

**Verfahren für die inverse Modellierung
von Ionenaustauschprozessen für den
Entwurf optischer Multimode-Wellen-
leiter in Dünnglasfolien**

Dudu Zhang

**Verfahren für die inverse
Modellierung von
Ionenaustauschprozessen für
den Entwurf optischer
Multimode-Wellenleiter in
Dünnglasfolien**

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktors
der Ingenieurwissenschaften

von

Diplom-Ingenieur Dudu Zhang
geb. am 05.06.1983 in V.R. China

eingereicht bei
der Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät
der Universität Siegen
Siegen 2018

Forschungsberichte des Lehrstuhls für Theoretische
Elektrotechnik & Photonik der Universität Siegen

Band 3

Dudu Zhang

**Verfahren für die inverse Modellierung von
Ionenaustauschprozessen für den Entwurf
optischer Multimode-Wellenleiter in Dünnglasfolien**

Shaker Verlag
Aachen 2018

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Zugl.: Siegen, Univ., Diss., 2018

Copyright Shaker Verlag 2018

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-6269-4
ISSN 1869-3784

Shaker Verlag GmbH • Postfach 101818 • 52018 Aachen
Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9
Internet: www.shaker.de • E-Mail: info@shaker.de

Betreuer und erster Gutachter
Prof. Dr.-Ing. Elmar Griese
Universität Siegen

Zweiter Gutachter
Prof. Dr. rer. nat. Frank Gronwald
Universität Siegen

Tag der mündlichen Prüfung
18. Mai 2018

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich meinen besonderen Dank nachstehenden Personen entgegenbringen.

Ich möchte mich ganz besonders bei meinem Doktorvater Herrn Prof. Dr.-Ing Elmar Griese, Leiter des Lehrstuhles für Theoretische Elektrotechnik und Photonik (LTP), für die interessante Themenstellung, die Betreuung der Arbeit und die Unterstützung bedanken. Ich danke auch für die Freiheit, die Herr Prof. Dr.-Ing Elmar Griese mir ließ, eigene Ideen frei umzusetzen. Die bereichernde Zeit während dieser Promotion ist eine wertvolle Erfahrung meines Lebens geworden.

Ich danke Herrn Dr.-Ing. Thomas Kühler für die zahlreichen konstruktiven Gespräche und Vorschläge. Jederzeit war er freundlich bereit, wissenschaftliche Diskussionen zu führen und Ratschläge zu geben. Ferner danke ich Herrn Dr. rer. nat. Alexander Seel für die ausführlichen, geduldigen Erklärungen meiner Fragen. Bei Herrn Jan Hinnerk Stosch will ich mich ganz besonders für die immer freundliche, uneingeschränkte Hilfsbereitschaft bedanken. Seine Hilfe hat mir meine Arbeit sehr erleichtert. Ich danke Prof. Dr.-Ing. Peter Haring Bolivar, Dr.-Ing. Heiko Schäfer-Eberwein und Dr. rer. nat. Rainer Bornemann für die Unterstützung bei der Nutzung des Labors, die Hilfe und Erklärung für die Messungen. Ich möchte mich auch bei allen Kollegien und Kollegen des Lehrstuhls LTP bedanken für die Schaffung der angenehmen Arbeitsumgebung.

Bedanken möchte ich mich auch bei Prof. Dr. rer. nat. Frank Gronwald, Prof. Dr.-Ing. Mario Pacas und Prof. Dr.-Ing. Günter Schröder für die Zeit und Mühen als Gutachter meine Arbeit zu bewerten.

Tief verbunden und dankbar bin ich meiner Freundin, Xiaoxue Li, für ihre hilfreiche Unterstützung und ihr Verständnis bei der Anfertigung dieser Arbeit.

Nicht zuletzt gilt mein besonderer und tiefer Dank meinen Eltern, die mir meinen bisherigen Lebensweg ermöglicht haben.

