Benutzer–Handbuch

Dipog–1.4

Weierstraß–Institut für
Angewandte Analysis und Stochastik

Mohrenstr.39
10117 Berlin

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung

Am Weierstraß–Institut für Angewandte Analysis und Stochastik wird das Programmsystem DIPOG

Direkte und Inverse Probleme bei Optischen Gittern

entwickelt, das zur Simulation und Optimierung von in Vielschichtsysteme eingebetteten periodischen Beugungsgittern dient. Die Version 1.4 behandelt binäre und verwandte Gitter mit Rechteckstrukturen. Ein Geometriebeispiel ist schematisch in der nachfolgenden Grafik angegeben, wobei sich eine in x_1–Richtung periodische, in x_3–Richtung konstante und im x_1, x_2–Querschnitt rechteckige Gitterstruktur auf 2 planaren Schichten befindet. Durch geeignete Wahl der optischen Indizes lassen sich eine Vielzahl von technologisch relevanten binären und Multilevel–Gitterformen realisieren. Das Gitter wird von einer elektromagnetischen Welle beleuchtet, wobei bei der so genannten in–plane oder klassischen Diffraktion die Einfallsebene senkrecht auf den Gitterfurchen steht. Bei der Simulation

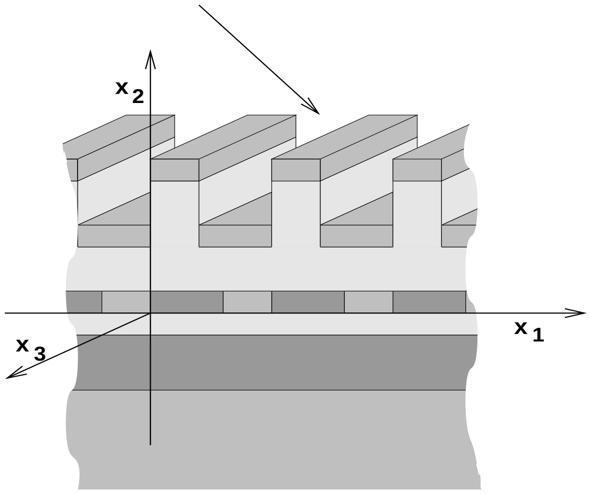

Abb. 1. Beispielgeometrie

des Beugungsgitters, dem so genannten direkten Problem, werden die Beugungseffizienzen von vorgegebenen periodischen diffraktiven Strukturen bei schrägem Einfall ebener elektromagnetischer Wellen berechnet. Grundlage ist hierbei eine auf der Finite–Element–Methode beruhende Diskretisierung von Helmholtz-Gleichungen, die aus den zeitharmonischen Maxwellschen Gleichungen abgeleiteten werden.

Beim inversen Problem geht es um den optimalen Entwurf von Beugungsgittern, die vorgegebene Funktionen, z.B. Effizienzverläufe oder Phasenverschiebungen, realisieren. Dabei wird ein Zielfunktional konstruiert, für das über einer Klasse von zulässigen Gittergeometrien ein Minimum mittels Gradientenabstiegsverfahren gesucht wird. Die Gradienten und Effizienzen werden aus der exakten Beugungstheorie mittels der Finite–Element–Methode berechnet. Dieses Problem kann sowohl für feste Wellenlänge und Einfallswinkel als auch über einen Wellenlängen– oder Einfallswinkelbereich untersucht werden.

Mit der Version 1.4 lassen sich in Vielschichtsysteme eingebrachte binäre periodische Strukturen modellieren und optimieren, die von ebenen Wellen mit einstellbarer linearer Polarisation, Wellenlängen und Einfallswinkeln beleuchtet werden. Die Optimierung ist vorerst nur bei klassischer Diffraktion möglich.

Die numerische Grundlage aller Programme ist die effektive Lösung von diskretisierten Helmholtzgleichungen. Mit Dipog–1.4 werden 3 unterschiedlichen Verfahren zur Lösung dieser Gleichungen angeboten, zwei direkte und ein iteratives Lösungsverfahren. Die insgesamt 9 Programme behandeln das direkte Problem, den optimalen Entwurf sowohl für feste Wellenlänge und Einfallswinkel als auch über einen Wellenlängen– oder Einfallswinkelbereich.

Die Programme benutzen Routinen der bekannten Software–Pakete der linearen Algebra LAPACK und BLAS, sowie teilweise die Bibliothek PARDISO der Universität Basel, Schweiz, ein sehr effektives und allgemeines Programm zum Lösen von schwachbesetzten Gleichungssystemen. Diese Bibliotheken müssen zur Laufzeit verfügbar sein. Desweiteren bieten die Programme zur Simulation des Beugungsgitters die Möglichkeit der grafischen Ausgabe der Lösung, die in OpenGL und dem Grafikprogramm "gnuplot" realisiert sind. Die Anbindung an OpenGL erfolgt mit dem am WIAS entwickelten System "gltools". Zur Nutzung der Grafik muss die entsprechende OpenGL–Bibliothek libGL und das Programm "gnuplot" installiert sein. Innerhalb der Programme werden zwei Standardprogramme zur Berechnung von Bessel– und Hurwitzfunktionen benutzt, deren Quellcode frei verfügbar ist.

Die Programme, die PARDISO nutzen, sind eine wertvolle Alternative zu den auf dem Iterationsverfahren basierenden Programmen. Der Rechenzeitaufwand entspricht etwa dem der Iterationsverfahren bei etwa 35-50 Iterationsschritten, hängt aber nicht von den Materialparametern ab. Deshalb sind sie selbst bei numerisch ungünstigen Parametern, die zu einer großen Anzahl von Iterationsschritten und damit zu langen Rechenzeiten beim Iterationsverfahren führen, sehr effektiv. Das dritte Verfahren, das auf einem direkter Löser mit geringem Hauptspeicherbedarf basiert, ist als Alternative für leistungsschwache Rechentechnik und bei bestimmten Gittergeometrien geeignet.

Weitere Neuerungen in Dipog–1.4 sind verschiedene Ausgabeformate (Rayleigh–Koeffizienten von TE– und TM–Anteil, Jones–Vektor oder Rayleigh–Koeffizienten der x_3–Komponenten des elektromagnetischen Feldes), die Bestimmung des Brechungsindex aus bereitgestellten Dateien, erweiterte grafische Ausgabemöglichkeiten der ermittelten Felder und abgeleiteter Größen bei der Simulation von Gittern. Darüber hinaus können jetzt Optimierungsprobleme mit einfallenden Wellen beliebiger linearer Polarisation behandelt werden, neben der konjugierten Gradientenmethode zur Minimumbestimmung der Zielfunktionale wurde die Inneren Punkt Methode weiterentwickelt.

Die Datenübergabe an die Programme erfolgt über einfache Eingabe–Files, die der entsprechenden Problemklasse (Simulation, Optimierung für feste Wellenlänge und Einfallswinkel sowie Optimierung über einen Wellenlängen– oder Einfallswinkelbereich) angepasst sind. Die Eingabe–Files sind in allen drei Fällen ähnlich strukturiert und bieten im Prinzip die gleichen Variationen von Eingabemöglichkeiten.

Fragen, Probleme, Programmfehler und Anregungen zu Dipog–1.4 bitte an:

G. Schmidt
Weierstraß–Institut für Angewandte Analysis und Stochastik
Mohrenstr.39, 10117 Berlin
email: schmidt@wias-berlin.de

2. Direkte Probleme

2.1. Beschreibung des Eingabe–Files

Das Eingabe–File bietet eine Vielzahl von Möglichkeiten, Serien von Rechnungen durchzuführen. Zum Beispiel können durch die Angabe von Parameterbereichen die entsprechenden Werte für diese Bereiche, z.B. Wellenlängen, Einfallswinkel, Gitterhöhen, verschiedene Geometrien, berechnet werden. Der Aufruf des Programms ist

```
Programmname  <Name des Datenfiles>
```

wobei beim Namen des Datenfiles die Endung `.dat` weggelassen werden kann. Ist kein File mit dem angegebenen Namen vorhanden, wird nach einem File mit dem angehängten Suffix `.dat` gesucht.

2.1.1 Beispiel

```
====================================================================
  Dateneingabe f"ur direktes Problem bei Gittern mit Schichtsystemen
--------------------------------------------------------------------
Ausgabe-File,  Ausgabetyp     |   beisp.erg 3
pol \ TE \ TM ,  level        |   TE  1
--------------------------------------------------------------------
Per., ob. Gitterende, shift   |   1. 1.4  0.
m (x-Diskr), ng(3) (Gitter)   |   50 70 70 0
lambda  (Vn) (von bis step)   |  .535 .635 2
theta   (Vn) (von bis step)   |   40. 40. 0
phi     (Vn) (von bis step)   |   0. 0.  0
Temperatur                    |
--------------------------------------------------------------------
     Materialien und Schichten
--------------------------------------------------------------------
k_+, k_- (Super- , Substrat) | 1.0  Si2.0
Schichtzahl oben  unten       |  0 2
obere Schichtdicken (sdo)     |
 ko_j, (j=1,nzo)              |
untere Schichtdicken (sdu)    |  .1 .3
 ku_j, (j=1,nzu)              |  Si2.0  2.35
 Materialien, Zw.-schicht     |  3  4
 kg_j der 1. Schicht          |  2.2   1.0  1.0
 kg_j der 2. Schicht          |  1.8   2.2  2.2
 kg_j der 3. Schicht          |  1.8   1.8  1.8
 kg_j der 4. Schicht          |  1.4   1.4  2.2
--------------------------------------------------------------------
Eingabeauswertung  (j/n)      |
Auswertung des Feldes         |
--------------------------------------------------------------------
Anzahl der Gitter             |   1
Anzahl Gitterpunkte           |   3
skal. x-Koordinaten  x_i      |   0. .4 .6
H"ohen in 1. Unterteilung     |  60  40  40
H"ohen in 2. Unterteilung     |  30  30  30
H"ohen in 3. Unterteilung     |  10  10  10
--------------------------------------------------------------------
```

Die Struktur des Eingabe–Files wird am obenstehenden Beispiel erläutert. Das Programm liest zeilenweise die durch die Kurzbezeichnungen vor dem | verlangten Parameter ein, wobei diese dem Kontext entsprechend als ganze Zahlen, reelle Zahlen (Eingabe mit .), komplexe Zahlen (Eingabe in der Form (f_1, f_2)) oder Zeichenketten einzugeben sind. Da die entsprechenden Parameter ab der 31. Stelle der Eingabezeile unformatiert gelesen werden, sind sie in richtiger Reihenfolge durch Leerzeichen getrennt in die jeweilige

Zeile einzutragen, die beliebig lang sein kann. Zu lange Eingabezeilen können auch mit backslash-newline (\<RET>) in mehrere Zeilen aufgeteilt werden. Wie üblich bedeutet das für das Einleseprogramm dann eine Zeile, ist aber besser darstell- und editierbar. Zum Beispiel, die Eingabezeile

```
 kg_j der 1. Schicht           |  2.2   1.0  1.0
```

ließe sich auch in der Form

```
 kg_j der 1. Schicht           |      \
                                 2.2 \
                                 1.0 \
                                 1.0
```

realisieren, wobei nach dem Zeilenfortsetzungszeichen "\" kein weiteres Zeichen stehen darf. Außerdem sollte backslash "\" nur in den Kurzbezeichnungen vorkommen.

Innerhalb des Eingabe–Files ist die Reihenfolge der Zeilen nicht zu ändern, es dürfen auch keine Leerzeilen eingefügt werden. Allerdings ist es nicht notwendig, dass die Zeilen nur die vorgeschriebenen Eingabe–Parameter enthalten. Da das Programm in jeder Zeile nur die im jeweiligen Kontext benötigten Werte liest, werden nachfolgende Werte nicht berücksichtigt.

Jedes Eingabe–File hat 3 Kopfzeilen

```
======================================================================
  Dateneingabe f"ur direktes Problem bei Gittern mit Schichtsystemen
----------------------------------------------------------------------
```

wobei die zweite Zeile das Wort `direkt` enthalten muss. Danach folgen die Daten zur Ausgabe:

```
Ausgabe-File,  Ausgabetyp     |  Name     1,2,3
```

Die Angabe eines Namens des Ergebnisfiles ist optional. Er ist frei wählbar und kann bis zu 30 alphanumerische Zeichen lang sein. Er darf nicht 1,2 oder 3 sein und sollte keine Leerzeichen oder für die Unix-Shell reservierte Sonderzeichen enthalten. Es ist auch möglich, das Ergebnisfile in einem anderen Verzeichnis anzulegen, wenn der Name die entsprechende Pfadangabe enthält. Wenn kein Name angegeben wird, dann wird er aus dem Namen des Eingabefiles nach der Regel `basename.erg` gebildet. In dieses File wird zuerst der Zeitpunkt der Berechnung und der Inhalt des Eingabefiles bis zur ersten Leerzeile eingefügt. Danach erfolgt entsprechend dem `Ausgabetyp` die Ausgabe der berechneten Werte.

Ausgabetyp wird durch eine Zahl 1, 2 oder 3 festgelegt, wobei verschiedene Darstellungen der Ergebnisse insbesondere bei der konischen Diffraktion gewählt werden können.

Das Ergebnisfile ist so strukturiert, dass man mit einfachen Unixkommandos (grep, cut usw.) die interessierenden Daten einer umfangreicheren Rechnung z.B. für eine graphische Auswertung leicht extrahieren kann. Nach einer Zeichenkette von 3 Großbuchstaben, deren Bedeutung am Anfang erklärt wird, stehen für jede Rechnung die im Vergleich zur vorigen Rechnung veränderten Eingabeparameter sowie die berechneten Rayleigh–Koeffizienten und Beugungseffizienzen der entsprechenden Moden.

Nachfolgend das Ausgabefile `beisp.erg` (der Inhalt des Eingabefiles wurde weggelassen) für das oben angegebene Eingabe-File bei $\lambda = 535$ nm.

```
   Berechnung von Effizienzen f"ur bin"are Gitter mit Schichtsystemen
       klassische Diffraktion            Dipog-1.4  WIAS-Berlin

GIW- Gitterperiode d
GIH- oberer Gitterrand, unterer Gitterrand, Verh"altnis h/d
GSH- obere, untere Begrenzung der Gesamtstruktur
POL- Polarisation
POE- Winkel (E_x,E_z) zur x-Achse, |E|
SOD- Anzahl der oberen Schichten, deren Dicken
SUD- Anzahl der unteren Schichten, deren Dicken
WEL- Wellenl"ange
EFO- Einfall von oben Winkel theta
TMP- Temperatur
DIG- Unterteilungen in x-Richtung und im Gitter, Gesamtzahl der Unbekannten
DKO- Diffraktionskoeffizienten  der Schichten oberhalb des Gitters
DKU- Diffraktionskoeffizienten  der Schichten unterhalb des Gitters
DKG- Diffraktionskoeffizienten  des Gittermaterials
VUR- Vertikale Unterteilung in Rechtecken
TPS- Transition points, skaliert auf [0,1]
TPU- Transition points in mu
TER- Reflexion des TE-Anteils - Ordnung, Winkel, Rayleigh-Koeffizient und Effizienz
TET- Transmission des TE-Anteils - Ordnung, Winkel, Rayleigh-Koeffizient und Effizienz
GTE- Gesamteffizienz des TE-Anteils - Reflexion, Transmission
INT- Integration der Gleichung mit FEM oder GFEM
DCT- Datum und Rechenzeit

INT:   GFEM
GIW:     1.00000
GIH:     1.40000    0.00000    1.40000
SOD:    0
SUD:    2       0.10000     0.30000
GSH:     1.40000   -0.40000
POL:   TE
TMP:    20.00000
EWP:     0.00000
DIG:      50      70        3750
WEL:    0.5350000
DKO:  1.0
DKU:  1.4606  2.35  1.4606
EFO:    40.00000
TPS:     0.0000    0.4000    0.6000
TPU:     0.0000    0.4000    0.6000
DKG:  2.2  1.0  1.0
VUR:     1.2000    0.8000    0.8000
DKG:  1.8  2.2  2.2
VUR:     0.6000    0.6000    0.6000
DKG:  1.8  1.8  1.8
VUR:     0.2000    0.2000    0.2000
DKG:  1.4  1.4  2.2
TER:     0    40.00    (-0.30717,-0.00694)        9.4405
TER:    -1     6.19    (-0.18452,-0.39761)       24.9363
TER:    -2   -25.29    ( 0.02421, 0.15947)        3.0706
TER:    -3   -74.20    (-0.30086, 0.11268)        3.6690
TET:     0    26.11    ( 0.24597,-0.12922)       13.2167
TET:     1    53.75    (-0.30324,-0.18388)       14.1805
TET:    -1     4.23    ( 0.07646, 0.08400)        2.4531
TET:    -2   -17.01    (-0.18569,-0.16248)       11.1001
TET:    -3   -41.21    ( 0.26155,-0.23794)       17.9334
GTE:       41.1163      58.8837
DCT:   beendet am 21.Aug 2003 um 16:31:30,    Rechenzeit:      0.23 sec
```

2.1.2 Einfallende Welle und Verfeinerung

```
pol \ TE \ TM ,  level        |   TE  1
```

Der Parameter `pol` bestimmt die Polarisation der einfallenden Welle. Dieser Parameter kann beliebig reellwertig sein, der reellen Zahl kann ein `K` vorangestellt sein (für die konische Diffraktion) oder er kann als Zeichenkette `TE` oder `TM` eingegeben werden.

Der Parameter `level` ≥ 1 bestimmt, wie oft die Berechnungen durchgeführt werden sollen. Sie werden für die angegebene Startdiskretisierung und deren Verfeinerungen durchgeführt, die sich durch Multiplikation der Anzahl der Unterteilungsintervalle mit den ganzzahligen Werten bis zum wert von `level` ergeben. So lässt sich eine Aussage über das Konvergenzverhalten oder die Genauigkeit ableiten.

2.1.3 Polarisation

Eine ebene elektromagnetische Welle in einem homogenen Medium

$$(\mathbf{E},\mathbf{H})(\mathbf{x},t) = (\vec{E},\vec{H})e^{i(\mathbf{k},\mathbf{x})-i\omega t}\ , \quad \vec{E} = (E_1,E_2,E_3)\,,\ \vec{H} = (H_1,H_2,H_3)$$

erfüllt die Maxwellschen Gleichungen

$$\nabla\times\vec{E} = i\omega\mu\vec{H} \quad \text{und} \quad \nabla\times\vec{H} = -i\omega\epsilon\vec{E}\ , \quad |\mathbf{k}|^2 = \omega^2\mu\epsilon\,, \tag{2.1}$$

wobei ϵ der Dielektrizitätskoeffizient und μ die Permeabilität des Mediums ist.

Da im weiteren nur Beugungsgitter untersucht werden, die aus nichtmagnetischen Materialien bestehen, wird immer konstantes μ angenommen. Die Beugungseigenschaften der Gitter werden somit nur durch die unterschiedlichen Dielektrizitätskoeffizienten der Materialien bestimmt, die frequenz- und temperaturabhängig sein können.

Bei der Diffraktion an periodischen Strukturen wird eine einfallende elektromagnetische ebene Welle in eine endliche Anzahl ebener Wellen aufgeteilt, den so genannten gebeugten Moden, die sich in den homogenen Medien ober– und unterhalb der Struktur mit den Dielektrizitätskoeffizienten ϵ_+ bzw. ϵ_- ausbreiten. Der Begriff der Polarisation dieser Wellen wird mit der Lage der periodischen Struktur verknüpft.

Eine Welle heißt TE-polarisiert, wenn der elektrische Feldvektor $\vec{E}$ senkrecht auf der vom Richtungsvektor der Welle $\mathbf{k} = (k_1,k_2,k_3)$ und der Gitternormalen (der x_2–Achse) aufgespannten Ebene steht, d.h. die x_2–Komponente des elektrischen Feldes $E_2 = 0$. Analog ist bei einem TM-polarisierten elektromagnetischem Feld $H_2 = 0$.

Wenn man den Polarisationsvektor als Einheitsvektor mit der Richtung des Vektorprodukts $\mathbf{k}\times(0,1,0)$ definiert, dann zeigt bei einer TE-polarisierten Welle das elektrische Feld in die Richtung des Polarisationsvektors, analog das magnetische Feld bei TM-polarisierter Welle. Jede elektromagnetische Welle lässt sich eindeutig in einen TE–polarisierten und einen TM–polarisierten Anteil zerlegen, wobei die elektrischen Felder dieser Anteile zueinander orthogonal sind. Im Fall des senkrechten Einfalls, wenn der Wellenvektor $\mathbf{k}$ parallel zur x_2–Achse ist, legen wir den Richtungsvektor der x_3–Achse als Polarisationsvektors fest.

Die Polarisation einer ebenen Welle kann auch durch die S– und P–Polarisation des elektrischen Feldes angegeben werden. Der S–Vektor $\mathbf{s}$ steht senkrecht auf der vom Wellenvektor und der Gitternormalen aufgespannten Einfallsebene, und fällt mit dem oben definierten Polarisationsvektor zusammen:

$$\mathbf{s} = \frac{\mathbf{k} \times (0,1,0)}{|\mathbf{k} \times (0,1,0)|}$$

Der *TE–polarisierte* $(\vec{E}_{TE}, \vec{H}_{TE})$ bzw. *TM–polarisierte Anteil* $(\vec{E}_{TM}, \vec{H}_{TM})$ einer ebenen Welle mit den Koeffizienten $(\vec{E}, \vec{H})$ erfüllt somit die Beziehungen

$$(\vec{E}_{TE}, \mathbf{s}) = (\vec{E}, \mathbf{s}) \,,\ (\vec{H}_{TE}, \mathbf{s}) = 0 \quad \text{bzw.} \quad (\vec{H}_{TM}, \mathbf{s}) = (\vec{H}, \mathbf{s}) \,,\ (\vec{E}_{TM}, \mathbf{s}) = 0 \,.$$

Zur Definition der P–Polarisation wird der Einheitsvektor $\mathbf{p}$ so gewählt, dass $(\mathbf{s}, \mathbf{p}, \mathbf{k})$ ein rechtshändiges Dreibein bilden,

$$\mathbf{p} = \frac{\mathbf{k} \times \mathbf{s}}{|\mathbf{k}|} \,, \quad \mathbf{s} = \frac{\mathbf{p} \times \mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} \,, \quad \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} = \mathbf{s} \times \mathbf{p} \,.$$

Der Vektor $\mathbf{p}$ liegt somit in der Einfallsebene. Da $\vec{E}$ immer senkrecht zum Wellenvektor ist, $(\vec{E}, \mathbf{k}) = 0$, lässt sich $\vec{E}$ im strahlfesten $\mathbf{s}, \mathbf{p}$ –Koordinatensystem entsprechend in einen S– und eine P–Anteil (senkrecht und parallel) zerlegen

$$\vec{E} = (\vec{E}, \mathbf{s})\, \mathbf{s} + (\vec{E}, \mathbf{p})\, \mathbf{p} \,.$$

Wegen $\omega\mu\vec{H} = \mathbf{k} \times \vec{E}$ charakterisiert diese Zerlegung eindeutig die ebene Welle $(\mathbf{E}, \mathbf{H})$. Das Paar $(\vec{E}, \mathbf{s}), (\vec{E}, \mathbf{p})$ wird auch als *Jones–Vektor* der Welle bezeichnet.

