Zeitschrift für Analysis
und ihre Anwendungen
Bd. 7 (6) 1988, S. 563–569

Phasenrekonstruktion für Stapel homogener dielektrischer Schichten gleicher optischer Dicke – eine Ambiguitätsstudie

H. Schachtzabel

Es wird eine vollständige Analyse der bei der Erkennung homogener Schichtsysteme möglichen Ambiguitäten durchgeführt. Die physikalische Realisierbarkeit aller theoretisch möglichen Lösungen der inversen Aufgabe wird gezeigt.

Проводится полный анализ возможных при познавании однородных систем слоев амбигуитетов. Демонстрируется физическая осуществимость всех теоретически возможных решений инверсной задачи.

A detailed analysis of the possible ambiguities in recognizing of homogeneous multilayer systems is given. Also the physical realizibility of all theoretical possible solutions of the inverse problem is shown.

1. Einleitung. Die Theorie der Optik dünner Schichten beruht wesentlich auf den Aussagen der makroskopischen Elektrodynamik, die ihrerseits aus den Maxwellschen Gleichungen hergeleitet werden [3, 8]. Wir betrachten speziell den Durchgang einer ebenen, linear polarisierten und in ihrer zeitlichen Abhängigkeit harmonischen elektromagnetischen Welle durch ein nichtabsorbierendes, isotropes Medium bei senkrechtem Einfall. Dieses Medium sei geschichtet, d. h. der Brechungsindex N in jeder Ebene senkrecht zur z-Achse eines geeignet gewählten Koordinatensystems konstant.

Das auf Grund der Maxwellschen Theorie existierende elektromagnetische Feld ist im Halbraum $z < 0$ Superposition einer einfallenden und einer *reflektierten Welle*

$$\mathfrak{E}(z) = \text{const}\left(\exp\left(-\mathrm{i}kN_pz\right) + r(k)\exp\left(\mathrm{i}kN_pz\right)\right) \tag{1}$$

und im Raumteil $z > 1$ eine *transmittierte ebene Welle*

$$\mathfrak{E}_t(z) = \text{const}\; t(k)\exp\left(\mathrm{i}k(l-z)\,N_0\right). \tag{2}$$

Die Kopplung der Felder $\mathfrak{E}$ und $\mathfrak{E}_t$ erfolgt durch das elektromagnetische Feld im Medium $0 < z < 1$ unter Beachtung der Fresnelschen Anschlußbedingungen (Stetigkeit der Tangentialkomponente des elektrischen und des magnetischen Vektors). Mit den in (1) und (2) eingeführten Transferkoeffizienten r (*Reflexionskoeffizient*) und t (*Transmissionskoeffizient*) lassen sich die in der Praxis für geschichtete Medien zu lösenden Aufgaben formulieren ($k = 2\pi/\lambda$ steht dabei für die Wellenzahl).

> **Direkte Aufgabe:** Aus den bekannten Systemparametern $\{N_0, N_1, d_1, \ldots, N_{p-1}, d_{p-1}, N_p\}$ sind die Transferkoeffizienten r und t zu bestimmen.

Die zur Bearbeitung der direkten Aufgabe grundlegenden linearen Differentialgleichungen (vgl. [3: S. 41f.]) sind für homogene Schichten in einfacher Form analytisch lösbar. In einer Vielzahl von Veröffentlichungen wurden vor allem algorithmische Aspekte der Berechnung von r und t diskutiert. Das Spektrum reicht dabei von einfachsten Näherungsverfahren [6, 13] bis hin zu hocheffektiven numerischen Methoden [1, 4]. Wegen ihrer überaus einfachen Struktur und wegen ihrer funktionentheoretischen Eigenschaften werden wir zur Berechnung der Transferkoeffizienten auf die *Rekursionsformeln* von *Vlasow* Bezug nehmen (vgl. [7: S. 47f.]). Das in Abb. 1a dargestellte optische System wird um eine Schicht erweitert:

