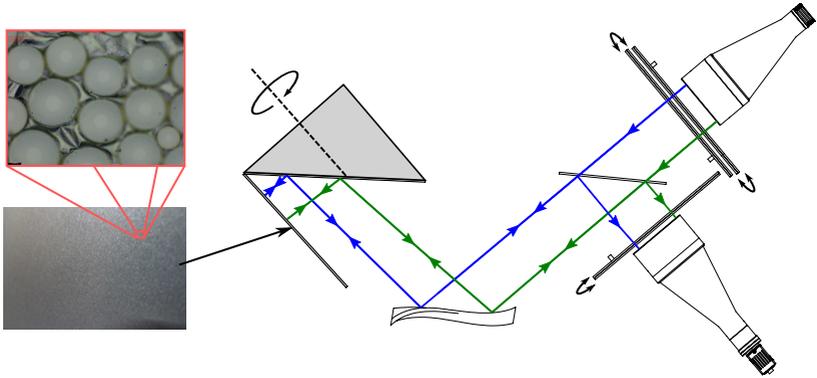


Abbildende Ellipsometrie mit Lichtwegumkehrung für die optische Charakterisierung von gekrümmten Oberflächen



Christian Emanuel Negara

**Abbildende Ellipsometrie mit
Lichtwegumkehrung für die optische
Charakterisierung von gekrümmten Oberflächen**

Schriftenreihe Automatische Sichtprüfung und Bildverarbeitung
Band 21

Herausgeber: Prof. Dr.-Ing. habil. Jürgen Beyerer

Lehrstuhl für Interaktive Echtzeitsysteme
am Karlsruher Institut für Technologie

Fraunhofer-Institut für Optronik, Systemtechnik
und Bildauswertung IOSB

Abbildende Ellipsometrie mit Lichtwegumkehrung für die optische Charakterisierung von gekrümmten Oberflächen

von
Christian Emanuel Negara

Karlsruher Institut für Technologie
Lehrstuhl für Interaktive Echtzeitsysteme

Abbildende Ellipsometrie mit Lichtwegumkehrung für die
optische Charakterisierung von gekrümmten Oberflächen

Zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der Ingenieur-
wissenschaften von der KIT-Fakultät für Informatik des Karlsruher
Instituts für Technologie (KIT) genehmigte Dissertation

von Christian Emanuel Negara

Tag der mündlichen Prüfung: 26. Januar 2023
Erster Gutachter: Prof. Dr.-Ing. habil. Jürgen Beyerer
Zweiter Gutachter: Prof. Dr. rer. nat. Uli Lemmer

Impressum



Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
KIT Scientific Publishing
Straße am Forum 2
D-76131 Karlsruhe

KIT Scientific Publishing is a registered trademark
of Karlsruhe Institute of Technology.
Reprint using the book cover is not allowed.

www.ksp.kit.edu



*This document – excluding parts marked otherwise, the cover, pictures and graphs –
is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC BY 4.0):
<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.en>*



*The cover page is licensed under a Creative Commons
Attribution-Non Commercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0):
<https://creativecommons.org/licenses/by-nd/4.0/deed.en>*

Print on Demand 2023 – Gedruckt auf FSC-zertifiziertem Papier

ISSN 1866-5934
ISBN 978-3-7315-1302-5
DOI 10.5445/KSP/1000158762

Kurzfassung

Die Ellipsometrie ist ein optisches Messverfahren zur Oberflächencharakterisierung und Dünnschichtmessung unter Verwendung von polarisiertem Licht, das aufgrund der hohen Sensitivität insbesondere in der Halbleiterindustrie eine breite Anwendung findet. Licht hat einen Polarisationszustand, der durch vier reelle Parameter beschrieben werden kann, die zu einem sogenannten Stokes-Vektor zusammengefasst werden. Es gibt einen Kalkül, in dem die Polarisationszustandsänderungen an optischen Elementen mit Hilfe von reellen 4×4 -Matrizen modelliert werden können, den sogenannten Müller-Matrizen. Diese hängen nichtlinear von den physikalischen Materialparametern ab. Viele komplexe Aufgabenstellungen in der Ellipsometrie können durch diese Abstraktionsebene über die Matrix-Algebra gelöst werden, ohne auf die elektromagnetische Wellennatur des Lichtes zurückgreifen zu müssen.

Bei der Messung wird das Licht an der Oberfläche spekulär reflektiert und anschließend von einem Polarisationszustandsdetektor erfasst. Die Polarisationszustandsmessung lässt sich durch drei Matrizen beschreiben: die Modulationsmatrix der Beleuchtung, die die Stokes-Vektoren der emittierten Lichtstrahlen enthält, die Müller-Matrix des Prüflings, die in mehrere Müller-Matrizen faktorisiert werden kann und die Analysematrix des Detektors, die die Stokes-Vektoren des einfallenden Lichts auf eine Matrix mit gemessenen Intensitäten abbildet.

Die Ellipsometrie ist ein indirektes, modellbasiertes Messverfahren. Die Oberfläche wird dabei als eine Schichtstruktur modelliert, die von mehreren sog. Modellparametern abhängt. Diese unterteilen sich in Material-bezogene Modellparameter zur Beschreibung der Schichtstruktur und Topographie-bezogene Modellparameter zur Beschreibung der Oberflächenform. Die

gesuchten Modellparameter stehen mit den Messwerten in einem nichtlinearen funktionalen Zusammenhang, wodurch spezielle Auswertelgorithmen erforderlich sind. Standardmäßig werden in der spektroskopischen Ellipsometrie einige wenige unbekannte Modellparameter aus vielen spektralen Messdaten bestimmt. Unter Annahme von Gauß'schem Sensorrauschen wird über iterative Verfahren eine Maximum-Likelihood-Schätzung der gesuchten Modellparameter berechnet.

Ein Nachteil der Ellipsometrie ist die geometrische Einschränkung der Prüf-anordnung aufgrund des Reflexionsgesetzes. Dadurch wird eine Vermessung von gekrümmten Oberflächen i. Allg. verhindert. Ein relativ neues Messprinzip basierend auf Lichtwegumkehrung und mikrostrukturierten Retroreflektoren ermöglicht jedoch die Erfassung von beliebigen Freiformflächen. Dieses neue Messprinzip und die damit verbundenen Änderungen der Messabbildung, der Messunsicherheiten, der Mehrdeutigkeiten, der Freiheitsgrade und der Auswertelalgorithmik einer Polarisationsmessung bilden den Forschungsschwerpunkt dieser Arbeit. Es wurde ein Einwellenlängen-Ellipsometer für die großflächige Prüfung gekrümmter Oberflächen realisiert und dazu ein angepasster Kalibrier-Algorithmus entwickelt, der mittels einer Matrixfaktorisierung mit Nebenbedingungen die Modulations- und Analysematrix simultan berechnet.

In den meisten Anwendungsfällen reduziert sich beim neuen Messverfahren die Anzahl der Freiheitsgrade der gemessenen Müller-Matrix von 16 auf 10. Außerdem verdoppelt sich die Anzahl der Elemente in der Lösungsmenge der Modellparameter, falls das untersuchte Medium nicht-depolarisierend und invariant gegenüber Lichtwegumkehrung ist. Bekannte inverse Abbildungen für die Ellipsometrie an ebenen Oberflächen wurden für die Anwendung an gekrümmten Oberflächen generalisiert. Dies bringt eine deutliche Performancesteigerung gegenüber den standardmäßig verwendeten iterativen Optimierungsverfahren. Bei der Einwellenlängen-Ellipsometrie ist zudem der Vorteil einer probabilistischen Datenauswertung gegenüber direkten Verfahren über inverse Abbildungen verschwindend gering, da die Anzahl der Messwerte oft unwesentlich größer als die Anzahl der Unbekannten ist.

An gekrümmten Oberflächen muss zusätzlich zu anderen Modellparametern auch die unbekannte Oberflächennormale bestimmt werden. Hierfür werden zwei Verfahren vorgestellt. Das erste Verfahren ist ein Marker-basiertes Verfahren, ähnlich dem monokularen Stereo, und ermöglicht eine grobe Abschätzung des Oberflächenreliefs ohne Verwendung von kalibrierten Polarisationsmessungen. Das zweite Verfahren misst die Oberflächennormalen anhand von Polarisationsmessungen. Nach bisherigem Technikstand ist hierbei Vorwissen über die Materialstruktur der Oberfläche erforderlich. Das vorgestellte Verfahren benötigt jedoch kein Vorwissen über die Materialstruktur. Ermöglicht wird dies durch einen speziellen optischen Aufbau und eine Modulation der Polarisationsseigenschaften des Retroreflektors im Zeitmultiplexverfahren. Die Oberflächennormale wird dann aus dem Richtungsvektor des reflektierten Lichts bestimmt.

Danksagung

Die vorliegende Dissertation entstand im Rahmen meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fraunhofer Institut für Optronik, Systemtechnik und Bildauswertung IOSB. Im Folgenden möchte ich einige Personen namentlich erwähnen, die durch den wissenschaftlichen Austausch oder sonstige Unterstützung wertvolle Beiträge für die Arbeit geleistet oder diese überhaupt erst ermöglicht haben.

Prof. Dr.-Ing. Jürgen Beyerer danke ich einerseits für die wissenschaftliche Betreuung der Arbeit durch Anregungen, Verbesserungsvorschläge und Koordinierung. Andererseits möchte ich mich auch für die kontinuierliche Förderung der Arbeit und für die persönliche Unterstützung bedanken. Prof. Dr. rer. nat. Uli Lemmer danke ich für die freundliche Übernahme des Korreferats und für die Bereitschaft für Kooperationen.

Den Mitarbeitern am IOSB und am Lehrstuhl für Interaktive Echtzeitsysteme möchte ich ebenfalls für die wissenschaftlichen Diskussionen und die hilfreichen Tipps danken, woraus wertvolle Beiträge für die Arbeit entstanden sind. Ohne Anspruch auf Vollständigkeit möchte ich hierbei Dr. Alexey Pak, Dr.-Ing. Christian Frese, Dr. Tim Zander, Chia-Wei Chen, Dr.-Ing. Zheng Li, Dr.-Ing. Johannes Meyer, Dr.-Ing. Miro Taphanel, Dr.-Ing. Robin Gruna und Dr.-Ing. Ding Luo namentlich erwähnen. Einen besonderen Beitrag hat Dr.-Ing. Matthias Hartrumpf durch die Entdeckung des neuartigen Messprinzips geleistet, auf dem diese Arbeit beruht, und durch die gemeinsamen Arbeiten und Publikationen in diesem Themenfeld. Prof. Dr.-Ing. Thomas Längle möchte ich für die langjährige wissenschaftliche Förderung, Projektfinanzierung sowie Flexibilität bei der Vereinbarkeit von Beruf und Privatleben danken. Dr.-Ing. Christian Frese, Dr.-Ing. Johannes Meyer, Dr. Alexey Pak, Dr. Tim Zander und

Dr.-Ing. Miro Taphanel möchte ich zudem fürs Korrekturlesen der umfangreichen Arbeit und für die Verbesserungsvorschläge danken. Den Fortschritt der Arbeit habe ich zudem auch den vielen studentischen Hilfskräften zu verdanken, die durch die Implementierung von Software-Prototypen, Durchführung von experimentellen Untersuchungen und Analyse der experimentellen Ergebnisse mir wichtige Aufgaben abgenommen und wertvolle Erkenntnisse geliefert haben. Dr.-Ing. Alexander Schwarz und seinem Team aus der Abteilung Signatorik am Fraunhofer IOSB gilt mein Dank für die Nutzungsmöglichkeit der BRDF-Roboteranlage und für die Klärung meiner zahlreichen Rückfragen.

Außerhalb der wissenschaftlichen Tätigkeit rund um das Thema Ellipsometrie hatte ich am IOSB die Gelegenheit, in vielen weiteren Themenbereichen Erfahrungen zu sammeln und in Industrie- und Forschungsprojekten mitzuwirken, wofür ich den Kollegen der Abteilung Sichtprüfsysteme und darüber hinaus für die gemeinsame Zeit und gute Zusammenarbeit danken möchte.

Auch privat habe ich viel Unterstützung auf dem langen Weg von den ersten Ideen bis zum Abschluss der Promotion erfahren. Meiner Frau Christina danke ich für die langjährige Begleitung entlang dieses Weges und für Ihre permanente Unterstützung in allen Lebensbereichen trotz vieler Entbehrungen. Meinem Sohn Gabriel verdanke ich viel Freude und seine zahlreichen Versuche, mir bei der Arbeit behilflich zu sein, waren ebenfalls wichtig. Ein großer Dank gilt meinen Eltern, auf die immer Verlass ist, wann immer ich ihre Hilfe benötige. Auch für die Korrektur der Dissertation möchte ich meiner Mutter, mit Unterstützung von Wolfgang Gerhardt, danken. Meinen Verwandten und Freunden danke ich für die abwechslungsreiche, gemeinsame Zeit und insbesondere meinen Schwestern für die Unterstützung bei der Kinderbetreuung. Trotz dieser großen Unterstützung, hätte ich die Arbeit ohne Gottes Hilfe und die Kraft und Zuversicht die er mir gab, nicht abschließen können, weshalb ihm mein besonderer Dank gilt.

Köln, Mai 2023

Christian Negara

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	i
Danksagung	v
Notation	xiii
1 Einleitung	1
1.1 Motivation	1
1.2 Problemstellung und Zielsetzung	3
1.3 Beiträge	5
1.4 Gliederung der Arbeit	7
2 Stand der Forschung und Technik	9
2.1 Ellipsometrie und spektroskopische Ellipsometrie	9
2.2 Messanordnungen und Messprinzip	11
2.3 Abbildende Ellipsometrie	13
2.4 Messanordnungen mit Lichtwegumkehrung	14
2.5 Sensorkalibrierung	17
2.6 Retroreflektierende Strukturen	18
3 Modellierung der Emission und Detektion von polarisiertem Licht	21
3.1 Beschreibung des Polarisationszustands von Licht	21
3.1.1 Maxwell'sche Gleichungen und Lichtausbreitung	21
3.1.2 Homogene und inhomogene ebene Wellen	31
3.1.3 Jones-Formalismus	35

3.1.4	Müller-Formalismus	38
3.2	Polarisationszustandsdetektion	46
3.2.1	Messabbildung	48
3.2.2	Aufbauten von Polarisationszustandsdetektoren	49
3.3	Polarisationszustandsgeneration	52
3.3.1	Messabbildung	53
3.3.2	Aufbauten von Polarisationszustandsgeneratoren	53
3.4	Reflexion und Transmission bei Schichtsystemen	54
3.5	Bestimmung der Modellparameter mit Ellipsometrie ohne Lichtwegumkehrung	58
4	Modellierung von mikrostrukturierten Retroreflektoren	63
4.1	Retroreflektierende Strukturen	63
4.2	Räumliche Symmetrie und Polarisationserhaltung	65
4.3	Räumliche und zeitliche Kohärenz	72
4.4	Kugel-Reflektoren	87
4.4.1	Intensitäts- und Polarisations-eigenschaften	91
4.4.2	Physikalisch-optische Simulation	106
4.5	Tripel-Reflektoren	115
4.5.1	Intensitäts- und Polarisations-eigenschaften	117
4.5.2	Strahlenoptische Simulation	123
4.6	Phasenkonjugierende Spiegel	125
4.7	Zusammenfassung	131
5	Abbildendes telezentrisches Retroreflex-Ellipsometer	135
5.1	Messanordnung	135
5.2	Reziprozitätsbeziehungen bei Strahlteilern	141
5.3	Messabbildung bei variabler Oberflächenneigung	144
5.4	Berücksichtigung von unkollimiertem und polychromatischem Licht	146
5.5	Funktionale Zusammenhänge bei Aufbauten mit und ohne Lichtwegumkehr	148
5.6	Freiheitsgrade von Müller-Matrizen	151

5.7	Simultane Bestimmung der Neigungswinkel und Materialparameter	153
5.7.1	Neigungswinkelbestimmung mit Probenpräparation	154
5.7.2	Simultane Bestimmung der Neigungswinkel für isotrope Medien	157
5.7.3	Rotierender Reflektor mit richtungsabhängiger Müller-Matrix	158
5.8	Zusammenfassung	161
6	Sensorkalibrierung	163
6.1	Zwei-Wege Kalibrierung mittels Singulärwertzerlegung	164
6.2	Teilproblem Matrixfaktorisierung	164
6.3	Teilproblem elliptische Regression	167
6.4	Teilproblem Bestimmung der Rotation und Orientierung	170
6.5	Teilproblem Charakterisierung des Strahlteilers	175
6.6	Zusammenfassung	177
7	Experimentelle Ergebnisse	179
7.1	Vermessung von Retroreflexfolien mit spektroskopischer Ellipsometrie	179
7.2	Messung der Mikrokugel-Retroreflexfolie mit dem abbildenden Ellipsometer	184
7.2.1	Gemessene Müller-Matrix	185
7.2.2	Winkelabhängigkeit der Müller-Matrix	186
7.2.3	Verbesserung des Signal-Rausch-Verhältnisses	188
7.3	Kalibrierung	194
7.3.1	Quantifizierung des Sensorrauschens	194
7.3.2	Vermessung der Polarisationsoptiken	195
7.3.3	Modulations- und Analysematrix	196
7.3.4	Polarisationseigenschaften des Strahlteilers	198
7.3.5	Brechungsindex des Oberflächenspiegels	199
7.4	Messung bei gedrehtem Polarisator	201
7.5	Untersuchung gekrümmter Oberflächen	204

7.5.1	Bestimmung der Topographie-bezogenen Modellparameter mit Probenpräparation	204
7.5.2	Bestimmung der Topographie-bezogenen Modellparameter bei Substraten	206
7.5.3	Bestimmung der Topographie- und Material-bezogenen Modellparameter	207
8	Abschlussbemerkungen	213
8.1	Zusammenfassung der Beiträge und Ergebnisse	213
8.2	Ausblick	218
Literatur	221
Eigene Publikationen	249
Patentanmeldungen	251
Abkürzungsverzeichnis	253

Anhang

A	Anhang	257
A.1	Fourier-Transformation	257
A.1.1	Eindimensionale Fourier-Transformation	257
A.1.2	Mehrdimensionale Fourier-Transformation	262
A.2	Notation für Tensorrechnung	264
A.3	Fourier-Transformation der Suszeptibilität	264
A.4	Generelle harmonische ebene Wellen	266
A.4.1	Homogene Wellen	266
A.4.2	Inhomogene Wellen	268
A.5	Ortsaufgelöste Jones-Matrizen	269
A.6	Ortsaufgelöste Müller-Matrizen	272
A.7	Strahlstärke von reflektiertem Licht an Kugelreflektoren	275
A.8	Näherung erster Ordnung für polychromatisches, unkollimiertes Licht	278

A.9 Rauschunterdrückung bei digitalen Bildsensoren 287

Notation

Nachfolgend ist die in dieser Arbeit verwendete Notation dargestellt.

Allgemein

reelle, skalare Größe	lateinische, kursive und griechische Buchstaben	a, α
komplexe, skalare Größe	unterstrichene Buchstaben	$\underline{a}, \underline{\alpha}$
skalares Quaternion	doppelt unterstrichene, lateinische Buchstaben	$\underline{\underline{a}}$
reeller Vektor	fett gedruckte, kursive Buchstaben	$\mathbf{a}, \boldsymbol{\alpha}$
komplexer Vektor	fett gedruckte, unterstrichene und kursive Buchstaben	$\underline{\underline{\mathbf{a}}}, \underline{\underline{\boldsymbol{\alpha}}}$
reelle Matrix oder reeller Tensor	fett gedruckte Buchstaben	$\mathbf{a}, \boldsymbol{\alpha}$
komplexe Matrix oder komplexer Tensor	fett gedruckte, unterstrichene Buchstaben	$\underline{\underline{\mathbf{a}}}, \underline{\underline{\boldsymbol{\alpha}}}$
skalarwertige reelle Zufallsvariable	Schreibmaschinenschrift	a
vektorwertige reelle Zufallsvariable	fett gedruckte, kursive Schreibmaschinenschrift	\mathbf{a}
matrixwertige reelle Zufallsvariable	fett gedruckte Schreibmaschinenschrift	\mathbf{a}
Menge	Kalligraphie-Schrift in Schriftart Computer Modern Math Symbol	\mathcal{A}

Operator Kalligraphie-Schrift in Schriftart AMS Euler \mathcal{A}
Script

Konstanten

c_0	Vakuumlichtgeschwindigkeit: $c_0 := 299\,792\,458 \frac{\text{m}}{\text{s}}$
ϵ_0	elektrische Feldkonstante: $\epsilon_0 \approx 8,854\,187\,8128(13) \cdot 10^{-12} \frac{\text{As}}{\text{Vm}}$
μ_0	magnetische Feldkonstante: $\mu_0 \approx 1,256\,637\,062\,12(19) \cdot 10^{-6} \frac{\text{N}}{\text{A}^2}$
\mathbf{o}_n	Nullvektor mit n Elementen
$\mathbf{1}_n$	Einsvektor mit n Elementen
\mathbf{O}_n	quadratische Nullmatrix der Größe n
\mathbf{I}_n	Einheitsmatrix der Größe n
$\mathbf{J}_{-\text{M}}$	Jones-Matrix eines idealen Spiegels: $\mathbf{J}_{-\text{M}} := \mathbf{J}_{-\Delta}(180^\circ)$
\mathbf{M}_{M}	Müller-Matrix eines idealen Spiegels: $\mathbf{M}_{\text{M}} := \mathbf{M}_{\Delta}(180^\circ)$
\mathbf{M}_{P}	Müller-Matrix eines idealen, horizontal ausgerichteten Polarisators: $\mathbf{M}_{\text{P}} := \mathbf{M}_{\Psi}(90^\circ)$
\mathbf{T}_x	Abbildungsmatrix einer Ebenenspiegelung an der x -Ebene: $\mathbf{T}_x := \mathbf{diag}(-1, 1, 1)$
\mathbf{T}_{yz}	Abbildungsmatrix einer Achsenspiegelung an der x -Achse: $\mathbf{T}_{yz} := \mathbf{diag}(1, -1, -1)$

Lateinische Symbole und Variablen

$ a $	Absolutbetrag des Skalars a
\mathcal{A}_{ls}	Region innerhalb der Referenzebene der Beleuchtung (Beleuchtungsebene)
\mathcal{A}_{r}	Region innerhalb der Referenzebene des Retroreflektors (Reflektorebene)
\mathcal{A}_{d}	Region innerhalb der Referenzebene des Detektors (Detektorebene)
$\arctan 2(\underline{y}, \underline{x})$	komplexe Arkustangens-Funktion mit zwei Argumenten: $\arctan 2(\underline{y}, \underline{x}) := -i \log \left((\underline{x} + iy) / \sqrt{\underline{x}^2 + \underline{y}^2} \right)$
$\arg(\underline{a})$	Argument der komplexen Zahl \underline{a}
$\underline{\mathbf{B}}, \underline{\mathbf{B}}$	reelle bzw. komplexe magnetische Flussdichte
$BRDF$	Bidirektionale Reflektanzverteilungsfunktion
c	Lichtgeschwindigkeit in einem nicht-absorbierenden Medium
\underline{c}	komplexe Lichtgeschwindigkeit in einem absorbierenden Medium
\mathbb{C}	komplexe Zahlen
$\text{col}(\mathbf{A})$	Menge der Spaltenvektoren von \mathbf{A}
$\underline{\mathbf{D}}$	elektrische Flussdichte
\mathcal{D}	Menge der glatten Funktionen mit kompaktem Träger
\mathcal{D}'	Menge der Distributionen mit Testfunktionen aus \mathcal{D}
$DI(\mathbf{M})$	Depolarisationsindex der Müller-Matrix \mathbf{M}
$\text{diag}(\underline{a}_1, \dots, \underline{a}_n)$	Diagonalmatrix mit den Diagonalelementen $(\underline{a}_1, \dots, \underline{a}_n)$
$\det \mathbf{A}$	Determinante der Matrix \mathbf{A}
$\underline{\mathbf{E}}, \underline{\mathbf{E}}$	reelle bzw. komplexe elektrische Feldstärke
ER	Löschungsverhältnis von Polarisatoren
$\mathcal{F}(\mathcal{A}, \mathcal{B})$	Menge der Funktionen mit Definitionsmenge \mathcal{A} und Zielmenge \mathcal{B}

$\underline{H}, \underline{H}$	reelle bzw. komplexe magnetische Feldstärke
i	imaginäre Einheit von komplexen Zahlen
i, j, k	imaginäre Einheiten von Quaternionen
I, \underline{I}	reelle bzw. komplexe Intensität
$\text{id}_{\mathcal{A}}$	identische Abbildung über die Menge \mathcal{A}
\underline{j}	komplexe Leitungsstromdichte
\underline{J}	Jones-Matrix
$\underline{J}_{\Psi}(\Psi)$	Jones-Matrix eines optischen Bauelements mit linearem Dichroismus für den polarisationsabhängigen Verlustwinkel Ψ : $\underline{J}_{\Psi}(\Psi) := \begin{pmatrix} \sin \Psi & 0 \\ 0 & \cos \Psi \end{pmatrix}$
$\underline{J}_{\Delta}(\Delta)$	Jones-Matrix eines Verzögerungselements in Transmissionsanordnung mit Verzögerung Δ und horizontaler schneller Achse: $\underline{J}_{\Delta}(\Delta) := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\Delta} \end{pmatrix}$
$\underline{J}_{\rightarrow}(\phi)$	Jones-Matrix der optischen Rotation um den Winkel ϕ : $\underline{J}_{\rightarrow}(\phi) := \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}$
$\underline{J}_{\perp}(\Psi, \Delta, R)$	Jones-Matrix einer Probe mit linearem Dichroismus, Verzögerung und Absorption in Reflexions- oder Transmissionsanordnung: $\underline{J}_{\perp}(\Psi, \Delta, R) := \sqrt{2R} \underline{J}_{\Psi}(\Psi) \underline{J}_{\Delta}(\Delta)$
\underline{J}_f	Jacobi-Matrix der vektorwertigen Funktion \underline{f}
$\underline{k}, \underline{k}$	reeller bzw. komplexer Wellenvektor
L	Strahldichte
\underline{M}	Müller-Matrix

$\mathbf{M}_\Psi(\Psi)$ Müller-Matrix eines optischen Bauelements mit linearem Dichroismus für den polarisationsabhängigen Verlustwinkel Ψ :

$$\mathbf{M}_\Psi(\Psi) := \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\cos 2\Psi & 0 & 0 \\ -\cos 2\Psi & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sin 2\Psi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sin 2\Psi \end{pmatrix}$$

$\mathbf{M}_\Delta(\Delta)$ Müller-Matrix eines Verzögerungselements mit Verzögerung Δ :

$$\mathbf{M}_\Delta(\Delta) := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \Delta & \sin \Delta \\ 0 & 0 & -\sin \Delta & \cos \Delta \end{pmatrix}$$

$\mathbf{M}_r(\phi)$ Müller-Matrix der optischen Rotation um den Winkel ϕ :

$$\mathbf{M}_r(\phi) := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos 2\phi & \sin 2\phi & 0 \\ 0 & -\sin 2\phi & \cos 2\phi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$\mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}, \phi)$ Müller-Matrix eines um den Winkel ϕ gedrehten optischen Bauteils, welches nicht gedreht die Müller-Matrix \mathbf{M} aufweist:

$$\mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}, \phi) := \mathbf{M}_r(-\phi)\mathbf{M}\mathbf{M}_r(\phi)$$

$\mathbf{M}_L(\Psi, \Delta, R)$ Müller-Matrix einer Probe mit linearem Dichroismus, Verzögerung und Absorption in Reflexions- oder Transmissionsanordnung:

$$\mathbf{M}_L(\Psi, \Delta, R) := 2R\mathbf{M}_\Psi(\Psi)\mathbf{M}_\Delta(\Delta)$$

$\mathbf{M}, \underline{\mathbf{M}}$ reelle bzw. komplexe Magnetisierung

$\mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ multivariate Normalverteilung mit Erwartungswert $\boldsymbol{\mu}$ und Kovarianzmatrix $\boldsymbol{\Sigma}$

$\mathbf{N}(\mathbf{M})$ Normierte Müller-Matrix: $\mathbf{M}/(\mathbf{M})_{11}$

Null (\mathbf{A})	Kern der durch $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ induzierten linearen Abbildung: Null (\mathbf{A}) := $\{\mathbf{x} \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{o}_n\}$
$\mathcal{P}(\mu)$	Poisson-Verteilung mit Erwartungswert und Varianz μ
P	Polarisationsgrad
$\underline{P}, \underline{P}$	reelle bzw. komplexe elektrische Polarisation
$\mathbf{R}(\mathbf{v}, \alpha)$	Rotationsmatrix im \mathbb{R}^3 um den Winkel α um die Rotationsachse \mathbf{v}
\mathbb{R}	reelle Zahlen
\mathbb{R}_+	positive, reelle Zahlen
R_a	Mittenrauwert
S	Strahlstärke
$\mathcal{S}, \underline{\mathcal{S}}$	Poynting-Vektor und komplexer Poynting-Vektor
$\mathcal{S}, \underline{\mathcal{S}}$	reeller bzw. komplexer Stokes-Vektor
\mathcal{S}_n	symmetrische Gruppe vom Grad n
S^{n-1}	Einheitssphäre im n -dimensionalen Raum: $S^{n-1} := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \ \mathbf{x}\ = 1\}$
\mathcal{S}	Menge der Schwartz-Funktionen
\mathcal{S}'	Menge der Distributionen mit Testfunktionen aus \mathcal{S}
$\text{tr}(\mathbf{A})$	Spur der Matrix \mathbf{A}
$\mathcal{U}(a, b)$	Gleichverteilung auf dem Intervall $[a, b]$
\underline{U}	Jones-Vektor
\mathcal{Z}	Menge der Fourier-Transformationen aus \mathcal{D}
\mathcal{Z}'	Menge der Distributionen mit Testfunktionen aus \mathcal{Z}

Griechische Symbole und Variablen

Δ	optischer Gangunterschied bzw. Verzögerung
ϵ, ϵ	reelle Permittivität als Skalar bzw. Tensor

$\underline{\epsilon}, \underline{\epsilon}$	komplexe Permittivität als Skalar bzw. Tensor
ϵ	Quotient von großer und kleiner Hauptachse der Polarisationsellipse
$\zeta_m, \underline{\zeta}_m$	reelle magnetische Suszeptibilität als Skalar bzw. Tensor
$\underline{\zeta}_{-m}, \underline{\zeta}_{-m}$	komplexe magnetische Suszeptibilität als Skalar bzw. Tensor
θ_K	Ablenkwinkel bzw. Polarwinkel bei Kugelreflektoren
ϑ	Azimutwinkel der großen Hauptachse der Polarisationsellipse
κ	Extinktionskoeffizient
$\underline{\kappa}$	komplexer zweidimensionaler Wellenvektor
λ	Wellenlänge
$\bar{\lambda}$	mittlere Wellenlänge eines Emissionsspektrums
$\mu, \underline{\mu}$	reelle Permeabilität als Skalar bzw. Tensor
$\underline{\mu}, \underline{\mu}$	komplexe Permeabilität als Skalar bzw. Tensor
ν	Beugungswinkel beim Huygens'schen Beugungsintegral
$\underline{\rho}$	komplexer Reflexionskoeffizient
$\varrho, \underline{\varrho}$	reelle bzw. komplexe Ladungsdichte
φ	Phasenverschiebung
Φ	Strahlungsfluss
$\chi_e, \underline{\chi}_e$	reelle elektrische Suszeptibilität als Skalar bzw. Tensor
$\underline{\chi}_{-e}, \underline{\chi}_{-e}$	komplexe elektrische Suszeptibilität als Skalar bzw. Tensor
Ψ	polarisationsabhängiger Verlustwinkel
ω	Kreisfrequenz
ω_d	objektseitiger Öffnungswinkel des telezentrischen Objektivs
ω_{ls}	objektseitiger Öffnungswinkel der telezentrischen Beleuchtung
Ω	Raumwinkel

Operatoren und mathematische Symbole

(\underline{a}_i)	Vektor bestehend aus den Elementen \underline{a}_i
(\underline{a}_{ij})	Matrix bestehend aus den Matrixelementen \underline{a}_{ij}
$(\underline{a}_{-i_1 i_2 \dots i_n})$	komplexer Tensor der Stufe n mit den Tensor-Elementen $\underline{a}_{-i_1 i_2 \dots i_n}$ und dazugehörigen Multiindizes (i_1, i_2, \dots, i_n)
$(\underline{\mathbf{a}})_i$	i -tes Element des Vektors $\underline{\mathbf{a}}$
$(\underline{\mathbf{A}})_{ij}$	Element einer Matrix $\underline{\mathbf{A}}$ in Zeile i und Spalte j
$(\underline{\mathbf{a}})_{\mathcal{I}}$	Teilvektor von $\underline{\mathbf{a}} = (\underline{a}_i)$ bestehend aus den Elementen \underline{a}_i mit den Indizes $i \in \mathcal{I}$
$(\mathcal{A})_{\mathcal{I}}$	Menge von Teilvektoren, die aus den Elementen der Menge \mathcal{A} gewonnen werden: $(\mathcal{A})_{\mathcal{I}} := \{(\underline{\mathbf{v}})_{\mathcal{I}} \mid \underline{\mathbf{v}} \in \mathcal{A}\}$
$(\underline{\mathbf{A}})_{\mathcal{I} \times \mathcal{J}}$	eine Teilmatrix von $\underline{\mathbf{A}} = (\underline{a}_{ij})$ bestehend aus den Elementen \underline{a}_{ij} mit den Indizes $(i, j) \in \mathcal{I} \times \mathcal{J}$
$\underline{\mathbf{A}}^{\top}$	Transponierte der Matrix $\underline{\mathbf{A}}$
$\underline{\mathbf{A}}^{\dagger}$	Adjungierte der Matrix $\underline{\mathbf{A}}$
$\underline{a}^*, \underline{\mathbf{A}}^*$	Konjugierte der komplexen Zahl \underline{a} bzw. elementweise, komplexe Konjugation der komplexen Matrix $\underline{\mathbf{A}}$
$\langle \underline{\mathbf{a}}, \underline{\mathbf{b}} \rangle$	Skalarprodukt zweier Vektoren: $\langle \underline{\mathbf{a}}, \underline{\mathbf{b}} \rangle = \sum_i (\underline{\mathbf{a}})_i (\underline{\mathbf{b}})_i$
$\langle \underline{\mathbf{a}}, \underline{\mathbf{b}} \rangle_s$	Standardskalarprodukt zweier Vektoren: $\langle \underline{\mathbf{a}}, \underline{\mathbf{b}} \rangle = \sum_i (\underline{\mathbf{a}})_i^* (\underline{\mathbf{b}})_i$
$\underline{\mathbf{a}} \times \underline{\mathbf{b}}$	Kreuzprodukt der Vektoren $\underline{\mathbf{a}} = (\underline{a}_i)$ und $\underline{\mathbf{b}} = (\underline{b}_i)$: $\underline{\mathbf{a}} \times \underline{\mathbf{b}} = \begin{pmatrix} \underline{a}_2 \underline{b}_3 - \underline{a}_3 \underline{b}_2 \\ \underline{a}_3 \underline{b}_1 - \underline{a}_1 \underline{b}_3 \\ \underline{a}_1 \underline{b}_2 - \underline{a}_2 \underline{b}_1 \end{pmatrix}$
$\text{vec}(\underline{\mathbf{A}})$	spaltenweise Vektorisierung der Matrix $\underline{\mathbf{A}}$
$\det \underline{\mathbf{A}}$	Determinante der Matrix $\underline{\mathbf{A}}$
$\underline{\mathbf{A}} \otimes \underline{\mathbf{B}}$	Kronecker-Produkt der Matrizen $\underline{\mathbf{A}}$ und $\underline{\mathbf{B}}$

$\underline{\mathbf{A}} \odot \underline{\mathbf{B}}$	elementweise Multiplikation zweier Matrizen $\underline{\mathbf{A}}$ und $\underline{\mathbf{B}}$ der gleichen Dimension
$\mathcal{A}f, \mathcal{A}\{f(x)\}$	Anwendung des Operators \mathcal{A} auf die Funktion f
$f _{\mathcal{A}}, f(x) _{x \in \mathcal{A}}$	Restriktion einer Funktion f auf die Definitionsmenge \mathcal{A}
$E\{\cdot\}$	Erwartungswert einer Zufallsvariablen
$V\{\cdot\}$	Varianz einer Zufallsvariablen
$\langle f(t) \rangle_t$	zeitliche Mittelung einer Funktion f über die Definitionsmenge von f
$\langle f(\mathbf{x}) \rangle_{\mathbf{x}}$	örtliche Mittelung einer Funktion f über die Definitionsmenge von f
$E_{uv}\{\mathbf{m}(u,v)\}$	elementweises, arithmetisches Mittel einer matrixwertigen, pixelabhängigen Musterfunktion \mathbf{m}
$S_{uv}\{\mathbf{m}(u,v)\}$	elementweise, empirische Standardabweichung einer matrixwertigen, pixelabhängigen Musterfunktion \mathbf{m}
\mathcal{F}	Fourier-Transformation
\mathcal{F}^{-1}	inverse Fourier-Transformation
\mathcal{F}_T	zeitliche Fourier-Transformation
\mathcal{F}_P	zweidimensionale örtliche Fourier-Transformation
\mathcal{F}_S	dreidimensionale örtliche Fourier-Transformation
\tilde{f}	zeitliche Fourier-Transformation von f
$\tilde{\tilde{f}}$	zeitliche und dreidimensionale örtliche Fourier-Transformation von f
\hat{f}	zeitliche und zweidimensionale örtliche Fourier-Transformation von f
\dot{f}	Distribution
$\overline{\tilde{f}}$	Fourier-Transformierte der Distribution \dot{f}
$\mathcal{R}f$	Spiegelung von f : $\mathcal{R}\{f(x)\} = f(-x)$
$\frac{df}{dx}, \frac{df(x)}{dx}$	Ableitung der Funktion f nach der Variablen x in Leibnitz-Notation
$\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f(x)}{\partial x}$	partielle Ableitung der Funktion f nach der Variablen x

∇	Nabla-Operator
$\langle \nabla, \underline{\mathbf{F}} \rangle$	Divergenz des Vektorfelds $\underline{\mathbf{F}}$ als formales Skalarprodukt von ∇ und $\underline{\mathbf{F}}$
$\nabla \times \underline{\mathbf{F}}$	Rotation des Vektorfelds $\underline{\mathbf{F}}$ als formales Kreuzprodukt von ∇ und $\underline{\mathbf{F}}$
$\langle \nabla, \nabla \rangle \underline{\mathbf{F}}$	Laplace-Operator eines Vektorfelds $\underline{\mathbf{F}}$ als formales Skalarprodukt zweier Nabla-Operatoren
$\langle \mathbf{x}, \nabla \rangle$	Formales Skalarprodukt zwischen einem Vektor \mathbf{x} und dem Nabla-Operator
$\Re \{ \underline{\mathbf{a}} \}, \Re \{ \underline{\mathbf{f}} \}$	Realteil einer komplexen Zahl $\underline{\mathbf{a}}$ bzw. Realteil einer komplexen Funktion $\underline{\mathbf{f}}$
$\Im \{ \underline{\mathbf{a}} \}, \Im \{ \underline{\mathbf{f}} \}$	Imaginärteil einer komplexen Zahl $\underline{\mathbf{a}}$ bzw. Imaginärteil einer komplexen Funktion $\underline{\mathbf{f}}$
$(\mathbf{A})^+$	Moore-Penrose-Inverse einer Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit vollem Rang: $(\mathbf{A})^+ := \begin{cases} (\mathbf{A}^\top \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^\top & \text{falls } m \geq n \\ \mathbf{A}^\top (\mathbf{A} \mathbf{A}^\top)^{-1} & \text{sonst} \end{cases}$
$f \overset{x}{*} g$	Örtliche Faltung von f und g in drei Raumdimensionen
$ \mathcal{A} $	Lebesgue-Borel-Maß der Menge \mathcal{A} , wobei \mathcal{A} eine Borelmenge ist
δ_{ij}	Kronecker-Delta von i und j
$[[1, n]]$	Intervall ganzer Zahlen: $\{1, 2, \dots, n\}$
$\int_{\mathcal{A}} f(\mathbf{x}) d\mathcal{A}$	Oberflächenintegral einer Funktion f über einer zweidimensionalen Menge $\mathcal{A} \subset \mathbb{R}^3$ mit skalarem Oberflächenelement $d\mathcal{A}$
$\ \underline{\mathbf{A}} \ _{\mathbb{F}}$	Frobeniusnorm: $\ \underline{\mathbf{A}} \ _{\mathbb{F}} := \sqrt{\sum_{i,j} (\underline{\mathbf{A}})_{ij} ^2}$

1 Einleitung

1.1 Motivation

Die Ellipsometrie ist ein optisches Messverfahren für die Schichtdickenmessung im Nanometerbereich, das seit dem 19. Jahrhundert bekannt ist [Dru89]. Darüber hinaus kann man mit der Ellipsometrie den Brechungsindex, den Kristallinitätsgrad, die elektrische Leitfähigkeit, die Oberflächenrauheit u. v. m. quantitativ erfassen [Tom99, Gar13b]. Bei der Ellipsometrie wird Licht mit bekanntem Polarisationszustand an einer Probe reflektiert oder transmittiert und anschließend der Polarisationszustand wieder gemessen [Azz99]. Das Messprinzip der Ellipsometrie beruht auf einer modellbasierten Auswertung der Polarisationszustandsänderung [Jel91]. Eine Änderung des Polarisationszustands tritt üblicherweise auf, wenn polarisiertes Licht unter einem schrägen Einfall auf eine Oberfläche auftrifft. Die Änderung des Polarisationszustands hängt von der Schichtstruktur der Oberfläche sowie vom Einfallswinkel des Lichts ab und lässt sich anhand von bekannten Gesetzmäßigkeiten der Optik berechnen [Hec02]. Über ein Fitting der Modellparameter oder eine Inversion dieser funktionalen Beziehungen lassen sich die Modellparameter bestimmen. Da sehr viele unterschiedliche Modellparameter wie Schichtdicke, Doppelbrechung, Oberflächenneigung, Kristallinitätsgrad u. v. m. eine Polarisationszustandsänderung bewirken, ergibt sich ein sehr großes Anwendungspotenzial für die Ellipsometrie [Gar13b]. Die Abbildung der physikalischen Realität auf mögliche Polarisationszustandsänderungen ist jedoch nicht injektiv, so dass es bei der Bestimmung der Modellparameter häufig zu Mehrdeutigkeiten kommt [Tom99]. Zudem können natürlich nur so viele Modellparameter der Oberfläche bestimmt werden, wie Messwerte vorhanden sind; die übrigen Modellparameter sind als bekannt vorauszusetzen.

Ein Vorteil der Ellipsometrie gegenüber vielen anderen optischen Verfahren ist der aus dem gemessenen Polarisationszustand resultierende Informationsgewinn. Wird ein spektroskopisches Ellipsometer für Reflektanzmessungen kalibriert, so wird durch Messung der Intensität, der Wellenlänge und des Polarisationszustands die Licht-Materie-Interaktion sehr umfangreich erfasst.

Eine weite Verbreitung fand die Ellipsometrie in der Halbleiterindustrie, wo sie einen festen Platz eingenommen hat [Tom99]. Als universell einsetzbare Messtechnik hat sie sich darüber hinaus in Regierungs- und Industrielaboratorien sowie in der Forschung und an Universitäten etabliert [Tom99, Fuj07]. Außerhalb der Halbleiterindustrie sind viele Industriezweige von dieser Messtechnik noch nicht erschlossen. Während früher die indirekte Messung mittels numerischen Optimierungsverfahren ein Problem darstellte, welches durch das Aufkommen von leistungsstarken Rechnern weitestgehend gelöst wurde [Fuj07], sind die heutigen Hürden vor allem das physikalisch-modellbasierte Messprinzip der Ellipsometrie [Fuj07] und die geometrisch-optischen Einschränkungen. Das physikalisch-modellbasierte Messprinzip führt dazu, dass sich die Anwendung der Ellipsometrie mit wenig Vorwissen über die Materialstruktur als schwierig gestaltet [Tom99]. Ist ausreichend Vorwissen über die Probe vorhanden, kann das Messprinzip auch von Vorteil sein, falls das physikalische Modell die Realität adäquat abbildet, da die gesuchte Kenngröße der Oberfläche in vielen Anwendungsfällen mit der Messgröße in einem bekannten Zusammenhang steht. In diesen Fällen sind bspw. keine Kalibrierstandards wie bei vielen anderen Messverfahren der Dünnschichtmessung erforderlich [Abo15]. Die geometrisch-optischen Einschränkungen ergeben sich aus dem Reflexionsgesetz, da mit Ellipsometrie meist spiegelnde Oberflächen gemessen werden [Asp13]. Als Konsequenz ist eine präzise Justage von Lichtquelle, Probe und Detektor erforderlich [Par02]. Zudem wird der Lichtpfad nicht durch die Probe, sondern durch die Messapparatur vorgegeben, die die Richtungen des emittierten und detektierten Lichts festlegt. Folglich beschränkt sich der Anwendungsbereich der Ellipsometrie fast nur auf ebene Oberflächen. Eine großflächige Prüfung von gekrümmten Oberflächen im Durchlauf oder im Stop-and-go-Verfahren, wie sie in der industriellen Sichtprüfung üblich ist [Str19], ist mit herkömmlichen Methoden und Ellipsometrie-Aufbauten nicht realisierbar.

Die Möglichkeit Beschichtungen im Nano- und Mikrometerbereich vollflächig zu vermessen, wäre für die Industrie von großem Nutzen. Funktionale Schichten finden sich z. B. in der Automobilindustrie [Tag97], in der optischen Industrie [Han09, Duw19] und in der flexiblen Elektronik, z. B. bei organischen Leuchtdioden (engl. *organic light emitting diode*, OLEDs) [Käl21]. In vielen Anwendungsbereichen findet momentan nur eine stichprobenhafte, punktuelle Messung der Oberflächenstruktur statt. Im Rahmen der sog. Industrie 4.0 sind flexible Sensorlösungen für eine 100%-Prüfung von Oberflächen wünschenswert [Zür20], weil dadurch eine Steigerung der Qualität und der Ressourceneffizienz sowie eine Minimierung des Ausschusses und der Materialkosten erreicht wird. Die vorliegende Arbeit soll einen Beitrag dazu leisten, diese Lücke im Bereich der optischen Messtechnik zu schließen.

1.2 Problemstellung und Zielsetzung

Der klassische Aufbau eines Ellipsometers besteht aus einer Lichtquelle und einem Detektor, wobei das Licht spekulär an einer Probe unter schrägem Lichteinfall reflektiert [Azz99] und hier als Ellipsometrie ohne Lichtwegumkehrung (engl. *unidirectional ellipsometry*, UE) bezeichnet wird. Das Beleuchtungsmodul emittiert Licht mit einem festen oder modulierten Polarisationszustand und wird als Polarisationszustandsgenerator (engl. *polarization state generator*, PSG) bezeichnet. Der Detektor detektiert den Polarisationszustand und wird als Polarisationszustandsdetektor (engl. *polarization state detector*, PSD) bezeichnet. Aus dem Stand der Technik ist eine Variante dieses Ellipsometrie-Aufbaus bekannt, bei der das Licht eine doppelte Reflexion an der Probenoberfläche erfährt und hier als Ellipsometrie mit Lichtwegumkehrung (engl. *return-path ellipsometry*, RPE) bezeichnet wird. Bisher wurde ein Spiegel verwendet, um das von der Probe reflektierte Licht zurück zu reflektieren [Azz81b]. Der Aufbau kann die Proben-Justage vereinfachen und ermöglicht auch Messungen an nicht-planen Oberflächen.

In den letzten Jahren wurde am Fraunhofer IOSB eine neue Variante der RPE entwickelt und vorgestellt, bei dem die Lichtwegumkehrung nicht mit einem Spiegel, sondern mit einem mikrostrukturierten Retroreflektor erreicht

wird [Har99, Har12]. Diese Modifikation stellt einen vielversprechenden Ansatz dar, um erstmals die Ellipsometrie an annähernd beliebig geformten Oberflächen anzuwenden. Der erste Prototyp ist ein Sensormodul zur parallelen Messung von vier Intensitäten mittels Laser-Scanning und arbeitet als Zeilensensor im Zeilenabtastverfahren. Der darin verwendete PSD weist Abtastraten im MHz-Bereich auf und misst drei von vier Freiheitsgraden des Polarisationszustands. Aufgrund der partiellen Polarisationszustandsmessung verdoppeln sich die Mehrdeutigkeiten bei der Bestimmung der Modellparameter. Der Polarisationszustandsdetektor mit Amplitudenteilung (engl. *division-of-amplitude photopolarimeter*, DoAmP) stellt ein alternatives und optimales Design zur vollständigen Messung des Polarisationszustands dar [Azz03]. Die Güte von alternativen Aufbauten eines PSD basierend auf Strahlungsteilung lassen sich daran messen, wie nah das Gütemaß an den Optimalwert des DoAmP heranreicht. Gütemaße sind z. B. die Determinante der Analysematrix des PSD sowie die Konditionszahl. Der DoAmP gibt zwar Aufschluss über das prinzipielle Design eines optimalen PSD. Dessen Herstellung gestaltet sich jedoch aufgrund von speziellen Polarisationsoptiken als aufwändig. Daher werden alternative Aufbauten des DoAmP basierend auf Standard-Polarisationsoptiken vorgestellt, die bezüglich der Gütemaße ebenfalls optimal sind.

Um präzise Polarisationsmessungen durchzuführen, werden handelsübliche Ellipsometer kalibriert. Gängige Kalibrierverfahren sind bei der RPE aufgrund der Lichtwegumkehrung jedoch eher ungeeignet. Neben der Kalibrierung gibt es auch bei der Polarisationsmessung zwischen der RPE und der UE Unterschiede, die eine geänderte Messabbildung und Datenauswertung erfordern. Üblicherweise werden die Modellparameter in der Ellipsometrie über eine nichtlineare Optimierung berechnet. Einige wenige geschlossene Lösungen sind für die Einwellenlängen-Ellipsometrie basierend auf der UE bekannt [Azz89b, Rus91, Rus99]. Diese weisen gegenüber iterativen Verfahren eine deutlich bessere Performanz auf, was im Echtzeit-Betrieb ein wichtiges Kriterium darstellt. Allerdings setzen sie eine bekannte Oberflächenneigung voraus. Da die Oberflächenneigung den Polarisationszustand ebenfalls verändert, können die Einflüsse von Material-Parametern und Topographie-Parametern nicht ohne Weiteres separiert werden und müssen

üblicherweise gemeinsam berechnet werden. Die zwei zusätzlichen Unbekannten der Oberflächenneigung verringern außerdem die Anzahl der Material-Parameter, die mit einer Messung bestimmt werden können. Ein wichtiges Ziel dieser Arbeit besteht daher darin, alternative Aufbauten, Algorithmen und Kalibrierverfahren aufzuzeigen, die die zuvor genannten Nachteile ausgleichen, um die Mächtigkeit der Ellipsometrie an ebenen Oberflächen mit möglichst wenig Einschränkungen bei der Messung von beliebig-geformten Oberflächen zu erhalten.

1.3 Beiträge

Die vorliegende Arbeit analysiert die Möglichkeiten und Einschränkungen der RPE basierend auf Retroreflexfolien. Die Retroreflexfolie bildet bei diesem neuartigen Messprinzip eine kritische Komponente, da deren Polarisatoneigenschaften nur innerhalb sehr enger Toleranzen variieren dürfen. Da das Licht aus unterschiedlichen Richtungen auf den Retroreflektor auftrifft, spielt ebenfalls die Einfallswinkelabhängigkeit eine wichtige Rolle. Die Eignung der in dieser Arbeit verwendeten Retroreflexfolie für Ellipsometrie-Anwendungen kann theoretisch begründet werden und wird experimentell bestätigt. Zudem werden Qualitätsmerkmale geeigneter Retroreflexfolien aufgezeigt, die sowohl für die Auswahl als auch für die Herstellung solcher Folien wichtig sind.

Auf dem neuartigen Messprinzip aufbauend, werden zwei Anordnungen der RPE betrachtet und untersucht: die Laser-Ellipsometrie und die Kamera-basierte, abbildende Ellipsometrie. Arbeiten zur Laser-Ellipsometrie behandeln vorwiegend den optischen Aufbau des PSD. Es wird ein PSD auf Basis des DoAmP unter Verwendung von Verzögerungsplättchen vorgestellt, der sich im Vergleich zum Stand der Technik durch eine deutlich vereinfachte Herstellung auszeichnet. Es wird theoretisch gezeigt, dass bei der Einwellenlängen-Ellipsometrie mit dem geänderten Aufbau die Gütemaße optimale Werte annehmen. Ebenfalls vorgestellt wird ein PSD für den Einsatz in der spektroskopischen Ellipsometrie, dessen Gütemaße erstmalig im gesamten Wellenlängenbereich von 400 nm bis 1000 nm annähernd optimale

Werte annehmen. Dieser Wellenlängenbereich spielt für Silizium-basierte Photodetektoren eine herausragende Rolle.

Die zweite Anordnung der RPE ist ein Prototyp basierend auf der Kamera-basierten, abbildenden Ellipsometrie. Die abbildende Ellipsometrie wird nicht wie sonst üblich mit Mikroskopie kombiniert [Asi08], sondern ermöglicht bei dieser Ausführung die vollflächige Abbildung größerer Objekte wie Linsen und Parabolspiegeln. Der vorgestellte Aufbau des abbildenden Ellipsometers ist ein Einwellenlängen-Ellipsometer. Im Gegensatz zur Laser-Ellipsometrie wird kein monochromatisches Licht, sondern schmalbandiges Licht emittiert. Obwohl dieser Prototyp als Einwellenlängen-Ellipsometer ausgeführt ist, ist das neue Messprinzip basierend auf Retroreflexion nicht darauf beschränkt und der Übergang zur spektroskopischen Ellipsometrie ist unkompliziert.

Für verschiedene Ausführungen der RPE werden Messabbildungen präsentiert, um geneigte Oberflächen, Lichtwegumkehrung, Strahlteilung und Retroreflexion zu berücksichtigen. Zudem werden bisher unbekannt analytische Lösungen mit dem Fokus auf geneigte Oberflächen vorgestellt und ein funktionaler Zusammenhang zwischen den Messwerten der UE und der RPE hergestellt. Durch Kombination bekannter und neuer Formeln lassen sich einige wichtige Aufgabenstellungen der Ellipsometrie an gekrümmten Oberflächen über direkte Verfahren lösen. Dies bringt eine deutliche Performan- cesteigerung mit sich und erleichtert die Echtzeit-Datenauswertung bei der abbildenden Ellipsometrie erheblich.

Mit der Einwellenlängen-RPE können an isotropen Medien zwei Neigungswinkel und ein Material-Parameter bestimmt werden, bspw. eine Schichtdicke. Die Anzahl der simultan bestimmbarer Material-Parameter kann jedoch erhöht werden, indem die Topographie des Prüflings auf andere Art und Weise gemessen wird. Die Verwendung von zusätzlicher Sensorik ist die naheliegendste Möglichkeit 3D-Messdaten zu gewinnen. In Laborumgebungen bietet sich eine andere Möglichkeit an, auf einfache Art und Weise 3D-Messdaten zu

gewinnen, ohne den optischen Aufbau zu ändern. Hierfür wird ein Messverfahren vorgestellt, welches eine (zerstörungsfreie) Präparation des zu untersuchenden Prüflings erfordert. Dabei wird nach der Aufnahme der Polarisationsmessungen ein retroreflektierender Staub oder retroreflektierende Schnipsel auf die Probe aufgetragen und mit monokularem Stereo basierend auf Orthogonalprojektion die 3D-Form bestimmt. Eine dritte Möglichkeit 3D-Daten während der Messung zu gewinnen, besteht in der Modulation der Polarisationsseigenschaften des Retroreflektors während der Messung.

Die genannten Methoden der separaten Messung von Topographie-Parametern bieten den Vorteil, dass bereits bekannte Methoden der Datenauswertung in der Ellipsometrie an ebenen Oberflächen auf gekrümmte Oberflächen übertragen werden können. Allerdings sind die Möglichkeiten der RPE zur Oberflächencharakterisierung gegenüber der UE etwas eingeschränkt, was in den meisten Anwendungsfällen jedoch unerheblich ist. Die Ursache für die Einschränkungen liegt in der Lichtwegumkehrung. Daher treten die Einschränkungen der RPE sowohl bei ebenen als auch gekrümmten Oberflächen auf. Eine Gegenüberstellung der RPE und der UE hinsichtlich der Vor- und Nachteile bildet einen Teil dieser Arbeit.

1.4 Gliederung der Arbeit

Die Arbeit beginnt in Kapitel 2 mit einer Einführung in das Messprinzip der Ellipsometrie, die Datenauswertung und bekannte Aufbauten von Ellipsometern aus dem Stand der Technik. Es wird auf die Einwellenlängen-Ellipsometrie, die spektroskopische Ellipsometrie, die punktmessende und die abbildende Ellipsometrie an ebenen Oberflächen ebenso eingegangen wie auf neue Entwicklungen der Ellipsometrie mit Lichtwegumkehrung an gekrümmten Oberflächen. Kapitel 3 behandelt die physikalischen und mathematischen Grundlagen der Lichtausbreitung und die beiden Darstellungsmöglichkeiten des Polarisationszustands als Jones- und Stokes-Vektoren. Auf örtlich variierende Jones- und Stokes-Vektoren bzw. Jones- und Müller-Matrizen wird ein besonderes Augenmerk gelegt, da sie für nachfolgende Berechnungen

erforderlich sind. Demgegenüber wird in der Literatur der Jones- und Müller-Formalismus meist auf unendlich ausgedehnte ebene Wellen eingeschränkt. Weiterhin werden Aufbauten zur Messung des Polarisationszustands und der Polarisationszustandsänderung von Licht behandelt sowie das direkte Problem und das inverse Problem bei der Datenauswertung adressiert. Aufbauend auf diesen theoretischen Grundlagen werden in Kapitel 3 die Polarisationsseigenschaften von mikrostrukturierten Retroreflexfolien untersucht. Retroreflexfolien basierend auf Mikrokugeln und Mikrotripeln sowie phasenkonjugierende Spiegel werden in die Analyse mit einbezogen. Ein abbildendes Ellipsometer zur Oberflächencharakterisierung beliebig geformter Oberflächen basierend auf der RPE mit Retroreflexion wird in Kapitel 5 vorgestellt. Die Datenauswertung und mögliche Lösungsansätze für das Problem der unbekanntenen Oberflächenneigung werden ebenfalls in diesem Kapitel behandelt. Sehr wichtig für eine praktische Umsetzung des vorgeschlagenen Sensordesigns ist das Thema Sensorkalibrierung aus Kapitel 6. Durch die Kombination von abbildender Ellipsometrie und der RPE gestaltet sich die Sensorkalibrierung schwieriger als bei der UE. Der vorgestellte, angepasste Kalibrieralgorithmus verwendet ähnlich zur etablierten Eigenwert-basierten Kalibrierung Methoden der linearen Algebra und der Numerik, unterscheidet sich jedoch deutlich von dieser hinsichtlich der algorithmischen Struktur. In Kapitel 7 werden schließlich die Möglichkeiten des abbildenden Ellipsometers zur Charakterisierung von ebenen und gekrümmten Oberflächen evaluiert. Die Zusammenfassung in Kapitel 8 schließt die Arbeit ab.

2 Stand der Forschung und Technik

Die Ellipsometrie als Messtechnik hat seit ihren Anfängen vor über 100 Jahren wichtige technologische Entwicklungen durchgemacht, die nachfolgend kurz zusammengefasst werden. Auch wenn sich das Messprinzip und die erzielbaren Messunsicherheiten über viele Jahre kaum geändert haben [Rot45, Gon02], haben erst diese Weiterentwicklungen und Automatisierungen es ermöglicht, die Ellipsometrie für eine Vielzahl von Problemstellungen und insbes. für die Dünnschichtmessung als Messtechnik zu etablieren [The81]. Eine wesentliche Weiterentwicklung wurde am Fraunhofer IOSB erst kürzlich erfunden: Die Ellipsometrie mit Lichtwegumkehrung unter Ausnutzung von Retroreflexion [Har99, Har12]. Diese Neuerung stellt die Grundlage dar, auf der die vorliegende Arbeit aufbaut.

2.1 Ellipsometrie und spektroskopische Ellipsometrie

Die Ellipsometrie ist ein modellbasiertes, indirektes Messverfahren. Zu messende Kenngrößen einer spiegelnden Oberfläche, wie die Schichtdicke einer Nano-Beschichtung, werden nicht direkt gemessen. Gemessen werden nur Polarisationszustandsänderungen von polarisiertem Licht, das an einer Oberfläche gespiegelt oder transmittiert wird. Die gesuchten Kenngrößen werden als Modellparameter bezeichnet und stehen mit der Polarisationszustandsänderung und ggf. weiteren bekannten oder unbekanntem Modellparametern in einem meist nichtlinearen Zusammenhang. Das direkte Problem, also die Berechnung der Polarisationszustandsänderung aus den Modellparametern, ist

analytisch oder mit direkten Verfahren lösbar. Die Berechnung der Modellparameter aus der Polarisationszustandsänderung bildet das inverse Problem und ist i. Allg. nur mit numerischen, iterativen Verfahren lösbar. Das inverse Problem ist i. Allg. schlecht gestellt [Liu21] und erfordert Vorwissen sowohl über die Schichtstruktur der Oberfläche als auch über den Suchraum der Modellparameter. Bei der Datenauswertung spielt die numerische Optimierung eine zentrale Rolle. Für wichtige Spezialfälle existieren jedoch geschlossene Lösungen.

Die Oberflächencharakterisierung erfolgt in der Ellipsometrie meist über ein phänomenologisches Modell, dass die zu untersuchende Probe als ein Schichtstapel aus mehreren, meist homogenen Medien und plan-parallelen Grenzflächen approximiert. Auch wenn dieses Modell eine Abstraktion der realen Probe darstellt, hat es sich als sehr fruchtbar erwiesen [Tom99]. Es können damit die Polarisierungseigenschaften komplexer Proben mit rauen Oberflächen, rauen Grenzflächen, variablem Brechungsindex und Diffusionsschichten beschrieben werden. Durch die Unterteilung der Probe in mehrere Schichten können bekannte Gesetze für Reflexion und Transmission von Licht an einer Grenzschicht genutzt werden, um die Polarisationszustandsänderung für die ganze Probe zu berechnen.

Eine Messung mit einem Ellipsometer kann (quasi-)monochromatisch, schmalbandig oder spektral aufgelöst erfolgen. Eine breitbandige Messung ergibt hingegen keinen Sinn. Der Grund liegt in der Dispersion von Materialien und der daraus resultierende Mittelung des Messsignals. Daher wurde bereits in den Anfängen der Ellipsometrie entweder monochromatisch beleuchtet oder spektral aufgelöst gemessen [Dru88, Dru89, Rot45]. Die anfangs manuelle Spektralmessung wurde erst Anfang der 1970er automatisiert [Asp14]. Gleichzeitig erhöhte sich aufgrund der spektral aufgelösten Messung der Rechenaufwand.

Obwohl der Fokus dieser Arbeit auf der Einwellenlängen-Ellipsometrie liegt, sind für manche Untersuchungen spektral aufgelöste Messungen erforderlich.

Diese wurden mit dem spektroskopischen Ellipsometer Smart SE der Fa. Horiba¹ durchgeführt. Dieses Ellipsometer dient auch als Referenz, um Messwerte von UE und RPE zu vergleichen. Dabei wird entweder aus den spektral aufgelösten Messwerten ein Wert bei der mittleren Wellenlänge des Emissionsspektrums des Einwellenlängen-Ellipsometers herausgegriffen oder die spektral aufgelösten Messwerte mit dem Emissionsspektrum gewichtet.

2.2 Messanordnungen und Messprinzip

Jedes Ellipsometer beinhaltet im Wesentlichen zwei Komponenten: einen PSD und einen PSG [Azz99]. Der PSD misst den Polarisationszustand des Lichts, das in den Detektor einfällt. Hier kann eine vollständige oder eine partielle Messung des Polarisationszustands erfolgen. Bei einer vollständigen Messung wird der sog. Stokes-Vektor bestehend aus vier Stokes-Parametern vollständig gemessen. Dazu sind vier Intensitätsmessungen erforderlich. Bei einer partiellen Messung wird nur eine Untermenge der vier Stokes-Parameter oder Linearkombinationen hiervon gemessen.

Welche Messanordnung für eine Aufgabenstellung erforderlich ist, hängt vom zu untersuchenden Prüfling ab. Handelt es sich um ebene, optisch isotrope Medien, reicht eine Messung der ellipsometrischen Winkel Ψ und Δ aus. Bei anisotropen, nicht-depolarisierenden Medien ist die Messung der 2×2 -Jones-Matrix erforderlich. Depolarisierende Proben erfordern schließlich die Messung der reellen 4×4 -Müller-Matrix. Bei der spektroskopischen Ellipsometrie werden diese Matrizen für jeden Spektralkanal gemessen, was zu einer entsprechend großen Anzahl von Messwerten führt. Methoden der Schätztheorie sind zumindest bei der spektroskopischen Ellipsometrie wichtig, da wenige unbekannte Modellparameter aus vielen spektroskopischen Messwerten geschätzt werden müssen, die zudem unterschiedliche Messunsicherheiten aufweisen. Bei der Einwellenlängen-Ellipsometrie bringt eine probabilistische Datenauswertung nicht immer einen Mehrwert, da die Anzahl der Messwerte

¹ <https://www.horiba.com/de/scientific/products/ellipsometers/spectroscopic-ellipsometers/details/smart-se-14909/> (25.12.2020)

oft unwesentlich größer als die Anzahl der Unbekannten ist. Dies resultiert in eine vergleichsweise geringe Fisher-Information, die mit der Anzahl der unabhängigen Observablen akkumuliert [Geo09]. Lediglich bei der Dimensionsreduktion der Polarisationsmessungen, z. B. von den 16 Elementen der Müller-Matrix auf die drei unabhängigen Messgrößen Ψ , Δ und R , kann eine Fortpflanzung von Verteilungen nach [JCG09] sinnvoll sein.

Grundsätzlich gibt es drei Möglichkeiten einen PSG zu betreiben: Es wird entweder ein fester, ein kontinuierlich modulierter oder ein diskret modulierter Polarisationszustand emittiert [Azz78a]. Nur für die Messung von Ψ und Δ ist ein fester, emittierter Polarisationszustand ausreichend. Die Modulation erfolgt entweder über mechanisch rotierende oder photoelektrisch modulierte Polarisations-elemente. Der PSD kann ebenfalls über eine kontinuierliche oder diskrete Modulation den Polarisationszustand messen. Zusätzlich gibt es auch die Möglichkeit diesen gänzlich ohne Modulation oder bewegliche Komponenten zu messen. Gemessen wird immer eine Linearkombination der Elemente der Müller-Matrix. Ein Müller-Matrix-Ellipsometer misst die gesamte Müller-Matrix und für die Messung müssen vier linear unabhängige Stokes-Vektoren emittiert und vier Stokes-Vektoren gemessen werden. Ein häufig verwendeter Aufbau zur Messung der Müller-Matrix ist in Abb. 2.1 abgebildet. Dieses Ellipsometer verwendet sowohl auf Beleuchtungs- als auch auf Detektorseite rotierende Kompensatoren (engl. *dual rotating compensator ellipsometer*)¹. Der Polarisator und der Analysator sind Polarisatoren und können fest montiert sein. Die Kompensatoren sind Verzögerungsplättchen und können beliebig in der Winkellage gedreht werden. Zerlegt man das Licht in zwei linear polarisierte Wellen, so absorbieren Polarisatoren eine der beiden Wellen. Der (lineare) Dichroismus beschreibt den Quotienten der Absorption der linear polarisierten Wellen und wird mit Ψ bezeichnet. Hingegen bewirken Kompensatoren eine Phasenverschiebung zwischen den beiden Wellen, die durch eine Verzögerung Δ beschrieben wird. Die Drehlage von Polarisationsoptiken wird durch deren Azimutwinkel angegeben. Betrachtet man ein zweidimensionales Koordinatensystem im dreidimensionalen Raum mit beliebigem Nullpunkt, das durch die Vektoren $\mathbf{e}_x^{\text{PSG}}$ und $\mathbf{e}_y^{\text{PSG}}$ aufgespannt wird, so ergibt

¹ Vgl. <https://www.jawoollam.com/products/rc2-ellipsometer> (27.07.2021)

sich der Azimutwinkel des Polarisators aus dem Richtungsvektor der Schwingungsebene des elektrischen Feldes in diesem Koordinatensystem. Analog dazu ergibt sich der Azimutwinkel des Kompensators auf der Beleuchtungsseite aus dem Richtungsvektor der schnellen Achse. Allgemein beschreibt der Azimutwinkel eine Drehung des Koordinatensystems, wobei die Ausbreitungsrichtung des Lichtstrahls die Drehachse definiert und die Drehung gegen den Uhrzeigersinn bei Betrachtung der Lichtquelle ausgeführt wird¹.

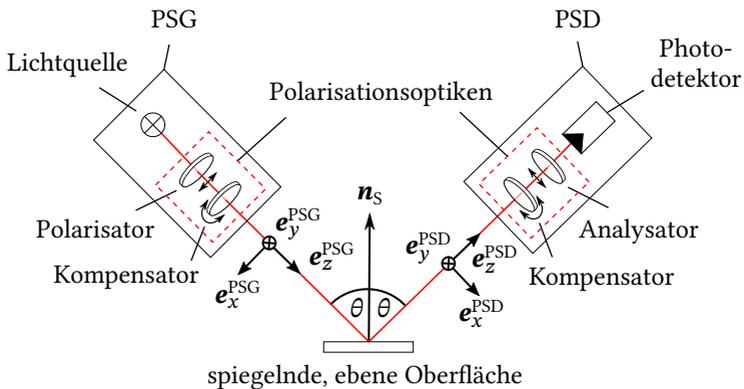


Abbildung 2.1: Aufbau eines Ellipsometers ohne Lichtwegumkehrung mit rotierenden Kompensatoren.

2.3 Abbildende Ellipsometrie

Mit der abbildenden Ellipsometrie lassen sich die Polarisations-eigenschaften von Oberflächen räumlich auflösen. Viele Anwendungsfälle im Forschungsumfeld erfordern sowohl eine hohe laterale als auch eine hohe Tiefenauflösung [Mat12, Art14], weshalb im Handel erhältliche abbildende Ellipsometer als Mikro-Ellipsometer ausgelegt sind². Die abbildende Ellipsometrie wird daher meist in Kombination mit Mikroskopie eingesetzt und unterscheidet

¹ Um Unklarheiten bei der Ausrichtung von Polarisationsoptiken vorzubeugen, wurde die Nebraska-Konvention eingeführt, auf die hier verwiesen wird [Hau80, Fuj07].

