільшує товщину й вагу конструкції, що може бути критичним для BIPV-застосувань, особливо при обмеженнях по навантаженням на фасади або дахові структури.

У фотоніці аналогічні ефекти створюються шляхом гравірування періодичних ґраток, отворів, конусів в шарі діелектрика або кремнію. Робота Yang et al. [22] демонструє реалізацію таких структур без використання барвників, що дозволяє зберігати стабільність кольору і довготривалість експлуатації в зовнішньому середовищі.

Альтернативою є інтеграція структур безпосередньо в поверхню фотоелектричних елементів, наприклад, у кремнієвий шар. Це дозволяє зменшити загальну товщину, уникнути додаткових міжшарових втрат і зберегти високу механічну гнучкість пристрою. Такі рішення мають потенціал для впровадження в легкі, гнучкі, органічні сонячні модулі, які можна використовувати навіть на нестандартних або криволінійних поверхнях.

Цікаво, що структурні кольорові покриття можуть одночасно виконувати функцію антиблікового шару, зменшуючи відбиття світла в широкому спектрі. Завдяки цьому можна покращити поглинання в інфрачервоній області, що додатково підвищує ефективність пристрою без компромісу з естетикою.

Естетика відіграє ключову роль у сприйнятті сонячних панелей кінцевими користувачами. Дослідження показують, що архітектори, забудовники та мешканці частіше позитивно сприймають сонячні елементи, коли вони мають привабливий або нейтральний вигляд, не контрастують з фасадом і добре інтегруються у загальну стилістику будівлі [23]. У зв’язку з цим розробка кольорових, ефективних і масових рішень є критично важливою для широкого впровадження сонячної енергетики у міське середовище.

1.4 Методи моделювання електромагнітних полів

У сучасній фотоніці точне моделювання взаємодії світла з матеріалом стало незамінним інструментом для розробки нових оптичних структур, зокрема – у сфері нанофотоніки та сонячної енергетики.. Комп'ютерне моделювання дозволяє не тільки передбачити поведінку структури до її фізичної реалізації, але й оптимізувати дизайн, зменшити витрати на виготовлення зразків і пришвидшити цикл дослідження.

Існує декілька підходів до моделювання — від простих аналітичних оцінок у межах геометричної оптики до складних чисельних симуляцій, що базуються на розв'язанні рівнянь Максвелла. Кожен із цих методів має свої переваги та обмеження: вони відрізняються за точністю, обчислювальними витратами, здатністю враховувати певні фізичні ефекти, такими як дифракція, поляризація або інтерференція.

Геометрична оптика — це класичний підхід, що базується на уявленні світла у вигляді променів, які поширюються прямолінійно та підпорядковуються законам відбиття і заломлення [24]. Така модель є ефективною для аналізу структур, розміри яких суттєво перевищують довжину хвилі світла, коли хвильові ефекти, зокрема дифракція, інтерференція та поляризація, стають незначними. Серед переваг геометричної оптики — висока обчислювальна швидкість та простота реалізації. Вона дозволяє швидко отримати уявлення про траєкторії світлових променів, прохідність, відбиття та освітленість в оптичних системах. Це особливо корисно для первинного етапу дизайну або для аналізу великих оптичних компонентів, таких як об'єктиви, світловоди або трекінгові системи. Однак геометрична оптика має суттєві обмеження. Вона не здатна точно моделювати поведінку світла в наноструктурах, де хвильова природа домінує. Взаємодії світла з наномасштабними елементами — такими як періодичні ґратки, нностовпчики або метаповерхні — вимагають повного врахування електромагнітних хвильових ефектів. Внаслідок цього геометрична оптика не підходить

для задач, пов’язаних із дизайном антиблікових покриттів або кольорових наноструктур, де критично важливі явища інтерференції та резонансів.

Метод скінченних різниць у часовій області (FDTD) є одним із найпоширеніших повнохвильових підходів у чисельному моделюванні електромагнітних полів. Його суть полягає в розв’язанні рівнянь Максвелла у часовій області шляхом дискретизації простору і часу. Обчислення здійснюються покроково — значення полів оновлюються в кожній точці сітки за певним алгоритмом, що дозволяє відстежувати динаміку поширення електромагнітних хвиль у часі [25].Основною перевагою FDTD є його універсальність. Метод підходить як для періодичних, так і для довільних, складних і навіть випадкових геометрій. Він дозволяє точно враховувати нелінійність, дисперсію матеріалів, втрати, а також взаємодію хвиль із криволінійними або багатошаровими структурами. Завдяки цьому FDTD широко використовується при моделюванні нанофотонних пристроїв, метаповерхонь, хвилеводів, резонаторів та інших складних оптичних елементів. Основним недоліком FDTD є високі обчислювальні витрати, моделювання може потребувати значних ресурсів пам’яті та часу. Це особливо критично при тривимірному аналізі або в оптимізаційних задачах, що вимагають багаторазового запуску симуляцій.

Метод скінченних елементів (FEM) є потужним чисельним інструментом для моделювання електромагнітних полів, особливо коли йдеться про складні геометрії або неоднорідні матеріали [26]. На відміну від FDTD, FEM працює у частотній області: простір розбивається на невеликі елементи, на яких локально апроксимується розв’язок рівнянь Максвелла. Основна перевага FEM полягає у високій гнучкості та точності, особливо на межах між матеріалами або у вузьких областях, де необхідна висока локалізація поля. Метод дозволяє точно відтворювати складні контури, а також працювати з довільною формою області розрахунку. Крім того, FEM підтримує адаптивну сітку, що покращує ефективність. До недоліків можна віднести підвищену складність реалізації в порівнянні з FDTD, особливо при тривимірному моделюванні. Також FEM менш зручний для аналізу широкого спектру частот або тимчасової динаміки, оскільки

працює в частотній області. Проте для задач, що вимагають дуже точного опису просторової структури — наприклад, при проектуванні фотонних кристалів або резонаторів — він залишається одним із найнадійніших інструментів.

Метод RCWA (Rigorous Coupled-Wave Analysis) є одним із найбільш ефективних і точних чисельних методів для моделювання періодичних наноструктур. Він базується на розкладі електромагнітного поля у вигляді гармонік у Фур'є-просторі, що дозволяє ефективно обчислювати взаємодію світла з періодичними структурами. Метод передбачає точне розв’язання рівнянь Максвелла для кожного шару періодичної структури, що дозволяє враховувати вплив складних матеріальних властивостей та геометричних особливостей.

Основною перевагою RCWA є висока швидкість та точність при моделюванні періодичних об’єктів, зокрема, коли структура повторюється в одному або двох напрямках. Це робить метод ідеальним для аналізу періодичних наноструктур, таких як фотонні кристали, гратки, метаповерхні та інші подібні структури. Оскільки RCWA дозволяє здійснювати точний розрахунок розсіяння світла, він широко використовується для оптимізації параметрів структур та визначення їх оптичних характеристик.

Незважаючи на свою ефективність, RCWA має певні обмеження. Він особливо добре працює для періодичних структур, але може бути менш ефективним при моделюванні неперіодичних або складних тривимірних структур, крім того, метод потребує значних обчислювальних ресурсів, особливо при високих значеннях роздільної здатності.

Цей метод активно використовується в чисельних симуляціях, де важлива висока точність, зокрема при оптимізації наноструктур, а також для визначення спектральних характеристик поглинання та розсіяння. Одним із популярних інструментів для реалізації RCWA є програмний пакет RETICOLO, розроблений J.P. Hugonin та P. Lalanne [27], який дозволяє здійснювати ефективне моделювання складних періодичних структур і підтримує анізотропію матеріалів, а також мультишарові структури.

РОЗДІЛ 2. АРХІТЕКТУРА МОДЕЛІ ТА МЕТОДИ ОПТИМІЗАЦІЇ

2.1 Метод глобальної оптимізації фотонних структур

Сучасні методи оптимізації фотонних структур часто стикаються з фундаментальними обмеженнями, пов'язаними з нелінійністю задачі та високою розмірністю простору параметрів. Традиційні підходи, такі як топологічна оптимізація або генетичні алгоритми, демонструють низьку ефективність при пошуку глобального оптимуму, особливо для складних багатопараметричних систем. У цьому контексті GLOnet (Global Optimization Network) представляє принципово новий підхід, який поєднує потужність генеративних нейронних мереж з точністю фізичного моделювання [28].

Архітектура GLOnet ґрунтується на кількох ключових компонентах, кожен з яких відіграє вирішальну роль у процесі оптимізації. Центральним елементом системи є генеративна нейронна мережа, яка перетворює простір випадкових шумових векторів у простір можливих фотонних структур. На відміну від звичайних генераторних моделей, GLOnet використовує спеціалізовану архітектуру, що враховує фізичні обмеження задачі. Зокрема, останній шар мережі включає гаусів фільтр, який усуває нереалістичні дрібномасштабні особливості, що можуть виникати під час навчання.

Процес оптимізації в GLOnet має ітеративний характер і ґрунтується на глибокій інтеграції фізичного моделювання. Кожна згенерована структура проходить повний цикл електромагнітного аналізу за допомогою спеціалізованих методів моделювання оптичних характеристик, в нашому випадку Rigorous Coupled-Wave Analysis. Цей метод дозволяє з високою точністю обчислити оптичні характеристики структури, включаючи коефіцієнти відбиття та пропускання для різних довжин хвиль і кутів падіння . Схематичний опис процесу оптимізації представлений на Рис 2.1.