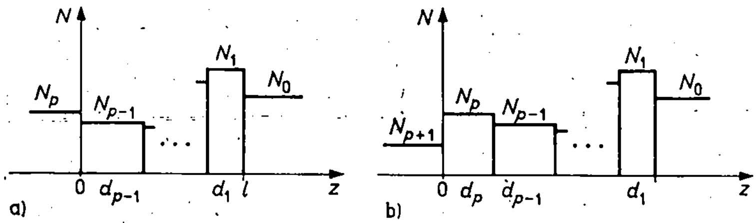

Abb. 1

Mit Bezug auf Abb. 1b ergibt sich der Reflexionskoeffizient an der vorderen Trennebene eines Stapels von p homogenen Schichten zu

$$^{(p)}r(k) = \frac{r_p + {}^{(p-1)}r(k) \exp(-2ikN_pd_p)}{1 + r_p\, {}^{(p-1)}r(k) \exp(-2ikN_pd_p)}, \tag{3}$$

wobei $^{(p-1)}r$ der Reflexionskoeffizient an der vorderen Trennfläche des Systems in Abb. 1a ist. Die Werte der Fresnel-Koeffizienten $r_j = (N_{j+1} - N_j)/(N_{j+1} + N_j)$ $(j = 0, \ldots, p)$ sind sämtlich reell und liegen im (offenen) Intervall $(-1, 1)$:

$$-1 < r_j < 1 \qquad (j = 0, \ldots, p). \tag{4}$$

2. Einige analytische Eigenschaften von Reflexionskoeffizienten. Zunächst wird die nur für positive reelle Wellenzahlen k eingeführte Größe $^{(p)}r$ in naheliegender Weise analytisch fortgesetzt.

Satz 1: *Für einen Stapel aus p homogenen dielektrischen Schichten ist der Reflexionskoeffizient* $^{(p)}r = {}^{(p)}r(k) = Z(k)/N(k)$ *eine meromorphe Funktion, deren Pole in der Halbebene* $\operatorname{Im}(k) < 0$ *liegen.*

Für den Beweis s. [5: S. 92f.] ▮

Mit $u = {}^{(p-1)}r$ und

$$z = \exp(-2ikN_pd_p) \tag{5}$$

ist die Rekursionsgleichung (2) in der Form

$$v = {}^{(p)}r = -z\big(u - (-r_p)/z\big)/\big((-r_p)\, z \cdot u - 1\big)$$

schreibbar. Die Abbildung $v = l(u)$ erweist sich folglich wegen der vorausgesetzten Realität aller beteiligten Brechzahlen als ein Automorphismus des Einheitskreises.

Hilfssatz 1: *Wenn* $^{(p)}r = Z(k)/N(k)$ *der Reflexionskoeffizient eines Stapels aus p homogenen dielektrischen Schichten ist, dann gilt die Ungleichung* $|Z(k)| + |N(k)| > 0$.

Beweis: Angenommen, k_0 ist eine gemeinsame Nullstelle der Zähler- und der Nennerfunktion. Nach (3) gilt dann

$$Z(k_0) = r_p + {}^{(p-1)}r(k_0) \exp(-2ik_0N_pd_p) = 0$$

und

$$N(k_0) = 1 + r_p\, {}^{(p-1)}r(k_0) \exp(-2ik_0N_pd_p) = 0.$$

Hieraus folgt ${}^{(p-1)}r(k_0) \exp(-2ik_0N_pd_p) = -r_p = -1/r_p$ oder, damit gleichbedeutend, $|r_p| = 1$ im Widerspruch zu (4) ∎

Hilfssatz 2: *Wenn* ${}^{(p)}r(k) = Z(k)/N(k)$ *der Reflexionskoeffizient eines Stapels aus* p *homogenen dielektrischen Schichten ist, dann gilt die Ungleichung* $|Z(-k)| + |N(k)| > 0$.

Für den Beweis s. [11: S. 75] ∎

Hilfssatz 3: *Mit* k_0 *ist auch* $-\bar{k}_0$ *Nullstelle (Polstelle) eines Reflexionskoeffizienten* $r = r(k)$.