² <https://accurion.com/thin-film-characterization-imaging-ellipsometry> (30.12.2020)

sich zur nicht-abbildenden Ellipsometrie vor allem durch folgende Merkmale [Asi08]:

- Die hohe laterale Auflösung der Mikro-Ellipsometrie erfordert aufgrund des Abbe-Limits eine große numerischen Apertur. Üblicherweise liegt diese zwischen 0,3 und 0,9 [Zha02, Asi08, Art14].
- Eine große numerische Apertur führt zu großen Einfallswinkeländerungen.
- Eine große numerische Apertur verringert die Schärfentiefe.

Die Einfallswinkelvariationen der von einem Sensorpixel detektierten Lichtstrahlen wirken sich negativ auf die Genauigkeit des Messergebnisses aus, solange ein konstanter Einfallswinkel angenommen wird. Daher wurde die abbildende Ellipsometrie in der Vergangenheit für Relativ- statt Absolutmessungen eingesetzt, da letztere eine Berücksichtigung von Einfallswinkelvariationen und höhere Rechenkapazitäten erfordern [Asi08].

Bei der abbildenden Makro-Ellipsometrie werden keine mikroskopisch kleinen Strukturen untersucht, so dass die o. g. Einschränkungen der abbildenden Mikro-Ellipsometrie nicht bzw. nur in abgeschwächter Form gelten. Die abbildende Makro-Ellipsometrie spielt insbesondere in Spezialanwendungen der industriellen Produktion wie der Folienherstellung und der flexiblen Elektronik eine Rolle, wo eine 100-Prozent-Kontrolle der Oberfläche erforderlich ist [Sha14, Bam19]. In dieser Arbeit wird der Fokus ebenfalls auf die Makro-Ellipsometrie gelegt.

2.4 Messanordnungen mit Lichtwegumkehrung

Der PSG und der PSD werden bei der Ellipsometrie mit Lichtwegumkehrung in einem Sensormodul kombiniert. Um das emittierte und einfallende Licht zu separieren, ist üblicherweise ein Strahlteiler erforderlich. Diese als RPE

bezeichnete Messtechnik wurde bisher unter Verwendung eines Spiegels realisiert und ist schon lange bekannt [OBr36]. Später wurden weitere Varianten dieses Aufbaus bzw. weitere Anwendungsfälle untersucht [Yam74, Kaw76, Yam80, Azz81a, Azz81b, Azz77a, Azz77b] und die Messabbildung mittels Jones- und Müller-Matrizen formalisiert [Azz77a, Azz77b, Azz81c].

Eine interessante Eigenschaft der Ellipsometrie mit Lichtwegumkehrung ist, dass Messungen auch dann möglich sind, wenn die Probe nicht eben oder nicht perfekt ausgerichtet ist. Wird die Neigung einer Probe variiert und trifft das Licht auf einen zentrierten, sphärischen Spiegel auf, so wird das Licht zurück reflektiert und gelangt auf dem gleichen Weg schließlich in den Detektor [Fu95, Joh11]. Dasselbe gilt, wenn die Höhe einer Probe variiert wird und das Licht unter senkrechtem Einfall auf einen ebenen Spiegel auftrifft. Sind sowohl Neigung als auch Höhe variabel und unbekannt, lässt sich mit Spiegeln keine Rückreflexion erreichen.

Es gibt jedoch auch Ellipsometer ohne Lichtwegumkehrung, die für die Messung von Oberflächen mit Neigungs- und Höhenvariation ausgelegt sind. Bei dem punktmessenden Messsystem aus [Hol96, Neu02b] wird die Toleranz gegenüber Neigungsänderungen mithilfe einer Sammellinse erreicht, wobei der Messpunkt in der Schärfeebene liegen muss. Die Toleranz gegenüber Höhenänderungen wird durch eine Autofokus-Einrichtung sichergestellt. Obwohl das Licht durch die Sammellinse emittiert und eingefangen wird, zählt das Messsystem nicht zu der RPE, da die emittierten und reflektierten Lichtstrahlen nicht koinzident sind. Ein abbildendes Ellipsometer zur Vermessung von gekrümmten Oberflächen wurde in [Han08, Han09, Lee05, Cha05, Cha17] vorgestellt. Das reflektierte Licht wird nach der Transmission durch den Analysator auf ein Milchglas projiziert und auf der Rückseite detektiert. Weitere Aufbauten zur Messung von gekrümmten Oberflächen, die auf der Detektorseite Sammel- oder Fresnellinsen verwenden, finden sich in [Duw19, Li16, Wir08]. Einige der genannten Aufbauten haben die Schwierigkeit, das in einem großen Raumwinkel reflektierte Licht wieder einzufangen und kommen nur mit kleinen Variationen des Neigungswinkels zurecht. Bei anderen Aufbauten besteht bei großen Variationen des Neigungswinkels das Problem, dass das Licht unter großen Einfallswinkeln auf Polarisationsoptiken auftrifft.

Abb. 2.2 zeigt einen völlig neuartigen Aufbau eines bildgebenden Ellipsometers mit Lichtwegumkehrung. Das polarisationssensitive Laserscanner-Messsystem wurde am Fraunhofer IOSB entwickelt und ist ein Zeilensensor [Har99], jedoch wurden auch Kamerasysteme erprobt [Har12]. Statt eines Spiegels wird ein mikrostrukturierter Retroreflektor verwendet. Die Kombination von Polarisationsmessung und Retroreflexion auf Basis von mikrostrukturierten Retroreflexfolien ermöglichte erstmals die Messung der Polarisationszustandsänderung an nicht-planen Oberflächen, die eine starke Variation der Oberflächenneigung aufweisen. Die untersuchte Oberfläche kann eine sog. Freiformfläche sein, unterliegt also keinen weiteren geometrischen Einschränkungen. Der erste Prototyp arbeitet ohne modulierte Beleuchtung und ist für eine partielle Messung des Stokes-Vektors ausgelegt. Die Intensitätsmessungen erfolgen über Photomultiplier, um bei niedriger Lichtausbeute eine hohe Abtastrate zu ermöglichen. Eine später entwickelte Variante des Laserscanner-Messsystems emittiert links- und rechtszirkular polarisiertes Licht. Das Messprinzip dieses Aufbaus bildet die Grundlage für das vorgestellte abbildende Ellipsometer aus Kapitel 5, das ebenfalls nach dem RPE-Prinzip mit Retroreflexion arbeitet.

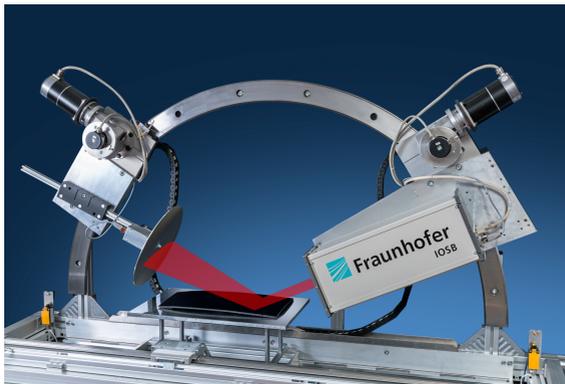


Abbildung 2.2: Laserscanner-Messsystem zur bildgebenden, polarimetrischen Vermessung von gekrümmten Oberflächen. Der Strahlengang ist rot eingezeichnet. Abgeänderter Nachdruck mit Genehmigung aus [Har20]. Copyright 2020, De Gruyter, Fraunhofer IOSB, Indigo Werbefotografie.

2.5 Sensorkalibrierung

Das Licht wird bei der Messung mit einem Ellipsometer an vielen optischen Elementen transmittiert oder reflektiert, die potentiell alle den Polarisationszustand ändern. Von Interesse ist jedoch nur die vom Prüfling verursachte Polarisationszustandsänderung, die entweder durch die ellipsometrischen Winkel Ψ_S und Δ_S oder durch die Müller-Matrix \mathbf{M}_S beschrieben wird. Die Einflüsse der anderen optischen Bauelemente im PSG bzw. PSD auf das Messergebnis lassen sich zu einer Modulationsmatrix \mathbf{W} bzw. einer Analysematrix \mathbf{A} zusammenfassen und werden während eines Kalibriervorgangs einmalig bestimmt, z. B. durch Verwendung von Kalibrierstandards. Die so bestimmte Kalibrierfunktion wird invertiert, um die optischen Parameter des Prüflings während des Messvorgangs zu berechnen [JCG09]. Selbst wenn die Polarisationsseigenschaften der optischen Bauelemente des Sensors bekannt sind, erfordert eine nicht vermeidbare Fehljustierung dennoch eine Kalibrierung des Messsystems [Tom05]. Bei handelsüblichen Ellipsometern muss die Kalibrierung üblicherweise in regelmäßigen Abständen wiederholt werden, um bspw. Umgebungseinflüsse auf das Messergebnis auszugleichen.

Ein relativ einfaches, aber trotzdem genaues Kalibrierverfahren für die UE wurde in [Azz89a] vorgestellt. Ein möglichst idealer Polarisator wird vor dem PSD platziert und mittels einer Drehbühne gedreht. Die Drehwinkel werden dort als sehr genau vorausgesetzt (ca. $0,01^\circ$). Durch Drehung des annähernd idealen Polarisators kann bereits die Sub-Matrix $(\mathbf{A})_{\|1,4\| \times \|1,3\|}$ über eine Fourier-Analyse präzise bestimmt werden, solange Intensitätsschwankungen des einfallenden Lichts herausgerechnet werden. Dazu wird ein Teil des einfallenden Lichts über eine Strahlteilerplatte unter einem kleinen Einfallswinkel ausgekoppelt und die Intensität von einem Photodetektor gemessen. Um Polarisationszustandsänderungen durch die Strahlteilerplatte zu vermeiden, muss das Licht annähernd senkrecht auf die Strahlteilerplatte auftreffen. Um die letzte Spalte von \mathbf{A} zu messen, wird der Linearpolarisator durch einen rechts- bzw. linkszirkularen Polarisator ausgetauscht. Diese bestehen aus Verzögerer, die herstellungsbedingt einer größeren Fertigungstoleranz unterliegen. Diese Abweichung der Verzögerung vom Nominalwert wird durch eine

Drehung des zirkularen Polarisators um 90° herausgerechnet. Nach der Kalibrierung des PSD wird der PSG über Polarisationszustandsmessungen des emittierten Lichts kalibriert. Ein frühes Kalibrierverfahren für die RPE findet sich in [Azz77a]. Dabei wird ebenfalls eine unbekannte Verzögerung des Kompensators angenommen. Diese wird während des Messvorgangs mit einem sog. Mehr-Zonen-Verfahren bestimmt. Da sich dieses Kalibrierverfahren jedoch auf die sog. Null-Ellipsometrie [Tom99] bezieht, spielt es für heutige Ellipsometrie-Aufbauten kaum noch eine Rolle.

Ein neueres Kalibrierverfahren für die UE wurde in [Com99] vorgestellt und wird als Eigenwert-basierte Kalibrierung bezeichnet. Die Kalibrierung erfolgt mittels Kalibrierproben, die entweder eine lineare Anisotropie aufweisen [Art11]¹ oder ideale Polarisatoren sind. Es ist keine präzise Aktorik erforderlich und die Kalibrierproben können in beliebiger Winkellage platziert werden. Mit Methoden der linearen Algebra lassen sich dann \mathbf{W} und \mathbf{A} bestimmen. Eine Erweiterung des Verfahrens auf die mikroskopische RPE findet sich in [Mac12]. Das Kalibrierverfahren arbeitet mehrstufig, sodass der Strahlteiler und die Fokussieroptik des Mikro-Ellipsometers separat kalibriert werden. Eine Schwierigkeit scheint hierbei zu sein, einen systematischen Fehler bei der Umpositionierung der Kalibrierproben zwischen den einzelnen Kalibrierstufen zu vermeiden, d.h. das Koordinatensystem für den Müller-Formalismus nicht zu verändern bzw. zu drehen.

2.6 Retroreflektierende Strukturen

Das im weiteren Verlauf der Arbeit untersuchte Messprinzip basiert auf der Verwendung von Retroreflexion. Vollständig diffus reflektierende Oberflächen weisen ein Reflexionsverhalten entsprechend dem Lambert'schen Kosinusetz auf [Bey16], wohingegen spiegelnde Oberflächen das Licht entsprechend dem Reflexionsgesetz reflektieren [Hec02]. Retroreflektierende

¹ Hierzu zählen z. B. Verzögerungsplättchen.

Oberflächen haben Eigenschaften, die sich von diffus oder spekulär reflektierenden Oberflächen unterscheiden, da sie einen Teil des Lichtes wieder in die Richtung des einfallenden Lichtes zurück reflektieren – mehr als dies nach dem Kosinusetz zu erwarten wäre. Dies gilt nicht nur für den senkrechten, sondern auch für schrägen Lichteinfall. Die meisten natürlichen Oberflächen weisen eine schwach ausgeprägte Retroreflexion auf [Ega76]. Dabei spielen verschiedene Wirkungsmechanismen eine Rolle, die oft in Kombination auftreten und als Oppositionseffekt [Hap86], Heiligenschein [Nil04] und kohärente Rückstreuung [Hap93, Akk86] bezeichnet werden. Rundförmige Objekte wie Wassertropfen, Glaskugeln oder die Glaskörper mancher Tierarten sind häufig die Ursache für die in der Natur auftretende Retroreflexion. Letztere haben einen hohen Rückstrahlwert [Gre10] und bildeten die Grundlage für die Entwicklung von künstlich hergestellten Retroreflektoren im Straßenverkehr [Ren98]. Es gibt viele Variationen, die auf dem Funktionsprinzip von Kugelreflektoren basieren. Dazu gehören zusammengesetzte Halbkugeln unterschiedlicher Größe [Gol96] oder katadioptrische Systeme. Eine weitere, relativ neue Methode zur Herstellung von Kugelreflektoren bzw. Kugellinsen bilden Metamaterialien [Ma09, Zha16, Gar19]. Diese befinden sich derzeit jedoch im Versuchsstadium. Hinsichtlich der Polarisierungseigenschaften gewöhnlicher Kugelreflektoren aus Glas gibt es bislang relativ wenig Publikationen. Das katadioptrische System aus [Sny75] wurde als polarisationserhaltend beschrieben, ohne eine genaue Begründung zu liefern. Aus Halbkugeln zusammengesetzte Makro-Reflektoren mit einem Durchmesser von 40 – 100 mm wurden ebenfalls als polarisationserhaltend beschrieben [Gol96]. Dort treffen die Lichtstrahlen unter annähernd senkrechtem Einfall auf der Kugeloberfläche auf, bevor sie zum Detektor zurück reflektiert werden. Daraus folgt die Polarisierungserhaltung, da auftreffendes Licht an isotropen Medien unter kleinen Einfallswinkeln eine vernachlässigbare Polarisationszustandsänderung erfährt. In [Li17b] wurde die Polarisationszustandsänderung einzelner paraxialer Lichtstrahlen bei der Reflexion an einem Makro-Kugelreflektor ($\varnothing = 60$ mm) mittels strahlenoptischer Simulation untersucht. Dabei wurden Maximalwerte für den Dichroismus und die Verzögerung ermittelt. Es lässt sich allerdings zeigen, dass diese Abschätzung von den geometrischen Randbedingungen abhängig

ist. Insbesondere ist die in der Literatur häufig vorgefundene Annahme, dass nur paraxiale Strahlen den Detektor treffen, nicht immer erfüllt.

Retroreflektoren basierend auf pyramidalen Mikrotripeln oder Mikrowürfeln finden ebenfalls breite Anwendung im Straßenverkehr [DIN13, Ren98] und haben i. Allg. einen höheren Rückstrahlwert als Mikrokugeln [Gre10]. Die Retroreflexion eines Lichtstrahls an einem Reflektorelement wird durch Spiegelung an drei, im rechten Winkel zueinander angeordneten Spiegelflächen erreicht. Jede Spiegelung bewirkt eine Richtungsänderung in einer Raumdimension. Werden alle drei Spiegel getroffen, wird der Strahl in die entgegengesetzte Richtung zurück reflektiert. Im Idealfall wird ein kollimierter Strahl wieder kollimiert zurück reflektiert. Für den Einsatz von Tripel-Reflektoren in Ellipsometern sind die Polarisations-eigenschaften entscheidend. Der Menge an Publikationen zu den Polarisations-eigenschaften von Retroreflektoren basierend auf Tripel-Spiegeln ist deutlich umfangreicher als bei Kugel-Reflektoren [Liu97, Azz08, OBr99, Cha71, Seg03, Lee08]. Jedoch sind die Untersuchungen aus dem Stand der Technik häufig auf einzelne Lichtstrahlen bzw. Makroreflektoren beschränkt.

Eine gänzlich andere Möglichkeit, Retroreflexion mit künstlichen optischen Bauteilen zu realisieren, bieten phasenkonjugierende Spiegel [Zel85, Pep82]. Diese nutzen Effekte aus der nichtlinearen Optik [She03], weshalb sowohl große Feldstärken als auch ein nichtlineares Medium erforderlich sind. Obwohl phasenkonjugierende Spiegel einige Vorteile aufweisen, können nach derzeitigem Stand der Technik keine großen Retroreflektoren realisiert werden. Da dies aber für Makro-Ellipsometrie erforderlich ist, wird in dieser Arbeit nur kurz auf diesen optischen Effekt eingegangen.

3 Modellierung der Emission und Detektion von polarisiertem Licht

3.1 Beschreibung des Polarisationszustands von Licht

Für die Beschreibung von Licht und optischen Phänomenen gibt es traditionell zwei unterschiedliche Betrachtungsweisen: Licht kann demnach als eine sich ausbreitende Welle oder als Teilchen (sog. Photonen) betrachtet werden [Hec02]. In der Realität weist Licht Eigenschaften beider Betrachtungsweisen auf, was als Welle-Teilchen-Dualismus bezeichnet wird. In der vorliegenden Arbeit und allgemein in der Ellipsometrie ist fast ausschließlich die Welleneigenschaft von Licht von Interesse. Diese wird als eine sich ausbreitende elektromagnetische Welle mit einem örtlich und zeitlich variierenden elektrischen und magnetischen Feld beschrieben, die sich entsprechend den sog. Maxwell'schen Gleichungen wechselseitig beeinflussen.

3.1.1 Maxwell'sche Gleichungen und Lichtausbreitung

Zunächst wird die Lichtausbreitung in einem räumlich unbegrenzten Vakuum ohne Materie betrachtet. Die Maxwell'schen Gleichungen lauten dann [Gri13]:

$$\langle \nabla, \underline{D} \rangle = \epsilon_0 \langle \nabla, \underline{E} \rangle \equiv 0, \quad \langle \nabla, \underline{B} \rangle \equiv 0, \quad (3.1)$$

$$\nabla \times \underline{E} = -\frac{\partial \underline{B}}{\partial t}, \quad \nabla \times \underline{H} = \mu_0^{-1} \nabla \times \underline{B} = \epsilon_0 \frac{\partial \underline{E}}{\partial t}, \quad (3.2)$$

wobei ϵ_0 die Permittivität des Vakuums, μ_0 die Vakuumpermeabilität, \underline{E} die elektrische Feldstärke, $\underline{D} = \epsilon_0 \underline{E}$ die elektrische Flussdichte, \underline{B} die magnetische Flussdichte und $\underline{H} = \mu_0^{-1} \underline{B}$ die magnetische Feldstärke bezeichnen. Alle Größen sind Funktionen, die von dem Ort \mathbf{x} und der Zeit t abhängig sind. Diese zeitabhängigen Skalar- und Vektorfelder können reell- oder komplexwertig sein. Die komplexwertigen, sog. analytischen Signale werden im Zeitbereich aus den entsprechenden reellwertigen, physikalischen Signalen berechnet, indem der Realteil übernommen und der Imaginärteil über eine Hilbert-Transformation aus dem Realteil berechnet wird. Dadurch werden im Frequenzbereich die negativen Frequenzanteile entfernt [Bor19, Goo15].

Die Propagation von Licht in einem Medium kann sowohl durch die mikroskopischen als auch makroskopischen Maxwell'schen Gleichungen beschrieben werden. Nur letztere sind für diese Arbeit von Bedeutung. Bei den makroskopischen Maxwell'schen Gleichungen wird das Medium durch makroskopische Materialparameter beschrieben und als kontinuierlich angenommen. In Medien lauten die makroskopischen Maxwell'schen Gleichungen [Jac06]:

$$\langle \nabla, \underline{D} \rangle = \underline{\varrho} \quad (\text{Gauß'sches Gesetz für elektrische Felder}), \quad (3.3)$$

$$\langle \nabla, \underline{B} \rangle \equiv 0 \quad (\text{Gauß'sches Gesetz für Magnetfelder}), \quad (3.4)$$

$$\nabla \times \underline{E} = -\frac{\partial \underline{B}}{\partial t} \quad (\text{Induktionsgesetz}), \quad (3.5)$$

$$\nabla \times \underline{H} = \underline{j} + \frac{\partial \underline{D}}{\partial t} \quad (\text{Erweitertes Durchflutungsgesetz}), \quad (3.6)$$

wobei \underline{j} die elektrische Stromdichte der freien Ladungsträger und $\underline{\varrho}$ die Ladungsdichte der freien Ladungsträger bezeichnen [Jac06].

Entsprechend dem Durchflutungsgesetz wird ein magnetisches Wirbelfeld nicht nur durch die zeitliche Änderung der elektrischen Flussdichte \underline{D} , sondern auch durch eine elektrische Stromdichte \underline{j} der freien, ungebundenen Ladungsträger verursacht. Die Stromdichte \underline{j} beschreibt ebenfalls ein zeitabhängiges Vektorfeld. Das zeitliche Skalarfeld $\underline{\varrho}$ im Gauß'schen Gesetz für elektrische Felder entspricht der Volumendichte der freien Ladungsträger. In Medien können $\underline{\varrho}$ und \underline{j} Werte ungleich Null annehmen. Zudem ist der

Zusammenhang zwischen \underline{E} und \underline{D} sowie \underline{H} und \underline{B} i. Allg. komplexer als im Vakuum. \underline{E} und \underline{B} werden als äußere Felder in Abwesenheit eines Mediums an einem Raumpunkt bezeichnet [Jac06, Hec02]. Die elektrische Polarisation \underline{P} und die Magnetisierung \underline{M} werden dagegen als innere Felder bezeichnet, die durch die Interaktion der äußeren Felder mit dem Medium induziert werden. Aus der Überlagerung von äußerem und innerem Feld ergeben sich \underline{D} und \underline{H} über die folgenden Materialgleichungen der Elektrodynamik [Jac06]:

$$\underline{D} = \epsilon_0 \underline{E} + \underline{P}, \quad \underline{H} = \frac{1}{\mu_0} \underline{B} - \underline{M}. \quad (3.7)$$

Üblicherweise hängt \underline{P} von \underline{E} und \underline{M} von \underline{B} ab. Der Zusammenhang zwischen \underline{E} und \underline{P} kann systemtheoretisch über ein zeitinvariantes, lineares oder nicht-lineares Filter modelliert werden, welches durch die elektrische Suszeptibilität χ_e charakterisiert wird und den Eingang \underline{E} auf den Ausgang \underline{P} abbildet. Analog erhält man \underline{M} aus \underline{B} anhand der magnetischen Suszeptibilität ζ_m . Zur Vereinfachung werden im sichtbaren Spektralbereich nur lokale Abhängigkeiten betrachtet: \underline{P} hängt dann nur lokal, also am selben Ort, von \underline{E} ab [Sut03, Jac06]. Gleiches gilt für \underline{M} und \underline{B} . Es ist üblich, das lineare oder nichtlineare, zeitinvariante Filter mittels Integraloperatoren in einer Potenzreihenentwicklung zu beschreiben [Pas13, Sut03]:

$$\underline{P}(\mathbf{x}, t) = \epsilon_0 \left(\int_{-\infty}^{\infty} \chi_e^{(1)}(\mathbf{x}, \tau) \underline{E}(\mathbf{x}, t - \tau) d\tau + \iint_{-\infty}^{\infty} \chi_e^{(2)}(\mathbf{x}, \tau_1, \tau_2) \underline{E}(\mathbf{x}, t - \tau_1) \underline{E}(\mathbf{x}, t - \tau_2) d\tau_1 d\tau_2 + \dots \right). \quad (3.8)$$

Überträgt man diesen Zusammenhang auf die Magnetisierung ergibt sich folgende Reihenentwicklung:

$$\underline{\mathbf{M}}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\mu_0} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \zeta_m^{(1)}(\mathbf{x}, \tau) \underline{\mathbf{B}}(\mathbf{x}, t - \tau) d\tau + \iint_{-\infty}^{\infty} \zeta_m^{(2)}(\mathbf{x}, \tau_1, \tau_2) \underline{\mathbf{B}}(\mathbf{x}, t - \tau_1) \underline{\mathbf{B}}(\mathbf{x}, t - \tau_2) d\tau_1 d\tau_2 + \dots \right). \quad (3.9)$$

$\chi_e^{(l)}$ und $\zeta_m^{(l)}$ sind reellwertige Funktionen, die Ort und Zeit auf einen Tensor der Stufe $l + 1$ abbilden (vgl. Anhang A.2). Negative Zeitparameter werden auf den Null-Tensor abgebildet.

Für die nachfolgenden Betrachtungen ist es hilfreich $\underline{\mathbf{P}}$, $\underline{\mathbf{M}}$, $\underline{\mathbf{E}}$ und $\underline{\mathbf{B}}$ in den Zeitfrequenzbereich zu überführen. Dabei wird für das elektrische und magnetische Feld angenommen, dass diese ein diskretes Frequenzspektrum mit abzählbar vielen Frequenzen aufweisen¹. Sind $\underline{\mathbf{E}} = \mathbf{E}$ und $\underline{\mathbf{B}} = \mathbf{B}$ reelle Größen, erhält man nach Anhang A.3 die folgenden Beziehungen:

$$\underline{\tilde{\mathbf{P}}}(\mathbf{x}, \omega) = \epsilon_0 \left(\sum_i \tilde{\chi}_{\underline{\mathbf{e}}}^{(1)}(\mathbf{x}, \omega; \omega_i) \underline{\mathbf{E}}'_i(\mathbf{x}) + \sum_{i,j} \tilde{\chi}_{\underline{\mathbf{e}}}^{(2)}(\mathbf{x}, \omega; \omega_i, \omega_j) \underline{\mathbf{E}}'_i(\mathbf{x}) \underline{\mathbf{E}}'_j(\mathbf{x}) + \dots \right), \quad (3.10)$$

¹ Es werden in diesem Kapitel einige Vereinfachungen getroffen, die einerseits die durchgeführten Berechnungen erleichtern und andererseits geeignet sind, die Abschätzungen und Schlussfolgerungen nicht zu beeinträchtigen. Der Fokus wird wie bei der wellenoptischen Simulation auf approximative Lösungen gelegt (vgl. [Wyr11]) und weniger auf eine präzise Modellierung des Lichts anhand der statistischen Optik (vgl. [Goo15]).

$$\begin{aligned} \underline{\tilde{M}}(\mathbf{x}, \omega) = \frac{1}{\mu_0} \left(\sum_i \tilde{\underline{\chi}}_{-m}^{(1)}(\mathbf{x}, \omega; \omega_i) \underline{\mathbf{B}}'_i(\mathbf{x}) \right. \\ \left. + \sum_{i,j} \tilde{\underline{\chi}}_{-m}^{(2)}(\mathbf{x}, \omega; \omega_i, \omega_j) \underline{\mathbf{B}}'_i(\mathbf{x}) \underline{\mathbf{B}}'_j(\mathbf{x}) + \dots \right), \end{aligned} \quad (3.11)$$

wobei $\underline{\mathbf{E}}'_i$, $\underline{\mathbf{B}}'_i$, $\tilde{\underline{\chi}}_{-c}^{(l)}$ und $\tilde{\underline{\chi}}_{-m}^{(l)}$ im Anhang A.3 eingeführt werden. Durch die zeitliche Fourier-Transformation (vgl. Anhang A.1) vereinfacht sich der Integraloperator im Zeitbereich zu einer Summe im Zeitfrequenzbereich. Eine weitere Vereinfachung ergibt sich für ein lineares, zeitinvariantes System. Die Systemantwort entspricht im Zeitfrequenzbereich einer Multiplikation von $\underline{\tilde{\mathbf{E}}}(\mathbf{x}, \omega)$ mit einer sog. Übertragungsfunktion [Bra00]¹:

$$\underline{\tilde{\mathbf{P}}}(\mathbf{x}, \omega) = \epsilon_0 \tilde{\underline{\chi}}_c(\mathbf{x}, \omega) \underline{\tilde{\mathbf{E}}}(\mathbf{x}, \omega), \quad (3.12)$$

$$\underline{\tilde{\mathbf{M}}}(\mathbf{x}, \omega) = \frac{1}{\mu_0} \tilde{\underline{\chi}}_{-m}(\mathbf{x}, \omega) \underline{\tilde{\mathbf{B}}}(\mathbf{x}, \omega), \quad (3.13)$$

wobei $\tilde{\underline{\chi}}_c := \tilde{\underline{\chi}}_c^{(1)}$ und $\tilde{\underline{\chi}}_{-m} := \tilde{\underline{\chi}}_{-m}^{(1)}$ orts- und frequenzabhängige Matrizen sind und die höheren Potenzen in den Gleichungen (3.10) und (3.11) vernachlässigt werden. Das zugehörige Medium nennt man linear, da eine lineare Abbildung zwischen $\underline{\tilde{\mathbf{P}}}(\mathbf{x}, \omega)$ und $\underline{\tilde{\mathbf{E}}}(\mathbf{x}, \omega)$ existiert [Boy08, Li17a]. Diesen linearen Zusammenhang gibt es nur im Zeitfrequenzbereich, wohingegen im Zeitbereich der Faltungoperator erforderlich ist, sofern das äußere Feld weder nieder- noch monofrequent ist. Grund hierfür ist die Dispersion von Medien bzw. die Frequenzabhängigkeit der Übertragungsfunktion, da Wechselwirkungen zwischen Licht und Materie frequenzabhängig sind [Wol82, Kit02]. Bildet man in der Gleichung (3.7) die Fourier-Transformation und setzt die Gleichungen (3.12) und (3.13) ein, erhält man für die Fourier-Transformierten $\underline{\tilde{\mathbf{D}}}$, $\underline{\tilde{\mathbf{E}}}$,

¹ Dieses Ergebnis aus der Systemtheorie gilt sowohl für vektorielle als auch komplexwertige Größen.

$\underline{\tilde{H}}$ und $\underline{\tilde{B}}$ folgende Beziehungen:

$$\underline{\tilde{D}} = \underbrace{\epsilon_0(\mathbf{I}_3 + \underline{\tilde{\chi}}_e)}_{=: \underline{\tilde{\epsilon}}} \underline{\tilde{E}}, \quad (3.14)$$

$$\underline{\tilde{H}} = \underbrace{\left(\frac{1}{\mu_0} \mathbf{I}_3 - \underline{\tilde{\zeta}}_m\right)}_{=: \underline{\tilde{\mu}'}} \underline{\tilde{B}}, \quad (3.15)$$

wobei $\underline{\tilde{\epsilon}}$ die Permittivität und $\underline{\tilde{\mu}} := \underline{\tilde{\mu}'^{-1}}$ die Permeabilität bezeichnen. In der Wellenoptik wird bei absorbierenden Medien zusätzlich das Ohm'sche Gesetz benötigt. Aus dem Gesetz folgt eine lineare Abbildung zwischen $\underline{\tilde{E}}$ und $\underline{\tilde{j}}$:

$$\underline{\tilde{j}} = \underline{\tilde{\sigma}} \underline{\tilde{E}}, \quad (3.16)$$

wobei $\underline{\tilde{\sigma}}$ den matrixwertigen elektrischen Leitfähigkeitstensor bezeichnet. Für die Rechnung mit frequenzabhängigen Größen bietet es sich an, die Maxwell'schen Gleichungen über die Fourier-Transformation in den Frequenzbereich zu überführen. Dabei beschreibt \mathcal{F}_T die zeitliche und \mathcal{F}_S die örtliche Fourier-Transformation (vgl. Anhang A.1.2). Das Funktionsargument zur Beschreibung des Zeitfrequenz- bzw. Ortsfrequenzbereichs ist die Kreisfrequenz ω bzw. der Wellenvektor \mathbf{k} . Bei Verwendung der komplexen Fourier-Transformation aus Gleichung (A.4) können diese Größen auch komplex sein und werden mit $\underline{\omega}$ und $\underline{\mathbf{k}}$ bezeichnet. Obwohl die Rechnung mit Fourier-transformierten Größen insbesondere bei Differentialgleichungen Vorteile bietet, ist die Existenz der Fourier-Transformierten nicht immer gegeben [Goo15] und wird im Folgenden angenommen.

Die Anwendung von \mathcal{F}_T auf beiden Seiten der Maxwell'schen ergibt:

$$\langle \nabla, \underline{\tilde{D}} \rangle = \underline{\tilde{g}}, \quad (3.17)$$

$$\langle \nabla, \underline{\tilde{B}} \rangle \equiv 0, \quad (3.18)$$

$$\nabla \times \underline{\tilde{E}} = -i\omega \underline{\tilde{B}}, \quad (3.19)$$

$$\nabla \times \underline{\tilde{H}} = \underline{\tilde{j}} + i\omega \underline{\tilde{D}}. \quad (3.20)$$

Aus den Gleichungen (3.14) bis (3.20) folgt:

$$\nabla \times \underline{\tilde{H}} = \underline{\tilde{j}} + i\omega \underline{\tilde{D}} = \underline{\tilde{\sigma}} \underline{\tilde{E}} + i\omega \underline{\tilde{\epsilon}} \underline{\tilde{E}} = i\omega \underbrace{\left(\underline{\tilde{\epsilon}} - \frac{i\underline{\tilde{\sigma}}}{\omega} \right)}_{=: \underline{\tilde{\epsilon}}_v} \underline{\tilde{E}} \quad (3.21)$$

und mithilfe bekannter Formeln aus der Vektoranalysis (vgl. [Jac06])

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \underline{\tilde{E}}) &= \nabla \langle \nabla, \underline{\tilde{E}} \rangle - \langle \nabla, \nabla \rangle \underline{\tilde{E}} \\ &= -i\omega \underline{\tilde{\mu}} \underline{\tilde{\sigma}} \underline{\tilde{E}} + \omega^2 \epsilon_0 \underline{\tilde{\mu}} \underline{\tilde{E}} + \omega^2 \underline{\tilde{\mu}} \underline{\tilde{P}} = \omega^2 \underline{\tilde{\mu}} \underline{\tilde{\epsilon}}_v \underline{\tilde{E}}, \end{aligned} \quad (3.22)$$

wobei $\underline{\tilde{\epsilon}}_v$ als verallgemeinerte Permittivität bezeichnet wird. Die Überführung der Maxwell'schen Gleichungen vom Zeitfrequenz in den Orts-/Zeitfrequenzbereich mithilfe der Fourier-Transformation \mathcal{F}_ζ führt zu:

$$-i \langle \mathbf{k}, \underline{\tilde{D}} \rangle = \underline{\tilde{\rho}}, \quad (3.23)$$

$$-i \langle \mathbf{k}, \underline{\tilde{B}} \rangle \equiv 0, \quad (3.24)$$

$$-i \mathbf{k} \times \underline{\tilde{E}} = -i\omega \underline{\tilde{B}}, \quad (3.25)$$

$$-i \mathbf{k} \times \underline{\tilde{H}} = \underline{\tilde{j}} + i\omega \underline{\tilde{D}} \quad (3.26)$$

mit

$$\underline{\tilde{D}} = \epsilon_0 \underline{\tilde{E}} + \underline{\tilde{P}}, \quad \underline{\tilde{H}} = \frac{1}{\mu_0} \underline{\tilde{B}} - \underline{\tilde{M}}. \quad (3.27)$$

Im Fall von linearen Medien gilt aufgrund des Faltungstheorems und der Linearität der Fourier-Transformation:

$$\underline{\tilde{D}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \underline{\tilde{\epsilon}}^x * \underline{\tilde{E}}, \quad (3.28)$$

$$\underline{\tilde{H}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \underline{\tilde{\mu}}^x * \underline{\tilde{B}}, \quad (3.29)$$

$$\underline{\tilde{j}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \underline{\tilde{\sigma}}^x * \underline{\tilde{E}}. \quad (3.30)$$

Für lineare, homogene Medien entsprechen $\underline{\tilde{\epsilon}}, \underline{\tilde{\mu}}'$ und $\underline{\tilde{\sigma}}$ im Ortsfrequenzbereich einer Delta-Distribution und der Zusammenhang vereinfacht sich zu:

$$\underline{\tilde{D}} = \underline{\tilde{\epsilon}} \underline{\tilde{E}}, \quad (3.31)$$

$$\underline{\tilde{H}} = \underline{\tilde{\mu}}' \underline{\tilde{B}}, \quad (3.32)$$

$$\underline{\tilde{j}} = \underline{\tilde{\sigma}} \underline{\tilde{E}}. \quad (3.33)$$

Einsetzen in Gleichung (3.26) unter Verwendung der Identität aus Gleichung (3.21) liefert:

$$\mathbf{k} \times \underline{\tilde{H}} = -\omega \underline{\tilde{\epsilon}}_v \underline{\tilde{E}}. \quad (3.34)$$

Das bisher betrachtete lineare Medium wurde ziemlich allgemein durch die matrixwertigen Materialparameter bzw. deren Fourier-Transformierten beschrieben. Bei bestimmten Materialklassen ergeben sich jedoch Spezialfälle der Maxwell'schen Gleichungen.

In Medien bewirken die freien Ladungsträger, dass $\underline{\rho}$ und \mathbf{j} Werte ungleich Null annehmen können. Im visuellen Spektrum gilt bei elektrisch neutralen, leitenden Medien annähernd $\underline{\rho} \equiv 0$. Im Fall von nicht-absorbierenden und somit nicht-leitenden Medien sind $\underline{\tilde{\epsilon}}_v$ und $\underline{\tilde{\mu}}$ reell¹: $\underline{\tilde{\epsilon}}_v = \underline{\tilde{\epsilon}} = \tilde{\epsilon}$ und $\underline{\tilde{\mu}} = \tilde{\mu}$. Betrachtet man elektrisch geladenen Medien, so gilt $\underline{\rho} \neq 0$.

Eine weitere Klassifizierung eines Mediums erfolgt anhand der Form der Matrizen $\underline{\tilde{\epsilon}}_v$, $\underline{\tilde{\mu}}$ und $\underline{\tilde{\sigma}}$. Handelt es sich dabei um Diagonalmatrizen mit gleichen Einträgen, spricht man von optisch isotropen Medien (d. h. von der Beobachtungsrichtung unabhängig), andernfalls von anisotropen Medien. Bei optisch isotropen Medien verwendet man statt Matrizen die Skalare $\tilde{\epsilon}_v$, $\tilde{\mu}$ und $\tilde{\sigma}$. Kristalle sind aufgrund ihrer Gitterstruktur nicht isotrop. Dennoch können sie optisch isotrop sein [Bor19], wohingegen isotrope Medien stets auch optisch isotrop sind. Treten in einem Material dielektrische Verluste durch gebundene Ladungsträger auf, so ist $\tilde{\epsilon}$ eine komplexe oder negative Zahl. Ist $\underline{\tilde{\epsilon}}_v$ komplex

¹ $\tilde{\epsilon}_v(\omega)$ kann aufgrund der Kramers-Kronig-Beziehungen allerdings nur in einem begrenzten Wellenlängenband reell sein [Fuj07].

oder negativ, werden die Verluste durch freie oder durch gebundene Ladungsträger hervorgerufen [Jac06].

Aus der Permeabilität und der Permittivität lässt sich die Ausbreitungsgeschwindigkeit einer elektromagnetischen Welle berechnen, die Lichtgeschwindigkeit genannt wird. Diese beträgt im Vakuum:

$$c_0 = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}. \quad (3.35)$$

In einem optisch isotropen Medium erhält man i. Allg. eine komplexe Lichtgeschwindigkeit:

$$\underline{c}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{\underline{\tilde{\mu}}(\omega) \underline{\tilde{\epsilon}}_v(\omega)}}. \quad (3.36)$$

Aus dem Verhältnis zwischen Vakuumlichtgeschwindigkeit und Lichtgeschwindigkeit im Medium resultiert der komplexe Brechungsindex:

$$\underline{n}(\omega) = n(\omega) - i\kappa(\omega) := \frac{c_0}{\underline{c}(\omega)} = \sqrt{\frac{\underline{\tilde{\mu}}(\omega) \underline{\tilde{\epsilon}}_v(\omega)}{\mu_0 \epsilon_0}}, \quad (3.37)$$

wobei n den (reellen) Brechungsindex und κ den Extinktionskoeffizient bezeichnen. Entsprechend den obigen Anmerkungen sind bei nicht-absorbierenden Medien $\underline{n} = n$ und $\underline{c} = c$ reellwertige Funktionen. Bei anisotropen Medien gibt es keine eindeutig definierte Lichtgeschwindigkeit oder eindeutig definierten Brechungsindex, da diese von der Polarisation abhängen.

Bisher wurden komplexwertige Felder in Form von analytischen Signalen betrachtet, da diese rechnerisch einige Vorteile bieten. Monochromatische Felder können bspw. im Frequenzbereich durch eine einzelne Kreisfrequenz beschrieben werden. In der Realität können im Orts- und Zeitbereich jedoch nur reellwertige Skalar- und Vektorfelder vorkommen. Dies stellt kein Problem unter der Annahme dar, dass das Medium linear ist und die elektrische und magnetische Suszeptibilität im Orts- und Zeitbereich reellwertige Funktionen

sind. Falls $\underline{\mathbf{E}}$ und $\underline{\mathbf{B}}$ komplexwertige Lösungen sind, so sind die dazugehörigen reellen Funktionen $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \Re \{ \underline{\mathbf{E}}(\mathbf{x}, t) \}$ bzw. $\mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = \Re \{ \underline{\mathbf{B}}(\mathbf{x}, t) \}$ ebenfalls Lösungen der Maxwell'schen Gleichungen (3.3) bis (3.6). Dies wird sofort ersichtlich, wenn man den Realteil auf beiden Seiten der Maxwell'schen Gleichungen und der Materialgleichungen berechnet. Bei nichtlinearen Medien erhält man aus dem Realteil einer komplexwertigen Lösung i. Allg. keine reellwertige Lösung. Daher ist es in diesem Fall erforderlich, im Zeitbereich statt der analytischen Signale die zugrundeliegenden reellen Felder zu betrachten (vgl. Gleichung (A.24)).

Der zuvor beschriebene Formalismus basierend auf den Maxwell'schen Gleichungen, den Materialgleichungen und dem Ohm'schen Gesetz liefert zwar eine Berechnungsgrundlage für die wichtigsten optischen Phänomene, allerdings ist er nicht universell gültig. Folgende Fälle werden damit nicht abgedeckt:

- Zuckerlösungen sind isotrope Medien, da die Zuckermoleküle im Wasser statistisch verteilt angeordnet sind und die Orientierung makroskopisch gesehen keine Richtungsabhängigkeit aufweist. Allerdings sind die Zuckermoleküle aufgrund ihrer Chiralität nicht invariant gegenüber einer Ebenenspiegelung. Bei der Transmission von linear polarisiertem Licht in einer Zuckerlösung führt diese fehlende Symmetrie zu einer Drehung der Polarisationssebene. Man nennt das Medium in diesem Fall optisch aktiv. Bei einer Drehung der Polarisationssebene kann die Abhängigkeit zwischen $\underline{\mathbf{E}}$ und $\underline{\mathbf{D}}$ nicht mehr durch eine Skalarmultiplikation mit $\underline{\xi}$ beschrieben werden, wie es für isotrope Medien eigentlich erforderlich wäre. Dieses Problem wird dadurch gelöst, dass $\underline{\tilde{\mathbf{P}}}$ bei optisch aktiven Medien nicht nur von $\underline{\mathbf{E}}$, sondern auch von $\underline{\mathbf{B}}$ abhängt. Falls $\underline{\tilde{\mathbf{P}}}$ von $\underline{\mathbf{B}}$ oder $\underline{\tilde{\mathbf{M}}}$ von $\underline{\mathbf{E}}$ abhängt, nennt man ein isotropes Medium bi-isotrop und ein anisotropes Medium bi-anisotrop [Jac06, Kon72, Sem96]. Zur Vereinfachung werden (nicht-depolarisierende) optisch isotrope, achirale Medien schlicht als isotrope Medien bezeichnet.

- Auch $\underline{\mathbf{j}}$ ist im allgemeinen Fall von $\underline{\mathbf{E}}$ und $\underline{\mathbf{B}}$ abhängig [Jac06], da die sog. Lorentzkraft, die auf bewegte Ladungen wirkt, von beiden Feldern abhängt.
- Nach der üblichen Definition von $\underline{\mathbf{P}}$ und $\underline{\mathbf{M}}$ sind diese nur mit dem elektrischen bzw. magnetischen Dipolmoment¹ verknüpft [Jac06]. Im allgemeinen Fall enthalten $\underline{\mathbf{D}}$ und $\underline{\mathbf{H}}$ noch weitere Terme, sogenannte Multipolmomente, die jedoch bei den meisten Materialien vernachlässigt werden können [Jac06]. Die Multipolmomente hängen sowohl von den Gradienten von $\underline{\mathbf{E}}$ bzw. $\underline{\mathbf{B}}$ als auch von den Gradienten der dazugehörigen Suszeptibilitäts-Tensoren ab [Bre96, Bre01, Pon91].
- $\underline{\mathbf{P}}$ und $\underline{\mathbf{M}}$ können zusätzliche Terme beinhalten, die in den Gleichungen (3.8) und (3.9) nicht aufgeführt sind. Dies ist bspw. bei angeregten Materialzuständen wie Gitterschwingungen in Kristallen der Fall (vgl. [Tan95]).
- Bewegt sich das Medium oder treten Konvektionsströme auf², sind in Gleichung (3.7) bzw. Gleichung (3.6) ebenfalls weitere Terme erforderlich, die z. B. die Leitungsstromdichte ändern oder dazu führen, dass das Material bi-isotrop oder bi-anisotrop wird [Jac06, Bor19].

3.1.2 Homogene und inhomogene ebene Wellen

In diesem Abschnitt wird die Ausbreitung von Licht in homogenen, isotropen, linearen und ungeladenen Medien betrachtet. Zudem sei das Medium nicht-absorbierend. Aus den Gleichungen (3.23) bis (3.26) folgt:

$$-\omega^2 \tilde{\mu} \tilde{\underline{\mathbf{E}}} = \omega \mathbf{k} \times \tilde{\underline{\mathbf{B}}} = \mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times \tilde{\underline{\mathbf{E}}}) = \frac{1}{\tilde{\epsilon}} \underbrace{\langle \mathbf{k}, \tilde{\underline{\mathbf{D}}} \rangle}_{=0} \mathbf{k} - \langle \mathbf{k}, \mathbf{k} \rangle \tilde{\underline{\mathbf{E}}}. \quad (3.38)$$

¹ Ein elektrisches Dipolmoment beschreibt den Schwerpunkt der Ladungsverteilung unter Berücksichtigung entgegengesetzter Ladungen.

² Bei einem Konvektionsstrom müssen die Ladungen keinen elektrischen Widerstand überwinden.

Nun wird die Annahme getroffen, dass das Medium im betrachteten Spektralbereich dispersionslos ist oder mit schmalbandigem Licht beleuchtet wird:

$$\tilde{\epsilon}(\omega) \approx \text{const.} =: \epsilon, \quad \tilde{\mu}(\omega) \approx \text{const.} =: \mu, \quad c(\omega) \approx \text{const.} =: c. \quad (3.39)$$

Unter diesen Voraussetzungen kann eine einfache Lösung der Gleichung (3.38) in Form von generellen homogenen ebenen Wellen (engl. *general homogeneous plane waves*, GHPWs) angegeben werden [Bor19, Bey16]¹:

$$\underline{\underline{E}}(\mathbf{x}, t) = \underline{\underline{E}}_g \left(t - \frac{\langle \mathbf{s}, \mathbf{x} \rangle}{c} \right), \quad (3.40)$$

wobei \mathbf{s} einen Einheitsvektor und $\underline{\underline{E}}_g$ eine entsprechend dem Anhang A.4.1 definierte Funktion bezeichnen. Einen Spezialfall dieser Lösung bilden zeitharmonische homogene ebene Wellen² [Bor19]:

$$\underline{\underline{E}}(\mathbf{x}, t) = \underline{\underline{E}}_0 e^{i(\omega t - \langle \mathbf{k}, \mathbf{x} \rangle)}, \quad (3.41)$$

wobei ω die Kreisfrequenz, $\mathbf{k} = \mathbf{s}\omega/c$ den reellen Wellenvektor und $\underline{\underline{E}}_0$ den komplexen elektrischen Feldvektor bezeichnen.

Die Lösung aus Gleichung (3.40) gilt nicht für absorbierende Medien mit einer komplexen Permittivität $\tilde{\epsilon}$. Für eine Verallgemeinerung auf absorbierende Medien ist in den Gleichungen (3.23) bis (3.34) statt der gewöhnlichen, die komplexe Fourier-Transformation zu wählen (vgl. Anhang A.1):

$$\langle \mathbf{k}, \tilde{\underline{\underline{E}}} \rangle \equiv 0, \quad (3.42)$$

$$\langle \mathbf{k}, \tilde{\underline{\underline{H}}} \rangle \equiv 0, \quad (3.43)$$

$$\underline{\underline{k}} \times \tilde{\underline{\underline{E}}} = \omega \tilde{\underline{\underline{\mu}}} \tilde{\underline{\underline{H}}}, \quad (3.44)$$

$$\underline{\underline{k}} \times \tilde{\underline{\underline{H}}} = -\omega \tilde{\underline{\underline{\epsilon}}} \tilde{\underline{\underline{E}}}, \quad (3.45)$$

¹ In [Bor19] werden GHPWs im Englischen als *general electromagnetic plane waves* bezeichnet.

² Zeitharmonische Wellen haben im Zeitbereich einen sinusförmigen Verlauf und sind somit monochromatisch.

wobei sowohl die Permittivität $\underline{\tilde{\epsilon}}$, als auch die verallgemeinerte Permittivität $\underline{\tilde{\epsilon}}_{\underline{v}}$ komplexwertig sein können. Analog zu Gleichung (3.38) ergibt sich für die Wellengleichung in absorbierenden Medien:

$$\langle \underline{\mathbf{k}}, \underline{\mathbf{k}} \rangle \underline{\tilde{\mathbf{E}}} = \omega^2 \underline{\tilde{\mu}}_{\underline{v}} \underline{\tilde{\mathbf{E}}}. \quad (3.46)$$

Zudem wird folgende Annahme über die Materialkonstanten des Mediums im betrachteten Spektralbereich getroffen:

$$\underline{\tilde{\epsilon}}_{\underline{v}}(\omega) \approx \text{const.} =: \underline{\epsilon}_{\underline{v}}, \quad \underline{\tilde{\mu}}(\omega) \approx \text{const.} =: \underline{\mu}, \quad \underline{c}(\omega) \approx \text{const.} =: \underline{c}. \quad (3.47)$$

Somit kann die Lösung aus Gleichung (3.40) auf absorbierende Medien erweitert werden (vgl. Anhang A.4.2):

$$\underline{\mathbf{E}}(\underline{\mathbf{x}}, t) = \underline{\mathbf{E}}_{\underline{g}} \left(t - \frac{\langle \underline{\mathbf{s}}, \underline{\mathbf{x}} \rangle}{\underline{c}} \right), \quad (3.48)$$

wobei $\underline{\mathbf{s}}$ einen komplexen Einheitsvektor bezeichnet und $\underline{\mathbf{E}}_{\underline{g}}$ eine beliebige, glatte und bandbegrenzte Funktion, die auf eine ganze Funktion erweitert wurde. Für diese Lösung wird die Bezeichnung generelle inhomogene ebene Welle (engl. *general inhomogeneous plane wave*, GIPW) gewählt. Im Gegensatz zum nicht-absorbierenden Fall, ändert sich i. Allg. die Wellenform mit fortlaufender Zeit.

Einen Spezialfall dieser Lösung bilden harmonische inhomogene ebene Wellen (engl. *harmonic inhomogeneous plane waves*, HIPWs) [Dup94a]:

$$\underline{\mathbf{E}}(\underline{\mathbf{x}}, t) = \underline{\mathbf{E}}_0 e^{i(\omega t - \langle \underline{\mathbf{k}}, \underline{\mathbf{x}} \rangle)}, \quad (3.49)$$

wobei ω die Kreisfrequenz, $\underline{\mathbf{k}} = \underline{\mathbf{s}}\omega/\underline{c}$ den komplexen Wellenvektor und $\underline{\mathbf{E}}_0$ den komplexen elektrischen Feldvektor bezeichnen.

Definition 1. (Poynting-Vektor) Der Poynting-Vektor für einen gegebenen Ortsvektor ist für beliebige elektromagnetische Felder definiert als [Hec02,

Bor19]:

$$\underline{\mathcal{S}} := \underline{\mathbf{E}} \times \underline{\mathbf{H}} = \Re \{ \underline{\mathbf{E}} \} \times \Re \{ \underline{\mathbf{H}} \} \quad (3.50)$$

Der Mittelwert des Poynting-Vektors ergibt die Richtung und den Betrag des Energieflusses pro Zeit an. Die Richtung entspricht der Ausbreitungsrichtung der elektromagnetischen Welle [Hec02]:

$$\overline{\underline{\mathcal{S}}} := \langle \underline{\mathcal{S}} \rangle_t. \quad (3.51)$$

Definition 2. (Komplexer Poynting-Vektor) Als Erweiterung des reellen Poynting-Vektors wird ein komplexer Poynting-Vektor eingeführt [Dup94b, Bor19, Mar98, Oug94]¹:

$$\underline{\underline{\mathcal{S}}} := \frac{1}{2} \underline{\underline{\mathbf{E}}} \times \underline{\underline{\mathbf{H}}}^*. \quad (3.52)$$

Der Mittelwert berechnet sich analog:

$$\overline{\underline{\underline{\mathcal{S}}}} = \langle \underline{\underline{\mathcal{S}}} \rangle_t. \quad (3.53)$$

Für viele Lichtquellen wie monochromatisches Licht, räumlich inkohärente Leuchtdioden (engl. *light-emitting diodes*, LEDs) und thermische Strahler kann ein Zusammenhang zwischen dem Mittelwert des reellen und komplexen Poynting-Vektors hergestellt werden²:

$$\overline{\underline{\underline{\mathcal{S}}}} = \Re \{ \overline{\underline{\underline{\mathcal{S}}}} \} \quad (3.54)$$

¹ In der zitierten Literatur bezieht sich der komplexe Poynting-Vektor auf zeitharmonische Felder. Demgegenüber schließt die hier verwendete Definition annähernd beliebige zeitvariante Felder mit ein.

² Ein formaler Beweis ist mithilfe der statistischen Optik möglich, wird hier jedoch nicht weiter vertieft. Als Annahmen werden die Gleichverteilung der Phasen, die örtliche Unabhängigkeit und die Ergodenhypothese verwendet, die nur für bestimmte Lichtquellen gültig sind. Für Ultrakurzpulse ist die Gültigkeit der Gleichung bspw. nicht garantiert.

3.1.3 Jones-Formalismus

Die Darstellung des Polarisationszustands von Licht im Punkt \mathbf{x}_0 erfolgt üblicherweise entweder über das elektrische Feld $\underline{\mathbf{E}}(\mathbf{x}, t)$ in Form von sog. Jones-Vektoren oder über die Intensität des Lichts in Form von sog. Stokes-Vektoren. Zur Vereinfachung wird wieder angenommen, dass das reelle elektromagnetische Feld (EM-Feld) entsprechend der Gleichung (A.24) ein diskretes Frequenzspektrum mit abzählbar vielen Frequenzen aufweist.

Die Herleitung des Jones- und Müller-Formalismus erfolgt anhand der analytischen Signale der elektrischen Felder. Die Entfernung der negativen Frequenzanteile aus Gleichung (A.24) führt dann zu folgendem komplexwertigen elektrischen Feld:

$$\underline{\mathbf{E}}(\mathbf{x}, t) = \sum_{k \geq 0} \underline{\mathbf{E}}_k(\mathbf{x}) e^{i\omega_k t}, \quad (3.55)$$

wobei

$$\underline{\mathbf{E}}_k(\mathbf{x}) := \begin{cases} 2\underline{\mathbf{E}}'_k(\mathbf{x}) & \text{falls } k > 0 \\ \underline{\mathbf{E}}'_0(\mathbf{x}) & \text{falls } k = 0. \end{cases} \quad (3.56)$$

Nachfolgend wird der Jones-Formalismus aus [Jon41] wiedergegeben. Die übliche Definition von Jones-Vektoren und Jones-Matrizen erfordert transversal-elektrische Felder (vgl. [Bor19]) und Referenzebenen, deren Normalen in Ausbreitungsrichtung zeigen [Azz99]. In Kapitel 4 ist das betrachtete elektromagnetische Feld nicht in allen Referenzebenen transversal-elektrisch. Um solche Fälle abzudecken, wird die Einschränkung auf transversal-elektrische Felder fallengelassen. Der Jones-Formalismus setzt monochromatische Felder voraus. Zunächst wird ein Rechtssystem $\mathbf{G} := (\mathbf{e}_x \ \mathbf{e}_y \ \mathbf{e}_z)$ bestehend aus drei Vektoren eingeführt, wobei hier und im Folgenden damit stets eine Orthonormalbasis gemeint ist.

Definition 3. (Jones-Vektor) Der ortsaufgelöste Jones-Vektor $\underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}; \mathbf{G}) \in \mathbb{C}^2$ einer monochromatischen Welle mit Kreisfrequenz ω_k im Punkt \mathbf{x} bzgl. eines

Rechtssystems \mathbf{G} wird definiert als¹:

$$\underline{U}_k(\mathbf{x}; \mathbf{G}) = \left(\left\langle \begin{array}{c} \mathbf{e}_x, \underline{E}_k(\mathbf{x}) \\ \mathbf{e}_y, \underline{E}_k(\mathbf{x}) \end{array} \right\rangle \right) = (\mathbf{G}^\top \underline{E}_k(\mathbf{x}))_{\llbracket 1,2 \rrbracket}. \quad (3.57)$$

Der Jones-Vektor wird verkürzt mit \underline{U}_k bezeichnet, falls sich die örtliche Referenz und die verwendete Wellenlänge aus dem Kontext ergibt. Trifft eine transversal-elektrische Welle auf eine Oberfläche auf, wird \mathbf{G} üblicherweise so gewählt, dass \mathbf{e}_z in Ausbreitungsrichtung zeigt und \mathbf{e}_x in der Einfallsebene liegt, wobei \mathbf{e}_x und die Oberflächennormale einen Winkel größer als 90° bilden. Durch diese Konvention wird \mathbf{G} eindeutig definiert.

Bei den in dieser Arbeit untersuchten Aufgabenstellungen ist es ausreichend, die Propagation von Licht durch ein optisches System in einem sog. sequentiellen Modus zu betrachten, bei dem das Licht von der Lichtquelle ausgehend von einer Referenzebene zur nächsten bis zum Detektor propagiert wird. Exemplarisch wird nachfolgend die Propagation von polarisiertem Licht von einer Referenzebene \mathcal{A}_1 zu einer Referenzebene \mathcal{A}_2 untersucht. Dabei wird in jeder Referenzebene ein homogenes, isotropes Medium mit einem konstanten Brechungsindex angenommen. Zunächst wird die Abbildung der Jones-Vektoren $\underline{U}_k(\mathbf{x}; \mathbf{G}_1)$ für $\mathbf{x} \in \mathcal{A}_1$ auf einen Jones-Vektor $\underline{U}_k(\mathbf{x}_2; \mathbf{G}_2)$ im Punkt $\mathbf{x}_2 \in \mathcal{A}_2$ betrachtet.

Definition 4. (Jones-Matrix) Eine orts aufgelöste Jones-Matrix wird als der Integrkern eines Integraloperators definiert, der die Jones-Vektoren $\underline{U}_k(\cdot; \mathbf{G}_1)$ von monochromatischem Licht in einer Referenzebene \mathcal{A}_1 , das durch ein optisches System propagiert wird, auf einen Jones-Vektor $\underline{U}_k(\mathbf{x}_2; \mathbf{G}_2)$ im Punkt \mathbf{x}_2 abbildet:

$$\underline{U}_k(\mathbf{x}_2; \mathbf{G}_2) = \int_{\mathcal{A}_1} \underline{J}_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2) \underline{U}_k(\mathbf{x}; \mathbf{G}_1) dA. \quad (3.58)$$

¹ Im Gegensatz zur üblichen Notation wird der Jones-Vektor mit \underline{U} (vgl. [Goo15]) statt mit \underline{E} [Goo15] bezeichnet, um eine Verwechslung mit dem elektrischen Feld zu vermeiden.

Die Jones-Matrix $\underline{\mathbf{J}}_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2) \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$ beschreibt nach Anhang A.5 die Polarisationszustandsänderung einer Elementarwelle, die von \mathbf{x} mit dem Polarisationszustand $\underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}; \mathbf{G}_1)$ emittiert und in \mathbf{x}_2 detektiert wird.

Als Nächstes wird die Annahme getroffen, dass sich $\underline{\mathbf{U}}_k$ in \mathcal{A}_1 wie folgt faktorisieren lässt:

$$\exists \underline{h}_k \in \mathcal{F}(\mathcal{A}_1, \mathbb{C}) \forall \mathbf{x} \in \mathcal{A}_1 : \underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}; \mathbf{G}_1) = \underline{h}_k(\mathbf{x}) \underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}_1; \mathbf{G}_1), \quad (3.59)$$

wobei $\mathbf{x}_1 := \langle \text{id}_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{x}) \rangle_{\mathbf{x}}$ den Schwerpunkt der Punktmenge in \mathcal{A}_1 beschreibt. Einsetzen in Gleichung (3.58) liefert:

$$\underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}_2; \mathbf{G}_2) = \underbrace{\int_{\mathcal{A}_1} \underline{\mathbf{J}}_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2) \underline{h}_k(\mathbf{x}) \, dA}_{=: \underline{\mathbf{J}}_k(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2)} \underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}_1; \mathbf{G}_1). \quad (3.60)$$

Die Jones-Matrix $\underline{\mathbf{J}}_k(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2)$ beschreibt die Änderung des Polarisationszustands von Licht, dass von einer Referenzebene \mathcal{A}_1 emittiert und in \mathbf{x}_2 detektiert wird.

Um die Polarisationszustandsänderung zwischen zwei Referenzebenen \mathcal{A}_1 und \mathcal{A}_2 im Jones-Formalismus zu beschreiben, wird folgende Notation verwendet:

$$\underline{\mathbf{U}}_k(\mathcal{A}_2; \mathbf{G}_2) := \underbrace{\int_{\mathcal{A}_2} \underline{\mathbf{J}}_k(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2) \, dA}_{=: \underline{\mathbf{J}}_k(\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2)} \underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}_1; \mathbf{G}_1). \quad (3.61)$$

Diese Jones-Matrix wird verkürzt mit $\underline{\mathbf{J}}_k$ bezeichnet, falls der Polarisationszustand in \mathcal{A}_1 konstant ist und die örtliche Referenz aus dem Kontext ersichtlich ist.

3.1.4 Müller-Formalismus

Der Polarisationszustand des Lichts im Punkt \mathbf{x} kann auch über die Intensität des Lichts definiert werden. Diese entspricht der Leistung einer elektromagnetischen Welle, die auf ein infinitesimales Oberflächenelement auftrifft. Durch Verwendung der Intensität zur Definition des Polarisationszustands, kann dieser auch für polychromatisches Licht angegeben werden. Zeigt die Oberflächennormale des infinitesimalen Oberflächenelements in Richtung des Poynting-Vektors, so ist die auftreffende Intensität gerade die Länge des Poynting-Vektors (vgl. [Hec02]):

$$I = \left\| \underline{\underline{S}} \right\|. \quad (3.62)$$

Die Intensität kann aber auch für ein beliebig orientiertes Oberflächenelement angegeben werden. In diesem Fall wird die Intensität als Bestrahlungsstärke bezeichnet, wobei hier auf diese terminologische Abgrenzung verzichtet wird. Ist $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ ein Rechtssystem, so beträgt die Intensität I einer Welle, die im Punkt \mathbf{x} auf eine infinitesimale Oberfläche mit der Oberflächennormalen \mathbf{e}_z auftrifft (vgl. [Bey16]):

$$I = \left\langle \mathbf{e}_z, \underline{\underline{S}} \right\rangle. \quad (3.63)$$

Diese Definition kann mithilfe einer komplexen Basis $(\underline{\underline{e}}_x, \underline{\underline{e}}_y, \underline{\underline{e}}_z)$ zu einer komplexen Intensität erweitert werden:

$$\underline{\underline{I}} = \left\langle \underline{\underline{e}}_z, \underline{\underline{S}} \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle \underline{\underline{e}}_z, \left\langle \underline{\underline{E}} \times \underline{\underline{H}}^* \right\rangle_t \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle \left\langle \underline{\underline{E}}, \underline{\underline{H}}^* \times \underline{\underline{e}}_z \right\rangle_t \right\rangle, \quad (3.64)$$

wobei $I = \Re \{ \underline{\underline{I}} \}$ gilt, falls $\underline{\underline{e}}_z = \mathbf{e}_z$. Es gelten folgende Identitäten:

$$\underline{\underline{E}} = \left\langle \underline{\underline{e}}_x, \underline{\underline{E}} \right\rangle_s \underline{\underline{e}}_x + \left\langle \underline{\underline{e}}_y, \underline{\underline{E}} \right\rangle_s \underline{\underline{e}}_y + \left\langle \underline{\underline{e}}_z, \underline{\underline{E}} \right\rangle_s \underline{\underline{e}}_z, \quad (3.65)$$

$$\underline{\underline{H}}^* = \left\langle \underline{\underline{e}}_x, \underline{\underline{H}}^* \right\rangle_s \underline{\underline{e}}_x + \left\langle \underline{\underline{e}}_y, \underline{\underline{H}}^* \right\rangle_s \underline{\underline{e}}_y + \left\langle \underline{\underline{e}}_z, \underline{\underline{H}}^* \right\rangle_s \underline{\underline{e}}_z. \quad (3.66)$$

Einsetzen in Gleichung (3.64) liefert:

$$\underline{I} = \underbrace{\frac{1}{2} \left\langle \underline{e}_x^\dagger \underline{E} \underline{H}^\dagger \underline{e}_y^* \left\langle \underline{e}_x, \underline{e}_y \times \underline{e}_z \right\rangle_t \right\rangle}_{=: I_1} + \underbrace{\frac{1}{2} \left\langle \underline{e}_y^\dagger \underline{E} \underline{H}^\dagger \underline{e}_x^* \left\langle \underline{e}_y, \underline{e}_x \times \underline{e}_z \right\rangle_t \right\rangle}_{=: I_2}. \quad (3.67)$$

Die auf ein infinitesimales Flächenelement auftreffende Gesamtintensität wird durch Projektion in zwei Intensitäten zerlegt, die orthogonalen Polarisationszuständen entsprechen. Der Polarisationszustand in einem Punkt \mathbf{x} wird über drei verschiedene Basen berechnet, die in Tabelle 3.1 aufgeführt sind. Diese Definition der Intensität zweier orthogonaler Polarisationszustände hat jedoch einen Nachteil: Die Licht-Materie-Interaktion wird hauptsächlich vom elektrischen Feld dominiert und kaum vom magnetischen Feld beeinflusst [Azz99]. Daher wird in der Ellipsometrie die Intensität zweier orthogonaler Polarisationszustände folgendermaßen definiert¹ (vgl. [Hec02]):

$$I \approx \underbrace{\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} \left\langle \underline{e}_x^\dagger \underline{E} \underline{E}^\dagger \underline{e}_x \right\rangle_t}_{=: I_x} + \underbrace{\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} \left\langle \underline{e}_y^\dagger \underline{E} \underline{E}^\dagger \underline{e}_y \right\rangle_t}_{=: I_y}. \quad (3.68)$$

Die Intensitäten I_x und I_y sind reell, wobei ein nicht-absorbierendes, isotropes Medium vorausgesetzt wird.

Tabelle 3.1: Basistransformationen zur Berechnung des Stokes-Vektors

Allgemeine Basis	1. Basis	2. Basis	3. Basis
$\underline{e}_x,$ $\underline{e}_y,$ $\underline{e}_z.$	$\underline{e}_{0^\circ} := \underline{e}_x,$ $\underline{e}_{90^\circ} := \underline{e}_y,$ $\underline{e}_z.$	$\underline{e}_{45^\circ} := \frac{1}{\sqrt{2}}(\underline{e}_x + \underline{e}_y),$ $\underline{e}_{135^\circ} := \frac{1}{\sqrt{2}}(\underline{e}_x - \underline{e}_y),$ $\underline{e}_z.$	$\underline{e}_{\text{R}} := \frac{1}{\sqrt{2}}(\underline{e}_x + i \underline{e}_y),$ $\underline{e}_{\text{L}} := \frac{1}{\sqrt{2}}(\underline{e}_x - i \underline{e}_y),$ $\underline{e}_z.$

¹ Der Übergang von Gleichung (3.67) zu Gleichung (3.68) erfolgt mithilfe der Gleichungen (3.25) und (3.32) und der Annahme, dass $\mathbf{k} = c/\omega \mathbf{e}_z$ (vgl. Gleichung (3.41)).

Bei Verwendung verschiedener Basen werden die resultierenden reellen Intensitäten entsprechend der Tabelle 3.1 als I_{0° , I_{90° , I_{45° , I_{135° , I_R und I_L bezeichnet. In der Ellipsometrie wird der Vorfaktor $\sqrt{\epsilon/\mu}/2$ häufig weggelassen und die resultierenden Intensitäten werden hier mit I'_{0° , I'_{90° , I'_{45° , I'_{135° , I'_R und I'_L bezeichnet. Der Müller-Formalismus kann zur Beschreibung von Polarisationszuständen/-zustandsänderungen von polychromatischem Licht verwendet werden. Allerdings muss das elektromagnetische Feld ein analytisches Signal sein. Setzt man in Gleichung (3.67) reellwertige Felder ein, erhält man bei der Berechnung von \underline{EH}^\dagger für rechts- und linkszirkular polarisiertes Licht die gleiche Matrix. Dasselbe gilt für \underline{EE}^\dagger in Gleichung (3.68). Daraus folgt immer die Gleichheit $I_R = I_L$, was nicht korrekt ist. Die Verwendung des komplexwertigen, analytischen Signals führt hingegen zu korrekten Ergebnissen. Sind Rechnungen mit reellwertigen Feldern erforderlich, wie in der nichtlinearen Optik der Fall, ist diese Einschränkung zu berücksichtigen. Die nachfolgende Definition des Stokes-Vektors basiert auf den Formeln aus [Sto09, Bor19, Fuj07].