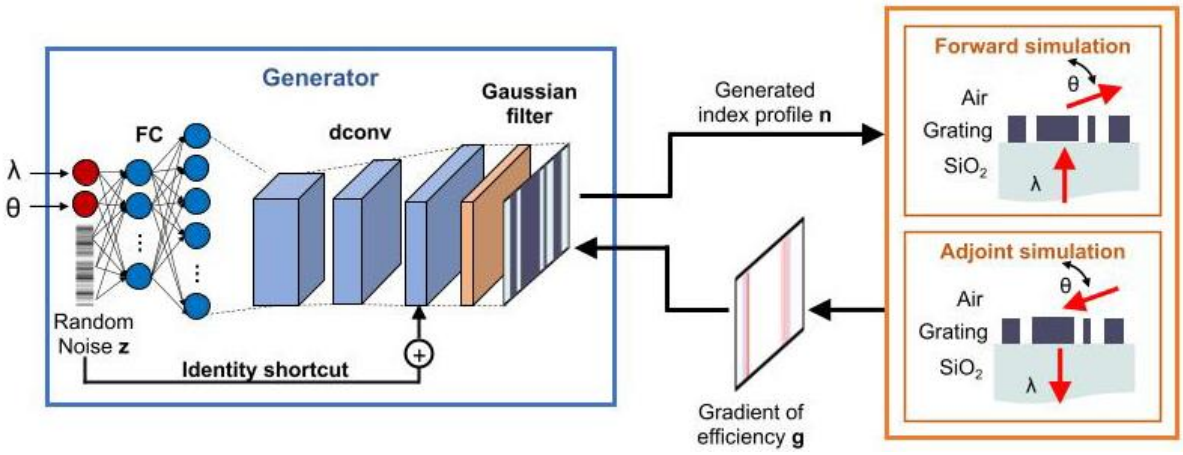


Рисунок 2.1. Глобальна оптимізація на основі генеративної нейронної мережі. Схема умовної GLOnet-архітектури для генерації метаграток. Генератор побудований на основі повнозв'язних шарів (FC), шарів деконволюції (dconv) та Гаусового фільтра. Також застосовується з'єднання-пропуск (identity shortcut), яке додає вектор шуму z до виходу останнього шару деконволюції. Вхідними даними є довжина хвилі λ, кут відхилення θ та 256-вимірний вектор шуму **z**, а на виході формується вектор пристрою **n**[29].

2.2 Генератор ResNet

Ключовим компонентом будь-якої генеративної системи для інверсного дизайну фотонних структур є архітектура генератора — мережі, яка створює геометрії з простору змінних. У рамках GLOnet ця мережа виконує функцію перетворення випадкового шуму на просторове розподілення матеріалу. У даній роботі для цієї задачі було досліджено дві популярні архітектури: глибоку нейронну мережу з залишковими зв'язками (ResNet) та генеративну мережу з прогресивним нарощуванням (Progressive Growing GAN або PG-GAN). Обидві архітектури виявили здатність ефективно моделювати складні залежності між параметрами наноструктури та її оптичними властивостями, однак мають суттєві відмінності як з теоретичної точки зору, так і в практичному використанні.

ResNet (Residual Neural Network), вперше запропонована He et al. у 2015 році [30], відзначається застосуванням так званих "skip connections", які дозволяють передавати інформацію через кілька шарів без змін, що істотно полегшує процес оптимізації глибоких мереж. Такий підхід усуває проблему затухання градієнтів, яка була типовою для традиційних глибоких моделей, і дає змогу ефективно тренувати мережі з десятками або сотнями шарів. У контексті фотонного дизайну ResNet показала високу ефективність для глобальної оптимізації без попереднього тренування на великому датасеті, оскільки вона може прямо поєднуватися з диференційованим симулятором для оновлення ваг за допомогою зворотного поширення градієнтів.

Однією з переваг ResNet у задачах оптичної оптимізації є її здатність працювати з довільними вхідними просторами (наприклад, вектором шуму) і видавати точні просторові розподіли матеріалу. У роботі Jiang & Fan (2020) [28], така архітектура була використана для оптимізації структури метаграток з багатьма цілями (наприклад, максимізація відбиття у заданому діапазоні довжин хвиль і водночас обмеження кольору). Завдяки тому, що ResNet легко масштабується, її також було застосовано в задачах, де кілька виходів мають бути узгоджені: наприклад, одночасна оптимізація при різних кутах падіння чи в різних спектральних діапазонах [31]. Недоліком залишається висока обчислювальна вартість — глибокі мережі вимагають більше ресурсів при тренуванні і можуть бути чутливими до вибору гіперпараметрів, особливо для широкого діапазону цільових функцій.

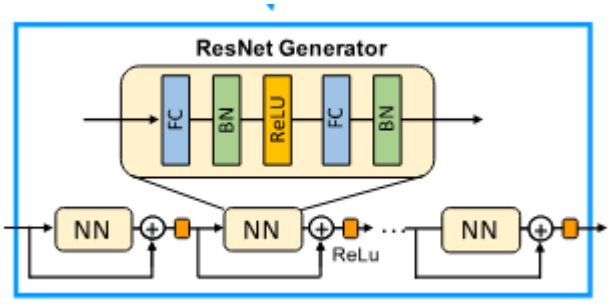


Рисунок 2.2. Схема Res генератора в GLOnet [28]

2.3 Генератор Progressive Growing GAN

Іншим підходом є архітектура PG-GAN, запропонована Karras et al. (2018) [32], яка спочатку була розроблена для генерації зображень високої якості, але згодом була адаптована до інженерних задач, зокрема до моделювання наноструктур. Головною ідеєю цієї архітектури є поступове зростання розмірності виходу генератора — тобто, на ранніх етапах мережа навчається генерувати грубі макроструктури, після чого деталізація нарощується шляхом додавання нових рівнів та шарів. Така стратегія дозволяє уникати проблеми колапсу моди (mode collapse) — ситуації, коли GAN видає лише обмежений клас варіантів. У роботах Wen et al. (2020) та Ma et al. (2021) [33, 34], PG-GAN було адаптовано для задач генерації фотонних метаповерхонь з високою деталізацією та стабільністю.

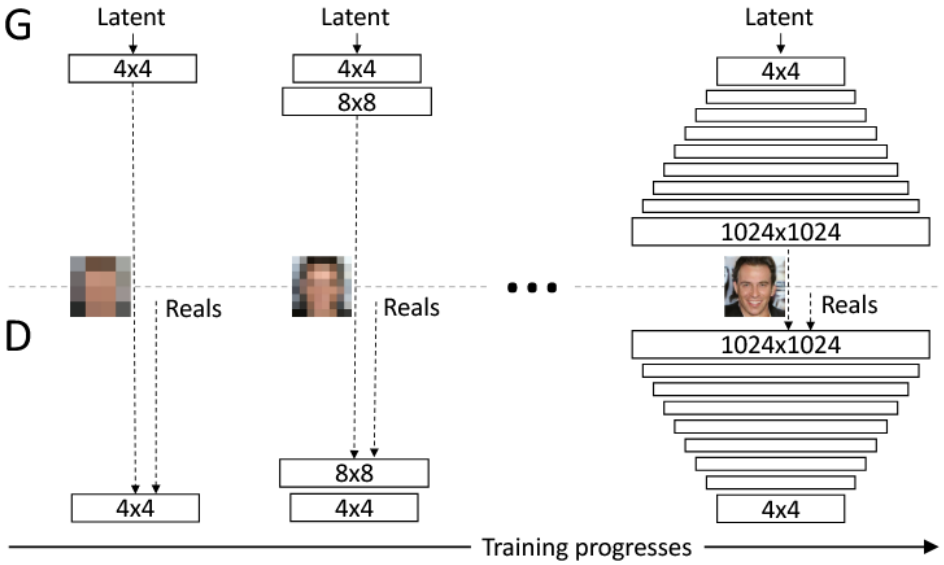


Рисунок 2.3. Схема навчання Progressive Growing GAN. Навчання починається з того, що як генератор (G), так і дискримінатор (D) працюють з низьким просторовим розширенням — 4×4 пікселі. У міру просування навчання ми поступово додаємо нові шари до G та D, таким чином збільшуючи просторову роздільну здатність згенерованих зображень.

У нашому дослідженні обидві архітектури реалізовані у вигляді генераторів, що приймають на вхід вектор випадкового шуму (розмірністю, наприклад, 128 або 256), іноді — додаткові умови (довжина хвилі, кут падіння тощо) і генерують структуру, що описує оптичний пристрій. Залежно від задачі — наприклад, генерація метаграток або кольорових антиблікових покриттів — обирається відповідна архітектура. Зокрема, ResNet часто застосовується, коли важлива узагальнена оптимізація та мультицільова постановка задачі, тоді як PG-GAN — у випадках, де необхідно досягти високої локальної точності або детальної структури.

Таким чином, вибір генератора є балансом між складністю структури, стабільністю навчання та вимогами до обчислювальних ресурсів. Обидва підходи демонструють перспективні результати в задачах генеративного дизайну фотонних структур і можуть бути ефективно інтегровані в загальну архітектуру GLOnet.

2.4 Функція втрат та процес навчання

У моделі GLOnet функція втрат визначає, наскільки добре згенерована структура відповідає бажаним оптичним властивостям. Центральною метою є максимізація так званої функції якості(figure of merit), наприклад — коефіцієнта відбиття у заданому спектральному діапазоні, мінімізації переданого світла або формування селективного кольору. При цьому важливо не лише досягти потрібного значення метрики, але й забезпечити фізичну реалістичність структури — наприклад, її бінарність, симетрію або технологічну відтворюваність.

Запропонована нами схема проектування показана на Рис 2.4 передбачає навчання генераторанейронна мережа для оптимізації сукупності пристроїв. Унікальним є те, що схема для свого навчання не вимагає набору тренувальних даних [35].