Beweis: Die Fortsetzung der Funktionalgleichung (3) genügt dem Schwarzschen Spiegelungssatz, d. h., es gilt die Gleichheit $r(-\bar{k}) = \overline{r(k)}$. Hieraus folgt leicht die Behauptung ∎

Für die weiteren Betrachtungen setzen wir voraus, daß alle Schichten die gleiche optische Dicke D besitzen, d. h., es gelte $N_jd_j = D$ $(j = 1, \ldots, p)$. Diese Voraussetzung kann für jedes aus p Schichten bestehende System mit beliebiger Genauigkeit erfüllt werden. Es ergeben sich aber unter Umständen sehr große Schichtzahlen und damit zusammenhängend rechentechnische Konsequenzen (vgl. [4: S. 126]). Durch p-faches Anwenden der Funktionalgleichung (3) ergibt sich unter Benutzung von (5) die Beziehung

$$ {}^{(p)}r(z) = \sum_{l=0}^{p} {}^{(p)}b_l z^l \Big/ \sum_{l=0}^{p} {}^{(p)}a_l z^l \tag{6}$$

mit

$$ {}^{(p)}b_l = r_p\, {}^{(p-1)}a_l + {}^{(p-1)}b_{l-1} \quad \text{und} \quad {}^{(p)}a_l = {}^{(p-1)}a_l + r_p\, {}^{(p-1)}b_{l-1}.$$

Zur Vereinfachung wurde ${}^{(p-1)}b_{-1} = {}^{(p-1)}a_p = 0$ gesetzt.

3. Eine inverse Aufgabe der Schichtenoptik. Vorgegeben sei der spektrale Verlauf R, $R(k) = |r(k)|^2$ für reelle Wellenzahlen k. Gesucht ist ein (das) optische System, welches diesen Reflexionsgrad R erzeugt. Vom mathematischen Standpunkt aus gesehen, ist es zweckmäßig, die Identifikationsaufgabe in zwei Schritten zu bearbeiten:

(a) Bestimmung der komplexwertigen Größe r aus R, d. h. aus Intensitätsmessungen (*Phasenrekonstruktionsproblem*).

(b) Aufklärung der *konkreten Systemstruktur* unter Verwendung des in (a) bestimmten Reflexionskoeffizienten r.

Durch die inverse Streutheorie werden für gewisse Klassen von Streupotentialen vollständige Lösungen der Teilaufgabe (b) angeboten (in [10] findet man neben einem sehr schönen Überblick auch eine umfangreiche Literaturzusammenstellung). Obwohl die Einbettung der Schichtenoptik in den Kalkül der Streutheorie unter den gemachten Voraussetzungen leicht möglich ist [2], bereitet die Anwendung der Resultate Schwierigkeiten. Wegen der in der Praxis auftretenden Sprungstellen (Abb. 1a) der Brechzahlfunktion $N = N(z)$ ist die meistens gestellte Forderung $r(k) = O(|k|^{-1})$, k reell, nicht erfüllt.

Satz 2: *Die Lösung der Teilaufgabe* (b) *ist für Stapel homogener dielektrischer Schichten gleicher optischer Dicke (bis auf die Umkehrbarkeit des Lichtweges) eindeutig möglich, wenn die Null- und die Polstellen des Reflexionskoeffizienten* (6) *bekannt sind.*

Beweis: Wir führen diesen konstruktiv durch die Angabe eines Erkennungsalgorithmus.

1. *Schritt*: Wir bestimmen die normierten Zähler- und Nennerpolynome (Wurzelsatz von Vieta). Es seien $(Z_0, Z_1, \ldots, Z_{p-1}, 1)$ bzw. $(S_0, S_1, \ldots, S_{p-1}, 1)$ die entsprechenden Koeffizienten.
2. *Schritt*: Wir berechnen r_0 und r_p aus den Normierungsgleichungen $r_p/r_0 = Z_0$ und $r_0 r_p = 1/S_0$.
3. *Schritt*: Wir bestimmen die tatsächlichen Koeffizienten gemäß ${}^{(p)}b_l = r_0 Z_l$ und ${}^{(p)}a_l = r_0 r_p S_l$ $(l = 0, 1, \ldots, p)$.
4. *Schritt*: Wir setzen $j = p$.
5. *Schritt*: Wir lösen die $j - 1$ linearen Gleichungssysteme (in x und y) ${}^{(p)}b_l = r_j x + y$ und ${}^{(j)}a_l = x + r_j y$ $(l = 1, \ldots, j - 1)$ und setzen ${}^{(j-1)}b_{l-1} = y$ und ${}^{(j-1)}a_l = x$.
6. *Schritt*: Wir setzen $r_{j-1} = {}^{(j-1)}b_0$.
7. *Schritt*: Wir setzen $j = j - 1$. Falls $j > 1$ ist, gehen wir zu Schritt 5 über.