Definition 5. (Stokes-Vektor) Der orts aufgelöste Stokes-Vektor $\mathbf{S}(\mathbf{x}; \mathbf{G}) \in \mathbb{R}^4$ im Punkt \mathbf{x} bzgl. des Rechtssystems $\mathbf{G} := (\mathbf{e}_x \quad \mathbf{e}_y \quad \mathbf{e}_z)$ wird definiert als:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{S}(\mathbf{x}; \mathbf{G}) &= \begin{pmatrix} S_0 \\ S_1 \\ S_2 \\ S_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I'_{0^\circ} + I'_{90^\circ} \\ I'_{0^\circ} - I'_{90^\circ} \\ I'_{45^\circ} - I'_{135^\circ} \\ I'_R - I'_L \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \mathbf{e}_{0^\circ}^\top \langle \underline{EE}^\dagger \rangle_t \mathbf{e}_{0^\circ} + \mathbf{e}_{90^\circ}^\top \langle \underline{EE}^\dagger \rangle_t \mathbf{e}_{90^\circ} \\ \mathbf{e}_{0^\circ}^\top \langle \underline{EE}^\dagger \rangle_t \mathbf{e}_{0^\circ} - \mathbf{e}_{90^\circ}^\top \langle \underline{EE}^\dagger \rangle_t \mathbf{e}_{90^\circ} \\ \mathbf{e}_{45^\circ}^\top \langle \underline{EE}^\dagger \rangle_t \mathbf{e}_{45^\circ} - \mathbf{e}_{135^\circ}^\top \langle \underline{EE}^\dagger \rangle_t \mathbf{e}_{135^\circ} \\ \mathbf{e}_{-L}^\top \langle \underline{EE}^\dagger \rangle_t \mathbf{e}_{-R} - \mathbf{e}_{-R}^\top \langle \underline{EE}^\dagger \rangle_t \mathbf{e}_{-L} \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \langle \underline{E}_x^\perp \underline{E}_x^{\perp*} \rangle_t + \langle \underline{E}_y^\perp \underline{E}_y^{\perp*} \rangle_t \\ \langle \underline{E}_x^\perp \underline{E}_x^{\perp*} \rangle_t - \langle \underline{E}_y^\perp \underline{E}_y^{\perp*} \rangle_t \\ \langle \underline{E}_x^\perp \underline{E}_y^{\perp*} \rangle_t + \langle \underline{E}_y^\perp \underline{E}_x^{\perp*} \rangle_t \\ i \left(\langle \underline{E}_x^\perp \underline{E}_y^{\perp*} \rangle_t - \langle \underline{E}_y^\perp \underline{E}_x^{\perp*} \rangle_t \right) \end{pmatrix}, \tag{3.69}
 \end{aligned}$$

wobei

$$\underline{E}_\perp = (\underline{E}_x^\perp, \underline{E}_y^\perp, \underline{E}_z^\perp)^\top := \mathbf{G}^\top \underline{E}. \quad (3.70)$$

Der Stokes-Vektor wird verkürzt mit \mathbf{S} bezeichnet, falls sich die örtliche Referenz aus dem Kontext ergibt. Gleichung (3.69) lässt sich mithilfe einer matrixwertigen Funktion $\underline{\mathbf{F}}(\mathbf{G})$ umformen:

$$\mathbf{S}(\mathbf{x}; \mathbf{G}) = \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{G}) \text{vec} \left(\langle \underline{\mathbf{E}} \underline{\mathbf{E}}^\dagger \rangle_t \right), \quad (3.71)$$

wobei gilt:

$$\underline{\mathbf{F}}(\mathbf{I}_3) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.72)$$

Zur Berechnung von $\underline{\mathbf{F}}(\mathbf{G})$ für den Fall $\mathbf{G} \neq \mathbf{I}_3$ kann die folgende Identität ausgenutzt werden:

$$\text{vec}(\underline{\mathbf{K}} \underline{\mathbf{C}} \underline{\mathbf{L}}) = (\underline{\mathbf{L}}^\top \otimes \underline{\mathbf{K}}) \text{vec}(\underline{\mathbf{C}}), \quad (3.73)$$

wobei $\underline{\mathbf{K}}$, $\underline{\mathbf{C}}$ und $\underline{\mathbf{L}}$ drei beliebige, mit der Matrixmultiplikation verträgliche Matrizen sind [Sho18]. Ein weiterer bekannter Zusammenhang lautet [Gol13]:

$$(\underline{\mathbf{K}} \underline{\mathbf{L}} \otimes \underline{\mathbf{M}} \underline{\mathbf{N}}) = (\underline{\mathbf{K}} \otimes \underline{\mathbf{M}})(\underline{\mathbf{L}} \otimes \underline{\mathbf{N}}), \quad (3.74)$$

wobei $\underline{\mathbf{K}}$, $\underline{\mathbf{L}}$, $\underline{\mathbf{M}}$ und $\underline{\mathbf{N}}$ vier beliebige Matrizen sind, deren Matrixprodukte $\underline{\mathbf{K}} \underline{\mathbf{L}}$ und $\underline{\mathbf{M}} \underline{\mathbf{N}}$ existieren. Gleichung (3.71) kann wie folgt umgeformt werden:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}(\mathbf{x}; \mathbf{G}) &= \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{G}) \text{vec} \left(\langle \underline{\mathbf{E}} \underline{\mathbf{E}}^\dagger \rangle_t \right) \stackrel{(3.69)}{=} \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{I}_3) \text{vec} \left(\langle \underline{E}_\perp \underline{E}_\perp^\dagger \rangle_t \right) \\ &\stackrel{(3.70)}{=} \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{I}_3) \text{vec} \left(\langle \mathbf{G}^\top \underline{\mathbf{E}} \underline{\mathbf{E}}^\dagger \mathbf{G} \rangle_t \right) \\ &\stackrel{(3.73)}{=} \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{I}_3) (\mathbf{G}^\top \otimes \mathbf{G}^\top) \text{vec} \left(\langle \underline{\mathbf{E}} \underline{\mathbf{E}}^\dagger \rangle_t \right). \end{aligned} \quad (3.75)$$

Bei einem Basiswechsel entsprechend der Tabelle 3.1 ändert sich der Wert auf der rechten Seite von Gleichung (3.68) nicht. Es folgt [Tom05]:

$$S_0 = I_{0^\circ} + I_{90^\circ} = I_{45^\circ} + I_{135^\circ} = I_R + I_L. \quad (3.76)$$

Zusätzlich gilt die Ungleichung [Azz99]:

$$S_0^2 \geq S_1^2 + S_2^2 + S_3^2. \quad (3.77)$$

Im Falle der Gleichheit nennt man das Licht vollständig polarisiert. Der Polarisationsgrad $P \in [0,1]$ ist wie folgt definiert [Azz99]:

$$P := \frac{\sqrt{S_1^2 + S_2^2 + S_3^2}}{S_0}. \quad (3.78)$$

Für vollständig polarisiertes Licht mit $P = 1$ ist der Stokes-Parameter S_0 redundant, da er aufgrund der Nicht-Negativität als einziger Parameter aus den anderen Parametern abgeleitet werden kann. Der Polarisationszustand lässt sich in diesem Fall als 3D-Vektor $(S_1, S_2, S_3)^\top$ veranschaulichen. Für eine gegebene Intensität S_0 kann der 3D-Vektor $(S_1, S_2, S_3)^\top$ auf einen beliebigen Punkt der Oberfläche einer zentrierten Kugel zeigen. Diese Kugel wird als Poincaré-Kugel bezeichnet und ist in Abb. 3.1 visualisiert. Weitere Kenngrößen zur Beschreibung des Polarisationszustands sind der Grad der linearen Polarisation $DoLP$ und der Grad der zirkularen Polarisation $DoCP$ [Chi10]:

$$DoLP := \frac{\sqrt{S_1^2 + S_2^2}}{S_0}, \quad DoCP := \frac{|S_3|}{S_0}. \quad (3.79)$$

Die Polarisationsellipse des Stokes-Vektors $\mathbf{S}(\mathbf{x}; \mathbf{G})$ wird zudem durch den Azimutwinkel der großen Hauptachse ϑ und dem Verhältnis zwischen großer und kleiner Hauptachse ε beschrieben [Ved11]:

$$\vartheta = \frac{1}{2} \arg(S_1 + iS_2), \quad \varepsilon = \frac{1}{2} \arcsin \frac{S_3}{\sqrt{S_1^2 + S_2^2 + S_3^2}}. \quad (3.80)$$

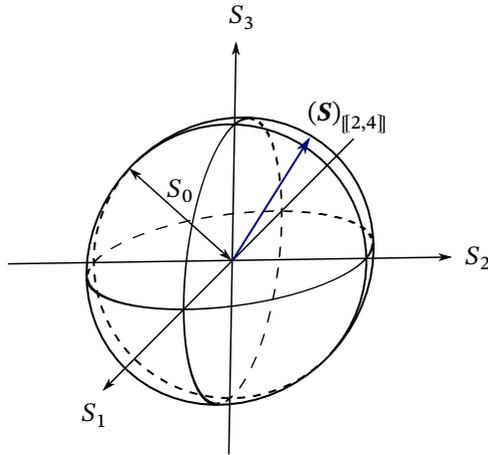


Abbildung 3.1: Visualisierung des Stokes-Vektors \mathbf{S} auf der Poincaré-Kugel.

In Gleichung (3.69) wurde der Stokes-Vektor über die Intensität des Lichts d. h. über die Leistung pro Fläche definiert und bei der Berechnung des Stokes-Vektors in einem Punkt wird eine infinitesimal kleine Fläche angenommen. Photodetektoren zur Messung der Lichtleistung haben jedoch eine definierte Fläche und die gemessene Intensität ergibt sich aus der Lichtleistung, die auf diese Fläche auftrifft. Dieser Quotient entspricht gerade dem Oberflächenintegral der Intensität dividiert durch die Fläche. Dieser Sachverhalt lässt sich auf den Stokes-Vektor übertragen, so dass ein Stokes-Vektor über eine Fläche \mathcal{A} bzgl. des Rechtssystems \mathbf{G} wie folgt definiert werden kann:

$$\mathbf{S}(\mathcal{A}; \mathbf{G}) := \frac{1}{|(\mathcal{A})_{[1,2]}|} \int_{\mathcal{A}} \mathbf{S}(\mathbf{x}; \mathbf{G}) dA. \quad (3.81)$$

wobei $(\mathcal{A})_{[1,2]}$ eine Menge von Vektoren bezeichnet, die nur die ersten beiden Elemente der Vektoren aus \mathcal{A} enthalten. Für monochromatische Wellen können Jones- und Stokes-Vektoren ineinander überführt werden. Die Umrechnung eines Jones-Vektors $\underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}; \mathbf{G})$ in einen Stokes-Vektor $\mathbf{S}_k(\mathbf{x}; \mathbf{G})$ erfolgt

auf Basis der Formeln aus [Azz99, Gar13b] und ergibt sich aus den Gleichungen (3.72) und (3.75):

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_k(\mathbf{x}; \mathbf{G}) &= \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{I}_3) \text{vec} \left(\left\langle \underline{\mathbf{G}}^\top \underline{\mathbf{E}} \underline{\mathbf{E}}^\dagger \underline{\mathbf{G}} \right\rangle_t \right) = \underline{\mathbf{A}}_{\text{T}}^* \left(\underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}; \mathbf{G})^* \otimes \underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}; \mathbf{G}) \right) \\ &= \underline{\mathbf{A}}_{\text{T}} \left(\underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}; \mathbf{G}) \otimes \underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}; \mathbf{G})^* \right), \end{aligned} \quad (3.82)$$

wobei

$$\underline{\mathbf{A}}_{\text{T}} := \left(\underline{\mathbf{F}}(\mathbf{I}) \right)_{\|_{[1,4]\times\{1,2,4,5\}}}. \quad (3.83)$$

Die Propagation von polarisiertem, unpolarisiertem oder teilweise polarisiertem Licht durch ein optisches System wird mithilfe des Müller-Formalismus beschrieben [Azz99, Mue48].

Definition 6. (Müller-Matrix) Die orts aufgelöste Müller-Matrix wird als der Integralkern eines Integraloperators definiert, der die Stokes-Vektoren $\mathbf{S}(\cdot; \mathbf{G}_1)$ von räumlich inkohärentem Licht in einer Referenzebene \mathcal{A}_1 , das durch ein optisches System propagiert wird, auf einen Stokes-Vektor $\mathbf{S}(\mathbf{x}_2; \mathbf{G}_2)$ im Punkt \mathbf{x}_2 abbildet:

$$\mathbf{S}(\mathbf{x}_2; \mathbf{G}_2) = \int_{\mathcal{A}_1} \mathbf{M}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2) \mathbf{S}(\mathbf{x}; \mathbf{G}_1) \, dA. \quad (3.84)$$

Die Müller-Matrix $\mathbf{M}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2) \in \mathbb{R}^{4 \times 4}$ beschreibt nach Anhang A.6 die Polarisationszustandsänderung einer Elementarwelle, die von \mathbf{x} mit dem Polarisationszustand $\mathbf{S}(\mathbf{x}; \mathbf{G}_1)$ emittiert und in \mathbf{x}_2 detektiert wird. Die Zerlegung des elektromagnetischen Felds in unabhängige, gleichartige Elementarwellen stellt eine Möglichkeit dar, um ein räumlich inkohärentes Feld in \mathcal{A}_1 zu simulieren. In diesem Fall wird die Beleuchtung quasi-homogen genannt und diese Art der Lichtmodellierung eignet sich u. a. für LED-Beleuchtungen [Vah06, Wyr07]. Da die Elementarwellen unabhängig sind, werden bei der Berechnung der Lichtpropagation entsprechend der Gleichung (3.84) Intensitäten superponiert.

Analog zum Jones-Formalismus wird nun die Annahme getroffen, dass sich \mathbf{S} in \mathcal{A}_1 wie folgt faktorisieren lässt:

$$\exists h \in \mathcal{F}(\mathcal{A}_1, \mathbb{R}) \forall \mathbf{x} \in \mathcal{A}_1 : \mathbf{S}(\mathbf{x}; \mathbf{G}_1) = h(\mathbf{x})\mathbf{S}(\mathbf{x}_1; \mathbf{G}_1). \quad (3.85)$$

Einsetzen in Gleichung (3.84) liefert:

$$\mathbf{S}(\mathbf{x}_2; \mathbf{G}_2) = \underbrace{\int_{\mathcal{A}_1} \mathbf{M}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2) h(\mathbf{x}) \, dA \, \mathbf{S}(\mathbf{x}_1; \mathbf{G}_1)}_{=: \mathbf{M}(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2)}. \quad (3.86)$$

Wird der Stokes-Vektor in einer Referenzebene \mathcal{A}_2 detektiert, erhält man eine Müller-Matrix zwischen den Stokes-Vektoren in der Referenzebene \mathcal{A}_1 und jenen in der Referenzebene \mathcal{A}_2 :

$$\begin{aligned} \mathbf{S}(\mathcal{A}_2; \mathbf{G}_2) &\stackrel{(3.81)}{=} \frac{1}{|(\mathcal{A}_2)_{\parallel[1,2]}|} \int_{\mathcal{A}_2} \mathbf{S}(\mathbf{x}; \mathbf{G}_2) \, dA \\ &\stackrel{(3.86)}{=} \frac{1}{|(\mathcal{A}_2)_{\parallel[1,2]}|} \underbrace{\int_{\mathcal{A}_2} \mathbf{M}(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2) \, dA \, \mathbf{S}(\mathbf{x}_1; \mathbf{G}_1)}_{=: \mathbf{M}(\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2)}. \end{aligned} \quad (3.87)$$

Die Müller-Matrix $\mathbf{M}(\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2)$ wird verkürzt mit \mathbf{M} bezeichnet, falls der Polarisationszustand in \mathcal{A}_1 konstant ist und die verwendeten Rechtssysteme aus dem Kontext ersichtlich sind.

Zur Charakterisierung einer Müller-Matrix \mathbf{M} wird häufig der Depolarisations-Index verwendet [Gil86]:

$$DI(\mathbf{M}) := \left(\frac{\text{tr}(\mathbf{M}^T \mathbf{M}) - (\mathbf{M})_{00}^2}{3(\mathbf{M})_{00}^2} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (3.88)$$

wobei \mathbf{M} depolarisierend ist, falls $DI(\mathbf{M}) < 1$, und nicht-depolarisierend, falls $DI(\mathbf{M}) = 1$.

Bei monochromatischem Licht kann aus der Jones-Matrix eine Müller-Matrix berechnet werden (vgl. [Azz99] und Gleichung (A.49)):

$$\mathbf{M}_k(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2) = \underline{\mathbf{A}}_{\text{T}}(\underline{\mathbf{J}}_k(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2) \otimes \underline{\mathbf{J}}_k(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2)^*) \underline{\mathbf{A}}_{\text{T}}^{-1}. \quad (3.89)$$

Im Müller-Formalismus kann ein Freiheitsgrad der Jones-Matrix, nämlich die absolute Phase einer Lichtwelle, nicht dargestellt werden. Diese Information geht bei der Umrechnung vom Jones- in den Müller-Formalismus verloren. Zudem kann die Phase der Jones-Matrix mit einem Ellipsometer auch nicht gemessen werden. Für monochromatisches Licht und somit nicht-depolarisierende Müller-Matrizen ist die Umkehrung vom Müller- in den Jones-Formalismus über eine Inversion von Gleichung (3.89) ebenfalls möglich:

$$\underline{\mathbf{J}}_k(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2) = e^{i\varphi} \frac{(\underline{\mathbf{A}}_{\text{T}}^{-1} \mathbf{M}_k(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2) \underline{\mathbf{A}}_{\text{T}})^*_{\|1,2\| \times \|1,2\|}}{\sqrt{(\underline{\mathbf{A}}_{\text{T}}^{-1} \mathbf{M}_k(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2) \underline{\mathbf{A}}_{\text{T}})_{11}}}, \quad (3.90)$$

wobei φ die unbekannte Phasenverschiebung der Welle beschreibt. Diese Formel ist nur für $(\underline{\mathbf{A}}_{\text{T}}^{-1} \mathbf{M}_k(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2) \underline{\mathbf{A}}_{\text{T}})_{11} \neq 0$ gültig. Ist diese Bedingung nicht erfüllt, erfordert dies bei der Inversion von Gleichung (3.89) eine Anpassung.

3.2 Polarisationszustandsdetektion

Photodetektoren wie CMOS-Sensoren oder Photomultiplier messen i. Allg. die Intensität des Lichts, also den ersten Stokes-Parameter¹. Für die Messung der

¹ Es existieren aber auch alternative Aufbauten eines PSD mit polarisationssensitiven, beschichteten Photodetektoren, die nicht den ersten Stokes-Parameter messen [Azz88].

vier Stokes-Parameter sind vier Intensitätsmessungen erforderlich. Eine partielle Messung des Stokes-Vektors, bspw. der ersten drei Stokes-Parameter, kann für manche Aufgabenstellungen ausreichend sein. Es gibt grundsätzlich unterschiedliche Aufbauten und Verfahren, um den Polarisationszustand zu messen [Han20, Tyo06a, Azz10]:

- Polarisationszustandsdetektor mit teilspiegelnden Detektoren (engl. *four detector polarimeter*, FDP): Simultane Messung des Polarisationszustands unter Verwendung von teilspiegelnden Photodetektoren
- Polarisationszustandsdetektor mit Zeitunterteilung (engl. *division-of-time polarimeter*, DoT): Sequentielle Messung des Polarisationszustands durch bewegliche oder modulierende Polarisationsoptiken
- Polarisationszustandsdetektor mit Amplitudenteilung (engl. *division-of-amplitude photopolarimeter*, DoAmP): Simultane Messung des Polarisationszustands durch Aufteilung des einfallenden Lichts in mehrere Strahlen, wie in Abb. 3.2
- Polarisationszustandsdetektor mit Aperturteilung (engl. *division-of-aperture polarimeter*, DoAp): Simultane Messung des Polarisationszustands durch Unterteilung der Apertur mittels mehrerer örtlich nebeneinander angeordneten Mikrolinsen zur Fokussierung des Bildes auf mehrere polarisationssensitive Detektoren
- Polarisationszustandsdetektor mit Unterteilung der Schärfeebene (engl. *division-of-focal-plane polarimeter*, DoFP): Simultane Messung des Polarisationszustands durch Unterteilung der Bildebene mittels polarisationssensitiver Photosensoren eines Linien- oder Matrixsensors

Der FDP ist ein punktmessendes [Azz10] und der DoFP ein bildgebendes System [Tyo06a]. Die übrigen Varianten gibt es sowohl punktmessend als auch bildgebend [Tyo06b].

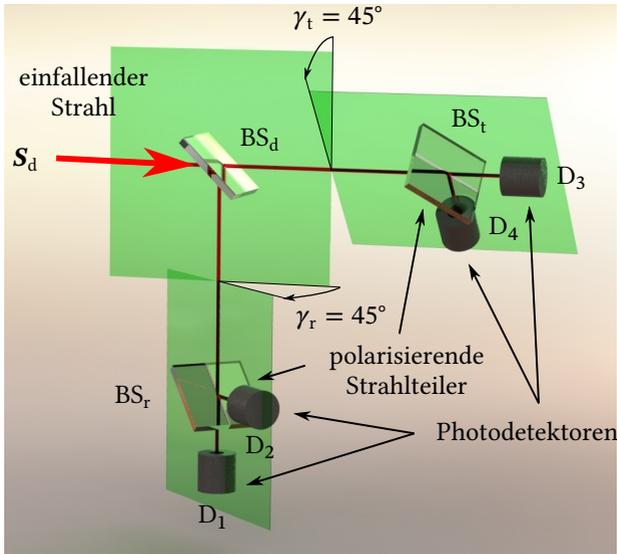


Abbildung 3.2: Schematischer Aufbau eines DoAmP. Die Strahlteiler BS_t und BS_r sind polarisierende Strahlteiler. Der Strahlteiler BS_d ist eine Spezialanfertigung. Die Strahlteiler BS_t und BS_r sind um 45° bzgl. der Einfallsebene von BS_d gedreht. Abgeänderter Nachdruck mit Genehmigung aus [Neg19b]. Copyright 2019, SPIE.

3.2.1 Messabbildung

Die im PSD einfallenden Lichtstrahlen werden bis zum Auftreffen auf den Photodetektoren an mehreren Polarisationsoptiken reflektiert oder transmittiert und im Polarisationszustand geändert. Zusammenfassend erhält man eine lineare Abbildung vom Stokes-Vektor des einfallenden Strahlenbündels¹ $\mathbf{S}_d \in \mathbb{R}^4$ auf einen gemessenen Intensitätsvektor $\mathbf{I} \in \mathbb{R}_+^m$, wobei m die Anzahl der Photodetektoren ist. Die lineare Abbildung wird als Analysematrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times 4}$ bezeichnet und während der Sensorkalibrierung bestimmt [Gar13b]. Sowohl der Messprozess als auch die Lichtquantelung

¹ Es wird entsprechend Gleichung (3.85) ein annähernd konstanter Polarisationszustand im Strahlprofil angenommen.

können als ein stochastischer Prozess modelliert werden [Bey16]. Die Messwerte bilden einen Vektor \mathbf{I} aus m Zufallszahlen:

$$\mathbf{I} = \underbrace{\mathbf{A}\mathbf{S}_d}_{=\boldsymbol{\mu}_I - \boldsymbol{\mu}_R} + \mathbf{R}, \quad (3.91)$$

wobei $\boldsymbol{\mu}_I$ den Mittelwert von \mathbf{I} , \mathbf{R} einen Zufallsvektor von m Störgrößen und $\boldsymbol{\mu}_R$ den Mittelwert von \mathbf{R} bezeichnen. Es sei \mathbf{I} ein gemessener Intensitätsvektor mit $m \geq 4$, aus dem der Stokes-Vektor \mathbf{S}_d berechnet werden soll. Sind die Störgrößen in \mathbf{R} stochastisch unabhängig, identisch normalverteilt und mittelwertfrei, so ergibt die folgende Inversion über die Pseudo-Inverse eine Maximum-Likelihood-Schätzung für \mathbf{S}_d :

$$\hat{\mathbf{S}}_d = (\mathbf{A})^+ \mathbf{I}. \quad (3.92)$$

3.2.2 Aufbauten von Polarisationszustandsdetektoren

Beim optischen Aufbau des PSD sind die Designparameter so zu wählen, dass die Messunsicherheiten der Stokes-Parameter aus $\hat{\mathbf{S}}_d$ simultan minimiert werden. Um verschiedene Aufbauten von PSDs miteinander zu vergleichen, wurden die normierte Determinante [Azz05, Yua14] und die normierte Konditionszahl [Neg19b] der Analysematrix als Gütemaße vorgeschlagen:

$$|\det \mathbf{A}|_{\text{norm}} := \frac{|\det \mathbf{A}|}{\det_{\max}}, \quad (3.93)$$

$$\text{cond}_{\text{norm}}(\mathbf{A}) := \frac{\text{cond}_{\min}}{\text{cond}(\mathbf{A})}, \quad (3.94)$$

wobei

$$\det_{\max} := \max_{\mathbf{A}} |\det \mathbf{A}| = \sqrt{3}/144, \quad (3.95)$$

$$\text{cond}_{\min} := \min_{\mathbf{A}} \text{cond}(\mathbf{A}) = \sqrt{3}, \quad (3.96)$$

Empirisch kann gezeigt werden, dass beide Gütemaße simultan optimale Werte annehmen, falls die gesamte einfallende Lichtintensität auf die Detektoren

auftritt [Neg19b]¹. Während $|\det \cdot|_{\text{norm}}$ ein Maß für die Abschätzung der absoluten Messunsicherheit ist, ist $\text{cond}_{\text{norm}}(\cdot)$ ein Maß für Abschätzung der relativen Messunsicherheit, weshalb beide Gütemaße relevant sind. Die Berechnung auf Basis der Determinante ist nur für den Fall $m = 4$ möglich, während die Konditionszahl auch für nicht-quadratische Matrizen aus dem maximalen und minimalen Singulärwert σ_{max} bzw. σ_{min} berechnet werden kann:

$$\text{cond}(\mathbf{A}) = \frac{\sigma_{\text{max}}}{\sigma_{\text{min}}}. \quad (3.97)$$

Eine einfache Möglichkeit, den Stokes-Vektor punktmessend zu messen, ist die Verwendung eines PSDs basierend auf DoT mit rotierendem Kompensator und festem Analysator, wobei der Kompensator als Viertelwellenplättchen mit einer Verzögerung von $\lambda/4$ ausgeführt ist [Azz10]. Dieser Aufbau wird häufig zur Polarisationszustandsmessung verwendet, allerdings ist die Messunsicherheit bei einer Verzögerung von $\lambda/4$ suboptimal. Eine minimale Messunsicherheit erhält man bei einer Verzögerung von $11/30 \cdot \lambda$, wobei die absolute Messunsicherheit durch Messwiederholung und Mittelung weiter reduziert werden kann [Sab00]. Alternativ lässt sich eine minimale Messunsicherheit erzielen, indem ein rotierendes Viertelwellenplättchen und ein rotierender Analysator verwendet werden.

Ein PSD basierend auf dem DoAmP ist hingegen schwieriger zu optimieren. Für das Laserscanner-Messsystem ist dieses Design jedoch von besonderem Interesse, da es keine beweglichen Komponenten beinhaltet und somit hohe Abstraten für Punktmessungen ermöglicht. Der PSD im Lasermesssystem ist wie die Polarisationskamera des abbildenden Ellipsometers aus Kapitel 5 äquivalent zu einem PSD mit rotierendem Analysator [Azz99]. Damit können nur die ersten drei Stokes-Parameter bestimmt werden. Eine Messung des Polarisationsgrads ist somit nicht möglich. Im Vergleich zur UE erhält man mit der RPE aus den ersten drei Stokes-Parametern vier mögliche Lösungen für Ψ und Δ und aus einer vollständigen Polarisationszustandsmessung zwei Lösungen [Neg15]². Die Verwendung des DoAmP im Laserscanner-Messsystem ist

¹ Dem entgegenstehende Aussagen finden sich in früheren Veröffentlichungen [Bru91].

² Dies gilt zumindest für isotrope, nicht-depolarisierende Medien.

daher wünschenswert, um sowohl den Polarisationsgrad zu messen als auch die Anzahl der Mehrdeutigkeiten zu reduzieren. Die praktische Realisierung des DoAmP gestaltet sich jedoch als aufwändig, da der Strahlteiler BS_d aus Abb. 3.2 eine Spezialanfertigung erfordert, um eine minimale Messunsicherheit zu erreichen [Azz82a, Azz85, Azz92, Azz05, Com98, Yua14].

Um diese Schwierigkeit zu umgehen, werden alternative Aufbauten des DoAmP untersucht [Neg17b]. Diese erfordern lediglich handelsübliche Optiken wie Standard-Strahlteiler, polarisierende Strahlteiler und Viertelwellenplättchen. Zwei Viertelwellenplättchen müssen dabei entweder auf dem Reflexions- oder auf dem Transmissionspfad angeordnet werden und die Azimutwinkel der Viertelwellenplättchen lassen sich über analytische Formeln aus den optischen Eigenschaften des Standard-Strahlteilers BS_d berechnen [Neg16a, Neg17a, Neg19b]. Auf diese Formeln wird hier nicht näher eingegangen, jedoch haben diese Aufbauten bei richtiger Einstellung der Azimutwinkel eine Analysematrix mit minimaler Konditionszahl bzw. maximaler Determinante. Sowohl für das ursprüngliche, optimale Design des DoAmP als auch für den vorgeschlagenen modifizierten Aufbau gilt: $|\det \mathbf{A}|_{\text{norm}} = \text{cond}_{\text{norm}}(\mathbf{A}) = 1$. Eine etwas abweichende Anordnung mit jeweils einem Viertelwellenplättchen auf dem Reflexions- und auf dem Transmissionspfad wurde davon unabhängig in [Zen17] vorgestellt. Diese Konfiguration hat jedoch den Nachteil, dass nicht immer eine minimale Konditionszahl bzw. maximale Determinante durch Rotation der Viertelwellenplättchen erreicht werden kann.

Die meisten Aufbauten des DoAmP nach dem Stand der Technik sind für die Einwellenlängen-Ellipsometrie optimiert und ergeben außerhalb eines begrenzten Spektralbands üblicherweise große Werte für die Konditionszahl und niedrige Werte für die Determinante [Yua14]. Eine Ausnahme bildet der Aufbau aus [Com98], der für die spektroskopische Ellipsometrie entwickelt wurde. Mit den dortigen Angaben der optischen Eigenschaften von BS_d lässt sich eine normierte Determinante von 0,34 und eine normierte Konditionszahl von 0,98 für $\lambda = 488 \text{ nm}$ berechnen. Die spektrale Abhängigkeit wurde dort nicht angegeben. Die Analysematrix kann nur deshalb simultan fast-optimale Werte für die Konditionszahl und suboptimale Werte für die

Determinante annehmen, weil bei diesem Aufbau ca. 24% der Lichtintensität nicht auf die Photodetektoren auftrifft. Eine Verbesserung erhält man mit dem vorgeschlagenen Aufbau aus [Neg19b]. Bei diesem Aufbau ist die normierte Konditionszahl größer als 0,93 und die normierte Determinante größer als 0,99 über den Wellenlängenbereich $\lambda \in [400 \text{ nm}, 1000 \text{ nm}]$. Der Strahlteiler BS_d ist Keil-förmig und besteht aus Glas mit hohem Brechungsindex (ZnS (Cleartran)). Da ZnS (Cleartran) schwach absorbierend ist, ist nur die Verwendung von kleinen Strahlteilern für punktmessende Polarisationszustandsdetektoren sinnvoll. Ein kollimierter, breitbandiger Lichtstrahl divergiert bei der Transmission am Keil-förmigen Strahlteiler. Es ist daher ggf. sinnvoll, diesen Effekt z.B. durch eine Linse mit einer Antireflexbeschichtung zu kompensieren. In dem vorgeschlagenen neuen Aufbau sind die Viertelwellenplättchen bei breitbandiger Beleuchtung durch ein achromatisches Fresnel'sches Parallelepiped zu ersetzen.

3.3 Polarisationszustandsgeneration

In der Ellipsometrie misst man nicht den Polarisationszustand des einfallenden Lichts, sondern die durch die Probe hervorgerufene Polarisationszustandsänderung. Bei manchen Problemstellungen ist es nicht ausreichend, Licht mit einem festen Polarisationszustand zu emittieren und den geänderten Polarisationszustand im PSD zu detektieren, wie in Abschnitt 2.2 bereits angemerkt. Dies gilt auch für Problemstellungen der Ellipsometrie an gekrümmten Oberflächen. Stattdessen wird ein PSG benötigt, der Licht mit unterschiedlichen Polarisationszuständen emittieren kann. Die Stokes-Vektoren des emittierten Lichts werden dabei im Zeitmultiplexverfahren geändert und für jeden Stokes-Vektor im PSG wird ein Stokes-Vektor im PSD gemessen. Daraus wird die Polarisationszustandsänderung berechnet, die durch die Probe hervorgerufen wird und in allgemeiner Form durch die Müller-Matrix $\mathbf{M}_{S,f}$ beschrieben wird.

3.3.1 Messabbildung

Analog zum PSD lässt sich auch ein PSG durch eine Matrix charakterisieren. Diese wird als Modulationsmatrix $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{4 \times n}$ bezeichnet und enthält die Stokes-Vektoren des emittierten Lichts. Die gemessenen Intensitäten werden mit $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ bzw. in probabilistischer Formulierung mit \mathbf{b} bezeichnet und berechnen sich durch Matrixmultiplikation von \mathbf{W} , $\mathbf{M}_{S,f}$ und \mathbf{A} sowie additivem Sensorrauschen entsprechend der folgenden Messabbildung (vgl. [Gar13a]):

$$\mathbf{B} = \underbrace{\mathbf{A}\mathbf{M}_{S,f}\mathbf{W}}_{=\mu_{\mathbf{b}} - \mu_{\mathbf{r}}} + \mathbf{R}, \quad (3.98)$$

wobei $\mu_{\mathbf{b}}$ den Mittelwert von \mathbf{B} , \mathbf{R} eine Zufallsmatrix aus $m \times n$ Störgrößen und $\mu_{\mathbf{r}}$ den Mittelwert von \mathbf{R} bezeichnen. Mit der gemessenen Intensitätsmatrix \mathbf{B} lautet die Maximum-Likelihood-Schätzung von $\mathbf{M}_{S,f}$ unter Annahme stochastisch unabhängiger und identisch normalverteilter, mittelwertfreier Störgrößen:

$$\hat{\mathbf{M}}_{S,f} = (\mathbf{A})^+ \mathbf{B}(\mathbf{W})^+. \quad (3.99)$$

3.3.2 Aufbauten von Polarisationszustandsgeneratoren

Wie beim PSD wird auch der optische Aufbau des PSG so gewählt, dass die Konditionszahl der Modulationsmatrix minimiert wird. Bei quadratischen Modulationsmatrizen entspricht eine minimale Konditionszahl einer maximalen Determinante. Eine Modulationsmatrix mit minimaler Konditionszahl erhält man bspw. durch äquidistante Abtastung der Poincaré-Kugel anhand der Ecken von platonischen Körpern. Die Messunsicherheit von $\hat{\mathbf{M}}_{S,f}$ hängt von der Konditionszahl von \mathbf{A} und \mathbf{W} ab. Die minimale Konditionszahl von \mathbf{A} und \mathbf{W} beträgt $\sqrt{3}$ [Gar13a].

Für das in Kapitel 5 vorgestellte abbildende Ellipsometer wurden die Ecken von platonischen Körpern als Ausgangsbasis genommen, um die Modulationsmatrix zu generieren. Daher sind sowohl der Polarisator als auch der

Kompensator als drehbare Komponenten ausgeführt. Beim Lasermesssystem ist eine mechanische Modulation nicht sinnvoll, da für die Messung der Müller-Matrix eines Oberflächensegments nur eine kurze Messzeit vorgesehen ist. Durch geblitzte Beleuchtung können unterschiedliche Polarisationszustände mit Zykluszeiten im Milli- und Mikrosekundenbereich erreicht werden. Dadurch ist es bspw. möglich, jede Sensorzeile mit einem anderen Polarisationszustand zu beleuchten. Bei einem neueren Prototyp des Lasermesssystems werden bereits zwei Polarisationszustände emittiert. Die Erweiterung auf eine komplette Müller-Matrix-Messung ließe sich z. B. realisieren, indem direkt neben den vier Photodetektoren im PSD aus Abb. 3.2 jeweils ein Beleuchtungsmodul platziert wird, die im Wechsel geblitzt werden. Werden linear polarisierte Laser mit dem Stokes-Parameter $S_0 = 1$ als Beleuchtungsmodule verwendet, gilt für die Modulationsmatrix: $\mathbf{W} = 2 \cdot \text{diag}(1, 1, -1, 1) \mathbf{A}^T$ [Neg17b]. Neben dem doppelten Verwendungszweck der Polarisationsoptiken für die Polarisationszustandsdetektion und -generation hat diese Anordnung den Vorteil, dass eine optimale Analysematrix automatisch eine optimale Modulationsmatrix impliziert.

3.4 Reflexion und Transmission bei Schichtsystemen

Die Reflexion und Transmission eines Lichtstrahls an einem Schichtsystem aus isotropen Medien ist in Abb. 3.3 abgebildet¹. Die Vektoren $\underline{\mathbf{E}}_i$, $\underline{\mathbf{E}}_r$ und $\underline{\mathbf{E}}_t$ seien jeweils die komplexen elektrischen Feldvektoren der einfallenden, transmittierten und reflektierten Welle. Die Einfallsebene wird aufgespannt vom Richtungsvektor des einfallenden Lichts und der Oberflächennormalen \mathbf{n}_s . Um aus der einfallenden die reflektierte oder transmittierte Welle zu berechnen, wird $\underline{\mathbf{E}}_i$ in eine Komponente parallel zur Einfallsebene $\underline{\mathbf{E}}_i^p$ (p-polarisiert) und eine senkrecht dazu $\underline{\mathbf{E}}_i^s$ zerlegt (s-polarisiert). Die p- und s-polarisierten Komponenten der reflektierten Welle werden mit $\underline{\mathbf{E}}_r^p$ und $\underline{\mathbf{E}}_r^s$ und die p- und

¹ Die Lichtstrahlen werden dabei als sehr breit gedacht, so dass sie einen Halbraum einnehmen.

s-polarisierten Komponenten der transmittierten Welle mit \underline{E}_r^t und \underline{E}_r^t bezeichnet.

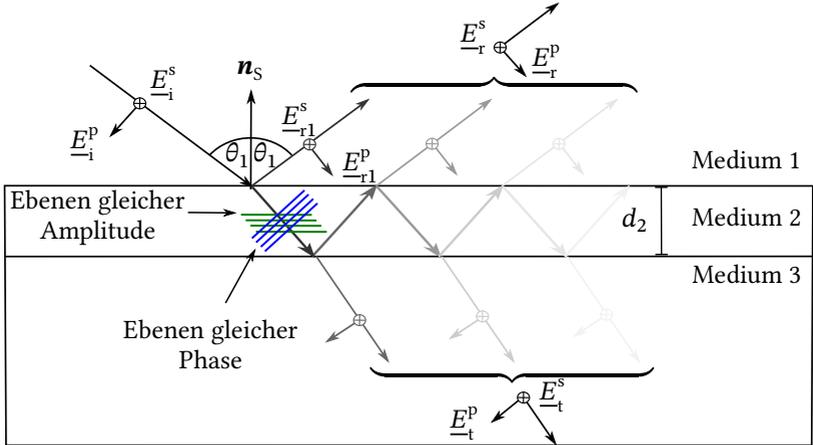


Abbildung 3.3: Reflexion und Transmission eines Lichtstrahls an einem Mehrschichtsystem.

Trifft ein Lichtstrahl vom ersten Medium Luft mit dem Brechungsindex n_1 unter dem Einfallswinkel θ_1 auf ein zweites ggf. absorbierendes Medium mit den Brechungsindex n_2 auf, so wird der komplexe Winkel des gebrochenen Lichtstrahls $\underline{\theta}_2$ über das komplexe Brechungsgesetz von Snellius berechnet [Tom99]:

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \underline{\theta}_2, \tag{3.100}$$

wobei die komplexen trigonometrischen Funktionen $\sin \underline{x} = (e^{i\underline{x}} - e^{-i\underline{x}})/(2i)$ und $\cos \underline{x} = (e^{i\underline{x}} + e^{-i\underline{x}})/2$ für die Rechnung mit komplexen Winkeln verwendet werden. Es sei \underline{E}_{r1} ein reflektierter Lichtstrahl an der Grenzfläche zwischen Medium eins und zwei und \underline{E}_{i1}^p bzw. \underline{E}_{i1}^s die p- und s-polarisierten Komponenten. Die sog. komplexen Fresnel'schen Formeln beschreiben den funktionalen

Zusammenhang zwischen den Feldkomponenten an einer Grenzfläche zwischen isotropen Medien [Tom99, Bor19]:

$$r_{-p} = \frac{E_{r1}^p}{E_i^p} = \frac{n_2 \cos \theta_1 - n_1 \cos \theta_2}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2} = \frac{\tan(\theta_1 - \theta_2)}{\tan(\theta_1 + \theta_2)}, \quad (3.101)$$

$$r_{-s} = \frac{E_{r1}^s}{E_i^s} = \frac{n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} = -\frac{\sin(\theta_1 - \theta_2)}{\sin(\theta_1 + \theta_2)}, \quad (3.102)$$

woraus für den Reflexionsquotienten folgt:

$$\rho = \frac{r_p}{r_s} = -\frac{\cos(\theta_1 + \theta_2)}{\cos(\theta_1 - \theta_2)}. \quad (3.103)$$

Nun sei \underline{E}_{t2} ein vom Medium eins zum Medium zwei gebrochener Lichtstrahl und die p- und s-polarisierten Komponenten seien E_{t2}^p bzw. E_{t2}^s . Diese lassen sich ebenfalls mithilfe der Fresnel'schen Formeln berechnen [Tom99, Bor19]:

$$t_{-p} = \frac{E_{t2}^p}{E_i^p} = \frac{2n_1 \cos \theta_1}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2} = \frac{2 \cos(\theta_1) \sin(\theta_2)}{\sin(\theta_1 + \theta_2) \cos(\theta_1 - \theta_2)}, \quad (3.104)$$

$$t_{-s} = \frac{E_{t2}^s}{E_i^s} = \frac{2n_1 \cos \theta_1}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} = \frac{2 \cos(\theta_1) \sin(\theta_2)}{\sin(\theta_1 + \theta_2)}. \quad (3.105)$$

Möchte man die Lichtbrechung- bzw. die Reflexion zwischen dem zweiten und dem dritten Medium betrachten, so sind bei einem ggf. absorbierenden dritten Medium in den Gleichungen (3.100) bis (3.105) die Winkel θ_1 und θ_2 durch die komplexen Winkel θ_2 und θ_3 sowie die Brechungsindizes n_1 und n_2 durch die komplexen Brechungsindizes \underline{n}_2 und \underline{n}_3 zu ersetzen.

Die komplexen Fresnel'schen sind eine komplexe Erweiterung der geläufigeren reellen Fresnel'schen Formeln [Hec02] und ein Spezialfall der allgemeineren sog. generalisierten Form der Fresnel'schen Formeln [Dup94a, Dup94b].

Die komplexen Winkel sind eine Hilfsgröße zur Beschreibung der Oberflächennormalen von Ebenen gleicher Phase und Ebenen gleicher Amplitude des elektrischen Feldes, die bei HIPWs auftreten können. Gibt es wie in Abb. 3.3 mehrere Grenzschichten, müssen Mehrfachreflexionen berücksichtigt werden. Die Berechnung der Reflexions- und Transmissionskoeffizienten für n Medien mit den Schichtdicken d_2, \dots, d_{n-1} kann über folgende rekursive Formel erfolgen [Lec06]:

$$r_{-p} = \frac{\mathbf{E}_i^p}{\mathbf{E}_i^p} = r_{-p1\dots n}, \quad r_{-s} = \frac{\mathbf{E}_i^s}{\mathbf{E}_i^s} = r_{-s1\dots n}, \quad (3.106)$$

$$t_{-p} = \frac{\mathbf{E}_t^p}{\mathbf{E}_i^p} = t_{-p1\dots n}, \quad t_{-s} = \frac{\mathbf{E}_t^s}{\mathbf{E}_i^s} = t_{-s1\dots n}. \quad (3.107)$$

wobei

$$r_{-pj\dots n} := \frac{r_{-pj,j+1} + r_{-pj+1\dots n} e^{-2i\beta_{-j+1}}}{1 + r_{-pj,j+1} r_{-pj+1\dots n} e^{-2i\beta_{-j+1}}}, \quad (3.108)$$

$$r_{-sj\dots n} := \frac{r_{-sj,j+1} + r_{-sj+1\dots n} e^{-2i\beta_{-j+1}}}{1 + r_{-sj,j+1} r_{-sj+1\dots n} e^{-2i\beta_{-j+1}}}, \quad (3.109)$$

$$t_{-pj\dots n} := \frac{t_{-pj,j+1} + t_{-pj+1\dots n} e^{-i\beta_{-j+1}}}{1 + r_{-pj,j+1} r_{-pj+1\dots n} e^{-2i\beta_{-j+1}}}, \quad (3.110)$$

$$t_{-sj\dots n} := \frac{t_{-sj,j+1} + t_{-sj+1\dots n} e^{-i\beta_{-j+1}}}{1 + r_{-sj,j+1} r_{-sj+1\dots n} e^{-2i\beta_{-j+1}}}, \quad (3.111)$$

und für $j \geq 2$

$$\beta_{-j} := \frac{2\pi}{\lambda} d_j n_j \cos \theta_{-j}. \quad (3.112)$$

Die Rechnung mit den komplexen Fresnel'schen Formeln ist allerdings nur gültig, wenn das Licht auf plan-parallele Grenzschichten auftrifft. Ist eine dieser Grenzschichten nicht senkrecht zur Einfallsebene, ist die Verwendung von generalisierten Fresnel'schen Formeln erforderlich. Die generalisierten Fresnel'schen Formeln setzen isotrope Medien voraus. Bei anisotropen Schichtstrukturen sind der Berreman-Formalismus und darauf aufbauende Algorithmen zu verwenden [Pas17]. Bei depolarisierenden Medien ist der differentielle Müller-Formalismus hilfreich [Azz78b, Oss11, Art13].

3.5 Bestimmung der Modellparameter mit Ellipsometrie ohne Lichtwegumkehrung

In den vorherigen Abschnitten wurde gezeigt, wie eine Müller-Matrix aus gemessenen Intensitäten durch eine Inversion der Messabbildung berechnet werden kann. Die Messung der Müller-Matrix ist insbesondere bei anisotropen und depolarisierenden Medien sinnvoll. Um die Reflexionseigenschaften von anisotropen Proben zu bestimmen, reicht die Angabe des Einfallswinkels alleine nicht aus. Stattdessen bestimmt die Richtung des eingestrahlt Lichts die Polarisationszustandsänderung. Da ein Richtungsvektor zwei Freiheitsgrade besitzt, wird neben dem Einfallswinkel θ_S ein weiterer Winkel η_S eingeführt. Zusammen bilden diese die Winkelkoordinaten des Richtungsvektors \mathbf{n}_S , wie in Abb. 3.4 dargestellt.

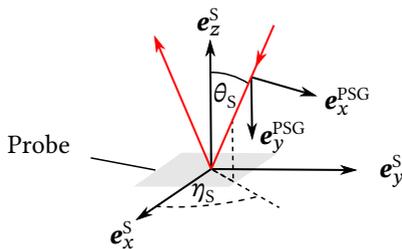


Abbildung 3.4: Parametrierung des Richtungsvektors des einfallenden Lichts durch die Winkelkoordinaten θ_S und η_S .

Anfangs wurden mit der Ellipsometrie nur die ellipsometrischen Winkel Ψ_S und Δ_S bzw. der komplexe Reflexionsquotient $\underline{\rho}_S = \tan \Psi_S e^{i\Delta_S}$ gemessen. Diese als Standard-Ellipsometrie bezeichnete Messtechnik [Gar13a] wird bei isotropen Schichtstrukturen angewendet. Für anisotrope oder depolarisierende Medien ist sie i. Allg. nicht geeignet, obwohl sie für spezielle Aufgabenstellungen auch bei der Vermessung von rauen und somit depolarisierenden Oberflächen und Zwischenschichten eingesetzt werden kann [Tom99]. Allerdings bilden isotrope Medien auch heute noch ein sehr breites Anwendungsfeld in der Ellipsometrie, sodass die Messung der ellipsometrischen Winkel häufig ausreicht. Bei einem Müller-Matrix-Ellipsometer wird eine Müller-Matrix $\mathbf{M}_{S,f}$ anstatt der ellipsometrischen Winkel gemessen, die zusammen mit dem Reflexionsgrad der Probe R_S in folgender Beziehung stehen [Fuj07]:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{S,f} &= \mathbf{M}_L(\Psi_S, \Delta_S, R_S) \\ &= R_S \begin{pmatrix} 1 & -\cos 2\Psi_S & 0 & 0 \\ -\cos 2\Psi_S & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sin 2\Psi_S \cos \Delta_S & \sin 2\Psi_S \sin \Delta_S \\ 0 & 0 & -\sin 2\Psi_S \sin \Delta_S & \sin 2\Psi_S \cos \Delta_S \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.113)$$

Aus dieser Formel ist leicht ersichtlich, dass die Umrechnung von $\mathbf{M}_{S,f}$ zu Ψ_S, Δ_S und R_S ohne Einschränkungen möglich ist. Liegt $\mathbf{M}_{S,f}$ als Messwert vor, so lässt sich im Fall von isotropen Medien beliebig zwischen den ellipsometrischen Winkeln, dem Jones- und dem Müller-Formalismus wechseln.

In der Ellipsometrie ist das inverse Problem, die Schätzung der Modellparameter aus den Messwerten, in den allermeisten Fällen nur über iterative Verfahren lösbar. Jedoch gibt es bei der Einwellenlängen-Ellipsometrie mit UE für bestimmte Aufgabenstellungen auch geschlossene Lösungen [Azz89b, Rus91, Rus99]. Für zwei ggf. absorbierende Medien wird der komplexe Brechungsindex \underline{n}_2 bei gegebenem komplexen Reflexionsquotienten $\underline{\rho}_S$ und bekanntem

Einfallswinkel $\underline{\theta}_1$ wie folgt berechnet [Azz99, Tom05]:

$$\underline{n}_2 = \underline{n}_1 \tan \underline{\theta}_1 \sqrt{1 - \frac{4\underline{\rho}_s \sin^2 \underline{\theta}_1}{(1 + \underline{\rho}_s)^2}}. \quad (3.114)$$

Sind die komplexen Brechungsindizes \underline{n}_1 und \underline{n}_2 bekannt und der komplexe Einfallswinkel $\underline{\theta}_1$ unbekannt, so gibt es ebenfalls eine geschlossene Lösung, wie kürzlich vorgestellt [Neg20a]:

$$\begin{aligned} \sin^2 \underline{\theta}_1 &= \frac{(\underline{n}_1^2 + \underline{n}_2^2)(1 + \underline{\rho}_s)^2}{8\underline{\rho}_s \underline{n}_1^2} \\ &\pm \frac{\sqrt{(\underline{n}_1^2 + \underline{n}_2^2)^2 (1 + \underline{\rho}_s)^4 - 16\underline{n}_1^2 \underline{n}_2^2 \underline{\rho}_s (\underline{\rho}_s + 1)^2}}{8\underline{\rho}_s \underline{n}_1^2}. \end{aligned} \quad (3.115)$$

Eine weitere, häufig verwendete inverse Abbildung berechnet aus $\underline{\rho}_s$ die Schichtdicke d_2 eines beschichteten Substrats, wobei die Brechungsindizes als bekannt vorausgesetzt werden [Azz99]. Dies geschieht über eine Inversion von $\underline{\rho}_s$ anhand der Gleichungen (3.108), (3.109) und (3.112):

$$d_2 = \frac{\log x_{1,2}}{\underline{\gamma}}, \quad (3.116)$$

wobei \log die komplexe Logarithmusfunktion ist und

$$\underline{x}_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, \quad (3.117)$$

$$\underline{a} = r_{-p23} r_{-s23} (r_{-s12} - \underline{\rho}_{-s} r_{-p12}), \quad (3.118)$$

$$\underline{b} = r_{-p12} r_{-s12} r_{-s23} + r_{-p23} - \underline{\rho}_{-s} (r_{-p12} r_{-s12} r_{-p23} + r_{-s23}), \quad (3.119)$$

$$\underline{c} = r_{-s12} - r_{-p12}, \quad (3.120)$$

$$\underline{\gamma} = \frac{-4\pi i \underline{n}_2 \cos \underline{\theta}_2}{\lambda}. \quad (3.121)$$

Für nicht-absorbierende Beschichtungen sind θ_2 und n_2 reelle Größen. In diesem Fall ist die Schichtdicke nicht eindeutig [Azz99]:

$$d_2 \in \left\{ \frac{\log \underline{x}_{1,2}}{\underline{\gamma}} + i \frac{\lambda n_2 \cos \theta_2}{2} \mid i \in \mathbb{Z} \right\}. \quad (3.122)$$

Weitere inverse Abbildungen wurden neuerdings bei der Kombination von Ellipsometrie mit Reflektometrie gefunden. In diesem Fall wird neben den ellipsometrischen Winkeln Ψ_s , Δ_s auch der Reflexionsgrad R_s gemessen. Aus der Literatur sind analytische Formeln bekannt, um aus diesen drei Größen bei einem Substrat sowohl den komplexen Brechungsindex \underline{n}_2 als auch den Einfallswinkel θ_1 zu bestimmen [Har20, Che21b].

4 Modellierung von mikrostrukturierten Retroreflektoren

4.1 Retroreflektierende Strukturen

Die Retroreflexfolie bildet eine wichtige optische Komponente bei der RPE mit Retroreflexion. Mikrostrukturierte Retroreflexfolien sind als rückseitig klebende Rollenware erhältlich. Damit können Oberflächen in beliebiger Form und Größe mit retroreflektierenden optischen Eigenschaften versehen werden. Im diesem Kapitel wird gezeigt, dass mikrostrukturierte Retroreflexfolien basierend auf Mikrokugeln weder einen linearen Dichroismus noch eine Verzögerung aufweisen, solange die Mikrokugeln eine ideale Form haben und vollständig ausgeleuchtet werden. Diese aus Experimenten bereits bekannte Polarisationserhaltung [Har99, Har12] wird nachfolgend theoretisch begründet und die genaue Form der Müller-Matrix bestimmt [Neg16b]. Ein Ergebnis dieser theoretischen Untersuchungen ist, dass der Retroreflektor streng genommen nicht polarisationserhaltend ist, sondern wie ein Spiegel einen Phasensprung verursacht [Har17].

Die Ergebnisse zur Polarisationserhaltung von mikrostrukturierten Retroreflektoren werden in den Abschnitten 4.2 und 4.3 vorgestellt. Die Ergebnisse ähneln denen aus [Hul81], obwohl dort die Streueigenschaften von Mikropartikeln in Luft untersucht wurden. Es gibt jedoch auch signifikante Unterschiede: Anstatt einer sehr großen Anzahl von Partikeln ist bereits ein Mikroelement ausreichend, um eine Polarisationserhaltung zu erzielen. Nicht nur der Müller-Formalismus, sondern auch der Jones-Formalismus muss bei

der Beschreibung des optischen Effekts berücksichtigt werden, da die Kohärenz des Lichts bei der Reflexion an einem Mikroelement als Feststoff besser erhalten wird als bei der Lichtstreuung an Mikropartikeln in Luft. Weiterhin wird für eine Polarisationserhaltung bei Mikropartikeln in Luft gefordert, dass die Orientierung der Partikeln statistisch gleichverteilt ist. Demgegenüber wird bei der Polarisationserhaltung von mikrostrukturierten Retroreflektoren keine Rotationssymmetrie, sondern lediglich eine Drehsymmetrie gefordert¹. Dies führt dazu, dass auch Tripel-Reflektoren polarisationserhaltend sein können, ohne dabei eine Rotationssymmetrie aufzuweisen.

In Abschnitt 4.4 werden die Reflexions- und Polarisations-eigenschaften von Mikrokugel-Reflektoren untersucht. Die weisen sowohl unter senkrechtem als auch unter schrägem Lichteinfall eine sehr gute Polarisationserhaltung auf, solange der Lichtfleck auf der Retroreflexfolie nicht zu klein ist. In Abschnitt 4.5 wird die Retroreflexion von Tripel-Reflektoren behandelt. Tripel-Reflektoren unterliegen einem gänzlich anderen Funktionsprinzip als Mikrokugel-Reflektoren und die Mikrostruktur bildet ein periodisches, klar strukturiertes Muster. Auch mikrostrukturierte Tripel-Reflektoren weisen unter senkrechtem Einfall eine Polarisationserhaltung auf. Im Gegensatz zu Mikrokugeln ist die Polarisationserhaltung von Tripel-Reflektoren nicht invariant gegenüber Einfallswinkeländerungen.

Abschnitt 4.6 behandelt schließlich phasenkonjugierende Spiegel, die Retroreflexion durch Ausnutzung nichtlinearer optischer Effekte erreichen. Für die RPE sind sie zwar von theoretischer Bedeutung, bieten jedoch keinen Ersatz für mikrostrukturierte Retroreflexfolien.

¹ Bei einer Rotationssymmetrie ist eine Drehung um einen beliebigen Drehwinkel eine Selbstabbildung, während dies bei einer Drehsymmetrie nur für bestimmte Winkel gilt.

4.2 Räumliche Symmetrie und Polarisationserhaltung

Bei der Bewertung der optischen Eigenschaften von Retroreflektoren für den Einsatz im Straßenverkehr oder anderen sicherheitsrelevanten Applikationen ist meistens die bidirektionale Reflektanzverteilungsfunktion (engl. *bidirectional reflectance distribution function*, BRDF) von Interesse. Daraus ableitbar ist der Rückstrahlwert abhängig vom Beobachtungswinkel und der Wellenlänge. Im Straßen- und Schienenverkehr sowie in der Luft- und Schifffahrt ist allein der Rückstrahlwert für die Spezifikation von Retroreflektoren und der Einordnung in Reflexions-Klassen entscheidend [DIN13]. Im Gegensatz zur Reflektometrie spielt der Rückstrahlwert in der Ellipsometrie nur eine untergeordnete Rolle. Viel entscheidender sind bei der ellipsometrischen Messung die Polarisations-eigenschaften des Retroreflektors, also die Änderung des Polarisationszustands als Folge der Retroreflexion. Wird ein idealer Spiegel unter senkrechtem Einfall beleuchtet, erhält man die Müller-Matrix $\mathbf{M}_M := \mathbf{diag}(1, 1, -1, -1)$. Bei handelsüblichen mikrostrukturierten Retroreflexfolien wird das Licht üblicherweise mehrfach gebrochen oder reflektiert. Selbst bei isotropen Materialien kann die Müller-Matrix eines einzelnen, als Linie idealisierten Lichtstrahls relativ komplex sein. Die Müller-Matrix eines einzelnen Reflektor-Elements ergibt sich jedoch nicht aus einem einzigen Lichtstrahl, sondern aus allen möglichen Lichtstrahlen zwischen Lichtquelle und Detektor. Im Folgenden soll für eine große Klasse von Retroreflektoren die Müller-Matrix zunächst theoretisch hergeleitet werden. Die Ergebnisse schließen nicht nur handelsübliche Kugel- oder Tripel-Reflektoren mit ein, sondern auch weitere mögliche geometrische Strukturen [Pla11], die in der Praxis aktuell noch keine Rolle spielen.

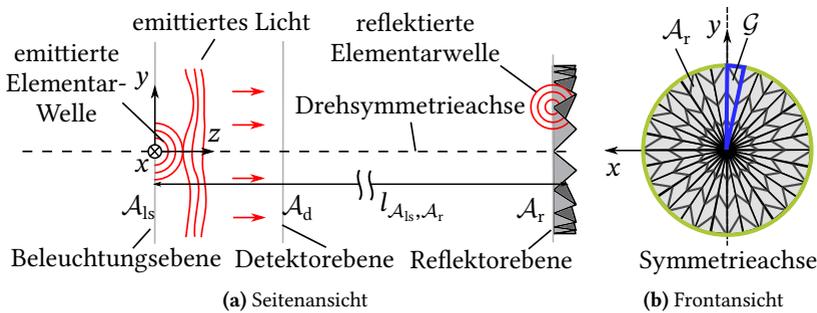


Abbildung 4.1: Skizze eines mit einer ebenen Welle beleuchteten Retroreflektorelements mit Dreh- und Spiegelsymmetrie.

Die Lichtquelle wird als eine leuchtende Ebene modelliert, in der sich eine kreisrunde Blende mit Durchmesser $d_{\mathcal{A}_{ls}}$ befindet. Die Punkte innerhalb der Blende definieren die Beleuchtungsebene $\mathcal{A}_{ls} \subset \mathbb{R}^3$. Es wird angenommen, dass sich das Licht in z -Richtung ausbreitet und das Mikroelement in der Reflektorebene \mathcal{A}_r mit konstanter Lichtintensität und Polarisation komplett ausleuchtet. Somit kann die Lichtquelle selbst als homogen erachtet werden. Von dem Mikroelement wird gefordert, dass es eine Drehsymmetrie aufweist. Die Drehsymmetrieachse ist dabei orthogonal zur Beleuchtungsebene und verläuft durch den Mittelpunkt der Blende. Zusätzlich wird eine Spiegelsymmetrie bezüglich einer Symmetrieebene gefordert, wobei die Symmetrieebene ebenfalls orthogonal zur Beleuchtungsebene ist und die Drehsymmetrieachse beinhaltet. Bei richtiger Position und Ausrichtung erfüllen alle handelsüblichen Retroreflektoren diese Symmetrieeigenschaften. In Abb. 4.1 ist exemplarisch ein solches theoretisches Mikroelement dargestellt, welches bzgl. der Ebene $x = 0$ eine Spiegelsymmetrie und bzgl. der z -Achse eine Drehsymmetrie aufweist. Der Polarisationszustand des zurück reflektierten Lichts wird innerhalb einer Blende $\mathcal{A}_d \subset \mathbb{R}^3$ mit Durchmesser $d_{\mathcal{A}_d}$ berechnet, die als Detektorebene bezeichnet wird und parallel zur Beleuchtungsebene angeordnet ist.

Im Folgenden wird der Einfluss von räumlichen Transformationen des Reflektorelements auf das elektromagnetische Feld untersucht und dabei die Symmetrien des Reflektorelements ausgenutzt. Für ein gegebenes optisches

System sei eine Lösung der Maxwell'schen Gleichungen durch $\underline{\mathbf{E}}_0(\mathbf{x}, t)$ und $\underline{\mathbf{B}}_0(\mathbf{x}, t)$ gegeben. Diese Lösung wird in ein emittiertes und ein reflektiertes Feld zerlegt, welche mit $\underline{\mathbf{E}}_{e,0}(\mathbf{x}, t)$ und $\underline{\mathbf{B}}_{e,0}(\mathbf{x}, t)$ bzw. mit $\underline{\mathbf{E}}_{r,0}(\mathbf{x}, t)$ und $\underline{\mathbf{B}}_{r,0}(\mathbf{x}, t)$ bezeichnet werden:

$$\underline{\mathbf{E}}_0(\mathbf{x}, t) = \underline{\mathbf{E}}_{e,0}(\mathbf{x}, t) + \underline{\mathbf{E}}_{r,0}(\mathbf{x}, t), \quad (4.1)$$

$$\underline{\mathbf{B}}_0(\mathbf{x}, t) = \underline{\mathbf{B}}_{e,0}(\mathbf{x}, t) + \underline{\mathbf{B}}_{r,0}(\mathbf{x}, t). \quad (4.2)$$

Anhand der Gleichung (3.71) erhält man für ein Rechtssystem \mathbf{I}_3 den Stokes-Vektor des emittierten Lichts $\mathbf{S}_{ls,0}$ im Mittelpunkt $\mathbf{x}_{ls} = \langle \text{id}_{\mathcal{A}_{ls}}(\mathbf{x}) \rangle_x$ der Beleuchtungsebene \mathcal{A}_{ls} :

$$\mathbf{S}_{ls,0} := \mathbf{F}(\mathbf{I}_3) \text{vec} \left(\left\langle \underline{\mathbf{E}}_{e,0}(\mathbf{x}_{ls}, t) \underline{\mathbf{E}}_{e,0}(\mathbf{x}_{ls}, t)^\dagger \right\rangle_t \right). \quad (4.3)$$

Es werden folgende Transformationsmatrizen definiert:

$$\mathbf{T}_x := \text{diag}(-1, 1, 1), \quad \mathbf{T}_{yz} := \text{diag}(1, -1, -1), \quad (4.4)$$

$$\mathbf{T}_{xz} := \text{diag}(-1, 1, -1), \quad \mathbf{R}_{\alpha_0} := \mathbf{R}((0, 0, 1)^\top, \alpha_0). \quad (4.5)$$

Für den detektierten Stokes-Vektor des reflektierten Lichts in einem Punkt \mathbf{x} wird das Rechtssystem \mathbf{T}_{xz} verwendet. Der Stokes-Vektor des reflektierten Lichts ist abhängig von $\mathbf{S}_{ls,0}$ und berechnet sich wie folgt¹:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_d(\mathbf{x}, \mathbf{S}_{ls,0}) &:= \overbrace{\mathbf{M}(\mathcal{A}_{ls}, \mathbf{x}; \mathbf{I}_3, \mathbf{T}_{xz})}^{=: \mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{ls}, \mathbf{x})} \mathbf{S}_{ls,0} \\ &= \mathbf{F}(\mathbf{T}_{xz}) \text{vec} \left(\left\langle \underline{\mathbf{E}}_{r,0}(\mathbf{x}, t) \underline{\mathbf{E}}_{r,0}(\mathbf{x}, t)^\dagger \right\rangle_t \right). \end{aligned} \quad (4.6)$$

¹ $\mathbf{M}(\mathcal{A}_{ls}, \mathbf{x}; \mathbf{I}_3, \mathbf{T}_{xz})$ beschreibt hierbei abweichend von der Definition in Gleichung (3.86) eine Abbildung der Stokes-Vektoren des emittierten elektrischen Feldes $\underline{\mathbf{E}}_{e,0}$ auf den Stokes-Vektor des reflektierten elektrischen Feldes $\underline{\mathbf{E}}_{r,0}$ im Punkt \mathbf{x} . Es wird daher ein emittiertes und ein reflektiertes Feld betrachtet und im Müller-Formalismus miteinander verknüpft.