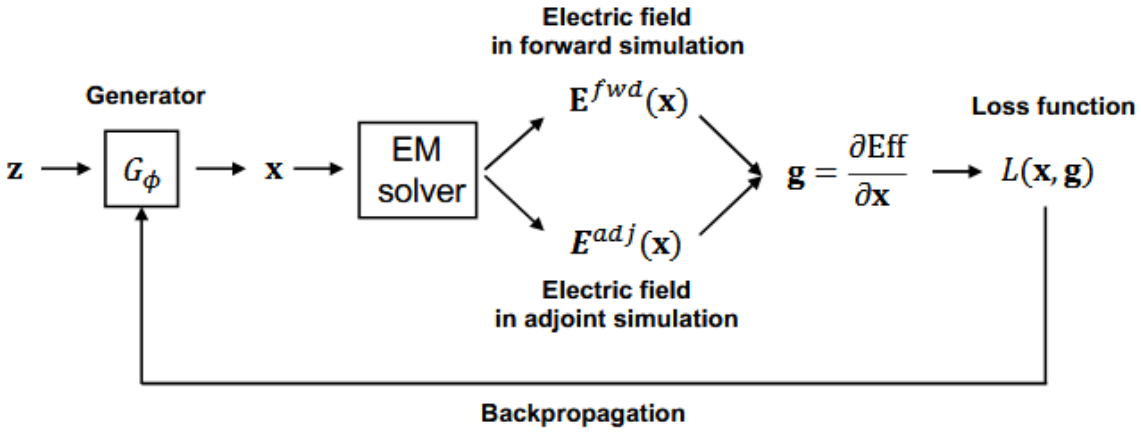


Рисунок 2.4. Схема генеративної оптимізації [35].

Формулюємо мету оптимізація як максимізація ймовірності генерації глобально оптимізованого пристрою в S:

$$\varphi = \mathrm{argmax}_\varphi \int_S \delta(\mathrm{Eff}(x) - \mathrm{Eff}_{\max}) \cdot P_\varphi(x) dx \qquad (2.1)$$

Генератор параметризований через φ, який зв'язує z з x через нелінійне відображення: $x = G_\varphi(z)$. Іншими словами, генератор відображає рівномірний розподіл векторів шуму на розподіл девайсів G_φ: $U^N(-1,1) \rightarrow P_\varphi$, де P_φ визначає ймовірність генерації x в просторі структур $S = [-1,1]^N$.

Ми не можемо використовувати формулу (2.1) на пряму для навчання оскільки похідна по функції δ завжди близька до нуля. Тому виразимо наступним чином:

$$\delta(\mathrm{Eff}(x) - \mathrm{Eff}_{\max}) = \lim_{\sigma \to 0} \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma} \exp\left[-\left(\frac{\mathrm{Eff}(x) - \mathrm{Eff}_{\max}}{\sigma}\right)^2\right] \qquad (2.2)$$

Підставивши в рівняння (2.1) маємо:

$$\varphi = \mathrm{argmax}_{\varphi} \int_{S} \exp\left[-\left(\frac{\mathrm{Eff}(x) - \mathrm{Eff}_{max}}{\sigma}\right)^2\right] \cdot P_{\varphi}(x)dx \qquad (2.3)$$

Також бачимо залежність від Eff_{max} яке невідомо. Щоб вирішити цю проблему ми апроксимуємо рівняння (2.3) за допомогою експоненти:

$$\varphi = \mathrm{argmax}_{\varphi} \int_{S} \exp\left(\frac{\mathrm{Eff}(x) - \mathrm{Eff}_{max}}{\sigma}\right) \cdot P_{\varphi}(x)dx \qquad (2.4)$$

Це наближення справедливе оскільки $P_{\varphi}(x|\ \mathrm{Eff}(x) > \mathrm{Eff}_{max}) = 0$ і наша нова функція потребує лише наближення для ефективності менше за Eff_{max}. За допомогою цього наближення отримуємо:

$$\varphi = \mathrm{argmax}_{\varphi} A \int_{S} \exp\left(\frac{\mathrm{Eff}(x)}{\sigma}\right) \cdot P_{\varphi}(x)dx \qquad (2.5)$$

$A = \exp(-\mathrm{Eff}_{max}/\ \sigma)$ тепер стає константою нормалізації і не вимагає явного обчислення.

На практиці неможливо розрахувати рівняння (2.5) на всьому просторі структур S. Натомість ми беремо певну вибірку з P_{φ} що призводить до додаткових спрощень.

$$\varphi = \mathrm{argmax}_{\varphi}\ \frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} \exp\left(\frac{\mathrm{Eff}(x)}{\sigma}\right) \qquad (2.6)$$

Градієнт ефективності g можна розрахувати за наступною формулою:

$$g = \frac{\partial \mathrm{Eff}(x)}{\partial x} \qquad (2.7)$$

Остаточно ми використовуємо наші суміжні градієнти та цільову функцію для визначення функції втрат L = L(x,g,Eff). Наша мета визначити таку L, щоб її мінімум відповідав максимуму цільової функції тобто вона буде мати наступний вигляд:

$$\mathrm{L}(\mathrm{x},\mathrm{g},\mathrm{Eff}) = -\frac{1}{\mathrm{M}}\sum_{\mathrm{m}=1}^{\mathrm{M}} \exp\left(\frac{\mathrm{Eff}^{(\mathrm{m})}}{\sigma}\right)\cdot \mathrm{n}^{(\mathrm{m})}\cdot \mathrm{g}^{(\mathrm{m})} \qquad (2.8)$$

Комплексне поле в цільовій точці можна описати як $\mathbf{E}(\mathbf{r}_0) = |\mathrm{E}|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\hat{\mathbf{e}}$, де $\hat{\mathbf{e}}$ це вектор поляризації, $\mathbf{r}_0$ – цільове розташування в дальньому полі, E – комплексна амплітуда скалярного поля в $\mathbf{r}_0$, а φ = arg(E) фаза поля в $\mathbf{r}_0$[36]. Щоб оптимізувати інтенсивність поля $|\mathrm{E}|^2$ визначаємо нашу функцію якості (figure of merit, FoM) як:

$$\mathrm{FoM}_{\mathrm{I}} = |\mathrm{E}|^2 \qquad (2.9)$$

Під збудженням поля δE ми можемо розрахувати відповідне збудження FoM:

$$\delta\mathrm{FoM}_{\mathrm{I}} = |\mathrm{E}+\delta\mathrm{E}|^2 - |\mathrm{E}|^2 = (\mathrm{E}+\delta\mathrm{E})\cdot(\mathrm{E}^*+\delta\mathrm{E}^*) - \mathrm{E}\cdot\mathrm{E}^* \approx \qquad (2.10)$$
$$\approx 2\mathrm{Re}\{\mathrm{E}^*\cdot\delta\mathrm{E}\}$$

Цей вираз узгоджується з виразом, для оптимізації відхилення пучка метагратки до певного порядку дифракції[37].

Фаза по амплітуді поля дорівнює:

$$\varphi(\mathrm{E},\mathrm{E}^*) = \arctan\left[\frac{\mathrm{Im}\{\mathrm{E}\}}{\mathrm{Re}\{\mathrm{E}\}}\right] = \arctan\left[\frac{\mathrm{E}-\mathrm{E}^*}{\mathrm{E}+\mathrm{E}^*}\right] \qquad (2.11)$$

Зміну фази, що є наслідком зміни поля, δE, можна оцінити подібним чином:

$$\delta\varphi(E, E^*) = \varphi(E + \delta E, E^* + \delta E^*) - \varphi(E, E^*) = \quad (2.12)$$
$$= \arctan[f(E + \delta E, E^* + \delta E^*)] - \arctan[f(E, E^*)]$$

де

$$f(E, E^*) \equiv \frac{E - E^*}{E + E^*} \quad (2.13)$$

Зберігаючи лише члени першого порядку в δE, δφ маємо:

$$\delta\varphi \approx \frac{1}{f(E, E^*) + 1}\left[\delta E \frac{\partial f}{\partial(\delta E)} + \delta E^* \frac{\partial f}{\partial(\delta E^*)}\right] = \frac{2}{|E|^2}\,\mathrm{Im}\{E^* \cdot \delta E\} \quad (2.14)$$

Ми визначаємо FoM як негативну величину відстані від цільової фази:

$$\mathrm{FoM}_\varphi = -\left[\arg\left(e^{i(\varphi_{tgt} - \varphi)}\right)\right]^2 \quad (2.15)$$

$$\mathrm{FoM}_\varphi = -\left(\varphi_{tgt} - \varphi\right)^2 \quad (2.16)$$

$$\delta\mathrm{FoM}_\varphi = \left(\varphi_{tgt} - \varphi\right)\delta\varphi = \left(\varphi_{tgt} - \varphi\right)\frac{2}{|E|^2}\,\mathrm{Im}\{E^* \cdot \delta E\} \quad (2.17)$$

Градієнт для оптимізації вимагає, щоб варіація FoM була виражена в термінах варіації дизайнів. Змінною для розрахунку в цьому випадку є діелектрична проникність у визначеній області дизайнів D, записана як ε(r) для r ∈ D.