Kurzfassung

Der zunehmende Bandbreitenbedarf sowie steigende Taktraten von Mikroprozessoren erfordern höhere Datenraten und hoch verdichtete Datenkanäle auch über kürzere Distanzen. Für die Datenübertragung auf Leiterplattebene werden derzeit elektrische Verbindungen verwendet. Deren Leistung bei hohen Datenraten ist signifikant beschränkt durch Dämpfung und Dispersion. Weiterhin führt eine höhere Kanaldichte der elektrischen Verbindungen zu einer verringerten Datenrate.

Im Vergleich zu elektrischen Verbindungen haben optische Verbindungen einige Vorteile, wie zum Beispiel: keine frequenzabhängige Absorption, vergleichsweise geringe optische Absorptionen, höhere Kanaldichte und Unempfindlichkeit gegen elektromagnetische Störungen. Aus diesem Grund ist es sinnvoll, eine Vielzahl der elektrischen Verbindungen durch optische Verbindungen zu ersetzen. Dafür sind elektro-optische Leiterplatten ein vielversprechender Ansatz. Lichtwellenleiterstrukturen können in Dünnglasfolien durch Ionenaustauschprozesse erzeugt werden. Nach dem Einlaminiertwerden in klassische elektrische Leiterplatten können optische Chip-to-Chip Verbindungen auf Leiterplattebene realisiert werden.

Diese Arbeit fokussiert sich auf die inverse Modellierung von Ionenaustauschprozessen, welche für die Industrie interessant sind. Im Vordergrund steht dabei die Bestimmung der notwendigen Prozessparameter, um Wellenleiter mit vorgegebenen optischen Eigenschaften herstellen zu können. In dieser Arbeit werden zunächst die optischen Eigenschaften eines Glases aus dessen chemischer Zusammensetzung bestimmt. Die Brechungsindexänderung des Glases nach dem Ag^+Na^+ -Ionenaustausch wird untersucht. Ein Modell zur Beschreibung der maximalen Brechungsindexänderung des Glases nach dem Ionenaustauschprozess wird entwickelt.

Zur Bestimmung der Prozessparameter für erwünschte Diffusionsprofile werden Optimierungsverfahren und Regressionsverfahren verwendet. Bei Verwen-

dung von Optimierungsverfahren wird eine Zielfunktion definiert und minimiert. Die adjungierte Methode wird in einer Ort-Zeit-Domäne zur Herleitung der adjungierten Gleichung einer partiellen Differentialgleichung in Koeffizientenform verwendet. Durch Auswahl der Koeffizienten kann die adjungierte Gleichung auf unterschiedliche Probleme, z.B. Diffusion, angewendet werden. Der Gradient der Zielfunktion kann durch Lösung der Diffusionsgleichung und der entsprechenden adjungierten Gleichung effizient berechnet werden.

Regressionsverfahren werden verwendet, wenn die mathematische Beschreibung des physikalischen Phänomens unbekannt ist. Mit den Datensätzen aus numerischen Experimenten werden Ionenaustauschprozesse durch Polynome und künstliche neuronale Netze modelliert. Die inverse Modellierung erfolgte danach durch die Verwendung einer *Desirability* Funktion. Das Modell eines künstlichen neuronalen Netzes hat eine sehr gute Generalisierungsfähigkeit und Robustheit gegen Rauschen gezeigt.

Abstract

The further increasing bandwidth requirements as well as increasing clock rates of microprocessors require higher data rates and high-density data channels even for short distances. Electrical interconnects are currently used for data transmission on the printed circuit board level. Their performance at high data rates is significantly limited by attenuation and dispersion. Furthermore, a higher electrical density of the electrical interconnects leads to a reduced data rate.

Compared to electrical interconnects, optical interconnects have certain advantages, such as: the absorption is independent of frequency, comparatively low optical absorption, higher density and insensitivity to electromagnetic interference. For this reason, it is meaningful to replace a variety of electrical interconnects by optical interconnects. Therefore, Electro-optical printed circuit boards are a promising approach. Optical waveguide structures are produced in thin glass-films by ion-exchange processes. After lamination of the glass-film into conventional electrical printed circuit boards, optical chip-to-chip interconnects can be realized on printed circuit board level.