In der im 2. Schritt möglichen Vorzeichenauswahl drückt sich die Umkehrbarkeit des Lichtweges aus. Bei der Vorgabe der Extremalmedien N_0 und N_{p+1} verschwindet diese Zweideutigkeit. Jedes der im 5. Schritt zu bearbeitenden linearen Gleichungssysteme ist eindeutig lösbar, da die Werte K_j der Koeffizientendeterminanten $K_j = r_j^2 - 1 < 0$ sind. Hinreichend dafür ist die oben gezeigte Automorphismuseigenschaft von (3) ∎

Die Lösung der Teilaufgabe (a) führt in natürlicher Weise auf eine funktionentheoretische Randwertaufgabe, wenn r in der Halbebene $\mathrm{Im}\,(k) > 0$ nicht nur singularitätenfrei (Satz 1) ist, sondern dort auch keine Nullstellen hat. Unter dieser zusätzlichen Voraussetzung existiert in der Halbebene $\mathrm{Im}\,(k) > 0$ ein holomorpher Zweig des Logarithmus von r, $\log r(k) = 0.5 \ln R(k) + \mathrm{i}\Phi(k)$. Das Phasenspektrum Φ kann dann aus R in bekannter Weise eindeutig (Hilbert-Transformation) berechnet werden. Für den einschichtigen und zweischichtigen Belag ist die Angabe notwendiger und hinreichender Bedingungen dafür, daß die Nullstellen von r in der Halbebene $\mathrm{Im}\,(k) < 0$ liegen, sehr einfach [5: S. 91]. Die Angabe *praktikabler* Bedingungen im Falle von mehr als zwei Schichten stößt hingegen auf große Schwierigkeiten, obwohl eine Fülle von Untersuchungen zur Stabilität von Polynomen vorliegt (siehe z. B. [12]).

4. Analyse der bei der Erkennung homogener Schichtstapel auftretenden Ambiguität. Sowohl in der Systemtheorie [12: S. 186f.] als auch in der inversen Streutheorie [10: S. 7] wird bei Ambiguitätsbetrachtungen häufig der folgende Faktorisierungssatz für Systemcharakteristiken (Reflexionskoeffizienten) zugrunde gelegt.

Satz 3: *Jeder Reflexionskoeffizient der Form* (6) *läßt sich in eindeutiger Weise als Produkt* ${}^{(p)}r(z) = {}^{(p)}r_m(z) \cdot {}^{(p)}r_a(z)$ *darstellen. Die Faktoren genügen dabei den Bedingungen*

$$|z| = 1 \Rightarrow |{}^{(p)}r_a(z)| = 1 \quad \textit{und} \quad {}^{(p)}r_m(z_0) = 0 \Rightarrow |z_0| \geqq 1. \tag{7}$$

Für den Beweis s. [12: S. 186f.] ∎

Die Anwendbarkeit des oben skizzierten Vorgehens zur Rekonstruktion des Phasenspektrums ist durch diesen Satz abgesichert. Als Lösung der entsprechenden Randwertaufgabe erhält man die Funktion ${}^{(p)}r_m$.

Von grundlegender Bedeutung für die Praxis ist die Klärung folgender Frage (*Realisierbarkeit*):

Ist die rationale Funktion ${}^{(p)}r_m$ ein Reflexionskoeffizient?

Wir betten diese Realisierbarkeitsfrage in eine allgemeinere Aufgabenstellung ein, deren Lösung Grundlage für die Formulierung von Ambiguitätsaussagen bei der Erkennung homogener Schichtstapel auf der Grundlage des Reflexionsgrades $R = R(k)$ bildet.