Der S–Anteil von $\vec{E}$ entspricht dem TE–polarisierten Anteil der Welle, während die Umrechnung vom P–Anteil von $\vec{E}$ zum TM–polarisierten Anteil $(\vec{H}, \mathbf{s})$ der Welle durch die Beziehung

$$(\vec{E}, \mathbf{p}) = -\sqrt{\frac{\mu}{\epsilon}}\, (\vec{H}, \mathbf{s})$$

gegeben ist.

Es sei hier angemerkt, dass die Wahl des Ausgabetyps 1, 2 oder 3 die Ausgabe der Rayleigh–Koeffizienten entweder des TE– und TM– Anteils der gebeugten Ordnung (Typ 1), des Jonesvektors, d.h. des S– und P– Anteils des elektrischen Feldes (Typ 2) oder der x_3– Komponenten von $\vec{E}$ und $\vec{H}$ (Typ 3) bewirkt. Wird keine Zahl angegeben, wird `Ausgabetyp` 1 gewählt.

2.1.4 Eingabe der einfallenden Welle

Die einfallende Welle ist von der Form

$$(\vec{E}^i, \vec{H}^i)\, e^{i(k_1 x_1 \pm k_2 x_2 + k_3 x_3)}$$

mit reellwertigen Vektoren $\vec{E}^i, \vec{H}^i \in \mathbb{R}^3$ und k_2 positiv. Der Fall $-k_2 x_2$ im Exponenten entspricht Beleuchtung von oben, was standardmäßig angenommen wird. Beleuchtung von unten ist zur Zeit nur für die in–plane Diffraktion implementiert.

Ist der Parameter `pol` die Zeichenkette `TE` oder `TM`, dann ist die einfallende ebene Welle TE- bzw. TM-polarisiert, d.h $\vec{E}^i$ bzw. $\vec{H}^i$ hat die Richtung des Polarisationsvektors $\mathbf{s}$. Insbesondere ist bei der in-plane Diffraktion auch $E_1^i = 0$ bei `TE` bzw. $H_1^i = 0$ bei `TM`.

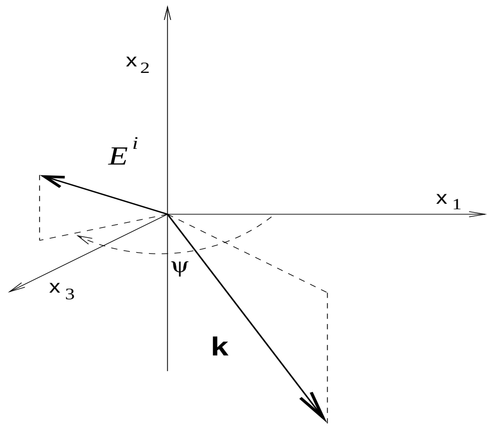

Abb. 2. Parameter pol als Winkel

Ist pol eine reelle Zahl (ψ) oder K und reelle Zahl (Kψ), dann bedeutet diese Zahl den Winkel ψ (in Grad angegeben), den die Projektion des einfallenden elektrischen Feldes in die x_1, x_3-Ebene (E_1^i, E_3^i) mit der x_1–Achse bildet (s. Abb. 2). Die Angabe von K vor diesem Winkel hängt mit der Interpretation von Eingabewerten bei der konischen Diffraktion (phi $\neq 0$) zusammen, deren genaue Erklärung weiter unten in Abschnitt 2.1.7 erfolgt.

Die Effizienzen der gebeugten Moden stellen das Verhältnis ihrer Energie zur Energie der einfallenden Welle dar, wobei die Energie einer elektromagnetischen Welle als Fluss des Poynting-Vektors $\mathbf{P} = \mathrm{Re}\,(\mathbf{E} \times \overline{\mathbf{H}})/2$ durch ein Referenzgebiet parallel zur Gitterebene definiert werden kann. Die Energie von $(\vec{E}, \vec{H})\, e^{i(k_1x_1+k_2x_2+k_3x_3)}$, $|\mathbf{k}|^2 = \omega^2\mu\epsilon$, lässt sich ausdrücken als

$$e = \frac{\omega|k_2|(\epsilon|E_3|^2 + \mu|H_3|^2)}{2(|\mathbf{k}|^2 - k_3^2)} = \frac{\omega|k_2|(\epsilon|(\vec{E}, \mathbf{s})|^2 + \mu|(\vec{H}, \mathbf{s})|^2)}{2\,|\mathbf{k}|^2} = \frac{\omega\epsilon|k_2||\vec{E}|^2}{2\,|\mathbf{k}|^2}\,.$$

Damit ergibt sich bei einfallender Welle $(\vec{E}_i, \vec{H}_i)\, e^{i(k_1x_1+k_2x_2+k_3x_3)}$, $k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = k_+^2$, und für reflektierte Moden $(\vec{E}_r, \vec{H}_r)\, e^{i(\alpha_r x_1+\beta_r x_2+\gamma_r x_3)}$ mit $\alpha_r^2 + \beta_r^2 + \gamma_r^2 = k_+^2$ die Effizienz

$$e_r^+ = \frac{\beta_r}{k_2}\,\frac{|\vec{E}_i|^2}{|\vec{E}_r|^2},$$

während für transmittierte Moden der Form $(\vec{E}_t, \vec{H}_t)\, e^{i(\alpha_t x_1-\beta_t x_2+\gamma_t x_3)}$ mit $\alpha_t^2+\beta_t^2+\gamma_t^2 = k_-^2$ die Formel

$$e_t^- = \frac{\beta_t}{k_2}\,\frac{k_+^2}{k_-^2}\,\frac{|\vec{E}_i|^2}{|\vec{E}_t|^2},$$

gilt. Die Energie der einfallenden Welle lässt sich mit $k_2 = \omega\sqrt{\mu\epsilon_+}\,b$, $|b| < 1$ und dem Brechungsindex des entsprechenden Materials $\mathrm{n}_+ = \sqrt{\epsilon_+/\epsilon_0}$ darstellen in der Form

$$e = \frac{\omega\epsilon_+|k_2||\vec{E}_i|^2}{2\,|\mathbf{k}|^2} = \frac{\omega^2\epsilon_+\sqrt{\mu\epsilon_+}\,b\,|\vec{E}_i|^2}{2\omega^2\mu\epsilon_+} = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu}}\,\frac{b}{2}\sqrt{\frac{\epsilon_+}{\epsilon_0}}\,|\vec{E}_i|^2 = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu}}\,\frac{b}{2}\,(\mathrm{n}_+|\vec{E}_i|^2)\,.$$

Bei den Berechnungen wird angenommen, dass der Wert $\mathrm{n}_+|\vec{E}_i|^2$ normiert ist. Diese Normierung ist neu im Vergleich zu vorigen Versionen des Programms, die von normierter Länge des elektrischen Feldvektors $|\vec{E}_i|^2$ ausgegangen sind.

2.1.5 Grösse und Diskretisierung der inhomogenen Gitterstruktur

Die Ausdehnung der inhomogene Struktur und die Startdiskretisierung für die Finite–Element Lösung wird im wesentlichen durch die beiden nachfolgenden Zeilen festgelegt.

```
Per., ob. Gitterende, shift  |   1. 1.4  0.
m (x-Diskr), ng(3) (Gitter)  |   50 70 70 0
```

Die Gitterperiode beträgt hier `per` $= 1.0\,\mu$m (alle Maßangaben sind in μm), die für die erste Diskretisierung in `m` = 50 Teilintervalle unterteilt wird. Die Strecke von $x_2 = 0$ bis `oberes Gitterende` ist `b` $= 1.4\,\mu$m festgelegt, die in `ng(1)` = 70 Teilintervalle unterteilt wird. Bei der Finite–Element-Lösung wird das Rechteck $(0, \mathtt{per}) \times (0, \mathtt{b})$ diskretisiert, planare Schichten ober– und unterhalb der Gitterstruktur sowie eine (mögliche) homogene Zwischenschicht innerhalb der Struktur werden mit analytischen Ansätzen behandelt.

Durch die Angabe von `per` und `m` bzw. `b=oberes Gitterende` und `ng(1)` wird die Größe der Unterteilungsrechtecke für die Diskretisierung mit (h_1, h_2) mit $h_1 = \mathtt{per}/\mathtt{m}$, $h_2 = \mathtt{b}/\mathtt{ng}(1)$ festgelegt. Nach Möglichkeit sollten diese Parameter so gewählt werden, dass die Unterteilungsrechtecke annähernd quadratisch sind. Bei langgestreckten Rechtecken ist der Diskretisierungsfehler der Finite–Element–Methode relativ groß.

Zu beachten ist, dass der Parameter `ng(3)` ein Vektor mit 3 ganzzahligen Komponenten ist, wobei bei `ng(1)`$\neq$`ng(2)` Rechnungen für verschiedene obere Gitterenden durchgeführt werden. Diese liegen im Bereich von $\mathtt{b} = \mathtt{h}_2 \cdot \mathtt{ng}(1)$ bis $h_2 \cdot \mathtt{ng}(2)$, der Schritt wird durch $h_2 \cdot \mathtt{ng}(3)$ vorgegeben. Somit bestimmt `ng(2)` das zuletzt zu berechnende Gitter mit der oberen Begrenzung $h_2 \cdot \mathtt{ng}(2)$.

Die *untere Begrenzung der inhomogenen Gitterstruktur* ist in der Regel bei $x_2 = 0$, kann aber durch Einfügen einer homogenen Zwischenschicht beliebiger Dicke nach unten verschoben werden. Das wird weiter unten bei der Eingabezeile

```
 Materialien, Zw.-schicht    |  3  5
```

näher beschrieben. Dort wird auch abschließend die Gittergeometrie und deren Diskretisierung erklärt.

Mit dem reellen Parameter `shift` kann die gesamte Gitterstruktur in x_2–Richtung beliebig verschoben werden. Wenn keine Zahl für `shift` eingegeben wird, ist `shift`$= 0$.

2.1.6 Wellenlänge und Einfallswinkel

Die Berechnungen der Effizienzen können mit einem Lauf für mehrere Wellenlängen λ und Einfallswinkel θ und ϕ durchgeführt werden. Dabei ist es möglich, sowohl Bereiche (`von bis step`) als auch Vektoren (`Vn`) verschiedener Werte anzugeben.

Bei der Eingabe von Bereichen müssen in den Zeilen für Wellenlänge (`lambda`) und Einfallswinkel (`theta, phi`) jeweils 3 Zahlen angegeben werden, wobei die beiden ersten λ_1 und λ_2, θ_1 und θ_2 bzw. ϕ_1 und ϕ_2 die Grenzen des Bereichs bestimmen und als reelle Zahlen einzugeben sind (Eingabe mit '.'). Ist die dritte Zahl ebenfalls reell, bedeutet sie die Schrittweite, mit denen die Berechnungen beginnend vom Anfang des Bereichs durchgeführt werden, bis das Ende des Bereichs erreicht oder überschritten wird. Das Vorzeichen der Schrittweite wird vom Programm entsprechend den Bereichsgrenzen gewählt.

Ist die dritte Zahl ganzzahlig (Eingabe ohne '.'), wird der angegebene Bereich entsprechend oft unterteilt, und die Effizienzen werden für alle Unterteilungswerte berechnet.

```
lambda  (Vn) (von bis step)  |  .535 .635 2
theta   (Vn) (von bis step)  |   40. 40. 0
phi     (Vn) (von bis step)  |   0. 0.  0
```

Maßeinheit bei `lambda` ist μm, bei `theta, phi` werden die Winkel in Grad angegeben. Die Rechnungen erfolgen hier für `lambda` $= 0.535, 0.585, 0.635\,\mu$m.

Sollen die Rechnungen für n nicht gleichmäßig verteilte Werte `lambda`, `theta` oder `phi` durchgeführt werden, können diese eingegeben werden, wenn vor Ihnen die Zeichenkette Vn steht, z.B.

```
lambda  (Vn) (von bis step)  |  V3 .535 .585 .635
theta   (Vn) (von bis step)  |  V5  40. 50. -60.  -20. 0.
phi     (Vn) (von bis step)  |  V1  0.
```

Das Gitter wird in der Regel von oben beleuchtet. Der Fall des Einfalls der Welle von unten kann bisher nur für die in-plane Diffraktion mit den beiden Programmen **dirpar** und **diriter** untersucht werden. Dazu ist in der Zeile

```
theta (von bis step)         |
```

ein "u" nach den Werten, die den Einfallswinkel θ beschreiben, einzugeben, im letzten Beispiel würde die Eingabe folglich sein:

```
theta (von bis step)         |  V5  40. 50. -60.  -20. 0.  u
```

2.1.7 Bestimmung von klassischer oder konischer Diffraktion

Die Abweichung der Einfallsrichtung von der (x_1, x_2)-Ebene wird durch den Wert ϕ des Parameters `phi` gesteuert: Der Fall $\phi = 0$ entspricht klassischer Diffraktion (Einfall in der (x_1, x_2)-Ebene), und wird durch die Eingabe

```
phi   (von bis step)         |  0. 0. 0.
```

angezeigt. Außerdem muss der Parameter `pol` die Zeichenkette `TE` oder `TM` oder eine reelle Zahl sein, die dann den in Abbildung 2 beschriebenen Winkel bezeichnet. Dann werden einfachere Differentialgleichungen jeweils für TE- und TM-polarisierten Einfall gelöst. Der Winkel `theta` $= \theta_i$ gibt hier den Neigungswinkel des Richtungsvektor bezüglich der x_2–Achse an, die Richtung der einfallenden Welle ist $(\sin\theta_i, -\cos\theta_i, 0)$ bei Beleuchtung von oben bzw. $(\sin\theta_i, \cos\theta_i, 0)$ bei Einfall des Lichts von unten. Der Fall $\theta_i = 0$ bedeutet also senkrechten Einfall.

Bei schrägem Einfall ($\phi \neq 0$) gibt es zwei Möglichkeiten die Richtung der einfallenden Welle einzugeben, die sich in der Wahl der Kugelkoordinaten unterscheiden:

1. Bei der Angabe von `pol` als reelle Zahl werden die Winkel `theta` $= \theta_i$ und `phi` $= \phi$ als Kugelkoordinaten im System (x_1, x_2, x_3) interpretiert: der Richtungsvektor hat die Form

$$(\sin\theta_i \cos\phi, -\cos\theta_i \cos\phi, \sin\phi)\,,\ -90^\circ < \phi, \theta < 90^\circ\,,\ \text{(siehe Abb. 3)},$$

er stellt die direkte Verallgemeinerung der Eingabe bei der klassischen Diffraktion dar.

2. Eine etwas anschaulichere Angabe des Wellenvektors benutzt die Kugelkoordinaten im System (x_1, x_3, x_2), d.h. $x_1 = \sin\theta\cos\phi$, $x_2 = \cos\theta$, $x_3 = \sin\theta\sin\phi$, (siehe Abb. 4), wobei

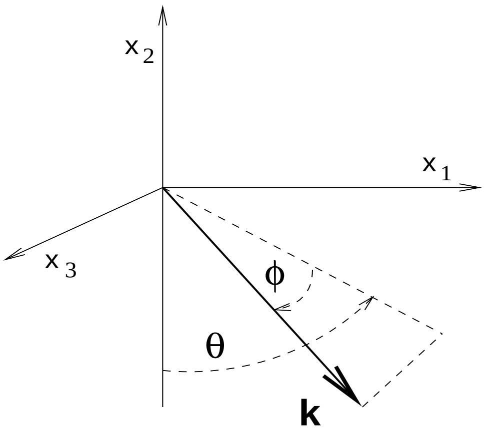

Abb. 3. Richtungsvektor der einfallenden Welle im gitterfesten Koordinatensystem

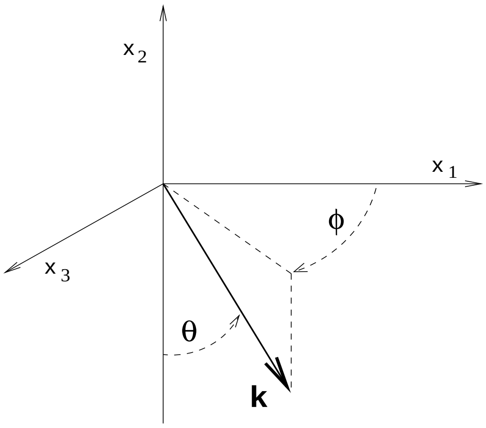

Abb. 4. Einfallsvektor in Kugelkoordinaten

ϕ ein beliebiger nichtnegativer Winkel ist und $0° \leq \theta \leq 180°$. Für die Eingabe in diesem System muss der Parameter `pol` entweder in der Form `K`ψ mit dem in Abb. 2 beschriebene Winkel ψ oder als Zeichenkette `TE` oder `TM` eingegeben werden. Dann ist der Wellenvektor der einfallenden Welle gegeben durch

$$(\sin\theta_i\cos\phi, -\cos\theta_i, \sin\theta_i\sin\phi)\,,\ 0 \leq \theta_i < 90°\,,\ \phi \text{ beliebig.}$$

`TE` (`TM`) bedeutet hier analog zum Fall $\phi = 0$, dass die einfallende Welle TE- bzw. TM-polarisiert ist. Die Angaben `TE` und `K`$(\psi+90)$ sowie `TM` und `K`ψ sind somit identisch, bieten aber verschiedene Optionen wenn z.B. für mehrere Einfallswinkel ψ gerechnet werden soll.

Die in 2. eingeführten Kugelkoordinaten werden bei der Ausgabe im Fall der konischen Diffraktion für die Richtungen der gebeugten Ordnungen benutzt, unabhängig davon, ob die 1. oder 2. Art der Eingabe des Wellenvektors gewählt worden ist. Die Richtungen der gebeugten Moden werden mit den in Abb. 4 dargestellten Winkeln θ und ϕ ausgegeben, wobei $0° \leq \theta < 90°$ bei den reflektierten und entsprechend $90° < \theta \leq 180°$ bei den transmittierten Moden.

`Temperatur` |

Der optische Index und die Ausdehnung von Materialien hängen natürlich auch von der Temperatur ab. Diese Temperaturabhängigkeit ist bisher nur bei den Materialien Silizium (Si), Zinksulfid (ZnS) und Germanium (Ge) berücksichtigt, und zwar für den Bereich von $0 - 400°$ C. Desweiteren müssen geometrischen Gegebenheiten erfüllt sein, d.h. die inhomogene Gitterstruktur besteht nur aus einem dieser Materialien und Luft, während alle Schichten aus einem der genannten Materialien sein müssen. Dann werden die temperaturabhängigen optischen Indizes und die sich aus den Ausdehnungskoeffizienten der einzelnen Materialien berechneten neuen Größen in der Berechnung verwendet. Ansonsten wird bei allen Rechnungen von Raumtemperatur ausgegangen, auch wenn in der unten gezeigten Zeile keine Angabe steht.

2.1.8 Eingabe von Materialien und Schichten

In der Zeile

```
k_+, k_- (Super- , Substrat) |  1.0  Si2.0
```

werden die optischen oder Brechnungsindizes der homogenen Materialien oberhalb und unterhalb des in einem Schichtsystem befindlichen Gitters eingegeben (entspricht Superstrat und Substrat bei Beleuchtung von oben).

Zu beachten ist, dass im Eingabefile immer der Buchstabe `k` zur Bezeichnung des optischen Index benutzt wird, während wir hier im weiteren die üblichere Bezeichnung

$$n = \sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_0}}$$

benutzen. Die Materialien ober– bzw. unterhalb des Gitters haben also den Brechungsindex n_+ bzw. n_-.

Für die Eingabe der optischen Indizes gibt es 3 Möglichkeiten:

1. Es können Materialien in Form von Zeichenketten eingegeben werden, für die die optischen Indizes aus internen Tabellen berechnet werden. Verfügbar sind zur Zeit folgende Materialien für bestimmte Wellenlängenbereiche:

Air	Ag	Al	Au	CsBr	Cu	InP
MgF2	NaCl	PMMA	PSKL	SF5	TlBr	TlCl
Cr	ZnS	Ge	TiO2r	Quarz	Si	Sia.b

wobei Sia.b mit $1.0 \leq$ a.b ≤ 2.0 eine Mischung aus Siliziumoxid und Siliziumdioxid bezeichnet. Wenn x die reelle Zahl a.b bezeichnet, dann wird der optische Index `k` von Sia.b nach der Formel

$$n = (2 - x) \cdot n_{\mathrm{SiO}} + (x - 1) \cdot n_{\mathrm{SiO_2}}$$

berechnet. Beim Medium "Air" ist $n = 1.0$.

2. Die optischen Indizes werden als reelle Zahlen oder als komplexe Zahlen in der Form (Re n , Im n) eingegeben.

3. Die optischen Indizes für gegebene Wellenlänge werden aus bereitgestellten Dateien berechnet. Diese Dateien müssen mindestens 5 Datensätze der Form

```
lambda      Re n        Im n
```

enthalten, wobei Im n $= 0$ gesetzt wird, wenn in einem Datensatz nur 2 Werte angegeben werden. Die Wellenlänge ist in μm anzugeben. Es ist zu beachten, dass pro Datei höchstens 112 Datensätze verarbeitet werden.

Der Name der Datei muss mit dem Buchstaben "u" beginnen und kann bis zu 5 Zeichen lang sein. Wird ein Dateiname zur Definition des optischen Index eines Materials im Eingabefile angegeben, dann wird die Datei im Verzeichnis, in dem das Programm gestartet wurde, gesucht. Aus den eingelesenen Daten wird der Wert für die vorgegebene Wellenlänge mittels kubischer Spline-Interpolation berechnet. In der Datei können Kommentare enthalten sein, alles nach dem Zeichen # wird nicht gelesen. Da optische Indizes mit negativem Real– oder Imaginärteil nicht zugelassen, und wahrscheinlich physikalisch auch nicht sinnvoll sind, stoppt das Programm, wenn solche Werte ermittelt werden.

Zu beachten ist, dass der optische Index des Materials, von dem aus das Gitter beleuchtet wird, immer reell und positiv sein muss.

Für spezielle Fragestellungen kann es sinnvoll sein, Rechnungen für Brechungsindizes mit negativem Imaginärteil durchzuführen. Solche Werte können mit der 2. Möglichkeit eingegeben werden, solange der Realteil des Brechungsindex positiv bleibt. Allerdings ist zu beachten, dass die Stabilität der Finite–Element–Methode nur dann gesichert ist, wenn die Werte aller optischen Indizes sich in einer nicht abgeschlossenen Viertelebene $\{z \text{ komplex} : -\varphi \leq \arg z < \pi/2 - \varphi\}$ mit $0 \leq \varphi < \pi/2$ befinden. Desweiteren entspricht der Fall von negativem Imaginärteil der Existenz einer Energiequelle, so dass die Summe der Energien der gebeugten Moden größer als die Energie der einfallenden Welle ist. Das kann dazu führen, dass die berechneten Werte der Rayleigh–Koeffizienten und Effizienzen nicht mehr in die vorgeschriebenen Ausgabeformate des Ergebnis–Files passen.