Розглянемо довільну точку в області проектування r_i, під дією електричного поля $E(r_i)$. Якщо діелектричну проникність у r_i змінити так, щоб $\varepsilon(r_i) \rightarrow \varepsilon(r_i)+\delta\varepsilon$, ми зможемо зробити наближення, при якому електричне поле в цій точці суттєво не зміниться. Використовуючи це наближення, ми можемо оцінити вплив δε на загальне електричне поле, розглядаючи його як індуковану щільність поляризації в об'ємі ΔV з центром у точці r_i:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}_i) \sim \varepsilon_0 \delta\varepsilon \Delta V \mathbf{E}(\mathbf{r}_i) \quad (2.18)$$

Ми можемо розширити цю зміну діелектричної проникності, яка впливає на всю область дизайну, δε(r ∈ D). Використовуючи формалізм функції Гріна, ми можемо виразити зміну поля в цільовій точці як:

$$\delta\mathbf{E}(\mathbf{r}_0) = \varepsilon_0 \int_{\mathbf{r}'\in\mathcal{D}} \delta\varepsilon(\mathbf{r}')\overleftrightarrow{\mathrm{G}}(\mathbf{r}_0,\mathbf{r}')\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r}')\mathrm{d}\mathbf{r}' \qquad (2.19)$$

Тут $\overleftrightarrow{\mathrm{G}}(\mathbf{r}_0,\mathbf{r}')\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r}')$ представляє поле в точці r_0, викликане диполем у точці r'. У рівняні (2.17) частинка δE з'являється у виразі, що містить $E^*\cdot\delta E$ або його комплексне спряження. Якщо цей вираз можна записати через δε, то градієнт FoM повністю заданий.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_0)^*\cdot\delta\mathbf{E}(\mathbf{r}_0) = \varepsilon_0\int_{\mathbf{r}'\in\mathcal{D}}\delta\varepsilon(\mathbf{r}')\mathbf{E}(\mathbf{r}_0)^*\cdot\overleftrightarrow{\mathrm{G}}(\mathbf{r}_0,\mathbf{r}')\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r}')\mathrm{d}\mathbf{r}' = \qquad (2.20)$$

$$= \varepsilon_0\int_{\mathbf{r}'\in\mathcal{D}}\delta\varepsilon(\mathbf{r}')\mathbf{E}(\mathbf{r}')\cdot\overleftrightarrow{\mathrm{G}}(\mathbf{r}',\mathbf{r}_0)\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r}_0)^*\mathrm{d}\mathbf{r}'$$

Перестановка полів навколо функції Гріна можлива завдяки симетрії, властивій рівнянням Максвелла, що дозволяє виконувати цю операцію для електричних диполів в ізотропних середовищах [38]. Тоді ми можемо визначити:

$$\mathbf{E}_{\mathrm{adj}}(\mathbf{r}) \equiv \overleftrightarrow{\mathrm{G}}(\mathbf{r},\mathbf{r}_0)\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r}_0)^* \qquad (2.21)$$

Цей новий вираз називається «суміжним полем»(adjoint) і обчислюється як поле в межах області проєктування, яке індукується диполем, розташованим в r_0, під дією $E(r_0)^*$. Тепер ми можемо переписати наше рівняння (2.17) в термінах прямого та суміжного полів, обчислених у межах області проектування.

$$\delta\mathrm{FoM}_{\varphi} = \left(\varphi_{\mathrm{tgt}} - \varphi\right)\frac{2\epsilon_0}{|\mathrm{E}|^2}\,\mathrm{Im}\left\{\int_{\mathbf{r}'\in\mathcal{D}}\delta\epsilon(\mathbf{r}')\mathbf{E}(\mathbf{r}')\cdot\mathbf{E}_{\mathrm{adj}}(\mathbf{r}')\mathrm{d}\mathbf{r}'\right\} \qquad (2.22)$$

РОЗДІЛ 3. РЕЗУЛЬТАТИ ПРОЄКТУВАННЯ НАНОСТРУКТУР

3.1 Підбір геометрії функціонального нанопокриття

У ході даної роботи було розроблено та досліджено наноструктуроване покриття, яке дозволяє одночасно досягти селективного кольорового відбиття та зниження загального коефіцієнта відбиття. Основна увага була зосереджена на синьому діапазоні видимого спектру (460–480 нм), оскільки він виявився найбільш чутливим до геометричних параметрів наноструктури. Підібрана конфігурація дозволяє суттєво підвищити відбиття саме в цьому вузькому діапазоні довжин хвиль, водночас знижуючи відбиття для решти спектру. На Рис. 3.1 подано узагальнене схематичне зображення отриманої структури покриття, що демонструє розташування основних компонентів, які впливають на оптичні властивості системи.

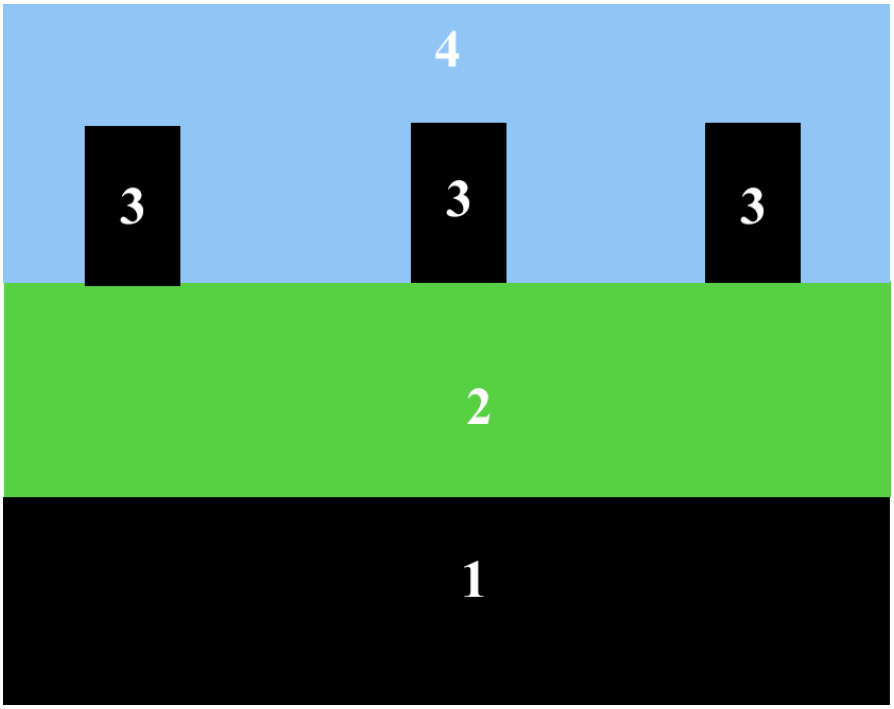


Рисунок 3.1. Схематичне зображення наноструктури на поверхні сонячної панелі. 1 – основне тіло кремнію (Si), 2 – підкладка на основі Al_2O_3, 3 – наноструктуроване покриття з кремнію, 4 –органічне скло (PMMA).

У процесі генерації наноструктур із використанням нейронних мереж, важливим є не лише досягнення цільових оптичних властивостей (наприклад, мінімального відбиття у заданому спектральному діапазоні), але й контроль над фізичною реалізованістю та якісною різноманітністю згенерованих структур. З цією метою під час навчання моделі обчислюються кілька допоміжних метрик, зокрема бінаризація, різноманітність та середнє відхилення. Ці метрики дозволяють більш глибоко аналізувати динаміку навчання та приймати рішення про його зупинку, корекцію гіперпараметрів або вибір найкращої архітектури.

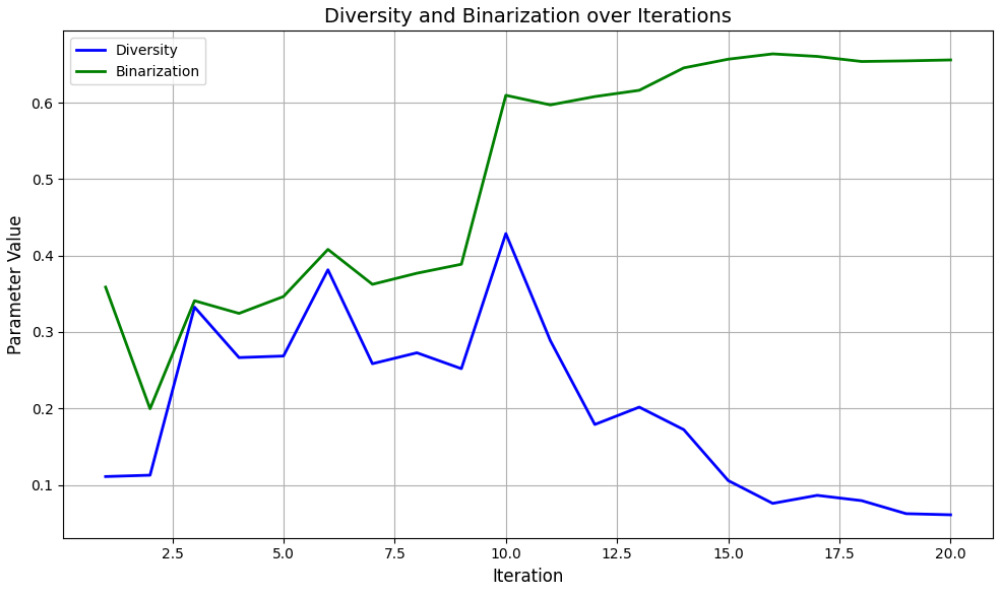


Рисунок 3.2. Приклад історії тренувань ResNet

Бінаризація є метрикою, яка оцінює, наскільки значення пікселів у згенерованих структурах наближаються до ±1, тобто до фізично реалізованих станів – наприклад, «наявність кремнію» або «відсутність кремнію», конкретно в нашому випадку 1 означає наявність кремнію, а -1 його відсутність. В ідеальній бінарній структурі кожна точка простору описується як один з двох дискретних станів, без проміжних значень. Якщо значення наближені до 0, це означає наявність проміжного або "нефізичного" стану, який не може бути реалізований технологічно. Тому підвищення бінарності є ознакою того, що мережа почала генерувати структури, які потенційно придатні до виробництва.