Definition: Die Größe

$$^{(p)}r(z) = \sum_{l=0}^{p} {}^{(p)}b_l z^l \Big/ \sum_{l=0}^{p} {}^{(p)}a_l z^l$$

heißt *Reflexionskoeffizient eines Stapels homogener Schichten gleicher optischer Dicke*, wenn es $p + 1$ reelle Zahlen $r_0, r_1, \ldots, r_p$ so gibt, daß $^{(p)}r$ aus $\{r_0, r_1, \ldots, r_p, |r_j| < 1$ $(j = 0, 1, \ldots, p)\}$ durch Anwendung der Rekursionsformel (3) darstellbar ist.

Satz 4: *Eine rationale Funktion*

$$r(z) = \sum_{l=0}^{p} b_l z^l \Big/ \sum_{l=0}^{p} {}^{(p)}a_l z^l,$$

die aus einem Reflexionskoeffizienten $^{(p)}r$ durch Stürzung von Zählernullstellen hervorgeht, ist ebenfalls ein Reflexionskoeffizient.

Beweis: Da alle Polstellen z_l von r bzw. $^{(p)}r$ im Äußeren des Einheitskreises liegen, können wir $\varepsilon > 0$ so bestimmen, daß $|z_l| > 1 + \varepsilon$ $(l = 1, \ldots, p)$ gilt. Als Reflexionskoeffizient hat $^{(p)}r$ die folgenden Eigenschaften:

(i) $^{(p)}r$ ist holomorph in $|z| < 1 + \varepsilon$ (Satz 1).

(ii) $|^{(p)}r(\exp(ix))| \neq 1$ auf dem Rand des Einheitskreises $(z = \exp(ix))$, da sonst $(N_{p+1} - N_0)/(N_{p+1} + N_0) = 1$ gelten müßte.

Weiter wissen wir folgendes:

(iii) $|r(\exp(ix))| = |^{(p)}r(\exp(ix))|$ (erster Teil von (7)).

(iv) r ist holomorph in $|z| < 1 + \varepsilon$.

Mit dem Maximumprinzip für holomorphe Funktionen erhalten wir dann die Ungleichung $\max_{|z| \leq 1} |r(z)| \leqq \max |r(\exp(ix))| \leqq 1$. Insbesondere gilt $|r_p| = |r(0)| \leqq 1$. Nun hätte aber $|r_p| = 1$ sofort $|r(z)| \equiv 1$ zur Folge. Dies ist aber wegen (iii) und (ii) nicht möglich. Es muß somit $|r_p| < 1$ gelten. Da (vgl. (3))

$$r(z) = \left(r_p + {}^{(p-1)}r(z)\, z\right) / \left(1 + {}^{(p-1)}r(z)\, r_p z\right) \tag{8}$$

für jedes z mit $|z| \leqq 1$ ein Automorphismus (zwischen r und $^{(p-1)}r$) ist, gilt insbesondere $|^{(p-1)}r(z)| \leqq 1$ für $|z| \leqq 1$. Weiterhin ist $|^{(p-1)}r(\exp(ix))| \not\equiv 1$, da sonst wegen der Realität von r_p im Widerspruch zu (ii) $|r(\exp(ix))| \equiv 1$ gelten müßte. Wir können folglich auf $^{(p-1)}r$ die gleichen Überlegungen wie oben anwenden. Dieses Vorgehen fortsetzend, erhalten wir eine Folge reeller Zahlen r_j, $|r_j| < 1$ $(j = 0, 1, \ldots, p)$, aus denen wegen (8) unter Anwendung der Rekursionsformel (2) r berechnet werden kann ∎

Aus diesem Satz kann man unmittelbar die nachfolgenden Aussagen herleiten.

Folgerung 1: *Ein optisches System kann genau dann eindeutig aus $R = R(k)$ bestimmt werden, wenn alle Nullstellen von $r = r(z)$ auf dem Einheitskreis liegen.*

Folgerung 2: *Wenn q die Gesamtzahl der reellen Nullstellen z_l $(|z_l| \neq 1)$ ist und wenn p die Anzahl der Paare konjugiert komplexer Lösungen $(t_l, \bar{t}_l)$ $(|t_l| \neq 1)$ der Gleichung $r(z) = 0$ ist, dann gibt es höchstens $2^{(q+p)/2}$ verschiedene optische Systeme, die den gleichen Reflexionsgrad R besitzen.*

Durch eine detailliertere Charakterisierung des Nullstellengebildes (Vielfachheit, Betrag und Realität der Wurzeln) sind leicht spezielle Ambiguitätsaussagen möglich.