Zunächst wird ein spiegelsymmetrisches Medium wie in Abb. 4.1b betrachtet. Für die Permittivität gilt dann: $\tilde{\epsilon}(\mathbf{x}, \omega) = \mathbf{T}_x \tilde{\epsilon}(\mathbf{T}_x \mathbf{x}, \omega) \mathbf{T}_x$. Für ein solches Medium löst zusätzlich zu $\underline{\mathbf{E}}_0$ und $\underline{\mathbf{B}}_0$ das folgende, gespiegelte elektromagnetische Feld die Maxwell'schen Gleichungen¹:

$$\underline{\mathbf{E}}_1(\mathbf{x}, t) := \mathbf{T}_x \underline{\mathbf{E}}_0(\mathbf{T}_x \mathbf{x}, t), \quad (4.7)$$

$$\underline{\mathbf{B}}_1(\mathbf{x}, t) := \mathbf{T}_{yz} \underline{\mathbf{B}}_0(\mathbf{T}_x \mathbf{x}, t). \quad (4.8)$$

$\underline{\mathbf{E}}_1$ lässt sich analog zu Gleichung (4.1) in ein emittiertes Feld $\underline{\mathbf{E}}_{e,1}$ und ein reflektiertes Feld $\underline{\mathbf{E}}_{r,1}$ zerlegen:

$$\underline{\mathbf{E}}_{e,1}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{T}_x \underline{\mathbf{E}}_{e,0}(\mathbf{T}_x \mathbf{x}, t), \quad (4.9)$$

$$\underline{\mathbf{E}}_{r,1}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{T}_x \underline{\mathbf{E}}_{r,0}(\mathbf{T}_x \mathbf{x}, t). \quad (4.10)$$

$\mathbf{S}_{ls,1}$ sei der Stokes-Vektor des emittierten, gespiegelten und $\mathbf{S}_d(\mathbf{x}, \mathbf{S}_{ls,1})$ der Stokes-Vektor des reflektierten, gespiegelten elektrischen Feldes. Aufgrund der Annahme einer homogenen Beleuchtung mit konstantem Polarisationszustand und Intensität gilt:

$$\underline{\mathbf{E}}_{e,0}(\mathbf{T}_x \mathbf{x}_{ls}, t) = \underline{\mathbf{E}}_{e,0}(\mathbf{x}_{ls}, t), \quad (4.11)$$

$$\underline{\mathbf{E}}_{e,0}(\mathbf{R}_{\alpha_0}^{-1} \mathbf{x}_{ls}, t) = \underline{\mathbf{E}}_{e,0}(\mathbf{x}_{ls}, t). \quad (4.12)$$

Mithilfe der Gleichungen (3.72) bis (3.75) erhält man folgende Beziehungen zwischen dem gespiegelten und dem nicht gespiegelten elektrischen Feld

¹ Dies kann für Medien mit einer skalarwertigen Permeabilität formal bewiesen werden, wird hier jedoch nicht weiter ausgeführt.

bzw. den dazugehörigen Stokes-Vektoren:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{S}_{\text{Is},1} &\stackrel{(4.3)}{=} \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{I}_3) \text{vec} \left(\left\langle \underline{\mathbf{E}}_{\text{e},1}(\mathbf{x}_{\text{Is}}, t) \underline{\mathbf{E}}_{\text{e},1}(\mathbf{x}_{\text{Is}}, t)^\dagger \right\rangle_t \right) \\
 &\stackrel{(4.9)}{=} \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{I}_3) \text{vec} \left(\mathbf{T}_x \left\langle \underline{\mathbf{E}}_{\text{e},0}(\mathbf{T}_x \mathbf{x}_{\text{Is}}, t) \underline{\mathbf{E}}_{\text{e},0}(\mathbf{T}_x \mathbf{x}_{\text{Is}}, t)^\dagger \right\rangle_t \mathbf{T}_x^\top \right) \\
 &\stackrel{(4.11)}{=} \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{I}_3) \text{vec} \left(\mathbf{T}_x \left\langle \underline{\mathbf{E}}_{\text{e},0}(\mathbf{x}_{\text{Is}}, t) \underline{\mathbf{E}}_{\text{e},0}(\mathbf{x}_{\text{Is}}, t)^\dagger \right\rangle_t \mathbf{T}_x^\top \right) \\
 &\stackrel{(3.73)}{=} \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{I}_3) (\mathbf{T}_x \otimes \mathbf{T}_x) \text{vec} \left(\left\langle \underline{\mathbf{E}}_{\text{e},0}(\mathbf{x}_{\text{Is}}, t) \underline{\mathbf{E}}_{\text{e},0}(\mathbf{x}_{\text{Is}}, t)^\dagger \right\rangle_t \right) \\
 &\stackrel{(3.72)}{=} \mathbf{M}_M \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{I}_3) \text{vec} \left(\left\langle \underline{\mathbf{E}}_{\text{e},0}(\mathbf{x}_{\text{Is}}, t) \underline{\mathbf{E}}_{\text{e},0}(\mathbf{x}_{\text{Is}}, t)^\dagger \right\rangle_t \right) \\
 &\stackrel{(4.3)}{=} \mathbf{M}_M \mathbf{S}_{\text{Is},0}, \tag{4.13}
 \end{aligned}$$

$$\mathbf{S}_{\text{d}}(\mathbf{x}, \mathbf{S}_{\text{Is},1}) \stackrel{(4.6)}{=} \mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathbf{x}) \mathbf{S}_{\text{Is},1} \stackrel{(4.13)}{=} \mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathbf{x}) \mathbf{M}_M \mathbf{S}_{\text{Is},0}, \tag{4.14}$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{S}_{\text{d}}(\mathbf{x}, \mathbf{S}_{\text{Is},1}) &\stackrel{(4.6)}{=} \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{T}_{xz}) \text{vec} \left(\left\langle \underline{\mathbf{E}}_{\text{r},1}(\mathbf{x}, t) \underline{\mathbf{E}}_{\text{r},1}(\mathbf{x}, t)^\dagger \right\rangle_t \right) \\
 &\stackrel{(4.10)}{=} \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{T}_{xz}) \text{vec} \left(\mathbf{T}_x \left\langle \underline{\mathbf{E}}_{\text{r},0}(\mathbf{T}_x \mathbf{x}, t) \underline{\mathbf{E}}_{\text{r},0}(\mathbf{T}_x \mathbf{x}, t)^\dagger \right\rangle_t \mathbf{T}_x \right) \\
 &\stackrel{(3.73)}{=} \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{T}_{xz}) (\mathbf{T}_x \otimes \mathbf{T}_x) \text{vec} \left(\left\langle \underline{\mathbf{E}}_{\text{r},0}(\mathbf{T}_x \mathbf{x}, t) \underline{\mathbf{E}}_{\text{r},0}(\mathbf{T}_x \mathbf{x}, t)^\dagger \right\rangle_t \right) \\
 &\stackrel{(3.75)}{=} \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{I}_3) (\mathbf{T}_{xz} \otimes \mathbf{T}_{xz}) (\mathbf{T}_x \otimes \mathbf{T}_x) \text{vec} \left(\left\langle \underline{\mathbf{E}}_{\text{r},0}(\mathbf{T}_x \mathbf{x}, t) \underline{\mathbf{E}}_{\text{r},0}(\mathbf{T}_x \mathbf{x}, t)^\dagger \right\rangle_t \right) \\
 &\stackrel{(3.74)}{=} \mathbf{M}_M \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{T}_{xz}) \text{vec} \left(\left\langle \underline{\mathbf{E}}_{\text{r},0}(\mathbf{T}_x \mathbf{x}, t) \underline{\mathbf{E}}_{\text{r},0}(\mathbf{T}_x \mathbf{x}, t)^\dagger \right\rangle_t \right). \tag{4.15} \\
 &\quad \quad \quad \underbrace{\hspace{15em}}_{=\mathbf{S}_{\text{d}}(\mathbf{T}_x \mathbf{x}, \mathbf{S}_{\text{Is},0})}
 \end{aligned}$$

Aus den Gleichungen (4.6), (4.14) und (4.15) folgt:

$$\mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathbf{x}) \mathbf{M}_M \mathbf{S}_{\text{Is},0} = \mathbf{M}_M \mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathbf{T}_x \mathbf{x}) \mathbf{S}_{\text{Is},0}. \tag{4.16}$$

Dieser Zusammenhang gilt für beliebige $\mathbf{S}_{\text{Is},0}$. Da vier geeignete Stokes-Vektoren den \mathbb{R}^4 aufspannen, gilt aufgrund der Identität $\mathbf{M}_M = \mathbf{M}_M^{-1}$ folgende Gleichung:

$$\mathbf{M}_M \mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathbf{x}) \mathbf{M}_M = \mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathbf{T}_x \mathbf{x}). \tag{4.17}$$

Einen ähnlichen Zusammenhang erhält man für ein drehsymmetrisches Medium mit $\tilde{\underline{\epsilon}}(\mathbf{x}, \omega) = \mathbf{R}_{\alpha_0} \tilde{\underline{\epsilon}}(\mathbf{R}_{\alpha_0}^{-1} \mathbf{x}, \omega) \mathbf{R}_{\alpha_0}^{-1}$. In diesem Fall erhält man zusätzlich zu $\underline{\mathbf{E}}_0$ und $\underline{\mathbf{B}}_0$ auch folgende Lösungen der Maxwell'schen Gleichungen¹:

$$\underline{\mathbf{E}}_2(\mathbf{x}, t) := \mathbf{R}_{\alpha_0} \underline{\mathbf{E}}_0(\mathbf{R}_{\alpha_0}^{-1} \mathbf{x}, t), \quad (4.18)$$

$$\underline{\mathbf{B}}_2(\mathbf{x}, t) := \mathbf{R}_{\alpha_0} \underline{\mathbf{B}}_0(\mathbf{R}_{\alpha_0}^{-1} \mathbf{x}, t). \quad (4.19)$$

Zerlegt man das gedrehte, elektrische Feld $\underline{\mathbf{E}}_2$ in ein emittiertes Feld $\underline{\mathbf{E}}_{e,2}$ und ein reflektiertes Feld $\underline{\mathbf{E}}_{r,2}$, so seien $\mathbf{S}_{ls,2}$ und $\mathbf{S}_d(\mathbf{x}, \mathbf{S}_{ls,2})$ die aus dem emittierten bzw. reflektierten Feld berechneten Stokes-Vektoren. Die nachfolgenden Berechnungen sind analog zu den Gleichungen (4.13) bis (4.17) durchzuführen:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{ls,2} &= \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{I}_3) \mathbf{vec} \left(\mathbf{R}_{\alpha_0} \left\langle \underline{\mathbf{E}}_{e,0}(\mathbf{R}_{\alpha_0}^{-1} \mathbf{x}_{ls}, t) \underline{\mathbf{E}}_{e,0}(\mathbf{R}_{\alpha_0}^{-1} \mathbf{x}_{ls}, t)^\dagger \right\rangle_t \mathbf{R}_{\alpha_0}^{-1} \right) \\ &= \mathbf{M}_r(\alpha_0) \mathbf{S}_{ls,0}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_d(\mathbf{x}, \mathbf{S}_{ls,2}) &= \mathbf{M}_{RE}(\mathcal{A}_{ls}, \mathbf{x}) \mathbf{M}_r(\alpha_0) \mathbf{S}_{ls,0} \\ &= \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{T}_{xz}) \mathbf{vec} \left(\mathbf{R}_{\alpha_0} \left\langle \underline{\mathbf{E}}_{r,0}(\mathbf{R}_{\alpha_0}^{-1} \mathbf{x}, t) \underline{\mathbf{E}}_{r,0}(\mathbf{R}_{\alpha_0}^{-1} \mathbf{x}, t)^\dagger \right\rangle_t \mathbf{R}_{\alpha_0}^{-1} \right) \\ &= \mathbf{M}_r(-\alpha_0) \underbrace{\underline{\mathbf{F}}(\mathbf{T}_{xz}) \mathbf{vec} \left(\left\langle \underline{\mathbf{E}}_{r,0}(\mathbf{R}_{\alpha_0}^{-1} \mathbf{x}, t) \underline{\mathbf{E}}_{r,0}(\mathbf{R}_{\alpha_0}^{-1} \mathbf{x}, t)^\dagger \right\rangle_t \right)}_{=\mathbf{S}_d(\mathbf{R}_{\alpha_0}^{-1} \mathbf{x}, \mathbf{S}_{ls,0})}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Analog zur Gleichung (4.16) folgt:

$$\mathbf{M}_r(\alpha_0) \mathbf{M}_{RE}(\mathcal{A}_{ls}, \mathbf{x}) \mathbf{M}_r(\alpha_0) = \mathbf{M}_{RE}(\mathcal{A}_{ls}, \mathbf{R}_{\alpha_0}^{-1} \mathbf{x}) \quad (4.22)$$

und

$$\mathbf{M}_r(-\alpha_0) \mathbf{M}_{RE}(\mathcal{A}_{ls}, \mathbf{x}) \mathbf{M}_r(-\alpha_0) = \mathbf{M}_{RE}(\mathcal{A}_{ls}, \mathbf{R}_{\alpha_0} \mathbf{x}). \quad (4.23)$$

¹ Der formale Beweis wird hier nicht weiter ausgeführt.

Für die linearen Abbildungsmatrizen \mathbf{T}_x und $\mathbf{R}_{\alpha_0}^{-1}$ ist $\mathbf{x}_a = (0,0,z)^\top$ ein Fixpunkt. Daher hat die Matrix $\mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}_a) = (m_{a_{ij}})$ unter Verwendung von Gleichung (4.17) folgende Nulleinträge (vgl. [Hul81]):

$$\mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}_a) = \mathbf{M}_{\text{M}} \mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}_a) \mathbf{M}_{\text{M}} = \begin{pmatrix} m_{a11} & m_{a12} & 0 & 0 \\ m_{a21} & m_{a22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m_{a33} & m_{a34} \\ 0 & 0 & m_{a43} & m_{a44} \end{pmatrix}. \quad (4.24)$$

Zusammen mit Gleichung (4.23) ergibt sich für $\alpha_0 \bmod 90^\circ \neq 0^\circ$:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}_a) &= \mathbf{M}_{\text{r}}(-\alpha_0) \mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}_a) \mathbf{M}_{\text{r}}(-\alpha_0) \\ &= \text{diag}(m_{a11}, m_{a22}, -m_{a22}, m_{a44}). \end{aligned} \quad (4.25)$$

Für den Fall $\alpha_0 \bmod 90^\circ \equiv 0^\circ$ gilt hingegen:

$$\mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}_a) = \text{diag}(m_{a11}, m_{a22}, m_{a33}, m_{a44}). \quad (4.26)$$

Die Werte der Nicht-Null-Einträge ergeben sich aus den Reflexions- und Polarisationsseigenschaften eines konkreten Reflektorelements. Bisher wurde die Müller-Matrix aus dem reflektierten Lichtfeld berechnet, das auf einer infinitesimal kleinen Fläche im Punkt \mathbf{x}_a auftrifft. Für ein etwas realistischeres Sensormodell wird ein Lichtsensor mit einer kreisrunden Blende \mathcal{A}_d angenommen, der allerdings nicht nur den ersten, sondern alle vier Stokes-Parameter messen kann (vgl. Gleichung (3.81)). Entsprechend der Abb. 4.1b wird eine Menge $\mathcal{G} \subset \mathcal{A}_d$ definiert. Bei einem Symmetriewinkel α_0 mit $\alpha_0 \bmod 90^\circ \neq 0^\circ$ gilt:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathcal{A}_d) &\stackrel{(3.87)}{=} \frac{1}{|(\mathcal{A}_d)_{\llbracket 1,2 \rrbracket}|} \int_{\mathcal{A}_d} \mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}) \, dA \\ &= \frac{1}{|(\mathcal{A}_d)_{\llbracket 1,2 \rrbracket}|} \sum_{l=0}^{n-1} \left(\int_{\mathcal{G}} \mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{R}_{\alpha_0}^l \mathbf{x}) \, dA + \int_{\mathcal{G}} \mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{R}_{\alpha_0}^l \mathbf{T}_x \mathbf{x}) \, dA \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \stackrel{(4.23)}{=} \stackrel{(4.17)}{=} \frac{1}{2n} \sum_{l=0}^{n-1} \mathbf{M}_r(-\alpha_0 l) \left(\overbrace{\frac{1}{|(\mathcal{G})_{\llbracket 1,2 \rrbracket}} \int_{\mathcal{G}} \mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}) \, dA}^{\text{=}\mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathcal{G})}} \right. \\
 & \left. + \mathbf{M}_M \underbrace{\frac{1}{|(\mathcal{G})_{\llbracket 1,2 \rrbracket}} \int_{\mathcal{G}} \mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}) \, dA \, \mathbf{M}_M}_{\text{=}\mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathcal{G})}} \right) \mathbf{M}_r(-\alpha_0 l) \\
 & = \text{diag}(m_{\mathcal{G}11}, (m_{\mathcal{G}22} - m_{\mathcal{G}33})/2, -(m_{\mathcal{G}33} - m_{\mathcal{G}22})/2, m_{\mathcal{G}44}), \quad (4.27)
 \end{aligned}$$

wobei $n := 2\pi/\alpha_0$, $m_{\mathcal{G}ij} := (\mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathcal{G}))_{ij}$ und $|(\mathcal{A}_d)_{\llbracket 1,2 \rrbracket}| = 2n|(\mathcal{G})_{\llbracket 1,2 \rrbracket}|$.

4.3 Räumliche und zeitliche Kohärenz

Im vorherigen Abschnitt wurde gezeigt, dass die berechnete Müller-Matrix $\mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathcal{A}_d)$ eines spiegel- und dreh-symmetrischen Reflektorelements eine spezielle Diagonalmatrix sein muss. Dabei kann sich die normierte Müller-Matrix $\mathbf{N}(\mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathcal{A}_d))$ von \mathbf{M}_M unterscheiden. In diesem Abschnitt wird gezeigt, dass zumindest für mikrostrukturierte, symmetrische Reflektorelemente $\mathbf{N}(\mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathcal{A}_d)) \approx \mathbf{M}_M$ gilt, wobei hierfür die räumliche und zeitliche Kohärenz der Beleuchtung betrachtet wird.

Zunächst wird eine ideale, monochromatische Lichtquelle mit der Kreisfrequenz ω_k betrachtet und die Ergebnisse aus dem vorherigen Abschnitt im Müller-Formalismus auf den Jones-Formalismus übertragen, wobei die Semantik der im vorherigen Abschnitt verwendeten Indizes erhalten bleibt. Monochromatisches Licht ist per Definition sowohl zeitlich als auch räumlich kohärent und die Lichtausbreitung lässt sich durch den Jones-Formalismus beschreiben. Für ein gegebenes, monochromatisches EM-Feld mit der Kreisfrequenz ω_k sei $\underline{\mathbf{U}}_{\text{ls}} := \underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}_{\text{ls}}; \mathbf{I}_3)$ der daraus abgeleitete Jones-Vektor im Punkt \mathbf{x}_{ls} bzgl. der Basis \mathbf{I}_3 . Abhängig von $\underline{\mathbf{U}}_{\text{ls}}$ wird im Punkt \mathbf{x} bzgl. der Basis \mathbf{T}_{xz} ein Jones-Vektor $\underline{\mathbf{U}}_d(\mathbf{x}, \underline{\mathbf{U}}_{\text{ls}})$ detektiert. Die Jones-Vektoren des emittierten und detektierten Lichts sind über die Jones-Matrix $\mathbf{J}_k(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}, \mathbf{I}_3, \mathbf{T}_{xz})$ miteinander

verknüpft:

$$\underline{\underline{U}}_d(\mathbf{x}, \underline{\underline{U}}_{-l_s}) = \underline{\underline{J}}_{-RE}(\mathcal{A}_{l_s}, \mathbf{x}) \underline{\underline{U}}_{-l_s}, \quad (4.28)$$

wobei $\underline{\underline{J}}_{-RE}(\mathcal{A}_{l_s}, \mathbf{x}) := \underline{\underline{J}}_{-k}(\mathcal{A}_{l_s}, \mathbf{x}, \mathbf{I}_3, \mathbf{T}_{xz})$. Anhand der im vorherigen Abschnitt eingeführten elektrischen Felder $\underline{\underline{E}}_{i,e}(\mathbf{x}_{l_s}, t)$ für $i \in \llbracket 0, 2 \rrbracket$ werden die entsprechenden monochromatischen Felder $\underline{\underline{E}}_{ki,e}(\mathbf{x}_{l_s})$ abgeleitet. Daraus lassen sich die Jones-Vektoren $\underline{\underline{U}}_{-l_s,i} := \underline{\underline{U}}_{ki,e}(\mathbf{x}_{l_s}; \mathbf{I}_3) \stackrel{(3.57)}{=} \left(\underline{\underline{E}}_{ki,e}(\mathbf{x}_{l_s}) \right)_{\llbracket 1, 2 \rrbracket}$ definieren. Analog zum Müller-Formalismus gilt im Jones-Formalismus $\underline{\underline{U}}_{-l_s,1} = \mathbf{T}_x \underline{\underline{U}}_{-l_s,0}$ und $\underline{\underline{U}}_{-l_s,2} = \underline{\underline{J}}_r(\alpha_0) \underline{\underline{U}}_{-l_s,0}$. Für die Analyse der Polarisationszustandsänderung spiegel- und drehsymmetrischer Medien bei Beleuchtung mit einem monochromatischen EM-Feld kann der Rechenweg aus dem Müller-Formalismus in den Gleichungen (4.13) bis (4.23) auf den Jones-Formalismus übertragen werden. Die emittierten und detektierten Jones-Vektoren stehen in folgendem Zusammenhang:

$$\underline{\underline{U}}_d(\mathbf{x}, \underline{\underline{E}}_{-l_s,1}) = \underline{\underline{J}}_M \underline{\underline{U}}_d(\mathbf{T}_x \mathbf{x}, \underline{\underline{U}}_{-l_s,1}), \quad (4.29)$$

$$\underline{\underline{U}}_d(\mathbf{x}, \underline{\underline{E}}_{-l_s,2}) = \underline{\underline{J}}_r(-\alpha_0) \underline{\underline{U}}_d(\mathbf{R}_{\alpha_0}^{-1} \mathbf{x}, \underline{\underline{U}}_{-l_s,1}), \quad (4.30)$$

woraus sich folgende Beziehungen für die Jones-Matrix ergeben:

$$\underline{\underline{J}}_M \underline{\underline{J}}_{-RE}(\mathcal{A}_{l_s}, \mathbf{x}) \underline{\underline{J}}_M = \underline{\underline{J}}_{-RE}(\mathcal{A}_{l_s}, \mathbf{T}_x \mathbf{x}), \quad (4.31)$$

$$\underline{\underline{J}}_r(-\alpha_0) \underline{\underline{J}}_{-RE}(\mathcal{A}_{l_s}, \mathbf{x}) \underline{\underline{J}}_r(-\alpha_0) = \underline{\underline{J}}_{-RE}(\mathcal{A}_{l_s}, \mathbf{R}_{\alpha_0} \mathbf{x}). \quad (4.32)$$

Im Falle von spiegelsymmetrischen Reflektorelementen folgt mit Gleichung (4.31) für $\mathbf{x}_a = (0, 0, z)^\top$:

$$\underline{\underline{J}}_{-RE}(\mathcal{A}_{l_s}, \mathbf{x}_a) = \text{diag}\left(\left(\underline{\underline{J}}_{-RE}(\mathcal{A}_{l_s}, \mathbf{x}_a) \right)_{11}, \left(\underline{\underline{J}}_{-RE}(\mathcal{A}_{l_s}, \mathbf{x}_a) \right)_{22} \right) \quad (4.33)$$

und durch Hinzunahme von Gleichung (4.32) folgt für spiegel- und drehsymmetrische Reflektorelemente mit $\alpha_0 \bmod 180^\circ \neq 0^\circ$:

$$\begin{aligned} \underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathbf{x}_a) &= \text{diag}\left(\left(\underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathbf{x}_a)\right)_{11}, -\left(\underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathbf{x}_a)\right)_{11}\right) \\ &= \left(\underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathbf{x}_a)\right)_{11} \underline{\mathbf{J}}_{\text{M}}. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Die Jones-Matrix $\left(\underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathbf{x}_a)\right)_{11} \underline{\mathbf{J}}_{\text{M}}$ kann mithilfe der Gleichung (3.89) in die Müller-Matrix $\left|\left(\underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathbf{x}_a)\right)_{11}\right|^2 \mathbf{M}_{\text{M}}$ umgerechnet werden. Daher erhält man bei monochromatischer, homogener Beleuchtung im Punkt \mathbf{x}_a sowohl im Jones- als auch im Müller-Formalismus eine polarisationserhaltende Jones- bzw. Müller-Matrix.

Als Nächstes soll die Polarisationszustandsänderung des vom Mikroelement zurück reflektierten Lichts in der gesamten Reflektorebene \mathcal{A}_r anstatt in einem einzigen Punkt \mathbf{x}_a untersucht werden. Nach Gleichung (3.61) gilt für die Jones-Matrix zwischen den Referenzebenen \mathcal{A}_{Is} und \mathcal{A}_r :

$$\underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathcal{A}_r) = \int_{\mathcal{A}_r} \underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathbf{x}) \, dA. \quad (4.35)$$

Überträgt man die Berechnung aus Gleichung (4.27) vom Müller in den Jones-Formalismus unter Verwendung der Gleichungen (4.31), (4.32) und (4.35), so folgt:

$$\underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathcal{A}_r) := \int_{\mathcal{A}_r} \underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathbf{x}) \, dA = \left(\underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathcal{A}_r)\right)_{11} \underline{\mathbf{J}}_{\text{M}}. \quad (4.36)$$

Mit der Definition $\underline{\mathbf{J}}'_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathbf{x}) := \underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathbf{x}) / \left(\underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathcal{A}_r)\right)_{11}$ erhält man:

$$\underline{\mathbf{J}}'_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathcal{A}_r) \stackrel{(3.61)}{=} \int_{\mathcal{A}_r} \underline{\mathbf{J}}'_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathbf{x}) \, dA = \underline{\mathbf{J}}_{\text{M}}. \quad (4.37)$$

Die Propagation des Lichts von \mathcal{A}_r nach \mathcal{A}_d kann über ein Beugungsintegral anhand des Huygens'schen Prinzips berechnet werden. Wird monochromatisches Licht durch eine Referenzebene \mathcal{A} transmittiert, wobei nur eine skalare Welle $\underline{u}(\mathbf{x})$ unter Vernachlässigung der vektoriellen Natur des EM-Feld betrachtet wird, dann lässt sich das Feld in einem Punkt $\mathbf{x}_d \in \mathcal{A}_d$ wie folgt berechnen [Goo15]:

$$\underline{u}(\mathbf{x}_d) = \frac{1}{i\lambda} \int_{\mathcal{A}} \underline{u}(\mathbf{x}) \frac{e^{i2\pi d/\lambda}}{d} K(\nu) dA, \quad (4.38)$$

wobei $K(\nu)$ einen Neigungsfaktor zum Beugungswinkel ν und d den Abstand zwischen \mathbf{x}_d und \mathbf{x} bezeichnen. Der Beugungswinkel ν ist definiert als (vgl. [Goo15]):

$$\nu = \frac{\langle \mathbf{n}_{\mathcal{A}}, (\mathbf{x}_d - \mathbf{x}) \rangle}{\|\mathbf{x}_d - \mathbf{x}\|}, \quad (4.39)$$

wobei $\mathbf{n}_{\mathcal{A}}$ die Normale von \mathcal{A} in \mathbf{x} bezeichnet. Zudem wird $\mathbf{n}_{\mathcal{A}}$ so gewählt, dass $\langle \mathbf{n}_{\mathcal{A}}, (\mathbf{x}_d - \mathbf{x}) \rangle \geq 0$ und somit $\nu \geq 0$ für alle $\mathbf{x} \in \mathcal{A}$. Im Folgenden wird das elektrische Feld des zurück reflektierten Lichts im Punkt $\mathbf{x}_d \in \mathcal{A}_d$ anhand des elektrischen Feldes in \mathcal{A}_r berechnet. Die nachfolgenden Berechnungen sind von den geometrischen Randbedingungen wie die Größe des Reflektorelements, die Abstände zwischen den Referenzebenen und die Blendenöffnungen in der Beleuchtungs- und Detektorebene abhängig. Da nur die Polarisationsseigenschaften des Retroreflektors für den optischen Aufbau des abbildenden Ellipsometers aus Abschnitt 5.1 von Interesse sind, werden die dort genannten geometrischen Angaben des abbildenden Ellipsometers als Grundlage für die Berechnungen herangezogen. Wird eine Mikrostruktur verwendet, deren Reflektorelemente deutlich größer als das nachfolgend betrachtete Mikroelement ist, oder sind die Blendendurchmesser in \mathcal{A}_s und \mathcal{A}_d deutlich größer als nachfolgend angenommen, können Abweichungen zu der hier berechneten Müller-Matrix des Retroreflektors auftreten.

Der Abstand zwischen der Beleuchtungs- und Reflektorebene sei gegeben durch $l_{\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathcal{A}_{\text{r}}} = 465 \text{ mm}$. Zur Vereinfachung wird zwischen Reflektor- und Detektorebene derselbe Abstand angenommen, so dass der Ursprung sowohl in \mathcal{A}_{Is} als auch in \mathcal{A}_{d} liegt. Für den Durchmesser des Mikroelements wird ein Wert von $d_{\mathcal{A}_{\text{r}}} = 60 \mu\text{m}$ angenommen, was den üblichen Strukturgrößen mikrostrukturierter Retroreflexfolien entspricht (vgl. Abschnitt 4.4). Die Durchmesser der Blenden ergeben sich aus den optischen Parametern der telezentrischen Optik bzw. telezentrischen Beleuchtung. Die objektseitige numerische Apertur der telezentrischen Beleuchtung beträgt $NA_{\text{Is}} \approx 0,011$, woraus ein Wert von $d_{\mathcal{A}_{\text{Is}}} = 2l_{\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathcal{A}_{\text{r}}} \tan(\arcsin(0,011)) \approx 10,2 \text{ mm}$ für den Blendendurchmesser des PSG resultiert. Das telezentrische Objektiv hat eine objektseitige numerische Apertur von $NA_{\text{d}} \approx 0,0088$ und somit beträgt der Blendendurchmesser des PSD $d_{\mathcal{A}_{\text{d}}} = 2l_{\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathcal{A}_{\text{r}}} \tan(\arcsin(0,0088)) \approx 8,2 \text{ mm}$. Für den Beugungswinkel ν aus Gleichung (4.39) folgt daraus:

$$\nu \in \left[0^\circ, \arctan \frac{d_{\mathcal{A}_{\text{r}}} + d_{\mathcal{A}_{\text{d}}}}{2l_{\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathcal{A}_{\text{r}}}} \right] \approx [0^\circ, 0,5^\circ]. \quad (4.40)$$

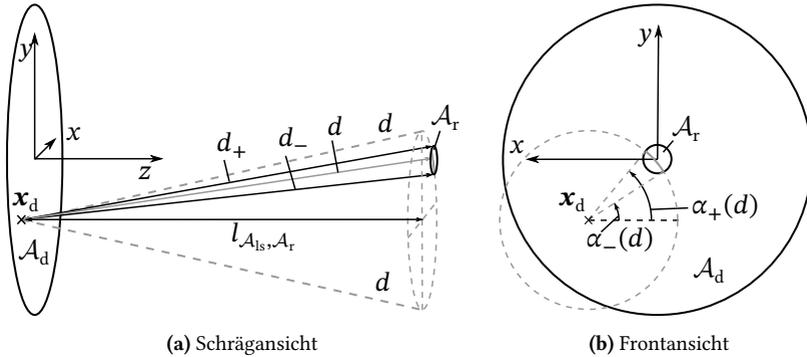


Abbildung 4.2: Skizze zur Berechnung von $\alpha_-(d)$ und $\alpha_+(d)$ abhängig von $d \in [d_-, d_+]$. Die Größenverhältnisse von \mathcal{A}_{r} , \mathcal{A}_{d} und $l_{\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathcal{A}_{\text{r}}}$ sind nicht maßstabsgetreu.

Da der Beugungswinkel ν sehr klein ist, gilt einerseits $K(\nu) \approx 1$ und andererseits kann die Anwendung von Gleichung (4.38) zur Berechnung der Propagation des elektrischen Felds für jede Feldkomponente separat betrachtet werden [Goo15]. Daraus folgt, dass bei der Berechnung der Propagation des elektrischen Feldes von \mathcal{A}_r nach \mathcal{A}_d die Feldkomponente orthogonal zur x, y -Ebene vernachlässigt werden kann. Betrachtet man einen Strahlquerschnitt um die z -Achse mit konstantem Durchmesser, wird die Feldkomponente orthogonal zur x, y -Ebene immer kleiner, je weiter sich die Welle von \mathcal{A}_r entfernt. Mit größer werdendem Abstand nähert sich die Welle immer mehr einer ebenen Welle an [Bor19]. Es ist daher ausreichend, Gleichung (4.38) für die Feldkomponenten in x - und y -Richtung separat anzuwenden, womit das Beugungsintegral auf den Jones-Formalismus übertragen werden kann:

$$\begin{aligned}
 \underline{\mathbf{U}}_d(\mathbf{x}_d, \underline{\mathbf{E}}_{ls,0}) &= \frac{1}{i\lambda} \int_{\mathcal{A}_r} \underline{\mathbf{U}}_d(\mathbf{x}, \underline{\mathbf{E}}_{ls,0}) \frac{e^{i2\pi d/\lambda}}{d} dA \\
 &\stackrel{(4.28)}{=} \underbrace{\frac{\overbrace{\left(\underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{ls}, \mathcal{A}_r) \right)_{11}}^{=: \underline{b}}}{i\lambda}}_{=: \underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{ls}, \mathbf{x}_d)} \int_{\mathcal{A}_r} \underbrace{\frac{\overbrace{\underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{ls}, \mathbf{x})}^{=: \underline{\mathbf{J}}'_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{ls}, \mathbf{x})}}{\overbrace{\left(\underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{ls}, \mathcal{A}_r) \right)_{11}}^{=: \underline{g}(d)}}}}_{=: \underline{g}(d)} \frac{e^{i2\pi d/\lambda}}{d} dA \underline{\mathbf{U}}_{ls,0}
 \end{aligned} \tag{4.41}$$

Es ist unter sinnvollen Annahmen möglich, $\underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{ls}, \mathbf{x}_d)$ ausreichend genau abzuschätzen, ohne $\underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{ls}, \mathbf{x})$ zu kennen. O. B. d. A. wird angenommen, dass $\mathbf{x}_d \in \{(x, y, 0)^\top \in \mathcal{A}_{ls} \mid \exists z : (x, y, z)^\top \in \mathcal{A}_r\}$. Zunächst werden zwei Diffeomorphismen \mathbf{t}' und \mathbf{t} eingeführt (vgl. Abb. 4.2):

$$\mathbf{t}' : \begin{cases} \mathbf{t}'^{-1}(\mathcal{A}_r) & \rightarrow \mathcal{A}_r \\ (d, \alpha) & \mapsto (x \quad y \quad l_{\mathcal{A}_{ls}, \mathcal{A}_r}) \end{cases}, \quad \mathbf{t}(d, \alpha) := (\mathbf{t}'(d, \alpha)^\top)_{\|1,2\|}. \tag{4.42}$$

Die Jacobi-Matrix von \mathbf{t} sei \mathbf{J}_t . Mit dem Transformationssatz und der Koordinatentransformation $(d, \alpha) = \mathbf{t}'^{-1}(x, y, l_{\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathcal{A}_r})$ folgt aus Gleichung (4.41):

$$\underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}_d) / \underline{b} = \int_{d_-}^{d_+} \underline{g}(d) \underbrace{\int_{\alpha_-(d)}^{\alpha_+(d)} \underline{\mathbf{J}}'_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{t}'(d, \alpha)) |\det \mathbf{J}_t(d, \alpha)| d\alpha}_{=: \underline{\mathbf{J}}''_{\text{RE}}(d)} dd, \quad (4.43)$$

wobei d_- und d_+ den minimalen bzw. maximalen Abstand zwischen \mathbf{x}_d und \mathcal{A}_r bezeichnen und $\alpha_-(d)$ und $\alpha_+(d)$ den minimalen bzw. maximalen Winkel zu gegebenem Abstand d . Mit dem Mittelwertsatz der Integralrechnung kann das Integral Gleichung (4.43) abgeschätzt werden, indem der Satz separat sowohl für die Real- und Imaginärteile von $\underline{\mathbf{J}}'_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x})$ bzw. $\underline{g}(d)$, als auch für alle Elemente der Jones-Matrix angewendet wird. Hierbei ist folgende Identität erforderlich, die sich aus Gleichung (4.37) und dem Transformationssatz ergibt:

$$\int_{d_-}^{d_+} \underline{\mathbf{J}}''_{\text{RE}}(d) dd = \int_{\mathcal{A}_r} \underline{\mathbf{J}}'_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}) dA \stackrel{(4.37)}{=} \underline{\mathbf{J}}_{\text{M}}. \quad (4.44)$$

Beispielhaft wird der Mittelwertsatz für die Realteile $\Re\left\{\left(\underline{\mathbf{J}}''_{\text{RE}}(d)\right)_{11}\right\}$ und $\Re\left\{\underline{g}(d)\right\}$ aus Gleichung (4.43) angewendet. Zunächst muss folgende Annahme erfüllt sein:

$$\forall d \in \underbrace{[d_-, d_+]}_{=: \mathcal{R}} : \Re\left\{\left(\underline{\mathbf{J}}''_{\text{RE}}(d)\right)_{11}\right\} \stackrel{\geq}{\leq} 0. \quad (4.45)$$

Nach Gleichung (4.44) und dem Mittelwertsatz existiert eine Zahl $d^* \in \mathcal{R}$, so dass:

$$\begin{aligned}
 & \int_{d_-}^{d_+} \Re \left\{ \underline{g}(d) \right\} \Re \left\{ \left(\underline{\mathbf{J}}''_{\text{RE}}(d) \right)_{11} \right\} dd \\
 &= \Re \left\{ \underline{g}(d^*) \right\} \int_{d_-}^{d_+} \Re \left\{ \left(\underline{\mathbf{J}}''_{\text{RE}}(d) \right)_{11} \right\} dd \\
 &\stackrel{(4.44)}{=} \Re \left\{ \underline{g}(d^*) \right\}. \tag{4.46}
 \end{aligned}$$

Je nachdem ob das Integral aus Gleichung (4.45) für alle d positiv oder negativ ist, liegt der Wert des Integrals im Intervall $[g_+^{\Re}, g_+^{\Im}]$ oder $[-g_+^{\Re}, -g_-^{\Im}]$, wobei:

$$\begin{aligned}
 g_-^{\Re} &:= \min_{d \in \mathcal{R}} \Re \left\{ \underline{g}(d) \right\}, & g_+^{\Re} &:= \max_{d \in \mathcal{R}} \Re \left\{ \underline{g}(d) \right\}, \\
 g_-^{\Im} &:= \min_{d \in \mathcal{R}} \Im \left\{ \underline{g}(d) \right\}, & g_+^{\Im} &:= \max_{d \in \mathcal{R}} \Im \left\{ \underline{g}(d) \right\}. \tag{4.47}
 \end{aligned}$$

Für viele Reflektorelemente wie denjenigen aus den Abschnitten 4.4 und 4.5 sind die Diagonalelemente von $\Re \left\{ \left(\underline{\mathbf{J}}'_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathbf{x}) \right)_{11} \right\}$ und $\Re \left\{ \left(\underline{\mathbf{J}}'_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathbf{x}) \right)_{22} \right\}$ entweder positiv oder negativ und erfüllen somit die Voraussetzung aus Gleichung (4.45). Jedoch gilt dies i. Allg. weder für die Imaginärteile noch für $\Re \left\{ \left(\underline{\mathbf{J}}'_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathbf{x}) \right)_{12} \right\}$ und $\Re \left\{ \left(\underline{\mathbf{J}}'_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathbf{x}) \right)_{21} \right\}$. Empirisch lässt sich feststellen, dass die Real- und Imaginärteile der einzelnen Matrix-Elemente von $\underline{\mathbf{J}}''_{\text{RE}}(d)$ bei Variation von d aufgrund der in $\underline{\mathbf{J}}''_{\text{RE}}(d)$ enthaltenen Rotationsmatrix $\underline{\mathbf{J}}_{\text{r}}(\cdot)$ meist sinusförmig oszillieren (vgl. z. B. $\mathbf{M}_{\text{r}}(\cdot)$ in Gleichung (4.27)). Beispielhaft ist dies für die Terme $g_-^{\Re} \Re \left\{ \left(\underline{\mathbf{J}}''_{\text{RE}}(d) \right)_{11} \right\}$ und $\Re \left\{ \underline{g}(d) \right\} \Re \left\{ \left(\underline{\mathbf{J}}''_{\text{RE}}(d) \right)_{11} \right\}$ in Abb. 4.3a skizziert. Bildet man unter diesen beiden Funktionen das Integral, so ergibt sich die Differenz zwischen diesen beiden Integralen aus den rot und blau schraffierten Flächen. Bei anderen Termen wie $\Re \left\{ \left(\underline{\mathbf{J}}''_{\text{RE}}(d) \right)_{12} \right\}$ ist diese Differenz viel kleiner: Da die Fläche im positiven und negativen Wertebereich unter der Funktion $\Re \left\{ \left(\underline{\mathbf{J}}''_{\text{RE}}(d) \right)_{12} \right\}$ aufgrund von Gleichung (4.44) gleich groß sein muss, wirkt sich die Multiplikation mit $\Re \left\{ \underline{g}(d) \right\}$ im Gegensatz

zum vorherigen Fall deutlich geringer auf den Absolutwert des Integrals aus. Dieser Unterschied wird in den Abb. 4.3a und 4.3b verdeutlicht. Um die Unsicherheit von $\underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}_d)/\underline{b}$ aus Gleichung (4.43) bei unbekanntem $\underline{\mathbf{J}}'_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x})$ abzuschätzen, ist es ausreichend, sich auf die Nicht-Null-Einträge in Gleichung (4.44) zu beschränken – also auf $\Re\left\{\left(\underline{\mathbf{J}}'_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x})\right)_{11}\right\}$ und $\Re\left\{\left(\underline{\mathbf{J}}'_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x})\right)_{22}\right\}$ – da die Abweichungen in den Null-Einträgen im Vergleich dazu verschwindend gering sind. Insgesamt gilt:

$$\begin{pmatrix} g_{-}^{\Re} & 0 \\ 0 & -g_{+}^{\Re} \end{pmatrix} \lesssim \Re\left\{\underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}_d)/\underline{b}\right\} \lesssim \begin{pmatrix} g_{+}^{\Re} & 0 \\ 0 & -g_{-}^{\Re} \end{pmatrix}, \quad (4.48)$$

$$\begin{pmatrix} g_{-}^{\Im} & 0 \\ 0 & -g_{+}^{\Im} \end{pmatrix} \lesssim \Im\left\{\underline{\mathbf{J}}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}_d)/\underline{b}\right\} \lesssim \begin{pmatrix} g_{+}^{\Im} & 0 \\ 0 & -g_{-}^{\Im} \end{pmatrix}, \quad (4.49)$$

wobei „ \lesssim “ hierbei elementweise und nur näherungsweise gilt¹.

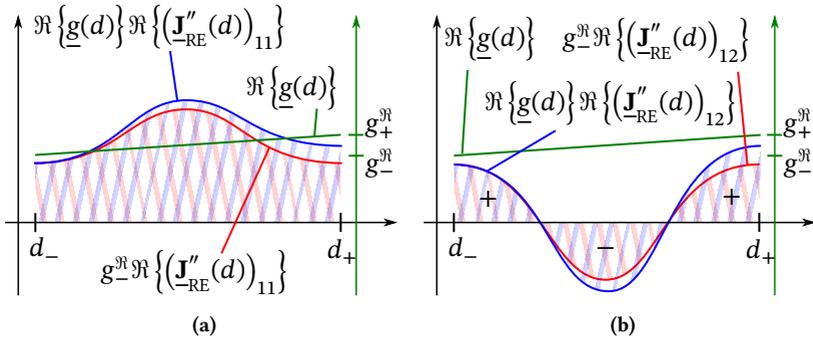


Abbildung 4.3: Skizze zur Veranschaulichung beispielhafter Kurven der Jones-Matrix-Elemente bei Variation von d und der sich daraus ergebenden Integrale über das Intervall $[d_-, d_+]$. Der Wert des Integrals aus Gleichung (4.43) ergibt sich aus der blau und der Wert der Approximation aus der rot schraffierten Fläche. Der Realteil der Gewichtungsfunktion \mathbf{g} ist auf einer anderen Skala ebenfalls eingezeichnet, wobei die Abbildung nicht maßstabsgetreu ist. In (a) nehmen die Integrale der Real- und Imaginärteile der Diagonalelemente aus Gleichung (4.43) i. Allg. Werte ungleich Null an. Für die Nicht-Diagonalelemente nimmt das Integral sehr kleine Absolutwerte an und die Approximation nimmt den Wert Null an (b).

¹ Man beachte, dass eine Drehung der Jones-Matrizen für die obere und untere Grenze eine Matrix ergibt, die innerhalb der Abschätzung liegt.

Für $\|\mathbf{x}_d\| = 9,2 \text{ mm}$ und $l_{\mathcal{A}_{ls}, \mathcal{A}_r} = 465 \text{ mm}$ ergeben sich folgende Werte:

$$g_-^{\Re} = 1,3012, \quad g_+^{\Re} = 1,3215, \quad g_-^{\Im} = 1,6961, \quad g_+^{\Im} = 1,7117. \quad (4.50)$$

Die Abschätzungen der Jones-Matrix können mithilfe von Gleichung (3.89) zur Abschätzung der Müller-Matrix verwendet werden. Für einen Punkt \mathbf{x}_2 sei $\mathbf{M}_{\text{REk}}(\mathcal{A}_{ls}, \mathbf{x}_2)$ die Müller-Matrix zur Jones-Matrix $\mathbf{J}_{-\text{RE}}(\mathcal{A}_{ls}, \mathbf{x}_2)$ und der Kreisfrequenz ω_k . Im Müller-Formalismus folgt aus den Gleichungen (4.48) und (4.49):

$$\begin{aligned} & \overbrace{\begin{pmatrix} 1,0000 & -0,0113 & 0 & 0 \\ -0,0113 & 1,0000 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1,0000 & -0,0118 \\ 0 & 0 & -0,0118 & -1,0000 \end{pmatrix}}{=: \mathbf{M}_{\min}} \\ & \approx \mathbf{N}(\mathbf{M}_{\text{REk}}(\mathcal{A}_{ls}, \mathbf{x}_d)) \\ & \approx \underbrace{\begin{pmatrix} 1,0000 & 0,0112 & 0 & 0 \\ 0,0112 & 1,0000 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -0,9999 & 0,0118 \\ 0 & 0 & 0,0118 & -0,9999 \end{pmatrix}}{=: \mathbf{M}_{\max}}. \end{aligned} \quad (4.51)$$

Weiterhin werden folgende Definitionen eingeführt:

$$\mathbf{M}_{\min}^d := \mathbf{M}_{\min} \odot \mathbf{I}_4 = \mathbf{diag}(1,0000, 1,0000, -1,0000, -1,0000), \quad (4.52)$$

$$\mathbf{M}_{\max}^d := \mathbf{M}_{\max} \odot \mathbf{I}_4 = \mathbf{diag}(1,0000, 1,0000, -0,9999, -0,9999). \quad (4.53)$$

Die Abschätzung der Müller-Matrix $\mathbf{M}_{\text{REk}}(\mathcal{A}_{ls}, \mathbf{x}_d)$ aus Gleichung (4.51) gilt, falls $\|\mathbf{x}_d\| \leq 9,2 \text{ mm}$, da für kleinere Abstände von \mathbf{x}_d zum Ursprung sich $\mathbf{N}(\mathbf{M}_{\text{REk}}(\mathcal{A}_{ls}, \mathbf{x}_d))$ dem Optimum $\mathbf{diag}(1, 1, -1, -1)$ annähert; siehe Gleichung (4.34) für die entsprechende Jones-Matrix. Schränkt man den Wertebereich von \mathbf{x}_d auf $\|\mathbf{x}_d\| \leq 4,1 \text{ mm} = d_{\mathcal{A}_d}/2$ ein, gilt die obige Abschätzung für

die Müller-Matrizen natürlich weiterhin. Gleichung (4.51) ist äquivalent zu:

$$(\mathbf{M}_{\text{REk}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}_d))_{11} \mathbf{M}_{\text{min}} \lesssim \mathbf{M}_{\text{REk}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}_d) \lesssim (\mathbf{M}_{\text{REk}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}_d))_{11} \mathbf{M}_{\text{max}} \quad (4.54)$$

Eine spektral gemittelte Müller-Matrix $\mathbf{M}_{\text{RE}}^{\text{B}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}_d)$ lässt sich durch Addition von Gleichung (4.54) für alle Kreisfrequenzen und Multiplikation mit $|q_{\underline{k}}|^2$ entsprechend der Definition der spektral gemittelten Müller-Matrix in Gleichung (A.51) berechnen:

$$\mathbf{M}_{\text{min}} \lesssim \mathbf{N}(\mathbf{M}_{\text{RE}}^{\text{B}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}_d)) = \frac{\sum_{k \geq 0} \mathbf{M}_{\text{REk}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}_d) |q_{\underline{k}}|^2}{\sum_{k \geq 0} (\mathbf{M}_{\text{REk}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}_d))_{11} |q_{\underline{k}}|^2} \lesssim \mathbf{M}_{\text{max}} \quad (4.55)$$

Die Müller-Matrix $\mathbf{M}_{\text{RE}}^{\text{B}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}_d)$ setzt sich zusammen aus räumlich kohärenten Moden mehrerer Kreisfrequenzen. Mithilfe der Definition aus Gleichung (3.87) kann man diese Matrix über die gesamte Detektorebene \mathcal{A}_d berechnen:

$$\mathbf{M}_{\text{RE}}^{\text{B}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathcal{A}_d) = \frac{1}{|\mathcal{A}_d|_{\|1,2\|}} \int_{\mathcal{A}_d} \mathbf{M}_{\text{RE}}^{\text{B}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathbf{x}_d) dA. \quad (4.56)$$

Aufgrund der Abschätzung aus Gleichung (4.55) gilt:

$$\mathbf{M}_{\text{min}} \lesssim \mathbf{N}(\mathbf{M}_{\text{RE}}^{\text{B}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathcal{A}_d)) \lesssim \mathbf{M}_{\text{max}}. \quad (4.57)$$

In Gleichung (4.27) wurde gezeigt, dass $\mathbf{M}_{\text{RE}}^{\text{B}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathcal{A}_d)$ eine Diagonalmatrix sein muss, wodurch sich folgende geänderte Abschätzung ergibt:

$$\mathbf{M}_{\text{min}}^{\text{d}} \lesssim \mathbf{N}(\mathbf{M}_{\text{RE}}^{\text{B}}(\mathcal{A}_{\text{ls}}, \mathcal{A}_d)) \lesssim \mathbf{M}_{\text{max}}^{\text{d}}. \quad (4.58)$$

Damit erhält man eine Abschätzung für die Müller-Matrix des Retroreflektors bei Verwendung einer räumlich kohärenten schmalbandigen Lichtquelle. Bei einer räumlich inkohärenten Beleuchtung können im Gegensatz zu einer

zeitlich inkohärenten Beleuchtung größere Abweichungen zu der idealen normierten Müller-Matrix \mathbf{M}_M auftreten. Wird räumlich inkohärentes Licht aus der Blende \mathcal{A}_{Is} emittiert und die Intensität des reflektierten Lichts über die gesamte Blendenöffnung \mathcal{A}_d gemessen, so wird die resultierende Müller-Matrix des Retroreflektors mit $\mathbf{M}_{RE}(\mathcal{A}_{Is}, \mathcal{A}_d)$ bezeichnet. Nach den Gleichungen (3.86) und (3.87) gilt für räumlich inkohärente Beleuchtungen:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{RE}(\mathcal{A}_{Is}, \mathcal{A}_d) &= \frac{1}{|(\mathcal{A}_d)_{\parallel 1,2}|} \int_{\mathcal{A}_d} \mathbf{M}_{RE}(\mathcal{A}_{Is}, \mathbf{x}') dA' \\ &= \frac{1}{|(\mathcal{A}_d)_{\parallel 1,2}|} \int_{\mathcal{A}_d} \int_{\mathcal{A}_{Is}} \mathbf{M}_{RE}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') dA dA'. \end{aligned} \quad (4.59)$$

Da Elementarwellen räumlich kohärent sind, lassen sich zur Berechnung von $\mathbf{M}_{RE}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ die Ergebnisse aus den Gleichungen (4.28) bis (4.58) mittels einer Spektralzerlegung wiederverwenden. Dies gilt zumindest für die von der Drehsymmetrieachse aus emittierte Elementarwelle, deren Ursprung unter Symmetrioperationen unverändert bleibt. Wird die Kugelwelle nicht von der Drehsymmetrieachse aus emittiert, kann für die meisten Reflektorelemente davon ausgegangen werden, dass sich die Müller-Matrix bei einer kleinen Verkippung des Einfallswinkels θ_R aus Abb. 4.4 nicht signifikant ändert:

$$\mathbf{M}_{RE}(\mathbf{x}_d, \mathbf{x}_d + \mathbf{x}_\Delta) \approx \mathbf{M}_{RE}(\mathbf{o}_3, \mathbf{x}_\Delta). \quad (4.60)$$

Der maximale Einfallswinkel θ_R^{\max} beträgt bei dem hier betrachteten optischen Aufbau (vgl. Abb. 5.1):

$$\theta_R^{\max} = \arctan \frac{d_{\mathcal{A}_{Is}}}{2l_{\mathcal{A}_{Is}, \mathcal{A}_r}} = 0,6^\circ. \quad (4.61)$$

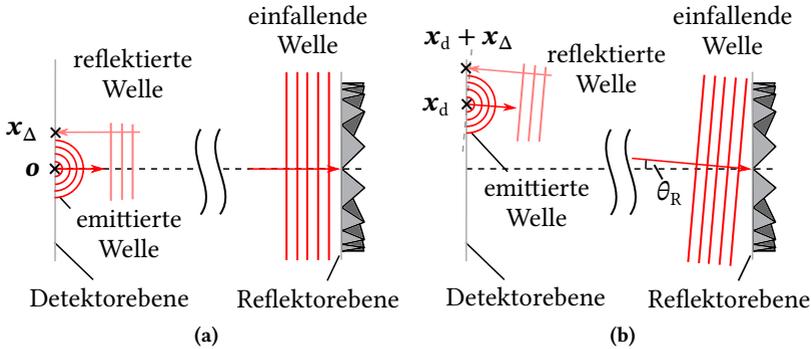


Abbildung 4.4: Darstellung der Referenzpunkte zur Berechnung der Müller-Matrix. In (a) wird eine zentrierte und in (b) eine nicht-zentrierte Kugelwelle emittiert. Das Schaubild visualisiert die getroffene Annahme, dass die Elemente der Müller-Matrix zwischen den beiden Referenzpunkten im Fall (a) und (b) ähnlich sind, was bei pyramidalen Mikrotripel nur für kleine θ_R gültig ist. Zur besseren Visualisierung sind die Größenverhältnisse nicht maßstabsgetreu und θ_R stark vergrößert abgebildet.

Im Einfallswinkelbereich $\theta_R \in [0^\circ, \theta_R^{\max}]$ gibt es kaum Unterschiede zwischen den Polarisationszustandsänderungen der einzelnen Elementarwellen. Bei Kugelreflektoren ist die Polarisationszustandsänderung in einem so kleinen Einfallswinkelbereich vernachlässigbar. Für ein Mikrotripel ergeben Simulationsergebnisse Abweichungen der Diagonaleinträge der normierten Müller-Matrix um bis zu $9 \cdot 10^{-5}$, falls unter annähernd senkrechtem Einfall beleuchtet wird.

Einsetzen von Gleichung (4.60) in Gleichung (4.59) liefert:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathcal{A}_{\text{d}}) &= \frac{1}{|(\mathcal{A}_{\text{d}})_{\parallel 1,2}|} \int_{\mathcal{A}_{\text{Is}}} \int_{\mathcal{A}_{\text{d}}} \mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \, dA' \, dA \\
 &= \frac{1}{|(\mathcal{A}_{\text{d}})_{\parallel 1,2}|} \int_{\mathcal{A}_{\text{Is}}} \int_{\mathcal{A}_{\Delta}(\mathbf{x})} \mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{x}_{\Delta}) \, dA_{\Delta} \, dA \\
 &\stackrel{(4.60)}{\approx} \frac{1}{|(\mathcal{A}_{\text{d}})_{\parallel 1,2}|} \int_{\mathcal{A}_{\text{Is}}} \int_{\mathcal{A}_{\Delta}(\mathbf{x})} \mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathbf{o}_3, \mathbf{x}_{\Delta}) \, dA_{\Delta} \, dA_1, \quad (4.62)
 \end{aligned}$$

wobei $\mathbf{x}_\Delta := \mathbf{x}' - \mathbf{x}$ und $\mathcal{A}_\Delta(\mathbf{x}) := \{\mathbf{x}' - \mathbf{x} \mid \mathbf{x}' \in \mathcal{A}_d\}$. Aufgrund der geometrischen Randbedingungen ist $\|\mathbf{x}_\Delta\| \leq (d_{\mathcal{A}_d} + d_{\mathcal{A}_s})/2 = 9,2 \text{ mm}$. Das Ergebnis aus Gleichung (4.55) für örtlich kohärentes Licht gilt nicht nur für eine leuchtende Fläche \mathcal{A}_s , sondern auch für eine (ggf. polychromatische) Elementarwelle, die vom Ursprung aus emittiert wird. Somit gilt:

$$\mathbf{M}_{\min} \lesssim \mathbf{N}(\mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathbf{o}_3, \mathbf{x}_\Delta)) \lesssim \mathbf{M}_{\max}. \quad (4.63)$$

Aufgrund des Mittelwertsatzes der Integralrechnung bleibt diese Abschätzung auch nach der Integration in Gleichung (4.62) und anschließender Normierung gültig:

$$\mathbf{M}_{\min} \lesssim \mathbf{N}(\mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_s, \mathcal{A}_d)) \lesssim \mathbf{M}_{\max}. \quad (4.64)$$

Da $\mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_s, \mathcal{A}_d)$ nach Gleichung (4.27) eine Diagonalmatrix sein muss, gilt:

$$\mathbf{M}_{\min}^d \lesssim \mathbf{N}(\mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_s, \mathcal{A}_d)) \lesssim \mathbf{M}_{\max}^d. \quad (4.65)$$

Dieses Ergebnis ist für emittiertes, räumlich inkohärentes Licht gültig. Dabei ist unerheblich, ob das Licht quasi-monochromatisch oder polychromatisch ist, da bei der Herleitung die Abschätzung aus Gleichung (4.55) für polychromatisches Licht ausgenutzt wurde. Es sei angemerkt, dass es nicht erforderlich ist, bestimmte Kombinationen von örtlichen und spektralen Moden bei der Rechnung mit inkohärentem Licht zu berücksichtigen. Die Verwendung des gleichen Spektrums für verschiedene örtliche Moden ist bei stationären Feldern ausreichend [Wyr07]¹.

Falls der Blendendurchmesser $d_{\mathcal{A}_d}$ des PSD sehr groß ist, können die Nicht-Diagonalelemente der normierten Müller-Matrix $\mathbf{N}(\mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_s, \mathbf{x}_d))$ in der Größenordnung 10^{-1} liegen. Betrachtet man Polarisationszustände in der Referenzebene \mathcal{A}_d anstatt im Punkt \mathbf{x}_d , sind für die Berechnung der normierten Müller-Matrix $\mathbf{N}(\mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_s, \mathcal{A}_d))$ nur die Diagonaleinträge von $\mathbf{N}(\mathbf{M}_{\text{RE}}(\mathcal{A}_s, \mathbf{x}_d))$ relevant und diese weichen kaum vom Wert 1 bzw. -1 ab. Auch bei sehr großen Blendendurchmessern – also bei allen praxisrelevanten

¹ LEDs-Beleuchtungen u. v. a. emittieren ein stationäres Feld.

Größen – ist die normierte Müller-Matrix eines idealen Reflektorelements annähernd \mathbf{M}_M .

Ist auch der Blendendurchmesser d_{A_s} des PSG groß und ist das emittierte Licht nicht kollimiert, so ist die Annahme aus Gleichung (4.60) i. Allg. nicht mehr erfüllt, wobei Kugelreflektoren aufgrund der Kugelsymmetrie eine Ausnahme bilden. Im allgemeinen Fall gibt es jedoch eine signifikante Winkelabhängigkeit der Müller-Matrix einer Elementarwelle, die vom Emissions- und Detektionsort der Elementarwelle abhängt. Bei pyramidalen Mikrotripeln basierend auf totaler interner Reflexion (TIR) können die Diagonaleinträge der normierten Müller-Matrix für $d_{A_d} = d_{A_s} > 30$ mm bei großen Blendendurchmessern Abweichungen zu \mathbf{M}_M in der Größenordnung 10^{-2} aufweisen. Die Ursache hierfür liegt in der Abhängigkeit des Kohärenzradius vom Strahldurchmesser bei der Lichtpropagation. Bei der Propagation von inkohärentem Licht um eine feste Strecke nimmt der Kohärenzradius bei einem breiten Lichtstrahl nicht so schnell zu wie bei einem schmalen Strahl, da der Kohärenzradius invers proportional zum Strahldurchmesser ist [Hec02]. Bei der Überlagerung von verschiedenen Müller-Matrizen der Elementarwellen über einen breiten Einfallswinkelbereich müssen daher Intensitäten superponiert werden, wodurch die Polarisationserhaltung vermindert wird und größere Abweichungen zur idealen Matrix \mathbf{M}_M entstehen.

Ein Ergebnis dieses Abschnitts ist, dass ideale, symmetrische Reflektorelemente eine Polarisationserhaltung aufweisen, die um Größenordnungen besser ist als in den meisten praktischen Anwendungen gefordert. Dies gilt sowohl bei Verwendung von Laser-Ellipsometrie als auch bei dem in Kapitel 5 vorgestellten abbildenden Ellipsometer. Bei der Laser-Ellipsometrie ist das Licht sowohl zeitlich als auch räumlich kohärent und der Blendendurchmesser des PSG spielt für das Messergebnis keine und der des PSD nur eine untergeordnete Rolle. Bei dem in Kapitel 5 vorgestellten abbildenden Ellipsometer wird eine rote LED-Beleuchtung verwendet. Diese hat eine bekannte zeitliche Kohärenzlänge, aber einen unbekanntem Kohärenzradius. Für eine Abschätzung der maximalen Abweichungen vom Idealfall wird ein Kohärenzradius von Null angenommen, was einer vollständig inkohärenten Beleuchtung entspricht. In der Realität ist der Kohärenzradius zwar immer größer als

Null [Goo15], allerdings führt ein größerer Kohärenzradius nur zu einer Verbesserung der Polarisationserhaltung.

Die bisherigen Untersuchungen beziehen sich auf ideale Reflektorelemente. In Abschnitt 4.4 wird die Polarisationserhaltung von nicht-idealen Kugelreflektoren mittels physikalisch-optischer Simulation abgeschätzt. Hierbei ist die Kenntnis der zeitlichen Kohärenzlänge und des Kohärenzradius der LED-Beleuchtung von Vorteil. Zur räumlichen Kohärenz von LED-Licht findet man in der Literatur unterschiedliche Angaben [Kar03, Den17]. Diese Unterschiede lassen sich durch eine Differenzierung nach Größe und Typ der LED wie High-Power-LEDs, Superlumineszenzdioden (SLED) und MicroLEDs (mLED) auflösen. Die experimentellen Ergebnisse aus [Den17] belegen, dass manche LEDs räumlich kohärent und andere vollständig räumlich inkohärent sind. Anhand dieser Ergebnisse kann die in dieser Arbeit verwendete High-Power-LED mit einem Durchmesser von ca. 3 mm als räumlich annähernd inkohärent angenommen werden.

4.4 Kugel-Reflektoren

Ein idealer Retroreflektor reflektiert einen kollimierten Lichtstrahl wieder als kollimierten Lichtstrahl in Richtung der Lichtquelle zurück. Bei einer Glaskugel kann dieser Effekt nur mit Gradientenoptik d. h. mit einem örtlich variierenden Brechungsindex erreicht werden. Bei der sog. Lüneburg-Linse lässt sich der ortsabhängige Brechungsindex innerhalb einer um den Ursprung zentrierten Kugel über folgende Formel berechnen [Lun64]:

$$n(r) = \begin{cases} \sqrt{2 - r/r_K} & \text{falls } r \leq r_K \\ 1 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.66)$$

wobei r_K den Radius der Kugel, $n(r)$ den Brechungsindex als Funktion von r und r den Abstand eines Punktes zum Kugelmittelpunkt bezeichnen. Bei der Lüneburg-Linse wird ein kollimierter Lichtstrahl auf der Rückseite in einem Punkt fokussiert. Falls die Rückseite der Linse verspiegelt ist, wird das Licht

entsprechend der Abb. 4.5 wieder zurück reflektiert. Lüneburg-Linsen können z. B. durch mehrere Kugelschalen mit konstantem Brechungsindex approximiert werden. Allerdings gibt es nur sehr wenige Materialien mit einem Brechungsindex nahe eins [Sch07]. Dennoch ist es mittlerweile möglich, einzelne Lüneburg-Linsen im Mikrometer-Bereich ($\varnothing = 50 \mu\text{m}$) bei einer Designwellenlänge von $\lambda = 6,25 \mu\text{m}$ im infraroten Wellenlängenbereich (IR) mittels Meta-Materialien aus Nano-3D-Druckern herzustellen [Zha16]. Zweidimensionale Lüneburg-Linsen im Mikrometerbereich ($\varnothing = 8,7 \mu\text{m}$) mit einer Designwellenlänge von $\lambda = 950 \text{ nm}$ im nahen infraroten Wellenlängenbereich (NIR) wurden ebenfalls bereits experimentell untersucht [Gar19].

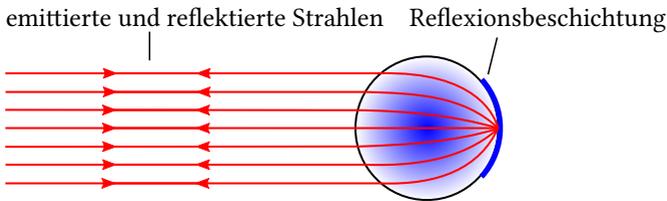


Abbildung 4.5: Strahlenverlauf bei einer Lüneburg-Linse.

Eine weitere Gradientenlinse bildet die Eaton-Linse, bei der die Retroreflexion mit folgender Verteilung des Brechungsindex erreicht wird [Dan09]:

$$n(r) = \begin{cases} \sqrt{2\frac{r_K}{r} - 1} & \text{falls } r \leq r_K \\ 1 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.67)$$

Die Eaton-Linse benötigt keine rückseitige Verspiegelung und bildet einen 360° -Retroreflektor. Die Singularität des Brechungsindex im Kugelmittelpunkt stellt jedoch bei der Herstellung ein Problem dar, welches durch die Verwendung von Meta-Materialien größtenteils umgangen werden kann [Dan09, Kim18]. Eaton-Zylinderlinsen wurden für den Mikrowellenlängenbereich bereits erfolgreich realisiert [Ma09]. Jedoch ist es momentan nicht möglich, mikrostrukturierte Retroreflexfolien aus Eaton- oder Lüneburg-Linsen für den visuellen Wellenlängenbereich (VIS) herzustellen.

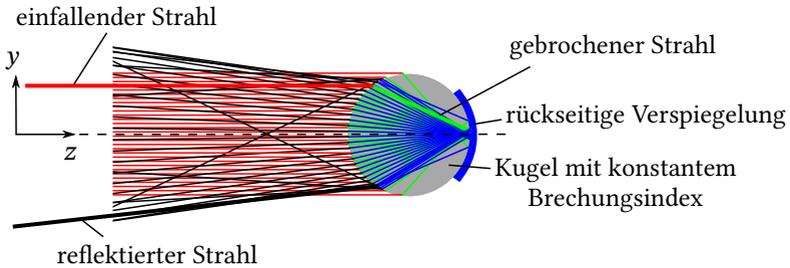


Abbildung 4.6: Strahlengang der Retroreflexion an einer Mikrokuugel für $n_K = 1,7$.

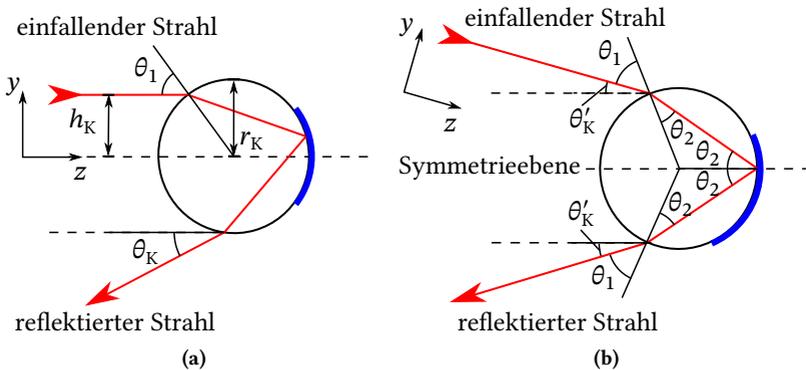


Abbildung 4.7: Darstellung des Strahlenverlaufs der Reflexion eines Lichtstrahls an einer Kugel. Die Abbildung (b) stellt eine Drehung der Abbildung (a) dar, um die Symmetrie des Strahlenverlaufs für die Berechnung der Einfalls- und Brechungswinkel zu visualisieren.

Rückseitig verspiegelte Mikrokuugeln aus Glas mit einem konstanten, reellen Brechungsindex n_K werden dagegen schon seit vielen Jahrzehnten als Retroreflektoren im Straßenverkehr eingesetzt. Im Folgenden wird angenommen, dass die rückseitige Verspiegelung aus einer Aluminiumschicht besteht. Die Retroreflexion eines Strahlenbündels an einer Mikrokuugel ist in Abb. 4.6 und die Reflexion eines einzelnen Lichtstrahls in Abb. 4.7 dargestellt. Der Strahlenverlauf eines einzelnen Lichtstrahls aus Abb. 4.7b weist eine Spiegelsymmetrie bzgl. einer Symmetrieebene auf, wenn Mehrfachreflexionen innerhalb

der Kugel vernachlässigt werden. Der Winkel zwischen einfallendem und reflektiertem Strahl sei θ_K , wobei dieser Winkel positiv oder negativ sein kann. Dieser Ablenkwinkel ist abhängig vom Abstand h_K des zugehörigen einfallenden Lichtstrahls zur z -Achse; siehe Abb. 4.7a. Der Ablenkwinkel wird nach [Yan99] über folgende Formel berechnet:

$$\theta_K = 2\theta'_K = 2(2\theta_2 - \theta_1) = 4 \arcsin \frac{h_K}{n_K r_K} - 2 \arcsin \frac{h_K}{r_K}. \quad (4.68)$$

Die Funktionsgraph von θ_K in Abhängigkeit von h_K ist für die Brechungsindizes $n_K = 1,92$ und $n_K = 1,95$ in Abb. 4.8 dargestellt. Bei Retroreflektoren mit Kugelgeometrie und einem Brechungsindex von $n_K = 2$ werden paraxiale Strahlen auf der Linsenrückseite in einem Punkt fokussiert [Ren98]. Der optimale Brechungsindex bei (unendlich) großen Entfernungen zum Retroreflektor ist demnach zwei. Bei endlichen Entfernungen ist der optimale Brechungsindex etwas kleiner als zwei (vgl. [Yan99, Li17b]). Daher wird in den folgenden Berechnungen n_K nur im Intervall zwischen 1,8 und 2,1 betrachtet. Der Graph von θ_K besitzt ein Minimum und ein Maximum:

$$\theta_K \in [\theta_K^{\min}, \theta_K^{\max}]. \quad (4.69)$$

Mit h_K^{\min} und h_K^{\max} werden die zu θ_K^{\min} bzw. θ_K^{\max} zugehörigen Werte auf der Abszisse bezeichnet. Für $n_K > \sqrt{2}$ gilt $h_K^{\min} = r_K$. Zudem gilt $h_K^{\max} = 0$ für $n_K \geq 2$ und $h_K^{\max} > 0$ für $n_K < 2$.

Ein Strahl trifft den Detektor nur, falls $2|\tan \theta_K| \leq d_{\mathcal{A}_d}/l_{\mathcal{A}_{ls}, \mathcal{A}_r}$. Wird mit ω_d der objektseitige Öffnungswinkel des telezentrischen Objektivs bezeichnet, so ist der objektseitige halbe Öffnungswinkel $\omega_d/2 = \arctan(d_{\mathcal{A}_d}/(2l_{\mathcal{A}_{ls}, \mathcal{A}_r})) \approx 0,5^\circ$. Im Idealfall ist der Brechungsindex n_K so gewählt, dass möglichst viele Lichtstrahlen innerhalb der Blende des PSD zurück reflektiert werden. Ein mögliches Optimalitätskriterium erhält man, indem der Extremwert θ_K^{\max} aus Abb. 4.8 mit dem objektseitigen Öffnungswinkel des PSD gleichgesetzt wird, woraus sich folgender Brechungsindex ableitet [Yan99]:

$$n_K \approx 2 - 3 \left(\frac{\theta_K^{\max}}{4} \right)^{2/3} \stackrel{!}{=} 2 - 3 \left(\frac{1}{4} \arctan \frac{d_{\mathcal{A}_d}}{2l_{\mathcal{A}_{ls}, \mathcal{A}_r}} \right)^{2/3}. \quad (4.70)$$

Anhand der geometrischen Angaben des abbildenden Ellipsometers ergeben sich $\theta_K^{\max} \approx 0,5^\circ$, $h_K^{\max} \approx 7,7 \mu\text{m}$, $n_K \approx 1,95$ und $\theta_K^{\min} \approx -57^\circ$.

Die Verwendung einer Retroreflexfolie mit optimalem Brechungsindex maximiert zwar die detektierte Intensität und reduziert das Sensorrauschen. Allerdings ist bei handelsüblichen Retroreflexfolien der Brechungsindex meist unbekannt, da sich die Spezifikation an die Anforderungen im Straßenverkehr orientiert. Erschwerend kommt hinzu, dass der Divergenzwinkel des zurück reflektierten Lichts auch von wellenoptischen Effekten beeinflusst wird. Insbesondere kann der Beobachtungswinkel des zentralen Beugungsscheibchens θ_β größer als θ_K^{\max} sein. θ_β lässt sich wie folgt abschätzen [Bey16]:

$$\sin \theta_\beta \approx 1,22 \frac{\lambda}{2r_K}. \quad (4.71)$$

Für $r_K = 30 \mu\text{m}$ und $\lambda \approx 625 \text{ nm}$ folgt $\theta_\beta \approx 0,7^\circ$. Durch wellenoptische Effekte vergrößert sich also die Divergenz des zurück reflektierten Lichtstrahls im Vergleich zu den Ergebnissen aus der Strahlenoptik.