Формально, бінаризація обчислюється як середнє абсолютне значення всіх пікселів згенерованих зображень у певному наборі, що називається батчем. Батч — це група структур, які одночасно обробляються під час однієї ітерації навчання. Наприклад, якщо розмір батча дорівнює 64, то одночасно генерується 64 різні структури, і бінаризація розраховується як середнє по всім цим структурам.

$$B = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}|x_i| \tag{3.1}$$

де x_i – значення кожного пікселя структури (в межах [-1, 1]), N – загальна кількість пікселів в батчі.

При B = 1 структура є повністю бінарною. Зростання значення бінаризації під час навчання є бажаним, оскільки це вказує на те, що модель з кожною ітерацією усе точніше визначає для кожної точки, чи повинна вона бути заповнена матеріалом, чи залишатись порожньою.

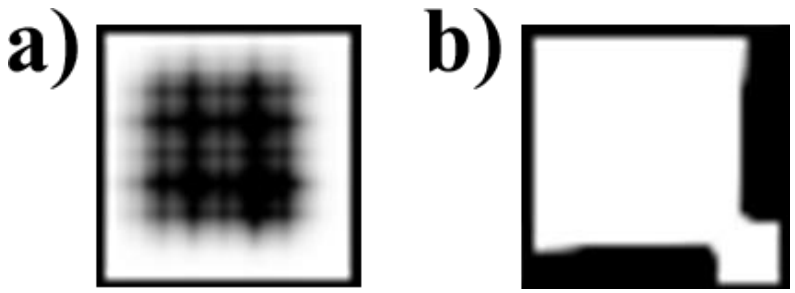


Рисунок 3.3. Приклади згенерованих структур. a) структура з низьким рівнем бінаризації, b) структура з високим рівнем бінаризації

Різноманітність (diversity) – це метрика, яка дозволяє оцінити варіативність або креативність генеративної моделі. Висока різноманітність означає, що мережа не "застрягла" в одному рішенні, а здатна генерувати багато унікальних варіантів структур із різними геометріями, які потенційно можуть задовольняти цільові оптичні характеристики. Низька різноманітність, навпаки,

свідчить про "mode collapse" – ситуацію, коли генератор починає видавати майже однакові рішення, навіть для різних входів. Це може бути наслідком нестабільного навчання або некоректно налаштованих гіперпараметрів.

Різноманітність обчислюється як середнє стандартне відхилення значень пікселів для кожного просторового положення в межах батча. Тобто, ми розглядаємо для кожного пікселя в усіх згенерованих структурах, наскільки сильно відрізняються його значення, і шукаємо середнє цієї відмінності по всьому зображенню.

$$D = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\sigma_j \tag{3.2}$$

де σ_j – відхилення значення пікселя j у всіх структурах батча, N – кількість пікселів. Високе значення різноманітності вказує на здатність генератора досліджувати простір рішень і шукати оптимальні структури в ширшому діапазоні.

У розробці ефективного селективного антиблікового покриття для сонячних елементів одним з ключових завдань є оптимізація переходу між середовищами з різними оптичними властивостями, зокрема, показником заломлення. Різка зміна цього показника на межі двох матеріалів призводить до сильного відбиття світла, що істотно знижує енергетичну ефективність пристрою.

У межах цієї роботи було обрано багатошарову структуру повітря–PMMA–наноструктурований кремній–Al_2O_3–сонячна панель. Такий підхід дозволяє побудувати ефективний оптичний градієнт, що зменшує сумарні втрати світла за рахунок поступового узгодження показників заломлення в напрямку поширення хвилі.

Особливу увагу було приділено фізичним властивостям використаних матеріалів. В основі наноструктури лежить полікристалічний кремній, який має високий показник заломлення ($n \approx 3.5$ у видимому діапазоні) і здатний формувати сильні резонансні ефекти. Оптична константа кремнію бралася з узагаль-

нених експериментальних даних Schinke et al. (2015) [39]. Полікремній використовується в силу своєї технологічної доступності та високої стабільності в оптоелектронних застосуваннях.

PMMA (поліметилметакрилат) обрано як верхній шар нанопокриття завдяки його прозорості у видимому діапазоні, технологічній зручності (легкість нанесення методом спін-коатингу) та помірному показнику заломлення n ≈ ≈ 1.48. Ці дані були взяті зі спектрального дослідження Sultanova et al. (2009) [40], яке охоплює широкий діапазон довжин хвиль і є надійним джерелом для оптичного моделювання. Саме цей матеріал дозволяє частково згладити стрибок показника заломлення між повітрям (n ≈ 1.0) та структурою, знижуючи відповідно відбиття.

Згідно з класичним рівнянням для коефіцієнта відбиття при нормальному падінні світла:

$$R = \left(\frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2}\right)^2 \tag{3.3}$$

Для повітря з кремнієм маємо:

$$R = \left(\frac{1{,}0 - 3{,}5}{1{,}0 + 3{,}5}\right)^2 \approx 0{,}3086 \tag{3.4}$$

Тобто майже 31% світла відбивається вже на першій межі. Для зменшення цього ефекту застосовується принцип підбору шару з таким показником заломлення, щоб він виконував роль узгоджувального середовища. У випадку нормального падіння найменше відбиття забезпечується, коли:

$$n_{\text{покриття}} = \sqrt{n_{\text{повітря}} \cdot n_{\text{підкладка}}} \tag{3.5}$$

Для повітря з кремнієм:

$$n_{\text{покриття}} = \sqrt{1 \cdot 3{,}5} \approx 1{,}87 \qquad (3.6)$$

PMMA, хоч і не дає ідеального значення, є практичним наближенням, а наноструктурування додатково дозволяє ефективно «розмити» межу.

Підкладка з сапфіру (Al_2O_3) виконує аналогічну функцію, але вже з іншого боку — на межі наноструктурованого кремнію та тіла сонячної панелі. Сапфір має показник заломлення n ≈ 1.75 у видимому діапазоні (за даними Malitson, 1962) [41], що дозволяє плавно знизити оптичну густину між шарами та запобігти сильним внутрішнім відбиттям. Крім того, Al_2O_3 є термічно стабільним, хімічно інертним та підходить для осадження або нанесення в умовах високої точності.

На всіх ілюстраціях та графічних зображеннях, що використовуються у роботі, прийнято наступне кодування матеріалів: білі пікселі відповідають значенню +1, що означає присутність кремнію, а чорні (або сірі) пікселі – значенню -1, тобто області, заповнені повітрям або PMMA. Така бінаризація дозволяє безпомилково інтерпретувати топологію наноструктури та використовувалась при тренуванні генеративної моделі. Власне, ступінь наближення до цієї двійкової картини є критерієм реалістичності структури, який оцінюється метрикою бінаризації, описаною вище.

Підсумовуючи результати підбору геометричних параметрів, можна стверджувати, що сформована методика дозволила отримати набір структур, які забезпечують бажану оптичну селективність у видимому спектрі. На кожному етапі дослідження варіювались окремі параметри нанопокриття — період, висота наноструктури, товщина підкладки з оксиду алюмінію (Al_2O_3) — з метою досягнення максимуму відбиття в заданому діапазоні довжин хвиль і мінімуму — поза ним.

Цільові спектральні властивості перевірялись за допомогою чисельного симулятора, вбудованого у процес глобальної генеративної оптимізації. Після кожної серії генерації структур проводився аналіз їх відповідності до бажаного

відбиття, а метрикою якості виступала середньоквадратична похибка (MSE) між спектром відбиття пристрою та заданим ідеальним профілем. Це дозволяло не лише ідентифікувати найуспішніші варіанти, а й відстежувати загальний прогрес навчання моделі.

Для наочності, обчислення середньоквадратичної похибки MSE проводилося за формулою:

$$\mathrm{MSE} = \frac{1}{\mathrm{N}}\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{N}}\left(\mathrm{R}_{\mathrm{device}}(\lambda_{\mathrm{i}}) - \mathrm{R}_{\mathrm{target}}(\lambda_{\mathrm{i}})\right)^2 \quad (3.7)$$

де $\mathrm{R}_{\mathrm{device}}(\lambda_{\mathrm{i}})$ – відбиття на довжині хвилі λ_{i} для певного пристрою, $\mathrm{R}_{\mathrm{target}}(\lambda_{\mathrm{i}})$ – цільове відбиття.

Критерії оптимальності також включали локалізацію піку у межах бажаної зони, низький рівень фонових відбиттів та адекватний рівень бінаризації згенерованої структури.

Під час варіювання параметрів було виявлено, що період наноструктури найбільш чутливий до вибору цільового кольору: зміна періоду дозволяє зміщувати спектральний максимум відбиття у відповідний інтервал довжин хвиль. Це відкриває можливість створення кольорових покриттів широкої палітри, використовуючи єдину виробничу технологію. Натомість висота наноструктури та товщина підкладки мають переважно коригуючий вплив, забезпечуючи загальний контраст і рівень селективності, але виявилися значно менш адаптивними у технологічному сенсі.