Die Eingabe von Schichten ober– und unterhalb der Gitterstruktur erfolgt danach in

```
Schichtzahl oben unten        |    0 2
```

wo die Zahl der Schichten oberhalb `nzo` und unterhalb `nzu` festgelegt wird, und

```
obere Schichtdicken (sdo)     |
 ko_j, (j=1,nzo)              |
untere Schichtdicken (sdu)    |   .1 .3
 ku_j, (j=1,nzu)              |   Si2.0  2.35
```

Das Beispielgitter hat ober– und unterhalb der inhomogenen Struktur ein System von 0 bzw. 2 Schichten, deren Materialien und Dicken jeweils von oben angegeben werden.

2.1.9 Materialien des Gitters

Danach erfolgt die Eingabe der Materialparameter für die inhomogene Gitterstruktur. Dabei wird vorausgesetzt, dass der Querschnitt der inhomogenen Struktur sich aus Rechtecken zusammensetzt, die jeweils von einem Gittermaterial ausgefüllt werden. Durch Hinzufügen weiterer Teilrechtecke kann erreicht werden, dass eine Struktur entsteht, die aus in x_1–Richtung aufeinanderfolgenden Rechtecken gleicher Höhe, die unabhängig voneinander in x_2–Richtung in gleich viele Teilrechtecke unterteilt sein können, wie in Abbildung 5 angedeutet ist.

Bei `Materialien, Zw.-schicht` ist die Anzahl der in x_1–Richtung aufeinanderfolgenden Rechtecke der inhomogenen Struktur anzugeben, sowie als zweiter Parameter die Anzahl der Teilrechtecke `khgi` bei vertikaler Unterteilung. Für die obige Abbildung sind also die Zahlen

```
Materialien, Zw.-schicht      |   3  4
```

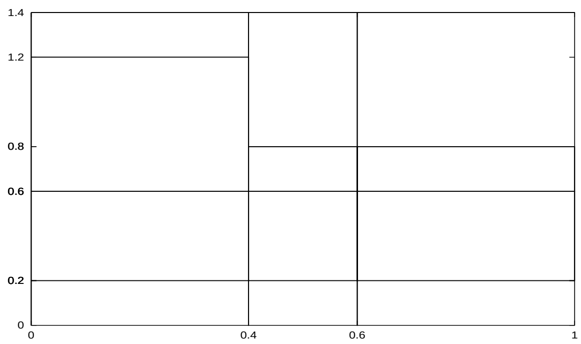

Abb. 5. Beispielgeometrie

einzugeben. Die Basispunkte der in x_1–Richtung aufeinanderfolgenden Rechtecke werden im Folgenden Gitterpunkte genannt. Da im Zug einer Rechnung mehrere Gitterstrukturen berechnet werden können, die unterschiedlich viele Gitterpunkte haben können, ist hier mindestens die maximale Anzahl `nzg` der in x_1–Richtung aufeinanderfolgenden Rechtecke aller Strukturen anzugeben. Die Anzahl der Teilrechtecke bei vertikaler Unterteilung muss aber bei allen Strukturen übereinstimmen.

Danach werden die optischen Indizes der erwähnten Teilrechtecke angegeben.

```
kg_j der 1. Schicht          |  2.2   1.0  1.0
kg_j der 2. Schicht          |  1.8   2.2  2.2
kg_j der 3. Schicht          |  1.8   1.8  1.8
kg_j der 4. Schicht          |  1.4   1.4  2.2
```

2.1.10 Geometrie des Gitters

Die Eingabe der Gitterpunkte und Teilhöhen erfolgt nach den Zeilen

```
Eingabeauswertung  (j/n)       |
Graphische Auswertung          |
```

die später beschrieben werden.

Es ist möglich, mit den bisher festgelegten Werten mehrere inhomogene Strukturen zu berechnen. Durch

```
Anzahl der Gitter              |   1
```

wird deren Zahl festgelegt. Allerdings werden durch das Programm nur die für die vorgegebene Diskretisierung geeigneten Strukturen ausgewählt. Für jede Struktur sind eine Eingabezeile für die x_1–Koordinaten der Gitterpunkte sowie $khgi - 1$ Zeilen für die vertikale Unterteilung der in x_1–Richtung aufeinanderfolgenden Rechtecke vorgesehen.

```
Anzahl Gitterpunkte            |   3
skal. x-Koordinaten  x_i       |   0. .4 .6
```

In der Zeile `skal. x-Koordinaten  x_i` sind die auf die Gitterperiode skalierten x_1–Koordinaten der Gitterpunkte einzugeben. Der erste Gitterpunkt ist immer 0.0 und muss angegeben werden! Die Koordinaten der anderen Gitterpunkte müssen größer als 0 und kleiner als 1 sein. Die x_1–Koordinaten der Gitterpunkte sind dann $t_i = x_i \cdot \texttt{per}$. Bei der Finite–Element–Lösung der Differentialgleichungen wird davon ausgegangen, dass in jedem der Unterteilungsrechtecke die Koeffizienten der Differentialgleichungen konstant sind, also die Unstetigkeiten im Gittermaterial auf Linien des durch die Unterteilung vorgegebenen Rechtecknetzes liegen. Stimmt ein eingegebener Gitterpunkt t_i nicht mit einem der Unterteilungspunkte überein, wählt das Programm den nächstliegenden Unterteilungspunkt als Gitterpunkt.

Bei der vertikalen Unterteilung der Rechtecke zwischen den Gitterpunkten werden die Höhen in Diskretisierungseinheiten n_i angegeben. Dabei wird davon ausgegangen, dass die inhomogene Gitterstruktur vertikal in `ng(1)` Diskretisierungintervalle unterteilt ist. Die Zeilen

```
Hoehen in 1. Unterteilung     |  60  40  40
Hoehen in 2. Unterteilung     |  30  30  30
Hoehen in 3. Unterteilung     |  10  10  10
```

geben an, wie die nebeneinanderliegenden Rechtecke in x_2–Richtung unterteilt werden. Das erste Rechteck $(0.0, 0.4) \times (0.0, 1.4)$ wird von $x_2 = 0$ aus gesehen nach 10, nach 30 und nach 60 Diskretisierungintervallen der Länge h_2 unterteilt, usw. Das heißt, das erste Rechteck besteht von oben gesehen aus einem Rechteck mit der Höhe 200 nm, gefüllt mit optischem Material mit dem Index 2.2, danach einem Rechteck mit der Höhe 600 nm und Material mit dem Index 1.8, danach ein Rechteck mit der Höhe 400 nm mit gleichem Material und abschließend ein Rechteck der Höhe 200 nm gefüllt mit optischem Material mit dem Index 1.4.

Zusammen mit den oben beschriebenen Schichten unterhalb der inhomogenen Struktur ergibt sich die Geometrie und Zusammensetzung des in Abbildung 1 dargestellten Beugungsgitters.

2.1.11 Homogene Schicht in der Struktur

Im Eingabe–File gibt es auch die Möglichkeit, innerhalb der inhomogenen Struktur zusätzlich eine homogenen Zwischenschicht beliebiger Dicke einzugeben. Dadurch lässt sich der numerische Aufwand bei der Simulation z.B. von beidseitig strukturierten Schichten teilweise erheblich reduzieren.

Im betrachteten Beispiel lässt sich die 3. Schicht als homogene Zwischenschicht des Materials mit dem Index 1.8 und der Dicke von 400 nm auffassen. Solch eine Schicht kann bei der Geometriebeschreibung durch die Angabe

```
Materialien, Zw.-schicht      |   3  3  2  0.4  1.8
```

festgelegt werden. Durch die Einführung der Zwischenschicht wird die 3. Materialschicht aus der inhomogenen Struktur entfernt, somit sind die Rechtecke der inhomogenen Struktur aus Abbildung 1 vertikal nur noch in 3 Teilrechtecke unterteilt.

Durch die Angabe der 3 Parameter `nzwi  d  kg_z` (hier `2  0.4  1.8`) wird zusätzlich zu einer Struktur aus 3 in x_1–Richtung nebeneinanderliegenden Rechtecken, die in vertikaler Richtung aus 3 verschiedenen Teilrechtecken bestehen, eine homogene horizontale Zwischenschicht eingeführt, die von oben gesehen nach der 2. Schicht der Teilmaterialien (`nzwi=2`) folgt, eine Dicke von $\mathtt{d} = 0.4\,\mu$m hat und aus Material mit dem Index $\mathtt{kg\_z} = 1.8$ besteht. Natürlich muss dabei gesichert sein, dass die von oben gesehen 2. vertikale Unterteilung der 3 Rechtecke in gleicher Höhe erfolgt. Das Gitter ohne Zwischenschicht hat nun nur noch eine Höhe von $\mathtt{b} = 1.0\,\mu$m, bei gleicher Größe der Unterteilungsrechtecke für die numerische Lösung wird die Strecke von $x_2 = 0$ bis `oberes Gitterende` nun in 50 Teilintervalle geteilt. Die entsprechend veränderten Zeilen des Eingabefiles haben dann folgende Form:

```
Per., ob. Gitterende, shift  |   1. 1.0 0.
m (x-Diskr), ng(3) (Gitter)  |   50 50 50 0
. . . . . . . . . . . . . . . .|. . . . . . . . . . . .
 Materialien, Zw.-schicht    |  3  3  2 .4 1.8
 kg_j der 1. Schicht         |  2.2   1.0  1.0
 kg_j der 2. Schicht         |  1.8   2.2  2.2
 kg_j der 3. Schicht         |  1.4   1.4  2.2
. . . . . . . . . . . . . . . .|. . . . . . . . . . . .
Anzahl der Gitter            |   1
Anzahl Gitterpunkte          |   3
skal. x-Koordinaten  x_i     |   0. .4 .6
Hoehen in 1. Unterteilung    |  40  20  20
Hoehen in 2. Unterteilung    |  10  10  10
```

Die `Hoehen in 2. Unterteilung` haben den x_2 –Wert $10 \cdot h_2 = 10 \cdot 1\,\mu\text{m}/50 = 0.2\,\mu\text{m}$, darunter befindet sich die Zwischenschicht, $0.4\,\mu$m dick. Somit ist dass obere Ende der Materialien die in `kg_j der 3. Schicht` gegeben sind bei $x_2 = -0.2\,\mu$m, und deren Höhe bleibt bei $10 \cdot h_2 = 0.2\,\mu$m.

Durch die Angabe einer Zwischenschicht der Dicke `d` wird somit die untere Begrenzung der inhomogenen Struktur auf $x_2 = -\mathtt{d}$ verändert. Die gleichen x_2 – Koordinaten wie für das zu Anfang betrachtete Gitter erhält man, wenn der Parameter `shift` entsprechend geändert wird, im betrachteten Fall würde die Zeile

```
Per., ob. Gitterende, shift  |   1. 1.0  0.4
```

dafür sorgen, dass die hier beschriebene Geometrie mit der des Gitters ohne Zwischenschicht übereinstimmt.

Bei einigen Anwendungen interessiert man sich dafür, die inhomogenen Struktur über der Zwischenschicht zu verschieben. Diese Berechnungen erfolgen während eines Laufs, wenn in der Zeile

```
 Materialien, Zw.-schicht    |  3  4  2  0.4  1.8  nv nvz
```

zwei weiteren ganzen Zahlen (Verschiebung um `nv` Unterteilungsintervalle insgesamt `nvz` mal) angegeben werden.

2.1.12 Ausdehnung des Gitters

Die gesamte x_2 –Ausdehnung eines Gitters wird durch die Parameter $\mathtt{b} = \mathtt{ob.\ Gitterende}$, die Summen der Dicken der Schichten oberhalb und unterhalb der Struktur $\mathtt{DO} = \sum \mathtt{sdo}$ bzw. $\mathtt{DU} = \sum \mathtt{sdu}$ sowie durch die Dicke `d` einer möglicherweise vorhandenen homogenen Zwischenschicht bestimmt. Und zwar erstreckt es sich von

$$x_2 = -\mathtt{DU} - \mathtt{d} + \mathtt{shift} \quad \text{bis} \quad x_2 = \mathtt{b} + \mathtt{DU} + \mathtt{shift}$$

Durch geeignete Wahl von `shift` kann somit jeder x_2 – Wert als Anfang des Gitters gewählt werden.

Werden in der Zeile

```
m (x-Diskr), ng(3) (Gitter)  |   m ng(1) ng(2) ng(3)
```

die Parameter ng(1)$\neq$ ng(2) angegeben, so dass Rechnungen für verschiedene obere Gitterenden durchgeführt werden sollen, gilt die obige Aussage nur für das erste Gitter. Die nachfolgenden Gitter erstrecken sich dann entsprechend von

$$x_2 = -\mathtt{DU} - \mathtt{d} + \mathtt{shift} \quad \text{bis} \quad x_2 = h_2(\mathtt{ng}(1) + j \cdot \mathtt{ng}(3)) + \mathtt{DU} + \mathtt{shift}$$

$j = 1, 2, \ldots$, solange bis die Schranke $h_2 \cdot \mathtt{ng}(2)$ erreicht ist.

Zur Überprüfung der Eingabe–Daten ist es ratsam, ein "j" in der Eingabezeile

```
Eingabeauswertung  (j/n)     |   j
```

einzutragen. Dann wird das Programm nach der Auswertung der gelesenen Daten und einem entsprechenden Bildschirmausdruck gestoppt, und die Eingabe–Daten können, wenn erforderlich, geändert werden. Im Beispiel des ursprünglichen Eingabe–Files erhält man folgende Ausgabe:

```
 ======================================================================
     Eingegebene Geometrie - klassische Diffraktion
 ======================================================================

  Anzahl der Schichten unter dem Gitter                    2
  mit den Dicken                                      0.1000
                                                      0.3000
  Refraction indices
  oberhalb des Gitters
   Superstratmaterial           k_+  =  1.0000

  unterhalb des Gitters
   1-tes Schichtmaterial              Si2.0
   2-tes Schichtmaterial        k_ 2 =  2.3500
   Substratmaterial                   Si2.0

  Zimmertemperatur
  Wellenlaengen          0.5350  bis 0.6350  mit Schritt 0.0500
  Beleuchtung von oben
  Einfallswinkel theta    40.0000

  Rechnung fuer TE Polarisation

  Gitterperiode                                       1.0000
  Gitterhoehe                                         1.4000

  Unterteilte Gitterstruktur mit  3 transition points und den Materialien
  von   0.0000  bis   0.4000
           1.2000  -    1.4000              2.2000
           0.6000  -    1.2000              1.8000
           0.2000  -    0.6000              1.8000
           0.0000  -    0.2000              1.4000
  von   0.4000  bis   0.6000
           0.8000  -    1.4000              1.0000
           0.6000  -    0.8000              2.2000
           0.2000  -    0.6000              1.8000
           0.0000  -    0.2000              1.4000
  von   0.6000  bis   1.0000
           0.8000  -    1.4000              1.0000
           0.6000  -    0.8000              2.2000
           0.2000  -    0.6000              1.8000
           0.0000  -    0.2000              2.2000
         Ende  der Eingabeauswertung
```

2.2. Diskretisierung der Helmholtzgleichungen

Für die numerische Lösung wird die inhomogene Struktur des Gitters ohne die möglicherweise vorhandene homogene Zwischenschicht mit einem Rechtecknetz unterteilt, das die Trennflächen zwischen verschiedenen Materialien enthält.

Das entsprechende Rechteck wird um jeweils 2 Diskretisierungsstreifen ober– und unterhalb der inhomogenen Struktur erweitert. Durch die Angabe von zwei weiteren Zahlen `nqo` und `nqu` in der Zeile

```
Schichtzahl oben  unten       |  2 3  nqo nqu
```

kann das Gebiet für die Diskretisierung auch verändert werden, indem nun `nqo` Streifen oberhalb und `nqu` Streifen unterhalb des Rechtecks hinzugefügt werden.

In diesem Gebiet werden die partiellen Differentialgleichungen mit unstetigen Koeffizienten (die aus den stückweise konstanten optischen Indizes bestimmt werden) gelöst. Hierbei werden noch periodische Randbedingungen in x_1-Richtung sowie nichtlokale Randbedingungen am oberen und unteren Rand gestellt, die die Schichtsysteme oder gegebenenfalls die Zwischenschicht und die bekannten Ausstrahlungsbedingungen modellieren. Da in den hinzugefügten Streifen homogenes Material angenommen wird, ist der Wert von $h_2 = h/ng(1)$ so festzulegen, dass $3 \cdot h_2$ kleiner ist als die Dicke der genau über oder unter der Struktur liegenden Schicht. Außerdem sollte die Zwischenschicht breiter als $3 \cdot h_2$ sein.

Ein Finite-Elemente-Ansatz überführt das Diffraktionsproblem in eine gekoppelte Finite-Element/Randelement-Diskretisierung, deren Konvergenz mathematisch gesichert ist. Die Diskretisierung basiert auf einer speziell für Rechtecknetze zugeschnittene neuartige Berechnung der Diskretisierungsmatrix entwickelt (verallgemeinerte FEM), die die Konvergenz der numerischen wesentlich beschleunigt.

2.3. Verfahren zur Lösung der linearen Gleichungssysteme

Die Diskretisierung der zugrunde liegenden partiellen Differentialgleichungen führt auf nichtsymmetrische Blockmatrizen mit teilweise dichtbesetzten Blöcken. Zur Lösung der Gleichungssysteme sind drei Verfahren implementiert. Neben einem speziellen direkten Lösungsverfahren auf der Basis der Block-Progonkamethode, was relativ wenig Hauptspeicher braucht, da Zwischenergebnisse, wenn erforderlich, abgespeichert werden, stehen ein auf dem effektiven Löser für schwach besetzte Gleichungssysteme PARDISO basiertes direktes Verfahren und ein GMRES–basiertes Iterationsverfahren zur Verfügung. Die Namen der jeweiligen Programme sind entsprechend **dirpro**, **dirpar** und **diriter**. Der numerische Aufwand der Verfahren liegt bei etwa $O(m^3 \cdot ng)$ für **dirpro** und $O(m \cdot ng)$ für **diriter** und **dirpar**, wobei m die Anzahl der Unterteilungen der Gitterperiode und ng die entsprechende Anzahl der Unterteilungen in x_2-Richtung ist. Allerdings können bei konkreten Rechnungen die Konstanten vor den asymptotischen Abschätzungen recht unterschiedlich sein.

Im Fall des Iterationsverfahrens hängt diese Konstante und damit die Rechenzeit wesentlich von der Materialverteilung im Gitter und vom Verhältnis von Gitterperiode zur Wellenlänge ab, während die Rechenzeit der direkten Verfahren nur von der Feinheit der Diskretisierung bestimmt wird. Dabei ist das Programm **dirpar** ab einer bestimmten Problemgröße wesentlich effektiver als **dirpro**, allerdings bei bedeutend höherem Hauptspeicherbedarf. Der Zeitaufwand von **dirpar** entspricht etwa dem des iterativen Verfahrens **diriter** mit 35 - 50 Iterationsschritten, ist also in den meisten Fällen die erste Wahl. Allerdings können sich bei geeigneten Parametern und bei einer Serie von Rechnungen durch Verwendung von **diriter** wesentlich kürzere Rechenzeiten ergeben.

2.4. Zur Ausgabe

2.4.1 Rayleigh–Koeffizienten und Effizienzen

Bei Beleuchtung eines periodischen Gitters von oben hat das elektromagnetische Feld außerhalb des Gitters die Darstellung

$$\left.\begin{aligned}\vec{E}(x_1,x_2,x_3) &= \vec{E}^i\, e^{i(\alpha x_1-\beta x_2+\gamma x_3)} + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \vec{A}_n^+ e^{i(\alpha_n x_1+\beta_n^+ x_2+\gamma x_3)} \\ \vec{H}(x_1,x_2,x_3) &= \vec{H}^i\, e^{i(\alpha x_1-\beta x_2+\gamma x_3)} + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \vec{C}_n^+ e^{i(\alpha_n x_1+\beta_n^+ x_2+\gamma x_3)}\end{aligned}\right\}\ \text{oberhalb}$$

$$\left.\begin{aligned}\vec{E}(x_1,x_2,x_3) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \vec{A}_n^- e^{i(\alpha_n x_1-\beta_n^- x_2+\gamma x_3)} \\ \vec{H}(x_1,x_2,x_3) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \vec{C}_n^- e^{i(\alpha_n x_1-\beta_n^- x_2+\gamma x_3)}\end{aligned}\right\}\ \text{unterhalb}$$

mit dem Wellenvektor der einfallenden Welle $\mathbf{k} = (\alpha, -\beta, \gamma)$ und den Koeffizienten

$$\alpha_n = \alpha + 2\pi n/\texttt{per}\ ,\ \beta_n^\pm = \sqrt{\mathrm{k}_\pm^2 - \alpha_n^2 - \gamma^2},$$

wobei $\operatorname{Re}\beta_n^\pm > 0$, $\operatorname{Im}\beta_n^\pm \geq 0$. Hier bezeichnet $k_\pm = \omega\sqrt{\mu\epsilon_\pm}$ mit den Dielektrizitätskoeffizienten $\epsilon_\pm$ von Superstrat bzw. Substrat.

Da die Anteile mit $\operatorname{Im}\beta_n^\pm \geq 0$ für $|x_2| \to \infty$ exponentiell abklingen, besteht das gebeugte Fernfeld aus einer endlichen Anzahl von ebenen Wellen

$$\left.\begin{aligned}\vec{E}_r(x_1,x_2,x_3) &= \sum_{n\in P_+} \vec{A}_n^+ e^{i(\alpha_n x_1+\beta_n^+ x_2+\gamma x_3)} \\ \vec{H}(x_1,x_2,x_3) &= \sum_{n\in P_+} \vec{C}_n^+ e^{i(\alpha_n x_1+\beta_n^+ x_2+\gamma x_3)}\end{aligned}\right\}\ \text{oberhalb}$$

$$\left.\begin{aligned}\vec{E}(x_1,x_2,x_3) &= \sum_{n\in P_-} \vec{A}_n^- e^{i(\alpha_n x_1-\beta_n^- x_2+\gamma x_3)} \\ \vec{H}(x_1,x_2,x_3) &= \sum_{n\in P_-} \vec{C}_n^- e^{i(\alpha_n x_1-\beta_n^- x_2+\gamma x_3)}\end{aligned}\right\}\ \text{unterhalb}$$

den gebeugten Moden, wobei $P_\pm = \{n : \beta_n^\pm \geq 0\}$. Wenn einer der Koeffizienten $\beta_n^\pm = 0$, dann verläuft die entsprechende Welle parallel zur Gitterebene und ihre Energie als Fluss des Poynting-Vektors durch ein Referenzgebiet parallel zur Gitterebene ist Null.