5. Ein illustrierendes Beispiel. Während auftretende Ambiguitäten die Lösung von Identifikationsaufgaben (zumindest) erschweren, eröffnen sie dem Schichtenoptiker die Möglichkeit, aus mathematisch gleichwertigen Systemen unter technologischen und ökonomischen Gesichtspunkten die günstigste Variante auszuwählen. Die Implementierung des Verfahrens ist denkbar einfach:

> Ausgehend von konkreten Schichtsystemen sind die Null- und Polstellen des zugehörigen Reflexionskoeffizienten zu berechnen. Äquivalente Brechzahlfolgen erhält man daraus durch Nullstellenstürzung. Die Realisierbarkeit wird durch die Sätze 2 und 4 abgesichert.

Auf der Grundlage dieses Vorgehens sind die nachfolgenden äquivalenten Schichtsysteme berechnet worden.

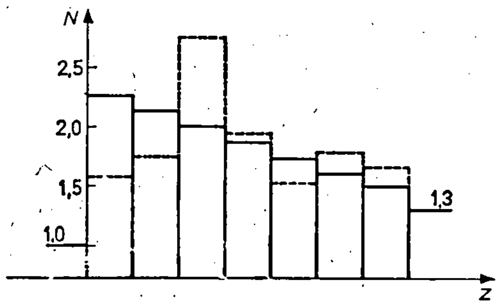

Abb. 2 Äquivalente Schichtsysteme

LITERATUR

[1] DOBROWOLSKI, J. A.: Modern computational methods for optical thin film synthesis. Thin Solid Films 34 (1976), 313—321.

[2] HIRSCH, J.: Theoretische Untersuchungen zur Lösung des Syntheseproblems dielektrischer Interferenzschichten mit der inversen Streutheorie. Dissertation A. Berlin: Akad. Wiss. DDR 1979.

[3] KAISER, H., und H. C. KAISER: Analysis der Transferkoeffizienten geschichteter Medien. Berlin: Inst. Math. Akad. Wiss. DDR, R-Math.-05/86 (1986).

[4] KAISER, H.: Algorithmen zur Analyse und Synthese von Interferenzschichtsystemen. Wiss. Z. Päd. Hochschule Potsdam 17 (1973), 117—132.

[5] KAISER, H., und H. C. KAISER: Zur Bestimmung des Brechzahlprofils aus dem Reflexionskoeffizienten. Potsdamer Forsch. (Reihe B) 31 (1982), 75—99.

[6] KNITTL, Z.: A rational function approach to multilayer synthesis. Appl. Optics 6 (1967), 331—338.

[7] KNITTL, Z.: Optics of Thin Films. Praha: Statni Nakl. Techn. Lit. (SNTL) and London: John Wiley & Sons 1976.

[8] KOSSEL, D.: Einfache Darstellung der Reflexion einer inhomogenen Schicht. Optik 3 (1948), 266—279.

[9] PEGIS, R. J.: An Exact Design Method for Multilayer Dielectric Films. JOSA 54 (1966), 1255—1271.

[10] SABATIER, P.: Rational reflection coefficients in one-dimensional inverse scattering and applications. Monpellier: Univ. Sci. Techn. du languedoc (Lab. phys. math.) PM/83-05 (1986).

[11] SCHACHTZABEL, H.: Lösung des Phasenrekonstruktionsproblems für Stapel homogener dielektrischer Schichten gleicher optischer Dicke. Potsdamer Forsch. (Reihe B) 45 (1985), 68–83.
[12] UNBEHAUEN, R.: Systemtheorie — Eine Einführung für Ingenieure. Berlin: Akademie-Verlag 1980.
[13] VAŠIČEK, A.: Couche mince hétérogène antiréfléchiassante. J. Phys. Rad. 25 (1964), 188–191.

Manuskripteingang: 24. 11. 1987

VERFASSER:

Dr. HARTMUT SCHACHTZABEL
Sektion Mathematik/Physik
der Pädagogischen Hochschule „Karl Liebknecht“
Am Neuen Palais
DDR-1570 Potsdam