У результаті чисельної генерації та аналізу було встановлено, що найбільш оптимальна структура для селективного відбиття у діапазоні зеленувато-блакитного кольору (460 – 480 нм) має наступні параметри:

- Період: 180 нм
- Висота наноструктури: 80 нм
- Товщина підкладки Al_2O_3: 150 нм

Для зеленого кольору (510 – 530 нм) оптимальні параметри мають наступний вид:

- Період: 240 нм
- Висота наноструктури: 80 нм
- Товщина підкладки Al_2O_3: 150 нм

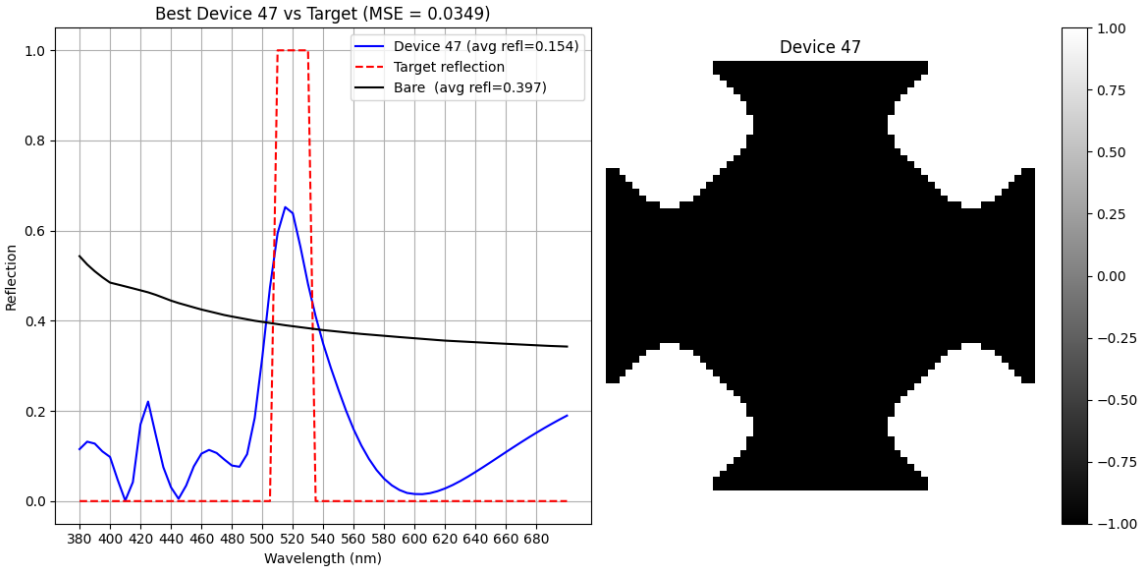


Рисунок 3.4. Порівняння отриманого графіку відбиття з цільовим і вигляд згенерованої структури нанопокриття для селективного зеленого кольору

3.2 Перехресна перевірка генераторів

Після завершення процесу навчання обох архітектур генераторів — ResNet та Progressive Growing GAN — було проведено перехресну перевірку їхньої ефективності. Цей етап мав на меті оцінити якість згенерованих наноструктур, їхню відповідність заданим оптичним характеристикам, а також порівняти динаміку метрик під час тренування. Оцінювання здійснювалося за рядом параметрів, зокрема середнім рівнем відбиття у цільовому спектральному діапазоні, формою спектра відбиття, бінарністю та різноманітністю сформованих структур.

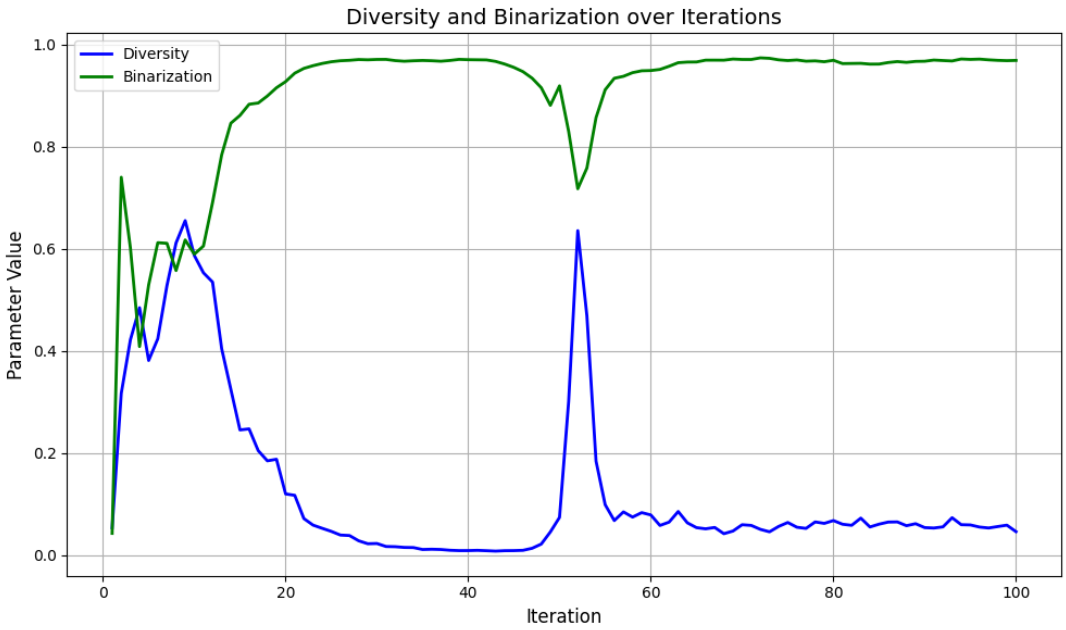


Рисунок 3.5. Історії тренувань на ResNet генераторі нанопокриття для селективного синього кольору

На Рис. 3.5. показано динаміку метрик різноманітність та бінаризція протягом 100 ітерацій тренування на ResNet-генераторі для селективного синього кольору. Як видно, дуже швидко спостерігається сильне зростання бінаризації, яка досягає значення, близького до 1 вже до 30-ї ітерації, що вказує на ефективне формування структур, максимально наближених до фізично реалізованих. Однак, на фоні цього спостерігається помітне зменшення різноманіття генерацій: модель "запам’ятовує" оптимальні патерни й зменшує варіативність. Тимчасовий “сплеск” різноманіття (в районі 55-ї ітерації) відповідає фазі оновлення шуму, після якої система знову стабілізується. Отже, хоча генератор ResNet швидко доходить до хороших значень бінаризації, він потенційно ризикує затриматись у вузькому просторі локальних мінімумів, обмежуючи пошук альтернативних конфігурацій.

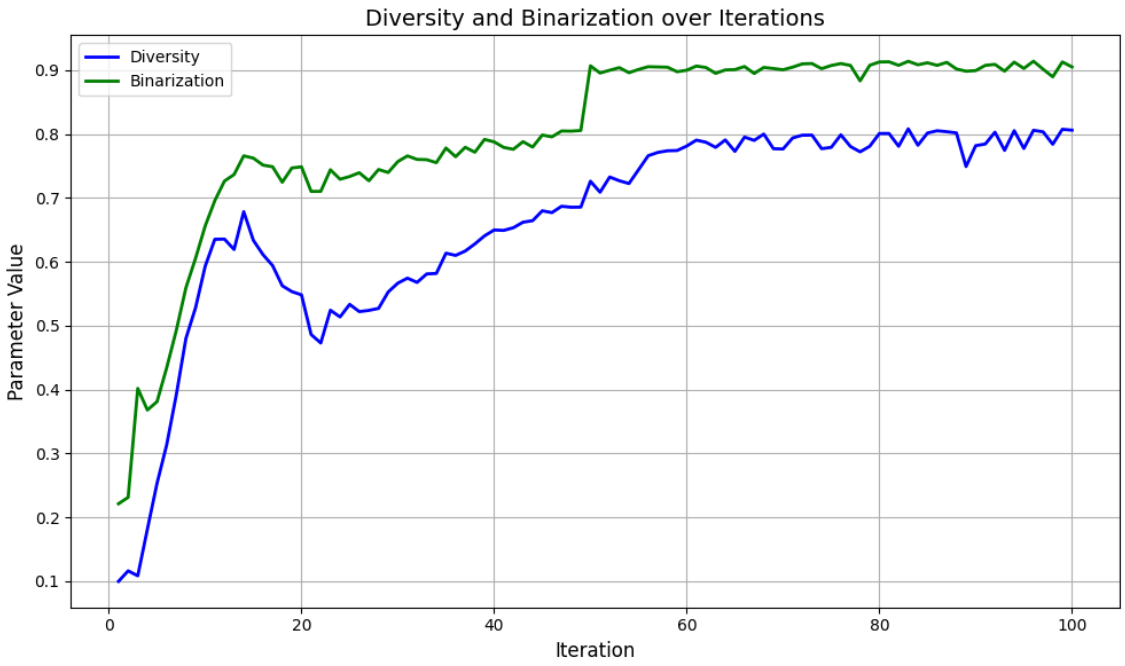


Рисунок 3.6. Історії тренувань на Progressive Growing генераторі нанопокриття для селективного синього кольору

Натомість, другий графік демонструє поведінку генератора Progressive Growing. У цьому випадку ми бачимо більш поступове зростання як бінаризації, так і різноманіття, що відповідає ідеї поетапного нарощування структури, закладеної в архітектуру. Це дозволяє зберігати більший простір для пошуку нових варіантів і уникнути передчасної конвергенції. Бінаризація досягає хороших значень (>0.9), але при цьому модель зберігає високу варіативність —стабільно утримується на рівні ~0.8, що є дуже позитивним показником для задач глобальної оптимізації. Така поведінка дозволяє моделі створювати ширший спектр структур, не втрачаючи при цьому їх фізичної реалізованості.

На Рис. 3.7. та 3.8. наведено типові приклади найкращих згенерованих структур для кожної архітектури. Обидва пристрої демонструють добре виражений селективний резонанс у діапазоні 460–480 нм — саме в зоні цільового синього кольору. Порівнюючи їх з поверхнею кремнію, видно суттєве зниження середнього відбиття: з ~37% до ~19% у випадку ResNet і ще трохи нижче у PG, що підтверджує ефективність підходу.