Von Interesse für das Fernfeld sind deshalb nur die auslaufenden ebenen Wellen, für die $\beta_n^\pm > 0$ gilt. Die komplexwertigen Vektoren $\vec{A}_n^\pm$ und $\vec{C}_n^\pm$ der auslaufenden ebenen Wellen sind die Rayleigh–Koeffizienten der gebeugten Moden, und nur die werden von den Programmen ausgegeben.

Zu Ihrer Berechnung wird bei der konischen Diffraktion ein System partieller Differentialgleichungen für die x_3–Komponenten der Vektorfunktionen

$$\vec{E}(x_1,x_2) = \vec{E}(x_1,x_2,x_3)\, e^{-i\gamma x_3}\ ,$$

$$\vec{B}(x_1,x_2) = Z\,\vec{H}(x_1,x_2,x_3)\ e^{-i\gamma x_3}\ ,\quad \text{mit}\quad Z = \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_0}},$$

gelöst. Dabei werden die reellen x_3 –Komponenten der einfallenden Welle so gewählt, dass neben der vorgeschriebenen Polarisation die Normierung

$$\mathrm{n}_+\,|\vec{E}^i|^2 = 1$$

erfüllt ist, das heißt E_3^i und B_3^i erfüllen

$$\mathrm{n}_+\,(E_3^i)^2 + \frac{1}{\mathrm{n}_+}\,(B_3^i)^2 = \frac{k_+^2 - \gamma^2}{k_+^2}\,.$$

Die entsprechenden optischen Indizes werden mit $\mathrm{n}_\pm = \sqrt{\epsilon_\pm/\epsilon_0}$ bezeichnet. Wie bereits erwähnt wurde, ist diese Normierung neu im Vergleich zu älteren Versionen von Dipog. Deshalb können sich die berechneten Rayleigh–Koeffizienten von den mit älteren Programmen berechneten unterscheiden.

Im Fall der in–plane Diffraktion vereinfacht sich das Differentialgleichungssystem zu zwei voneinander unabhängigen Helmholtz-Gleichungen jeweils für die x_3–Komponenten von $\vec{E}$ und $\vec{B}$. Wenn das einfallende Feld nicht TE– oder TM–polarisiert ist, werden beide Gleichungen mit der Normierung

$$\mathrm{n}_+\,(E_3^i)^2 = \frac{1}{\mathrm{n}_+}\,(B_3^i)^2 = 1$$

gelöst und danach die Lösung des Problems als Linearkombination der beiden Lösungen für TE und TM bestimmt. Anderenfalls wird nur die Gleichung für E_3 bzw. B_3 gelöst.

Aus der Lösung der Differentialgleichung werden die Rayleigh–Koeffizienten

$$p_n^\pm := (\vec{A}_n^\pm)_3\,, \quad q_n^\pm := (\vec{B}_n^\pm)_3 = \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_0}}\,(\vec{C}_n^\pm)_3$$

ermittelt. Aus den Werten von $p_n^\pm$ und $q_n^\pm$ lassen sich verschiedene Größen ableiten, die in Abhängigkeit vom `Ausgabetyp` ausgegeben werden.

Die Richtungen der gebeugten Moden werden bei `Ausgabetyp` 1 und 2 mit den in Abb. 4 dargestellten Winkeln θ und ϕ ausgegeben, wobei $0 \le \phi < 360°$ sowie $0° \le \theta < 90°$ bei den reflektierten und entsprechend $90° < \theta \le 180°$ bei den transmittierten Moden ist.

Jeder Mode mit dem Wellenvektor $\mathbf{k}_n^\pm = (\alpha_n, \pm\beta_n^\pm, \gamma)$ wird, wie im Abschnitt 2.1.3 POLARISATION beschrieben, ein strahlfestes Koordinatensystem mit dem Polarisationsvektor $\mathbf{s}_n^\pm$ und $\mathbf{p}_n^\pm$ angeheftet. Sei $\mathbf{k}_n^\pm = k_\pm(a,b,c)$ mit $a^2+b^2+c^2=1$. In Abhängigkeit vom `Ausgabetyp` wird ausgegeben:

1) Die Rayleigh–Koeffizienten des TE– und TM–Anteils $(\vec{A}_n^\pm, \mathbf{s}_n^\pm)$ und $(\vec{B}_n^\pm, \mathbf{s}_n^\pm)$, wobei

$$(\vec{A}_n^\pm, \mathbf{s}_n^\pm) = \frac{a\,p_n^\pm + b\,c\,\sqrt{\epsilon_0/\epsilon_\pm}\,q_n^\pm}{(1-c^2)\sqrt{a^2+c^2}}\,, \quad (\vec{B}_n^\pm, \mathbf{s}_n^\pm) = \frac{a\,q_n^\pm - b\,c\,\sqrt{\epsilon_\pm/\epsilon_0}\,p_n^\pm}{(1-c^2)\sqrt{a^2+c^2}}\,,$$

die Beugungseffizienzen der Anteile

$$\frac{\beta_n^\pm}{\beta}\,\mathrm{n}_+|(\vec{A}_n^\pm, \mathbf{s}_n^\pm)|^2\,, \quad \frac{\beta_n^\pm}{\beta}\,\frac{\mathrm{n}_+}{\mathrm{n}_\pm^2}\,|(\vec{B}_n^\pm, \mathbf{s}_n)|^2\,,$$

sowie deren Summen $e_n^\pm$. Da die Beugungseffizienzen das Verhältnis der Energie der jeweiligen gebeugten Ordnung zur Energie der einfallenden Welle darstellt, werden sie in %

angegeben. Bei dielektrischen Beugungsgittern müsste somit die Summe aller berechneten Beugungseffizienzen 100.0 ergeben.

2) Die Rayleigh–Koeffizienten des S– und P–Anteils $(\vec{A}_n^{\pm}, \mathbf{s}_n^{\pm})$ und $(\vec{A}_n^{\pm}, \mathbf{p}_n^{\pm})$ (d.h. der Jones–Vektor), wobei

$$(\vec{A}_n^{\pm}, \mathbf{s}_n^{\pm}) = \frac{a\, p_n^{\pm} + b\, c\, \sqrt{\epsilon_0/\epsilon_\pm}\, q_n^{\pm}}{(1-c^2)\sqrt{a^2+c^2}}\,, \quad (\vec{A}_n^{\pm}, \mathbf{p}_n^{\pm}) = -\sqrt{\frac{\epsilon_0}{\epsilon_\pm}}\,(\vec{B}_n^{\pm}, \mathbf{s}_n^{\pm}) = \frac{b\, c\, p_n^{\pm} - a\, q_n^{\pm}\sqrt{\epsilon_0/\epsilon_\pm}}{(1-c^2)\sqrt{a^2+c^2}}\,,$$

die Beugungseffizienzen der Anteile

$$\frac{\beta_n^{\pm}}{\beta}\,\mathrm{n}_+ |(\vec{A}_n^{\pm}, \mathbf{s}_n^{\pm})|^2\,, \quad \frac{\beta_n^{\pm}}{\beta}\,\mathrm{n}_+ |(\vec{A}_n^{\pm}, \mathbf{p}_n^{\pm})|^2\,,$$

sowie deren Summen $e_n^{\pm}$ (wiederum in %).

3) Die Werte $p_n^{\pm}$ und $q_n^{\pm}$ (die Rayleigh–Koeffizienten der x_3–Komponenten von $\vec{E}$ und $\vec{B}$) sowie in % die entsprechenden Beugungseffizienzen

$$e_n^{+} = \frac{\beta_n^{+}}{\beta}\,\frac{\mathrm{n}_+ k_+^2}{k_+^2 - \gamma^2}\left(|p_n^{+}|^2 + \frac{|q_n^{+}|^2}{\mathrm{n}_+^2}\right), \quad e_n^{-} = \frac{\beta_n^{-}}{\beta}\,\frac{\mathrm{n}_+ k_-^2}{k_-^2 - \gamma^2}\left(|p_n^{-}|^2 + \frac{|q_n^{+}|^2}{\mathrm{n}_-^2}\right).$$

2.4.2 Ein- und Ausgabe bei konischer Diffraktion

Nachfolgend ein Beispiel des Eingabefiles und der Ausgabe bei konischer Diffraktion. Es wird eine in Schichtsysteme eingebettete Struktur mit einer leicht absorbierenden Zwischenschicht schräg beleuchtet, und zwar ist der Winkel zwischen (E_x, E_z) und der x_1–Achse $\psi = 45°$. Die Einfallswinkel sind in Kugelkoordinaten (wegen `K45.0`) mit $\theta = 36.4°$, $\phi = 10°$ gegeben. Die obere Begrenzung der Gesamtstruktur liegt bei $x_2 = 0.0$. Es sollen neben den Beugungseffizienzen die Jones-Vektoren der einzelnen Ordnungen ausgegeben werden.

```
=====================================================================
  Dateneingabe f"ur direktes Problem bei Gittern mit Schichtsystemen
---------------------------------------------------------------------
Ausgabe-File,  Ausgabetyp    |  beisp.erg 2
pol \ TE \ TM ,  level       |  K45.0  1
---------------------------------------------------------------------
Per., ob. Gitterende, shift  |   .8 .8  -.8
m (x-Diskr), ng(3) (Gitter)  |   100 100 100 0
lambda  (Vn) (von bis step)  |   v1 .835
theta   (Vn) (von bis step)  |   v1 36.4
phi     (Vn) (von bis step)  |   v1 10.
Temperatur                   |
---------------------------------------------------------------------
     Materialien und Schichten
---------------------------------------------------------------------
k_+, k_- (Super- , Substrat) | 1.0  1.4
Schichtzahl oben  unten      |  2 3
obere Schichtdicken (sdo)    |  1.5 .8
 ko_j, (j=1,nzo)             |  2.35 1.45
untere Schichtdicken (sdu)   |  .9 .2  .5
 ku_j, (j=1,nzu)             | 2.1 2.35  1.6
 Materialien, Zw.-schicht    | 2 3 2 2.0  (1.3,0.01)
 kg_j, der 1. Schicht        | 1.0   1.3
 kg_j, der 2. Schicht        | 1.3   1.4
 kg_j, der 3. Schicht        | 1.4   1.6
----------------------------------------------------------------------
Eingabeauswertung  (j/n)     |
Auswertung des Feldes        |
----------------------------------------------------------------------
Anzahl der Gitter            |   1
Anzahl Gitterpunkte          |   2
skal. x-Koordinaten  x_i     |   0. .6
H"ohen in 1. Unterteilung    |  7  8
H"ohen in 2. Unterteilung    |  4  4
----------------------------------------------------------------------
```

Die nächste Seite zeigt das Ergebnisfile "beisp.erg", dazu einige Erklärungen. In den Zeilen `REJ:` und `TRJ:` sind die berechneten Ergebnisse für Reflexion und Transmission enthalten. Nach der Nummer der Ordnung kommen die Winkel ϕ, θ für die Richtung der Mode in Kugelkoordinaten. Danach folgen durch "|" abgetrennt die Rayleigh–Koeffizienten des S– und P–Anteils des elektrischen Felds in dieser Richtung sowie die sich daraus ergebende Effizienz. Am Ende die Gesamteffizienz der Ordnung. Dabei hängt der Polarisationsvektor **s** als Vektorprodukt vom Wellenvektor der Mode mit der Richtung der x_2-Achse von der jeweiligen Mode ab. Die einzelnen S– und P–Anteile der Lösung lassen sich mit dem Unix-Kommando

```
grep 'REF:' beisp.erg | cut -d'|' -f2
```

oder analog, aus dem Ergebnisfile herausziehen.

```
   Berechnung von Effizienzen f"ur bin"are Gitter mit Schichtsystemen
       konische Diffraktion              Dipog-1.4  WIAS-Berlin

GIW- Gitterperiode d
GIH- oberer Gitterrand, unterer Gitterrand, Verh"altnis h/d
GSH- obere, untere Begrenzung der Gesamtstruktur
POE- Winkel (E_x,E_z) zur x-Achse, |E|
SOD- Anzahl der oberen Schichten, deren Dicken
SUD- Anzahl der unteren Schichten, deren Dicken
WEL- Wellenl"ange
KOS- Angabe der Einfallswinkel
EFO- Einfall von oben Winkel theta
EWP- Einfallswinkel phi
TMP- Temperatur
DIG- Unterteilungen in x-Richtung und im Gitter, Gesamtzahl der Unbekannten
DKO- Diffraktionskoeffizienten  der Schichten oberhalb des Gitters
DKU- Diffraktionskoeffizienten  der Schichten unterhalb des Gitters
DKG- Diffraktionskoeffizienten  des Gittermaterials
VUR- Vertikale Unterteilung in Rechtecken
TPS- Transition points, skaliert auf [0,1]
TPU- Transition points in mu
REJ- Reflexion - Ordnung, spher. Winkel, im strahlfesten Koord.-System:
     S-Koeff. u. Effizienz, P-Koeff. u. Effizienz, Gesamteffizienz
TRJ- Transmission - Ordnung, spher. Winkel, im strahlfesten Koord.-System:
     S-Koeff. u. Effizienz, P-Koeff. u. Effizienz, Gesamteffizienz
GEM- Summe der Effizienz (S,P,Gesamt)  - Reflexion, Transmission
INT- Integration der Gleichung mit FEM oder GFEM
DCT- Datum und Rechenzeit

INT:   GFEM
GIW:     0.80000
GIH:     0.00000   -2.80000    3.50000
SOD:    2       1.50000     0.80000
SUD:    3       0.90000     0.20000     0.50000
GSH:     2.30000   -4.40000
POE:    45.00000    1.00000
KOS:   Kugelkoordinaten
TMP:    20.00000
DIG:     100     105       22000
WEL:    0.8350000
DKO:  1.0  2.35  1.45
DKU:  2.1  2.35  1.6  1.4
EWP:   10.00000
EFO:   36.40000
TPS:     0.0000    0.6000
TPU:     0.0000    0.4800
DKG:  1.0  1.3
VUR:    -0.7440   -0.7360
DKG:  1.3  1.4
VUR:    -0.7680   -0.7680
DKG: (1.3,0.01)(1.3,0.01)
VUR:    -2.7680   -2.7680
DKG:  1.4  1.6
REJ:   0  10.00  36.40|( 0.26740, 0.13900)  9.0824|( 0.33621, 0.17036) 14.2060| 23.2884
REJ:  -1 167.36  28.08|( 0.09227,-0.03533)  1.0700|( 0.04995,-0.00218)  0.2740|  1.3440
TRJ:   0  10.00 154.92|( 0.02966,-0.18877)  5.7525|(-0.03384, 0.47830) 36.2201| 41.9726
TRJ:  -1 167.36 160.35|(-0.06898, 0.19928)  7.2846|( 0.01554,-0.07820)  1.0414|  8.3260
GEM:    10.1524   14.4800   24.6324   |   13.0371   37.2615   50.2986
DCT:   beendet am 22.Aug 2003 um 13:41:42,    Rechenzeit:     3.81 sec
```

2.4.3 Ausgabe bei klassischer Diffraktion

Hier gelten die Beziehungen $c = \gamma = 0$ und $\mathbf{s} = |a|^{-1}(0, 0, a)$. Deshalb ist

$$(\vec{A}_n^{\pm}, \mathbf{s}_n^{\pm}) = \mathrm{sign}(a)\, p_n^{\pm}\,, \quad (\vec{B}_n^{\pm}, \mathbf{s}_n^{\pm}) = \mathrm{sign}(a)\, q_n^{\pm}\,.$$

Im Fall, dass (E_1^i, E_3^i) mit der x_1–Achse einen Winkel ψ verschieden von 0° oder 90° bildet, also nicht TE– oder TM–polarisiert ist (siehe Abschnitt 2.1.4), entstehen bei in–plane

Diffraktion zwei Probleme für den TE– und den TM–polarisierten Anteil des Gesamtfeldes, die unabhängig voneinander gelöst werden. Dann ergibt sich die Gesamtlösung als Linearkombination

$$\vec{E} = \vec{E}_\psi = \frac{\sin\psi\,\cos\theta}{\sqrt{\sin^2\psi\,\cos^2\theta + \cos^2\psi}}\,\vec{E}_0 + \frac{\cos\psi}{\sqrt{\sin^2\psi\,\cos^2\theta + \cos^2\psi}}\,\vec{E}_{90}$$

und damit die Rayleigh–Koeffizienten

$$p_n^\pm = \frac{\sin\psi\,\cos\theta}{\sqrt{\sin^2\psi\,\cos^2\theta + \cos^2\psi}}\,(\vec{A}_n^\pm)_3\,, \quad q_n^\pm = \frac{\cos\psi}{\sqrt{\sin^2\psi\,\cos^2\theta + \cos^2\psi}}\,(\vec{B}_n^\pm)_3$$

wobei $(\vec{A}_n^\pm)_3$ und $(\vec{B}_n^\pm)_3$ die entsprechenden Rayleigh–Koeffizienten für das reine TE– bzw. TM–Problem sind.

Deshalb werden im Ergebnisfile bei in-plane Diffraktion in diesem Fall zuerst die Ergebnisse für die beiden Teilprobleme und danach das richtige Ergebnis für das Gesamtfeld ausgegeben. Dabei kann zwischen den drei Ausgabetypen gewählt werden.

Die Angabe der Ausfallwinkel der gebeugten Moden erfolgt bei den Typen 1 und 2 wie in 2.1.7 beschrieben mittels Kugelkoordinaten (mit den in Abb. 4 dargestellten Winkeln θ und ϕ), wie im Ausschnitt des Ergebnisfiles vom Beispiel aus 2.1.1 mit Polarisation $\psi = 15°$ und Ausgabetyp 1 zu sehen ist:

```
REF:   0   0.00  40.00|(-0.06176,-0.00140)  0.3817|(-0.00017, 0.10902)  1.1884|  1.5701
REF:  -1   0.00   6.19|(-0.03710,-0.07995)  1.0081|(-0.20241,-0.07458)  6.0390|  7.0471
REF:  -2 180.00  25.29|(-0.00487,-0.03206)  0.1241|( 0.11017,-0.20492)  6.3888|  6.5130
REF:  -3 180.00  74.20|( 0.06049,-0.02266)  0.1483|( 0.44515,-0.22072)  8.7754|  8.9237
TRA:   0   0.00 153.89|( 0.04946,-0.02598)  0.5343|( 0.16559,-0.52223) 24.0890| 24.6233
TRA:   1   0.00 126.25|(-0.06097,-0.03697)  0.5733|(-0.31272, 0.13644)  6.1529|  6.7262
TRA:  -1   0.00 175.77|( 0.01537, 0.01689)  0.0992|( 0.29599, 0.15847) 10.0472| 10.1464
TRA:  -2 180.00 162.99|( 0.03734, 0.03267)  0.4488|(-0.11584, 0.12842)  2.5565|  3.0053
TRA:  -3 180.00 138.79|(-0.05259, 0.04784)  0.7250|( 0.50404, 0.45034) 30.7199| 31.4449
```

Bei Typ 3 wird der Winkel θ_j, den die reflektierte und transmittierte Ordnung mit der x_2–Achse in der oberen bzw. der unteren Halbebene bildet. Das gleiche Beispiel liefert bei Ausgabetyp 3 die folgende Auflistung der Werte von der Ordnung j, θ_j, E_z–Koeffizient, Effizienz, H_z–Koeffizient, Effizienz, und Gesamteffizienz:

```
REZ:   0  40.00 |(-0.06176,-0.00140)  0.3817|(-0.00017, 0.10902)  1.1884|  1.5701
REZ:  -1   6.19 |(-0.03710,-0.07995)  1.0081|(-0.20241,-0.07458)  6.0390|  7.0471
REZ:  -2 -25.29 |( 0.00487, 0.03206)  0.1241|(-0.11017, 0.20492)  6.3888|  6.5130
REZ:  -3 -74.20 |(-0.06049, 0.02266)  0.1483|(-0.44515, 0.22072)  8.7754|  8.9237
TRZ:   0  26.11 |( 0.04946,-0.02598)  0.5343|( 0.16559,-0.52223) 24.0890| 24.6233
TRZ:   1  53.75 |(-0.06097,-0.03697)  0.5733|(-0.31272, 0.13644)  6.1529|  6.7262
TRZ:  -1   4.23 |( 0.01537, 0.01689)  0.0992|( 0.29599, 0.15847) 10.0472| 10.1464
TRZ:  -2 -17.01 |(-0.03734,-0.03267)  0.4488|( 0.11584,-0.12842)  2.5565|  3.0053
TRZ:  -3 -41.21 |( 0.05259,-0.04784)  0.7250|(-0.50404,-0.45034) 30.7199| 31.4449
```