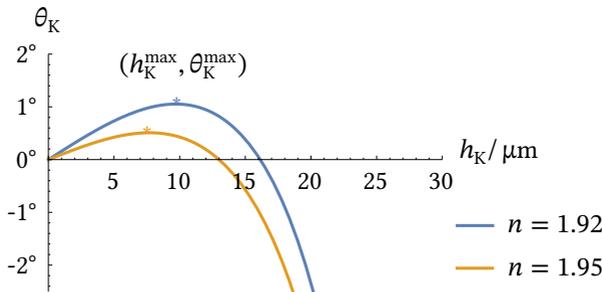


Abbildung 4.8: Der Ablenkwinkel θ_K ist in Abhängigkeit vom Abstand des einfallenden Lichtstrahls zur z -Achse h_K für zwei verschiedene Brechungsindizes dargestellt. Der Kugelradius beträgt $r_K = 30 \mu\text{m}$.

4.4.1 Intensitäts- und Polarisations-eigenschaften

Aufbauend auf den bisherigen Ergebnissen der Lichtablenkung eines Lichtstrahls an einer Mikrokugel in einer zweidimensionalen Ebene wird nun das

Lichtfeld des reflektierten Lichts im dreidimensionalen Raum berechnet. Die winkelabhängigen, radiometrischen Kenngrößen einer beleuchteten Retroreflexfolie werden nachfolgend theoretisch und experimentell untersucht. Die betrachtete Oberfläche der Retroreflexfolie wird in makroskopischen Skalen als opak, eben und homogen angenommen. Das einfallende Strahlenbündel trifft kollimiert unter senkrechtem Einfall und mit einem örtlich homogenen Intensitätsprofil auf die zu untersuchende Oberfläche auf. Wie in der Radiometrie üblich, wird der Polarisationszustand dabei zunächst vernachlässigt. Abb. 4.9 zeigt die Reflexion eines Lichtstrahls des Strahlenbündels an einer Mikrokugel. Das Koordinatensystem wird so gewählt, dass die z -Achse in Richtung des einfallenden Lichts zeigt. Jedem einfallenden Lichtstrahl ist eine x,y -Koordinate zugeordnet, die zugleich den Richtungsvektor des reflektierten, ausfallenden Lichtstrahls bestimmt. In Winkelkoordinaten wird dieser durch den Ausfalls- bzw. Polarwinkel θ_o und den Azimutwinkel η_o beschrieben.

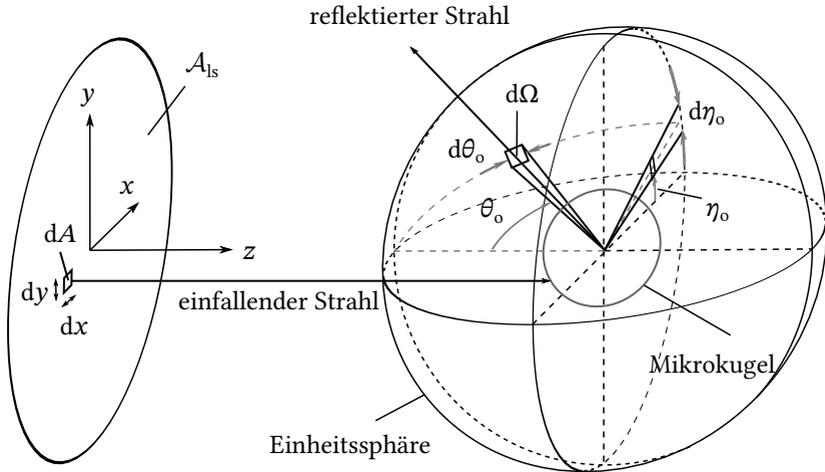


Abbildung 4.9: Darstellung des Polarwinkels θ_o und des Azimutwinkels η_o zur Festlegung der Ausbreitungsrichtung des reflektierten Lichtstrahls. Die Ausbreitungsrichtung ist abhängig von den x,y -Koordinaten des emittierten Lichtstrahls in der Beleuchtungsebene.

In der geometrischen Optik sind Lichtstrahlen de facto Strahlenbündel mit einem sehr kleinen Querschnitt [Bey16]. Das infinitesimale Flächenelement dA symbolisiert sowohl die Ausdehnung eines emittierten Lichtstrahls in der Beleuchtungsebene \mathcal{A}_s als auch ein entsprechend gleich großes Oberflächenelement in der Reflektorebene \mathcal{A}_r , auf die der Lichtstrahl unter senkrechtem Einfall auftrifft. Die Intensität I_{ls} eines einfallenden Lichtstrahls ist definiert als die Flächendichte des auf dA auftreffenden Strahlungsflusses Φ_{ls} [Bey16]:

$$I_{ls} := \frac{d\Phi_{ls}}{dA}. \quad (4.72)$$

Die Strahlstärke des reflektierten Lichts S_o ist definiert als die Raumwinkel-dichte des Strahlungsflusses Φ_o , die von einer Oberfläche in Richtung $d\Omega_o$ emittiert wird [Bey16]:

$$S_o := \frac{d\Phi_o}{d\Omega_o}. \quad (4.73)$$

Ein infinitesimales Oberflächenelement dA der Oberfläche emittiert eine infinitesimale Strahlstärke dS_o . Gewichtet mit dem Sekans des Ausfallswinkels ergibt dies die Strahldichte [Bey16]:

$$L_o := \frac{dS_o}{dA \cos \theta_o}. \quad (4.74)$$

Es sei dI_{ls} eine infinitesimale Intensität, die aus einer gegebenen Einfallrichtung auf das infinitesimale Flächenelement dA auftrifft. Weiter sei dL_o eine infinitesimale Strahldichte, die in eine gegebene Ausfallsrichtung emittiert und von dI_{ls} induziert wird. Der Quotient von dL_o und dI_{ls} ergibt die BRDF, die

die Reflexionseigenschaften einer Oberfläche für gegebene Einfall- und Ausfallrichtungen charakterisiert [Bey16]¹:

$$BRDF = \frac{dL_o}{dI_{ls}}. \quad (4.75)$$

Die radiometrischen Größen aus den Gleichungen (4.72) bis (4.75) werden bei senkrechtem Einfall für folgende Oberflächen berechnet: eine einzelne Mikrokugel, eine Retroreflexfolie, eine gemessene Oberfläche und eine absorptionsfreie Oberfläche mit Lambert'schem Reflexionsverhalten. Diese werden jeweils mit den Subindizes K, R, m und L gekennzeichnet.

Die Berechnung von $S_K(\theta_o, \eta_o)$ erfolgt nach Anhang A.7 anhand des funktionalen Zusammenhangs zwischen $d\Omega$ und dA für gegebene (x, y) und dem Reflexionsgrad $R(x, y)$:

$$S_K(\theta_o, \eta_o) = \sum_{\substack{(x, y) \in \\ r^{-1}(\theta_o, \eta_o)}} I_{ls} \frac{R(x, y)}{\sin \theta_o |\det \mathbf{J}_t(x, y)|}, \quad (4.76)$$

Bei radiometrischen Messungen wird nicht eine, sondern eine Vielzahl von Mikrokugeln beleuchtet. Die Strahlstärke einer Retroreflexfolie mit n_K beleuchteten Mikrokugeln beträgt:

$$S_R(\theta_o, \eta_o) = n_K S_K(\theta_o, \eta_o). \quad (4.77)$$

Sind alle Kugeln gleich groß, so können diese maximal eine dichteste Kugelpackung in Form eines hexagonalen Musters bilden [Kit02]. Der Füllfaktor ν_K wird definiert als das Verhältnis zwischen der Fläche der beleuchteten Mikrokugeln und der gesamten beleuchteten Fläche. Der größtmögliche Füllfaktor

¹ Die BRDF kann neben der Einfall- und Ausfallrichtung von weiteren Funktionsargumenten abhängen, wie der Wellenlänge, dem Polarisationszustand und dem Ort auf der Oberfläche [Bey16, Gru13]

wird aus dem Verhältnis der Kreisfläche $A_K = \pi r_K^2$ zum umschließenden, regelmäßigen Hexagon A_H berechnet und beträgt (vgl. [Lun03])¹:

$$v_K = \frac{A_K}{A_H} = \frac{\pi}{\sqrt{12}} \approx 90,7\%. \quad (4.78)$$

Eine beleuchtete Retroreflexfolie mit dem Flächeninhalt A beinhaltet ungefähr $n_K = A/A_H = v_K A/A_K$ Mikrokugeln. Einsetzen in Gleichung (4.77) liefert:

$$S_R(\theta_o, \eta_o) = v_K \frac{A}{A_K} S_K(\theta_o, \eta_o). \quad (4.79)$$

Die gemessene Strahlstärke einer beliebigen Oberfläche ist proportional zur Intensität I_{ls} des einfallenden Lichts und zur beleuchteten Fläche A :

$$S_m(\theta_o, \eta_o) = I_{ls} A f_m(\theta_o, \eta_o), \quad (4.80)$$

wobei $f_m(\theta_o, \eta_o)$ eine skalarwertige und charakteristische Funktion des Oberflächenmaterials ist. Die Strahlstärke einer absorptionsfreien Oberfläche mit Lambert'schem Reflexionsverhalten ist:

$$S_{La}(\theta_o, \eta_o) = I_{ls} A \frac{\cos \theta_o}{\pi}. \quad (4.81)$$

Nach Gleichung (4.74) ergeben sich folgende Strahldichten:

$$L_R(\theta_o, \eta_o) \stackrel{(4.76)}{=} \stackrel{(4.79)}{=} \frac{2v_K}{A_K} \sum_{\substack{(x,y) \in \\ \mathbf{t}^{-1}(\theta_o, \eta_o)}} I_{ls} \frac{R(x,y)}{\sin 2\theta_o |\det \mathbf{J}_t(x,y)|}, \quad (4.82)$$

$$L_m(\theta_o, \eta_o) \stackrel{(4.80)}{=} I_{ls} \frac{f_m(\theta_o, \eta_o)}{\cos \theta_o}, \quad (4.83)$$

$$L_{La}(\theta_o, \eta_o) \stackrel{(4.81)}{=} I_{ls} \frac{1}{\pi}. \quad (4.84)$$

¹ Mikrostrukturierte Retroreflektoren mit einem Füllfaktor von 75% wurden bereits realisiert [Lun03].

Mit Gleichung (4.75) erhält man schließlich die BRDFs:

$$BRDF_R(\theta_o, \eta_o) = \frac{2v_K}{A_K} \sum_{\substack{(x,y) \in \\ \mathbf{r}^{-1}(\theta_o, \eta_o)}} \frac{R(x,y)}{\sin 2\theta_o |\det \mathbf{J}_{\mathbf{r}}(x,y)|}, \quad (4.85)$$

$$BRDF_m(\theta_o, \eta_o) = \frac{f_m(\theta_o, \eta_o)}{\cos \theta_o}, \quad (4.86)$$

$$BRDF_{La}(\theta_o, \eta_o) = \frac{1}{\pi}. \quad (4.87)$$

Die aus der Strahlenoptik theoretisch hergeleitete BRDF der Retroreflexfolie wird anhand von experimentellen BRDF-Messungen evaluiert. Die BRDF-Roboteranlage des Fraunhofer IOSB ermöglicht die Messung der BRDF für beliebige Einfall- und Ausfallrichtungen. Sie misst die BRDF nicht direkt, sondern relativ zu einem hochreflektierenden Spectralon-Reflexionsstandard, dessen Strahlstärke und BRDF mit S_s bzw. $BRDF_s$ bezeichnet werden. Diese weisen für $\theta_o \in [5^\circ, 70^\circ]$ ein näherungsweise absorptionsfreies Lambert'sches Reflexionsvermögen auf¹. Unter senkrechtem Einfall berechnen sich die Messwerte der BRDF-Anlage aus dem Quotienten $S_m(\theta_o, \eta_o)/S_s(\theta_o, \eta_o)$. Aufgrund der Gleichheit $S_m(\theta_o, \eta_o)/S_s(\theta_o, \eta_o) = BRDF_m(\theta_o, \eta_o)/BRDF_s(\theta_o, \eta_o)$ gilt folgender Zusammenhang zwischen den Messwerten und der BRDF des Prüflings:

$$\begin{aligned} BRDF_m(\theta_o, \eta_o) &= \frac{S_m(\theta_o, \eta_o)}{S_s(\theta_o, \eta_o)} BRDF_s(\theta_o, \eta_o) \\ &\approx \frac{S_m(\theta_o, \eta_o)}{S_s(\theta_o, \eta_o)} BRDF_{La}(\theta_o, \eta_o) = \frac{S_m(\theta_o, \eta_o)}{\pi S_s(\theta_o, \eta_o)}. \end{aligned} \quad (4.88)$$

¹ Für senkrechten Einfall beträgt die relative Abweichung der BRDF bis zu 10%, wohingegen für $\theta = 60^\circ$ die relative Abweichung 32% betragen kann [Geo08].

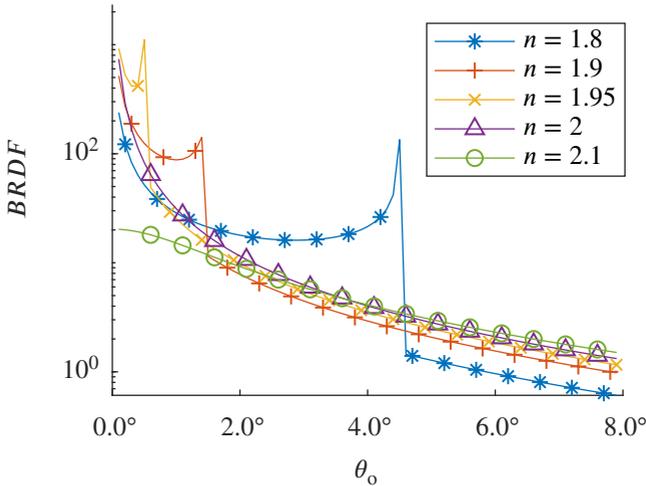


Abbildung 4.10: Simulierte BRDF-Daten einer Retroreflexfolie basierend auf Mikrokugeln für verschiedene Brechungsindizes.

Abb. 4.10 zeigt die simulierte BRDF der Retroreflexfolie für verschiedene Brechungsindizes im Winkelbereich $\theta_o \in [0^\circ, 8^\circ]$ und $\eta_o = \text{const.}$ Aufgrund der Rotationssymmetrie ist die Abbildung für alle $\eta_o \in [0^\circ, 360^\circ]$ identisch. Anhand der BRDF lässt sich die detektierte Intensität in der Detektorebene \mathcal{A}_d simulieren. Der Lichtfleck auf dem Retroreflektor wird dabei als sehr klein angenommen und die beleuchteten Mikrokugeln als vollständig ausgeleuchtet. In der Detektorebene ergibt sich anhand der Simulation ein relativ breiter Lichtfleck, der für $n_K = 1,95$ in Abb. 4.11 abgebildet ist. Der experimentell beobachtete Lichtfleck ist in etwa zwei bis dreimal so groß wie der Durchmesser des zentralen Beugungsscheibchens einer Mikrokugel mit $r_K = 30 \mu\text{m}$. Der Beobachtungswinkel des zentralen Beugungsscheibchens beträgt nach Gleichung (4.71) ca. $0,7^\circ$ und der Durchmesser somit ca. 11 mm für $l_{\mathcal{A}_s, \mathcal{A}_r} = 465 \text{ mm}$. In Abb. 4.10 ist der Messfleck für $n_K = 2,1$ deutlich breiter, da die BRDF mit steigendem Einfallswinkel langsam abfällt. Für $n_K = 1,8$ fällt die BRDF zwar schneller ab, jedoch weist sie bei ca. $4,5^\circ$ ein Nebenmaximum auf, das experimentell nicht beobachtet wird. Ein Brechungsindex von

1,9 oder 2,0 würde mit dem experimentell beobachteten Lichtfleck übereinstimmen und ist bei Kugelreflektoren auch ein üblicher Wert.

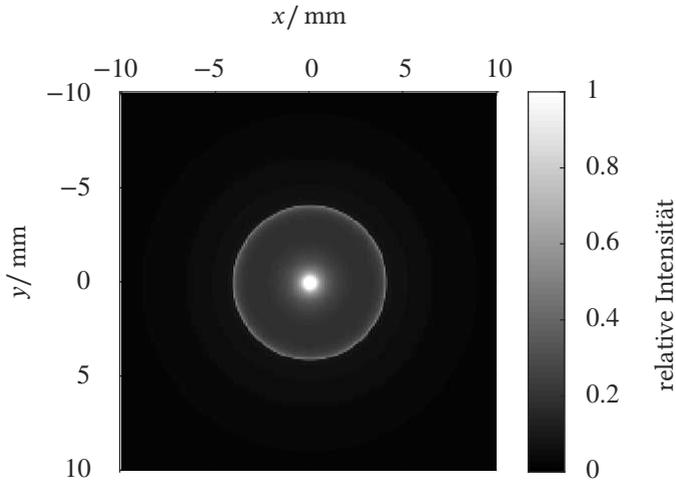


Abbildung 4.11: Intensitätsverteilung in \mathcal{A}_d entsprechend der Strahlenoptik bei Reflexion eines Strahlenbündels an einer Mikrokugel mit dem Brechungsindex 1,95.

Die Annahme von gleich großen Mikrokugeln in einer dichtesten Kugelpackung entspricht nicht der Realität. Die Mikroskopaufnahmen aus Abb. 4.12 zeigen deutliche Größenunterschiede auf, eine unregelmäßige Anordnung und auch Defekte wie fehlende oder beschädigte Mikrokugeln. Dies führt zu einem unbekanntem Vorfaktor ν_K , der den Vergleich zwischen simulierten und experimentellen BRDF-Messdaten anhand der Absolutwerte erschwert.

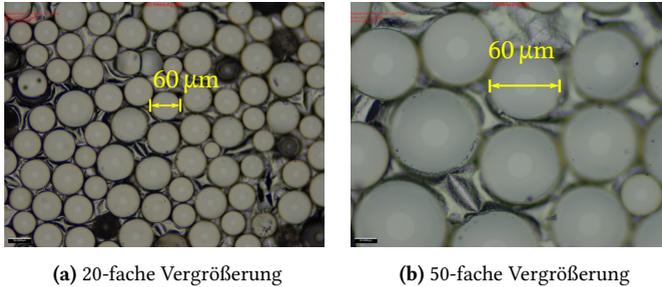


Abbildung 4.12: Abgebildet sind Mikroskopaufnahmen der Retroreflexfolie basierend auf Mikrokugeln mit 20-facher (a) und 50-facher (b) Vergrößerung. Abgeänderter Nachdruck von (b) mit Genehmigung aus Negara et al., J. Vac. Sci. Technol. B 38, 014016 (2020). Copyright 2020, AVS.

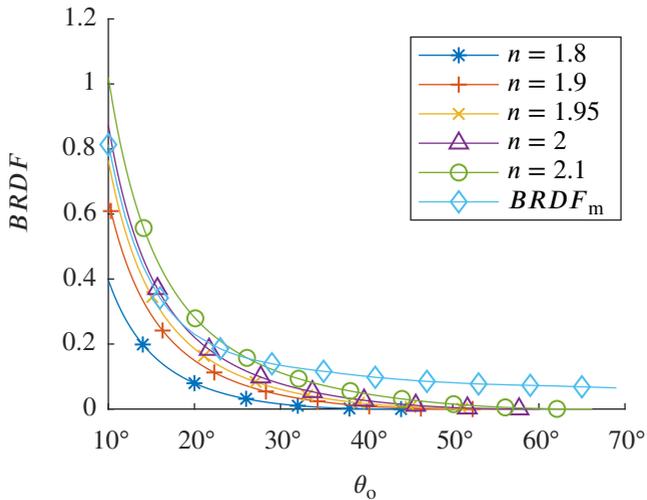


Abbildung 4.13: Vergleich von simulierten und experimentell gewonnenen BRDF-Messungen einer Retroreflexfolie basierend auf Mikrokugeln.

In Abb. 4.13 sind simulierte und experimentelle BRDF-Messdaten aufgetragen. Mit der BRDF-Roboteranlage ist es aufgrund von Verdeckungen zwischen Lichtquelle und Detektor nicht möglich, einen Ausfallswinkel kleiner als 10°

einzustellen. Nach Gleichung (4.69) gilt für die Simulationsdaten:

$$\theta_o > |\theta_K^{\min}| \Rightarrow BRDF_R(\theta_o, \eta_o) = 0, \quad (4.89)$$

da $|\theta_K^{\min}| > |\theta_K^{\max}|$ für $n_K \in [1.8, 2.0]$. Die BRDF-Roboteranlage detektiert jedoch auch für $\theta_o > |\theta_K^{\min}|$ noch ein Signal. Eine mögliche Ursache sind Mehrfachreflexionen innerhalb der Mikrokugel sowie wellenoptische Effekte, die in den Berechnungsformeln der Simulationsdaten nicht berücksichtigt sind. Ungeachtet dieser Unterschiede kann anhand des vereinfachten Kugelmodells aus Abb. 4.6 die BRDF zumindest grob abgeschätzt werden, um bspw. die Intensität des zurück reflektierten Lichts in der Detektorebene \mathcal{A}_d zu simulieren. Aufgrund dieser Unterschiede ist es jedoch schwierig, das Intervall des Brechungsindex anhand der BRDF-Messungen genauer einzugrenzen.

Die BRDF beeinflusst die detektierte Intensität und folglich das Signal-Rausch-Verhältnis (engl. *signal-to-noise ratio*, SNR) der Müller-Matrix-Elemente (siehe Abschnitt 7.2.3). Die detektierte Intensität kann für das in Abschnitt 5.1 vorgestellte abbildende Ellipsometer wie folgt abgeschätzt werden: Die telezentrische Beleuchtung mit einem Durchmesser von 80 mm beleuchtet annähernd unter senkrechtem Einfall eine Fläche $A = \pi(0.04)^2 \text{ m}^2 = 5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$ der Retroreflexfolie. Der emittierte Strahlungsfluss der LED beträgt nach Abschnitt 5.1 ca. 0,25 W und die Intensität somit ca. $I_{\text{ls}} = 49 \text{ W/m}^2$. Verluste durch die Beleuchtungsoptik und durch das Objektiv werden dabei vernachlässigt. Der Strahlungsfluss des zurück reflektierten Lichts berechnet sich nach den Gleichungen (4.73), (4.74) und (A.61) bei einem objektseitigen Öffnungswinkel von $\omega_d \approx 1^\circ$ nach Passieren der Telezentrikblende wie folgt:

$$\Phi = \int_0^A \int_0^{\omega_d/2} \int_0^{2\pi} L_R(\theta_o, \eta_o) \sin(\theta_o) \cos(\theta_o) d\eta_o d\theta_o dA \approx 4,1 \text{ mW}. \quad (4.90)$$

Bisher wurde vereinfachend angenommen, dass sich die telezentrische Beleuchtung und das telezentrische Objektiv am selben Ort befinden. Da sich

Beleuchtung und Objektiv an unterschiedlichen Orten befinden, ist die Verwendung eines Strahlteilers zur Auskopplung des zurück reflektierten Lichts erforderlich. Der detektierte Strahlungsfluss reduziert sich durch den Strahlteiler um den Faktor vier [Joh11] auf ca. 1 mW, wobei ein Reflexions- und Transmissionsgrad von 50% angenommen wird. Durch stärkere Lichtquellen oder längere Messzeiten lässt sich jedoch ein schwaches Intensitätssignal kompensieren.

Aus diesem Grund ist in der Ellipsometrie die Polarisationserhaltung des Retroreflektors wichtiger als der Rückstrahlwert. Beschädigte, unförmige oder partiell detektierte Mikrokugeln beeinflussen die Polarisationserhaltung negativ. Der prozentuale Anteil von partiell detektierten Mikrokugeln kann wie folgt grob abgeschätzt werden: Aus den geometrischen Angaben in Abschnitt 5.1 ergibt sich ein Arbeitsabstand des telezentrischen Objektivs von 182 mm und eine Vergrößerung von 0,137. Ein Makropixel der Kantenlänge $6,9 \mu\text{m}$ entspricht im Objektraum in der Schärfenebene einer Länge von $50 \mu\text{m} = 6,9 \mu\text{m}/0,137$. Der Retroreflektor befindet sich nicht in der Schärfenebene, sondern im Abstand $d_{\mathcal{A}_s, \mathcal{A}_r} = 465 \text{ mm}$ zum Objektiv und $d_{\mathcal{F}, \mathcal{A}_r} := 283 \text{ mm}$ zur Schärfenebene. Von einem Makropixel wird in der Reflektorebene \mathcal{A}_r als grobe Abschätzung eine Kreisfläche mit einem Durchmesser $d_{\text{MP}} := 2d_{\mathcal{F}, \mathcal{A}_r} \tan(\arcsin(NA_d)) + 50 \mu\text{m} \approx 5,0 \text{ mm}$ erfasst; siehe Abb. 4.14. Innerhalb dieser Fläche werden manche Mikrokugeln vollständig und andere nur partiell erfasst. Bei den partiell erfassten Mikrokugeln werden nicht alle von der Kugeloberfläche emittierten Lichtstrahlen von betrachteten Makropixel detektiert. Zur Vereinfachung wird wieder eine konstante Größenverteilung der Mikroelemente mit einem Radius $r_K = 30 \mu\text{m}$ angenommen. Die von einem Makropixel erfasste Kreisfläche beträgt ca. $A_{\text{MP}} := \pi(d_{\text{MP}}/2)^2 \approx 19,9 \text{ mm}^2$. Abzüglich eines Randes der Breite $2r_K = 60 \mu\text{m}$ ergibt dies eine Fläche von ca. $A'_{\text{MP}} := \pi(d_{\text{MP}}/2 - 60 \mu\text{m})^2 \approx 18,9 \text{ mm}^2$, innerhalb derer die Mikrokugeln vollständig erfasst werden. Die benötigte Fläche einer Mikrokugel auf der Retroreflexfolie beträgt $A_K = \pi r_K^2 \approx 2,827 \cdot 10^{-3} \text{ mm}^2$. Betrachtet man in einer dichtesten Kugelpackung auch die Leerräume zwischen den Mikrokugeln, so nimmt eine Mikrokugel eine Fläche von

$A_H = A_K/v_K = \sqrt{12}r_K^2 \approx 3,118 \cdot 10^{-3} \text{ mm}^2$ ein. Der Anteil von partiell detektierten Mikrokugeln eines Makropixels beträgt ca. $5\% \approx 1 - A'_{MP}/A_{MP}$, wobei ca. $A'_{MP}/A_H \approx 6077$ Mikrokugeln vollständig und ca. $(A_{MP} - A'_{MP})/A_H \approx 301$ partiell erfasst werden. Betrachtet man die Größe eines Lichtflecks auf dem Retroreflektor, das von einem Makropixel detektiert wird, so ist diese kaum von der Größe des Makropixels abhängig. Werden 10×10 Makropixel statt einem Makropixel betrachtet, so sind die Ergebnisse ähnlich (vgl. Abb. 5.4).

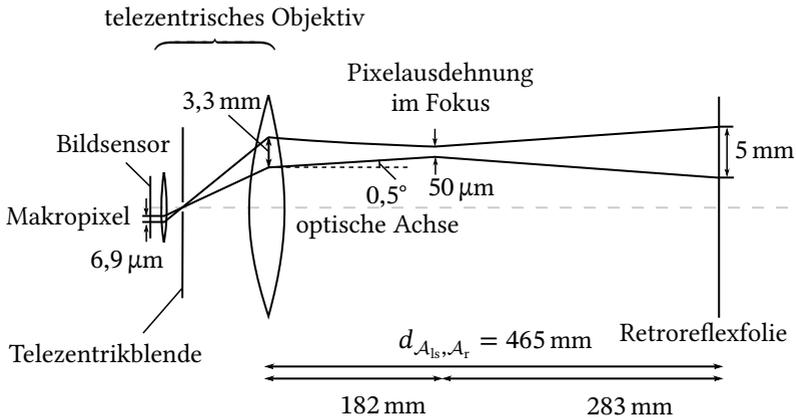


Abbildung 4.14: Schematische Darstellung des Ausschnitts der Retroreflexfolie, der von einem Pixel erfasst wird.

Bei einer partiellen Ausleuchtung von 5% aller Mikrokugeln wären theoretisch Abweichungen der Elemente der normierten Müller-Matrix vom Sollwert von 10% möglich¹. In [Li17b] wurde anhand strahlenoptischer Simulation gezeigt, dass die Elemente der normierten Müller-Matrix m_{12} bzw. m_{21} um max. 0,027 und die Elemente m_{34} bzw. m_{43} um max. 0,005 vom Ideal \mathbf{M}_M abweichen. Da diese maximale Abweichung für einzelne Strahlen gilt, gilt sie ebenso für alle Lichtstrahlen, die von partiell beleuchteten Mikrokugeln ausgehend auf den Detektor auftreffen. Die größte Abweichung der normierten

¹ Hat ein Müller-Matrix-Element innerhalb eines Flächenanteils von 95% den Sollwert 1 und innerhalb von 5% den Wert -1 , so beträgt die Abweichung vom Sollwert 10%.

Müller-Matrix zu \mathbf{M}_M erhält man für Lichtstrahlen, bei denen h_K ein Maximum annimmt und die vom Detektor gerade noch erfasst werden. Der hier verwendete optische Aufbau unterscheidet sich zu dem aus [Li17b], so dass die dort genannten Maximalabweichungen nicht übertragbar sind. Während dort nur Lichtstrahlen mit $h_K < 0,2d_K$ den Detektor treffen, sind beim abbildenden Ellipsometer Abstände von $h_K = 0,45d_K$ möglich. Die maximale Abweichung der Elemente der normierten Müller-Matrix ist dementsprechend größer: 0,063 für die Nicht-Diagonalelemente und 0,002 für die Diagonalelemente. Diese Abweichungen gehen nur zu max 5% in das Messergebnis ein, da vollständig ausgeleuchtete Mikrokugeln polarisationserhaltend wirken. Es liegt zudem die Vermutung nahe, dass bei partiell ausgeleuchteten Mikrokugeln lediglich die maximale Abweichung der Diagonalelemente relevant ist: Statistisch verteilte Verdeckungen könnten wieder zu vollständigen Kugeloberflächen zusammengefügt werden, womit nach Abschnitt 4.2 im Müller-Formalismus die Nicht-Diagonalelemente verschwinden. Nach den obigen Angaben beträgt die Maximalabweichung der Elemente der normierten Müller-Matrix und insbes. der Diagonalelemente deutlich weniger als ein Prozent¹. Daher ist die Retroreflexfolie basierend auf Mikrokugeln als optische Komponente für die RPE geeignet. Dies gilt zunächst einschränkend unter der Annahme idealer Mikrokugeln.

Bisher wurde der senkrechte Lichteinfall auf die Retroreflexfolie betrachtet. Wie in Abschnitt 7.2.2 gezeigt wird, hat die Variation des Einfallswinkels in einem großen Einfallswinkelbereich keinen nennenswerten Einfluss auf den Polarisationszustand des reflektierten Lichts, eine Eigenschaft, die die Retroreflexfolie deutlich von anderen Materialien unterscheidet (mit Ausnahme von idealen Depolarisatoren). Die Invarianz gegenüber dem Einfallswinkel kann leicht gezeigt werden und liegt in der Radialsymmetrie der Kugel begründet: Eine Änderung des Einfallswinkels ist äquivalent zu einer Drehung der Mikrokugel, wodurch sich aufgrund der Radialsymmetrie nichts ändert. Nicht radialsymmetrisch ist allerdings die rückseitige Verspiegelung. In Abb. 4.15 ist jedoch erkennbar, dass sich der Strahlenverlauf bei einer

¹ Abweichungen von mehr als einem Prozent wären in der Ellipsometrie meist nicht tolerierbar. Vorzugsweise liegen diese im Promillebereich.

Drehung der Mikrokugel über einen großen Einfallswinkelbereich nicht ändert, da die Strahlen auf der Rückseite auf einen kleinen Fleck fokussiert auftreffen. Der Flächenanteil der rückseitigen Verspiegelung darf weder zu groß noch zu klein sein. Ist der Flächenanteil zu gering, so treffen nicht mehr alle Strahlen auf die Spiegelschicht auf. Ist er zu groß, so werden unter einem schrägen Einfall nicht mehr alle Strahlen durch die Glaskugel transmittiert. Eine zu tiefe Einlassung der Mikrokugel im Trägermaterial sowie ein zu enger Abstand zwischen den Mikrokugeln, z. B. in Form einer dichtesten Kugelpackung, limitieren ebenfalls den invarianten Einfallswinkelbereich. Wechselt man von der Strahlen- in die Wellenoptik ändert sich die Sichtweise nicht grundlegend, da die Mikrokugel deutlich größer als die Wellenlänge des Lichts ist. Die Abschätzung aus Gleichung (4.60) ist bei Kugelreflektoren daher sehr gut erfüllt, da sich die Polarisationsseigenschaften in einem großen Einfallswinkelbereich kaum ändern.

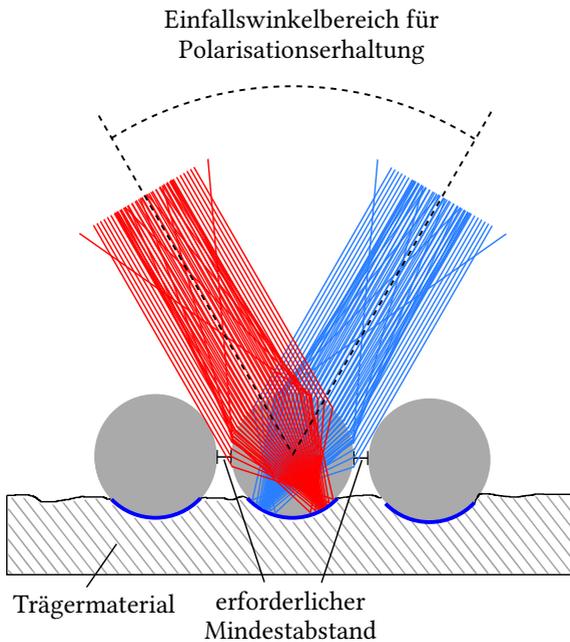


Abbildung 4.15: Polarisationserhaltung bei Variation des Einfallswinkels.

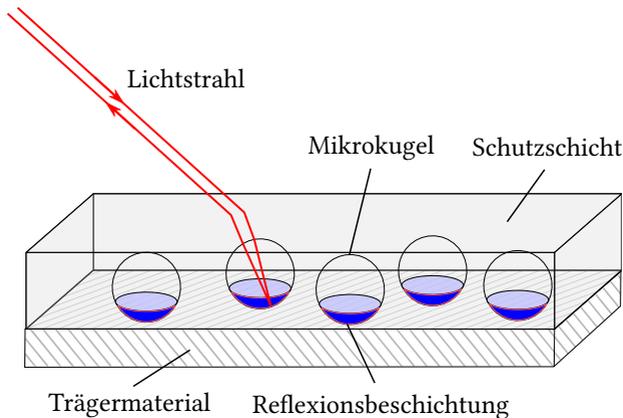


Abbildung 4.16: Exemplarischer Strahlengang bei vorhandener Schutzschicht.

Retroreflexfolien können eine Schutzschicht wie in Abb. 4.16 beinhalten, um den Rückstrahlwert der Mikroelemente bei Verschmutzung und Nässe zu optimieren. Die Lichtbrechung an einer ebenen, transparenten Oberfläche unter schrägem Einfall führt zu einer Polarisationszustandsänderung, da die Fresnel'schen Transmissionskoeffizienten der p- und s-Polarisation verschieden sind. In den Mikroskopaufnahmen aus Abb. 4.12 ist keine Schutzschicht erkennbar. Zu Abb. 4.12b ist in Abb. 4.17 das dazugehörige 3D-Oberflächenrelief abgebildet, das mittels Fokusvariation [Sze11] mit dem Messgerät InfiniteFocus von Alicona aufgenommen wurde. Obwohl der Sensor an den transparenten Kugeloberflächen keine Messwerte liefert, kann das Oberflächenrelief zwischen den Mikrokugeln gut rekonstruiert werden. Das Oberflächenrelief stimmt mit dem erwarteten Höhenprofil des Trägermaterials überein: Das Oberflächenrelief ist weder glatt, wie dies bei einer ebenen Schutzschicht zu erwarten wäre. Noch enthält das Oberflächenrelief Ausreißer, die bei einer 3D-Rekonstruktion des Trägermaterials aufgrund von unvermeidbaren Staubpartikeln auf der transparenten Schutzschicht als solche sichtbar sein müssten. Schließlich sind auch laut Produktbeschreibung die Mikrokugeln offenliegend. Im Gegensatz dazu haben neuere Retroreflexfolien für den Straßenverkehr immer eine Schutzschicht [Ren98, DIN13].

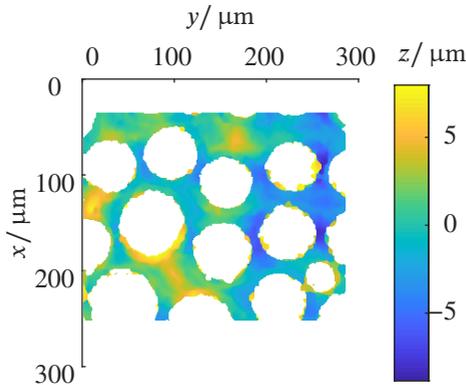


Abbildung 4.17: Abgebildet ist das Oberflächenrelief der Mikrokugel-Retroreflexfolie. Die rundförmigen weißen Bereiche entsprechen den Mikrokugeln und können aufgrund der Retroreflexion nicht ausgewertet werden.

4.4.2 Physikalisch-optische Simulation

In diesem Abschnitt werden die vorherigen Ergebnisse zur Polarisationserhaltung von Kugelreflektoren mittels wellenoptischer Simulation evaluiert. Gängige Softwarepakete zur optischen Simulation können in strahlenoptische Simulation, wellenoptische Simulation und Maxwell-Löser unterteilt werden. Letztere basieren auf der Finite-Elemente-Methode (FEM) und Derivaten wie der FDTD (engl. *finite difference time domain*) und der FDFD (engl. *finite difference frequency domain*). Eine Übersicht verschiedener Softwarepakete für die optische Simulation findet sich in [The10]. Die FDFD und die FDTD bieten eine rigorose Methode zur Lösung der Maxwell'schen Gleichungen [Shi12, Lie13]. Sie eignen sich gut für die Simulation auf Längenskalen von wenigen Mikrometern oder bei großen Wellenlängen, z. B. im Radiowellenbereich. Bei der Simulation der Polarisationsseigenschaften einer Mikrokugel im Fernfeld kommen jedoch sowohl makroskopische als auch mikroskopische Längenskalen vor, weshalb sich die Verwendung von Methoden basierend auf der FDFD und der FDTD als schwierig erweisen.

Die Simulationssoftware VirtualLab Fusion der Fa. LightTrans¹ ermöglicht eine wellenoptische Simulation, indem das elektromagnetische Feld in einem sequentiellen Modus von einer Referenzebene zur nächsten propagiert wird. Beginnend mit der Referenzebene $z = z_0$ der Beleuchtung wird ein Winkelspektrum von ebenen Wellen (engl. *angular spectrum*) berechnet [Goo96, Wyr11]:

$$\begin{aligned} \hat{\underline{\mathbf{E}}}(\underline{\mathbf{x}}, z_0, \omega) &:= (\mathcal{F}_P \underline{\mathbf{E}})(\underline{\mathbf{x}}, z_0, \omega) \\ &:= \iint_{-\infty}^{\infty} \underline{\mathbf{E}}((x, y, z_0)^\top, \omega) e^{i\langle \underline{\mathbf{x}}, (x, y)^\top \rangle} dx dy, \end{aligned} \quad (4.91)$$

wobei der Vektor $\underline{\mathbf{x}} = (\underline{k}_x, \underline{k}_y)^\top$ die ersten beiden Komponenten des komplexen Wellenvektors enthält. Mithilfe von Gleichung (A.31) wird folgende Variable definiert [Wyr11]:

$$\underline{k}'_z := \pm \sqrt{\left(\frac{\omega n(\omega)}{c_0}\right)^2 - \langle \underline{\mathbf{x}}, \underline{\mathbf{x}} \rangle}, \quad (4.92)$$

wobei $n(\omega)$ den ortsinvarianten Brechungsindex in der Referenzebene $z = z_0$ bezeichnet.

Unter der Annahme, dass das Medium überall homogen, isotrop, linear und ungeladen ist², resultiert die folgende Lösung der Maxwell'schen Gleichungen (vgl. [Goo96]):

$$\hat{\underline{\mathbf{E}}}(\underline{\mathbf{x}}, z, \omega) = \hat{\underline{\mathbf{E}}}(\underline{\mathbf{x}}, z_0, \omega) e^{-ik'_z(z-z_0)}. \quad (4.93)$$

Das Vorzeichen aus der Gleichung (4.92) wird sinnvollerweise so gewählt, dass der Poynting-Vektor in Richtung der nächsten Referenzebene zeigt.

¹ <https://www.lighttrans.com/>

² Zur Forderung, dass das Medium überall homogen ist, siehe [Oug94].

Mit $\underline{\mathbf{k}} := (k_x, k_y, k_z)^\top$ bildet $\tilde{\underline{\mathbf{E}}}(\underline{\mathbf{k}}, \omega)$ die Fourier-Transformierte von $\hat{\underline{\mathbf{E}}}(\underline{\mathbf{x}}, z, \omega)$ in z -Richtung:

$$\begin{aligned}\tilde{\underline{\mathbf{E}}}(\underline{\mathbf{k}}, \omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\underline{\mathbf{E}}}(\underline{\mathbf{x}}, z, \omega) e^{ik_z z} dz = \hat{\underline{\mathbf{E}}}(\underline{\mathbf{x}}, z_0, \omega) e^{ik'_z z_0} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik'_z z} e^{ik_z z} dz \\ &= \hat{\underline{\mathbf{E}}}(\underline{\mathbf{x}}, z_0, \omega) e^{ik'_z z_0} 2\pi \delta(k_z - k'_z).\end{aligned}\quad (4.94)$$

Mit Gleichung (3.42) folgt:

$$\tilde{\underline{\mathbf{E}}}_z(\underline{\mathbf{k}}, \omega) = -\frac{k_x \tilde{\underline{\mathbf{E}}}_x(\underline{\mathbf{k}}, \omega) + k_y \tilde{\underline{\mathbf{E}}}_y(\underline{\mathbf{k}}, \omega)}{k_z}.\quad (4.95)$$

Einsetzen von Gleichung (4.94) in Gleichung (4.95) und Integration über k_z liefert [Wyr11]:

$$\hat{\underline{\mathbf{E}}}_z(\underline{\mathbf{x}}, z_0, \omega) = -\frac{k_x \hat{\underline{\mathbf{E}}}_x(\underline{\mathbf{x}}, z_0, \omega) + k_y \hat{\underline{\mathbf{E}}}_y(\underline{\mathbf{x}}, z_0, \omega)}{k'_z}.\quad (4.96)$$

Die dritte elektrische Feldkomponente ist somit unter den getroffenen Annahmen redundant und lässt sich aus dem Winkelspektrum der ersten beiden Feldkomponenten ableiten. Für die Propagation des Lichts zwischen zwei Referenzebenen ist die dritte Feldkomponente ebenfalls nicht erforderlich, da die Berechnung nach Gleichung (4.93) komponentenweise erfolgt. Die dritte elektrische Feldkomponente sowie die magnetischen Feldkomponenten können bei Bedarf, z. B. in der Detektorebene, aus den ersten beiden elektrischen Feldkomponenten abgeleitet werden [Wyr11]. Die Propagation selbst erfolgt im Ortsfrequenzbereich, doch ist ein Wechsel zwischen Orts- und Ortsfrequenzbereich über Gleichung (4.91) immer möglich.

Die für die Propagation erforderliche Fourier-Transformation wird nicht analytisch berechnet, sondern durch örtliche Rasterung und Verwendung der schnellen Fourier-Transformation (engl. *fast fourier transform*, FFT). Der Gitterabstand wird anhand des Shannon-Nyquist-Abtasttheorem gewählt, um

Informationsverlust zu vermeiden [Bra00]. Zudem wird die Phaseninformation teilweise als analytische Funktion abgespeichert, um den Gitterabstand zu vergrößern. Die Simulationssoftware bietet neben der Propagation von Winkelspektren noch weitere Methoden wie die Fresnel-Näherung, die Fraunhofer-Näherung u. a. [Wyr11]. Gegenüber der Propagation von Winkelspektren zeichnen sich diese meist durch weniger Abtastpunkte und bessere Laufzeiten aus. Ist das Medium zwischen zwei Referenzebenen nicht homogen, weil das Feld bspw. auf eine gekrümmte Linsenoberfläche auftrifft, so wird ein Propagationsalgorithmus basierend auf der geometrischen Optik verwendet.

Die Simulationssoftware unterstützt die Emission monochromatischer Elementarwellen wie ebene Wellen, Kugelwellen oder Gauß-Strahlen. Räumlich und spektral bandbegrenzte Lichtquellen werden durch identische, unkorrelierte und lateral verschobene Elementarwellen modelliert, wobei für diese örtlichen Elementarwellen das gleiche Spektrum angenommen wird. Die meisten Lichtquellen lassen sich durch geeignete Gewichtung solcher Elementarwellen modellieren [Tur11]. Eine solche Zerlegung ist bspw. für LED-Beleuchtungen geeignet [Wyr11, Vah06] und wurde in Abschnitt 4.3 bereits verwendet. Der Polarisationszustand der Beleuchtung kann moduliert werden, so dass anhand von mehreren Simulationen die Jones- oder Müller-Matrix bestimmt werden kann. Eine Programmierschnittstelle in VirtualLab Fusion für .NET-Module bietet zudem die Möglichkeit, diese Prozedur zu automatisieren. Lichtquellen, Detektoren und angepasste Analysewerkzeuge lassen sich in jeder Programmiersprache implementieren, die eine Kompilierung in CIL-Code (engl. *common intermediate language*, CIL)¹ ermöglicht, wie MATLAB oder C#.

¹ Siehe ECMA-Standard <https://www.ecma-international.org/publications/standards/Ecma-335.htm> (17.11.2020)

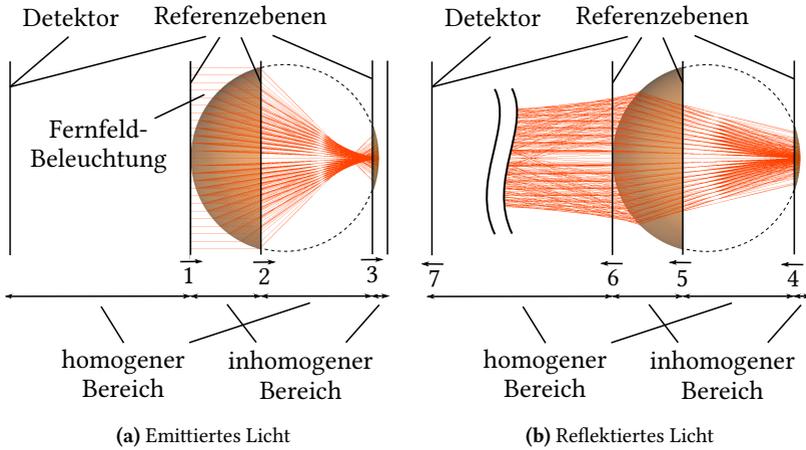


Abbildung 4.18: Strahlenoptische Simulation der Reflexion einer ebenen Welle an einem idealen Kugelreflektor mittels VirtualLab Fusion.

Obwohl die Software Simulations-Parameter wie den Gitterabstand oder den Propagationsalgorithmus im Regelfall automatisch bestimmen kann, sind bei dem hier betrachteten Anwendungsfall einer Kugellinse mit starken Brechkraften und dem Wechsel zwischen Mikro- und Makrobereich einige manuelle Anpassungen erforderlich. Abb. 4.18 zeigt die in der Simulation verwendeten Referenzebenen. Das Licht trifft als ebene Welle auf eine Blende ($\varnothing = 200 \mu\text{m}$) in der Ebene eins auf die Mikrokugel auf¹. Im sequentiellen Modus wird das Licht von einer Referenzebene zur nächsten bis zum Detektor in der Ebene sieben propagiert. In jeder Referenzebene findet eine manuelle Abstratenkonvertierung und eine Anpassung des Auswertebereichs statt. Dies ist bei dem hier betrachteten Anwendungsfall erforderlich, da es ohne Informationsverlust leicht zu einer Überschreitung gängiger Speicherkapazitäten kommen kann. Innerhalb der inhomogenen Bereiche zwischen den Referenzebenen 1/2 (Luft/Glas), 3/4 (Glas/Metall) und 5/6 (Glas/Luft) wird ein Propagationsalgorithmus basierend auf der geometrischen Optik verwendet. In den homogenen

¹ Der Phasenunterschied zwischen einer ebenen Welle und einer Kugelwelle aus \mathcal{A}_{1s} beträgt weniger als $1 \text{ nm} = 0.002\lambda$, wobei λ die mittlere Wellenlänge des Emissionsspektrums bezeichnet.

Bereichen zwischen den Ebenen 2/3 sowie 4/5 wird die Propagation mit dem sog. Rayleigh-Sommerfeld-Operator berechnet, da dieser nicht auf paraxiale Strahlen beschränkt ist¹. Zuletzt wird das Licht im homogenen Bereich zwischen den Ebenen 6/7 mithilfe der Fraunhofer-Näherung propagiert.

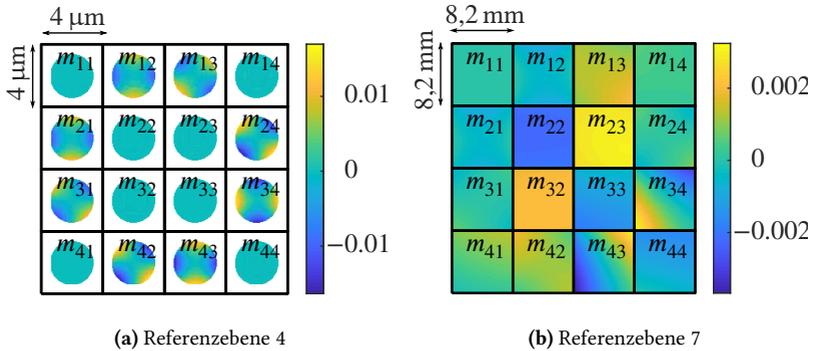


Abbildung 4.19: Differenz zwischen der orts aufgelösten normierten Müller-Matrix und \mathbf{M}_M bei Reflexion an einer idealen Mikrokugel.

Abb. 4.19a zeigt die Polarisationszustandsänderung in der Referenzebene vier als Differenz zwischen der orts aufgelösten normierten Müller-Matrix und \mathbf{M}_M ($\bar{\lambda} = 625 \text{ nm}$). Jedes Quadrat repräsentiert ein Element der Müller-Matrix. Ortsbereiche mit einer vernachlässigbaren Intensität sind ausmaskiert und weiß dargestellt. In der Referenzebene vier ist die Intensität auf einen relativ kleinen Fleck fokussiert. Abb. 4.19b zeigt denselben Sachverhalt für die Detektorebene. Die Integration der orts abhängigen Müller-Matrix in der Detektorebene und die anschließende Normierung ergibt folgende simulierte normierte Müller-Matrix:

$$\begin{pmatrix} 1,0000 & -0,0004 & 0,0010 & 0,0003 \\ -0,0003 & 0,9984 & 0,0023 & 0,0001 \\ 0,0001 & 0,0017 & -1,0009 & 0,0000 \\ 0,0005 & 0,0008 & -0,0003 & -1,0007 \end{pmatrix}. \quad (4.97)$$

¹ Der Fresnel-Operator für die Nahfeld-Näherung ist dagegen auf paraxiale Strahlen beschränkt, da in Gleichung (4.38) ein Neigungsfaktor von $K(\nu) \approx 1$ angenommen wird.

Die Abweichung zu \mathbf{M}_M beträgt maximal $2,3 \cdot 10^{-3}$ und ist somit um eine Größenordnung größer als die theoretische maximale Abweichung aus Gleichung (4.65), die allerdings nur die Diagonaleinträge betrifft. Als Ursache kommen numerische Artefakte und approximative Propagationsalgorithmen in Betracht, da m_{33} um $9 \cdot 10^{-4}$ kleiner als -1 und somit außerhalb des physikalisch zulässigen Wertebereichs ist. Trotz des größeren simulationsbedingten Fehlers im Vergleich zur Theorie weist die simulierte Müller-Matrix immer noch eine sehr gute Polarisationserhaltung auf, die für die meisten Anwendungsfälle ausreichend ist. Als Nächstes werden die Reflexionseigenschaften bei Verwendung von polychromatischem Licht untersucht. Dabei wird das LED-Spektrum aus Abb. 5.2 durch fünf spektrale Moden abgetastet. Man erhält dann folgende schmalbandige normierte Müller-Matrix als Simulationsergebnis (vgl. Gleichung (A.51)):

$$\begin{pmatrix} 1,0000 & 0,0006 & 0,0008 & 0,0004 \\ 0,0002 & 0,9987 & -0,0002 & -0,0003 \\ 0,0000 & 0,0004 & -1,0009 & 0,0001 \\ 0,0000 & 0,0000 & -0,0007 & -1,0004 \end{pmatrix}. \quad (4.98)$$

Wie erwartet, ergibt sich keine Verschlechterung der Polarisationserhaltung durch Verwendung von polychromatischem Licht. Nach Abschnitt 4.3 ist auch bei Verwendung einer räumlich inkohärenten Beleuchtung keine signifikante Änderung der Müller-Matrix zu erwarten. Dies wird durch die Simulation von 16 örtlichen und 5 spektralen Moden bestätigt, woraus folgende normierte Müller-Matrix resultiert:

$$\begin{pmatrix} 1,0000 & 0,0003 & 0,0006 & 0,0002 \\ 0,0002 & 0,9995 & 0,0002 & 0,0000 \\ -0,0002 & 0,0003 & -1,0002 & 0,0001 \\ 0,0000 & 0,0002 & 0,0001 & -1,0000 \end{pmatrix}. \quad (4.99)$$

Im Gegensatz zur Theorie ist aus den Gleichungen (4.97) bis (4.99) sogar eine sukzessive Verbesserung der Polarisationserhaltung hinsichtlich des maximalen Fehlers der Müller-Matrix-Elemente zu beobachten, je mehr Moden verwendet werden. Eine genauere Analyse zeigt, dass sich die Müller-Matrizen

der örtlichen Moden unterscheiden, was aufgrund der Rotationssymmetrie eigentlich nicht möglich ist (vgl. Abschnitt 4.4). Daher ist die Verbesserung der Müller-Matrix bei Verwendung mehrerer Moden allein auf die Mittelung von Artefakten zurückzuführen und hat keine physikalische Bedeutung.

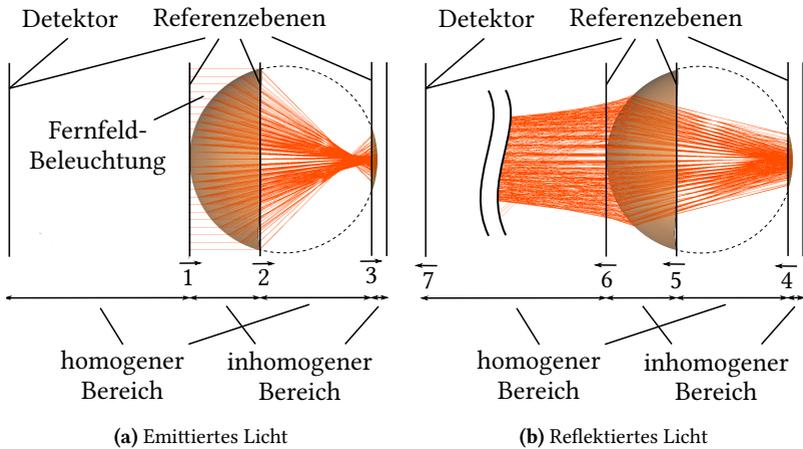


Abbildung 4.20: Strahlenoptische Simulation der Reflexion einer ebenen Welle an einem Kugelreflektor mit Unebenheiten mittels VirtualLab Fusion.

Die bisherigen Annahmen zur Symmetrie des Reflektorelements sind in der realen Welt nicht erfüllt, da Mikrokugeln keine ideale Form aufweisen. Im Folgenden werden die Reflexionseigenschaften einer nicht idealen Mikrokugel untersucht. Beispielhaft wird dabei in den inhomogenen Bereichen 1/2 bzw. 5/6 eine raue Kugeloberfläche mit einem Mittenrauwert von $R_a \approx 0,2 \mu\text{m}$ simuliert (vgl. [Rho95]). Die Form der Reflexionsschicht wird hingegen weiterhin als ideal angenommen. Abb. 4.20 zeigt den Strahlenverlauf für die raue Mikrokugel und in der Abb. 4.21 sind die resultierenden Müller-Matrizen visualisiert. In der Referenzebene vier ist die Intensität nicht mehr innerhalb

eines Kreises konzentriert, sondern weitflächiger verteilt. Für monochromatisches Licht lautet die normierte Müller-Matrix in der Detektorebene:

$$\begin{pmatrix} 1,0000 & -0,0174 & 0,0136 & -0,0013 \\ -0,0150 & 0,9995 & 0,0040 & -0,0203 \\ -0,0122 & 0,0007 & -1,0014 & 0,0090 \\ 0,0003 & -0,0221 & -0,0072 & -0,9983 \end{pmatrix}. \quad (4.100)$$

Bei polychromatischem, örtlich kohärentem Licht wird diese zu:

$$\begin{pmatrix} 1,0000 & -0,0107 & 0,0139 & 0,0003 \\ -0,0107 & 0,9990 & -0,0007 & -0,0206 \\ -0,0137 & 0,0004 & -1,0005 & 0,0069 \\ -0,0002 & -0,0218 & -0,0082 & -0,9995 \end{pmatrix}. \quad (4.101)$$

Für zeitlich und räumlich inkohärentes Licht erhält man schließlich die normierte Müller-Matrix:

$$\begin{pmatrix} 1,0000 & -0,0027 & 0,0071 & 0,0006 \\ -0,0027 & 0,9996 & -0,0001 & -0,0089 \\ -0,0071 & 0,0008 & -0,9998 & 0,0003 \\ -0,0003 & -0,0099 & -0,0003 & -1,0001 \end{pmatrix}. \quad (4.102)$$

Auch bei einer rauen Oberfläche lässt sich eine Verbesserung des maximalen Fehlers der Müller-Matrix zum Idealfall feststellen, wenn inkohärentes statt kohärentes Licht verwendet wird. Dies ist jedoch nicht auf Artefakte zurückzuführen, da diese nur die vierte und dritte Nachkommastelle beeinflussen. Zudem bringt nur räumlich inkohärentes Licht eine Verbesserung der Polarisationserhaltung; zeitlich inkohärentes Licht bringt hingegen keine nennenswerte Verbesserung. Erklärbar ist dies durch die geringe Dispersion des Glases im Spektralbereich der Beleuchtung. Der Brechungswinkel variiert um bis zu ca. $0,04^\circ$, so dass das Licht für verschiedene Wellenlängen annähernd den gleichen Lichtweg nimmt, was letztlich zu einer ähnlichen Polarisationszustandsänderung führt. Dagegen variiert der Winkel der gebrochenen Strahlen bei einer numerischen Apertur von $NA_{1g} = 0,011$ um ca. $0,6^\circ$, wenn verschiedene inkohärenten Moden betrachtet werden. Bei einer Variation des Einfallswinkels in dieser Größenordnung mitteln sich systematische Abweichungen

aufgrund des unterschiedlichen Lichtweges infolge der Oberflächenrauheit heraus. Es liegt daher nahe, dass bei der Reflexion an einer Vielzahl von Mikrokugeln sich der Einfluss der Oberflächenrauheit ebenfalls heraus mittelt.

Die Nicht-Diagonalelemente der Müller-Matrix von Retroreflektoren sind nicht alle unabhängig, sondern hängen aufgrund von reziproken Beziehungen paarweise voneinander ab; siehe Gleichung (5.25) aus Abschnitt 5.5. Die Abweichungen der Elemente der Müller-Matrix zum Ideal \mathbf{M}_M aus den Gleichungen (4.100) und (4.101) betragen bis zu $2,2 \cdot 10^{-2}$. Die Abweichungen zwischen den Absolutwerten von \mathbf{M}_R und ihrer Transponierten betragen jedoch nur $3,3 \cdot 10^{-3}$. Die Reziprozitätsbeziehungen sind daher gut erfüllt, was die Plausibilität der Simulationsergebnisse unterstreicht.

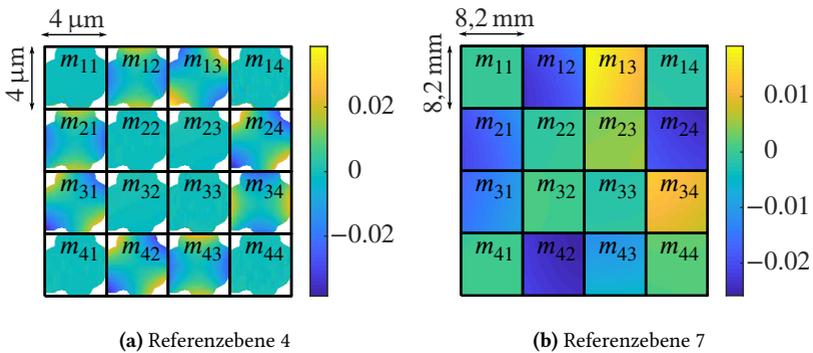


Abbildung 4.21: Differenz zwischen der orts aufgelösten normierten Müller-Matrix und \mathbf{M}_M bei Reflexion an einer Mikrokugel mit rauer Oberfläche.

4.5 Tripel-Reflektoren

Bei Tripel-Reflektoren erfährt das Licht drei Spiegelungen an drei orthogonal zueinander angeordneten Spiegelflächen. Aufgrund der fehlenden Rotations-symmetrie ist die Polarisationszustandsänderung von Tripel-Reflektoren abhängig von der Orientierung der Spiegelflächen zum einfallenden Lichtstrahl.

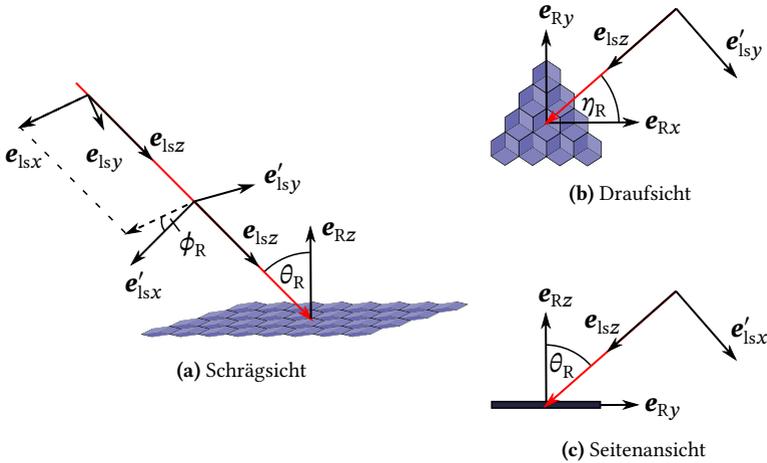


Abbildung 4.22: Skizze des Einfalls- und Azimutwinkels eines auf dem Retroreflektor auftreffenden Lichtstrahls bei einer Drehung des Retroreflektors in der Ebene (vgl. Abb. 3.4).

Zur Vereinfachung wird die Retroreflexfolie als eben angenommen. In Abb. 4.22 werden mehrere Winkel definiert, die das Rechtssystem des einfallenden Lichtstrahls $\mathbf{G}_{1s} := (\mathbf{e}_{1sx}, \mathbf{e}_{1sy}, \mathbf{e}_{1sz})$ mit der Ausrichtung des Retroreflektors bzw. der Mikroelemente in Beziehung bringt. Die Orientierung des Retroreflektors wird durch das Rechtssystem $(\mathbf{e}_{Rx}, \mathbf{e}_{Ry}, \mathbf{e}_{Rz})$ beschrieben. Eine alternative Darstellung des Richtungsvektors \mathbf{e}_{1sz} bilden die Polarwinkel (θ_R, η_R) :

$$\cos \theta_R = -\langle \mathbf{e}_{1sz}, \mathbf{e}_{Rz} \rangle, \tag{4.103}$$

$$\eta_R = \arctan2(-\langle \mathbf{e}_{1sz}, \mathbf{e}_{Ry} \rangle, -\langle \mathbf{e}_{1sz}, \mathbf{e}_{Rx} \rangle). \tag{4.104}$$

Für Polarisationsrechnungen ist es i. Allg. sinnvoll, das Rechtssystem \mathbf{G}_{1s} bezüglich der Einfallsebene auszurichten, indem \mathbf{e}_{1sx} und \mathbf{e}_{1sy} um den Winkel ϕ_R

um die Rotationsachse \mathbf{e}_{lsz} gedreht werden:

$$\mathbf{e}'_{\text{lsy}} = \frac{\mathbf{e}_{\text{Rz}} \times \mathbf{e}_{\text{lsz}}}{\|\mathbf{e}_{\text{Rz}} \times \mathbf{e}_{\text{lsz}}\|}, \quad (4.105)$$

$$\mathbf{e}'_{\text{lsx}} = \mathbf{e}'_{\text{lsy}} \times \mathbf{e}_{\text{lsz}}, \quad (4.106)$$

$$\tan \phi_{\text{R}} = \frac{\langle \mathbf{e}'_{\text{lsx}}, \mathbf{e}_{\text{lsy}} \rangle}{\langle \mathbf{e}'_{\text{lsx}}, \mathbf{e}_{\text{lsx}} \rangle}. \quad (4.107)$$

Das so erhaltene Rechtssystem wird mit \mathbf{G}'_{ls} bezeichnet:

$$\mathbf{G}'_{\text{ls}} := (\mathbf{e}'_{\text{lsx}} \quad \mathbf{e}'_{\text{lsy}} \quad \mathbf{e}_{\text{lsz}}) = \mathbf{R}(\mathbf{e}_{\text{lsz}}, \phi_{\text{R}}) \mathbf{G}_{\text{ls}}. \quad (4.108)$$

4.5.1 Intensitäts- und Polarisations-eigenschaften

Tripel-Reflektoren gibt es in mehreren Ausführungen. Ein Unterscheidungsmerkmal ist die Form der Reflektorelemente, die entweder Pyramiden- oder Würfel-förmig ist, wie in Abb. 4.23 dargestellt. Die Form beeinflusst den Rückstrahlwert: pyramidale Mikrotripel können unter senkrechtem Einfall aufgrund von Abschattungen max. ca. 67% der einfallenden Lichtintensität zurück reflektieren, wohingegen Mikrowürfel bis zu 100% zurück reflektieren können [Nil04]. Der Rückstrahlwert zur Lichtquelle hin nimmt bei nicht-idealer Ausrichtung der Spiegelflächen zueinander sowie bei kleinen Strukturgrößen aufgrund von Beugung ab.

Ein weiteres Unterscheidungsmerkmal zwischen verschiedenen Tripel-Reflektoren ist die Materialstruktur; siehe Abb. 4.24. Beim Aufbau aus Abb. 4.24a wird das Licht an offenliegenden Spiegelflächen reflektiert. Nach drei Reflexionen beträgt der Reflexionsgrad bei Aluminium-Spiegeln unter senkrechtem Lichteinfall ca. 74%, bei $\lambda = 625 \text{ nm}$ und einem Brechungsindex von $n_{\text{RE}} = 1,329 - 7,536i$.

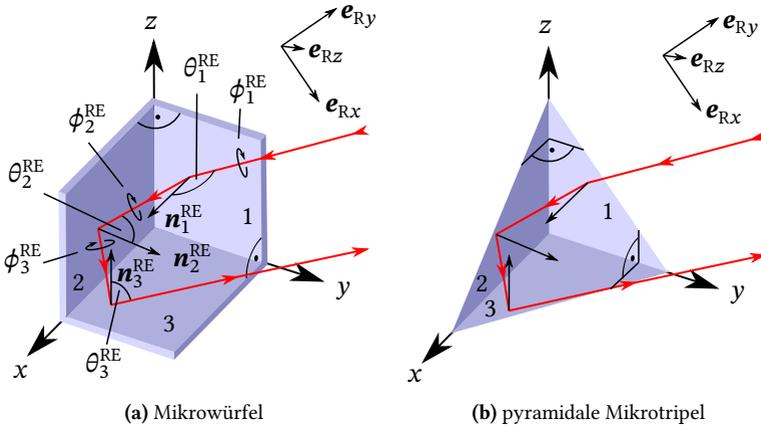


Abbildung 4.23: Darstellung von zwei gängigen Strukturen von Tripel-Reflektoren als Mikrowürfel (a) und pyramidale Mikrotripel (b). Ein Lichtstrahl erfährt an jedem Spiegelelement eine Spiegelung und zur Berechnung der Polarisationszustandsänderung sind zunächst für jedes Spiegelelement die Einfalls- und Azimutwinkel zu bestimmen.

Der Aufbau aus Abb. 4.24b wird für die Straßenverkehrsbeschilderung oft verwendet und unterscheidet sich zum vorherigen Aufbau durch eine transparente Schutzschicht, an der das Licht gebrochen wird. In Abb. 4.24c wird die Reflexion an den Spiegelflächen durch die TIR und nicht durch die Spiegelung an metallischen Oberflächen erreicht. Für diesen physikalischen Effekt muss folgende Bedingung erfüllt sein (vgl. [Hec02]):

$$\forall i : \theta_i^{\text{RE}} \geq \theta_c := \arctan\left(\frac{n_{\text{RE}}}{n_{\text{Luft}}}\right) \approx \arctan(n_{\text{RE}}), \quad (4.109)$$

wobei n_{Luft} den Brechungsindex von Luft und n_{RE} den reellen Brechungsindex des Dielektrikums bezeichnet. Im Falle von NBK-7 von SCHOTT (Glas) beträgt $n_{\text{RE}} = 1,52$ und $\theta_c = 41,1^\circ$ bei $\lambda = 625 \text{ nm}$. Der große Vorteil von TIR gegenüber einer Spiegelung an Metallen ist der hohe Reflexionsgrad, der selbst nach drei Spiegelungen annähernd 100% beträgt. Ein Nachteil ist der kleinere Raumwinkelbereich, in dem nach Gleichung (4.109) eine Retroreflexion möglich ist. Durch hochbrechende Materialien kann der Raumwinkelbereich vergrößert werden.

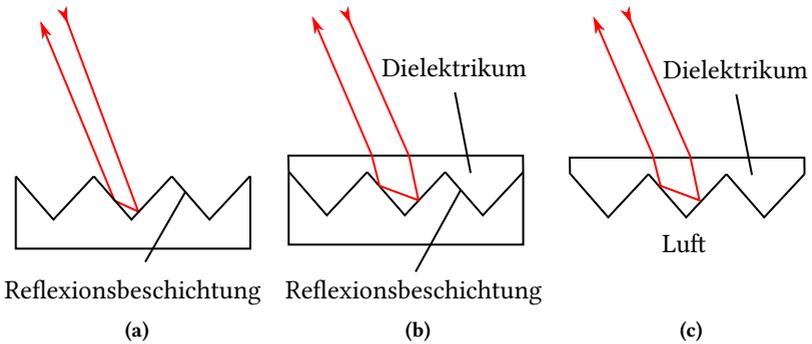


Abbildung 4.24: Bei unterschiedlichen Materialstrukturen wird das Licht an verschiedenen Grenzflächen reflektiert: Luft/Metall (a), Dielektrikum/Metall (b) und Dielektrikum/Luft (c).