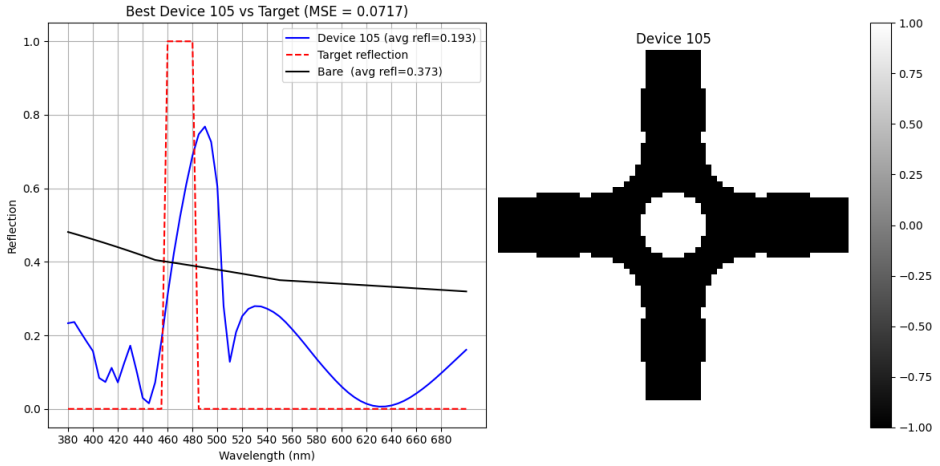


Рисунок 3.7. Порівняння отриманого графіку відбиття з цільовим і вигляд згенерованої структури нанопокриття для селективного синього кольору на ResNet генераторі

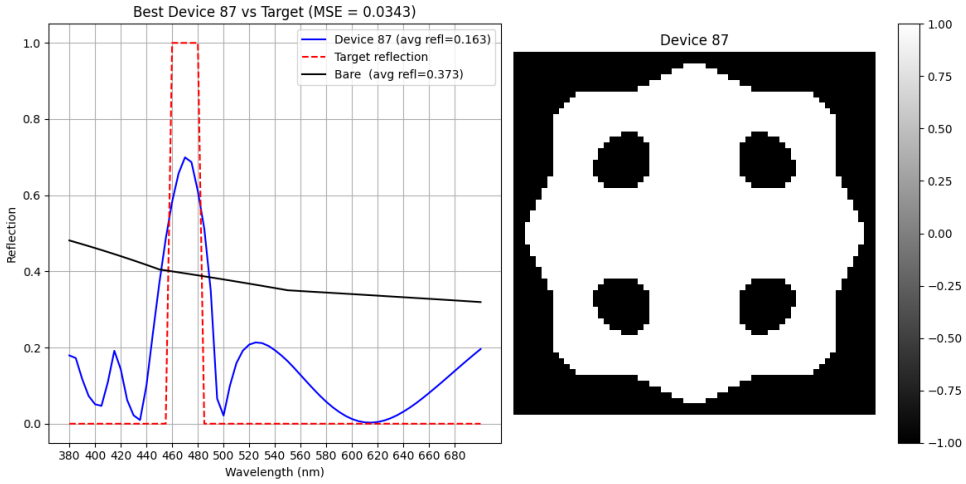


Рисунок 3.8. Порівняння отриманого графіку відбиття з цільовим і вигляд згенерованої структури нанопокриття для селективного синього кольору на Progressive Growing генераторі

Таким чином, хоча обидві архітектури показали хороші результати, Progressive Growing має певну перевагу з точки зору стабільності генерації, широти простору рішень і кращого узгодження з багатоцільовими критеріями. Водночас ResNet залишається потужним інструментом для швидкої оптимізації при обмежених обчислювальних ресурсах або в умовах необхідності фокусованого пошуку. Підсумовуючи, обидві моделі доцільно використовувати залежно

від задачі — ResNet для точкової оптимізації, Progressive Growing — для дослідження дизайну з високим ступенем свободи.

3.3 Визначення кольору на основі спектрального розподілу

Для оцінки кольору з фізичних вимірів необхідно перейти від спектрального розподілу відбиття до колориметричних координат.

Для цього спектр відбиття R(λ), який був отриманий за результатами RCWA-симуляцій, конвертується у координати кольору за допомогою стандартної моделі кольорового простору – CIE 1931. Вона базується на трьох функціях чутливості людського ока: <x(λ)>, <y(λ)>, <z(λ)>, відомих як color matching functions (CMFs) [42]. Вони визначаються для стандартного спостерігача і джерела світла – найчастіше це джерело D65, яке моделює природне денне освітлення.

Колір у просторі CIE XYZ визначається через спектральну згортку:

$$X = k \int_{\lambda} R(\lambda) \cdot S(\lambda) \cdot < x(\lambda) > d\lambda \tag{3.8}$$

$$Y = k \int_{\lambda} R(\lambda) \cdot S(\lambda) \cdot < y(\lambda) > d\lambda \tag{3.9}$$

$$Z = k \int_{\lambda} R(\lambda) \cdot S(\lambda) \cdot < z(\lambda) > d\lambda \tag{3.10}$$

де S(λ) – спектральна потужність джерела світла, k – нормувальний коефіцієнт. Отримані координати X, Y, Z зручно приводити до нормованих значень у вигляді координат у кольоровому просторі xy:

$$x = \frac{X}{X + Y + Z} \tag{3.11}$$

$$y = \frac{Y}{X + Y + Z} \tag{3.12}$$

Ці координати дозволяють нанести точку на хроматичну діаграму CIE 1931, що демонструє положення отриманого кольору у спектрі видимого світла. Таким чином, навіть без суб'єктивного опису, ми отримуємо кількісну метрику кольору, яку можна порівнювати між структурами. В межах даної роботи такі розрахунки дозволили оцінити вплив наноструктури на сприйманий колір покриття та дібрати параметри, які дають бажаний відтінок у поєднанні з мінімальним відбиттям.

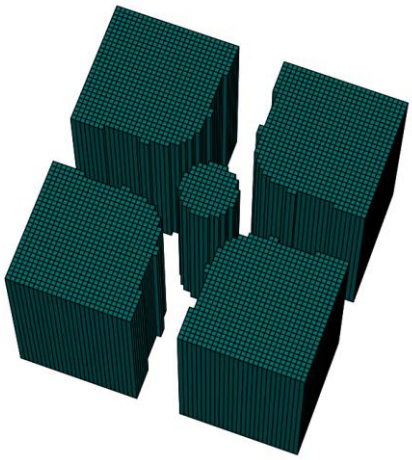


Рисунок 3.9. 3D зображення комірки періодичної структури синього-зеленого кольору на ResNet генераторі

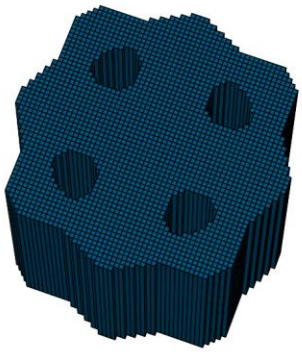


Рисунок 3.10. 3D зображення комірки періодичної структури синього кольору на ResNet генераторі

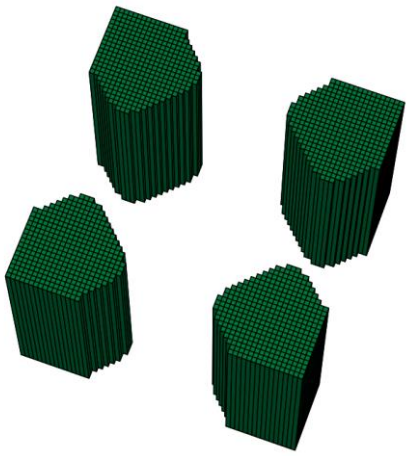


Рисунок 3.11. 3D зображення комірки періодичної структури зеленого кольору на ResNet генераторі

Запишемо кольорові координати наших селективних кольорів:

- Синьо-зелений: [0, 0.579, 0.564], xy = [0.192, 0.337]
- Синій: sRGB = [0, 0.443, 0.654], xy = [0.171, 0.215]
- Зелений: sRGB = [0, 0.623, 0.309], xy = [0.2, 0.534]

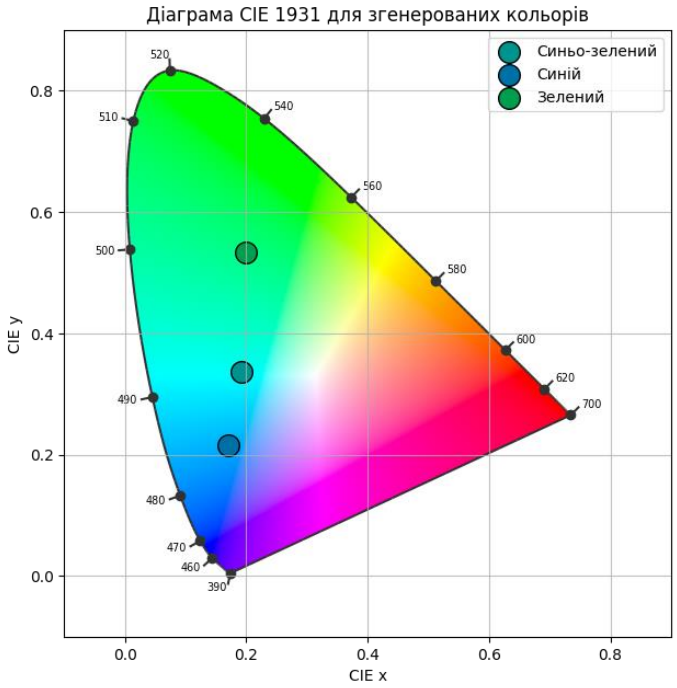


Рисунок 3.12. CIE 1931 діаграма згенерованих в рамах цієї роботи наноструктур

Таким чином, у межах даної роботи було отримано кілька унікальних наноструктур, які демонструють селективне відбиття в межах бажаного спектрального діапазону. Для синього кольору вдалося побудувати дві структури, що дають близькі, але відмінні відтінки у просторі CIE та sRGB, а також одну структуру з вираженим зеленим відтінком. Візуалізація отриманих геометрій у вигляді 3D-воксельних моделей дозволяє не лише оцінити їх оптичні властивості, але й підкреслити технологічну реалістичність запропонованих дизайнів. Узагальнено, результати підтверджують можливість точного кольорового та спектрального контролю за допомогою генеративного дизайну функціональних нанопокриттів.