Nachfolgend ein Ausschnitt des Ergebnisfiles, den das Programm bei Eingabe von Beispiel 2.1.1 bei Polarisation $\psi = 15°$ und Ausgabetyp 2 liefert:

```
POE- Winkel (E_x,E_z) zur x-Achse, |E|
TPS- Transition points, skaliert auf [0,1]
TPU- Transition points in mu
TER- Reflexion des TE-Anteils - Ordnung, spher. Winkel, Koeffizient und Effizienz
TET- Transmission des TE-Anteils - Ordnung, spher. Winkel, Koeffizient und Effizienz
GTE- Gesamteffizienz des TE-Anteils - Reflexion, Transmission
TMR- Reflexion des TM-Anteils - Ordnung, spher. Winkel, Koeffizient und Effizienz
TMT- Transmission des TM-Anteils- Ordnung, spher. Winkel, Koeffizient und Effizienz
GTM- Gesamteffizienz des TM-Anteils - Reflexion, Transmission
EPR- Reflexion des TM-Anteils - Ordnung, spher. Winkel, P-Koeffizient und Effizienz
EPT- Transmission des TM-Anteils- Ordnung, spher. Winkel, P-Koeffizient und Effizienz
GTM- Gesamteffizienz des TM-Anteils - Reflexion, Transmission
REJ- Reflexion - Ordnung, spher. Winkel,
     S-Koeff. u. Effizienz, P-Koeff. u. Effizienz, Gesamteffizienz
TRJ- Transmission - Ordnung, spher. Winkel,
     S-Koeff. u. Effizienz, P-Koeff. u. Effizienz, Gesamteffizienz
GEM- Summe der Effizienz (S,P,Gesamt)  - Reflexion, Transmission

GIW:     1.00000
GIH:     1.40000    0.00000    1.40000
SOD:    0
SUD:    2       0.10000     0.30000
GSH:     1.40000   -0.40000
POE:    15.00000    1.00000
TMP:    20.00000
EWP:     0.00000
DIG:      50      70        3750
WEL:    0.5350000
DKO:  1.0
DKU:  1.4606  2.35  1.4606
EFO:    40.00000
TPS:     0.0000    0.4000    0.6000
TPU:     0.0000    0.4000    0.6000
DKG:  2.2  1.0  1.0
VUR:     1.2000    0.8000    0.8000
DKG:  1.8  2.2  2.2
VUR:     0.6000    0.6000    0.6000
DKG:  1.8  1.8  1.8
VUR:     0.2000    0.2000    0.2000
DKG:  1.4  1.4  2.2
TER:    0    0.00  40.00   (-0.30717,-0.00694)       9.4405
TER:   -1    0.00   6.19   (-0.18452,-0.39761)      24.9363
TER:   -2  180.00  25.29   (-0.02421,-0.15947)       3.0706
TER:   -3  180.00  74.20   ( 0.30086,-0.11268)       3.6690
TET:    0    0.00 153.89   ( 0.24597,-0.12922)      13.2167
TET:    1    0.00 126.25   (-0.30324,-0.18388)      14.1805
TET:   -1    0.00 175.77   ( 0.07646, 0.08400)       2.4531
TET:   -2  180.00 162.99   ( 0.18569, 0.16248)      11.1001
TET:   -3  180.00 138.79   (-0.26155, 0.23794)      17.9334
GTE:       41.1163       58.8837
EPR:    0    0.00  40.00   ( 0.00017,-0.11129)       1.2385
EPR:   -1    0.00   6.19   ( 0.20663, 0.07613)       6.2934
EPR:   -2  180.00  25.29   (-0.11247, 0.20919)       6.6580
EPR:   -3  180.00  74.20   (-0.45443, 0.22532)       9.1451
EPT:    0    0.00 153.89   (-0.11574, 0.36501)      25.1039
EPT:    1    0.00 126.25   ( 0.21858,-0.09536)       6.4121
EPT:   -1    0.00 175.77   (-0.20688,-0.11076)      10.4705
EPT:   -2  180.00 162.99   ( 0.08097,-0.08976)       2.6642
EPT:   -3  180.00 138.79   (-0.35230,-0.31476)      32.0142
GTM:       23.3351       76.6649
REJ:   0   0.00  40.00|(-0.06176,-0.00140)  0.3817|( 0.00017,-0.10902)  1.1884|  1.5701
REJ:  -1   0.00   6.19|(-0.03710,-0.07995)  1.0081|( 0.20241, 0.07458)  6.0390|  7.0471
REJ:  -2 180.00  25.29|(-0.00487,-0.03206)  0.1241|(-0.11017, 0.20492)  6.3888|  6.5130
REJ:  -3 180.00  74.20|( 0.06049,-0.02266)  0.1483|(-0.44515, 0.22072)  8.7754|  8.9237
TRJ:   0   0.00 153.89|( 0.04946,-0.02598)  0.5343|(-0.11338, 0.35756) 24.0890| 24.6233
TRJ:   1   0.00 126.25|(-0.06097,-0.03697)  0.5733|( 0.21412,-0.09341)  6.1529|  6.7262
TRJ:  -1   0.00 175.77|( 0.01537, 0.01689)  0.0992|(-0.20265,-0.10850) 10.0472| 10.1464
TRJ:  -2 180.00 162.99|( 0.03734, 0.03267)  0.4488|( 0.07932,-0.08793)  2.5565|  3.0053
TRJ:  -3 180.00 138.79|(-0.05259, 0.04784)  0.7250|(-0.34511,-0.30833) 30.7199| 31.4449
GEM:      1.6623   22.3916   24.0539  |    2.3806   73.5654   75.9460
DCT:   beendet am 22.Aug 2003 um 13:26:10,    Rechenzeit:     0.32 sec
```

2.5. Weitere Auswertungen der ermittelten Lösungen

Wenn zur Bestimmung der Effizienzen die Programme **dirpar** oder **diriter** benutzt werden, können neben der Berechnung der Effizienzen und Rayleigh–Koeffizienten weitere Auswertungen der berechneten elektromagnetischen Felder vorgenommen werden. Das betrifft die zahlenmäßige Ausgabe von Werten der x_3 –Komponenten der Felder $\vec{E}$ und $\vec{B}$, des Poynting–Vektors sowie die graphische Ausgabe verschiedener abgeleiteter Größen mittels "gnuplot" oder dem auf OpenGL basierten Programms "gltools" vom WIAS Berlin. Der Hinweis (k) in der nachfolgenden Tabelle bedeutet, dass die entsprechende Auswertung auch für die konische Diffraktion implementiert ist, wobei die Darstellung in der Ebene $(x_1, x_2, 0)$ erfolgt.

Die zusätzliche Auswertung erfolgt, wenn in der Eingabezeile

```
Auswertung des Feldes         | N
```

ein ganzzahliger Parameter `N` gesetzt wird, der folgende Bedeutung hat:

```
 0: es passiert nichts
 1: Ausgabe der komplexen Feldwerte in den Knotenpunkten der
    Diskretisierung in die Files Efield.dat bzw. Hfield.dat (k)
 2: Ausgabe der komplexen Feldwerte in den Knotenpunkten durch gnuplot (k)
 3: Ausgabe des reellen Poynting-Verktors in den Knotenpunkten der
    Diskretisierung in die Files Efield.dat bzw. Hfield.dat
    x_1 und x_2 Koordinate sowie Laenge
 4: Grafische Ausgabe dieses Vektors durch Gnuplot
 5: 3d-Ausgabe der Energiestromdichte
    (Realteil der y-Projektion des Poynting-Verktors) ueber Gitter (k)
 6: 3d-Ausgabe der Energiedichte (|E|, |H|) ueber Gitter
 7: 3d-Ausgabe der Intensitaet und der Phase ueber Gitter
 8: animierte 3d-Ausgabe des Realteil des Feldes ueber Gitter

11: Ausgabe der komplexen Feldwerte ober- bzw. unterhalb des Gitters
    in die Files Efield.dat bzw. Hfield.dat (k)
    dazu muessen jeweils 2 y-Koordinaten sowie die Zahl der
    Unterteilungen angegeben werden
12: Grafische Ausgabe dieser Werte durch Gnuplot (k)
13: Ausgabe der komplexen Werte der Energiestromdichte
    (y-Projektion des Poynting-Verktors) ober- bzw. unterhalb des Gitters
    in die Files Efield.dat bzw. Hfield.dat
    dazu muessen jeweils 2 y-Koordinaten sowie die Zahl der
    Unterteilungen angegeben werden
14: Grafische Ausgabe dieser Werte durch Gnuplot
15: Ausgabe der x- und y-Komponente  des reellen Poynting-Verktors
    ober- bzw. unterhalb des Gitters in die Files Efield.dat bzw. Hfield.dat
    dazu muessen jeweils 2 y-Koordinaten sowie die Zahl der
    Unterteilungen angegeben werden
16: Grafische Ausgabe dieser Werte durch Gnuplot
17: 3d-Ausgabe der Energiestromdichte ober- bzw. unterhalb des Gitters
18: 3d-Ausgabe der Intensit"at (Quadrat des Feldwertes)
    ober- bzw. unterhalb des Gitters
19: animierte 3d-Ausgabe des Realteils des Feldes
    ober- bzw. unterhalb des Gitters

21: Ausgabe der komplexen Feldwerte in der Zwischenschicht
    in die Files Efield.dat bzw. Hfield.dat (k)
    dazu muessen jeweils 2 y-Koordinaten sowie die Zahl der
    Unterteilungen angegeben werden
```

```
22: Grafische Ausgabe dieser Werte durch Gnuplot (k)
23: Ausgabe der komplexen Werte der Energiestromdichte
    (y-Projektion des Poynting-Verktors)
    in der Zwischenschicht in die Files Efield.dat bzw. Hfield.dat
    dazu muessen jeweils 2 y-Koordinaten sowie die Zahl der
    Unterteilungen angegeben werden
24: Grafische Ausgabe dieser Werte durch Gnuplot
25: Ausgabe der x- und y-Komponente  des reellen Poynting-Verktors
    in der Zwischenschicht in die Files Efield.dat bzw. Hfield.dat
    dazu muessen jeweils 2 y-Koordinaten sowie die Zahl der
    Unterteilungen angegeben werden
26: Grafische Ausgabe dieser Werte durch Gnuplot
27: 3d-Ausgabe der Energiestromdichte  in der Zwischenschicht
28: 3d-Ausgabe der Intensit"at in der Zwischenschicht
29: animierte 3d-Ausgabe des Realteils des Feldes in der Zwischenschicht
```

3. Optimaler Entwurf bei fester Wellenlänge und Einfallswinkel

Die Programme zur Optimierung sollen Gitterformen bestimmen, die vorgegebene Fernfeldmuster liefern. Bisher wird nur der Fall binärer Strukturen in Schichtsystemen und die klassische Diffraktion behandelt, d.h. die einfallende Welle liegt in der (x_1, x_2)–Ebene.

Die Bestimmung der beugenden Struktur aus dem Fernfeld gehört zu den so genannten inversen Problemen, deren theoretische und praktische Untersuchung viele offene Fragen aufwirft. So ist zum Beispiel nicht bekannt, ob jedes physikalisch denkbare Fernfeld von einem Beugungsgitter generiert werden kann, ebenso sind Fragen der Eindeutigkeit und Stabilität der Lösung nur für Spezialfälle untersucht.

In der Regel ist es deshalb nicht möglich, in der Klasse der binären Gitter eine Struktur zu bestimmen, die eine einfallende Welle in ein gewünschtes Fernfeld beugt. Die Programme versuchen deshalb, in einer bestimmten Geometrieklasse eine Struktur zu bestimmen, die das Fernfeld möglichst gut approximiert. Ein Beispiel ist schematisch in Abb. 6 angegeben, wobei eine optimale Gittergeometrie gesucht wird mit 8 verschiedenen Materialien pro Periode und 3 darüber– und 2 darunterliegenden Schichten. Mit fest vorgegebener Gitterperiode und vorgeschriebenen Materialien soll ein gewünschtes Diffraktionsmuster angenähert werden, wobei die Lage einzelner oder aller Gitterpunkte, die Gesamthöhe der inhomogenen Struktur, die Teilhöhen und die Schichtdicken variieren können. Dabei kann die Optimierung für einfallende ebene Wellen sowohl mit fixierter Länge und Einfallswinkel als auch aus einem Bereich von Wellenlängen oder Einfallswinkeln durchgeführt werden.

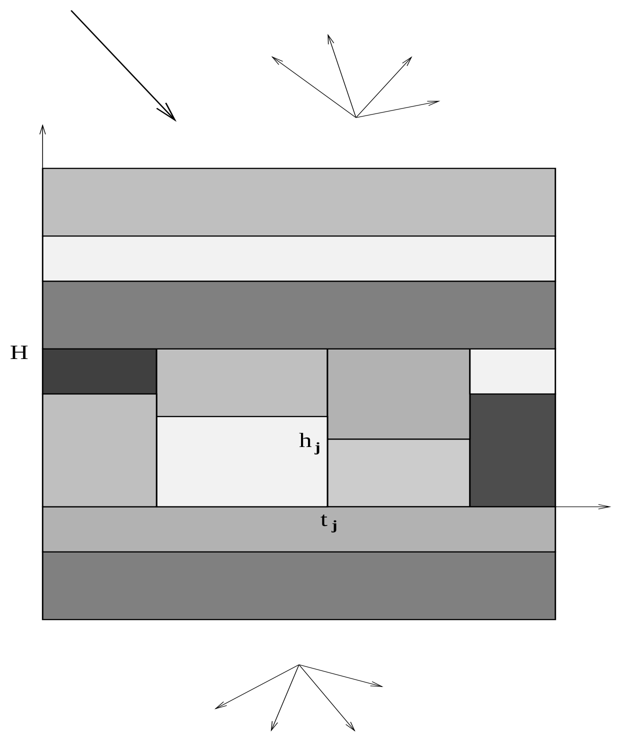

Abb. 6. Beispiel für Geometrieklasse bei Optimierung

In diesem Abschnitt werden die Eingabefiles und die Ausgabe der Programme **optpro**, **optpar** und **optiter** beschrieben, die das Optimierungsproblem mit fest vorgegebener Wellenlänge und Einfallswinkel der Beleuchtung behandeln. Entsprechend dem gewünschten Diffraktionsmuster werden Zielfunktionale aufgestellt, deren lokale Minima mittels gradientenbasierter Optimierungsverfahren bestimmt werden; die entsprechenden Lösungen werden hier als optimale Gitter bezeichnet. Die Zielfunktionale besitzen in der Regel allerdings eine Vielzahl lokaler Minima, so dass die Bestimmung eines wirklich optimalen Gitters nur durch mehrmaliges Durchrechnen des Optimierungszyklus mit unterschiedlichen Startgittern möglich ist.

Als Optimierungsziele sind implementiert

- Maximierung und Minimierung von Reflexions- bzw. Transmissioneffizienzen bestimmter Ordnungen
- Annahme vorgegebener Werte durch Reflexions- bzw. Transmissioneffizienzen bestimmter Ordnungen
- Annahme einer vorgegebenen Phasenverschiebung in einer Ordnung zwischen den TE– und TM–Anteilen bei Reflexion oder Transmission
- Maximierung und Minimierung der reflektierten oder transmittierten Gesamtenergie
- Annahme vorgegebener Werte durch die reflektierte oder transmittierte Gesamtenergie

Dabei ist die Polarisation der einfallenden Welle beliebig einstellbar, in vielen Fällen ist neben der Optimierung der Effizienz von Ordnungen auch die Optimierung der Effizienz der TE– und TM–polarisierten Anteile möglich.

Im nächsten Kapitel werden Programme beschrieben, mit denen das Optimierungsproblem über einem Wellenlängen– oder Einfallswinkelbereichs behandelt werden kann. Dabei wird ein optimales Gitter gesucht, dass ein gewünschtes Diffraktionsmuster oder bestimmte Effizienzverläufe über diesem Bereich annähert.

Die Suche nach Minima der Zielfunktionen erfolgt durch Optimierungsverfahren, die auf der Auswertung der Ableitungen dieser Funktionen nach den Geometrieparametern basieren. Es sind 2 Verfahren implementiert: Beim ersten wird die Suchrichtung durch konjugierte Gradienten bestimmt, während das zweite auf der so genannten Inneren Punkt Methode basiert, die zur Bestimmung der Suchrichtung zusätzlich Approximationen der Hessematrix benutzt.

Zur Lösung der diskretisierten Helmholtz– und der dualen Gleichungen zur Berechnung der Gradienten sind die gleichen Lösungsverfahren für lineare Systeme wie beim direkten Problem implementiert, worauf der zweite Teil des Namens der Programme hindeutet.

Bei ausreichendem Hauptspeicher sind auch hier die auf PARDISO basierten Programme vorzuziehen, bei geringer Variation der Brechungsindizes der Gittermaterialien kann das Programm **optiter** auf der Basis des Iterationsverfahrens Rechenzeiteinsparungen liefern. Wie bereits erwähnt wurde, gibt es in der Regel mehrere lokale Minima der Zielfunktionale. Da das Iterationsverfahren die linearen Gleichungen mit einem relativen Fehler von 10^{-6} löst, ist es durchaus möglich, dass selbst bei gleichen Startwerten und Algorithmen Iterations- und direkte Verfahren verschiedene optimale Strukturen liefern.

3.1. Beschreibung des Eingabe–Files

3.1.1 Beispiel

```
==========================================================================
  Dateneingabe fu"r optimales Design-Problem bei Gittern mit Schichtsystemen
--------------------------------------------------------------------------
Ausgabe-File,  Ausgabetyp     |   stair.erg  1
pol \ TE \ TM ,  level        |   45   2
--------------------------------------------------------------------------
Periode:per  Gitterh"ohe:h    |   1.2   1.2
m (x-Diskr), ng (Gitter)      |   40 40
lambda  (Vn) (von bis step)   |   .876 .876 0
theta   (Vn) (von bis step)   |   v1 21.41
Temperatur                    |   20.
--------------------------------------------------------------------------
     Schichten und Materialien
--------------------------------------------------------------------------
k_+, k_- (Super- , Substrat)  |   1.0 Ag
Schichtzahl oben  unten       |   0   1
obere Schichtdicken (sdo)     |
 ko_j, (j=1,nzo)              |
untere Schichtdicken (sdu)    |   1.
 ku_j, (j=1,nzu)              |   Si2.0
--------------------------------------------------------------------------
     Gitterstruktur und Materialien
--------------------------------------------------------------------------
Anz. Gitterpunkte,Unterteil   |   4   2
skal. x-Koordinaten  x_i      |   .0  .25 .5 .75
H"ohen in Unterteilung n_i    |   10 10 20 30
 kg_j, (j=1,3,5..nzgi) oben   |   Air  Air  Air  Air
 kg_j, (j=2,4,6..nzgi) unten  |   Air  Si2.0 Si2.0 Si2.0
--------------------------------------------------------------------------
Eingabeauswertung  (j/n)      |
--------------------------------------------------------------------------
                   Optimierungsteil
--------------------------------------------------------------------------
Funk.-Nr., Methode, Abstieg   |   1  1  .15
zu opt. Ord.:Reflex.-Trans.   |   1  0
--------------------------------------------------------------------------
Reflextionsordnungen          | -1
Wert_r                        |  1.
Transmissionsordnungen        |
Wert_t                        |
--------------------------------------------------------------------------
           zu optimierende Parameter
--------------------------------------------------------------------------
H"ohe in Untert.,  Breiten    |   3 0
Nummer H"ohen, gesamt:0,      |   2 3 4
Gleichheit von Teilrechtecken|
Nummer Gitterpunkt            |
obere Schichten (Periode)     |
Nummer obere  Schichten,      |
untere Schichten (Periode)    |    1 0
Nummer untere Schichten       |    1
--------------------------------------------------------------------------
     technologische Restriktionen ( in Mikrometer)
--------------------------------------------------------------------------
min. und max.   Gesamth"ohe   |
minimale  Teilh"ohen          |    .03
minimale Breiten (skaliert)   |
min. und max. Schichtdicken   |    .05 20.
==========================================================================
```

3.1.2 Geometrie–Eingabe

Im Eingabe–File werden die Geometrie des Startgitters für den Optimierungsprozess und die Optimierungsziele beschrieben, wobei die Eingabekonventionen und viele Eingabezeilen denen für die Lösung des direkten Problems entsprechen.

```
Ausgabe-File,  Ausgabetyp    |   stair.erg    1
pol \ TE \ TM ,  level       |   45   2
```

Die Angabe eines Namens des Ergebnisfiles ist optional. Wenn kein Name angegeben wird, wird er wieder aus dem Namen des Eingabefiles gebildet nach der Regel `basename.erg`. Das Ergebnisfile enthält die ermittelten optimalen Gitterformen, außerdem wird ein Hilfsfile geschrieben, in dem die Ergebnisse aller Suchschritte enthalten sind. Es wird unter dem Namen `opt<Name Ausgabe-File>` abgelegt. Soll das Ergebnisfile in einem anderen Verzeichnis angelegt werden, z. B. durch die Angabe `../results/stair.erg`, dann ist das Hilfsfile entsprechend `../results/optstair.erg`.

Der `Ausgabetyp` kann 1, 2 oder 3 sein und entspricht der Ausgabe beim direkten Problem und klassischer Diffraktion (siehe Abschnitt 2.4.3).

Ebenso ist die Angabe der Polarisation `TE \ TM` oder des Winkels `pol`, den die Projektion des einfallenden elektrischen Feldes in der (x_1, x_3)–Ebene (E_1^i, E_3^i) mit der x_1–Achse bildet, analog zur Eingabe bei der direkten in-plane Diffraktion. Konische Diffraktion $(\phi \neq 0)$ kann bisher noch nicht untersucht werden.

Der Parameter `level` gibt an, für wieviele Diskretisierungsstufen die Optimierung durchgeführt wird. Bei `level` > 1 wird das in der vorigen Stufe ermittelte optimale Gitter als Startgitter für eine neue Suche mit doppelt feiner Unterteilung bei der Finite–Element–Methode gewählt. Somit bedeutet `level` $= j$ hier die kleinste Schrittweite $2^{1-j}h$, im Gegensatz dazu bedeutet beim direkten Problem diese Angabe, dass die kleinste Schrittweite nur h/j beträgt.

Wie bei der Eingabe zur direkten Berechnung von Effizienzen wird durch

```
Periode:per  Gitterhoehe:h    |   1.2   1.2
m (x-Diskr), ng (Gitter)      |   40 40
```

die Ausdehnung und Diskretisierung des Startgitters für die Optimierung festgelegt. Die Gitterperiode beträgt hier `per` $= 1.2\,\mu$m, die für die Diskretisierung in `m` $= 40$ Teilintervalle unterteilt wird. Die Strecke von $x_2 = 0$ bis `Gitterhoehe` beträgt `h` $= 1.2\,\mu$m, die ebenfalls in `ng` $= 40$ Teilintervalle unterteilt wird. Somit wird die Größe der Unterteilungsrechtecke für die Diskretisierung der Gleichungen mit (h_1, h_2) mit $h_1 =$ `per/m`, $h_2 =$ `h/ng` festgelegt, und die weiteren Rechnungen innerhalb des Optimierungszyklus werden mit dieser Diskretisierung durchgeführt. Da die Grenzen zwischen unterschiedlichen Materialien immer auf dem durch die Diskretisierung gegebenem Rechtecknetz liegen müssen, sind während der Optimierung nur Geometrievariationen der inhomogenen Struktur, wie Veränderungen von Gitterpunkten oder Teilhöhen, auf diesem Rechtecknetz möglich. Nachdem der Algorithmus eine optimale Struktur bestimmt hat und `level` > 1 ist, wird diese Struktur als Startgitter für eine neue Suche mit doppelt feiner Unterteilung benutzt.

Bei der Eingabe von Wellenlänge `lambda` und Einfallswinkel `theta` gelten dieselben Konventionen wie beim direkten Problem,

```
lambda  (Vn) (von bis step)  |  .876 .876 0
theta   (Vn) (von bis step)  |  v1 21.41
Temperatur                   |   20.
```

allerdings ist nur Beleuchtung der Struktur von oben implementiert. Im gegebenen Beispiel entspricht der Einfallswinkel Littrow–Montage, die Ordnung -1 wird in Richtung der einfallenden Welle zurückreflektiert.

Es ist zu beachten, dass im Fall der Eingabe von mehreren Wellenlängen bzw. Einfallswinkeln die Programme die optimale Gittergeometrie für die jeweils festen Werte bestimmen, sich also die ermittelten optimalen Strukturen in der Regel mit Wellenlänge bzw. Einfallswinkel ändern. Zur Bestimmung eines für einen ganzen Bereich von Wellenlängen oder Einfallswinkeln optimalen Gitters dienen die Programme **dom ...**, die in Kapitel 4 beschrieben werden. Bei der Temperaturangabe gelten die beim direkten Problem gemachten Ausführungen.

Die Eingabe von `Schichten und Materialien` ist analog zur Eingabe beim direkten Problem.