Die Ergebnisse aus den Abschnitten 4.2 und 4.3 gelten nicht nur für Mikrokugeln, sondern auch für Mikrotripel. Allerdings sind die in diesen Abschnitten betrachteten Symmetrien nur für $\theta_R = 0^\circ$ erfüllt, was aus der Abb. 4.25 deutlich wird. Die Abb. 4.25a weist sowohl eine Spiegelsymmetrie als auch eine Drehsymmetrie um 120° auf, wohingegen Abb. 4.25b nur eine Spiegelsymmetrie aufweist. Für $\theta_R = 0^\circ$ ist daher auch bei Tripel-Reflektoren eine Polarisationserhaltung zu erwarten.

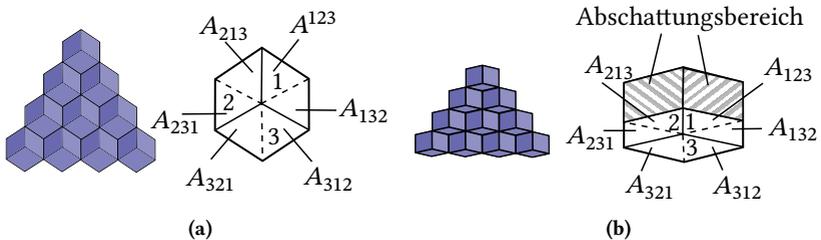


Abbildung 4.25: Vergleich der Orthogonalprojektion des Retroreflektors auf die Beleuchtungsebene A_{1s} für senkrechten (a) und schrägen (b) Lichteinfall. Die Änderung des Polarisationszustands eines Lichtstrahls ist abhängig vom Sextanten, auf den der Lichtstrahl auftrifft. Wird das Mikroelement vollständig ausgeleuchtet, müssen die Jones-Matrizen der Sextanten mit den Flächenanteilen gewichtet werden.

Im Folgenden werden die Polarisierungseigenschaften von Reflektoren basierend auf Mikrowürfeln für den schrägen Lichteinfall untersucht, wobei eine Einschränkung auf die Strahlenoptik vorgenommen wird. Sind die Polarisierungseigenschaften des Retroreflektors unabhängig vom Auftreffpunkt des Strahlenbündels, können diese in allgemeiner Form durch eine von den Polarisierungswinkeln (θ_R, η_R) abhängige Jones-Matrix beschrieben werden:

$$\underline{\mathbf{J}}^R(\theta_R, \eta_R) = \underline{\mathbf{J}}^R(\theta_R, \eta_R; \mathbf{G}'_{\text{ls}}, \mathbf{G}''_{\text{ls}}), \quad (4.110)$$

wobei $\mathbf{G}''_{\text{ls}} := (\mathbf{e}'_{\text{ls}x} \quad -\mathbf{e}'_{\text{ls}y} \quad -\mathbf{e}'_{\text{ls}z})$. Um die Jones-Vektoren des einfallenden und reflektierten Lichts bzgl. der Rechtssysteme \mathbf{G}'_{ls} bzw. \mathbf{G}''_{ls} auszurichten, ist eine Multiplikation mit $\underline{\mathbf{J}}_r(\phi_R)$ erforderlich. Die folgende Jones-Matrix bildet den Jones-Vektor des emittierten Lichts $\underline{\mathbf{U}}_{\text{ls}}$ auf den detektierten Jones-Vektor $\underline{\mathbf{U}}_{\text{d}}$ ab:

$$\underline{\mathbf{U}}_{\text{d}} = \underline{\mathbf{J}}_r(\phi_R) \underline{\mathbf{J}}^R(\theta_R, \eta_R) \underline{\mathbf{J}}_{-r}(\phi_R) \underline{\mathbf{U}}_{\text{ls}}. \quad (4.111)$$

Für den Aufbau aus Abb. 4.24a wird das Licht an drei Spiegelflächen bestehend aus einem isotropen Substrat, z. B. Aluminium, gespiegelt¹. Zunächst muss das Rechtssystem \mathbf{G}'_{ls} in das lokale Koordinatensystem des Retroreflektors überführt werden:

$$\mathbf{G}^{\text{RE}}_0 := (\mathbf{e}^{\text{RE}}_{0x} \quad \mathbf{e}^{\text{RE}}_{0y} \quad \mathbf{e}^{\text{RE}}_{0z}) := (\mathbf{e}_{\text{Rx}} \quad \mathbf{e}_{\text{Ry}} \quad \mathbf{e}_{\text{Rz}})^{-1} \mathbf{G}'_{\text{ls}} \quad (4.112)$$

Im Rechtssystem des Retroreflektors werden drei Normalen \mathbf{n}_1^{RE} , \mathbf{n}_2^{RE} und \mathbf{n}_3^{RE} definiert, die den Spiegelflächen eins, zwei und drei entsprechen. Insgesamt gibt es sechs Permutationen $\varpi \in \mathfrak{S}_3$ der symmetrischen Gruppe \mathfrak{S}_3 vom Grad 3 zur Beschreibung der Reihenfolge der getroffenen Spiegelemente. Es wird zunächst die Permutation $\varpi = (1,2,3)$ aus Abb. 4.23 behandelt. Nach

¹ In Luft bildet sich auf Aluminium eine Oxidschicht, jedoch lässt sich dieser Fall durch eine Änderung des Brechungsindex auf den unbeschichteten Fall zurückführen; siehe Abschnitt 7.3.5.

einer Drehung des Rechtssystems um den Winkel ϕ_1^{RE} , um dieses zur Einfallsebene auszurichten, trifft das Licht unter dem Einfallswinkel θ_1^{RE} auf das erste Spiegelement auf:

$$\cos \theta_1^{\text{RE}} = -\langle \mathbf{e}_{0z}^{\text{RE}}, \mathbf{n}_1^{\text{RE}} \rangle, \quad (4.113)$$

$$\tan \phi_1^{\text{RE}} = -\frac{\langle \mathbf{n}_1^{\text{RE}} \times \mathbf{e}_{0z}^{\text{RE}}, \mathbf{e}_{0y}^{\text{RE}} \rangle}{\langle \mathbf{n}_1^{\text{RE}} \times \mathbf{e}_{0z}^{\text{RE}}, \mathbf{e}_{0x}^{\text{RE}} \rangle}. \quad (4.114)$$

Nach der ersten Reflexion erhält man folgendes Rechtssystem:

$$\mathbf{G}_1^{\text{RE}} := \mathbf{R}(\mathbf{e}_{0z}^{\text{RE}} \times \mathbf{n}_1^{\text{RE}}, \pi - 2\theta_1^{\text{RE}}) \mathbf{R}(\mathbf{e}_{0z}^{\text{RE}}, \phi_1^{\text{RE}}) \mathbf{G}_0^{\text{RE}}. \quad (4.115)$$

Durch die sukzessive Anwendung der Gleichungen (4.113) bis (4.115) erhält man die übrigen Winkel $\theta_2^{\text{RE}}, \phi_2^{\text{RE}}, \theta_3^{\text{RE}}$ und ϕ_3^{RE} sowie die Rechtssysteme \mathbf{G}_2^{RE} und \mathbf{G}_3^{RE} nach der zweiten bzw. dritten Spiegelung. Die Jones-Matrizen zur Beschreibung der Reflexionen an den einzelnen Spiegelementen lauten:

$$\mathbf{J}_{-1}^{\text{RE}} := \mathbf{J}_{-L}(|\rho_{-1}^{\text{RE}}|, \arg \rho_{-1}^{\text{RE}}, R), \quad (4.116)$$

$$\mathbf{J}_{-2}^{\text{RE}} := \mathbf{J}_{-L}(|\rho_{-2}^{\text{RE}}|, \arg \rho_{-2}^{\text{RE}}, R), \quad (4.117)$$

$$\mathbf{J}_{-3}^{\text{RE}} := \mathbf{J}_{-L}(|\rho_{-3}^{\text{RE}}|, \arg \rho_{-3}^{\text{RE}}, R), \quad (4.118)$$

wobei R den Reflexionsgrad bezeichnet und die komplexen Reflexionsquotienten entsprechend der Gleichungen (3.100) und (3.103) sich wie folgt berechnen:

$$\rho_{-1}^{\text{RE}} := -\frac{\cos(\theta_1^{\text{RE}} + \arcsin(\frac{n_{\text{RE}}}{n_{\text{RE}}} \sin \theta_1^{\text{RE}}))}{\cos(\theta_1^{\text{RE}} - \arcsin(\frac{n_{\text{RE}}}{n_{\text{RE}}} \sin \theta_1^{\text{RE}}))}, \quad (4.119)$$

$$\rho_{-2}^{\text{RE}} := -\frac{\cos(\theta_2^{\text{RE}} + \arcsin(\frac{n_{\text{RE}}}{n_{\text{RE}}} \sin \theta_2^{\text{RE}}))}{\cos(\theta_2^{\text{RE}} - \arcsin(\frac{n_{\text{RE}}}{n_{\text{RE}}} \sin \theta_2^{\text{RE}}))}, \quad (4.120)$$

$$\rho_{-3}^{\text{RE}} := -\frac{\cos(\theta_3^{\text{RE}} + \arcsin(\frac{n_{\text{RE}}}{n_{\text{RE}}} \sin \theta_3^{\text{RE}}))}{\cos(\theta_3^{\text{RE}} - \arcsin(\frac{n_{\text{RE}}}{n_{\text{RE}}} \sin \theta_3^{\text{RE}}))}. \quad (4.121)$$

Für den Reflexionsgrad R ist keine Berücksichtigung des Einfallswinkels erforderlich, da der Reflexionsgrad im relevanten Einfallswinkelbereich annähernd konstant ist.

Es sei $\underline{\mathbf{J}}_{\varpi}^{\text{RE}}(\theta_R, \eta_R)$ die Jones-Matrix eines Lichtstrahls und $\mathbf{M}_{\varpi}^{\text{RE}}(\theta_R, \eta_R)$ die dazugehörige Müller-Matrix für die Permutation ϖ . Für $\varpi = (1,2,3)$ gilt:

$$\underline{\mathbf{J}}_{-123}^{\text{RE}}(\theta_R, \eta_R) := \underline{\mathbf{J}}_{-3}^{\text{RE}} \underline{\mathbf{J}}_{-2}^{\text{RE}} \underline{\mathbf{J}}_{-1}^{\text{RE}}. \quad (4.122)$$

Wird das Mikroelement komplett ausgeleuchtet, müssen für alle Permutationen ϖ die Jones-Matrizen $\underline{\mathbf{J}}_{\varpi}^{\text{R}}(\theta_R, \eta_R)$ mit den Flächenanteilen A^{ϖ} entsprechend der Abb. 4.25 gewichtet werden:

$$\underline{\mathbf{J}}^{\text{R}}(\theta_R, \eta_R) = \sum_{\varpi \in \mathcal{E}_3} A_{\varpi} \underline{\mathbf{J}}_{\varpi}^{\text{RE}}(\theta_R, \eta_R). \quad (4.123)$$

Im Gegensatz zum Müller-Formalismus ist im Jones-Formalismus die Phase des Lichts wichtig. Das Fehlen der Phaseninformation in Gleichung (4.123) ist nur dann gerechtfertigt, wenn die optische Pfadlänge für alle Lichtstrahlen eines kollimierten Strahlenbündels gleich lang ist. Dass dies der Fall ist, wird für den zweidimensionalen Fall in Abb. 4.26 verdeutlicht und lässt sich auch auf den dreidimensionalen Fall übertragen.

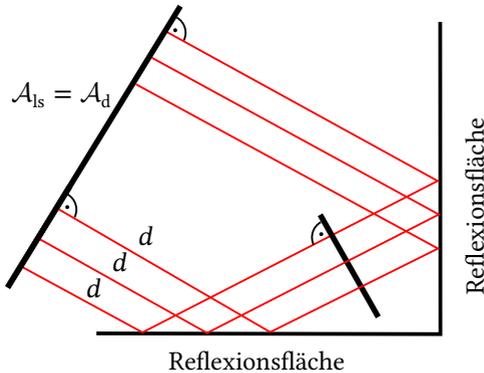


Abbildung 4.26: Aus \mathcal{A}_{1s} emittierte Strahlen weisen einen Gangunterschied von Null auf.

4.5.2 Strahlenoptische Simulation

In diesem Abschnitt werden die Polarisationsmessungen an Tripel-Spiegeln mittels strahlenoptischer Simulation anhand der Formeln aus Abschnitt 4.5.1 untersucht. Im Gegensatz zu Mikrokugeln ist die Retroreflexion von Licht an Tripel-Spiegeln nicht als eine Sequenz von Reflexion und Transmission an Referenzebenen modellierbar, da mehrere Permutationen von Spiegelementen berücksichtigt werden müssen. Wellenoptische Simulationsprogramme wie VirtualLab Fusion erfordern jedoch eine sequentielle Modellierung, weshalb nur Ergebnisse aus der Strahlenoptik präsentiert werden¹.

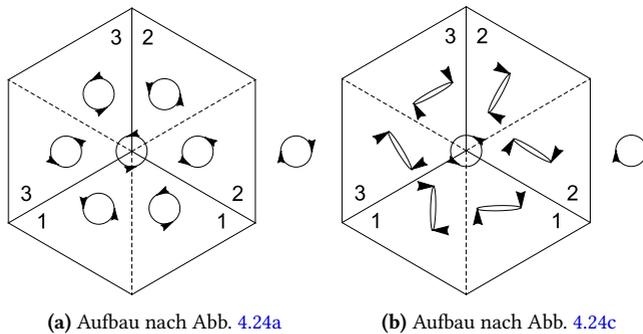


Abbildung 4.27: Die Abbildung zeigt die Polarisationszustände des reflektierten Lichts für jeden Sextanten. Das einfallende Licht ist rechtszirkular polarisiert. In der Mitte des Schaubilds ist die aus allen Sextanten überlagerte Polarisationseellipse abgebildet.

Abb. 4.27 zeigt die Polarisationszustandsänderung bei der Reflexion von rechtszirkular polarisiertem Licht an einem Mikroelement unter senkrechtem Lichteinfall. In Abb. 4.27a wurde die Retroreflexion an offenliegenden Aluminium-Spiegelflächen simuliert. In jedem Sextanten wird das Licht annähernd linkszirkular polarisiert zurück reflektiert. Eine nähere Analyse der normierten Müller-Matrizen $\mathbf{M}_{\overline{\omega}}^{\text{RE}}(0^\circ, 0^\circ) / (\mathbf{M}_{\overline{\omega}}^{\text{RE}}(0^\circ, 0^\circ))_{11}$ für die sechs

¹ Neuere Versionen von VirtualLab Fusion enthalten einen nicht-sequentielle Modus, der jedoch hauptsächlich für die Behandlung von Mehrfachreflexionen konzipiert ist.

Permutation $\varpi \in \mathfrak{S}_3$ zeigt, dass die Elemente um bis zu 0,07 voneinander abweichen. Die Simulationsergebnisse aus Abb. 4.27b für den Retroreflektor basierend auf TIR zeigen zwischen den Sextanten deutlich größere Abweichungen. Die Elemente der normierten Müller-Matrix weichen um bis zu 1,94 voneinander ab. Werden die Mikrostrukturen vollständig ausgeleuchtet, ergibt die Superposition der Jones-Vektoren in beiden Fällen ideal linkszirkular polarisiertes Licht. Der Polarisationszustand des zurück reflektierten Lichts ist in beiden Schaubildern jeweils in der Mitte dargestellt. Die resultierende Polarisationserhaltung stimmt mit den wellenoptischen Ergebnissen aus Abschnitt 4.3 überein. Bei schrägem Lichteinfall sind die Tripel-Spiegel i. Allg. nicht mehr polarisationserhaltend. Abb. 4.28a zeigt die Polarisationszustandsänderung bei einem Reflektor-Element mit offenliegenden Aluminium-Spiegelflächen für $\theta_R = 20^\circ$ und $\eta_R = 0^\circ$. Abb. 4.28b zeigt die Simulationsergebnisse für $\theta_R = 20^\circ$ und $\eta_R = 45^\circ$.

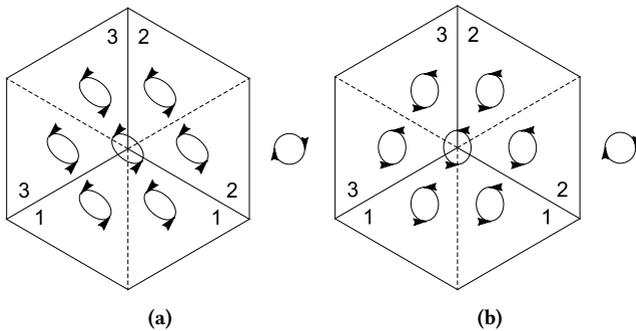


Abbildung 4.28: Simulation der Polarisationszustände der reflektierten Lichtstrahlen für schrägen Lichteinfall. In (a) sind die Polarisationszustände für $\theta_R = 20^\circ$ und $\eta_R = 0^\circ$ und in (b) für $\theta_R = 20^\circ$ und $\eta_R = 45^\circ$ abgebildet. Der eingestrahlte Polarisationszustand befindet sich jeweils rechts neben dem Schaubild.

Auf den ersten Blick scheint die Richtungsabhängigkeit der Müller-Matrix des Retroreflektors bei der Bestimmung der Modell-Parameter ein Problem darzustellen, da selbst bei bekannten optischen Eigenschaften des Retroreflektors der Richtungsparameter (θ_R, η_R) als zusätzliche Unbekannte in die Modell-Rechnung einzugehen scheint. Allerdings sind bei gekrümmten Oberflächen

die unbekannte Oberflächennormale des Prüflings \mathbf{n}_S und der Richtungsparameter (θ_R, η_R) nicht voneinander unabhängig. Vielmehr besteht zwischen beiden eine bijektive Abbildung. Diese Abbildung ist von wenigen geometrischen Parametern abhängig, die vorab während einer Sensorkalibrierung bestimmt werden können. Die Abbildung der Winkel (θ_R, η_R) auf die Müller-Matrix des Retroreflektors $\mathbf{M}_R(\theta_R, \eta_R)$ ist jedoch nicht bijektiv, da aus Gründen der Symmetrie folgende Beziehung gilt:

$$\mathbf{M}_R(\theta_R, \eta_R) = \mathbf{M}_R(\theta_R, \eta_R + 120^\circ). \quad (4.124)$$

Daher ist die Bestimmung von (θ_R, η_R) anhand von Polarisationsmessungen nur in einem eingeschränkten Intervall möglich.

4.6 Phasenkonjugierende Spiegel

Eine andere Art von Retroreflexion kann mittels phasenkonjugierender Spiegel realisiert werden. Dieser Effekt beruht auf der nichtlinearen Optik, d. h. auf große Feldstärken. In Abb. 4.29 ist ein Vergleich der Wellenfront bei der Reflexion an einem Mikrotripel-Retroreflektor und einem phasenkonjugierenden Spiegel abgebildet. Es gibt sowohl gepumpte als auch selbstgepumpte (engl. *self-pumped*) phasenkonjugierende Spiegel, wobei erstere eine zusätzliche leistungsstarke Lichtquelle benötigen. Während gepumpte Spiegel im Prinzip mit jedem Medium realisiert werden können [Pep82], sind bei selbstgepumpten Spiegeln spezielle Medien, wie photorefraktive Kristalle erforderlich. Bei Beleuchtung eines photorefraktiven Kristalls mit Licht ändert sich der Brechungsindex des Mediums. Als Medien wurden Bariumtitanat [Whi82, Fei82], Strontium-Barium-Niobat (SBN) [Sha86], Kalium-Natrium-Strontium-Barium-Niobat (KNSBN) [Bia93] und andere verwendet [Pep82]. Für Bariumtitanat ist der Strahlengang bei einem gepumpten phasenkonjugierenden Spiegel in Abb. 4.30a abgebildet. Bei der Lichtbrechung an der Kristalloberfläche breitet sich ein Teil des Lichts geradlinig aus und ein anderer Teil bildet eine Lichtschleife und wird wieder zur Lichtquelle zurückgestrahlt.

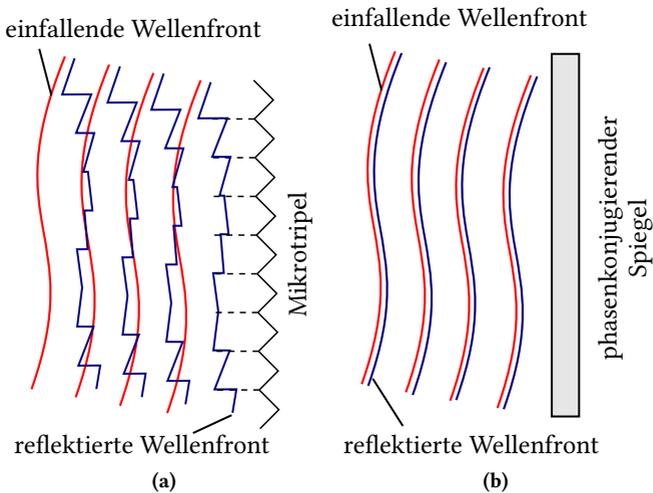


Abbildung 4.29: Reflexion der Wellenfront an einem mikrostrukturierten Retroreflektor (a) und einem phasenkonjugierenden Spiegel (b).

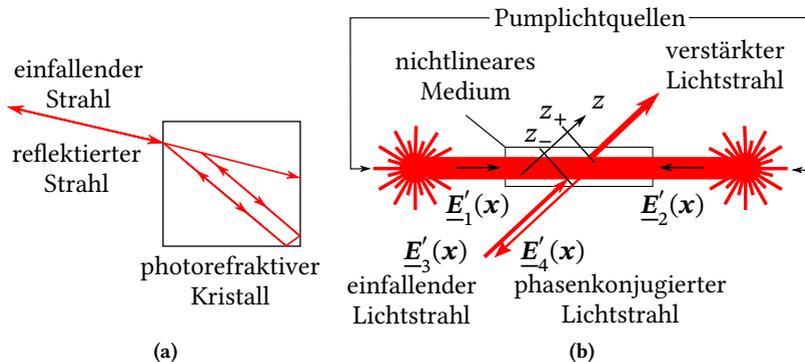


Abbildung 4.30: In (a) ist das Funktionsprinzip eines selbstgepumpten phasenkonjugierenden Spiegels nach [Fei82] abgebildet und in (b) das eines gepumpten phasenkonjugierenden Spiegels.

Die Phasenkonjugation basiert auf einem nichtlinearen Effekt, der in den meisten Fällen eine numerische Näherungslösung der Maxwell'schen Gleichungen erfordert [Jai82]. Die elektrische Polarisation wird in einen linearen

und einen nichtlinearen Anteil zerlegt:

$$\underline{\tilde{P}}(\mathbf{x}, \omega) = \underline{\tilde{P}}_{\text{L}}(\mathbf{x}, \omega) + \underline{\tilde{P}}_{\text{NL}}(\mathbf{x}, \omega). \quad (4.125)$$

Einsetzen in die Wellengleichung aus Gleichung (3.22) liefert für ein isotropes, nicht-magnetisches, nicht-absorbierendes Medium [Li17b]:

$$\begin{aligned} \nabla(\langle \nabla, \underline{\tilde{E}} \rangle) - \langle \nabla, \nabla \rangle \underline{\tilde{E}} &= \omega^2 \epsilon_0 \mu_0 \underline{\tilde{E}} + \omega^2 \mu_0 \underline{\tilde{P}}_{\text{L}} + \omega^2 \mu_0 \underline{\tilde{P}}_{\text{NL}} \\ &= \omega^2 \epsilon \mu_0 \underline{\tilde{E}} + \omega^2 \mu_0 \underline{\tilde{P}}_{\text{NL}}. \end{aligned} \quad (4.126)$$

In Abb. 4.30b sind vier monochromatische Strahlen mit der Kreisfrequenz ω_0 abgebildet, die mit dem nichtlinearen Medium interagieren. Die örtlich variierenden Amplituden dieser vier Strahlen werden mit $\underline{E}'_1, \underline{E}'_2, \underline{E}'_3$ und \underline{E}'_4 bezeichnet und bilden zusammen mit den Konjugierten $\underline{E}'_{-1}, \underline{E}'_{-2}, \underline{E}'_{-3}$ und \underline{E}'_{-4} eine Zerlegung des elektrischen Feldes entsprechend dem Anhang A.3. Die elektrischen Felder $\underline{E}'_1, \underline{E}'_2, \underline{E}'_3$ bestrahlen das nichtlineare Medium, wobei \underline{E}'_1 und \underline{E}'_2 als pumpende Strahlen eine deutlich größere Intensität aufweisen als \underline{E}'_3 und \underline{E}'_4 . Die Felder \underline{E}'_1 und \underline{E}'_2 werden daher üblicherweise als ebene Wellen mit konstanten Amplituden \underline{E}_{01} und \underline{E}_{02} beschrieben [Li17b]:

$$\underline{E}'_1(\mathbf{x}) := \underline{E}_{01} e^{-i(\mathbf{k}_1, \mathbf{x})}, \quad (4.127)$$

$$\underline{E}'_2(\mathbf{x}) := \underline{E}_{02} e^{-i(\mathbf{k}_2, \mathbf{x})}, \quad (4.128)$$

wobei $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2$. Das eingestrahelte Feld \underline{E}'_3 und das reflektierte Feld \underline{E}'_4 sind über die nichtlineare Polarisation und die Wellengleichung miteinander gekoppelt. Zur Vereinfachung wird das Koordinatensystem so gelegt, dass das Feld \underline{E}'_3 sich in z -Richtung und das Feld \underline{E}'_4 entgegengesetzt zur z -Richtung ausbreitet. Nach Anhang A.3 gilt für die nichtlineare Polarisation mit der

Kreisfrequenz ω_0 bei Berücksichtigung der Suszeptibilität bis zur dritten Ordnung¹:

$$\begin{aligned}
\tilde{\underline{P}}_{\text{NL}}(\mathbf{x}, \omega_0) &\approx \epsilon_0 \sum_{i,j,k} \tilde{\underline{\chi}}_{\text{e}}^{(3)}(\mathbf{x}, \omega_0; \omega_i, \omega_j, \omega_k) \underline{E}'_i(\mathbf{x}) \underline{E}'_j(\mathbf{x}) \underline{E}'_k(\mathbf{x}) \\
&= \epsilon_0 \left(\tilde{\underline{\chi}}_{\text{e}}^{(3)}(\mathbf{x}, \omega_0; \omega_0, \omega_0, -\omega_0) \underline{E}_{01} \underline{E}_{02} (\underline{E}'_3(\mathbf{x})^* + \underline{E}'_4(\mathbf{x})^*) \right. \\
&\quad + \tilde{\underline{\chi}}_{\text{e}}^{(3)}(\mathbf{x}, \omega_0; \omega_0, -\omega_0, \omega_0) \underline{E}_{01} (\underline{E}'_3(\mathbf{x})^* + \underline{E}'_4(\mathbf{x})^*) \underline{E}_{02} \\
&\quad + \tilde{\underline{\chi}}_{\text{e}}^{(3)}(\mathbf{x}, \omega_0; \omega_0, \omega_0, -\omega_0) \underline{E}_{02} \underline{E}_{01} (\underline{E}'_3(\mathbf{x})^* + \underline{E}'_4(\mathbf{x})^*) \\
&\quad + \tilde{\underline{\chi}}_{\text{e}}^{(3)}(\mathbf{x}, \omega_0; \omega_0, -\omega_0, \omega_0) \underline{E}_{02} (\underline{E}'_3(\mathbf{x})^* + \underline{E}'_4(\mathbf{x})^*) \underline{E}_{01} \\
&\quad + \tilde{\underline{\chi}}_{\text{e}}^{(3)}(\mathbf{x}, \omega_0; -\omega_0, \omega_0, \omega_0) (\underline{E}'_3(\mathbf{x})^* + \underline{E}'_4(\mathbf{x})^*) \underline{E}_{01} \underline{E}_{02} \\
&\quad \left. + \tilde{\underline{\chi}}_{\text{e}}^{(3)}(\mathbf{x}, \omega_0; -\omega_0, \omega_0, \omega_0) (\underline{E}'_3(\mathbf{x})^* + \underline{E}'_4(\mathbf{x})^*) \underline{E}_{02} \underline{E}_{01} \right), \tag{4.129}
\end{aligned}$$

wobei $\underline{E}'_3(\mathbf{x})^* = \underline{E}'_{-3}(\mathbf{x})$ und $\underline{E}'_4(\mathbf{x})^* = \underline{E}'_{-4}(\mathbf{x})$. Aufgrund von Symmetrien der elektrischen Suszeptibilität gilt (vgl. [Li17b]):

$$\tilde{\underline{P}}_{\text{NL}}(\mathbf{x}, \omega_0) \approx 6\epsilon_0 \tilde{\underline{\chi}}_{\text{e}}^{(3)}(\mathbf{x}, \omega_0; \omega_0, \omega_0, -\omega_0) \underline{E}_{01} \underline{E}_{02} (\underline{E}'_3(\mathbf{x})^* + \underline{E}'_4(\mathbf{x})^*). \tag{4.130}$$

Da ein isotropes Medium angenommen wurde, kann Gleichung (4.129) vereinfacht werden. Hierfür wird ein Verstärkungsfaktor g eingeführt (vgl. [Li17b]), wobei g als reell angenommen werden kann und von \underline{E}_{01} , \underline{E}_{02} , $\tilde{\underline{\chi}}_{\text{e}}^{(3)}$ sowie den Polarisationszuständen der Lichtstrahlen abhängt²:

$$\tilde{\underline{P}}_{\text{NL}}(\mathbf{x}, \omega_0) \approx 2g \frac{\epsilon_0 c_0^2}{\omega_0 c} (\underline{E}'_3(\mathbf{x})^* + \underline{E}'_4(\mathbf{x})^*), \tag{4.131}$$

¹ Aufgrund von Symmetrien spielen geradzahlige Ordnungen bei den meisten Materialien keine Rolle.

² Der Verstärkungsfaktor ist nur dann annähernd reell, falls Resonanzen zwischen \underline{E}'_3 und \underline{E}'_4 schwach ausgeprägt sind [Yar77, Li17b].

wobei c die Mediumlichtgeschwindigkeit im nichtlinearen Medium bezeichnet. Da $\mathbf{P}(\mathbf{x}, t)$ reell ist, gelten die Identitäten [Boy08]:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{P}}_{\text{NL}}(\mathbf{x}, \omega_0) &= \tilde{\mathbf{P}}_{\text{NL}}(\mathbf{x}, -\omega_0)^*, \\ \tilde{\chi}_{\text{e}}^{(3)}(\mathbf{x}, \omega_0; \omega_0, \omega_0, -\omega_0) &= \tilde{\chi}_{\text{e}}^{(3)}(\mathbf{x}, -\omega_0; -\omega_0, -\omega_0, \omega_0)^*.\end{aligned}\quad (4.132)$$

$\tilde{\mathbf{P}}_{\text{NL}}(\mathbf{x}, \omega_0)$ kann rechnerisch noch weitere Terme bzw. Kombinationen von Feldern enthalten. Bei diesen passt jedoch der Wellenvektor nicht zur Kreisfrequenz, weshalb sich keine elektromagnetischen Wellen bilden [She03]. Beispielsweise kann der folgende Ausdruck mit doppelt vorkommendem elektrischen Feld $\underline{\mathbf{E}}'_1$ aufgrund der Modulation mit $e^{i(-2k_1 \cdot \mathbf{x})}$ als Null angenommen werden:

$$\tilde{\chi}_{\text{e}}^{(3)}(\mathbf{x}, \omega_0; \omega_0, \omega_0, -\omega_0) \underline{\mathbf{E}}_{01} \underline{\mathbf{E}}_{01} (\underline{\mathbf{E}}'_{-3}(\mathbf{x}) + \underline{\mathbf{E}}'_{-4}(\mathbf{x})) e^{i(-2k_1 \cdot \mathbf{x})} \stackrel{!}{=} 0.\quad (4.133)$$

Um die Wellengleichung aus Gleichung (4.126) mit der nichtlinearen Polarisierung aus Gleichung (4.130) zu lösen, wird entsprechend der Abb. 4.30 ein Gebiet \mathcal{G}_{NL} betrachtet, in dem die vier Lichtstrahlen interagieren. Die Lösung der Wellengleichung erfolgt über die Approximation der sog. langsam variierenden Hüllkurve (engl. *slowly varying envelope approximation*). Unter dieser Annahme lautet die Lösung der Wellengleichung für $\mathbf{x} \in \mathcal{G}_{\text{NL}}$ [Li17b]:

$$\underline{\mathbf{E}}'_3(\mathbf{x}) = \frac{\cos(((\mathbf{x})_3 - z_+)g)}{\cos((z_+ - z_-)g)} \underline{\mathbf{E}}'_3(\mathbf{x}_-),\quad (4.134)$$

$$\underline{\mathbf{E}}'_4(\mathbf{x}) = -i \underbrace{\frac{\sin(((\mathbf{x})_3 - z_+)g)}{\cos((z_+ - z_-)g)}}_{=:g'} \underline{\mathbf{E}}'_3(\mathbf{x}_-)^*.\quad (4.135)$$

wobei $\mathbf{x}_- \in \mathcal{G}_{\text{NL}}$ so definiert wird, dass $(\mathbf{x}_-)_3 = z_-$. Insbesondere gilt $\underline{\mathbf{E}}'_4(\mathbf{x}_-) = -ig' \underline{\mathbf{E}}'_3(\mathbf{x}_-)^*$. Aus der zeitinversen Beziehung zwischen eingestrahelter und reflektierter Strahlung [Pep82] folgt ein wichtiger Unterschied zwischen phasenkongjugierenden und gewöhnlichen Spiegeln bzw. Retroreflektoren. Ist $\underline{\mathbf{U}}_3$ der Jones-Vektor des einfallenden Lichts, so

ist $\underline{U}_4 = -ig' \underline{J}_M \underline{U}_3^*$ der Jones-Vektor des reflektierten Lichts. Die Matrix \underline{J}_M ist zur Berechnung des Jones Vektors des reflektierten Lichts erforderlich, da sich das Licht in die entgegengesetzte Richtung ausbreitet. Es existiert keine Jones-Matrix, um einen Jones-Vektor auf seinen konjugiert komplexen Jones-Vektor abzubilden. Im Müller-Formalismus gibt es jedoch eine Müller-Matrix, die die zu den Jones-Vektoren zugehörigen Stokes-Vektoren aufeinander abbildet. Die normierte Müller-Matrix des phasenkonjugierten Spiegels lautet $\mathbf{N}(\mathbf{M}_R) = \mathbf{diag}(1, 1, -1, 1)$. Falls linear polarisierte Laser als Pumplichtquellen verwendet werden, ist die Intensität des reflektierten Lichts abhängig vom Polarisationszustand des einfallenden Lichts. Durch Verwendung von zirkular polarisierten Pumplichtquellen wird das Licht unabhängig vom Polarisationszustand des einfallenden Lichts zurück reflektiert [Pep82].

Im Vergleich zu mikrostrukturierten Retroreflexfolien können nur relativ kleine phasenkonjugierende Spiegel mittels Pumplichtquellen realisiert werden, da die Größe des phasenkonjugierenden Spiegels durch das beleuchtete Raumvolumen begrenzt ist. Die Rückstrahlfläche selbstgepumpter phasenkonjugierender Spiegel wird dagegen nicht durch den Durchmesser der Pump-Laserstrahlen begrenzt. Neben diesem Vorteil haben selbstgepumpte phasenkonjugierende Spiegel zwei wichtige Nachteile, die den Einsatz in der Ellipsometrie behindern: Einerseits kann die Bildung von Lichtschleifen wie in Abb. 4.30a mehrere Sekunden in Anspruch nehmen [Fei82, Pep82]. Andererseits hängen die Intensität und der Polarisationszustand des zurück reflektierten Lichts nichtlinear von der Intensität und des Polarisationszustands des einfallenden Lichts ab [Fei80, Fei82].

Bei den bisherigen Betrachtungen wurde monochromatisches Licht mit der Kreisfrequenz ω_0 angenommen, was physikalisch nicht realisierbar ist. Quasimonochromatisches Licht mit einer sehr schmalen Bandbreite ($\ll 1$ nm) ist jedoch für die Erzielung der Retroreflexion ausreichend [Whi92]. Zudem dürfen die Frequenzen der einfallenden Lichtstrahlen bei quasi-monochromatischem

Licht nur um wenige GHz voneinander abweichen [Pep82]. Bei polychromatischem Licht wie einem Frequenzkamm können in $\tilde{\mathbf{P}}_{\text{NL}}(\mathbf{x}, \omega_0)$ weitere Kombinationen von Frequenzen und Wellenvektoren auftreten. Werden n spektrale Laserlinien statt einer Laserlinie verwendet, sinkt der Reflexionsgrad eines gepumpten phasenkonjugierenden Spiegels um den Faktor n^2 ab [Dep80].

4.7 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurden hinreichende Bedingungen aufgezeigt, unter denen mikrostrukturierte Retroreflektoren polarisationserhaltend wirken. Ein wichtiges Kriterium bilden räumliche Symmetrien der Mikrostruktur. Daher können unterschiedlichste Arten von Retroreflektoren bestehend aus isotropen oder anisotropen Medien und Metamaterialien polarisationserhaltend wirken. Die theoretischen Ergebnisse zur Polarisationserhaltung setzen jedoch eine skalarwertige Permeabilität voraus.

Nach aktuellem Stand der Technik bieten Retroreflexfolien basierend auf offenliegenden Mikrokugeln für den Einsatz in der Ellipsometrie die meisten Vorteile, da sie nicht nur unter senkrechtem Einfall, sondern über einen großen Wellenlängen- und Einfallswinkelbereich polarisationserhaltend wirken, was in den Abschnitten 7.1 und 7.2.2 experimentell bestätigt wird. Wird die Retroreflexfolie in die Schärfeebene platziert, treten sowohl die bei den Elementen der normierten Müller-Matrix als auch beim Rückstrahlwert Schwankungen auf; siehe Abschnitt 7.2.3. Mögliche Gründe sind die statistische Anordnung der Mikrokugeln, der kleine Durchmesser des Lichtflecks auf der Retroreflexfolie und partiell ausgeleuchtete oder defekte Mikrokugeln.

Retroreflexfolien basierend auf Mikrowürfeln oder pyramidalen Mikrotripeln stellen eine Alternative zu Mikrokugeln dar, die sich insbesondere durch einen höheren Rückstrahlwert auszeichnen. Für Polarisationsmessungen sind Retroreflektoren mit offenliegenden Spiegelflächen im Vergleich zu Retroreflektoren basierend auf der TIR trotz des geringeren Rückstrahlwerts besser geeignet, da sich die Polarisationszustände in den Sextanten weniger stark

unterscheiden. Folglich spielt die räumliche Kohärenz des einfallenden Lichts für den Polarisationszustand des reflektierten Lichts eine geringere Rolle.

Obwohl Retroreflektoren basierend auf Aluminium-veredelten Spiegelflächen für Polarisationsmessungen geeignet erscheinen, haben sie dennoch im Vergleich zu Mikrokugeln eine richtungsabhängige Müller-Matrix. Dies stellt jedoch nicht in allen Anwendungsbereichen einen Nachteil dar. Über eine spezielle Messsequenz lassen sich aufgrund der Richtungsabhängigkeit der Müller-Matrix und dem bekannten Brechungsindex von Aluminium die Parameter θ_R und η_R und somit die Richtung des einfallenden Lichts bestimmen. Dies gilt auch für den Fall, dass das Licht zunächst an einer Probe reflektiert wird, bevor es auf den Retroreflektor auftrifft. Auf dieses Verfahren wird in der Arbeit zwar nicht näher eingegangen, jedoch wird in Abschnitt 5.7.3 ein ähnlicher Effekt ausgenutzt bzw. ein ähnliches Messverfahren vorgestellt. Dieses modifizierte Messverfahren erfordert jedoch keine Retroreflektoren bestehend aus Mikrotripeln. Stattdessen wird ein Mikrokugel-Retroreflektor mit einem Oberflächenspiegel kombiniert, um eine Richtungsabhängigkeit der Müller-Matrix zu erreichen. Der Hauptgrund für dieses alternative Vorgehen liegt in der fehlenden Verfügbarkeit von Mikrotripel-Retroreflektoren mit speziellen Polarisationsseigenschaften. Die technologische Entwicklung von Retroreflexfolien wird maßgeblich durch den Einsatz in sicherheitsrelevanten Applikationen vorangetrieben. Polarisationsseigenschaften spielen dort eine untergeordnete Rolle und unbeschichtete, metallische Spiegelflächen sind nicht witterungsbeständig. Weiterhin sind Retroreflexfolien basierend auf Mikrowürfeln aufgrund der eindeutigen Orientierung der Mikroelemente für Polarisationsmessungen besser geeignet als pyramidale Mikrotripel. Allerdings sind erstere weniger verbreitet. Für die Ellipsometrie ist die Verwendung geeigneter Retroreflexfolien basierend auf Mikrowürfeln daher wenn überhaupt nur über kostspielige Spezialanfertigungen möglich.

Eine vielversprechende Alternative zu mikrostrukturierten Retroreflektoren bilden phasenkonjugierende Spiegel. Diese haben die normierte Müller-Matrix $(1,1,-1,1)$ und unterscheiden sich grundlegend zu gewöhnlichen Spiegeln oder Retroreflexfolien mit der normierten Müller-Matrix $(1,1,-1,-1)$. Für die meisten Ergebnisse in dieser Arbeit ist dieser Unterschied zwar nicht

bedeutend. Die Vermessung isotroper Medien stellt jedoch einen wichtigen Anwendungsfall dar, bei dem durch Verwendung eines phasenkonjugierenden Spiegels die Information über die Verzögerung des Prüflings verloren geht. Dennoch ließe sich dieser Mangel z. B. durch Hinzunahme von dichroitischen optischen Elementen im Strahlengang beheben. Ein großer Vorteil phasenkonjugierender Spiegel bildet die genaue Rekonstruktion der Wellenfront bei der Retroreflexion. Das Anwendungsfeld der RPE mit Retroreflexion kann so auf den Mikroskopiebereich erweitert werden, der mit herkömmlichen Retroreflexfolien aufgrund der auflösungsbegrenzenden Mikrostruktur nicht zugänglich ist. Selbstgepumpte phasenkonjugierende Spiegel sind aufgrund der Polarisationsseigenschaften als Retroreflektoren ungeeignet. Die Reflexionsfläche gepumpter phasenkonjugierender Spiegel ist für den Makrobereich zwar unzureichend, könnte jedoch im Mikrobereich ausreichend sein. Die spektroskopische Ellipsometrie ließe sich mit gepumpten phasenkonjugierenden Spiegeln nur im Zeitmultiplexverfahren realisieren, was bei der abbildenden Ellipsometrie keinen großen Nachteil darstellt. Offen bleibt die Fragestellung, ob gepumpte phasenkonjugierende Spiegel für die Ellipsometrie eine ausreichende Linearität aufweisen.

Für den hier betrachteten Anwendungsfall der Ellipsometrie im Makrobereich überwiegen die Vorteile von mikrostrukturierten Retroreflektoren gegenüber phasenkonjugierenden Spiegeln. Dazu zählen die Verwendung von inkohärenten Lichtquellen, schnelle Reaktionszeiten, großflächige Reflexionsflächen und Kosteneffizienz. Die Strukturgröße der Mikrostruktur ist dabei passend zum Anwendungsfall zu wählen und darf weder zu grob noch zu fein sein [Bar79].

5 Abbildendes telezentrisches Retroreflex-Ellipsometer

In diesem Kapitel wird ein Aufbau eines abbildenden Müller-Matrix-Ellipsometers basierend auf der RPE vorgestellt, mit dem komplex-geformte Oberflächen großflächig gemessen werden können; siehe Abb. 5.1. Dabei wird auf das bewährte Messprinzip der RPE mit mikrostrukturierten Retroreflex-Folien aufgebaut [Har99, Har12], wie es bspw. beim Laserscanner-Messsystem realisiert ist [Har17]. Der PSG und der PSD sind als abbildendes System ausgelegt und arbeiten nach einem ähnlichen Prinzip wie Müller-Matrix-Ellipsometer mit rotierenden Kompensatoren. Zur Messung des detektierten Stokes-Vektors werden die Prinzipien der Zeit- und Aperturteilung kombiniert [Tyo06b], indem sowohl rotierende Kompensatoren wie beim DoT als auch ein Polarisationsfilter-Array wie beim DoFP verwendet werden.

5.1 Messanordnung

Es sei $\bar{\lambda}$ die mittlere Wellenlänge, λ_σ die Streubreite der Wellenlänge und FWHM die Halbwertsbreite des Beleuchtungsspektrums. Der PSG besteht aus einer telezentrischen Beleuchtung (Opto Engineering LTCLHP064-R, $NA_{\text{ls}} = 0,011$, $\varnothing = 80$ mm, Arbeitsabstand 120 mm – 240 mm) mit einer roten LED (Seoul Semiconductor SZR05A0A, $\Phi_{\text{ls}} = 0,24$ W¹, $\varnothing = 3$ mm,

¹ Laut Datenblatt beträgt die durchschnittliche Leistungsaufnahme $2,4$ V \times 350 mA = $0,84$ W, wobei 55 lm emittiert werden. Das theoretische Maximum der Effizienz beträgt für das Emissionsspektrum ca. 224 lm/W. Daraus resultiert ein Wirkungsgrad von ca. 29% .

$\bar{\lambda} = 625 \text{ nm}$, $\lambda_\sigma = 9,4 \text{ nm}$ und $\text{FWHM} = 16 \text{ nm}$). Abb. 5.2 zeigt das Emissionsspektrum der LED-Beleuchtung entsprechend dem Datenblatt¹. Auf Beleuchtungsseite sind sowohl ein rotierbarer Polfilter als auch eine rotierbare Verzögerungsfolie angeordnet, um einerseits beliebige Stokes-Vektoren zu modulieren und andererseits einen optimalen Wert für die Konditionszahl der Modulationsmatrix zu erzielen².

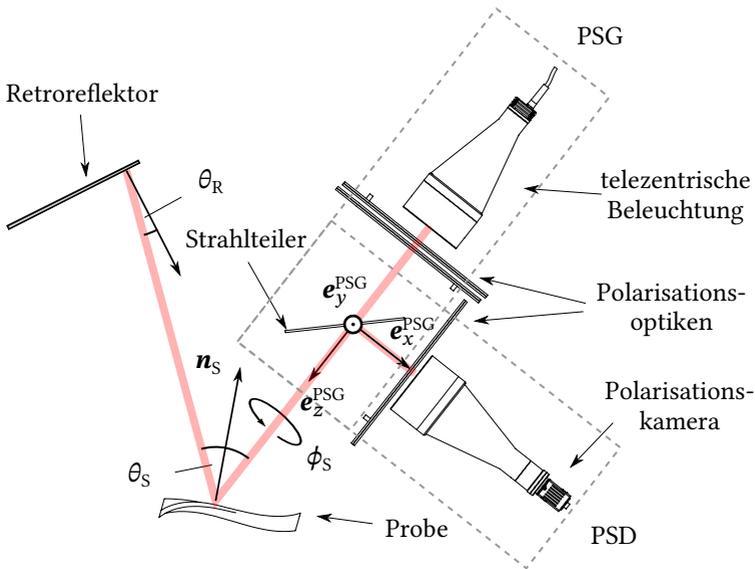


Abbildung 5.1: Die Skizze zeigt das abbildende Ellipsometer mit einem Retroreflektor. Abgeänderter Nachdruck mit Genehmigung aus Negara et al., J. Vac. Sci. Technol. B 38, 014016 (2020). Copyright 2020, AVS.

¹ <http://www.seoulsemicon.com/en/product/spec/SZR05A0A/236> (11.09.2021)

² Der PSG emittiert 20 Polarisationszustände, die den Knoten eines Dodekaeders auf der Poincaré-Kugel entsprechen. Jede gleichmäßige Abtastung minimiert die Konditionszahl.

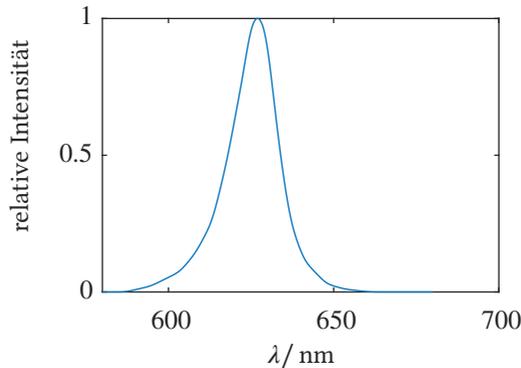


Abbildung 5.2: Emissionsspektrum der LED von Seoul Semiconductor.

Eine präzise Drehung von Polarisationsoptiken mit einem Durchmesser von wenigen Zentimetern kann mit handelsüblicher Aktorik erreicht werden. Bei Durchmessern von 80 mm und darüber ist die Verfügbarkeit deutlich eingeschränkt, was häufig teurere Eigenbauten erfordert. Durch angepasste Aktorik können zwar präzise Winkeländerungen vorgenommen werden, jedoch gibt es trotzdem einen Nullpunkt-Versatz, da die Polarisationsoptik in der Optikfassung und die Nullpunkte verschiedener Polarisationsoptiken zueinander i. d. R. nicht präzise genug ausgerichtet werden können. Aus diesem Grund wurde bei der Auswahl der Aktorik auf eine hohe Genauigkeit gänzlich verzichtet und nur eine gute Reproduzierbarkeit ($< 0,3^\circ$) angestrebt. Bereits einfache Servo-Motoren, wie der Parallax Standard-Servo (Artikelnr. 900-00360), können die geforderte Reproduzierbarkeit erreichen. Zudem eignen sie sich aufgrund des geringen Platzverbrauchs für die Ansteuerung mehrerer hintereinander liegenden Polarisationsfolien im Strahlengang. Die Motoren wurden außerhalb des Sichtfeldes platziert, so dass die Rotationsachse der Polarisationsfolie nicht mit der optischen Achse der telezentrischen Beleuchtung bzw. des telezentrischen Objektivs zusammenfällt.

Abb. 5.3 zeigt die telezentrische Beleuchtung mit einer davor angeordneten Polarisationsfolie. Diese ist in einer Filterhalterung befestigt, die auf die Rotationsachse eines Elektromotors montiert wird. Die üblicherweise verwendeten Kugeldrehverbindungen sind bei dieser Anordnung nicht erforderlich.

Die Abbildung zeigt drei unterschiedliche Drehlagen der Polarisationsfolie. Im Müller-Formalismus ist die Drehung eines optischen Bauelements um 180° in der Referenzebene des Stokes-Vektors eine Selbstabbildung. Die Müller-Matrizen der Polarisationsfolien bei den Azimutwinkeln 90° und 270° aus Abb. 5.3a und 5.3c sind daher identisch. Aus diesem Grund kann eine Polarisationsfolie in jede beliebige Drehlage gebracht werden, ohne dass die Halterung den telezentrischen Strahlengang verdeckt. Der Durchmesser der Filterhalterung beträgt 270 mm. Die Fa. ITOS bietet standardmäßig Folien in diesem Größenbereich an, allerdings ohne Antireflex-Beschichtung. Dies führt im PSG zu Mehrfachreflexionen zwischen Polarisator und Kompensator, die zudem aufgrund der Welligkeit der Folie nur in bestimmten Winkelkombinationen auftreten. Die Eliminierung dieses Störreflexes erreicht man durch gegenseitige Verkipfung von Polarisator und Kompensator. Für den Polarisator wurde der Polfilter ITOS XP38-18 (typ. Lösungsverhältnis 7500 : 1 bei $\lambda = 564 \text{ nm}$) und für die Kompensatoren die Verzögerungsfolie WP140HE-C-5060 ($\Delta \approx 90^\circ$ bei $\lambda = 560 \text{ nm}$) verwendet. Am Rand der telezentrischen Beleuchtung ist zudem ein Lichtsensor angebracht, wie in Abb. 5.3 erkennbar. Dieser gleicht Intensitätsschwankungen während der Messung und Kalibrierung aus.

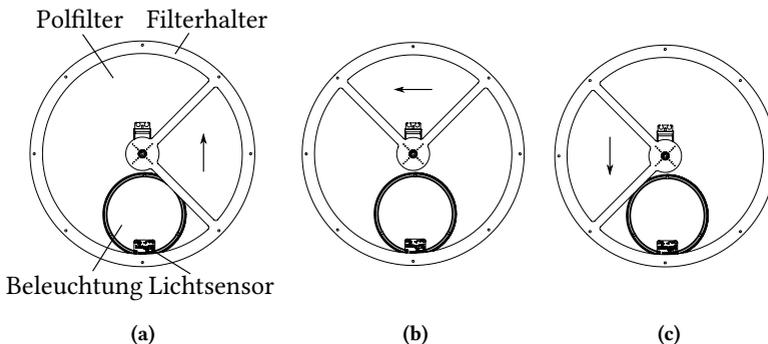


Abbildung 5.3: Frontansicht des Polarisators der telezentrischen Beleuchtung für die Azimutwinkel 90° (a), 180° (b) und 270° (c).

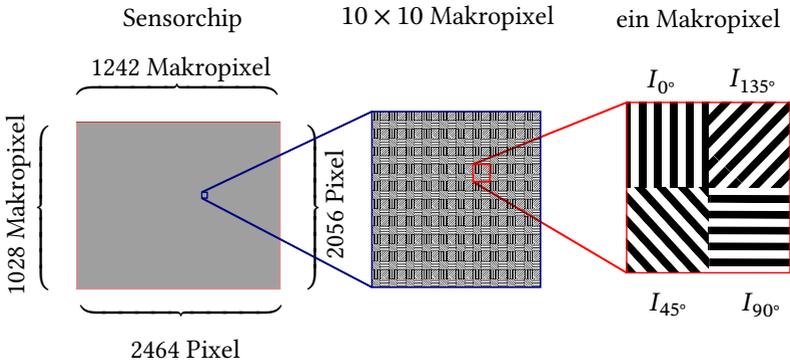


Abbildung 5.4: Das Schaubild zeigt den Sensorchip IMX250MZR von Sony mit den darauf aufgetragenen Mikro-Polarisatoren unter den Azimutwinkeln 0° , 90° , 45° und 135° . Ein Makropixel mit vier Mikro-Polarisatoren ist im roten Quadrat auf der rechten Seite abgebildet, der für das Binning verwendete Ausschnitt von 10×10 Makropixeln ist im blauen Quadrat in der Mitte abgebildet und links ist der gesamte Sensorchip zu sehen.

Der PSD enthält ein telezentrisches Objektiv mit Scheimpflugeinstellung (Opto Engineering TCSM064, $NA_d = 0,0088$, $\varnothing = 80$ mm, Arbeitsabstand 182 mm, Vergrößerung 0,137, Objektneigung max. 45°), eine Verzögerungsfolie und eine Polarisationskamera (Jai GO-5100MP-USB mit Sony IMX250MZR Polarisations-CMOS-Sensor, 5,07 Megapixel, $3,45 \mu\text{m}$ Pixelgröße, 11 mm Bilddiagonale). Die Scheimpflugeinstellung ermöglicht die scharfe Abbildung von Oberflächen, die unter großen Einfallswinkeln betrachtet werden. Der Sensorchip der Polarisationskamera und die darauf aufgetragenen Linearpolarisatoren sind schematisch in Abb. 5.4 abgebildet. Zu sehen ist die abwechselnde Orientierung der Linearpolarisatoren auf den einzelnen Pixeln des CMOS-Sensors mit den Azimutwinkeln $\{0^\circ, 90^\circ, 45^\circ, 135^\circ\}$. Man erhält so aus 2×2 Pixeln ein Makropixel, ähnlich zum Bayer-Filter bei Farbkameras [Bey16]. Statt der Farbinformation wird dabei der Polarisationszustand erfasst. Aus $5,07 \cdot 10^6$ einzelnen Sensorpixeln ergeben sich $1,27 \cdot 10^6 = 1232 \times 1028$ Makropixel. Auf dem daraus entstehenden Rohbild wird ein örtliches Binning von 10×10 Makropixeln berechnet

(ca. $500 \times 500 \mu\text{m}^2$), was einerseits die zu verarbeitende Datenmenge reduziert und andererseits das vom Retroreflektor hervorgerufene hochfrequente örtliche Rauschen unterdrückt.

Die Polarisationskamera misst den Polarisationszustand nur partiell, da mit Linearpolarisatoren nur die ersten drei Stokes-Parameter bestimmt werden können. Der vierte Stokes-Parameter wird nicht gemessen und einer der vier Messwerte ist redundant. Einen vollwertigen Polarisationszustandsdetektor erhält man durch Hinzunahme eines Kompensators vor der Polarisationskamera. Zu diesem Zweck wird ein Folienhalter mit einer Verzögerungsfolie vor dem Objektiv platziert und mit einem Servo-Motor in zwei feste Winkelpositionen rotiert, die um 45° zueinander verschoben sind. Theoretisch sind vier Winkellagen der Polarisationsoptiken des PSG und zwei des PSD erforderlich, um eine Müller-Matrix zu messen. Aktuell werden 40 Kombinationen von Azimutwinkeln verwendet, 20 Kombinationen für den PSG und zwei für den PSD. Der Zweck dieser Überabtastung der Poincaré-Kugel ist die Minimierung der statistischen und ggf. auch der systematischen Fehler der Elemente der Müller-Matrix.

Zum PSG und PSD gehört ebenfalls ein Strahlteiler (Edmund Optics Standard Beamsplitter 50/50, $127 \times 178 \text{ mm}^2$ Artikelnr. #46-583), der das emittierte und detektierte Licht auf eine gemeinsame Achse bringt. Dieser besteht aus einer 3 mm dicken Glasplatte, die auf einer Seite eine unspezifizierte dielektrische Beschichtung und auf der anderen Seite eine Antireflexbeschichtung hat. Das annähernd Gauß-förmige Emissionsspektrum der Beleuchtung aus der Abb. 5.2 hat nach [Goo15] eine Kohärenzlänge in der Größenordnung von $10 \mu\text{m}$, was zu inkohärenter Überlagerung von mehrfach reflektierten Lichtstrahlen innerhalb der Glasplatte führt. Bei inkohärenter Überlagerung werden Intensitäten aufsummiert, die üblicherweise zu einer Minderung des Polarisationsgrads führen. Depolarisierende isotrope Medien werden durch drei anstatt zwei ellipsometrischen Winkeln beschrieben [Joe97]. Durch die einseitige Antireflexbeschichtung werden Mehrfachreflexionen innerhalb der Glasplatte jedoch weitestgehend vermieden. Dies führt letztlich dazu, dass die inkohärente Überlagerung von Strahlen sehr schwach ausgeprägt ist, der Depolarisationsindex annähernd eins ist und die Müller-Matrix somit annähernd

nicht-depolarisierend ist¹. Bei einem Strahlteiler aus isotropen Medien gibt es für einen Einfallswinkel insgesamt vier Möglichkeiten, wie das Licht reflektiert und transmittiert werden kann. Die dazugehörigen Müller-Matrizen seien: $\mathbf{M}_{B,f}^r$ und $\mathbf{M}_{B,b}^r$, $\mathbf{M}_{B,f}^t$ und $\mathbf{M}_{B,b}^t$. Diese werden entsprechend der Abb. 5.5 mit den Indizes f und b für Vorwärts- und Rückwärtsrichtung sowie r und t für Reflexion und Transmission gekennzeichnet.

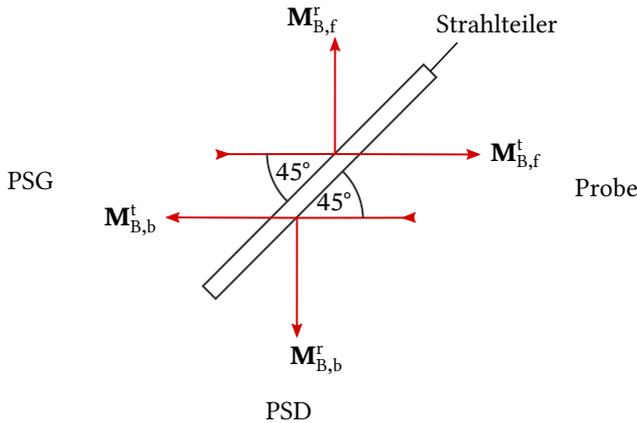


Abbildung 5.5: Mögliche Lichtpfade und Polarisationszustandsänderungen für Licht, das unter einem Einfallswinkel von 45° auf die Strahlteilerplatte auftrifft.

5.2 Reziprozitätsbeziehungen bei Strahlteilern

Handelsübliche Strahlteiler bestehen aus optisch isotropen, absorptionsfreien Medien. Aufgrund der Vernachlässigung von inkohärenter Überlagerung kann der Strahlteiler durch eine Schichtstruktur aus dünnen isotropen, absorptionsfreien Medien abstrahiert werden. Die Medien werden durch die Indexmenge $\{1, 2, \dots, n\}$ referenziert. Die Polarisationszustandsänderung solcher Schichtstrukturen sind durch die ellipsometrischen Winkel (Ψ, Δ) und dem

¹ Für die spezifizierte Schichtstruktur lässt sich in Reflexionsanordnung anhand von Simulationen ein Depolarisationsindex von ca. 0,99 erzielen.

Reflexionsgrad R bzw. Transmissionsgrad T beschreibbar. Das Licht kann nach Abb. 5.5 aus verschiedenen Richtungen auf eine Oberfläche auftreffen und in verschiedene Richtungen gelenkt werden. Die resultierenden ellipsometrischen Größen werden mit den Hoch- und Tiefstellungen f , b , r und t gekennzeichnet. Die nachfolgenden Formeln gelten für die Vorwärts- und Rückrichtung $x \in \{f, b\}$:

$$\mathbf{M}_{B,x}^r = \mathbf{M}_L(\Psi_{r,x}, \Delta_{r,x}, R_x), \quad \mathbf{M}_{B,x}^t = \mathbf{M}_L(\Psi_{t,x}, \Delta_{t,x}, T_x). \quad (5.1)$$

Eine andere Darstellungsmöglichkeit der Polarisations-eigenschaften erhält man durch Verwendung der Reflexions- und Transmissionskoeffizienten [Fuj07]:

$$\begin{aligned} \tan \Psi_{r,x} &= \frac{\left| \frac{r_{-p,x}}{-p,x} \right|}{\left| \frac{r_{-s,x}}{-s,x} \right|} & \Delta_{r,x} &= \arg \left(\frac{r_{-p,x}}{r_{-s,x}} \right) & R_x &= \frac{\left| \frac{r_{-p,x}}{-p,x} \right|^2 + \left| \frac{r_{-s,x}}{-s,x} \right|^2}{2}, \\ \tan \Psi_{t,x} &= \frac{\left| \frac{t_{-p,x}}{-p,x} \right|}{\left| \frac{t_{-s,x}}{-s,x} \right|} & \Delta_{t,x} &= \arg \left(\frac{t_{-p,x}}{t_{-s,x}} \right) & T_x &= \frac{n_n \cos \theta_n \left(\left| \frac{t_{-p,x}}{-p,x} \right|^2 + \left| \frac{t_{-s,x}}{-s,x} \right|^2 \right)}{2n_1 \cos \theta_1}. \end{aligned} \quad (5.2)$$

wobei n_1 und n_n die Brechungsindizes der Medien des einfallenden bzw. ausfallenden Strahls in Transmissionsanordnung bezeichnen und θ_1 und θ_n die Einfalls- bzw. Ausfallwinkel. Bei isotropen, absorptionsfreien Medien gibt es keinen Energietransfer zwischen der p- und s-Polarisation und die einfallende Lichtleistung teilt sich in einen reflektierten und einen transmittierten Anteil [Fuj07]:

$$R_{p,x} + T_{p,x} = 1, \quad R_{s,x} + T_{s,x} = 1, \quad R_x + T_x = 1, \quad (5.3)$$

wobei

$$R_{p,x} := \frac{|r_{-p,x}|^2}{2}, \quad R_{s,x} := \frac{|r_{-s,x}|^2}{2}, \quad (5.5)$$

$$T_{p,x} := \frac{n_n \cos \theta_n |t_{-p,x}|^2}{2n_1 \cos \theta_1}, \quad T_{s,x} := \frac{n_n \cos \theta_n |t_{-s,x}|^2}{2n_1 \cos \theta_1}, \quad (5.6)$$

$$R_x = \frac{R_{p,x} + R_{s,x}}{2}, \quad T_x = \frac{T_{p,x} + T_{s,x}}{2}. \quad (5.7)$$

Für den Strahlenverlauf aus Abb. 5.5 entsprechen n_1 und n_n dem Brechungsindex von Luft und es gilt $\theta_1 = \theta_n$. Bei einem absorptionsfreien Strahlteiler aus isotropen Medien gelten aufgrund der Reziprozitätsbeziehungen nach Stokes folgende Identitäten [Vig00]:

$$\frac{t_{-p,f}}{t_{-p,b}} = \frac{t_{-p,b}}{t_{-p,f}}, \quad \frac{t_{-s,f}}{t_{-s,b}} = \frac{t_{-s,b}}{t_{-s,f}}, \quad (5.8)$$

$$-r_{-p,f} \frac{t_{-p,b}}{t_{-p,f}} = r_{-p,b}, \quad -r_{-s,f} \frac{t_{-s,b}}{t_{-s,f}} = r_{-s,b}. \quad (5.9)$$

Daraus folgt:

$$T_B := T_f = T_b, \quad \Psi_t := \Psi_{t,f} = \Psi_{t,b}, \quad \Delta_t := \Delta_{t,f} = \Delta_{t,b}, \quad (5.10)$$

$$R_B := R_f = R_b, \quad \Psi_r := \Psi_{r,f} = \Psi_{r,b}, \quad \Delta_r := \Delta_{r,f} = 2\Delta_{t,f} - \Delta_{r,b}. \quad (5.11)$$

Bei einem solchen Strahlteiler gilt zudem folgender Zusammenhang, der sich aus den Gleichungen (5.2) bis (5.7) ergibt:

$$\frac{2R_x}{1 + \tan^2 \Psi_{r,x}} + \frac{2T_x}{1 + \tan^2 \Psi_{t,x}} = 1. \quad (5.12)$$

5.3 Messabbildung bei variabler Oberflächenneigung

Eine Verkippung der Oberflächennormalen in der Einfallsebene ist gleichbedeutend mit einer Änderung des Einfallswinkels θ_S . Dieser Fall wird durch die Ellipsometrie mit variablem Einfallswinkel abgedeckt. Eine Verkippung der Oberflächennormalen bewirkt einerseits eine Verkippung der Einfallsebene. Andererseits sind die Koordinatensysteme des PSG und des PSD i. Allg. nicht mehr bzgl. der Einfallsebene ausgerichtet. Die Messgleichung aus Gleichung (3.98) für die UE an ebenen Oberflächen setzt eine bzgl. des Sensorkoordinatensystems ausgerichtete Einfallsebene voraus. Bei gekrümmten Oberflächen erfordert die Messgleichung für die UE Anpassungen: Auf Sende- und Detektorseite sind jeweils eine optische Rotation um ϕ_{S1} und ϕ_{S2} zur Ausrichtung der Koordinatensysteme des PSG bzw. des PSD zur Einfallsebene erforderlich [Joh11]. Im Rahmen der Arbeit wurde gezeigt, dass bei der RPE mit Retroreflexion entsprechend der Abb. 5.1 nur eine optische Rotation des Sensorkoordinatensystems um $\phi_S = \phi_{S1} = \phi_{S2}$ erforderlich ist [Neg14]. In manchen Anwendungsfällen sind nicht nur die Material-bezogenen, sondern auch die Topographie-bezogenen Modellparameter von Interesse. Der Zusammenhang zwischen der Oberflächennormalen \mathbf{n}_S und den zuvor genannten Azimut- bzw. Einfallswinkeln ist überraschend einfach, wie im Rahmen der Arbeit gezeigt wurde [Neg20a] und in der Abb. 5.6 für die UE dargestellt ist: Die Einfalls- und Azimutwinkel sind die Winkelkoordinaten der Oberflächennormalen \mathbf{n}_S im Rechtssystem des PSG bzw. des PSD¹:

$$\mathbf{n}_S = -(\sin \theta_S \cos \phi_{S1} \mathbf{e}_x^{\text{PSG}} + \sin \theta_S \sin \phi_{S1} \mathbf{e}_y^{\text{PSG}} + \cos \theta_S \mathbf{e}_z^{\text{PSG}}), \quad (5.13)$$

$$\mathbf{n}_S = -(\sin \theta_S \cos \phi_{S2} \mathbf{e}_x^{\text{PSD}} - \sin \theta_S \sin \phi_{S2} \mathbf{e}_y^{\text{PSD}} - \cos \theta_S \mathbf{e}_z^{\text{PSD}}). \quad (5.14)$$

¹ Bei festen Koordinatensystemen müsste es eigentlich bei variierender Oberflächenneigung jeweils einen Einfallswinkel für den PSG und einen für den PSD geben. Allerdings kann das Koordinatensystem des PSD bei variierender Oberflächenneigung nicht fest sein, da der Richtungsvektor des reflektierten Lichts mit $\mathbf{e}_z^{\text{PSD}}$ übereinstimmen muss.