This work focuses on the inverse modeling of the ion-exchange processes, which are of interest to industry, namely the determination of the process parameters necessary for the manufacturing of waveguides with given optical properties. In this work firstly the optical properties of glass are determined by means of its chemical composition. The refractive index change of the glass after Ag^+-Na^+ ion-exchange is studied. A model describing the maximum refractive index change of the glass has been developed.

Optimization and regression methods are used to determine the process parameters for desired diffusion profiles. Using optimization methods a target function is defined and minimized. An adjoint method is used to derive the adjoint equation of a partial differential equation. The gradient of the target function can be calculated efficiently by solving the diffusion equation and the

corresponding adjoint equation. This method can be easily applied to other problems.

The regression method is used when the mathematical description of the physical phenomenon is unknown. With the data obtained from numerical experiments the ion exchange process can be approximated by polynomials and artificial neural networks. The inverse modeling has been performed by using a desirability function. The model of the artificial neural network has shown a very good generalization ability and robustness against measurement errors.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
1.1	Optische Verbindungen	1
1.2	Aktueller Stand der Ionenaustauschprozesse	3
1.3	Modellierung der Ionenaustauschprozesse	6
1.4	Überblick dieser Arbeit	6
2	Ionenaustauschprozesse in Glas	9
2.1	Struktur und chemische Zusammensetzung von Kalk-Natron-Glas	9
2.2	Modell des Brechungsindex eines Silikatglases	11
2.2.1	Brechungsindex als Funktion der chemischen Zusammensetzung	11
2.2.2	Brechzahländerung durch Ionenaustauschprozesse	12
2.2.3	Brechzahländerung an der Glasoberfläche	14
2.3	Analyse des Glases B270	16
2.3.1	Chemische Zusammensetzung	16
2.3.2	Brechungsindex Bestimmen	17
2.3.3	Bestimmung der maximalen Brechzahländerung bei der Verwendung von verdünnter Salzschmelze	20
3	Vorwärtsmodellierung von Ionenaustauschprozessen	25
3.1	Mathematische Beschreibung von Diffusionsprozessen	25
3.1.1	Thermische Diffusionsprozesse	25
3.1.2	Feldgestützte Diffusionsprozesse	30
3.2	Eindimensionaler Ionenaustauschprozess	30
3.2.1	Bestimmung der Eindringtiefe durch das Brechungsindexprofil	32
3.2.2	Bestimmung der Diffusionskonstante D_{Ag}	33
3.3	Zweidimensionaler Ionenaustauschprozess	38
	Weitere Messungen zur Verifikation	40

4	Inverse Modellierung durch Optimierungsverfahren	45
4.1	Verfahren für Optimierungsprobleme	46
4.1.1	Verfahren des steilsten Abstiegs	47
4.1.2	Newton-Verfahren	48
4.1.3	BFGS-Verfahren	49
4.2	Regularisierungsmethoden	51
	Tikhonov-Regularisierung	51
4.3	Verfahren für die Berechnung der Gradienten	52
4.3.1	Direkte Methode	52
4.3.2	Adjungierte Methode	53
4.4	Adjungierte Gleichung einer partiellen Differentialgleichung . .	54
4.5	Inverse Modellierung der Eindiffusion	56
4.6	Inverse Modellierung der Ein- und Ausdiffusion	61
	Optimierung mit Tikhonov-Regularisierung	68
5	Inverse Modellierung durch Response Surface Methode	73
5.1	Polynom-Modell	74
5.2	KNN-Modell	75
5.2.1	Backpropagation-Verfahren	78
5.2.2	Bestimmung der Topologie	83
5.3	Schätzen der Prozessparameter	84
5.4	Inverse Modellierung der Eindiffusion	86
5.4.1	Regression mittels Datensätzen	86
5.4.2	Bestimmung der Prozessparameter	89
5.5	Inverse Modellierung der Ein- und Ausdiffusion	91
5.5.1	Datensätze mit Messfehler	91
5.5.2	Regression mit Hilfe von Datensätzen	92
5.5.3	Bestimmung der Prozessparameter	97
6	Zusammenfassung und Ausblick	99
	Literaturverzeichnis	102
	Anhang: Herleitung der adjungierten Gleichung	110
	Abbildungsverzeichnis	119
	Tabellenverzeichnis	122