Die Eingabe der Daten der inhomogenen Gitterstruktur nach

```
----------------------------------------------------------------------------
     Gitterstruktur und Materialien
----------------------------------------------------------------------------
```

weicht von der Eingabe beim direkten Problem ab. Bisher ist es nur möglich, die Geometrie von Gittern zu optimieren, die aus in x_1–Richtung aufeinanderfolgenden beliebig vielen Rechtecken gleicher Höhe bestehen, die in vertikaler Richtung nur in `khgi` ≤ 2 Teilrechtecke unterteilt sein können. Die Anzahl `nzg` der Rechtecke stimmt mit der Anzahl der Gitterpunkte überein, die beiden Parameter `nzg` und `khgi` werden in der ersten Zeile von

```
Anz. Gitterpunkte, Unterteil |   4   2
skal. x-Koordinaten  x_i     |   .0  .25 .5 .75
Hoehen in Unterteilung n_i   |   10 10 20 30
```

eingegeben. Danach folgen die auf die Gitterperiode skalierten x_1–Koordinaten der Gitterpunkte. Der Punkt $x_1 = 0.0$ ist immer ein Gitterpunkt, der angegeben werde muss! Im Fall `khgi` $= 2$ wird in der dritten Zeile die vertikalen Unterteilung der Rechtecke zwischen den Gitterpunkten angegeben, wobei die ganzzahligen Werte n_i wieder die Höhe der vertikalen Unterteilung des jeweiligen Rechtecks angeben.

Da im Gegensatz zur Lösung des direkten Problems hier nur die Startgeometrie für die Optimierung eingegeben wird, gibt es allerdings eine Besonderheit. Ist $n_i > 0$ und wird durch die Angabe der Optimierungsparameter (siehe unten) festgelegt, dass sich die Höhe der vertikalen Unterteilung nicht ändern soll, dann bleibt die Höhe des unteren Rechtecks unverändert bei $n_i \cdot h_2$. Soll dagegen die Höhe des oberen Rechtecks bei $n_i \cdot h_2$ festgehalten werden, ist hier die negative Zahl $-n_i$ einzugeben.

Im Fall `khgi` $= 1$ wird die dritte Zeile nicht ausgewertet, muss aber vorhanden sein.

Danach wird analog zur Eingabe beim direkten Problem durch

```
 kg_j, (j=1,3,5..nzgi) oben  |   Air  Air  Air  Air
 kg_j, (j=2,4,6..nzgi) unten |   Air  Si2.0 Si2.0 Si2.0
```

die optischen Indizes der erwähnten Teilrechtecke angegeben. Auch hier ist bei `khgi` $= 1$ die zweite Zeile ohne Bedeutung, muss aber im Eingabe–File vorhanden sein.

3.1.3 Beschreibung des Optimierungsteils

```
Funk.-Nr., Methode, Abstieg  |   1  1  .15
```

Die am Anfang beschriebenen Optimierungsziele werden durch Angabe einer gewissen Funktionalnummer ausgewählt. Funk.-Nr. 0 bedeutet, dass für das spezifizierte Gitter die Effizienzen berechnet werden sollen, also keine Optimierung stattfindet.

Zur Bestimmung optimaler Gitter im Falle fester Wellenlänge und Einfallswinkel sind 9 verschiedene Zielfunktionale implementiert, die einzelne Optimierungsziele realisieren.

Lokale Minima dieser Funktionale, die durch optimale Gitter angenommen werden, können entweder durch ein Abstiegsverfahren mit adaptiver Schrittweitensteuerung auf der Basis von konjugierten Gradienten und Simplexmethode (1) oder durch eine Innere Punktmethode (2) bestimmt werden.

Neben der Wahl des Startgitters und der `technologische Restriktionen` (s. Abschnitt 3.1.6), die wesentlich die konkrete Form des ermittelten optimalen Gitters bestimmen, ist `Abstieg` der einzige von außen einstellbare Parameter des Optimierungsalgorithmus. Dieser Parameter `Abstieg` bestimmt, wann ein in einem Iterationsschritt erzielter Abstieg ausreichend ist für die Akzeptanz eines neuen Minimumwertes. Der Differenzenquotient von Funktionalwerten zu Schrittweite muss kleiner als der Wert von `- Abstieg` sein. Bei `Abstieg` $= 0.0$ wird also jeder Wert akzeptiert, sobald er kleiner als das bisher ermittelte Minimum ist. Bei numerischen Tests haben sich die Werte $0.1 \leq$ `Abstieg` ≤ 0.2 für Methode 1 und $0.05 \leq$ `Abstieg` ≤ 0.15 für Methode 2 als günstig erwiesen.

Bevor die verschiedenen Funktionale beschrieben werden, erinnern wir an einige Bezeichnungen. Wie im Abschnitt 2.4 beschrieben, bestimmen die Rayleigh–Koeffizienten

$$p_j^{\pm} := (\vec{A}_j^{\pm})_3 \,, \quad q_j^{\pm} := (\vec{B}_j^{\pm})_3 = \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_0}}\,(\vec{C}_j^{\pm})_3$$

des elektrischen und des Magnetfelds wesentlich das Diffraktionsmuster von Beugungsgittern. Die Reflexions– bzw. Transmissionseffizienzen der TE– bzw. TM–Anteile sowie Gesamteffizienzen der entsprechenden Ordnung werden berechnet mit den Formeln

$$e_{j,TE}^{\pm} = \frac{\beta_j^{\pm}}{\beta}\, \mathrm{n}_+ (p_j^{\pm})^2 \,, \quad e_{j,TM}^{\pm} = \frac{\beta_j^{\pm}}{\beta}\, \frac{\mathrm{n}_+}{\mathrm{n}_{\pm}^2}\, (q_j^{\pm})^2 \,, \quad e_j^{\pm} = e_{j,TE}^{\pm} + e_{j,TM}^{\pm} \,.$$

Diese Größen bestimmen die verschiedenen Zielfunktionale.

In der Zeile

```
zu opt. Ord.:Reflex.-Trans.  |   1  0
```

wird die Anzahl der zu optimierenden Ordnungen in Reflexion und Transmission angegeben. Die nachfolgende 4 Eingabezeilen

```
Reflextionsordnungen          | -1
Wert_r                        |  1.
Transmissionsordnungen        |
Wert_t                        |
```

bestimmen die Parameter der Funktionale.

3.1.4 Funktionale

Funktional Nr. 1:

Die Effizienzen bestimmter Ordnungen $\{j\}$ sollen vorgegebene Zahlen $Wert_*(j)$ annehmen. Hier ist $Wert_*(j)$ das Verhältnis von Energie der Ordnung zur Energie des einfallenden Lichts, also nur $0 \leq Wert_*(j) \leq 1$ sinnvoll.

Entsprechend zu der in `zu opt. Ord.:Reflex.-Trans.` genannten Anzahl der zu optimierenden reflektierten bzw. transmittierten Ordnungen, sind in `Reflexionsordnungen` und `Transmissionsordnungen` die Nummern j der Ordnungen und darunter die dazugehörigen Zahlen $Wert_*(j)$ anzugeben.

Ist $Wert_*(j) > 1$ wird $Wert_*(j) = 1$ gesetzt, $Wert_*(j) < 0$ wird zu $Wert_*(j) = 0$.

Das zu minimierende Funktional ist

$$J_1 = \sum (e_j^+ - Wert_r(j))^2 + \sum (e_j^- - Wert_t(j))^2$$

wobei über die festgelegten Reflexions– und Transmissionsordnungen summiert wird.

Im Beispiel soll folglich eine optimale Gittergeometrie in Littrow–Montage gesucht werden, wo die Energie der in Richtung der einfallenden Welle reflektierten Ordnung maximiert werden soll.

Funktional Nr. 2:

Die Effizienzen bestimmter Ordnungen $\{j\}$ sollen maximiert oder minimiert werden. Die Anzahl der zu optimierenden reflektierten bzw. transmittierten Ordnungen wird in `zu opt. Ord.:Reflex.-Trans.` festgelegt. Danach sind jeweils in `Reflexionsordnungen` und `Transmissionsordnungen` die Nummern j der Ordnungen anzugeben. In diesem Fall sind die Zahlen $Wert_*(j)$ Koeffizienten des zu minimierenden Funktionals

$$J_2 = -\left(\sum Wert_r(j) \cdot e_j^+ + \sum Wert_t(j) \cdot e_j^- \right) ,$$

so dass $Wert_*(j) > 0$ der Maximierung und $Wert_*(j) < 0$ der Minimierung der Effizienzen e_j^+ oder e_j^- entspricht.

Ist $Wert_*(j) = 0$, so wird $Wert_*(j) = -1$ gesetzt.

Das im Beispiel eingetragene Optimierungsziel ist somit bei Funk-Nr. 1 und 2 identisch: Maximierung der Effizienz der -1. Reflexionsordnung. Allerdings können die ermittelten optimalen Gitter durchaus verschieden sein, da unterschiedliche Funktionale minimiert werden.

Funktional Nr. 3:

Hier wird angestrebt, für eine feste Ordnung j entweder in Reflexion oder Transmission maximale Effizienz und eine vorgegebene Phasendifferenz zwischen den Rayleigh–Koeffizienten des TE– und TM–Anteils zu erreichen.

Ist in der Zeile `zu opt. Ord.:Reflex.-Trans.` die erste Zahl größer als 0, so wird das Funktional

$$J_3 = Wert_r(2) \cdot \left(1 - e_j^+\right) + Wert_r(3) \cdot \left|p_j^+ - e^{i\phi} \cdot q_j^+\right|^2$$

mit $\phi = Wert_r(1) \cdot \pi / 180$ minimiert, wobei $Wert_r(1)$ die in Grad anzugebende gewünschte Phasendifferenz zwischen p_j^+ und q_j^+ ist. Es müssen also 3 reelle Zahlen in der Eingabezeile

`Wert_r` angegeben werden, als erste die gewünschte Phasendifferenz in Grad, danach zwei nichtnegative Koeffizienten des Funktionals.

Ist in der Zeile `zu opt. Ord.:Reflex.-Trans.` die erste Zahl gleich 0, dann wird entsprechend das Funktional

$$J_3 = Wert_t(2) \cdot \left(1 - e_j^-\right) + Wert_t(3) \cdot \left|p_j^- - e^{i\phi} \cdot q_j^-\right|^2$$

mit $\phi = Wert_t(1) \cdot \pi/180$ minimiert.

Funktional Nr. 4:

Die Effizienzen der TE– und TM–Anteile bestimmter Moden $\{j\}$ sollen vorgegebene Werte annehmen. Die Anzahl der zu optimierenden reflektierten bzw. transmittierten Ordnungen wird in `zu opt. Ord.:Reflex.-Trans.` festgelegt. Danach sind jeweils in `Reflexionsordnungen` und `Transmissionsordnungen` die Nummern j der Ordnungen einzulesen. Da die vorgegebenen Werte für TE und TM Polarisation unterschiedlich sein können, müssen demzufolge bei n zu optimierenden Ordnungen jeweils $2n$ Werte angegeben werden. Nach Vereinbarung bestimmt $Wert_*(2j-1)$ die TE–Effizienz und $Wert_*(2j)$ die TM–Effizienz, wobei diese Werte skaliert zur TE– bzw. TM–Effizienz der einfallenden Welle sind. Sie betragen (siehe 2.4.3)

$$p = e^i_{TE} = \frac{\sin^2\psi\,\cos^2\theta}{n_+(\sin^2\psi\,\cos^2\theta + \cos^2\psi)}\,, \quad q = e^i_{TM} = \frac{\cos^2\psi}{n_+(\sin^2\psi\,\cos^2\theta + \cos^2\psi)}\,.$$

Das zu minimierende Funktional ist somit

$$\begin{aligned} J_4 = &\sum \left(\left(e^+_{j,TE} - p \cdot Wert_r(2j-1)\right)^2 + \left(e^+_{j,TM} - q \cdot Wert_r(2j)\right)^2\right) \\ &+ \sum \left(\left(e^-_{j,TE} - p \cdot Wert_t(2j-1)\right)^2 + \left(e^-_{j,TM} - q \cdot Wert_t(2j)\right)^2\right)\,. \end{aligned}$$

Für $Wert_*(j) > 1$ wird $Wert_*(j) = 1$ und für $Wert_*(j) < 0$ wird $Wert_*(j) = 0$ gesetzt.

Funktional Nr. 5:

Dieses Funktional erweitert Funktional Nr. 2 so, dass TE– und TM–Effizienzen bestimmter Ordnungen getrennt voneinander maximiert oder minimiert werden können. Die Eingabekonventionen sind analog zu den Funktionalen Nr. 2 und Nr. 4. Es wird die folgende Funktion minimiert:

$$\begin{aligned} J_5 = -\Big(&\sum \left(Wert_r(2j-1) \cdot e^+_{j,TE} + Wert_r(2j) \cdot e^+_{j,TM}\right) \\ &+ \sum \left(Wert_t(2j-1) \cdot e^-_{j,TE} + Wert_t(2j) \cdot e^-_{j,TM}\right)\Big) \end{aligned}$$

Bei den Funktionalen Nr. 1 – 5 ist zu beachten, dass das Programm nur bezüglich der eingelesenen Ordnungen optimiert, die existieren. Am Anfang wird das Auftreten dieser Ordnungen geprüft und es erfolgt ein entsprechender Bildschirmausdruck. Deshalb ist es ratsam, die Input–Daten mit einem “j” nach dem | in der Eingabezeile

```
Eingabeauswertung  (j/n)     |
```

zu verifizieren. Dann wird nach der Auswertung der gelesenen Daten das Programm gestoppt. Anderenfalls führt das Programm die Optimierung bezüglich der verbleibenden Ordnungen durch. Ist keine der angegebenen Ordnungen vorhanden, verhält sich das Programm wie bei Funk.-Nr. 0.

Bei den Funktionalen Nr. 6 – 9 wird die reflektierten oder transmittierten Gesamtenergie optimiert. Hierbei ist zu beachten, dass das Programm aus numerischen Gründen höchsten m Ordnungen berechnet, d.h. alle auftretenden Ordnungen j mit $|j| \leq m/2$, wobei m in der Eingabezeile für die Unterteilung der Gitterstruktur

```
m (x-Diskr), ng (Gitter)      |   40 40
```

bestimmt wird. Am Programmanfang werden alle auftretenden Ordnungen, die in die Optimierung eingehen, aufgelistet. Mit einem "j" in der Eingabezeile `Eingabeauswertung` können u.a. diese Daten geprüft werden.

Funktional Nr. 6:

Hier wird angestrebt, dass die reflektierte oder transmittierte Gesamtenergie vorgegebene Werte annimmt.

Ist in der Zeile `zu opt. Ord.:Reflex.-Trans.` die erste Zahl größer als 0 und die zweite gleich 0 wird das Funktional

$$J_6 = \left(Wert_r(1) - \sum e_j^+ \right)^2$$

minimiert, wobei über alle auftretenden Reflexionsordnungen summiert wird.

Ist in der Zeile `zu opt. Ord.:Reflex.-Trans.` die erste Zahl gleich 0 und die zweite Zahl größer als 0 wird das Funktional

$$J_6 = \left(Wert_t(1) - \sum e_j^- \right)^2$$

minimiert, wobei über alle auftretenden Transmissionsordnungen summiert wird. Sind in der Zeile `zu opt. Ord.:Reflex.-Trans.` beide Zahlen positiv, wird natürlich die Summe beider Funktionen minimiert.

Funktional Nr. 7:

Dieses Funktional unterscheidet sich von Funktional Nr. 6 nur dadurch, dass die zu minimierende Funktion die Gestalt

$$J_7 = \left| Wert_r(1) - \sum e_j^+ \right| + \left| Wert_t(1) - \sum e_j^- \right|$$

besitzt.

Funktional Nr. 8:

Hier wird angestrebt, dass die reflektierten oder transmittierten Gesamtenergien der TE– und TM–Anteile getrennt vorgegebene Werte annehmen.

Ist in der Zeile `zu opt. Ord.:Reflex.-Trans.` die erste Zahl größer als 0 wird das Funktional

$$J_8 = \left(p \cdot Wert_r(1) - \sum e_{j,TE}^+ \right)^2 + \left(q \cdot Wert_r(2) - \sum e_{j,TM}^+ \right)^2$$

minimiert, wobei über alle auftretenden Reflexionsordnungen summiert wird. Die Parameter p und q besitzen die gleiche Bedeutung wie bei Funktional 4.

Ist in der Zeile zu `opt. Ord.:Reflex.-Trans.` die zweite Zahl größer als 0 wird das Funktional

$$J_8 = \left(p \cdot Wert_t(1) - \sum e^-_{j,TE}\right)^2 + \left(q \cdot Wert_t(2) - \sum e^-_{j,TM}\right)^2$$

minimiert, wobei über alle auftretenden Transmissionsordnungen summiert wird. Sind in der Zeile zu `opt. Ord.:Reflex.-Trans.` beide Zahlen positiv, wird die Summe beider Funktionen minimiert.

<u>Funktional Nr. 9:</u>
Dieses Funktional unterscheidet sich von Funktional Nr. 8 nur dadurch, dass die zu minimierende Funktion die folgende Gestalt besitzt:

$$J_9 = \left|p \cdot Wert_r(1) - \sum e^+_{j,TE}\right| + \left|q \cdot Wert_r(2) - \sum e^+_{j,TM}\right|$$
$$+\left|p \cdot Wert_t(1) - \sum e^-_{j,TE}\right| + \left|q \cdot Wert_t(2) - \sum e^-_{j,TM}\right|$$

Es ist zu beachten, dass die bei den Funktionalen 1 bis 5 zu spezifizierenden Reflexions– bzw. Transmissionsmoden möglicherweise nicht für angegebene Wellenlängen oder Einfallswinkel existieren. Dann wird keine Optimierung durchgeführt, und das Programm geht entweder zum nächsten Parameter über oder stoppt.

3.1.5 Eingabe der zu optimierenden Gitterparameter

Da ein optimales Gitter in der durch die Geometriebeschreibung festgelegten Klasse binärer Gitter mit fester Anzahl von Gitterpunkten mit einer bestimmten Zahl von Schichten und vorgeschriebener Materialzusammensetzung gesucht werden soll, kann das Optimierungsziel nur durch Variation der Lage der Gitterpunkte, der Gitterhöhe, der Unterteilungshöhen in den Teilrechtecken und der Schichtdicken erreicht werden. Die Eingabe der jeweils zu variierenden Gitterparameter erfolgt in den 8 Zeilen

```
H"ohen in Untert., Gitterp.  |   3 0
Nummer H"ohen, gesamt:0      |   2 3 4
Gleichheit von Teilrechtecken|
Nummer Gitterpunkt           |
obere Schichten (Periode)    |
Nummer obere  Schichten,     |
untere Schichten (Periode)   |    1 0
Nummer untere Schichten      |    1
```

In der ersten Zeile wird die Anzahl der zu variierenden Höhen und der Gitterpunkte festgelegt, dort müssen zwei ganze Zahlen stehen. Die Höhen umfassen die Gesamthöhe des Gitters (Angabe von 0 in der Zeile `Nummer H"ohen, gesamt:0`) und Teilhöhen der unterteilten in x_1–Richtung aufeinanderfolgenden Rechtecke wenn `khgi=2`. Wenn solche Teilhöhen variiert werden sollen, ist die Nummer des entsprechenden Rechtecks in der Zeile `Nummer H"ohen, gesamt:0` anzugeben.

In `Gleichheit von Teilrechtecken` wird angegeben, welche der Teilrechtecke in der Unterteilung gleiche Höhen haben sollen. Diese Option ist nur sinnvoll bei `khgi=2` und die Nummerierung der Teilrechtecke erfolgt dabei nach dem in Abb. 8 angegebenen Schema. Dabei sind die Nummern der entsprechenden Teilrechtecke verbunden durch "=" ohne Leerzeichen einzugeben. Dabei versucht das Programm, überflüssige oder widersprüchliche Angaben zu eliminieren und das Startgitter den ermittelten Vorgaben anzupassen.

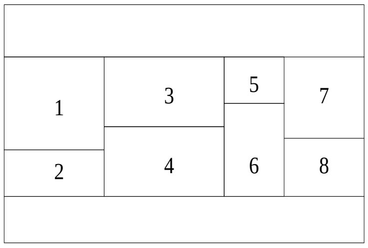

Abb. 7. Nummerierung der Teilrechtecke

Wenn die Lage von Gitterpunkten geändert werden soll, dann ist deren Nummer in die Zeile `Nummer Gitterpunkt` einzugeben. Zu beachten ist, dass der Gitterpunkt bei 0.0 immer festgehalten wird, er bekommt die Nummer 0 und kann dort nicht angegeben werden. Es lassen sich nur die Gitterpunkte innerhalb der Periode `(0,per)` verändern, die von links die Nummern `1` bis `nzg -1` haben.

Befinden sich ober– oder unterhalb des Gitters Schichten, dann müssen in den Zeilen `obere Schichten (Periode)` bzw. `untere Schichten (Periode)` 2 ganze Zahlen eingegeben werden. Die erste bedeutet jeweils die Anzahl der zu variierenden Schichtdicken. Ist diese Zahl positiv, bestimmt die zweite Zahl, ob sich die Schichtdicken periodisch wiederholen und ob diese Periodizität auch bei der Optimierung beibehalten werden soll. Ist die Zahl positiv, werden vom Programm automatisch die Schichtdicken entsprechend der eingelesenen Dicken der Schichten in der ersten Periode periodisch fortgesetzt und alle Schichten werden während des Optimierungszyklus entsprechend variiert.

Auch hier ist es ratsam, die Optimierungs–Daten mit einem "j" nach dem | in der Eingabezeile `Eingabeauswertung` zu verifizieren.

```
Gitterperiode                                         1.2000
Wellenlaenge                                          0.8760
Einfallswinkel                                       21.4100
Polarisationswinkel                                    45.00
Zimmertemperatur

Start-Gitter:
Anzahl der Schichten unter dem Gitter                      1
mit den Dicken                                        1.0000
           variieren zwischen   0.0500    und  20.0000

Brechungsindices
oberhalb des Gitters
 Superstratmaterial        k_+  =  1.0000

unterhalb des Gitters
 1-tes Schichtmaterial           Si2.0
 Substratmaterial                Ag

Hoehe der inhomogenen Struktur                        1.2000

 mit  4 transition points und den Materialien
 von   0.0000  bis   0.3000
  oben         0.3000  -    1.2000          1.0000
  unten        0.0000  -    0.3000          1.0000
```

```
 von   0.3000  bis   0.6000
  oben         0.3000  -    1.2000         1.0000
  unten        0.0000  -    0.3000          Si2.0
 von   0.6000  bis   0.9000
  oben         0.6000  -    1.2000         1.0000
  unten        0.0000  -    0.6000          Si2.0
 von   0.9000  bis   1.2000
  oben         0.9000  -    1.2000         1.0000
  unten        0.0000  -    0.9000          Si2.0

     minimale Hoehen in Unterteilung            0.0300

Zu variierende Gitterparameter:

  2. Teilhoehe zwischen       0.2500  0.5000
  3. Teilhoehe zwischen       0.5000  0.7500
  4. Teilhoehe zwischen       0.7500  1.0000
  1. untere Schicht der Dicke     1.0000

Optimiert werden mit Methode des steilsten Abstiegs
              Reflexions-Effektivitaeten
  Ordnung -1 auf Wert   1.00  entspricht Reflexionswinkel  21.41

Abstiegsparameter   0.15000

       Ende  der Eingabeauswertung
```

Im vorliegenden Beispiel soll eine auf Silber aufgebrachte SiO_2–Schicht so strukturiert werden, dass ein daraus entstehendes Beugungsgitter die Energie der in Richtung der einfallenden Welle reflektierten Ordnung maximiert. Dafür sind drei Furchen, deren Breite jeweils ein Viertel der Gitterperiode von $1,2\mu$m beträgt, in die Schicht einzubringen. Von Interesse sind die Dicke der SiO_2–Schicht und die Tiefe der Furchen. Durch das Festhalten der Gesamthöhe der inhomogenen Struktur, wird die Tiefe der Furchen begrenzt. In Abbildung 9 ist das Startgitter für die Optimierung aus 3.1.1 dargestellt.