ВИСНОВКИ

У цій кваліфікаційній роботі розглянуто проблему оптичних втрат у сонячних елементах, що виникають через відбиття світла від їхньої поверхні. З метою підвищення ефективності таких пристроїв було проаналізовано сучасні підходи до зниження цих втрат, зокрема шляхом впровадження наноструктурованих покриттів із заданими оптичними властивостями. Запропоновано концепцію багатофункціонального покриття, яке одночасно забезпечує антибліковий ефект та створює бажаний вигляд поверхні завдяки ефекту селективного кольору.

Методологічною основою дослідження стала глобальна оптимізація фотонних структур за допомогою модифікованого підходу GLOnet. Цей метод об’єднує генеративні нейронні мережі з фізичним симулятором, реалізованим на основі повнохвильового методу RCWA, що дало змогу виконувати пошук оптимальних геометрій без попереднього навчання на великому датасеті. Такий підхід дозволив ефективно враховувати багатофакторні критерії, включно з мінімізацією оптичного відбиття та збереженням спектральної селективності.

У ході чисельного моделювання було досліджено вплив ключових геометричних параметрів нанопокриття на характеристики відбиття. Визначено конфігурації, які демонструють знижене відбиття в порівнянні з незміненою поверхнею кремнієвого елемента, зокрема у діапазоні довжин хвиль 460–480 нм, що відповідає кольору з найбільшою візуальною насиченістю.

Отримані результати підтверджують перспективність інтеграції методів машинного навчання з фізичними моделями в задачах проєктування оптичних наноструктур. Запропонований підхід може стати основою для подальших досліджень у галузі структурного кольору, метаповерхонь та створення функціональних фотонних пристроїв з адаптивними властивостями.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

[1] RAUT, Hemant Kumar, et al. Anti-reflective coatings: A critical, in-depth review. *Energy & Environmental Science*, 2011, 4.10: 3779-3804.

[2] YANG, Qiaoyin, et al. Antireflection effects at nanostructured material interfaces and the suppression of thin-film interference. *Nanotechnology*, 2013, 24.23: 235202.

[3] SOMAN, Anishkumar; Antony, Aldrin. Colored solar cells with spectrally selective photonic crystal reflectors for application in building integrated photovoltaics. *Solar Energy*, 2019, 181: 1-8.

[4] CORTÉS, Emiliano, et al. Optical metasurfaces for energy conversion. *Chemical reviews*, 2022, 122.19: 15082-15176.

[5] PETER AMALATHAS, Amalraj; Alkaisi, Maan M. Nanostructures for light trapping in thin film solar cells. *Micromachines*, 2019, 10.9: 619.

[6] EINSTEIN, Albert. Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt [AdP 17, 132 (1905)]. Annalen der Physik, 2005, 517: 164-181.

[7] GREEN, Martin A. Solar cells: operating principles, technology, and system applications. *Englewood Cliffs*, 1982.

[8] LUQUE, Antonio; Hegedus, Steven (ed.). *Handbook of photovoltaic science and engineering*. John Wiley & Sons, 2011.

[9] SMETS, Arno, et al. Solar Energy: The physics and engineering of photovoltaic conversion, technologies and systems. Bloomsbury Publishing, 2016.

[10] GREEN, Martin, et al. Solar cell efficiency tables (version 57). *Progress in photovoltaics: research and applications*, 2021, 29.1: 3-15.

[11] CHOPRA, K. L.; Paulson. Thin-film solar cells: an overview. *Progress in Photovoltaics: Research and applications*, 2004, 12.2-3: 69-92.

[12] KOJIMA, Akihiro, et al. Organometal halide perovskites as visible-light sensitizers for photovoltaic cells. *Journal of the american chemical society*, 2009, 131.17: 6050-6051.

[13] NREL. (2024). Best Research-Cell Efficiency Chart. National Renewable Energy Laboratory. https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html

[14] MACLEOD, H. Angus; Macleod, H. Angus. *Thin-film optical filters*. CRC press, 2010.

[15] SOUTHWELL, William H. Gradient-index antireflection coatings. *Optics letters*, 1983, 8.11: 584-586.

[16] GREEN, M. A. Third Generation Photovoltaics: Advanced Solar Energy Conversion–Springer. *Berlin.–2003.–160 p*, 2003.

[17] ZHU, Jia, et al. Nanodome solar cells with efficient light management and self-cleaning. *Nano letters*, 2010, 10.6: 1979-1984.

[18] AWASTHI, Anshul, et al. Review on sun tracking technology in solar PV system. *Energy Reports*, 2020, 6: 392-405.

[19] RØYSET, Arne; Kolas, Tore; Jelle, Bjørn Petter. Coloured building integrated photovoltaics: Influence on energy efficiency. *Energy and Buildings*, 2020, 208: 109623.

[20] FREYER, Pascal; Stavenga, Doekele G. Biophotonics of diversely coloured peacock tail feathers. *Faraday Discussions*, 2020, 223: 49-62.

[21] Kromatix™ – Coloured Solar Glass Technology. https://www.kromatix.com

[22] YANG, Wenhong, et al. All-dielectric metasurface for high-performance structural color. *Nature communications*, 2020, 11.1: 1864.

[23] SÁNCHEZ-PANTOJA, Núria; Vidal, Rosario; Pastor, M. Carmen. Aesthetic perception of photovoltaic integration within new proposals for ecological architecture. *Sustainable cities and society*, 2018, 39: 203-214.

[24] BORN, Max; WOLF, Emil. *Principles of optics: electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*. Elsevier, 2013

[25] TAFLOVE, Allen; Hagness, Susan C.; Piket-May, Melinda. Computational electromagnetics: the finite-difference time-domain method. *The Electrical Engineering Handbook*, 2005, 3.629-670: 15.

[26] JIN, Jian-Ming. *The finite element method in electromagnetics*. John Wiley & Sons, 2015.

[27] HUGONIN, Jean Paul; Lalanne, Philippe. Reticolo software for grating analysis. *arXiv preprint arXiv:2101.00901*, 2021.

[28] JIANG, Jiaqi; Fan, Jonathan A. Multiobjective and categorical global optimization of photonic structures based on ResNet generative neural networks. *Nanophotonics*, 2020, 10.1: 361-369.

[29] JIANG, Jiaqi; Fan, Jonathan A. Global optimization of dielectric metasurfaces using a physics-driven neural network. *Nano letters*, 2019, 19.8: 5366-5372.

[30] HE, K., Zhang, X., Ren, S. and Sun, J., 2016. Deep residual learning for image recognition. In *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition* (pp. 770-778). 31] KANMAZ, T.B., Ozturk, E., Demir, H.V. and Gunduz-Demir, C., 2023. Deep-learning-enabled electromagnetic near-field prediction and inverse design of metasurfaces. *Optica*, *10*(10), pp.1373-1382.

[32] KARRAS, T., Aila, T., Laine, S. and Lehtinen, J., 2017. Progressive growing of gans for improved quality, stability, and variation. *arXiv preprint arXiv:1710.10196*.

[33] WEN, F., Jiang, J. and Fan, J.A., 2020. Robust freeform metasurface design based on progressively growing generative networks. *Acs Photonics*, *7*(8), pp.2098-2104.

[34] MA, W., Cheng, F. and Liu, Y., 2018. Deep-learning-enabled on-demand design of chiral metamaterials. *ACS nano*, *12*(6), pp.6326-6334.

[35] JIANG, J. and Fan, J.A., 2020. Simulator-based training of generative neural networks for the inverse design of metasurfaces. *Nanophotonics*, *9*(5), pp.1059-1069

[36] PHAN, Thaibao, et al. High-efficiency, large-area, topology-optimized metasurfaces. *Light: Science & Applications*, 2019, 8.1: 48.

[37] ARBABI, Amir, et al. Subwavelength-thick lenses with high numerical apertures and large efficiency based on high-contrast transmitarrays. *Nature communications*, 2015, 6.1: 7069.

[38] CURBELO, Jesús P.; Da Silva, Odair P.; BARROS, Ricardo C. An Adjoint Technique Applied to Slab-Geometry Source-Detector Problems Using the Generalized Spectral Green's Function Nodal Method. *Journal of Computational and Theoretical Transport*, 2018, 47.1-3: 278-299.

[39] SCHINKE, Carsten, et al. Uncertainty analysis for the coefficient of band-to-band absorption of crystalline silicon. *Aip Advances*, 2015, 5.6.

[40] SULTANOVA, Nina; Kasarova, S.; Nikolov, Ivan. Dispersion properties of optical polymers. *Acta Physica Polonica A*, 2009, 116.4: 585-587.

[41] MALITSON, Ian H. Interspecimen comparison of the refractive index of fused silica. *Journal of the optical society of America*, 1965, 55.10: 1205-1209.

[42] WANG, Danyan, et al. Structural color generation: from layered thin films to optical metasurfaces. *Nanophotonics*, 2023, 12.6: 1019-1081.