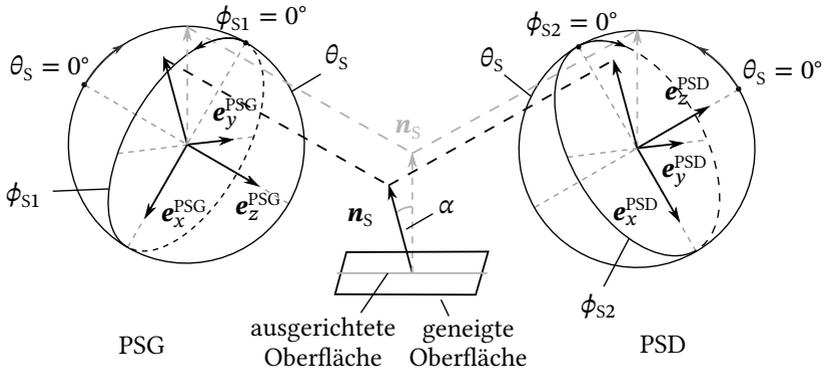


Abbildung 5.6: Schaubild zur Berechnung des Einfallswinkels θ_s und der Azimutwinkel ϕ_{s1} und ϕ_{s2} für eine gegebene Oberflächennormale \mathbf{n}_s

Es sei angemerkt, dass der Winkel α aus der Abb. 5.6 nicht mit den Winkeln ϕ_{s1} oder ϕ_{s2} verwechselt werden darf (vgl. [Han09]), da letztere eine optische Rotation um den Wellenvektor beschreiben und sich auf das Koordinatensystem des PSG bzw. des PSD beziehen. Bspw. kann eine beliebig kleine Neigungsänderung der Oberflächennormalen eine beliebig große Änderung von ϕ_s hervorrufen, falls $\theta_s \approx 0^\circ$. Die Semantik von ϕ_s entspricht im Grunde der aus [Hol96, Neu02b]. In [Gu18, Tsu13, Duw19] hat ϕ_s hingegen eine andere Bedeutung und für die optische Rotation werden andere Bezeichner verwendet. Überträgt man die Messabbildung aus Gleichung (3.98) für UE auf geneigte Oberflächen, so folgt:

$$\mathbf{B} = \mathbf{A}\mathbf{M}_r(\phi_2)\mathbf{M}_{s,f}\mathbf{M}_r(\phi_1)\mathbf{W} + \mathbf{R}. \quad (5.15)$$

Bei RPE findet eine doppelte Reflexion an der Probenoberfläche und eine Reflexion am Retroreflektor statt. Bei der doppelten Reflexion erhält man anstatt $\mathbf{M}_{s,f}$ die Müller-Matrix $\mathbf{M}_{s,fb} = \mathbf{M}_{s,b}\mathbf{M}_R\mathbf{M}_{s,f}$, wobei $\mathbf{M}_{s,f}$ wie in Abschnitt 3.3.1 die Müller-Matrix für die Vorwärts- und $\mathbf{M}_{s,b}$ die Müller-Matrix für die Rückwärts-Richtung bezeichnen. Insgesamt resultiert folgende

Messgleichung:

$$\mathbf{B} = \underbrace{\mathbf{A}\mathbf{M}_{B,b}^r}_{=: \mathbf{A}_B} \underbrace{\mathbf{M}_r(\phi_S)\mathbf{M}_{S,fb}\mathbf{M}_r(\phi_S)}_{=: \mathbf{M}_{Si,fb}} \underbrace{\mathbf{M}_{B,f}^t}_{=: \mathbf{W}_B} \mathbf{W} + \mathbf{R}, \quad (5.16)$$

Die Matrizen in Gleichung (5.16) sind bei der abbildenden Ellipsometrie ortsabhängige Funktionen in der Bildebene. Die örtliche Abhängigkeit sowie statistische und systematische Abweichungen werden in diesem und den folgenden Kapiteln in der Notation fast durchgängig ignoriert. Die Rechenschritte müssen daher stets pixelweise ausgeführt werden und das Messrauschen muss vernachlässigbar sein.

5.4 Berücksichtigung von unkolliertem und polychromatischem Licht

Die Messabbildungen aus den Abschnitten 3.2 und 3.3 beziehen sich auf Messwerte eines punktmessenden Einwellenlängen-Ellipsometers, so dass der Einfluss von Strahldivergenz und Dispersion auf die Messwerte vernachlässigt wurde. Die LED-Beleuchtung des abbildenden Ellipsometers hat eine spektrale Bandbreite, innerhalb derer sich die Elemente der Müller-Matrix signifikant ändern können. Bei der Verzögerungsfolie ändert sich für $\text{FWHM} = 16 \text{ nm}$ die Verzögerung Δ um ca. $1,6^\circ$ und das Element m_{33} der normierten Müller-Matrix um ca. 0,02. Der Einfallswinkel variiert auch um bis zu $1,2^\circ$.

Die Propagation von Licht durch ein optisches System lässt sich durch die Strahlenoptik mit meist ausreichender Genauigkeit beschreiben. Dies schließt die Polarisationszustandsänderung mit ein. Die Mikrostruktur des Retroreflektors erfordert zwar eigentlich eine wellenoptische Betrachtung. Aufgrund der Polarisationserhaltung kann jedoch auch dieser strahlenoptisch abstrahiert werden, wenn Intensitätsschwankungen ignoriert werden. Die Matrizen aus Gleichung (5.16) werden um eine Richtungs- und Wellenlängenabhängigkeit entsprechend der Abb. 3.4 erweitert und mit dem Index \ddagger versehen. Die Richtungsvektoren von Strahlen werden anhand der Winkelkoordinaten θ und η der jeweiligen lokalen Koordinatensysteme beschrieben, so

dass man für eine Kreisfrequenz ω_k mit dem Index k folgende Matrizen erhält: Die Analyse-Matrix $\mathbf{A}_{Bk}^\ddagger(\theta_d, \eta_d)$, die Modulations-Matrix $\mathbf{W}_{Bk}^\ddagger(\theta_{1s}, \eta_{1s})$ und die Müller-Matrix der Probe $\mathbf{M}_{Si,fbk}^\ddagger(\theta_s, \eta_s)$.

In der Strahlenoptik berechnet sich der Beitrag eines emittierten Lichtstrahls aus \mathcal{A}_{1s} mit Kreisfrequenz ω_k zur gemessenen Intensität in \mathcal{A}_d wie folgt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\mathbf{B}_k)_{ij}}{\partial \mathcal{A}_{1s}} &= \left(\mathbf{A}_{Bk}^\ddagger(\theta_d, \eta_d) \right)_{\{i\} \times \llbracket 1,4 \rrbracket} \mathbf{M}_{Si,fbk}^\ddagger(\theta_s, \eta_s) \\ &\quad \times \left(\mathbf{W}_{Bk}^\ddagger(\theta_{1s}, \eta_{1s}) \right)_{\llbracket 1,4 \rrbracket \times \{j\}}, \end{aligned} \quad (5.17)$$

wobei i den Index eines Intensitätsmesswerts für ein Makropixel, j den Index des emittierten Polarisationszustands und \mathcal{A}_{1s} die Größe der Licht emittierenden Fläche bezeichnet, die vom betrachteten Makropixel erfasst wird. Für ein polychromatisches Strahlenbündel erhält man die Intensität:

$$\begin{aligned} (\mathbf{B})_{ij} &= \sum_k (\mathbf{B}_k)_{ij} = \sum_k \int_{\mathcal{A}_{1s}} \left(\mathbf{A}_{Bk}^\ddagger(\theta_d, \eta_d) \right)_{\{i\} \times \llbracket 1,4 \rrbracket} \mathbf{M}_{Si,fbk}^\ddagger(\theta_s, \eta_s) \\ &\quad \times \left(\mathbf{W}_{Bk}^\ddagger(\theta_{1s}, \eta_{1s}) \right)_{\llbracket 1,4 \rrbracket \times \{j\}} d\mathcal{A}_{1s}. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Für den optischen Aufbau des abbildenden Ellipsometers kann das Integral nach Anhang A.8 stark vereinfacht werden, da die Lichtquelle schmalbandig ist ($\lambda_\sigma = 9,4$ nm) und das Strahlenbündel einen kleinen Divergenzwinkel aufweist ($\omega_{1s}/2 = 0,6^\circ$):

$$\begin{aligned} (\mathbf{B})_{ij} &\approx \left(\mathbf{A}_{Bk_0}^\ddagger(\theta_d, \eta_d) \right)_{\{i\} \times \llbracket 1,4 \rrbracket} \mathbf{M}_{Si,fbk_0}^\ddagger(\theta_s, \eta_s) \\ &\quad \times \left(\mathbf{W}_{Bk_0}^\ddagger(\theta_{1s}, \eta_{1s}) \right)_{\llbracket 1,4 \rrbracket \times \{j\}} \Big|_{\theta_{1s}=0^\circ, \eta_{1s}=0^\circ}, \end{aligned} \quad (5.19)$$

wobei k_0 in Anhang A.6 definiert wird. Durch Verwendung der Analyse-Matrix $\mathbf{A}_B = \mathbf{A}_{Bk_0}^\ddagger(0^\circ, 0^\circ)$, der Modulationsmatrix $\mathbf{W}_B = \mathbf{W}_{Bk_0}^\ddagger(0^\circ, 0^\circ)$ und der Müller-Matrix der Probe $\mathbf{M}_{Si,fb} = \mathbf{M}_{Si,fbk_0}^\ddagger(\theta_s, \eta_s) \Big|_{\theta_{1s}=0^\circ, \eta_{1s}=0^\circ}$ des Hauptstrahls erhält man wieder die ursprüngliche Messabbildung aus Gleichung (5.16).

5.5 Funktionale Zusammenhänge bei Aufbauten mit und ohne Lichtwegumkehr

Bei isotropen Medien sind die Müller- und Jones-Matrizen der Probe für die Vorwärts- und Rückwärts-Richtung per Definition identisch. Im allgemeinen Fall unterscheiden sich die Müller- bzw. Jones-Matrizen für die Vorwärts- und Rückwärts-Richtung. Anisotrope und depolarisierende Medien (und entsprechende Schichtstrukturen) können in reziproke und nicht-reziproke Medien unterteilt werden, wobei in fast allen praxisrelevanten Anwendungsfällen das untersuchte Medium reziprok ist. Für diese Fälle gilt [Sch87, Bha08, Bha09, Art13]:

$$\mathbf{M}_{S,b} = \mathbf{diag}(1,1, -1,1)\mathbf{M}_{S,f}^T\mathbf{diag}(1,1, -1,1), \quad (5.20)$$

$$\mathbf{J}_{-S,b} = \mathbf{diag}(1, -1)\mathbf{J}_{-S,f}^T\mathbf{diag}(1, -1). \quad (5.21)$$

Einsetzen in die Müller-Matrix für die Lichtwegumkehr $\mathbf{M}_{S,fb} = \mathbf{M}_{S,b}\mathbf{M}_R\mathbf{M}_{S,f}$ einer ausgerichteten Probe mit $\phi_S = 0^\circ$ liefert [Neg20b]:

$$\mathbf{M}_{S,fb} = (\mathbf{M}_R)_{11} \mathbf{diag}(1,1, -1,1)\mathbf{M}_{S,f}^T\mathbf{diag}(1,1,1, -1)\mathbf{M}_{S,f}, \quad (5.22)$$

woraus folgt:

$$\mathbf{diag}(1,1, -1,1)\mathbf{M}_{S,fb} = (\mathbf{M}_R)_{11} \mathbf{M}_{S,f}^T\mathbf{diag}(1,1,1, -1)\mathbf{M}_{S,f} \quad (5.23)$$

$$= ((\mathbf{M}_R)_{11} \mathbf{M}_{S,f}^T\mathbf{diag}(1,1,1, -1)\mathbf{M}_{S,f})^T. \quad (5.24)$$

Da die Müller-Matrix auf der rechten Seite symmetrisch ist, hat $\mathbf{M}_{S,fb}$ bei reziproken Medien nur zehn Freiheitsgrade und die entsprechende Jones-Matrix sechs. Diese Einschränkung gilt nicht für nicht-reziproke Medien.

Eine weitere Klassifizierung von Medien kann danach erfolgen, ob die Müller-Matrizen invariant gegenüber Richtungsumkehr sind ($\mathbf{M}_S = \mathbf{M}_{S,f} = \mathbf{M}_{S,b}$). Die Richtungsinvarianz ist unabhängig von der Reziprozität [Neg20b]. Allerdings sind in den meisten Anwendungsfällen die Medien sowohl richtungsinvariant als auch reziprok. Die Einschränkung auf richtungsinvariante

und reziproke Medien ist daher eine schwache Einschränkung. In diesen Fällen gilt nach Gleichung (5.21):

$$\mathbf{M}_S = \mathbf{diag}(1, 1, -1, 1) \mathbf{M}_S^\top \mathbf{diag}(1, 1, -1, 1), \quad (5.25)$$

$$\underline{\mathbf{J}}_S = \mathbf{diag}(1, -1) \underline{\mathbf{J}}_S^\top \mathbf{diag}(1, -1). \quad (5.26)$$

Retroreflektoren, isotrope Medien und bestimmte anisotrope Medien erfüllen die Richtungsinvarianz. Tritt die Anisotropie lediglich in der Ebene auf, die durch \mathbf{e}_x^S und \mathbf{e}_y^S aufgespannt wird, so ist das Medium invariant gegenüber Richtungsumkehr [Neg20b]¹; vgl. Abb. 3.4. Zur Klasse der Medien mit Richtungsinvarianz gehören bspw. zweiachsige Kristalle mit den optischen Achsen in der Oberflächenebene [Bha08] sowie mikrostrukturierte Oberflächen [Die18]. Diese Medien haben zudem auch bei der UE nur zehn Freiheitsgrade, da die Messwerte für die UE aus den Messwerten von der RPE abgeleitet werden können, wie in [Neg20b] gezeigt wurde. Es seien $\{\Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3, \Lambda_4\}$ die Eigenwerte und $\text{col}(\mathbf{V})$ die dazugehörigen Eigenvektoren von der bekannten Matrix $\mathbf{M}_R^{-\frac{1}{2}} \mathbf{M}_{S,fb} \mathbf{M}_R^{-\frac{1}{2}}$. Für richtungsinvariante Medien erhält man folgende Menge der möglichen Lösungen für \mathbf{M}_S [Neg20b]:

$$\mathbf{M}_S \in \mathcal{M}_S := \left\{ \mathbf{M}_R^{-\frac{1}{2}} \mathbf{Y} \mathbf{M}_R^{-\frac{1}{2}} \mid \mathbf{Y} \in \mathcal{X} \right\}, \quad (5.27)$$

mit

$$\mathcal{X} := \mathbf{V} \mathbf{diag}(\pm\Lambda_1, \pm\Lambda_2, \pm\Lambda_3, \pm\Lambda_4) \mathbf{V}^{-1}, \quad (5.28)$$

Nicht alle Matrizen aus \mathcal{M}_S sind physikalisch realisierbar. Betrachtet man nur verschiedene, physikalisch realisierbare Matrizen, so reduziert sich die Anzahl der Matrizen aus \mathcal{M}_S auf maximal acht Müller-Matrizen für depolarisierende und zwei Müller-Matrizen für anisotrope Medien [Neg20b]. Eine Voraussetzung dafür ist jedoch, dass die Eigenwerte $\{\Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3, \Lambda_4\}$ paarweise verschieden sind, was fast immer gilt, da die Matrizen mit gleichen Eigenwerten eine

¹ Dies gilt auch für Schichtstrukturen.

niedrig-dimensionale Mannigfaltigkeit mit Maß Null bilden. Im Falle gleicher Eigenwerte enthält \mathcal{M}_S unendlich viele Elemente.

Die vermutlich wichtigste Klasse von Materialien in der Ellipsometrie stellen isotrope Medien dar und daraus hergestellte Schichtstrukturen. Im Rahmen der Arbeit wurde ein funktionaler Zusammenhang zwischen den Messgrößen $(\Psi_{S,\text{fb}}, \Delta_{S,\text{fb}}, \underline{\rho}_{-S,\text{fb}})$ für die RPE und den entsprechenden Größen $(\Psi_S, \Delta_S, \underline{\rho}_S)$ für die UE gefunden [Neg15]¹. Ein analoger Zusammenhang ergibt sich zwischen dem Reflexionsgrad $R_{S,\text{fb}}$ für die RPE und dem Reflexionsgrad R_S für die UE [Neg20b]. Insgesamt erhält man folgende Abhängigkeiten:

$$\tan \Psi_{S,\text{fb}} = \tan^2 \Psi_S, \quad (5.29)$$

$$\Delta_{S,\text{fb}} = 2\Delta_S - \pi, \quad (5.30)$$

$$R_{S,\text{fb}} = R_S^2(1 + \cos^2 2\Psi_S), \quad (5.31)$$

$$\underline{\rho}_{-S,\text{fb}} = -\underline{\rho}_S^2. \quad (5.32)$$

Aus diesen Gleichungen werden unabhängig vom konkreten Design des PSG und des PSD mehrere Dinge deutlich (vgl. [Neg20b]):

- Es gibt zwei Lösungen bei der Rückrechnung der ellipsometrischen Winkel Ψ_S , Δ_S bzw. beim komplexen Reflexionsquotienten $\underline{\rho}_S$ [Neg20b].
- Die Messunsicherheit von Ψ_S ist bei der RPE für $\Psi_S \approx 0^\circ$ oder $\Psi_S \approx 90^\circ$ größer als bei der UE und kleiner für $\Psi_S \approx 45^\circ$. Eine geringere Messunsicherheit der RPE gegenüber der UE wird jedoch nur bei hochreflektierenden Oberflächen erreicht.
- Die Messunsicherheit von Δ_S ist für hochreflektierende Oberflächen bei der RPE kleiner als bei der UE.
- Die Messunsicherheit von R_S ist bei der RPE invers proportional zu R_S .

¹ In den Formeln aus [Neg14, Neg15] wird der Phasensprung bei der Spiegelung nicht adäquat berücksichtigt bzw. die Formeln sind noch nicht mit der Nebraska-Konvention konform, siehe auch [Azz77a].

- Die Messunsicherheit der ellipsometrischen Winkel ist bei der UE invers proportional zu R_S^2 und bei der RPE invers proportional zu R_S . Daher ist die RPE zur Vermessung von metallischen Oberflächen besser geeignet als von (unbeschichtetem) Glas.

Diese Ergebnisse sind gültig, falls bei der UE und der RPE der gleiche PSG und PSD verwendet wird und der Retroreflektor sowie der Strahlteiler keinen Intensitätsverlust verursacht. Berücksichtigt man Intensitätsverluste, vergrößert sich die Messunsicherheit bei der RPE¹. Diese lassen sich durch stärkere Lichtquellen oder längere Messzeiten kompensieren.

5.6 Freiheitsgrade von Müller-Matrizen

Depolarisierende, physikalisch realisierbare Müller-Matrizen besitzen 16 Freiheitsgrade [Azz99, Chi07]. Ob eine Müller-Matrix physikalisch realisierbar ist, wird oft anhand des Cloude-Kriteriums entschieden [Ahm08, Clo89]. Reelle 4×4 -Matrizen, die das Cloude-Kriterium erfüllen, haben 16 Freiheitsgrade. Dies kann leicht eingesehen werden: Eine reelle Matrix erfüllt das Cloude-Kriterium, falls die sog. Kohärenzmatrix hermitesch und positiv semidefinit ist. Komplexe, hermitesche, positiv semidefinite 4×4 -Matrizen haben 16 Freiheitsgrade. Da die Abbildung von reellen 4×4 -Matrizen auf hermitesche Kohärenzmatrizen einen isometrischen Isomorphismus bildet [Zan20], haben physikalisch realisierbare Müller-Matrizen nach dem Cloude-Kriterium 16 Freiheitsgrade.

Die in Abschnitt 4.6 berechnete Müller-Matrix von gepumpten phasenkonjugierenden Spiegeln aus der nichtlinearen Optik verletzt das Cloude-Kriterium. Weitere Beispiele finden sich in [Sim87]. Das Cloude-Kriterium ist daher keine allgemeingültige, notwendige Bedingung für physikalische Realisierbarkeit.

¹ Ein Strahlteiler verursacht im Idealfall einen Intensitätsabfall um den Faktor vier [Joh11].

In der Ellipsometrie werden jedoch meist passive optische Untersuchungsobjekte wie anisotrope Oberflächen untersucht¹. Beschränkt man sich auf solche „typischen“ Untersuchungsobjekte in der Ellipsometrie, so stellt sich die Frage, ob das Cloude-Kriterium eine hinreichende Bedingung für die physikalische Realisierbarkeit darstellt, da andernfalls die Müller-Matrizen typischer Untersuchungsobjekte weniger als 16 Freiheitsgrade haben könnten. Mit einem Konstruktionsbeweis lässt sich jedoch zeigen, dass das Cloude-Kriterium eine hinreichende Bedingung für die physikalische Realisierbarkeit in Form eines „typischen“ Untersuchungsobjektes in der Ellipsometrie darstellt. Auf diesen Konstruktionsbeweis wird hier zwar nicht näher eingegangen, jedoch beruht dieser Beweis auf die Zerlegung einer Müller-Matrix, die das Cloude-Kriterium erfüllt, in vier nicht-depolarisierende Müller-Matrizen [Clo89] und auf eine Faktorisierung der nicht-depolarisierenden Müller-Matrizen nach [Lu96] in einen Verzögerungsanteil, einen linear dichroitischen Anteil und eine optische Rotation. Aus dieser Zerlegung und Faktorisierung lässt sich schließlich eine Schichtstruktur eines synthetischen Materials basierend auf doppelbrechende, optisch aktive und polarisierende Medien ableiten. Diese Schichtstruktur ist physikalisch realisierbar. Eine Depolarisation wird dabei durch eine örtliche Variation der Schichtstruktur und eine räumlich inkohärente Beleuchtung erreicht.

Messbare Müller-Matrizen typischer Untersuchungsobjekte haben somit 16 Freiheitsgrade, falls sie mit der UE gemessen werden. Wenn sie mit der RPE gemessen werden, haben sie nach Abschnitt 5.5 zehn Freiheitsgrade. Da das zuvor genannte synthetische Material aus reziproken Medien besteht, sind die reziproken Beziehungen aus Abschnitt 5.5 anwendbar. Nimmt man nicht-reziproke Medien hinzu, erhöht sich die Anzahl der Freiheitsgrade.

¹ Für beliebig komplexe Untersuchungsobjekte bildet das sog. Stokes-Kriterium eine hinreichende und notwendige Bedingung für die physikalische Realisierbarkeit. Das Stokes-Kriterium erfordert lediglich, dass eine Müller-Matrix jeden Stokes-Vektor auf einen Stokes-Vektor abbildet [Zan20]. In diesem Zusammenhang spricht man dann auch von pre-Müller-Matrizen [Sim10].

5.7 Simultane Bestimmung der Neigungswinkel und Materialparameter

Die Bestimmung der Oberflächennormalen ist für die Charakterisierung des Oberflächenmaterials erforderlich. Üblicherweise gehen Topographie- und Material-bezogene Modellparameter in eine Zielfunktion ein und werden durch eine nichtlineare Optimierung gemeinsam berechnet. Dieses Verfahren hat jedoch auch Nachteile (vgl. [Neg20a]):

- Es ist Vorwissen über die Materialstruktur des Prüflings erforderlich.
- Die unbekanntenen Topographie-bezogenen Modellparameter reduzieren die Anzahl der bestimmbaren Material-bezogenen Modellparameter.
- Die numerische Optimierung ist insbesondere bei der abbildenden Ellipsometrie zeitaufwändig. Bekannte inverse Abbildungen für die UE setzen oft bekannte Topographie- oder Material-bezogene Modellparameter voraus.
- Es können Parameterkorrelationen auftreten, die eine genaue Bestimmung von Topographie- und Material-bezogenen Modellparameter verhindern [Bu-86].

Bei der RPE kommt zusätzlich hinzu, dass eine explorative Analyse aufgrund der unbekanntenen Oberflächenneigung und der Lichtwegumkehrung nur sehr eingeschränkt möglich ist. Eine Alternative zur simultanen Optimierung der Modellparameter bildet ein zweistufiges Messverfahren, bei dem zunächst die Oberflächennormale bestimmt wird und anschließend eine Materialcharakterisierung erfolgt. Eine separate Bestimmung der Modellparameter kann z. B. über eine Sensordatenfusion erreicht werden. Genaue Messverfahren zur Messung der Oberflächennormalen sind die Deflektometrie und zur Messung der Oberflächenreliefs die Interferometrie und die Lasertriangulation [Bey16]. Die Lasertriangulation lässt sich besonders gut mit der Laser-Ellipsometrie kombinieren, da eine Laserlinie bereits auf den Prüfling projiziert wird. Für die Messung des Oberflächenreliefs ist eine zusätzliche Kamera erforderlich.

In diesem Abschnitt werden Verfahren zur Bestimmung der Topographie untersucht, die ohne zusätzliche Sensoren auskommen.

5.7.1 Neigungswinkelbestimmung mit Probenpräparation

Ein Messverfahren für die 3D-Rekonstruktion von gekrümmten Oberflächen, das neben der Kamera eines abbildenden RPE keine zusätzliche Hardware benötigt, wurde in [Neg18] vorgestellt und in [Neg19a] an einer Linsenoberfläche evaluiert. Die algorithmische Struktur, die verwendeten Voraussetzungen und die Ergebnisse werden nachfolgend zusammengefasst. Für die 3D-Rekonstruktion der Oberfläche ist eine Bewegung der Probe oder Kamera erforderlich, die entweder manuell oder mit einer Aktorik durchgeführt werden kann. Mit monokularem Stereo lässt sich aus Bildern einer diffus reflektierenden, strukturierten Oberfläche, die aus unterschiedlichen Blickwinkeln aufgenommen wurden, eine 3D-Rekonstruktion berechnen [Bey16, Sze11]. Diffus reflektierende Oberflächen erscheinen aus allen Blickwinkeln gleich hell. Dasselbe gilt auch für retroreflektierende Oberflächen bei Verwendung einer koaxialen Hellfeldbeleuchtung. Um auf einer spekulär reflektierenden Oberfläche eine diffus reflektierende Struktur mit hohem Kontrastverhältnis zu simulieren, kann man daher kleine, retroreflektierende Schnipsel aufbringen bzw. statistisch verteilt aufstreuen. Trifft das Licht nicht auf die Marker auf, gelangt es nicht in den Sensor, falls der Retroreflektor aus dem Lichtpfad entfernt wird; siehe Abb. 5.1. Zur Vermeidung einer Kalibrierung der extrinsischen Kameraparameter ist es sinnvoll, die Kameraposen mitzuschätzen. Eine Kalibrierung der intrinsischen Kameraparameter ist bei hochwertigen Objektiven und Industriekameras nicht zwingend erforderlich. Meist reicht es aus, einen unbekanntem Skalierungsfaktor anzunehmen.

Die 3D-Rekonstruktion und die Kameraposen erhält man durch die in Abb. 5.7 abgebildete Bildverarbeitungs-Pipeline. Zunächst ist eine 2D-Korrespondenzsuche zwischen den Bildern erforderlich, da die Kameraposen unbekannt sind und nicht auf eine 1D-Suche durch die Epipolareometrie zurückgegriffen werden kann [Bey16]. Die Korrespondenzanalyse kann

anhand bekannter Verfahren des dichten optischen Flusses berechnet werden [Gar13c], da aufeinanderfolgende Bilder einer Bildserie eine kurze Basislinie haben. Aus den Pixelkorrespondenzen lassen sich 3D-Koordinaten den Pixeln zuordnen, wobei die Kameraposen mitgeschätzt werden müssen. Bei perspektivischer Projektion verwendet man üblicherweise die Methode der Bündelausgleichung [Tri00]. Bei orthographischer Projektion eignet sich die Methode der Faktorisierung [Tom92]. Nur die Randpixel der Reflexionsmarker liefern eine 3D-Information. Daher bietet es sich an, die anderen Pixel auszumaskieren. Das Normalenfeld kann nur dann für alle Bildpixel geschätzt werden, wenn Glattheitsannahmen über die Oberfläche erfüllt sind.

Die Glattheitsannahmen werden von der Größe und Dichte der auf der Oberfläche liegenden Marker bestimmt. Sei $z_s = g(x, y)$ das zu bestimmende Oberflächenrelief für die Bildkoordinaten (x, y) und $\{\mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_n\}$ eine 3D-Punktvolke mit n Objektpunkten, wobei $\mathbf{s}_i = (s_{ix}, s_{iy}, s_{iz})^\top$ für alle $i \in \llbracket 1, n \rrbracket$. Für diese Objektpunkte ist der Funktionswert von g bekannt und es gilt $s_{iz} = g(s_{ix}, s_{iy})$. Ist g eine niederfrequente Funktion mit der Grenzfrequenz f_{max} , so kann diese auch bei nicht-uniformer Abtastung über der x, y -Ebene rekonstruiert werden, falls das nicht-uniforme Abtasttheorem erfüllt ist [Mar01, Mug87]. Hierfür ist es hinreichend, wenn die Abstände der Abtastpunkte der Marker $\{(s_{ix}, s_{iy}) \mid i \in \llbracket 1, n \rrbracket\}$ einen gewissen Schwellwert nicht überschreiten:

$$l \leq \frac{\log 2}{\sqrt{2} f_{max} \pi}, \quad (5.33)$$

wobei l die maximale Kantenlänge aller Dreiecke ist, die man aus einer Triangulation der Bildpunkte $\mathbf{s}_i = (s_{ix}, s_{iy}, s_{iz})$ erhält. Die Rekonstruktion von g aus der Punktvolke erfolgt in dem hier betrachteten Verfahren nicht über eine Fourier-Synthese, sondern über eine B-Spline-Oberflächenrekonstruktion [Pie97] nach dem probabilistischen Verfahren aus [Wan94, Hua07] unter Verwendung eines Kalman-Filters [Sim06]. Beim Kalman-Filter werden die Kontrollpunkte der B-Spline-Oberfläche zu einem Zustandsvektor \mathbf{p} zusammengefasst und als multinominale Normalverteilung durch den Erwartungswert $\boldsymbol{\mu}_p$ und der Kovarianzmatrix \mathbf{C}_p beschrieben. Hat die Oberfläche n Kontrollpunkte und sind $m \propto n$ Messwerte vorhanden, so

beträgt der Rechenaufwand für den Filter-Schritt $\mathcal{O}(n^3)$ [Hua07] und der Speicheraufwand $\mathcal{O}(n^2)$. Zur Performancesteigerung wird statt eines Kalman-Filters ein sog. Informations-Filter verwendet¹. Beim Informations-Filter wird die kanonische Form der Normalverteilung gegeben durch $\mathbf{b}_p = \mathbf{Q}_p \boldsymbol{\mu}_p$ und die Präzisionsmatrix $\mathbf{Q}_p = \mathbf{C}_p^{-1}$ zur Beschreibung der B-Spline-Oberfläche verwendet. Der Filterschritt kann mit der kanonischen Form effizienter berechnet werden. Da \mathbf{Q}_p eine bandbegrenzte Matrix ist, kann aus \mathbf{b}_p und \mathbf{Q}_p durch Rückwärts-Substitution auch $\boldsymbol{\mu}_p$ effizient berechnet werden. Der Rechenaufwand verringert sich auf $\mathcal{O}(n^2)$ und der Speicheraufwand auf $\mathcal{O}(n^{3/2})$ [Neg12], was insbesondere bei komplex-geformten Oberflächen mit vielen Kontrollpunkten den Messvorgang deutlich beschleunigt.

Die Repräsentation der Oberfläche als B-Spline-Oberfläche ermöglicht eine einfache Differentiation des Oberflächenreliefs g , woraus sich das Normalenfeld und über Gleichung (5.13) schließlich die Einfall- und Azimutwinkel ableiten lassen. Diese Messwerte können für eine anschließende ellipsometrische Oberflächencharakterisierung genutzt werden, jedoch ist das beschriebene Rekonstruktionsverfahren nicht auf diesen Anwendungsfall beschränkt.

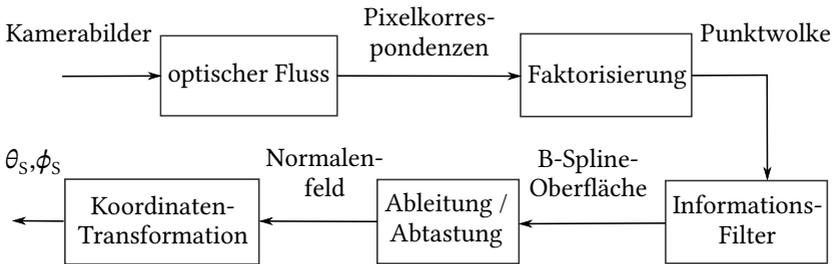


Abbildung 5.7: Bildverarbeitungs-Pipeline für die Schätzung des Normalenfelds anhand von Aufnahmen aus mehreren Kameraposen.

¹ Eine Übersicht über verschiedene lineare und nicht-lineare Filter ist in [Sim06] zu finden.

5.7.2 Simultane Bestimmung der Neigungswinkel für isotrope Medien

Falls die Müller-Matrix eines Mediums in Reflexions- oder Transmissionsanordnung als $\mathbf{M}_{S,fb}^L := (m_{Lij}) = \mathbf{M}_L(\Psi, \Delta, R)$ darstellbar ist, dann kann für die RPE der Azimutwinkel ϕ_S über direkte Verfahren aus zwei gemessenen Stokes-Vektoren anhand von zwei emittierten Polarisationszuständen bestimmt werden [Har17]. Für die UE wurden in [Hol96, Neu02b, Cha05, Lee05, Cha06, Che19] ebenfalls geschlossene Lösungen vorgestellt. Diese Formeln sind teilweise auf Spezialfälle beschränkt, wie die Verwendung bestimmter PSGs. Im Rahmen der Arbeit wurden für die RPE und UE neue Formeln gefunden, die sich durch eine besonders geringe Messunsicherheit und einen breiten Anwendungsbereich auszeichnen, da keine spezifischen Annahmen über den optischen Aufbau getroffen werden. Stattdessen wird eine gemessene Müller-Matrix vorausgesetzt. Die Azimutwinkel lassen sich aus einer gemessenen Jones- oder Müller-Matrix wie folgt berechnen:

$$2\phi_{S1} = \arctan 2 \begin{pmatrix} j'_{-L12} - j'_{-L21}, j'_{-L11} + j'_{-L22} \\ j'_{-L12} + j'_{-L21}, j'_{-L11} - j'_{-L22} \end{pmatrix}, \quad (5.34)$$

$$2\phi_{S2} = \arctan 2 \begin{pmatrix} j'_{-L12} - j'_{-L21}, j'_{-L11} + j'_{-L22} \\ j'_{-L12} + j'_{-L21}, j'_{-L11} - j'_{-L22} \end{pmatrix} - \arctan 2 \begin{pmatrix} j'_{-L12} - j'_{-L21}, j'_{-L11} + j'_{-L22} \\ j'_{-L12} + j'_{-L21}, j'_{-L11} - j'_{-L22} \end{pmatrix}, \quad (5.35)$$

$$2\phi_S = \arctan 2 \begin{pmatrix} j'_{-L12} - j'_{-L21}, j'_{-L11} + j'_{-L22} \\ j'_{-L12} + j'_{-L21}, j'_{-L11} - j'_{-L22} \end{pmatrix}. \quad (5.36)$$

Die Matrix $\begin{pmatrix} j'_{-Lij} \end{pmatrix}$ entspricht dabei der Jones-Matrix multipliziert mit einem beliebigen Skalar. Da der Skalar beliebig gewählt werden kann, ergibt sich folgende Vereinfachung von Gleichung (3.90) für die Berechnung von $\begin{pmatrix} j'_{-Lij} \end{pmatrix}$

aus einer Müller-Matrix [Neg20a]:

$$j'_{-L11} := m_{L11} + m_{L12} + m_{L21} + m_{L22}, \quad (5.37)$$

$$j'_{-L12} := m_{L13} + m_{L23} - i(m_{L14} + m_{L24}), \quad (5.38)$$

$$j'_{-L21} := m_{L31} + m_{L32} + i(m_{L41} + m_{L42}), \quad (5.39)$$

$$j'_{-L22} := m_{L33} + m_{L44} + i(m_{L43} - m_{L34}). \quad (5.40)$$

Bei der UE gibt es zwei Azimutwinkel ϕ_{S1} und ϕ_{S2} [Neu02b, Cha05, Lee05, Cha06]¹, woraus die Oberflächennormale berechnet werden kann [Neu02b]. Bei der RPE gibt es nur einen Azimutwinkel ϕ_S , weshalb der Einfallswinkel separat bestimmt werden muss. Für isotrope Substrate mit bekanntem Brechungsindex kann die geschlossene Lösung aus Gleichung (3.115) zur Bestimmung des Einfallswinkels verwendet werden.

5.7.3 Rotierender Reflektor mit richtungsabhängiger Müller-Matrix

Alle bisher bekannten Verfahren aus dem Stand der Technik zur Messung der Oberflächennormalen anhand von Polarisationsmessungen sind auf isotrope Medien beschränkt. Für anisotrope oder depolarisierende Medien sind Verfahren wie in [Che21a] zur Bestimmung der Oberflächenneigung ungeeignet. Der Grund hierbei ist, dass jede Matrix $\mathbf{J}_S \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$ physikalisch realisierbar ist². Es bleiben somit keine Freiheitsgrade mehr übrig, um aus der Jones-Matrix ohne weiteres Vorwissen die Azimutwinkel für die optische Rotation zu bestimmen. Dasselbe Argument gilt auch für den Müller-Formalismus, da physikalisch-realisierbare Müller-Matrizen nach Abschnitt 5.6 16 Freiheitsgrade besitzen.

¹ Die Allgemeingültigkeit der Formeln aus [Cha05, Lee05, Cha06] ist etwas unklar; siehe https://avs.scitation.org/doi/suppl/10.1116/1.5144506/suppl_file/jvb19-ar-icse2019-00634_supp.pdf (27.10.2021).

² Dies gilt zumindest für solche Jones-Matrizen, die das einfallende Licht nicht verstärken.

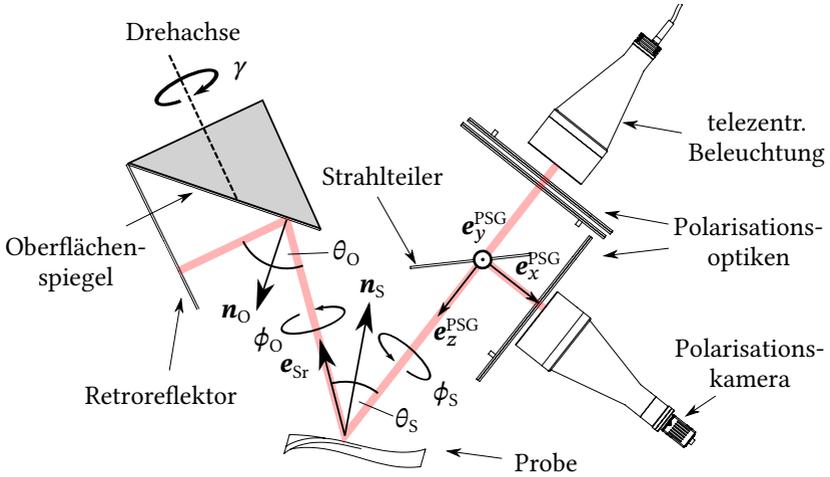


Abbildung 5.8: Dargestellt ist der Strahlengang bei Verwendung des rotierenden Reflektors. Abgeänderter Nachdruck mit Genehmigung aus Negara et al., J. Vac. Sci. Technol. B 38, 014016 (2020). Copyright 2020, AVS.

Werden hingegen mehrere Müller-Matrizen unter geänderten Aufnahmebedingungen gemessen, so kann die Oberflächennormale aus den Müller-Matrizen für beliebige Medien berechnet werden. Nachfolgend wird das in [Neg20b] vorgestellte Verfahren wiedergegeben. Für die Messung der Oberflächennormalen ist dabei kein Vorwissen über die Probe erforderlich. Es wird insbesondere kein isotropes Material vorausgesetzt. Zudem können damit sowohl θ_s als auch ϕ_s gemessen werden. Das Messprinzip ist in Abb. 5.8 abgebildet. Ein Oberflächenspiegel wird um eine feste Achse um den Winkel γ gedreht und dabei eine Müller-Matrix gemessen. Die Müller-Matrix des Oberflächenspiegels für den Einfallswinkel θ_0 sei $\mathbf{M}_O(\theta_0)$ und die daraus berechneten ellipsometrischen Winkel sowie die Reflektanz seien Ψ_O , Δ_O und R_O . Zwischen Probe und Oberflächenspiegel ist eine optische Rotation $\mathbf{M}_r(\phi_0)$ erforderlich. Insgesamt wird folgende Müller-Matrix für einen Drehwinkel γ gemessen:

$$\mathbf{M}_\gamma(\gamma) = \mathbf{M}_r(\phi_s)\mathbf{M}_{s,b}\mathbf{M}_r(\phi_0)\mathbf{M}_O(\theta_0)\mathbf{M}_R\mathbf{M}_O(\theta_0)\mathbf{M}_r(\phi_0)\mathbf{M}_{s,f}\mathbf{M}_r(\phi_s). \quad (5.41)$$

Weiterhin wird die Referenzmessung $\mathbf{M}_{\text{Si,fb}}$ aus Gleichung (5.16) ohne Oberflächenspiegel benötigt. Mit der Definition $\mathbf{M}_{\gamma/\text{Si}}(\gamma) := \mathbf{M}_{\gamma}(\gamma)\mathbf{M}_{\text{Si,fb}}^{-1}$ erhält man nach einigen Umformungen unter Ausnutzung der Identität $\mathbf{M}_{\text{R}} = \mathbf{M}_{\text{r}}(\phi)\mathbf{M}_{\text{R}}\mathbf{M}_{\text{r}}(\phi)$ die folgende Gleichung [Neg20b]:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{\gamma/\text{Si}}(\gamma) &:= \underbrace{\mathbf{M}_{\text{r}}(\phi_{\text{S}})\mathbf{M}_{\text{S,b}}\mathbf{M}_{\text{r}}(\phi_{\text{O}})}_{=: \mathbf{M}_3} \underbrace{\mathbf{M}_{\text{O}}(\theta_{\text{O}})\mathbf{M}_{\text{R}}\mathbf{M}_{\text{O}}(\theta_{\text{O}})\mathbf{M}_{\text{R}}}_{=: \mathbf{M}_4(\theta_{\text{O}})} \\ &\quad \times \underbrace{\mathbf{M}_{\text{r}}(-\phi_{\text{O}})\mathbf{M}_{\text{S,b}}^{-1}\mathbf{M}_{\text{r}}(-\phi_{\text{S}})}_{=: \mathbf{M}_3^{-1}}. \end{aligned} \quad (5.42)$$

Da die Matrizen $\mathbf{M}_{\gamma/\text{Si}}(\gamma)$ und $\mathbf{M}_4(\theta_{\text{O}})$ ähnlich sind, haben sie die selben Eigenwerte, die mit $\{\Lambda_{\gamma_1}, \Lambda_{\gamma_2}, \Lambda_{\gamma_3}, \Lambda_{\gamma_4}\}$ bezeichnet werden und folgende Werte annehmen:

$$\Lambda_{\gamma_1} = 4R_{\text{O}}^2 \sin^4 \Psi_{\text{O}}, \quad (5.43)$$

$$\Lambda_{\gamma_2} = 4R_{\text{O}}^2 \cos^4 \Psi_{\text{O}}, \quad (5.44)$$

$$\Lambda_{\gamma_3} = R_{\text{O}}^2 \sin^2 2\Psi_{\text{O}} e^{i2\Delta_{\text{O}}}, \quad (5.45)$$

$$\Lambda_{\gamma_4} = R_{\text{O}}^2 \sin^2 2\Psi_{\text{O}} e^{-i2\Delta_{\text{O}}}. \quad (5.46)$$

Die Spektralzerlegung liefert vier ungeordnete Eigenwerte, so dass die Zuordnung der Eigenwerte zu den Formeln ohne Vorwissen nicht möglich ist. In der Evaluation wird ein Aluminiumspiegel als Oberflächenspiegel verwendet. Für diesen sind die Wertebereiche der Eigenwerte über einen großen Einfallswinkelbereich disjunkt, so dass eine eindeutige Zuordnung möglich ist. Aus den Eigenwerten lassen sich mit den Gleichungen (5.43) bis (5.46) zunächst Ψ_{O} und Δ_{O} und über Gleichung (3.115) schließlich θ_{O} berechnen. Die obigen Formeln ermöglichen es, für einen bekannten Drehwinkel γ den dazugehörigen Einfallswinkel θ_{O} zu bestimmen.

Als Nächstes soll der Richtungsvektor \mathbf{e}_{Sr} aus Abb. 5.8 bestimmt werden. Hierfür werden für o Rotationen die Einfallswinkel $(\theta_{\text{O}1}, \theta_{\text{O}2}, \dots, \theta_{\text{O}o})$ mit $o \geq 3$ gemessen. Die dazugehörigen Normalen des Oberflächenspiegels $(\mathbf{n}_{\text{O}1}, \mathbf{n}_{\text{O}2}, \dots, \mathbf{n}_{\text{O}o})$ werden als bekannt vorausgesetzt. Der gesuchte Richtungsvektor \mathbf{e}_{Sr} lässt sich über die Methode der kleinsten Quadrate

berechnen¹:

$$\mathbf{e}_{\text{Sr}} = (\mathbf{H}^T \mathbf{H})^{-1} \mathbf{H}^T \mathbf{y}, \quad (5.47)$$

wobei

$$\mathbf{H} = - \begin{pmatrix} \mathbf{n}_{\text{O1}}^T \\ \mathbf{n}_{\text{O2}}^T \\ \dots \\ \mathbf{n}_{\text{O0}}^T \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} \cos \theta_{\text{O1}} \\ \cos \theta_{\text{O2}} \\ \dots \\ \cos \theta_{\text{O0}} \end{pmatrix}. \quad (5.48)$$

Aus \mathbf{e}_{Sr} und der Kenntnis von $\mathbf{e}_z^{\text{PSG}}$ erhält man \mathbf{n}_s und mit Gleichung (5.13) schließlich θ_s und ϕ_s :

$$\mathbf{n}_s = \frac{\mathbf{e}_{\text{Sr}} - \mathbf{e}_z^{\text{PSG}}}{|\mathbf{e}_{\text{Sr}} - \mathbf{e}_z^{\text{PSG}}|} \quad (5.49)$$

Hierbei ist wichtig hervorzuheben, dass die Oberflächennormale nicht aus der Müller-Matrix des Prüflings berechnet wird, denn dafür wäre Vorwissen über die Schichtstruktur erforderlich. Stattdessen wird der Richtungsvektor \mathbf{e}_{Sr} des reflektierten Lichts aus den Polarisationsmessungen ohne Kenntnis der Müller-Matrix der Probe bestimmt. Da der Richtungsvektor des emittierten Lichts bekannt ist, erhält man schließlich die gesuchte Oberflächennormale. Aus der Oberflächennormalen erhält man ϕ_s und über Gleichung (5.16) schließlich $\mathbf{M}_{\text{S,fb}}$. Hierfür ist zunächst die Kalibrierung von \mathbf{A}_B und \mathbf{W}_B erforderlich. Für Medien mit Richtungsinvarianz lässt sich über Gleichung (5.27) auch \mathbf{M}_S berechnen.

5.8 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurden mehrere Verfahren vorgestellt, um nicht nur ebene, sondern auch gekrümmte Oberflächen mit der RPE zu vermessen.

¹ Bei annähernd normalverteilten Messwerten \mathbf{y} mit bekannter Kovarianzmatrix \mathbf{C}_y erhält man über $\mathbf{e}_{\text{Sr}} = (\mathbf{H}^T \mathbf{C}_y^{-1} \mathbf{H})^{-1} \mathbf{H}^T \mathbf{C}_y^{-1} \mathbf{y}$ eine Maximum-Likelihood-Schätzung für \mathbf{e}_{Sr} .

Das vorgestellte abbildende Ellipsometer basiert auf dem Messprinzip des Laserscanner-Messsystems aus dem Stand der Technik. Die Sensorik des Laserscanner-Messsystems wurde dabei durch ein abbildendes Messsystem ausgetauscht. Für eine Oberflächencharakterisierung in der Ellipsometrie ist stets die Oberflächengeometrie zu beachten, weshalb mehrere Verfahren vorgestellt wurden, um die Oberflächennormale zu messen. Die Messung kann bspw. anhand von heterogenen Sensordaten oder durch Verwendung des Messverfahrens mit rotierendem Reflektor erfolgen. Wird die Oberflächennormale separat gemessen und nicht aus der Müller-Matrix des Prüflings hergeleitet, so ist die Erweiterung der RPE an ebenen Oberflächen mit bekanntem Einfallswinkel auf die der RPE an gekrümmten Oberflächen mit unbekanntem Einfallswinkel nicht mit Einschränkungen des Anwendungspotenzials verbunden. Zusätzlich wurde aufgezeigt, dass die RPE die meisten Aufgabenstellungen der UE zur Materialcharakterisierung abdeckt. Dies gilt jedoch nur bei Vernachlässigung von Sensorrauschen. Wird dieses mit einbezogen, gibt es durchaus Unterschiede zwischen der RPE und der UE hinsichtlich der erzielbaren Messunsicherheit. Bei moderat bis schwach reflektierenden Oberflächen ist die UE der RPE überlegen.

Inzwischen existiert ein weiterer, punktmessender Ellipsometrie-Aufbau, der ebenfalls mit rotierenden Kompensatoren die Müller-Matrix misst [Che20]. Im Unterschied zum abbildenden Ellipsometer wird dort die Ellipsometrie und die Reflektometrie kombiniert, um mehr Information über die zu untersuchende Oberfläche zu erhalten. Reflexionsmessungen liefern zwar zusätzliche Messdaten, jedoch erschwert die inhärente Variation des Reflexionsgrads des Retroreflektors eine Reflexionsmessung. Die in Abschnitt 7.2.3 vorgeschlagene Bewegung des Retroreflektors könnte das Signal-Rausch-Verhältnis verbessern. Eine weitere Schwierigkeit ergibt sich durch die relativ hohe Messunsicherheit bei der Vermessung von metallischen Oberflächen [Che21b]. Hoch-reflektierende Oberflächen sind jedoch für die RPE besonders geeignet [Neg20b]. Trotz dieser Schwierigkeiten wurden durch die Kombination von der RPE und der Reflektometrie beachtenswerte Messunsicherheiten bei der Bestimmung des Brechungsindex und des Einfallswinkels von metallischen Oberflächen erreicht [Che20].

6 Sensorkalibrierung

Zur Kalibrierung des abbildenden Ellipsometers wird wie in [Mac12] ein mehrstufiges Verfahren verwendet, das jedoch eine gänzlich andere algorithmische Struktur aufweist. Es werden Aufnahmen unter verschiedenen Konfigurationen durchgeführt; siehe Abb. 6.1. Die Motivation für das entwickelte Kalibrierverfahren ergibt sich aus den Einschränkungen bisheriger Verfahren. Das Verfahren aus [Azz89a] setzt voraus, dass die Drehwinkel der Polarisationsoptiken sehr genau bekannt sind, sodass die Messunsicherheit der Kalibrierung auf die geometrische Messunsicherheit der Winkelpositionierung zurückgeführt werden kann. Die verwendeten Servomotoren des abbildenden Ellipsometers haben dagegen typischerweise einen großen winkelabhängigen, systematischen Fehler ($> 1^\circ$). Weiterhin werden annähernd ideale Polarisatoren vorausgesetzt ($ER = 10^6$). Das Lösungsverhältnis der verwendeten Polarisationsfolie beträgt im eingesetzten Wellenlängenbereich dagegen nur ca. $ER = 1127$.

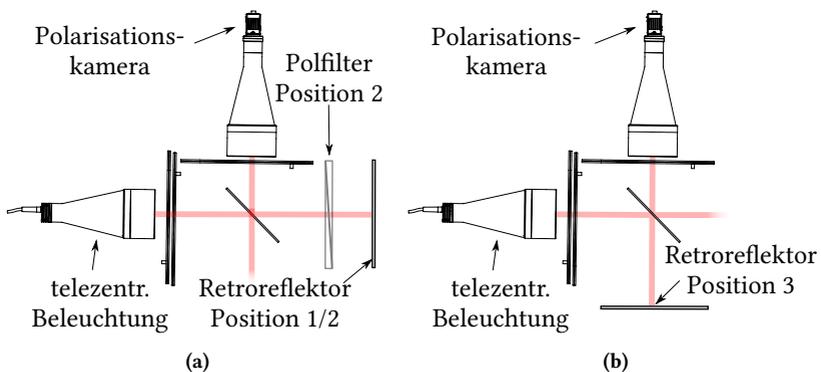


Abbildung 6.1: Anordnung von Retroreflektor und Polarisationsfilter bei den ersten beiden Kalibriermessungen (a) sowie bei der dritten Kalibriermessung (b).

6.1 Zwei-Wege Kalibrierung mittels Singulärwertzerlegung

Der Polarisationszustand des emittierten Lichts im Bereich zwischen telezentrischer Beleuchtung und Polarisator wird durch den Stokes-Vektor \mathbf{S}_u beschrieben. Das vorgestellte Kalibrierverfahren beruht auf drei Annahmen: Die erste Annahme ist, dass alle modulierten Polarisationszustände des PSG eine konstante Intensität aufweisen. Der Kompensator muss hierbei frei von Dichroismus sein und der Grad der linearen Polarisation der Beleuchtung muss Null sein $DoLP(\mathbf{S}_u) = 0$. Die Beleuchtung weist insbesondere während der Aufwärmphase Intensitätsschwankungen auf, die durch einen separaten Lichtsensor kompensiert werden; siehe Abb. 5.3a. Die zweite Annahme ist, dass das vom PSG emittierte Licht vollständig polarisiert ist. Als dritte Annahme wird eine grobe Kenntnis der Drehlagen der Polarisationsoptiken sowie der Parameter der optischen Bauelemente vorausgesetzt. Für die Evaluation dieser Arbeit wurden die Parameter der optischen Bauelemente mittels eines spektroskopischen Ellipsometers gemessen.

6.2 Teilproblem Matrixfaktorisierung

Unter der Annahme einer konstanten Intensität der emittierten Stokes-Vektoren nimmt die Modulationsmatrix \mathbf{W} folgende Gestalt an:

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} S_0 & S_0 & \dots & S_0 \\ S_{11} & S_{12} & \dots & S_{1n} \\ S_{21} & S_{22} & \dots & S_{2n} \\ S_{31} & S_{32} & \dots & S_{3n} \end{pmatrix} = S_0 \underbrace{\frac{\mathbf{W}}{S_0}}_{=: \mathbf{W}_1}, \quad (6.1)$$

wobei \mathbf{W}_1 die emittierten normierten Stokes-Vektoren enthält. Die Messung eines idealen Spiegels führt nach Gleichung (5.16) zu folgender Intensitätsmatrix \mathbf{B} :

$$\mathbf{B} = \underbrace{S_0 (\mathbf{M}_R)_{11}}_{=: \mathbf{A}_1} \underbrace{\mathbf{A} \mathbf{M}_{B,b}^r}_{=: \mathbf{A}_B} \underbrace{\mathbf{M}_M \mathbf{M}_{B,f}^t}_{=: \mathbf{W}_B} \mathbf{W}_1 + \mathbf{R}, \quad (6.2)$$

wobei \mathbf{B} und \mathbf{R} eine Realisierung der Zufallsvariablen \mathbf{B} und \mathbf{R} sind. Das Ziel der Kalibrierung ist die Bestimmung der Matrizen \mathbf{A}_B und \mathbf{W}_B . Bei dem hier betrachteten Müller-Matrix-Ellipsometer gilt $\text{rang}(\mathbf{A}_B) = \text{rang}(\mathbf{W}_B) = 4$.

Die Singulärwertzerlegung der gemessenen Matrix $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ liefert:

$$\mathbf{B} = \mathbf{U} \mathbf{\Sigma} \mathbf{V}^T, \quad (6.3)$$

wobei $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $\mathbf{\Sigma} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ [Cli06]. Die ökonomische Variante der Singulärwertzerlegung lautet [Cli06]:

$$\mathbf{B}_4 := \underbrace{\mathbf{U}_4}_{=: \mathbf{A}_2} \underbrace{\mathbf{\Sigma}_4 \mathbf{V}_4^T}_{=: \mathbf{W}_2}, \quad (6.4)$$

wobei

$$\mathbf{U}_4 := (\mathbf{U})_{\llbracket 1,m \rrbracket \times \llbracket 1,4 \rrbracket}, \quad (6.5)$$

$$\mathbf{\Sigma}_4 := (\mathbf{\Sigma})_{\llbracket 1,4 \rrbracket \times \llbracket 1,4 \rrbracket}, \quad (6.6)$$

$$\mathbf{V}_4 := (\mathbf{V})_{\llbracket 1,n \rrbracket \times \llbracket 1,4 \rrbracket}. \quad (6.7)$$

Diese Variante der Singulärwertzerlegung minimiert nach dem Eckart–Young Theorem den mittleren quadratischen Fehler [Eck36, Gol13]:

$$\min_{\substack{\mathbf{B}' \in \mathbb{R}^{4 \times 4} \\ \text{rang}(\mathbf{B}')=4}} \|\mathbf{B}' - \mathbf{B}\|_F = \|\mathbf{B}_4 - \mathbf{B}\|_F. \quad (6.8)$$

Sind die Elemente von \mathbf{B} identisch normalverteilt, so liefert die Singulärwertzerlegung einen Maximum-Likelihood-Schätzer für die Faktorisierung von

$E\{\mathbf{B}\}$ in zwei Matrizen $\mathbf{A}_1 \in \mathbb{R}^{m \times 4}$ und $\mathbf{W}_1 \in \mathbb{R}^{4 \times n}$, wenn diese als Parameter der Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktion von \mathbf{B} aufgefasst werden. Die Faktorisierung von $E\{\mathbf{B}\}$ ist nicht eindeutig. In den nachfolgenden Berechnungen wird das Sensorrauschen ignoriert und die in Abschnitt 6.1 getroffenen Annahmen als erfüllt angenommen, außer es wird explizit etwas anderes erwähnt. In diesem Fall gilt $\mathbf{B}_4 = E\{\mathbf{B}\} = \mathbf{B}$ und aufgrund der Ranggleichungen gilt $\text{rang}(\mathbf{B}) = 4$ [Hoh13]. Die Faktorisierung von \mathbf{B} ist bis auf eine Matrixmultiplikation mit einer regulären 4×4 -Matrix eindeutig [Piz99]:

$$\exists \mathbf{C}_{2 \rightarrow 1} \in \mathbb{R}^{4 \times 4} : \mathbf{A}_1 = \mathbf{A}_2 \mathbf{C}_{2 \rightarrow 1}^{-1} \wedge \mathbf{C}_{2 \rightarrow 1} \mathbf{W}_2 = \mathbf{W}_1. \quad (6.9)$$

Die Tiefstellung $2 \rightarrow 1$ symbolisiert, dass $\mathbf{C}_{2 \rightarrow 1}$ die Modulationsmatrix mit dem Index 2 auf die Modulationsmatrix mit dem Index 1 abbildet. Daraus folgt, dass $\mathbf{C}_{2 \rightarrow 1} = \mathbf{C}_{1 \rightarrow 2}^{-1}$. Diese Notation wird im Folgenden für beliebige Indizes verwendet. Eine Konsequenz von Gleichung (6.9) ist, dass von anfänglich $4m + 3n$ Unbekannten der Matrizen \mathbf{A}_1 und \mathbf{W}_1 nur noch 16 Unbekannte der Matrix $\mathbf{C}_{2 \rightarrow 1}$ übrigbleiben, da \mathbf{A}_2 und \mathbf{W}_2 aus Gleichung (6.4) bekannt sind. Aus den Gleichungen (6.1) und (6.9) lässt sich die erste Zeile von $\mathbf{C}_{2 \rightarrow 1}$ berechnen:

$$(\mathbf{C}_{2 \rightarrow 1})_{\{1\} \times \llbracket 1, 4 \rrbracket} \mathbf{W}_2 = (\mathbf{W}_1)_{\{1\} \times \llbracket 1, n \rrbracket} = \mathbf{1}_n^\top \quad (6.10)$$

$$\Rightarrow (\mathbf{C}_{2 \rightarrow 1})_{\{1\} \times \llbracket 1, 4 \rrbracket} = \mathbf{1}_n^\top \mathbf{W}_2^+. \quad (6.11)$$

Die bekannten Matrizen \mathbf{A}_2 und \mathbf{W}_2 werden nun wie folgt transformiert:

$$\mathbf{A}_3 := \mathbf{A}_2 \mathbf{C}_{3 \rightarrow 2}, \quad (6.12)$$

$$\mathbf{W}_3 := \mathbf{C}_{2 \rightarrow 3} \mathbf{W}_2, \quad (6.13)$$

wobei

$$\mathbf{C}_{2 \rightarrow 3} := \begin{pmatrix} ((\mathbf{C}_{2 \rightarrow 1})_{11}) & (\mathbf{C}_{2 \rightarrow 1})_{\{1\} \times \llbracket 2, 4 \rrbracket} \\ \mathbf{o}_3 & \mathbf{I}_3 \end{pmatrix}. \quad (6.14)$$

Die berechnete Modulationsmatrix \mathbf{W}_3 enthält nun Einsen in der ersten Zeile:

$$(\mathbf{W}_3)_{\{1\} \times \llbracket 1, n \rrbracket} = (\mathbf{C}_{2 \rightarrow 1})_{\{1\} \times \llbracket 1, n \rrbracket} \mathbf{W}_2 = (\mathbf{W}_1)_{\{1\} \times \llbracket 1, n \rrbracket} = \mathbf{1}_n^\top. \quad (6.15)$$

Es sei $\mathbf{C}_{3 \rightarrow 1} = \mathbf{C}_{2 \rightarrow 1} \mathbf{C}_{3 \rightarrow 2}$, woraus $\mathbf{C}_{3 \rightarrow 1} \mathbf{W}_3 = \mathbf{W}_1$ bzw. $\mathbf{W}_3 = \mathbf{C}_{1 \rightarrow 3} \mathbf{W}_1$ folgt. Einsetzen in Gleichung (6.15) liefert:

$$\begin{aligned} (\mathbf{W}_3)_{\{1\} \times \llbracket 1, n \rrbracket} &= (\mathbf{C}_{1 \rightarrow 3})_{\{1\} \times \llbracket 1, 4 \rrbracket} (\mathbf{W}_1)_{\llbracket 1, 4 \rrbracket \times \llbracket 1, n \rrbracket} \\ &= (\mathbf{C}_{1 \rightarrow 3})_{11} \mathbf{I}_n^\top + (\mathbf{C}_{1 \rightarrow 3})_{\{1\} \times \llbracket 2, 4 \rrbracket} (\mathbf{W}_1)_{\llbracket 2, 4 \rrbracket \times \llbracket 1, n \rrbracket} = \mathbf{I}_n^\top \end{aligned} \quad (6.16)$$

$$\Leftrightarrow (\mathbf{C}_{1 \rightarrow 3})_{\{1\} \times \llbracket 2, 4 \rrbracket} (\mathbf{W}_1)_{\llbracket 2, 4 \rrbracket \times \llbracket 1, n \rrbracket} = (1 - (\mathbf{C}_{1 \rightarrow 3})_{11}) \mathbf{I}_n^\top. \quad (6.17)$$

Da die Vektoren $\text{col} \left((\mathbf{W}_1)_{\llbracket 2, 4 \rrbracket \times \llbracket 1, n \rrbracket} \right) \subset \mathcal{S}^2$ auf der Poincaré-Kugel liegen und $\text{rang} \left((\mathbf{W}_1)_{\llbracket 2, 4 \rrbracket \times \llbracket 1, n \rrbracket} \right) = 3$, gilt:

$$(\mathbf{C}_{1 \rightarrow 3})_{\{1\} \times \llbracket 2, 4 \rrbracket} = \mathbf{o}_3, \quad (\mathbf{C}_{1 \rightarrow 3})_{11} = 1. \quad (6.18)$$

Die gesuchte Matrix $\mathbf{C}_{3 \rightarrow 1}$ und deren Inverse lassen sich darstellen als:

$$\mathbf{C}_{3 \rightarrow 1} = \left(\begin{array}{c|ccc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline \mathbf{t} & & \mathbf{T} & \end{array} \right), \quad \mathbf{C}_{1 \rightarrow 3} = \left(\begin{array}{c|ccc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline -\mathbf{T}^{-1} \mathbf{t} & & \mathbf{T}^{-1} & \end{array} \right) \quad (6.19)$$

wobei $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^3$ ein gesuchter Vektor und $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ eine gesuchte reguläre Matrix ist.

6.3 Teilproblem elliptische Regression

Die lineare Abbildung von der unbekannt Matrix \mathbf{W}_1 auf die bekannte Matrix \mathbf{W}_3 mithilfe der unbekannt Matrix $\mathbf{C}_{1 \rightarrow 3}$ kann anhand von Gleichung (6.19) geometrisch leicht veranschaulicht werden: $\mathbf{C}_{1 \rightarrow 3}$ entspricht einer affinen Transformation auf homogenen Koordinaten, wobei der Skalierungsfaktor nicht wie sonst üblich die letzte, sondern im Falle von Stokes-Vektoren die erste Komponente darstellt (vgl. [Aza07, Bey16]). Die gesuchte Matrix $\mathbf{C}_{1 \rightarrow 3}$ bildet Punkte auf der Einheitsphäre auf einen Ellipsoid ab, der i. Allg. nicht zentriert ist. Da die normierten Stokes-Vektoren in \mathbf{W}_1

die Norm $\sqrt{2}$ haben, gilt folgende Identität:

$$\forall i : (\mathbf{W}_3^T)_{\{i\} \times \llbracket 1,4 \rrbracket} \mathbf{C}_{3 \rightarrow 1}^T \mathbf{C}_{3 \rightarrow 1} (\mathbf{W}_3)_{\llbracket 1,4 \rrbracket \times \{i\}} = \left\| (\mathbf{W}_1)_{\llbracket 1,4 \rrbracket \times \{i\}} \right\|^2 = 2. \quad (6.20)$$

Eine alternative Darstellungsmöglichkeit ist nach Gleichung (6.19):

$$\forall i : \left((\mathbf{W}_3)_{\{i\} \times \llbracket 2,4 \rrbracket} + \mathbf{T}^{-1} \mathbf{t} \right)^T \mathbf{T}^T \mathbf{T} \left((\mathbf{W}_3)_{\{i\} \times \llbracket 2,4 \rrbracket} + \mathbf{T}^{-1} \mathbf{t} \right) = 1. \quad (6.21)$$

Bei verrauschten Messdaten oder verletzten Annahmen (vgl. Abschnitt 6.1) gilt das Gleichheitssymbol nur näherungsweise. In diesem Fall spannen die Ortsvektoren aus \mathbf{W}_3 den \mathbb{R}^4 auf und liegen nicht mehr exakt auf einem dreidimensionalen Ellipsoid in einer Hyperebene. Im dreidimensionalen Raum lassen sich aus den bekannten Vektoren \mathbf{W}_3 aus Gleichung (6.21) der Vektor $\mathbf{T}^{-1} \mathbf{t}$ und die Matrix $\mathbf{T}^T \mathbf{T}$ auf Basis bekannter Regressionsverfahren für Ellipsoide berechnen [Ber10, Mar04]. Aufgrund der speziellen Aufgabenstellung erfolgt die Berechnung von $\mathbf{C}_{3 \rightarrow 1}^T \mathbf{C}_{3 \rightarrow 1}$ anhand eines angepassten Regressionsalgorithmus für Ellipsoide, welcher hier jedoch nicht weiter ausgeführt wird.

Die auf Basis der elliptischen Regression berechnete positiv definite Matrix $(\mathbf{C}_{3 \rightarrow 1}^T \mathbf{C}_{3 \rightarrow 1})_{\llbracket 2,4 \rrbracket \times \llbracket 2,4 \rrbracket} = \mathbf{T}^T \mathbf{T}$ lässt sich anhand der Cholesky-Faktorisierung als Produkt einer oberen Dreiecksmatrix \mathbf{R}_1 , einer Diagonalmatrix \mathbf{D}_1 mit positiven Einträgen und deren Transponierten darstellen, wobei \mathbf{R}_1 und \mathbf{D}_1 eindeutig bestimmt sind:

$$\mathbf{T}^T \mathbf{T} = \mathbf{R}_1^T \mathbf{D}_1 \mathbf{D}_1 \mathbf{R}_1. \quad (6.22)$$

Aus der QR-Faktorisierung der unbekanntenen Matrix \mathbf{T} ergeben sich zwei wohldefinierte Matrizen \mathbf{Q}_2 und \mathbf{R}_2 :

$$\mathbf{T} = \mathbf{Q}_2 \mathbf{R}_2, \quad (6.23)$$

wobei \mathbf{Q}_2 eine unbekanntene orthogonale Matrix und \mathbf{R}_2 eine unbekanntene obere Dreiecksmatrix mit positiven Diagonaleinträgen ist. Weiterhin kann die

nicht-normierte obere Dreiecksmatrix \mathbf{R}_2 in eindeutiger Weise in eine Diagonalmatrix $\mathbf{D}_3 = \text{diag}((\mathbf{R}_2)_{11}, (\mathbf{R}_2)_{22}, (\mathbf{R}_2)_{33})$ mit positiven Diagonaleinträgen und eine normierte obere Dreiecksmatrix \mathbf{R}_3 faktorisiert werden:

$$\mathbf{R}_2 = \mathbf{D}_3 \mathbf{R}_3, \quad (6.24)$$

woraus folgt:

$$\mathbf{T}^\top \mathbf{T} = \mathbf{R}_3^\top \mathbf{D}_3^2 \mathbf{R}_3. \quad (6.25)$$

Da die Cholesky-Faktorisierung eindeutig ist, gilt:

$$\mathbf{D}_3 = \mathbf{D}_1, \quad \mathbf{R}_3 = \mathbf{R}_1 \quad (6.26)$$

und man erhält mit Gleichung (6.24) die gesuchte Matrix $\mathbf{R}_2 = \mathbf{D}_1 \mathbf{R}_1$. Nun wird abermals eine Transformation der bekannten Matrizen \mathbf{A}_3 und \mathbf{W}_3 durchgeführt:

$$\mathbf{A}_4 := \mathbf{A}_3 \mathbf{C}_{4 \rightarrow 3}, \quad (6.27)$$

$$\mathbf{W}_4 := \mathbf{C}_{3 \rightarrow 4} \mathbf{W}_3, \quad (6.28)$$

wobei

$$\mathbf{C}_{3 \rightarrow 4} := \left(\begin{array}{c|ccc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline \mathbf{R}_2 \mathbf{T}^\top \mathbf{T} \mathbf{T}^{-1} \mathbf{t} & & \mathbf{R}_2 & \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c|ccc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline \mathbf{Q}_2^{-1} \mathbf{t} & & \mathbf{R}_2 & \end{array} \right) \quad (6.29)$$

Man beachte, dass der erste Spaltenvektor sich aus den bekannten Größen \mathbf{R}_2 , $\mathbf{T}^\top \mathbf{T}$ und $\mathbf{T}^{-1} \mathbf{t}$ zusammensetzt. Zusammen mit den Gleichungen (6.19)

und (6.23) folgt:

$$\mathbf{C}_{4 \rightarrow 1} := (\mathbf{C}_{3 \rightarrow 4} \mathbf{C}_{1 \rightarrow 3})^{-1} = \left(\begin{array}{c|ccc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & & & \\ 0 & & \mathbf{Q}_2^{-1} & \\ 0 & & & \end{array} \right)^{-1} \quad (6.30)$$

Die gesuchte, orthogonale Matrix \mathbf{Q}_2 kann abhängig vom Vorzeichen der Determinante $\det(\mathbf{Q}_2) = \pm 1$ eine eigentliche oder uneigentliche Isometrie beschreiben. Durch Einbringung von Vorwissen über den optischen Aufbau, anhand dessen \mathbf{W}_1 zumindest grob abgeschätzt werden kann, kann das Vorzeichen der Determinante bestimmt werden. Liegt eine uneigentliche Isometrie vor, kann durch weitere Transformation von \mathbf{W}_4 und \mathbf{A}_4 anhand einer Ebenenspiegelung diese in eine eigentliche Isometrie überführt werden. Auf diese Weise lassen sich die 16 Freiheitsgrade der Matrix $\mathbf{C}_{2 \rightarrow 1}$ aus Gleichung (6.9) auf drei Freiheitsgrade der Matrix \mathbf{Q}_2 reduzieren. Die Anzahl der Freiheitsgrade lässt sich nur mit zusätzlichen Annahmen oder weiteren Messdaten unter geänderten Aufnahmebedingungen verringern.