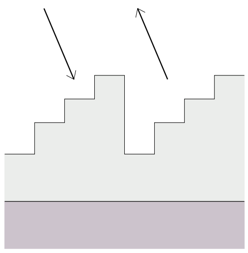

Abb. 8. Startgitter der Optimierung

Abbildung 10 zeigt den Querschnitt des optimierten Beugungsgitters, das in der -1. Ordnung eine Effizienz von 97,87 % liefert.

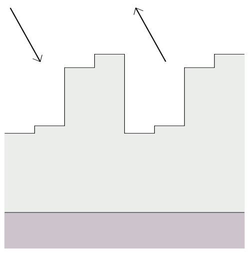

Abb. 9. Optimierte Gitterstruktur

Natürlich gibt es verschiedene Möglichkeiten der Geometrieeingabe und der Festlegung der zu optimierenden Parameter für dieses Problem.

3.1.6 Eingabe der technologische Restriktionen

Hier sind Schranken anzugeben, innerhalb derer sich die zu variierenden Parameter ändern sollen. Das Programm prüft, inwieweit diese Schranken beim Startgitter durch die relevanten Parameter eingehalten werden. In den Eingabezeilen erfolgt die Angabe in μm, nur in der Zeile `minimale Breiten (skaliert)` ist der minimale Abstand zwischen zwei benachbarten Gitterpunkten skaliert anzugeben.

```
min. und max.   Gesamth"ohe  |
minimale  Teilh"ohen         |   .03
minimale Breiten (skaliert)  |
min. und max. Schichtdicken  |   .05 20.
```

Die Angabe von Schranken für die zu variierenden Parameter ist notwendig, da die Optimierungsalgorithmen einen beschränkten Parameterraum zur Minimalwertbestimmung der Funktionale voraussetzen.

Es sei angemerkt, dass die Angabe der Schranken die Optimierungsergebnisse und die erforderliche Rechenzeit wesentlich beeinflussen können. Da beide Optimierungsalgorithmen die Liniensuche in der Nähe des Begrenzung des beschränkten Parameterraums beginnen, können bei sehr groß gewählter maximaler Gesamthöhe Gleichungssysteme mit sehr vielen Variablen entstehen, und das bei jeder neuen Suchrichtung. Deren numerische Lösung ist sehr aufwendig, leistet aber unter Umständen keinen Beitrag zur Optimierung. Ähnlich verhält es sich bei einem großem Verhältnis von maximaler zu minimaler Schichtdicke, das zwar die Dimension der diskreten Gleichungen nicht beeinflusst, aber zu sehr vielen Optimierungschritten führen kann.

Deshalb sollten nach Möglichkeit die technologische Restriktionen anfangs recht enge Schranken für die zu variierenden Parameter darstellen, die dann gegebenenfalls für weitere Rechnungen erweitert werden.

3.2. Verfahren zur Lösung der linearen Gleichungssysteme

Zur Bestimmung der Funktionalwerte und der Gradienten werden so genannte direkte und duale Differentialgleichungsprobleme gelöst, für die die in Abschnitt 2.3 beschriebenen Verfahren eingesetzt werden können. Der zweite Teil des Namens der 3 zur Verfügung stehenden Programme zum optimalen Entwurf bei fester Wellenlänge und festem Einfallswinkel **optpro**, **optpar** und **optiter** wird vom eingesetzten Löser der Differentialgleichungsprobleme bestimmt.

Analog zum Fall der Simulation sollte das Programm **optpar**, das die Bibliothek PARDISO (soweit vorhanden) nutzt, zuerst getestet werden. Im Gegensatz zu den beiden anderen Programmen kann es hier allerdings vorkommen, dass während der Optimierung nicht mehr genügend Speicherplatz zur Verfügung steht und das Programm beendet wird.

3.3. Zur Ausgabe

Nachfolgend das Ergebnis–File `stair.erg` für Beispiel 3.1.1. Es wurden wegen `level` = 2 die Optimierung für die gegebene Startdiskretisierung und für sich nach Halbierung der Teilintervalle ergebende feinere Diskretisierung durchgerechnet. Im zweiten Zyklus wird die optimale Geometrie des ersten Zyklus als neue Startgeometrie benutzt. Daneben wird ein weiteres File unter dem Namen `optstair.erg` geschrieben, das die Ergebnisse der direkten Berechnungen für alle während der Optimierung betrachteten Gitterstrukturen enthält.

Unter Umständen kann es nützlich sein, aus diesem File weitere Strukturen mit hinreichend kleinen Funktionalwerten zu extrahieren. Da diese Hilfsdateien recht groß werden können, sollten sie aber nach Gebrauch gelöscht werden.

Wie schon erwähnt, können durch Wahl des Ausgabetyps die Rayleigh–Koeffizienten der TE– und TM–Anteile, des Jones–Vektors oder der x_3–Komponenten von $\vec{E}$ und $\vec{B}$ ausgegeben werden.

```
GWS- Gitterweite d, Anzahl der oberen und unteren Schichten
POE- Winkel (E_x,E_z) zur x-Achse, |E|
WEL- Wellenlaenge
EFW- Einfallswinkel
SOD- Anzahl der oberen Schichten, deren Dicken
SUD- Anzahl der unteren Schichten, deren Dicken
DKO- Diffraktionskoeffizienten  der Schichten oberhalb des Gitters
DKU- Diffraktionskoeffizienten  der Schichten unterhalb des Gitters
DGO- Diffraktionskoeffizienten  des oberen Gittermaterials
DGU- Diffraktionskoeffizienten  des unteren Gittermaterials
OPP- Optimierungsparameter -  Funktionalnummer, Abstiegsparameter
VAH- variiert werden Hoehe der Struktur(0) und  j-te Hoehe in Unterteilung, j>0
VAU- variiert werden die Dicken der j. Schicht unter dem Gitterprofil
ORO- Zu optimierende Reflexionsordnungen mit entsprechenden Werten
DIS- Unterteilungen in x-Richtung und der Diskretisierungsstreifen
GIH- Gitterhoehe h, Verhaeltnis h/d
DIG- Unterteilungen in x-Richtung und im Gitter, Gesamtzahl der Unbekannten
TRS- Transition points, skaliert auf [0,1]
TRP- Transition points in mu
HIR- Hoehe der unteren Rechtecke in mu bei horizontaler Unterteilung
FUN- Minimaler Wert des Funktionals, Iterationszahl
TER- Reflexion bei TE-pol. Einfall - Ordnung, spher. Winkel, Koeffizient und Effizienz
GTE- Gesamteffizienz im TE-Fall - Reflexion, Transmission
TMR- Reflexion bei TM-pol. Einfall - Ordnung, spher. Winkel, Koeffizient und Effizienz
GTM- Gesamteffizienz im TM-Fall - Reflexion, Transmission
REF- Gesamtreflexion - Ordnung, spher. Winkel, E-Koeff., H-Koeff., Effizienz
GEM- Gesamteffizienz - Reflexion, Transmission
```

```
GWS:    1.20000       0       1
POE:     45.000    1.0000
OPP:    1   0.15
VAH:    2   3   4
VAU:    1
ORO:   -1   1.00
DKO:  1.0
DKU:  1.4521 (0.159,5.8808)
DGO:  1.0  1.0  1.0  1.0
DGU:  1.0  1.4521  1.4521  1.4521
WEL:    0.87600
EFW:   21.4100
DIS:  40   2   2
OPTIMALE GEOMETRIE:
GIH:   1.20000  1.00000
DIG:      40      1800
TRS:   0.00000  0.25000  0.50000  0.75000
TRP:   0.00000  0.30000  0.60000  0.90000
HIR:   0.30000  0.09000  0.81000  0.99000
SUD:    1    0.9732
TER:    0    0.00  21.41   (  0.0151, -0.0265)       0.0931
TER:   -1  180.00  21.41   (  0.4320, -0.8914)      98.1247
GTE:     98.2178
TMR:    0    0.00  21.41   ( -0.0024,  0.0113)       0.0132
TMR:   -1  180.00  21.41   ( -0.0725,  0.9852)      97.5996
GTM:     97.6128
REF:    0    0.00  21.41 ( 0.0103,-0.0181) (-0.0018, 0.0083)    0.0503
REF:   -1  180.00  21.41 ( 0.2944,-0.6074) (-0.0531, 0.7211)   97.8434
GEM:     97.8937
FUN:   0.000465       132
```

```
DIS:  80   2   2
OPTIMALE GEOMETRIE:
GIH:   1.20000  1.00000
DIG:      80      7120
TRS:   0.00000  0.25000  0.50000  0.75000
TRP:   0.00000  0.30000  0.60000  0.90000
HIR:   0.30000  0.09000  0.82500  0.99000
SUD:    1    0.9798
TER:    0    0.00  21.41   (  0.0083, -0.0111)       0.0192
TER:   -1  180.00  21.41   (  0.5194, -0.8437)      98.1651
GTE:     98.1843
TMR:    0    0.00  21.41   ( -0.0016,  0.0113)       0.0130
TMR:   -1  180.00  21.41   ( -0.1940,  0.9687)      97.5966
GTM:     97.6097
REF:    0    0.00  21.41 ( 0.0057,-0.0076) (-0.0012, 0.0083)    0.0159
REF:   -1  180.00  21.41 ( 0.3539,-0.5749) (-0.1420, 0.7090)   97.8606
GEM:     97.8765
FUN:   0.000458        62
```

4. Optimierung über einen Bereich von Wellenlängen oder Einfallswinkeln

Hier werden die Programme zur Bestimmung eines optimales Gitters beschrieben, das ein gewünschtes Diffraktionsmuster über einem Bereich von Wellenlängen oder Einfallswinkeln annähert. Bei fest vorgegebener Gitterperiode und Materialzusammensetzung sollen z.B. vorgegebene Effizienzen oder Intensitätsverläufe bestimmter Ordnungen oder der Gesamtenergie erreicht werden. In 6 zusätzlichen Funktionalen können bestimmte Funktionen angegeben werden, die einzelne Effizienzen oder die Gesamtenergie über diesem Bereich annehmen sollen.

Die Suche nach Minima der Zielfunktionen erfolgt durch die beiden im vorigen Kapitel beschriebenen Optimierungsmethoden auf der Basis von Gradientenverfahren. Die hierbei zu untersuchenden Zielfunktionale stellen Integrale über den Wellenlängen– bzw. Einfallswinkelbereich der in Abschnitt 3.1.4 eingeführten Zielfunktionen dar. Diese Integrale werden während des Optimierungszyklus durch die Trapezregel approximiert, deren Stützstellen vom Benutzer festgelegt werden.

Analog zu den vorigen Abschnitten gibt es drei Programme **dompar**, **dompro** und **domiter**, die sich im jeweiligen Löser für die diskretisierten Differentialgleichungsprobleme unterscheiden.

4.1. Beschreibung des Eingabe–Files

Die Struktur des Eingabe–Files für die Programme **dom...** stimmt bis auf ein zusätzliches Eingabefeld zur Angabe von Intensitätsverläufen mit der Struktur der Eingabe für die im vorigen Abschnitt beschriebenen Programme **opt...** überein. Ein Beispiel wird auf der nächsten Seite vorgestellt.

Solange die optimale Geometrie bezüglich der in Abschnitt 3.1.4 beschriebenen Funktionale 1 – 9 bestimmt werden soll, ist es aber auch möglich, die Eingabe–Files beidseitig zu nutzen. Das heißt, die Programme **dom...** akzeptieren die in 3.1 beschriebene Eingabe der Programme **opt...**, die wiederum auch Eingabe–Files wie in Beispiel 4.1.1 akzeptieren, wenn `Funk.-Nr.` zwischen 0 und 9 gewählt wird.

Im folgenden gehen wir nur auf die Unterschiede zum Eingabe–File 3.1.1 ein. Für alle nicht erwähnten Eingabezeilen gelten die in 3.1 gemachten Ausführungen.

Neben der Ergebnisdatei, das die ermittelte optimale Gitterform und die entsprechende Ergebnisse enthält, wird ein Hilfsfile mit den Ergebnisse aller Suchschritte unter dem Namen `dom<Name Ausgabe-File>` angelegt. Auch diese Files sollten nach Auswertung gelöscht werden.

4.1.1 Beispiel

```
==============================================================================
  Dateneingabe fu"r optimales Design-Problem "uber Bereich
------------------------------------------------------------------------------
Ausgabe-File,  Ausgabetyp     |   beisp.erg  1
TE:0 TM:1 TE+TM:2  niveau     |   10  2
------------------------------------------------------------------------------
Periode:per  Gitterh"ohe:h    |    1.   .4
m (x-Diskr), ng (Gitter)      |   80   40
lambda  (Vn) (von bis step)   |   v1 .7
theta   (Vn) (von bis step)   |   45. 30.  10
Temperatur                    |
------------------------------------------------------------------------------
     Schichten und Materialien
------------------------------------------------------------------------------
k_+, k_- (Super- , Substrat) |   Air 2.7
Schichtzahl oben  unten       |   2 2
obere Schichtdicken (sdo)     |   .5 .5
 ko_j, (j=1,nzo)              |   2.35 PMMA
untere Schichtdicken (sdu)    |   1. 1.123456789
 ku_j, (j=1,nzu)              |   2.35 PMMA
------------------------------------------------------------------------------
     Gitterstruktur und Materialien
------------------------------------------------------------------------------
Anz. Gitterpunkte,Unterteil   |   3   2
skal. x-Koordinaten  x_i      |   .0   .2 .75
H"ohen in Unterteilung n_i    |    15 20  37
 kg_j, (j=1,3,5..nzgi) oben   |   1.  Si2.0  Air
 kg_j, (j=2,4,6..nzgi) unten |   2.1  1.5  1.0
------------------------------------------------------------------------------
Eingabeauswertung  (j/n)      |
------------------------------------------------------------------------------
                   Optimierungsteil
------------------------------------------------------------------------------
Funk.-Nr., Methode, Abstieg   |   16  1  .15
zu opt. Ord.:Reflex.-Trans.   |   1   1
------------------------------------------------------------------------------
     Eingabe der Konstanten f"ur Funktionale 1 bis 9
------------------------------------------------------------------------------
Reflexionsordnungen           | 0
Wert_r                        | .3
Transmissionsordnungen        | 0
Wert_t                        | .7
------------------------------------------------------------------------------
     Eingabe der Funktionsverl"aufe f"ur Funktionale 11 bis 18
------------------------------------------------------------------------------
Reflexionsordnung            |   0
Werte_R                      |  Line 0.2 0.4
Transmissionsordnung         |  0
Werte_T                      |  Line 0.8 0.6
------------------------------------------------------------------------------
           zu optimierende Parameter
------------------------------------------------------------------------------
H"ohe in Untert.,  Breiten    |   3 2
Nummer H"ohen, gesamt:0,      |   0 1 2 3
Gleichheit von Teilrechtecken|
Nummer Gitterpunkt            |    1 2
obere Schichten (Periode)     |    2  0
Nummer obere  Schichten,      |    1 2
untere Schichten (Periode)    |    2 0
Nummer untere Schichten       |    1  2
------------------------------------------------------------------------------
     technologische Restriktionen ( in Mikrometer)
------------------------------------------------------------------------------
min. und max.   Gesamth"ohe   |   .1 1.5
minimale  Teilh"ohen          |   .02
minimale Breiten (skaliert)   |    .05
min. und max. Schichtdicken   |   .05 2.
==============================================================================
```

Durch die Angabe

```
lambda  (Vn) (von bis step)  |   v1 .7
theta   (Vn) (von bis step)  |  45. 30.  10
```

wird der Bereich von Wellenlängen oder Einfallswinkeln, über den die Gittergeometrie optimiert werden soll, festgelegt. Dabei ist zu beachten, dass die Optimierung nur über einen Parameterbereich erfolgt. Wird für beide Parameter ein Bereich angegeben, wird über den Wellenlängenbereich und den fixierten, zuerst gelesenen Einfallswinkel optimiert.

Es besteht wieder die Möglichkeit, Bereiche in der Form `von bis step` und als Vektoren verschiedener Werte (`Vn`) anzugeben. In der Form `von bis step` werden durch die beiden ersten reellen Zahlen die Grenzen des Bereichs angegeben, die dritte Zahl bestimmt, mit welcher Feinheit die Integrale der Zielfunktionen diskretisiert werden. Ist die dritte Zahl reell (Eingabe mit .) bedeutet sie im Unterschied zu den Programmen **dir...** und **opt...** nicht die Schrittweite, sondern das Programm unterteilt den angegebenen Bereich so, dass die Länge der Teilintervalle nahe an der angegebenen reellen Zahl liegt. Ist die dritte Zahl ganzzahlig, wird der angegebene Bereich entsprechend oft unterteilt. Somit wird die Rechnung immer über den angegebenen Bereich ausgeführt. Für die dadurch Stützstellen werden die Berechnungen durchgeführt und das Zielfunktionsintegral mittels Trapezregel approximiert.

Wird der Bereich als Vektor verschiedener Werte angegeben, dann sucht das Programm die Grenzen des Bereichs und benutzt die anderen angegebenen Werte als Stützstellen oder Knoten für die Quadratur des Zielfunktionsintegrals. So ist es möglich (aber auch recht aufwändig), das Integral einer nichtglatten Zielfunktion (z.B. an Rayleighfrequenzen) durch Verfeinerung der Stützstellen besser zu approximieren.

Da in jedem Stützstellenpunkt 2 Differentialgleichungsprobleme gelöst werden, wirkt sich natürlich die Anzahl der Stützstellen wesentlich auf die Rechenzeit aus. Sie sollte deshalb möglichst klein gehalten werden, allerdings ist es wohl unmöglich, hier praktische Hinweise zu geben.

Falls bei `lambda` und `theta` kein Bereich, sondern feste Wellenlänge und Einfallswinkel angegeben werden, wird für diese Werte optimiert. Allerdings sind in diesem Fall die Programme **opt...** effektiver. Wie bereits erwähnt, können sie auch das gleiche Eingabe–File benutzen.

4.1.2 Beschreibung des Optimierungsteils

```
Funk.-Nr., Methode, Abstieg  |   16  1  .15
```

Neben den in 3.1.4 beschriebenen Funktionalen mit den Nummern 1 bis 9 aus sind 6 weitere Zielfunktionen implementiert, die die Annäherung an gegebene Funktionsverläufe realisieren sollen.

Zur Beschreibung der einzelnen Funktionale bezeichne (X_1, X_2) den Wellenlängen– bzw. Einfallswinkelbereich, über den ein optimales Gitter bestimmt werden soll. Die zu minimierenden Funktionale sind Integrale über den Parameterbereich (X_1, X_2), nach Diskretisierung der Integrale ergibt sich eine endliche Summe von Funktionalwerten. Deren Minima werden wieder entweder durch ein Abstiegsverfahren mit adaptiver Schrittweitensteuerung auf der Basis von konjugierten Gradienten und Simplexmethode (1) oder durch eine Innere Punktmethode (2) bestimmt.

4.1.3 Funktionale 1 bis 9

Die Reflexions– und Transmissionskoeffizienten sowie die daraus ermittelten Effizienzen sind Funktionen des Parameters $x \in (X_1, X_2)$. Die Eingabe einer Funk.-Nr. zwischen 1 und 9 bedeutet, dass das jeweilige Integral

$$\int_{X_1}^{X_2} J_j(x)\, dx$$

minimiert, wobei j, $1 \leq j \leq 9$, die entsprechende Nummer des Zielfunktionals aus Abschnitt 3.1.4 ist. Die 4 Eingabezeilen nach

```
---------------------------------------------------------------------------
     Eingabe der Konstanten f"ur Funktionale 1 bis 9
---------------------------------------------------------------------------
```

sind so wie in 3.1.4 zu belegen.

Es ist zu beachten, dass die bei den Funktionalen 1 bis 5 zu spezifizierenden Reflexions– bzw. Transmissionsmoden möglicherweise nicht im gesamten vorgegebenen Wellenlängen– oder Einfallswinkelbereich existieren. Im Gegensatz zu früheren Versionen des Programms wird die Optimierung trotzdem durchgeführt, wobei in jedem Knoten für die Quadratur des Integrals die Berechnungen für alle spezifizierten und dort auftretenden Moden durchgeführt werden.

Falls eine Ordnung im gesamten Bereich nicht existiert, dann wird sie aus der Liste der zu optimierenden Ordnungen gestrichen. Sollte danach diese Liste leer sein, stoppt das Programm.

Auch hier ist es ratsam, in der Eingabezeile

```
Eingabeauswertung  (j/n)     |
```

ein "j" einzutragen, da neben den Geometriedaten auch die verifizierten Daten zur Optimierung ausgegeben werden.

4.1.4 Intensitätsverläufe

Neu sind die Funktionale mit zweistelligen Nummern.

```
---------------------------------------------------------------------------
     Eingabe der Funktionsverl"aufe f"ur Funktionale 11 bis 18
---------------------------------------------------------------------------
Reflextionsordnung           |  0 1
Werte_R                      |  Line 0.2 0.4
Transmissionsordnung         |  0 -1
Werte_T                      |  Line 0.8 0.6
```

Die Eingabe eines speziellen Funktionsverlaufs erfolgt in Form einer Zeichenkette und 2 darauffolgender reeller Zahlen, jeweils voneinander durch Leerzeichen getrennt.

`Gauss` a b bedeutet den Funktionsverlauf einer Glockenkurve

$$f(x) = \exp(-|a| \cdot (x-b)^2)$$

Wegen $0 < f(x) \leq 1$ können mit diesem Funktionsverlauf angestrebte Gaußverteilungen der Effizienzen gut dargestellt werden. Die Zahl b stellt das Zentrum dieser Verteilung dar, in der das Maximum 1 erreicht werden soll, die Zahl a bestimmt die Form der Kurve.

`Arctg` a b bedeutet den Arkustangens–Funktionsverlauf

$$f(x) = \arctan(a \cdot (x-b))/\pi + 1/2$$

Wegen $0 < f(x) < 1$ kann mit diesem Funktionsverlauf ein angestrebter Umschlag der Effizienzen von 0 auf 1 gut dargestellt werden. Die Zahl b stellt den Übergangspunkt dar, die Zahl a bestimmt die Steilheit dieses Umschlags und das Vorzeichen von a die Richtung.

`Line` a b bedeutet den linearen Funktionsverlauf

$$f(x) = b\,\frac{x - X_1}{X_2 - X_1} + a\,\frac{X_2 - x}{X_2 - X_1}$$

Diese Funktion nimmt am Beginn des Wellenlängen– bzw. Einfallswinkelbereichs den Wert a und am Ende den Wert b an, wobei a und b beliebige reelle Zahlen sein können.

`Step` a b bedeutet den Funktionsverlauf der Stufenfunktion, die die Werte 0 und $|a|$ annimmt. Der Wert $|a|$ wird dabei rechts von b $(x > b)$ bei positivem a und links von b $(x < b)$ bei negativem a angenommen.

`Exp`k a b bedeutet den Funktionsverlauf der verallgemeinerten Gaußfunktion

$$f(x) = \exp(-|(x-b)/a|^k)\ .$$

Damit kann ein Plateau mit starkem Abfall an den Intervallenden dargestellt werden.

Bei den Optimierungszielen der Funktionale Nr. 11 bis Nr. 18 wird verlangt, dass eine Effizienz oder die reflektierte bzw. transmittierte Gesamtenergie für $x \in [X_1, X_2]$ den mittels a und b (und gegebenenfalls k) berechneten Funktionswert $f(x)$ annimmt. Dieser Funktionswert wird in die entsprechenden Funktionale anstelle der Zahlen $Wert_r(j)$ bzw. $Wert_t(j)$ der Funktionalen 1 – 9 eingesetzt.

Durch ein “j” nach dem | in der Eingabezeile

```
Eingabeauswertung  (j/n)      |
```

stoppt das Programm nach Auswertung der Input–Daten und entsprechender Bildschirmausgabe. Insbesondere werden die aus den Funktionsverläufen berechneten Werte in den Integrationsstützstellen des Wellenlängen– bzw. Einfallswinkelbereichs angegeben. Somit lassen sich relativ leicht die gewünschten Werte überprüfen und gegebenenfalls durch Änderung der reellen Zahlen a und b modifizieren.

Zum Beispiel liefern die folgenden Zeilen im Eingabefile

```
lambda  (Vn) (von bis step)  |  .7 .9  10
.............................................
Funk.-Nr., Methode, Wichtung |  11  1  .15
zu opt. Ord.:Reflex.-Trans.  |  1 1
.............................................
Reflextionsordnung           |  0
Werte_R                      |  Arctg  50. .8
Transmissionsordnung         |  0
Werte_T                      |  Arctg  -50. .8
```

die Bildschirmausgabe

```
  Zu optimieren:
   Effizienzen bei Reflexion
 Argument Ord. Wert
  0.7000    0  0.06
  0.7200    0  0.08
  0.7400    0  0.10
  0.7600    0  0.15
  0.7800    0  0.25
  0.8000    0  0.50
  0.8200    0  0.75
  0.8400    0  0.85
  0.8600    0  0.90
  0.8800    0  0.92
  0.9000    0  0.94
   Effizienzen bei Transmission
 Argument Ord. Wert
  0.7000    0  0.94
  0.7200    0  0.92
  0.7400    0  0.90
  0.7600    0  0.85
  0.7800    0  0.75
  0.8000    0  0.50
  0.8200    0  0.25
  0.8400    0  0.15
  0.8600    0  0.10
  0.8800    0  0.08
  0.9000    0  0.06
```

4.1.5 Funktionale 11 bis 18

Für die Annäherung an Intensitätsverläufe lassen sich nur die Funktionale 1, 4 und 6 – 9 sinnvoll verallgemeinern. In Analogie dazu erfolgt die Nummerierung der erweiterten Funktionale mit 11, 14 und 16 – 19.

Funktional Nr. 11:

Die Effizienzen bestimmter Ordnungen $\{j\}$ sollen in Abhängigkeit von $x \in [X_1, X_2]$ jeweils vorgegebene Funktionsverläufe $f_j(x)$ annehmen. Da hier nur $0 \leq f_j(x) \leq 1$ sinnvoll ist, wird wie bei allen folgenden Funktionalen vom Programm der Funktionsverlauf in

$$h_j(x) = \begin{cases} 0 \ , & f_j(x) < 0 \\ f_j(x) \ , & 0 \leq f_j(x) \leq 1 \\ 1 \ , & f_j(x) > 1 \end{cases}$$

geändert.

Entsprechend zu der in `zu opt. Ord.:Reflex.-Trans.` genannten Anzahl der zu optimierenden reflektierten bzw. transmittierten Ordnungen, sind in `Reflexionsordnungen` und `Transmissionsordnungen` die Nummern j der Ordnungen und darunter die dazugehörigen Funktionsbeschreibungen "*fname a b*" anzugeben, wobei *fname* für eine der 5 Zeichenketten aus 4.1.4 steht. Daraus werden Funktionen $h_j^r(x)$ für die reflektierten Ordnungen bzw. $h_j^t(x)$ für die transmittierten Ordnungen bestimmt.

Das zu minimierende Funktional ist

$$J_1 = \int\limits_{X_1}^{X_2} \Big(\sum (e_j^+(x) - h_j^r(x))^2 + \sum (e_j^-(x) - h_j^t(x))^2 \Big) dx$$

wobei über die festgelegten Reflexions– und Transmissionsordnungen summiert wird. Durch das Programm wird ein lokales Minimum des mit der Trapezregel diskretisierten Integrals bestimmt.

Funktional Nr. 14:

Die Effizienzen der TE– und TM–Anteile bestimmter Ordnungen $\{j\}$ sollen in Abhängigkeit von $x \in [X_1, X_2]$ vorgegebene Funktionsverläufe $f_*(x)$ annehmen. Entsprechend der in `zu opt. Ord.:Reflex.-Trans.` festgelegten Anzahl sind in `Reflexionsordnungen` und `Transmissionsordnungen` die Nummern j der jeweiligen Ordnungen einzulesen. Da die vorgegebenen Funktionsverläufe für TE– und TM–Anteile unterschiedlich sein können, müssen bei n zu optimierenden Ordnungen jeweils $2n$ Funktionsbeschreibungen angegeben werden. Daraus werden Funktionen $f_*^r(x)$ und $f_*^t(x)$ bestimmt, wobei nach Vereinbarung f_{2j-1}^* den Verlauf der TE– Effizienz und f_{2j}^* den der TE– Effizienz festlegt, wobei diese Werte wie bei Funktional 4 zur TE– bzw. TM–Effizienz der einfallenden Welle p und q skaliert sind.

Das zu minimierende Funktional ist somit

$$J_{14} = \int\limits_{X_1}^{X_2} \sum \Big(\sum \Big(\big(e_{j,TE}^+ - p \cdot h_{2j-1}^r(x)\big)^2 + \big(e_{j,TM}^+ - q \cdot h_{2j}^r(x)\big)^2 \Big)$$

$$+ \sum \Big(\big(e_{j,TE}^- - p \cdot h_{2j-1}^t(x)\big)^2 + \big(e_{j,TM}^- - q \cdot h_{2j}^t(x)\big)^2 \Big) ,$$

wobei die Funktionen $h_*^r(x)$ und $h_*^t(x)$ die gegebenenfalls auf den Wertebereich $[0,1]$ abgeschnittenen Funktionen $f_*^r(x)$ und $f_*^t(x)$ bezeichnen.

Analog zu den Funktionalen 1 bis 5 brauchen die für die Funktionale 11 und Nr. 14 zu spezifizierenden Reflexions– bzw. Transmissionsordnungen nicht im gesamten vorgegebenen Wellenlängen– oder Einfallswinkelbereich zu existieren. In jeder Stützstelle der Quadratur wird die Funktional und Gradientenberechnung mit den dort auftretenden angegebenen Moden durchgeführt. Existiert im Bereich keine der angegebenen Ordnungen, dann werden keine Rechnungen durchgeführt.

Funktional Nr. 16:

Die reflektierte und/oder transmittierte Gesamtenergie soll vorgegebene Funktionsverläufe realisieren.

Ist in der Zeile `zu opt. Ord.:Reflex.-Trans.` die erste Zahl größer als 0 und die zweite gleich 0 wird das Funktional

$$\int\limits_{X_1}^{X_2} \Big(h_1^r(x) - \sum e_j^+(x) \Big)^2 dx$$

minimiert, wobei über alle auftretenden Reflexionsordnungen summiert wird. In jeder Stützstelle der Quadratur des Integrals erfolgt die Summation über alle dort auftretenden Reflexionsordnungen.

Ist in der Zeile zu `opt. Ord.:Reflex.-Trans.` die erste Zahl gleich 0 und die zweite Zahl größer als 0 wird das Funktional

$$\int_{X_1}^{X_2} \Big(h_1^t(x) - \sum e_j^-(x)\Big)^2 dx$$

minimiert, wobei über alle auftretenden Transmissionsordnungen summiert wird. Sind in der Zeile zu `opt. Ord.:Reflex.-Trans.` beide Zahlen positiv, wird die Summe beider Integrale minimiert.

<u>Funktional Nr. 17:</u>

In Analogie zu Funktional 7 unterscheidet sich dieses Funktional von Funktional 16 nur dadurch, dass die zu minimierende Funktion die Gestalt

$$\int_{X_1}^{X_2} \Big(\Big|f_1^r(x) - \sum e_j^+(x)\Big| + \Big|f_1^t(x) - \sum e_j^-(x)\Big|\Big) dx$$

besitzt.

<u>Funktional Nr. 18:</u>

Hier wird angestrebt, dass die reflektierten oder transmittierten Gesamtenergien der TE– und TM–Anteile getrennt voneinander vorgegebene Funktionsverläufe realisieren.

Wird in der Zeile zu `opt. Ord.:Reflex.-Trans.  1  0` eingeben, dann wird das Funktional

$$\int_{X_1}^{X_2} \Big(\Big(p \cdot h_1^r(x) - \sum e_{j,TE}^+(x)\Big)^2 + \Big(q \cdot h_2^r(x) - \sum e_{j,TM}^+(x)\Big)^2\Big) dx$$

minimiert, wobei über alle auftretenden Reflexionsordnungen summiert wird. Die Parameter p und q besitzen die gleiche Bedeutung wie bei Funktional 4.

Analog ist bei der Eingabe `0  1` das Funktional

$$\int_{X_1}^{X_2} \Big(\Big(p \cdot h_1^t(x) - \sum e_{j,TE}^-(x)\Big)^2 + \Big(q \cdot h_2^t(x) - \sum e_{j,TM}^-(x)\Big)^2\Big) dx$$

zu minimieren, und bei Eingabe von `1  1` die Summe beider Integrale.

<u>Funktional Nr. 19:</u>

Dieses Funktional unterscheidet sich von Funktional 18 nur dadurch, dass die zu minimierende Funktion die folgende Gestalt besitzt:

$$\int_{X_1}^{X_2} \Big(\Big|p \cdot h_1^r(x) - \sum e_{j,TE}^+(x)\Big| + \Big|(q \cdot h_2^r(x) - \sum e_{j,TM}^+(x)\Big|\Big) dx$$
$$+ \int_{X_1}^{X_2} \Big(\Big|p \cdot h_1^t(x) - \sum e_{j,TE}^-(x)\Big| + \Big|(q \cdot h_2^t(x) - \sum e_{j,TM}^-(x)\Big|\Big) dx$$

4.2. Zur Ausgabe

Für das Ergebnisfile gelten sinngemäß die Aussagen von 3.3, wobei jetzt die Effizienzen und Rayleigh–Koeffizienten des optimalen Gitters für alle Stützstellen der Quadraturformel ausgegeben werden.

5. Installation von Dipog-1.4

5.1. Compilieren der Programme

Der Quellcode wird in Form eines tgz–Archivs bereitgestellt, das nach Auspacken in einem Verzeichnis ein `Makefile`, eine Datei `mk.rules` mit Compiler–Optionen, das Handbuch als Postscript–Datei und die Unterverzeichnisse `direkt/`, `optim/` und `domain/` mit den dazugehörigen Fortran– und C–Programmen sowie einigen Eingabe–Files ablegt.

Vor dem Compilieren sollte noch die Datei `mk.rules` angepasst werden. Ein Beispiel für Irix64 zum Compilieren von optimierten 64–Bit Code ist auf der nächsten Seite angegeben.

Nach Eingabe von `make` werden in den Unterverzeichnissen die ausführbaren Programme **dir...**, **opt...** sowie **dom...** erzeugt und in das Unterverzeichnis `bin/` verschoben.

In den Unterverzeichnissen sind die jeweiligen Makefiles mit dem Namen `makefile` enthalten, in deren oberem Teil die Namen der ausführbaren Programme festgelegt werden können. In den vorbereiteten Varianten sind die Programme nur mit diesen Namen aufrufbar, da intern die zur Compilierung festgelegten Werte von `NAMEDIR`, `NAMEITER` und `NAMEPRO` geprüft werden. Wird diesen Parametern kein Wert zugewiesen, können die Namen der ausführbaren Programme beliebig geändert werden.

Wenn nicht alle Programme erzeugt werden sollen, ist das durch Änderung der Targets nach `all:` möglich.

Da zum Linken der ausführbaren Programme im Unterverzeichnis `optim/` auch Objekte aus `direkt/` und für die Programme **dom...** Objekte aus `direkt/` und `optim/` sowie jeweils das Archivfile `direkt/libhur.a` benötigt werden, ist beim Übersetzen der Programme die im `Makefile` vorgegebene Reihenfolge `direkt/`, `optim/`, `domain/` einzuhalten.

```
#######################################################
#
# You need to change only these machine specific data
#
#
# Compiler names
#
#######
CC     =   cc
FF     =   f90
LINKER =   $(FF)
#######
#
# Compiler flags
#
#######
CFLAGS  =  -64 -O
FFLAGS  =  -64 -O
LFLAGS  =  -64 -O  -o
OMPFLAGS=  -mp               # allow Multi-Threading
#######
#
# Libraries
#
#######
# LAPACK and BLAS Library
BLASLIB =  -L/usr/lib64 -lcomplib.sgimath
# PARDISO library
PARLIB  =  -L<path to libpardiso> -lpardiso2_sgi64omp
# OpenGL library
GL_LIB  =  -L/usr/lib64 -lGL -lX11
#######
#
# Remove and move without prompt
#
#######
RM = rm -f
MV = mv -f
#######################################################
#
# No change should be necessary from here on.
#

LIBHUR= ../direkt/libhur.a


.SUFFIXES:
.SUFFIXES: .f .c .o

.f.o:
        $(FF) $(FFLAGS) -c $<
.c.o:
        $(CC) $(CFLAGS) -c $<
#######################################################
```

Mit `make clean` werden die während der Compilation erzeugten Objekte und Bibiotheken in den 3 Verzeichnissen gelöscht, im Verzeichnis `bin/` verbleiben die ausführbaren Programme.

5.2. Ausführbare Programme

Die ausführbaren Programme aus dem Verzeichnis `bin/` können in ein beliebiges Verzeichnis kopiert werden, es sollte im Pfad des Nutzers liegen. Sie lesen die Eingabe–Files aus dem Verzeichnis, wo sie aufgerufen werden, und legen auch dort die Ergebnis–Files ab.

Bei den mit PARDISO gelinkten Programmen ist zu beachten, dass das Verzeichnis, in dem die Bibliothek installiert ist, im `LD_LIBRARY_PATH` enthalten ist. Anderenfalls können die Programme nicht geladen werden. Desweiteren ist diese Bibliothek auf Mehrprozessormaschinen Multi–Thread–fähig und benötigt die Umgebungsvariable `OMP_NUM_THREADS`. Der Wert von `OMP_NUM_THREADS` bestimmt die maximale Anzahl der Prozessoren, auf denen PARDISO parallele Prozesse zur Lösung der linearen Gleichungssysteme startet. Ist dieser Wert nicht gesetzt, sie sollte mindestens 1 und höchstens die Anzahl der Prozessoren sein, dann stoppen die Programme mit einer entsprechenden Ausschrift.

Auf Nachfrage können auch die ausführbaren Programme von Dipog-1.4 für bestimmte Architekturen bereitgestellt werden. Wenn auf die graphische Ausgabe verzichtet werden kann, wird dann nur eine Fortran-Laufzeitumgebung benötigt.

5.3. Hilfsprogramme zur graphischen Auswertung

Zur Unterstützung bei der grafischen Auswertung von längeren Rechnungen können sich neben den Berechnungsprogrammen im Verzeichnis `bin/` 3 bereits übersetzte Hilfsprogramme befinden.

Die beiden Programme **plotcurve** und **veceffic** arbeiten mit Ausgabedateien der Simulation von Beugungsgittern, wenn ein Eingabeparameter wie Wellenlänge, Einfallswinkel, Gitterhöhe oder Verschiebung der Struktur über homogener Zwischenschicht über einen Bereich mit vielen Zwischenwerten geändert wird.

plotcurve stellt mit 'gnuplot' Effizienz- und Intensitätsverläufe über dem variierten Eingabeparameter dar, die auch als eps–File abgespeichert werden können. Das Programm benötigt mindestens 4 Eingabeparameter

```
plotcurve file Arg Scan sa-sb
```

wobei `file` die Dipog–Ausgabedatei und `Arg` die dem variierten Eingabeparameter entsprechende Zeichenkette ist, z.B. `WEL`, `EFO`, `EWP`. Die beiden Eingabeparameter `Scan sa-sb` entsprechend den zu extrahierenden Funktionswerten. Soll zum Beispiel der Effizienzverlauf der 1-ten transmittierten TE–Mode dargestellt werden, die in der Ausgabedatei folgendes Format hat:

```
TET:     1  180.00 157.48   ( 0.29170,-0.28026)      47.0311
0...:....1...:....2...:....3...:....4...:....5...:....6.
```

dann extrahiert die Angabe `"TET1 54-60"` für `Scan sa-sb` als die Werte zwischen der 54. und 60. Stelle aus den Zeilen, die mit `"TET:        1"` beginnen, und stellt sie als Funktion von `Arg` dar.

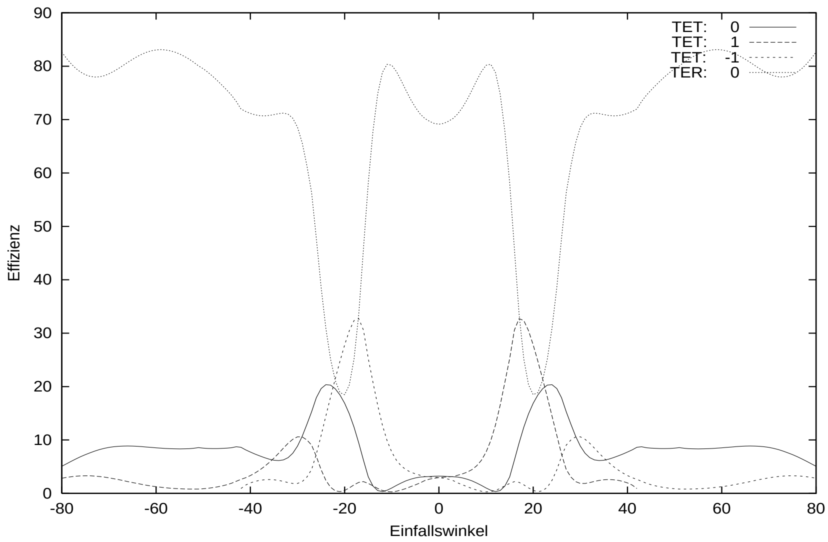

Abb. 10. Ausgabe von **plotcurve**

Die Angabe von Parametern der Form `Scan sa-sb` kann beliebig oft wiederholt werden. Es ist auch möglich, die Nummern der Ordnungen als Liste an die Zeichenkette anzuhängen. So würde die Angabe `"TET0,1,-1,2,5 54-60"` die entsprechenden Werte (falls sie existieren) für die transmittierten TE–Ordnungen 0, 1, -1, 2 und 5 extrahieren und als Funktionsverlauf plotten. Die Grafik in Abb. 11 wurde mit der Eingabezeile

```
plotcurve file efo tet0,1,-1 54-60 ter0 54-60
```

erstellt. Im Übrigen bemüht sich das Programm, bei der korrekten Erstellung der Eingabeparameter zu helfen.

veceffic stellt mit 'gnuplot' die Richtung und Effizienz aller Moden dar, wobei die Länge der Vektoren dem Enegieanteil der entsprechenden Ordnung entspricht, die Länge des Vektors für die einfallende Welle aber halbiert ist.

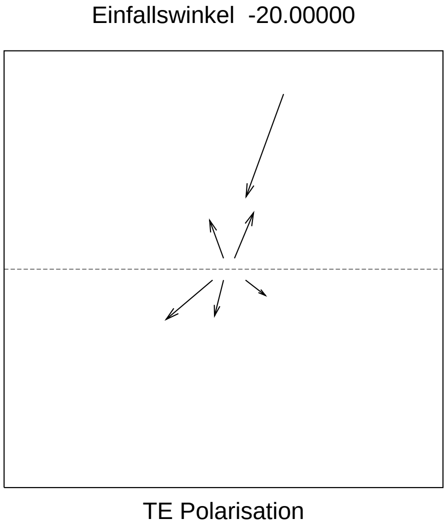

Abb. 11. Ausgabe von **veceffic**

Bei Aufruf der Programme wird eine Anleitung über die erforderlichen Aufrufparameter gegeben.

Das Programm **plotoptim** dient dazu, nach einer Optimierungsrechnung die optimale Geometrie darzustellen. Insbesondere kann man bei Eingabe von `level` > 0 sehen, wie sich diese Geometrie möglicherweise geändert hat.

6. Literatur

Die mathematischen und numerischen Grundlagen der benutzten Verfahren zur Lösung der direkten und Optimierungsprobleme sind in den folgenden Arbeiten beschrieben:

J. Elschner, G. Schmidt: *Diffraction in periodic structures and optimal design of binary gratings. I. Direct problems and gradient formulas.* 1998, Math. Meth. Appl. Sci. **21** (1998), 1297–1342.

J. Elschner, G. Schmidt: *The numerical solution of optimal design problems for binary gratings.* J. Comput. Physics **146** (1998), 603–626.

J. Elschner, R. Hinder, G. Schmidt: *Finite element solution of conical diffraction problems*, Adv. Comp. Math. **16** (2002), No. 2-3, 139-156.

J. Elschner, R. Hinder, G. Schmidt: *Direct and Inverse Problems for Diffractive Structures – Optimization of Binary Gratings.* In: W. Jäger, H.-J. Krebs (eds.), *Mathematics, key technology for the future: joint projects between universities and industry*, Springer Verlag Berlin Heidelberg, 2003, 293–304.

Die in der Bibliothek PARDISO benutzten Verfahren sind in den folgenden Arbeiten zu finden:

O. Schenk, K. Gärtner: *Solving unsymmetric sparse systems of linear equations with PARDISO*, erscheint in Journal of Future Generation Computer Systems, 2003.

O. Schenk, K. Gärtner, W. Fichtner: *Scalable parallel sparse factorization with left–right looking strategy on shared memory multiprocessor*, BIT **40** (2000), 158–176.