6.4 Teilproblem Bestimmung der Rotation und Orientierung

In der nächsten Stufe der Kalibrierung wird der Spiegel entsprechend der dritten Konfiguration aus Abb. 6.1b angeordnet und die dabei gemessene Intensitätsmatrix als \mathbf{B}_{tr} bezeichnet. Dabei wird sichergestellt, dass das von der Lichtquelle kommende und am Strahlteiler transmittierte Licht absorbiert wird. Zusammen mit den Messwerten $\mathbf{B}_{\text{tr}} := \mathbf{B}$ aus dem vorherigen Abschnitt ergeben sich unter Vernachlässigung von Sensorrauschen folgende Messgleichungen:

$$\mathbf{B}_{\text{rt}} := \overbrace{S_0 (\mathbf{M}_{\text{R}})_{11} \mathbf{A} \mathbf{M}_{\text{rt}} \mathbf{C}_{4 \rightarrow 1}}^{\mathbf{A}_4} \overbrace{\mathbf{C}_{1 \rightarrow 4} \mathbf{W}_1}_{\mathbf{W}_4}, \quad (6.31)$$

$$\mathbf{B}_{\text{tr}} := S_0 (\mathbf{M}_{\text{R}})_{11} \mathbf{A} \mathbf{M}_{\text{tr}} \mathbf{C}_{4 \rightarrow 1} \mathbf{C}_{1 \rightarrow 4} \mathbf{W}_1, \quad (6.32)$$

wobei

$$\mathbf{M}_{\text{rt}} := \mathbf{M}_{\text{B,b}}^{\text{r}} \mathbf{M}_{\text{M}} \mathbf{M}_{\text{B,f}}^{\text{t}}, \quad \mathbf{M}_{\text{tr}} := \mathbf{M}_{\text{B,f}}^{\text{t}} \mathbf{M}_{\text{M}} \mathbf{M}_{\text{B,f}}^{\text{r}}. \quad (6.33)$$

Für zwei Matrizen $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit vollem Rang, wobei $m \geq n$, ergeben sich aus der Definition der Moore-Penrose-Pseudoinversen folgende Eigenschaften:

$$\mathbf{X}^+ \mathbf{X} = \mathbf{I}_n, \quad \mathbf{X}^{\text{T}} (\mathbf{X}^{\text{T}})^+ = \mathbf{I}_n, \quad (\mathbf{Y})^+ = \mathbf{Y}^{-1} \quad (6.34)$$

$$(\mathbf{X}\mathbf{Y})^+ = \mathbf{Y}^{-1} \mathbf{X}^+, \quad (\mathbf{Y}\mathbf{X}^{\text{T}})^+ = (\mathbf{X}^{\text{T}})^+ \mathbf{Y}^{-1}. \quad (6.35)$$

Mit Gleichung (6.32) ergibt sich folgende Identität:

$$\mathbf{B}_{\text{tr}} \mathbf{W}_4^+ = S_0 (\mathbf{M}_{\text{R}})_{11} \mathbf{A} \mathbf{M}_{\text{tr}} \mathbf{C}_{4 \rightarrow 1} \quad (6.36)$$

und mithilfe von $\mathbf{A}_4 = \mathbf{A}_1 \mathbf{C}_{4 \rightarrow 1} = S_0 (\mathbf{M}_{\text{R}})_{11} \mathbf{A} \mathbf{M}_{\text{tr}} \mathbf{C}_{4 \rightarrow 1}$ schließlich:

$$\underbrace{(\mathbf{B}_{\text{tr}} \mathbf{W}_4^+)^+}_{=: \mathbf{B}_{\text{trrt}}} \mathbf{A}_4 \stackrel{(6.36)}{=} (S_0 (\mathbf{M}_{\text{R}})_{11} \mathbf{A} \mathbf{M}_{\text{tr}} \mathbf{C}_{4 \rightarrow 1})^+ \mathbf{A}_4 = \mathbf{C}_{1 \rightarrow 4} \underbrace{(\mathbf{M}_{\text{tr}})^{-1} \mathbf{M}_{\text{tr}}}_{=: \mathbf{M}_{\text{trrt}}} \mathbf{C}_{4 \rightarrow 1} \quad (6.37)$$

Einsetzen der optischen Parameter aus Abschnitt 5.2 in die Matrizen $\mathbf{M}_{\text{B,f}}^{\text{r}}$, $\mathbf{M}_{\text{B,b}}^{\text{r}}$ und $\mathbf{M}_{\text{B,f}}^{\text{t}}$ liefert:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{\text{rt}} &= \mathbf{M}_{\text{L}}(\arctan(\tan \Psi_{\text{r}} \tan \Psi_{\text{t}}), \\ &\quad 3\Delta_{\text{t}} - \Delta_{\text{r}} + \pi, R_{\text{B}} T_{\text{B}} (\cos 2\Psi_{\text{r}} \cos 2\Psi_{\text{t}} + 1)), \end{aligned} \quad (6.38)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{\text{tr}} &= \mathbf{M}_{\text{L}}(\arctan(\tan \Psi_{\text{r}} \tan \Psi_{\text{t}}), \\ &\quad \Delta_{\text{r}} + \Delta_{\text{t}} + \pi, R_{\text{B}} T_{\text{B}} (\cos 2\Psi_{\text{r}} \cos 2\Psi_{\text{t}} + 1)), \end{aligned} \quad (6.39)$$

$$\mathbf{M}_{\text{trrt}} = \mathbf{M}_{\Delta} \overbrace{(2(\Delta_{\text{t}} - \Delta_{\text{r}}))}^{=: \Delta_{\text{tr}}}. \quad (6.40)$$

Hierbei wurden folgende Identitäten ausgenutzt:

$$(\mathbf{M}_L(\Psi, \Delta, R))^{-1} = \mathbf{M}_L(90^\circ - \Psi, -\Delta, 1/(R \sin 2\Psi^2)), \quad (6.41)$$

$$\mathbf{M}_L(\Psi, \Delta, R) = 2R\mathbf{M}_\Psi(\Psi)\mathbf{M}_\Delta(\Delta), \quad (6.42)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_L(\Psi_a, \Delta_a, R_a)\mathbf{M}_L(\Psi_b, \Delta_b, R_b) &= \mathbf{M}_L(\arctan(\tan \Psi_a \tan \Psi_b), \\ &\Delta_a + \Delta_b, R_a R_b (\cos 2\Psi_a \cos 2\Psi_b + 1)). \end{aligned} \quad (6.43)$$

Zudem lässt sich zeigen, dass die Müller-Matrizen von isotropen Medien mit einer gemeinsamen Einfallsebene bezüglich der Matrixmultiplikation eine kommutative Gruppe bilden¹.

Aus den Gleichungen (6.30), (6.37) und (6.40) folgt:

$$\underbrace{(\mathbf{B}_{\text{trrt}})_{\|2,4\| \times \|2,4\|}}_{=: \mathbf{B}_{\text{trrt}}^{\text{sm}}} = \underbrace{(\mathbf{C}_{1 \rightarrow 4})_{\|2,4\| \times \|2,4\|}}_{=: \mathbf{C}_{1 \rightarrow 4}^{\text{sm}}} \underbrace{(\mathbf{M}_{\text{trrt}})_{\|2,4\| \times \|2,4\|}}_{=: \mathbf{M}_{\text{trrt}}^{\text{sm}}} \underbrace{(\mathbf{C}_{4 \rightarrow 1})_{\|2,4\| \times \|2,4\|}}_{=: \mathbf{C}_{4 \rightarrow 1}^{\text{sm}}}, \quad (6.44)$$

wobei die Matrizen $\mathbf{B}_{\text{trrt}}^{\text{sm}}$ und $\mathbf{M}_{\text{trrt}}^{\text{sm}}$ gesucht und $\mathbf{C}_{1 \rightarrow 4}^{\text{sm}}$ sowie $\mathbf{C}_{4 \rightarrow 1}^{\text{sm}}$ bekannt sind. Die Matrizen entsprechen Drehungen im \mathbb{R}^3 . Die Matrix auf der linken Seite ist durch eine Drehachse \mathbf{e}_{tot} und einen Drehwinkel α_{tot} darstellbar:

$$\mathbf{B}_{\text{trrt}}^{\text{sm}} = \mathbf{R}(\mathbf{e}_{\text{tot}}, \alpha_{\text{tot}}). \quad (6.45)$$

Eine beliebige Drehmatrix \mathbf{R} lässt sich anhand von Euler'schen Winkeln in drei Drehmatrizen zerlegen [Gol12]²:

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}(\mathbf{e}_x, \alpha_1)\mathbf{R}(\mathbf{e}_z, \alpha_2)\mathbf{R}(\mathbf{e}_x, \alpha_3) \quad (6.46)$$

Betrachtet man diese Drehung als eine Drehung der Poincaré-Kugel, so entsprechen die Winkel $-\alpha_1$ und $-\alpha_3$ einer Verzögerung und $-\alpha_2$ dem Azimut

¹ Dabei sei $R \in \mathbb{R}_+$, um die Abgeschlossenheit bzgl. der Inversion zu gewährleisten.

² Entgegen der üblichen Konvention werden die Drehungen zuerst um die x -, dann um die z - und schließlich wieder um die x -Achse ausgeführt.

der optischen Rotation. In analoger Weise können die Drehmatrizen $\mathbf{C}_{4 \rightarrow 1}^{\text{sm}}$, $\mathbf{C}_{1 \rightarrow 4}^{\text{sm}}$ und $\mathbf{M}_{\text{trrt}}^{\text{sm}}$ parametrisiert werden:

$$\mathbf{C}_{4 \rightarrow 1}^{\text{sm}} = \mathbf{R}(\mathbf{e}_x, \Delta_1) \mathbf{R}(\mathbf{e}_z, 2\phi_2) \mathbf{R}(\mathbf{e}_x, \Delta_3), \quad (6.47)$$

$$\mathbf{C}_{1 \rightarrow 4}^{\text{sm}} = \mathbf{R}(\mathbf{e}_x, -\Delta_3) \mathbf{R}(\mathbf{e}_z, -2\phi_2) \mathbf{R}(\mathbf{e}_x, -\Delta_1), \quad (6.48)$$

$$\mathbf{M}_{\text{trrt}}^{\text{sm}} = \mathbf{R}(\mathbf{e}_x, -\Delta_{\text{tr}}), \quad (6.49)$$

wobei die Vektoren $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ ein Rechtssystem bilden und die Winkel Δ_1 , ϕ_2 , Δ_3 sowie Δ_{tr} aus den Euler'schen Winkeln abgeleitet werden. Die Multiplikation entsprechend der Gleichung (6.44) ergibt:

$$\mathbf{B}_{\text{trrt}}^{\text{sm}} = \mathbf{R}(\mathbf{e}_x, -\Delta_3) \mathbf{R}(\mathbf{e}_z, -2\phi_2) \mathbf{R}(\mathbf{e}_x, -\Delta_{\text{tr}}) \mathbf{R}(\mathbf{e}_z, 2\phi_2) \mathbf{R}(\mathbf{e}_x, \Delta_3). \quad (6.50)$$

Es ist somit nicht möglich $\mathbf{C}_{4 \rightarrow 1}$ aus den Messwerten $\mathbf{B}_{\text{trrt}}^{\text{sm}}$ zu berechnen, da der durch Δ_1 beschriebene Freiheitsgrad sich in Gleichung (6.44) herauskürzt. Um die übrigen Winkel zu bestimmen, ist es hilfreich, Quaternionen statt Drehmatrizen zu verwenden. Eine beliebige Drehmatrix $\mathbf{R}(\mathbf{e}, \alpha)$, die durch eine Drehachse \mathbf{e} und einen Drehwinkel α parametrisiert ist, entspricht dem Quaternion: [Jai95]:

$$\underline{q} = \cos \frac{\alpha}{2} + i(\mathbf{e})_1 \sin \frac{\alpha}{2} + j(\mathbf{e})_2 \sin \frac{\alpha}{2} + k(\mathbf{e})_3 \sin \frac{\alpha}{2}. \quad (6.51)$$

Überführt man alle Drehmatrizen aus Gleichung (6.50) in Quaternionen unter Verwendung des Graßmann-Produkts für die Multiplikation, so erhält man die Gleichung:

$$\begin{aligned} & \cos \frac{\alpha_{\text{tot}}}{2} + i(\mathbf{e}_{\text{tot}})_1 \sin \frac{\alpha_{\text{tot}}}{2} + j(\mathbf{e}_{\text{tot}})_2 \sin \frac{\alpha_{\text{tot}}}{2} + k(\mathbf{e}_{\text{tot}})_3 \sin \frac{\alpha_{\text{tot}}}{2} \\ &= \cos \frac{\Delta_{\text{tr}}}{2} + i \sin \frac{\Delta_{\text{tr}}}{2} \cos 2\phi_2 - j \sin \frac{\Delta_{\text{tr}}}{2} \sin 2\phi_2 \cos \Delta_3 \\ &+ k \sin \frac{\Delta_{\text{tr}}}{2} \sin 2\phi_2 \sin \Delta_3. \end{aligned} \quad (6.52)$$

Aus den bekannten Größen α_{tot} und \mathbf{e}_{tot} lassen sich die Unbekannten aus Gleichung (6.52) berechnen:

$$\Delta'_{\text{tr}} = \pm \alpha_{\text{tot}}, \quad (6.53)$$

$$\phi'_2 = \pm \arccos \frac{(\mathbf{e}_{\text{tot}})_1}{2}, \quad (6.54)$$

$$\Delta'_3 = \arctan 2 \left(\frac{(\mathbf{e}_{\text{tot}})_3}{\sin \phi'_2}, -\frac{(\mathbf{e}_{\text{tot}})_2}{\sin \phi'_2} \right) \quad (6.55)$$

Die Berechnung liefert nur für Strahlteiler mit $\Delta_{\text{tr}} \neq 0$ ein auswertbares Ergebnis, da ansonsten die Gleichung (6.44) aufgrund von $\mathbf{B}_{\text{trrt}}^{\text{sm}} = \mathbf{M}_{\text{trrt}}^{\text{sm}} = \mathbf{I}_3$ keine Information enthält. Die Winkel $(\Delta'_{\text{tr}}, \phi'_2, \Delta'_3)$ sind nicht eindeutig bestimmt und stellen somit eine Lösungsmenge \mathcal{M} der gesuchten Winkel $(\Delta_{\text{tr}}, \phi_2, \Delta_3)$ dar. Hinzu kommt, dass $(\mathbf{e}_{\text{tot}}, \alpha_{\text{tot}})$ und $(-\mathbf{e}_{\text{tot}}, -\alpha_{\text{tot}})$ dieselbe Rotation bzw. Drehmatrix beschreiben und ebenfalls nicht eindeutig sind. Da nur die Matrix $\mathbf{C}_{1 \rightarrow 4}$ gesucht ist, und nicht etwa die Winkel $(\Delta_1, \phi_2, \Delta_3)$, reduziert sich die Anzahl möglicher Kombinationen und es gilt (vgl. Gleichung (6.48)¹):

$$\begin{aligned} & \forall (\Delta'_{\text{tr}}, \phi'_2, \Delta'_3) \in \mathcal{M} \exists s_1, s_2 \in \{-1, 1\} : \\ & \mathbf{M}_{\text{r}}(-\phi'_2) \mathbf{M}_{\Delta}(-\Delta'_3) \mathbf{C}_{1 \rightarrow 4} = \mathbf{M}_{\Delta}(\Delta_1) \mathbf{diag}(1, s_1, s_2, s_1 s_2). \end{aligned} \quad (6.56)$$

Um die Mehrdeutigkeiten bei den Vorzeichen aufzulösen, wird wiederum das Vorwissen über den optischen Aufbau genutzt. Daher kann im Folgenden die Gleichheit der bekannten Größen $(\Delta'_{\text{tr}}, \phi'_2, \Delta'_3)$ und der gesuchten Größen $(\Delta_{\text{tr}}, \phi_2, \Delta_3)$ angenommen werden. Anschließend werden folgende Definitionen eingeführt:

$$\mathbf{C}_{4 \rightarrow 5} := \mathbf{M}_{\text{r}}(-\phi_2) \mathbf{M}_{\Delta}(-\Delta_3), \quad (6.57)$$

$$\mathbf{A}_5 := \mathbf{A}_4 \mathbf{C}_{5 \rightarrow 4} = \mathbf{A}_1 \mathbf{M}_{\Delta}(-\Delta_1), \quad (6.58)$$

$$\mathbf{W}_5 := \mathbf{C}_{4 \rightarrow 5} \mathbf{W}_4 = \mathbf{M}_{\Delta}(\Delta_1) \mathbf{W}_1. \quad (6.59)$$

¹ Man beachte den Vorzeichenwechsel zwischen Dreh- und Müller-Matrizen.

Gleichung (6.56) wird zu:

$$\mathbf{C}_{1 \rightarrow 5} = \mathbf{C}_{4 \rightarrow 5} \mathbf{C}_{1 \rightarrow 4} = \mathbf{M}_{\Delta}(\Delta_1). \quad (6.60)$$

Für die Bestimmung der Matrizen \mathbf{A}_1 und \mathbf{W}_1 anhand des obigen Algorithmus ist daher noch ein Freiheitsgrad zu bestimmen, der durch Δ_1 gegeben ist. Zudem ist das eigentliche Ziel der Kalibrierung die Berechnung der Matrizen \mathbf{A}_B und \mathbf{W}_B aus Gleichung (6.2). Es stellt sich daher die Frage, ob ein anderer Algorithmus existiert, mit dem man die Matrizen \mathbf{A}_B und \mathbf{W}_B aus \mathbf{B}_{rt} und \mathbf{B}_{tr} berechnen kann. Diese Frage lässt sich verneinen, wie aus den Gleichungen (6.2), (6.38) und (6.39) hervorgeht. Selbst wenn Δ_1 und somit \mathbf{W}_1 bekannt wären, wäre der zusammengefasste lineare Dichroismus des Strahlteilers für die Konfiguration eins und drei aus Abb. 6.1a bzw. Abb. 6.1b identisch. Die Müller-Matrix des linearen Dichroismus beträgt für beide Lichtpfade $\mathbf{M}_{\Psi}(\arctan(\tan \Psi_r, \tan \Psi_t))$, so dass die Umpositionierung des Spiegels keinen Informationsgewinn hervorbringt. Insbesondere können die einzelnen Beiträge von $\mathbf{M}_{B,b}^t$ und $\mathbf{M}_{B,f}^t$ zum gesamten linearen Dichroismus nicht separiert werden, was für eine Bestimmung von \mathbf{W}_B und \mathbf{A}_B jedoch erforderlich wäre. Was hingegen aus den beiden unterschiedlichen Messungen \mathbf{B}_{rt} und \mathbf{B}_{tr} u. a. abgeleitet werden kann, ist der Azimutwinkel der Einfallsebene, um das Referenzsystem auszurichten.

6.5 Teilproblem Charakterisierung des Strahlteilers

Die Messung der ellipsometrischen Winkel Ψ_t und Δ_t des Strahlteilers in Transmissionsanordnung bildet eine Möglichkeit, die gesuchten Matrizen \mathbf{W}_B und \mathbf{A}_B bis auf einen Skalierungsfaktor T_B zu bestimmen. Die Messung der unbekanntenen Verzögerung Δ_1 ist hingegen nicht erforderlich. Stattdessen ist die Bestimmung von $\Delta_t - \Delta_1$ ausreichend; siehe Gleichungen (6.2), (6.58)

und (6.59):

$$\mathbf{A}_B = T_B^{-1} \mathbf{A}_5 \mathbf{C}_{6 \rightarrow 5} \mathbf{M}_M, \quad (6.61)$$

$$\mathbf{W}_B = T_B \mathbf{C}_{5 \rightarrow 6} \mathbf{W}_5. \quad (6.62)$$

wobei

$$\mathbf{C}_{5 \rightarrow 6} := \mathbf{M}_\Psi(\Psi_t) \mathbf{M}_\Delta(\Delta_t - \Delta_1). \quad (6.63)$$

Die gesuchten ellipsometrischen Winkel Ψ_t und $\Delta_t - \Delta_1$ lassen sich mit einer weiteren Messung \mathbf{B}_P berechnen; siehe Konfiguration zwei in Abb. 6.1a. Der Spiegel wird dabei auf dem Transmissionspfad des Strahlteilers angeordnet und vor dem Spiegel wird ein Polfilter in unbekannter Winkellage ϕ_P platziert. Bei der Kalibrierung bietet die Verwendung von Polarisatoren gegenüber Verzögerern Vorteile, da Polarisatoren im visuellen Wellenlängenbereich deutlich geringere Fertigungstoleranzen aufweisen [Azz89a]. Die Messabbildung lautet:

$$\mathbf{B}_P = S_0 (\mathbf{M}_R)_{11} \mathbf{A} \mathbf{M}_{B,b}^r \mathbf{M}_{Pr}(-\phi_P) \mathbf{M}_M \mathbf{M}_{Pr}(\phi_P) \mathbf{M}_{B,f}^t \mathbf{W}_1, \quad (6.64)$$

wobei $\mathbf{M}_{Pr}(\alpha) := \mathbf{M}_{Er}(\mathbf{M}_P, \alpha) = \mathbf{M}_t(-\alpha) \mathbf{M}_P \mathbf{M}_t(\alpha)$. Zunächst wird eine nicht-depolarisierende Müller-Matrix $\mathbf{M}_{P,rt}$ definiert und entsprechend der Gleichungen (6.2), (6.58) und (6.59) umgeformt:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{P,rt} &:= (\mathbf{A}_5)^+ \mathbf{B}_P (\mathbf{W}_5)^+ \\ &= \mathbf{M}_\Delta(\Delta_1) (\mathbf{M}_{B,f}^t)^{-1} \mathbf{M}_M \mathbf{M}_{Pr}(-\phi_P) \mathbf{M}_M \mathbf{M}_{Pr}(\phi_P) \mathbf{M}_{B,f}^t \mathbf{M}_\Delta(-\Delta_1). \end{aligned} \quad (6.65)$$

Die Transition von $\mathbf{M}_{P,rt}$ in den Jones-Formalismus durch Gleichung (3.90) ergibt die Jones-Matrix $\mathbf{J}_{-P,rt}$:

$$\mathbf{J}_{-P,rt} = \begin{pmatrix} \cos^2 \phi_P & -\frac{1}{2} e^{i(\Delta_t - \Delta_1)} \sin 2\phi_P \cot \Psi_t \\ -\frac{1}{2} e^{-i(\Delta_t - \Delta_1)} \sin 2\phi_P \tan \Psi_t & \sin^2 \phi_P \end{pmatrix}. \quad (6.66)$$

Dies führt direkt zu den gesuchten Winkeln:

$$\phi_p = \arctan \sqrt{\frac{\left(\begin{smallmatrix} \mathbf{J} \\ -\mathbf{p}, \text{rt} \end{smallmatrix}\right)_{22}}{\left(\begin{smallmatrix} \mathbf{J} \\ -\mathbf{p}, \text{rt} \end{smallmatrix}\right)_{11}}}, \quad (6.67)$$

$$\Psi_t = \arctan \sqrt{\left| \frac{\left(\begin{smallmatrix} \mathbf{J} \\ -\mathbf{p}, \text{rt} \end{smallmatrix}\right)_{21}}{\left(\begin{smallmatrix} \mathbf{J} \\ -\mathbf{p}, \text{rt} \end{smallmatrix}\right)_{12}} \right|}, \quad (6.68)$$

$$\Delta_t - \Delta_1 = \frac{1}{2} \arg \left(\frac{\left(\begin{smallmatrix} \mathbf{J} \\ -\mathbf{p}, \text{rt} \end{smallmatrix}\right)_{12}}{\left(\begin{smallmatrix} \mathbf{J} \\ -\mathbf{p}, \text{rt} \end{smallmatrix}\right)_{21}} \right), \quad (6.69)$$

wobei $\phi_p \in [0, 90^\circ]$ angenommen wird und ein Wert von $\phi_p = 45^\circ$ die Messunsicherheit von Ψ_t und $\Delta_t - \Delta_1$ minimiert.

6.6 Zusammenfassung

Das vorgestellte Kalibrierverfahren für die RPE ermöglicht die Berechnung der Modulationsmatrix \mathbf{W}_B und der Analysematrix \mathbf{A}_B unter relativ moderaten Annahmen. Es werden bis auf einen Polfilter und einen Spiegel keine Kalibrierproben benötigt. Da das Verfahren nicht auf kalibrierten Proben beruht, eignet es sich besonders für die abbildende Makro-Ellipsometrie. Es gibt dennoch eine Reihe von Optimierungsmöglichkeiten. Der Kalibrieralgorithmus ist zwar robust gegenüber Sensorrauschen. Allerdings basiert er nicht auf der Schätztheorie und ist nicht hinsichtlich statistischer Gütekriterien wie Erwartungstreue und Effizienz optimiert¹. Um das Rauschen besser zu berücksichtigen und die Messunsicherheit der Kalibrierung zu berechnen, ließe sich das Kalibrierverfahren auf eine wahrscheinlichkeitstheoretisch solidere Basis stellen. Die Matrizen \mathbf{A}_B und \mathbf{W}_B könnten mittels der Maximum-Likelihood-Methode aus \mathbf{B}_{rt} , \mathbf{B}_{tr} und \mathbf{B}_p über eine nichtlineare Optimierung berechnet

¹ Motiviert wurden die Einschränkungen auf den rauschfreien Fall durch die Methode zur Rauschunterdrückung aus Anhang A.9

werden. Dabei müsste als Nebenbedingung in die Optimierung einfließen, dass die Vektoren aus \mathbf{W}_B Punkte auf einem Ellipsoid bilden. Andernfalls wäre zuerst die Eindeutigkeit der Lösung zu prüfen. Bei der Evaluation des Kalibrierverfahrens wurde anstatt eines Spiegels ein Retroreflektor verwendet. Ein großer Vorteil ist dabei die deutlich vereinfachte Justierung, da die Messwerte insensitive gegenüber kleinen Neigungen der Reflektorebene sind. Demgegenüber führen bei einem Spiegel bereits kleinste Neigungsänderungen vom senkrechten Einfall zu einem starken Signalabfall. Die Verwendung des Retroreflektors hat jedoch den Nachteil, dass das verwendete Rauschmodell mit einem additiven weißen Gauß'schen Rauschen nicht mehr adäquat ist, da die Mikrostruktur des Retroreflektors einen multiplikativen Rauschterm zur Beschreibung des Reflexionsgrads erfordert. Schließlich ist die Emission von Stokes-Vektoren durch gleichmäßige Abtastung der Poincaré-Kugel nicht optimal, da man dadurch eine minimale Konditionszahl für die Matrix \mathbf{W}_1 anstatt für die Matrix \mathbf{W}_B erhält. Hat man die Kenngrößen des Strahlteilers einmal grob bestimmt, ließe sich eine geeignetere Abtastung der Poincaré-Kugel berechnen.

7 Experimentelle Ergebnisse

Die theoretischen Ergebnisse der Kapitel 3 bis 6 werden nachfolgend experimentell überprüft. Hierfür werden überwiegend Polarisationsmessungen des abbildenden Ellipsometers herangezogen. Messdaten des Laserscanner-Messsystems, des spektroskopischen Ellipsometers und nicht-polarimetrische Messungen werden bei der Evaluation jedoch ebenfalls einbezogen.

7.1 Vermessung von Retroreflexfolien mit spektroskopischer Ellipsometrie

In diesem Abschnitt wird die spektrale Abhängigkeit der Müller-Matrix von mikrostrukturierten Retroreflexfolien untersucht. Zur Beschreibung spektral aufgelöster Müller-Matrizen wird zur Vereinfachung die Notation $\mathbf{M}^\lambda(\lambda)$ eingeführt. Für $\lambda_k := 2\pi c_0/\omega_k$ sei $\mathbf{M}^\lambda(\lambda_k) = \mathbf{M}_k$ die spektrale Müller-Matrix aus Gleichung (A.49). In den Abschnitten 4.2 und 4.3 wurde gezeigt, dass ideale, auf Mikrokugeln oder Mikrotripeln basierende Retroreflexfolien unter senkrechtem Einfall in einem breiten Wellenlängenbereich eine Polarisationserhaltung aufweisen. Dieses theoretische Ergebnis wird nachfolgend für unterschiedliche Retroreflexfolien mit spektroskopischer Ellipsometrie experimentell evaluiert. In Abb. 7.1 sind Mikroskopaufnahmen verschiedener Retroreflexfolien abgebildet. Abb. 7.1a zeigt eine Folie basierend auf Mikrokugeln und in den Abb. 7.1b bis 7.1e sind Folien basierend auf Mikrotripeln dargestellt. Die Folien wurden mit dem spektroskopischen Ellipsometer gemessen. Mit UE ist es aufgrund der Koinzidenz von Sende- und Empfangsstrahlengang normalerweise nicht möglich, die Müller-Matrix von Retroreflektoren zu messen.

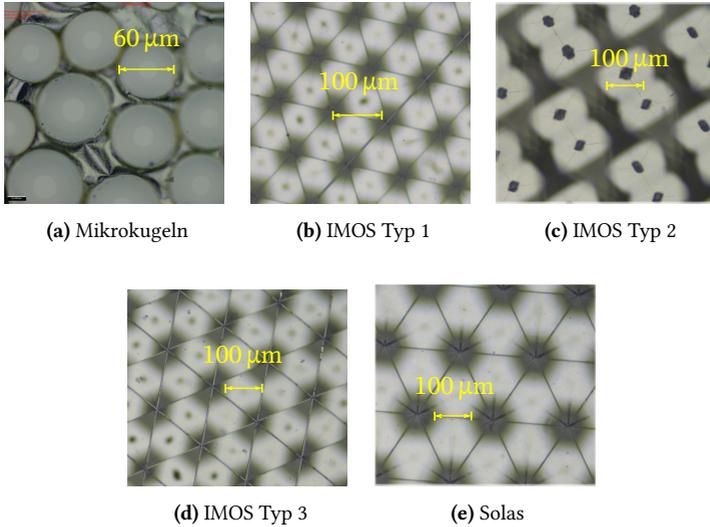


Abbildung 7.1: In den Abbildungen sind Mikroskopaufnahmen von verschiedenen Retroreflexfolien dargestellt, die mit dem Alicona InfiniteFocus aufgenommen wurden. In (a) ist eine Retroreflexfolie bestehend aus offenliegenden Mikrokuugeln abgebildet und in (b)-(e) verschiedene Retroreflexfolien aus pyramidalen Mikrotripeln.

Dieses Problem kann mithilfe eines Strahlteilers gelöst werden, wie in Abb. 7.2 dargestellt. Die gemessene spektrale Müller-Matrix $\mathbf{M}_\lambda(\lambda)$ entspricht dem Produkt der spektralen Müller-Matrizen des Strahlteilers $\mathbf{M}_{B,b}^{r\lambda}(\lambda)$ bzw. $\mathbf{M}_{B,f}^{t\lambda}(\lambda)$ und des Retroreflektors $\mathbf{M}_R^\lambda(\lambda)$:

$$\mathbf{M}^\lambda(\lambda) = \mathbf{M}_{B,b}^{r\lambda}(\lambda)\mathbf{M}_R^\lambda(\lambda)\mathbf{M}_{B,f}^{t\lambda}(\lambda). \tag{7.1}$$

Damit diese Messgleichung korrekt ist, muss der Strahlteiler an den Außenflächen mit einer Antireflex-Beschichtung versehen sein, um Mehrfachreflexionen zu verhindern. Die Müller-Matrix des Retroreflektors wird über die Matrixinversion bestimmt:

$$\mathbf{M}_R^\lambda(\lambda) = \left(\mathbf{M}_{B,b}^{r\lambda}(\lambda)\right)^{-1}\mathbf{M}^\lambda(\lambda)\left(\mathbf{M}_{B,f}^{t\lambda}(\lambda)\right)^{-1}. \tag{7.2}$$

Die spektralen Müller-Matrizen $\mathbf{M}_{B,f}^{t\lambda}(\lambda)$ und $\mathbf{M}_{B,b}^{r\lambda}(\lambda)$ müssen wie in Abb. 7.2b und 7.2c separat gemessen werden, da auch sog. nicht-polarisierende Strahlteiler i. d. R. den Polarisationszustand ändern.

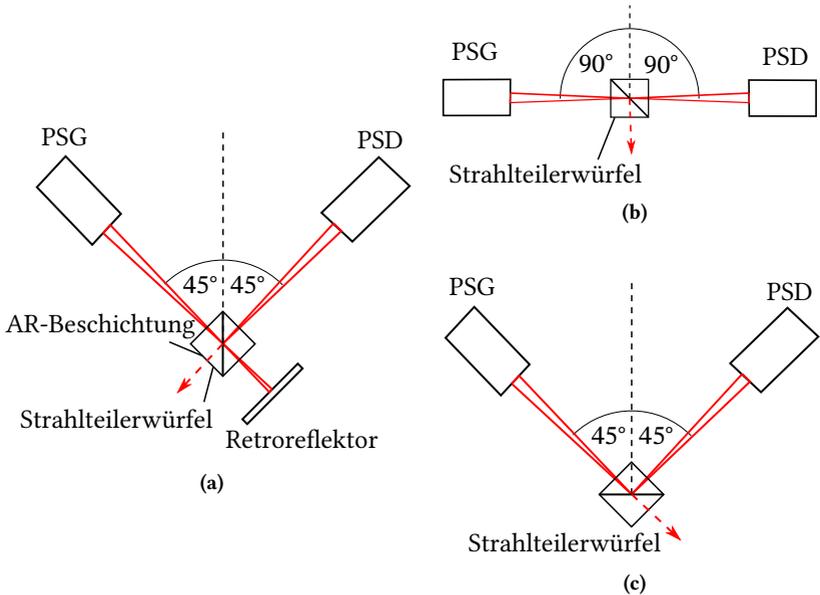


Abbildung 7.2: Schematische Darstellung der drei Messanordnungen zur Messung der Müller-Matrix des Retroreflektors mit UE. In (a) ist die Messung des Retroreflektors unter Zuhilfenahme eines Strahlteilers und in (b) und (c) die Messung der Polarisations-eigenschaften des Strahlteilers in Transmissions- und Reflexionsanordnung abgebildet.

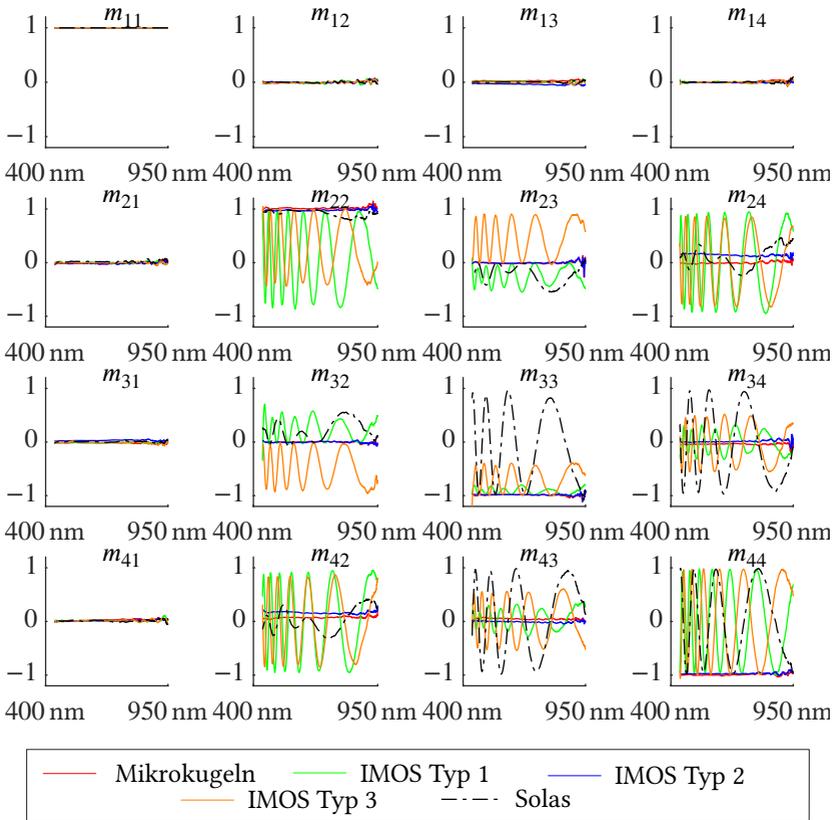


Abbildung 7.3: Spektral aufgelöste Müller-Matrix-Elemente verschiedener mikrostrukturierter Retroreflexfolien aufgenommen mit dem spektroskopischen Ellipsometer.

Für die spektrale Müller-Matrix eines idealen Spiegels $\mathbf{M}_M^\lambda(\lambda)$ gilt: $\mathbf{M}_M^\lambda \equiv \mathbf{M}_M$. Tatsächlich treten beim spektroskopischen Ellipsometer jedoch deutliche Abweichungen auf. Das quadratische Mittel (engl. *root-mean-square error*, RMSE) von jedem Element der Müller-Matrix über alle Wellenlängen des sichtbaren

Spektrums ($\lambda \in [300 \text{ nm}, 750 \text{ nm}]$) beträgt:

$$\begin{aligned} \text{RMSE}(\mathbf{M}_M^\lambda) &= \frac{1}{n_\lambda} \sum_{k=1}^{n_\lambda} \left(\left(\mathbf{M}_M^\lambda(\lambda_k) / \left(\mathbf{M}_M^\lambda(\lambda_k) \right)_{11} - \mathbf{M}_M \right)_{ij}^2 \right) \\ &= \begin{pmatrix} 0,0000 & 0,0088 & 0,0035 & 0,0047 \\ 0,0174 & 0,0123 & 0,0105 & 0,0237 \\ 0,0056 & 0,0086 & 0,0107 & 0,0135 \\ 0,0054 & 0,0102 & 0,0172 & 0,0053 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (7.3)$$

wobei n_λ die Anzahl der gemessenen Wellenlängen und λ_k für $k \in [1, n_\lambda]$ die Wellenlängen Müller-Matrix-Messung bezeichnen. Die relativ großen RMSE-Werte haben folgende möglichen Ursachen: Die Elemente der Müller-Matrizen $\left(\mathbf{M}_{B,b}^{r\lambda}(\lambda) \right)^{-1}$, $\mathbf{M}^\lambda(\lambda)$ und $\left(\mathbf{M}_{B,f}^{t\lambda}(\lambda) \right)^{-1}$ sind mit Messunsicherheiten behaftet¹, wodurch sich die Messunsicherheit von $\mathbf{M}_R^\lambda(\lambda)$ akkumuliert. Weitere Ursachen für die relativ großen RMSE-Werte sind systematische Fehler bei der Neujustage des Strahlteilers zwischen den Messungen (vgl. Abb. 7.2b und 7.2c), suboptimale Breitband-Antireflexbeschichtungen, die nach Abb. 7.2a zu Störreflexen führen können, und ein im Vergleich zu gewöhnlichen Reflexionsmessungen sehr schwaches Messsignal bzw. niedriges SNR.

Abb. 7.3 zeigt die gemessenen Spektren der Retroreflexfolien im Wellenlängenbereich $\lambda \in [440 \text{ nm}, 950 \text{ nm}]$. Die Retroreflexfolie basierend auf Mikrokugeln weist wie erwartet eine sehr gute Polarisierungserhaltung auf. Mit Ausnahme des Retroreflektors IMOS Typ 2 weisen die pyramidalen Mikrotripel nur bei bestimmten Wellenlängen eine Polarisierungserhaltung auf. Ansonsten hat das Signal einen typischen oszillierenden Verlauf, wie er in der Ellipsometrie bei Schichtstrukturen häufig vorkommt. Ein möglicher Grund für die Oszillationen könnte eine wellenlängenabhängige Verzögerung aufgrund einer oder mehrerer Polymer-Schutzschichten sein. Eine andere Möglichkeit bilden unterschiedliche optische Pfadlängen für die einzelnen Sextanten bei

¹ Die Messunsicherheit des spektroskopischen Ellipsometers ist nur für Ψ und Δ , nicht jedoch für die einzelnen Elemente der Müller-Matrix spezifiziert, was für eine Fehlerfortpflanzung erforderlich wäre.

TIR oder eine suboptimale Ausrichtung der Mikrotripel. Alle Folien basierend auf Mikrotripeln sind mit einer Schutzschicht versehen, was an aufliegenden Staubpartikeln sichtbar wird, die durch die Fokusvariation detektiert werden. Ob die Mikrotripel auf metallischen Spiegelflächen oder TIR basieren, ist hingegen unbekannt.

Die Retroreflexfolie IMOS Typ 2 weist im gesamten visuellen Wellenlängenbereich eine gute Polarisationserhaltung auf. Die Polarisationserhaltung bei IMOS Typ 2 bestätigt zwar das theoretische Ergebnis, dass auch Mikrotripel unter senkrechtem Einfall für bestimmte Mikrostrukturen polarisationserhaltend wirken können. Allerdings zeigt die Mikroskopaufnahme aus Abb. 7.1c im Gegensatz zu den Abb. 7.1b, 7.1d und 7.1e keine Drehsymmetrie. Die zugrundeliegende Mikrostruktur der Mikrotripel ist deshalb nicht offensichtlich.

Insgesamt lässt sich festhalten, dass bestimmte Retroreflexfolien basierend auf Mikrotripeln für die Ellipsometrie geeignet sein können. Die Polymerbeschichtungen handelsüblicher Mikrotripel erschweren oder verhindern eine präzise Modellierung der retroreflektierenden Struktur. Die Polarisations-eigenschaften von optischen Elementen eines Ellipsometers müssen jedoch sehr genau bekannt sein. Dies erfordert entweder eine genaue Kenntnis der Materialstruktur und Materialkonstanten des Retroreflektors oder eine Vermessung der Müller-Matrix für alle Einfallswinkel und Azimutwinkel.

7.2 Messung der Mikrokugel-Retroreflexfolie mit dem abbildenden Ellipsometer

Im vorherigen Abschnitt wurden Messungen des spektroskopischen Ellipsometers von Mikrokugel- und Mikrotripel-basierten Retroreflexfolien gezeigt. Während die theoretischen und simulativen Ergebnisse aus Abschnitt 4.4 qualitativ bestätigt werden, ist ein quantitativer Vergleich aufgrund der atypischen Messbedingungen und damit einhergehenden großen Unsicherheiten nur bedingt möglich. In diesem Abschnitt werden die Polarisations-eigenschaften einer Mikrokugel-Retroreflexfolie mit RPE untersucht. Die Messung der

Müller-Matrix erfolgt auf Basis der Sensorkalibrierung aus Kapitel 6. Wichtige Unterschiede zu den UE-Messungen sind, dass die geänderten Messbedingungen der Abschnitte 6.1 bis 6.3 nicht Teil der Messung, sondern Teil der Kalibrierung sind. Zudem sind keine mechanischen Änderungen am Sensoraufbau während der Sensorkalibrierung nötig.

7.2.1 Gemessene Müller-Matrix

Die Differenz der orts aufgelösten normierten Müller-Matrix eines Retroreflektors und der eines idealen Spiegels ist in Abb. 7.4 grafisch visualisiert. Erkennbar ist zunächst eine relativ homogene örtliche Verteilung der Polarisationsmessdaten. Der aus der Körnigkeit des Retroreflektors resultierende stochastische Fehler ist deutlich geringer als der systematische Fehler. Der RMSE beträgt für jedes Element der orts aufgelösten normierten Müller-Matrix:

$$\text{RMSE}(\mathbf{M}_R) = \begin{pmatrix} 0,0000 & 0,0007 & 0,0012 & 0,0005 \\ 0,0010 & 0,0007 & 0,0052 & 0,0023 \\ 0,0013 & 0,0056 & 0,0009 & 0,0054 \\ 0,0014 & 0,0009 & 0,0033 & 0,0013 \end{pmatrix}. \quad (7.4)$$

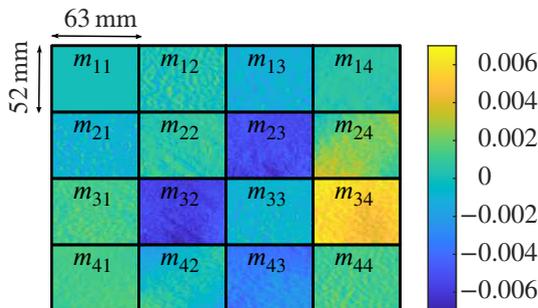


Abbildung 7.4: Die Grafik zeigt die Elemente der gemessenen, normierten Müller-Matrix als Differenz zu \mathbf{M}_M , wobei die Messung der Mikrokugel-Retroreflexfolie mit dem abbildenden Ellipsometer durchgeführt wurde.

Ein Vergleich der Gleichungen (7.3) und (7.4) zeigt, dass der RMSE beim RPE kleiner ist als beim UE, was auf einen kleineren Kalibrier- und Messfehler hindeutet. Hierbei ist allerdings zu berücksichtigen, dass der RMSE beim RPE über die spektrale Dimension und beim UE über die örtliche Dimension gebildet wird, was unter der Annahme eines achromatischen Retroreflektors kein prinzipielles Problem darstellt. Allerdings ist der Messfleck auf der Retroreflexfolie beim UE relativ klein ($< 1 \text{ mm}^2$), was zu einem vergleichsweise hohen Anteil von partiell beleuchteten Mikrokugeln führt ($> 20\%$), wie in Abb. 7.5 dargestellt.

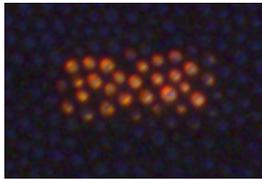


Abbildung 7.5: Die Abbildung zeigt eine Aufnahme der beleuchteten Mikrokugeln mit der integrierten Kamera des spektroskopischen Ellipsometers, die für die Probenjustage verwendet wird. Der Lichtfleck hat eine Größe von $500 \times 250 \mu\text{m}^2$.

Durch einen größeren Abstand zur Schärfeebene lässt sich der Messfleck zwar vergrößern, allerdings geht dies mit einer Reduzierung des ohnehin niedrigen Signal-Rausch-Verhältnisses einher.

7.2.2 Winkelabhängigkeit der Müller-Matrix

Nach Abschnitt 4.4 sind die Polarisationsseigenschaften des Retroreflektors in einem begrenzten Einfallswinkelbereich annähernd unabhängig vom Einfallswinkel. Dieser Grenzwinkel ist dann erreicht, wenn auftreffende Strahlen auf der Oberfläche der Mikrokugel so gebrochen werden, dass sie nicht mehr an der Reflexionsschicht reflektiert werden. Alternativ können bei großen Einfallswinkeln auch Verdeckungen durch benachbarte Mikrokugeln auftreten, so dass die Oberfläche der Mikrokugel nicht vollständig ausgeleuchtet wird. Abb. 7.6 zeigt die Winkelabhängigkeit der Müller-Matrix für $\theta_R \in [0^\circ, 60^\circ]$

auf. Für jedes Pixel wurde die normierte Müller-Matrix gemessen und der Mittelwert über alle Pixel berechnet. Abweichungen vom Idealwert um $1 \cdot 10^{-2}$ sind durch die rot gestrichelten Linien gekennzeichnet. Steigt der Einfallswinkel über ca. 30° , weichen m_{21} und m_{12} stark von den idealen Werten ab, wohingegen unterhalb dieses Grenzwerts kaum Unterschiede erkennbar sind. Daher wird ein Einfallswinkel von 30° als Grenzwert für die Polarisationserhaltung betrachtet. Abb. 7.7 zeigt analog die Standardabweichungen der Elemente der normierten Müller-Matrix. Der Anstieg der Standardabweichung ab einem Grenzwinkel, wie er z. B. bei m_{22} erkennbar ist, bedarf einer genaueren Untersuchung, da damit nicht ein erhöhtes Sensorrauschen verbunden ist. Vielmehr steigt die Diskrepanz zwischen den Messwerten aus verschiedenen Bildregionen.

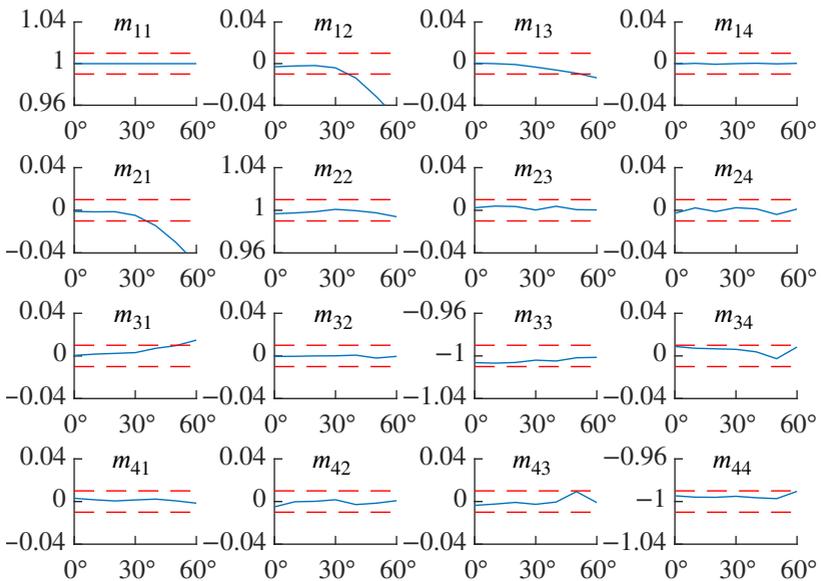


Abbildung 7.6: Die Grafik zeigt die Mittelwerte der Elemente der normierten Müller-Matrix abhängig vom Einfallswinkel θ_R . Die Mittelwerte wurden über alle Sensorpixel des abbildenden Ellipsometers berechnet. Abgeänderter Nachdruck mit Genehmigung aus Negara et al., J. Vac. Sci. Technol. B 38, 014016 (2020). Copyright 2020, AVS.

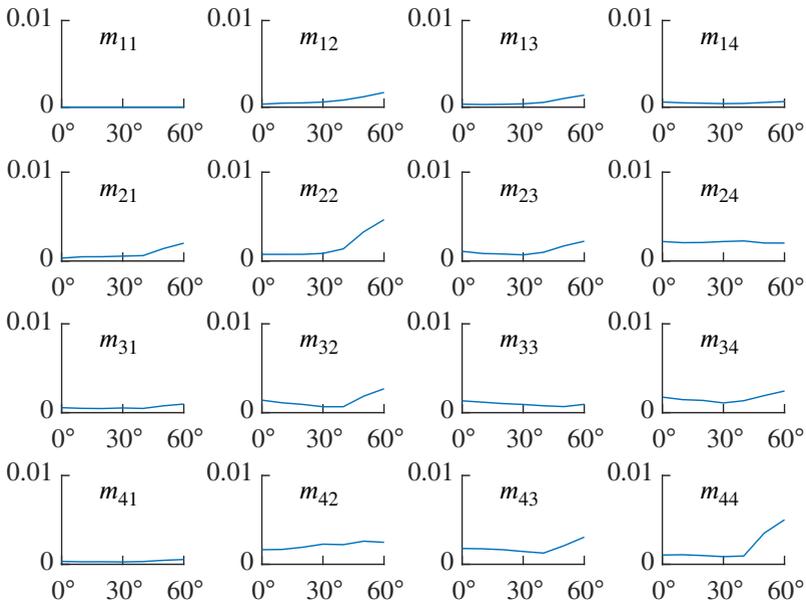


Abbildung 7.7: Die Grafik zeigt die Standardabweichungen der Elemente der normierten Müller-Matrix abhängig vom Einfallswinkel θ_R . Die Standardabweichungen wurden über alle Sensorpixel des abbildenden Ellipsometers berechnet. Abgeänderter Nachdruck mit Genehmigung aus Negara et al., J. Vac. Sci. Technol. B 38, 014016 (2020). Copyright 2020, AVS.

7.2.3 Verbesserung des Signal-Rausch-Verhältnisses

In Abschnitt 4.4 wurde theoretisch begründet, dass die Qualität der Polarisationserhaltung des Mikrokugel-Retroreflektors maßgeblich vom Abstand des Reflektors zur Schärfeebene abhängt. Im Fokusbereich beleuchtet ein Strahlenbündel nur wenige Mikrokugeln. Als Folge daraus ist der Anteil von partiell beleuchteten Mikrokugeln am Gesamtanteil relativ groß. Bei Beleuchtung weniger Mikrokugeln entsteht eine starke Variation der detektierten Intensität benachbarter Pixel, da einzelne Mikrokugeln die Intensität signifikant beeinflussen. Ein großer Anteil von partiell beleuchteten Mikrokugeln wirken sich dagegen negativ auf die Polarisationserhaltung aus.

Nachfolgend wird diese Abhängigkeit anhand von Messdaten des Laser-Messsystems untersucht (vgl. Abschnitt 2.3), indem die Messsignale bei unterschiedlichen Abständen l_{A_{ls}, A_r} zwischen Sensor und Retroreflektor miteinander verglichen werden. Bei dem Laser-Messsystem werden vier Intensitäten gemessen, nicht jedoch die Müller-Matrix. Dennoch lassen die Intensitätsmesswerte \mathbf{I} gewisse Rückschlüsse auf die Elemente der Müller-Matrix des Retroreflektors zu. Die Division des ersten durch den dritten Intensitätskanal unterdrückt Fluktuationen des Reflexionsgrads, wodurch das Messsignal nur noch von der normierten Müller-Matrix abhängt:

$$\frac{I_1(u)}{I_3(u)} = \frac{(\mathbf{A}(u)\mathbf{M}_R(u)\mathbf{S}_{\text{ls}}(u))_1}{(\mathbf{A}(u)\mathbf{M}_R(u)\mathbf{S}_{\text{ls}}(u))_3} = \frac{(\mathbf{A}(u)\mathbf{N}(\mathbf{M}_R(u))\mathbf{S}_{\text{ls}}(u))_1}{(\mathbf{A}(u)\mathbf{N}(\mathbf{M}_R(u))\mathbf{S}_{\text{ls}}(u))_3}. \quad (7.5)$$

Hierbei bezeichnen u ein Pixel, I_1 und I_3 den ersten und dritten Intensitätskanal, $\mathbf{M}_R(u)$ die zu einem detektierten Pixel zugehörige Müller-Matrix des Retroreflektors, $\mathbf{S}_{\text{ls}}(u)$ den zu einem Pixel zugehörigen emittierten Polarisationszustand und $\mathbf{A}(u)$ die zu einem Pixel zugehörige Analysematrix. Die Homogenität des Reflexionsgrads wird anhand von relativen Messwerten des ersten Intensitätskanals bewertet:

$$I_1^{\text{rel}}(u) := \frac{I_1(u)}{\langle I_1(u) \rangle_u} = \frac{(\mathbf{A}(u)\mathbf{M}_R(u)\mathbf{S}_{\text{ls}}(u))_1}{\langle (\mathbf{A}(u)\mathbf{M}_R(u)\mathbf{S}_{\text{ls}}(u))_1 \rangle_u}. \quad (7.6)$$

Zwei Gütemaße zur Bewertung der Qualität des Retroreflektors sind die Signal-Rausch-Verhältnisse von $I_1(u)/I_3(u)$ und $I_1^{\text{rel}}(u)$. Das Signal-Rausch-Verhältnis ist wie folgt definiert [Bey16]:

$$SNR = \frac{\mu^2}{\sigma^2}, \quad (7.7)$$

wobei μ den Mittelwert und σ die Standardabweichung des betrachteten Messsignals bezeichnen.

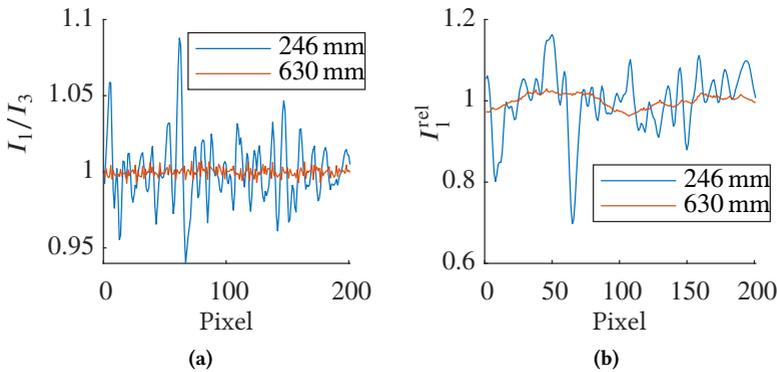


Abbildung 7.8: Die Abbildung zeigt einen Ausschnitt von 200 Pixeln aus dem Zeilenprofil des Laserscanner-Messsystems für zwei verschiedene Abstände zwischen Beleuchtungs- und Reflektorebene bei Messung der Mikrokugel-Retroreflexfolie. In (a) ist der Intensitätsquotient aus dem ersten und dritten Intensitätskanal und in (b) der normierte, erste Intensitätskanal dargestellt.

Abb. 7.8 zeigt einen Ausschnitt von 200 Pixeln bzw. 13 mm aus dem Zeilenprofil des Laserscanners von insgesamt 2048 Pixeln für zwei verschiedene Abstände des Retroreflektors zum Sensormodul, wobei $l_{A_{ls},A_r} = 246$ mm einen Abstand im Fokusbereich und $l_{A_{ls},A_r} = 630$ mm einen Abstand außerhalb des Fokusbereichs kennzeichnet. Die in diesem Abschnitt gezeigten Signalverläufe stellen zeitliche Mittelungen über $n = 1000$ sequentiell aufgenommenen Bildzeilen an der gleichen Stelle auf dem Retroreflektor dar. Nach Anhang A.9 führt dies zu einer starken Unterdrückung des Sensorrauschens, sodass dieses nachfolgend ignoriert werden kann. Die Ergebnisse zur Rauschunterdrückung für digitale Bildsensoren behalten auch bei der Laser-Ellipsometrie ihre Gültigkeit, solange die Photomultiplier nicht im Sättigungsbereich betrieben werden¹. Im Unterschied zum Kamera-basierten Ellipsometer wird das Dunkelsignal nicht in der Auswertalgorithmik abgezogen, sondern in der Analog-Verstärkung des Photomultipliers.

¹ https://www.hamamatsu.com/resources/pdf/etd/PMT_handbook_v3aE.pdf (15.04.2021)

Der Intensitätsquotient I_1/I_3 in Abb. 7.8a weist im Fokusbereich eine deutlich größere Signalschwankung auf als außerhalb des Fokusbereichs. Die Fluktuationen von I_1/I_3 können nur durch Fluktuationen der Elemente der normierten Müller-Matrix $\mathbf{N}(\mathbf{M}_R(u))$ hervorgerufen werden. Der Grund hierfür ist, dass $\mathbf{S}_s(u)$ und $\mathbf{A}(u)$ innerhalb des verwendeten Bildausschnitts von 200 Pixeln als annähernd konstant angenommen werden können, da diese aufgrund der verwendeten optischen Bauelemente im Laserscanner nur niedrige Ortsfrequenzen enthalten. Eine nicht konstante normierte Müller-Matrix ist wiederum gleichbedeutend mit einer durch den Retroreflektor hervorgerufenen Polarisationszustandsänderung.

Abb. 7.8b zeigt das Intensitätsprofil von I_1^{rel} für die zuvor genannten Abstände. Sowohl der Reflexionsgrad als auch der Polarisationszustand haben einen Einfluss auf das Messsignal I_1^{rel} . Der Reflexionsgrad ist jedoch der dominierende Faktor, was durch einen Vergleich der roten Kurven aus Abb. 7.8a und Abb. 7.8b verdeutlicht wird: Die Standardabweichung von I_1/I_3 beträgt für $l_{\mathcal{A}_s, \mathcal{A}_r} = 630$ mm nur 0,3%, wohingegen die Standardabweichung von I_1^{rel} bei 1,6% liegt. Ein annähernd konstanter Signalwert von I_1/I_3 ist mit einem konstanten Polarisationszustand gleichzusetzen, wie bereits im obigen und in Abschnitt 4.4 erläutert. Daher ist die Varianz von I_1^{rel} bei $l_{\mathcal{A}_s, \mathcal{A}_r} = 630$ mm hauptsächlich auf Schwankungen des Reflexionsgrads zurückzuführen.

Im Rahmen der Arbeit wurde eine Möglichkeit gefunden, den negativen Einfluss von Inhomogenitäten des Retroreflektors auf das Messsignal zu minimieren [Har17]. Hierbei wird der Retroreflektor während der Messung bewegt, z. B. durch Rotation um eine Achse quer zur Reflektorebene; siehe Abb. 7.9. Abb. 7.10a zeigt I_1/I_3 für einen statischen und rotierenden Retroreflektor in der Fokusebene. Der erste Intensitätskanal ist für beide Fälle in Abb. 7.10b abgebildet. Die Rotation des Retroreflektors verbessert die Homogenität des Reflexionsgrads und der Polarisationserhaltung. Dies gilt für jeden beliebigen Abstand $l_{\mathcal{A}_s, \mathcal{A}_r}$ innerhalb des abgefahrenen Messbereichs von 750 mm. Abb. 7.11 zeigt das Signal-Rausch-Verhältnis des Intensitätsquotienten bzw. des Intensitätskanals.

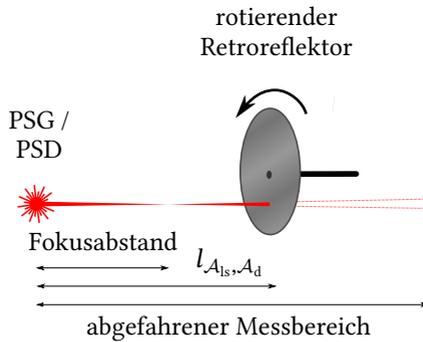


Abbildung 7.9: Messvorgang während der Rotation des Retroreflektors für einen festen Abstand l_{A_{Is}, A_r} .

Die in der Untersuchung durchgeführte Bewegung des Retroreflektors kann weiter optimiert werden. Ein Problem stellt die unterschiedliche Winkelgeschwindigkeit an verschiedenen Messpunkten auf dem Retroreflektor dar, so dass im Falle einer Messung auf der Rotationsachse das Signal-Rausch-Verhältnis kaum verbessert wird. Ein weiteres Problem stellt die herstellungsbedingte, örtlich inhomogene Verteilung des Rückstrahlwertes dar.

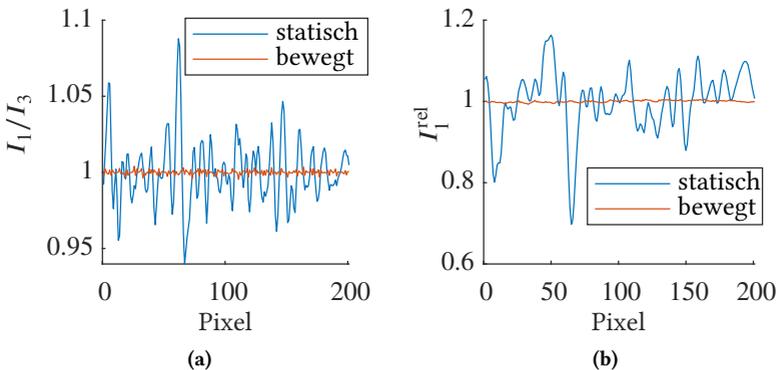


Abbildung 7.10: Für den Abstand $l_{A_{Is}, A_r} = 246$ mm sind in (a) der Intensitätsquotient des ersten und dritten Intensitätskanals und in (b) der normierte, erste Intensitätskanal jeweils für einen statischen und einen rotierenden Retroreflektor abgebildet.

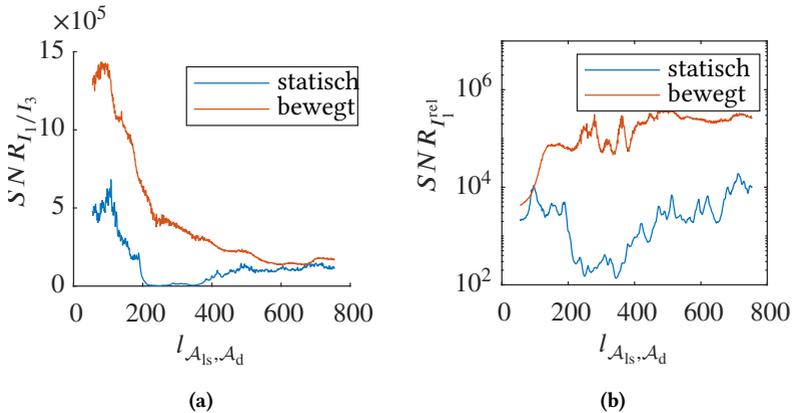


Abbildung 7.11: Die Grafik zeigt den SNR von I_1/I_3 (a) und I_1^{rel} (b) bei Variation des Abstands des Retroreflektors $l_{A_{1s}, A_{1d}}$, wobei der SNR aus einem Ausschnitt von 200 Pixelwerten des Zeilenprofils des Laserscanners berechnet wurde.

Dieser Effekt lässt sich erst durch mehrere Rotationen und lange Messzeiten eliminieren. Um beide Probleme zu beheben, scheint es aussichtsreich, statt einer Rotation um eine feste Achse, eine rotierende, hochfrequente Vibration auszuführen.

Speckle stellt eine weitere mögliche Störquelle bei der Laser-Ellipsometrie dar. Die Bewegung einer beobachteten Oberfläche während der Messung ist eine bekannte Methode, um Speckle zu minimieren. Während Speckle als multiplikatives Rauschen ebenfalls als eine mögliche Ursache für die Variation der gemessenen Intensität in Abb. 7.8b in Betracht kommt, erklärt es nicht die Variation des Intensitätsquotienten in Abb. 7.8a. Daher scheint das Speckle-Rauschen nicht ursächlich für die beobachtete Signalschwankung zu sein. Eine örtlich hochfrequente Schwankung der Intensität ist auch bei dem abbildenden Ellipsometer zu beobachten. Aufgrund der räumlich und zeitlich inkohärenten Beleuchtung des abbildenden Ellipsometers kommt Speckle ebenfalls nicht als mögliche Ursache in Betracht. Zudem ist das gemessene hochfrequente Rauschen beim abbildenden Ellipsometer auf den Retroreflektor als Ursache zurückzuführen, da die optischen Eigenschaften der anderen Komponenten niederfrequenteren Schwankungen unterliegen, wie in Abschnitt 7.3.4

gezeigt wird. Die Unterdrückung der hochfrequenten Rauschanteile erfolgt über ein sog. Binning [McL08]¹.

7.3 Kalibrierung

7.3.1 Quantifizierung des Sensorrauschens

In der Ellipsometrie ist der Wertebereich des Variationskoeffizienten² des Sensorrauschens, welches sich aus dem Photonenrauschen, Dunkelrauschen und Quantisierungsrauschen zusammensetzt, üblicherweise im unteren Promillebereich [Azz89a]. Das Sensorrauschen der hier verwendeten Polarisationskamera hat hingegen einen Variationskoeffizienten größer als $1,6 \cdot 10^{-2}$, bei einer Belichtungszeit von 1 ms. Um dennoch die nötige Genauigkeit für eine ellipsometrische Messung zu erreichen, werden die Messwerte zunächst zeitlich über 15 Zeitpunkte gemittelt, wodurch sich der Variationskoeffizient auf $3,8 \cdot 10^{-3}$ reduziert. Schließlich wird auch eine örtliche Mittelung über 10×10 Pixel durchgeführt. Dadurch reduziert sich der Variationskoeffizient auf $6,8 \cdot 10^{-4}$ und die örtliche Mittelung führt gleichzeitig zu einer Reduzierung der hochfrequenten Variation des Reflexionsgrads des Retroreflektors³; siehe Abschnitt 7.2.3. Unter der Annahme eines normalverteilten Messrauschens sollte die Mittelung über 1500 Messwerte den Variationskoeffizienten von $1,6 \cdot 10^{-2}$ um den Faktor $1/\sqrt{1500}$ auf $4,1 \cdot 10^{-4}$ reduzieren, was vergleichsweise gut mit dem Messergebnis übereinstimmt.

¹ Zur Rauschunterdrückung muss das Binning nicht zwingend auf dem Sensorchip erfolgen, sondern kann auch nach der AD-Wandlung durchgeführt werden; siehe Anhang A.9

² Der Variationskoeffizient wird definiert als $1/\sqrt{SNR}$; siehe Gleichung (7.7).

³ Der Variationskoeffizient wurde nicht über eine Zeitreihenanalyse, sondern anhand von zwei aufeinanderfolgenden, zeitlich und örtlich gemittelten Aufnahmen bestimmt. Diese zwei Aufnahmen wurden subtrahiert, daraus die Standardabweichung über alle Bildpixel berechnet und schließlich durch den Mittelwert eines der beiden Bilder dividiert. Bei annähernd normalverteiltem Sensorrauschen erhält man so den doppelten Wert des Variationskoeffizienten einer Zeitreihenanalyse. Allerdings fand zwischen den beiden Bildern eine Bewegung der Polarisationsoptiken und des Retroreflektors statt, was den Variationskoeffizient etwas vergrößert.

7.3.2 Vermessung der Polarisationsoptiken

Das Lösungsverhältnis ER von Polfiltern oder allgemein Polarisatoren wird in Transmissionsanordnung gemessen und über die Eigenwerte der Jones-Matrix Λ_{\min} und Λ_{\max} definiert [Azz99]:

$$ER = \frac{|\Lambda_{\max}|^2}{|\Lambda_{\min}|^2}, \quad (7.8)$$

wobei $|\Lambda_{\max}| \gg |\Lambda_{\min}|$. Polarisatoren können gut durch einen linearen Dichroismus Ψ_t , eine Doppelbrechung Δ_t und eine Absorption T beschrieben werden [Azz99]¹. Es gilt $\tan^2 \Psi_t = T_p/T_s$ und $T = (T_p + T_s)/2$. $\underline{\rho}_t$ wird definiert als $\underline{\rho} = \tan \Psi_t e^{\Delta_t}$. Ist der Polarisator so ausgerichtet, dass die Jones-Matrix die Gestalt $\mathbf{diag}(\underline{\rho}, 1)$ hat und $|\underline{\rho}| > 1$ gilt, so ist $|\Lambda_{\min}|^2 = 1$ und $|\Lambda_{\max}|^2 = \tan^2 \Psi_t = ER$. Eine Möglichkeit zur Messung des Lösungsverhältnisses bildet die Transmission von unpolarisiertem, kollimiertem Licht durch zwei gleichartige Polarisatoren. Die Azimutwinkel des ersten im Strahlengang angeordneten Polarisators sei fest und des zweiten variabel, wobei diese jeweils mit ϕ_1 und ϕ_2 bezeichnet werden. Die gemessene Intensität des transmittierten Lichts folgt bei idealen Polarisatoren dem Gesetz von Malus [Azz99]. Bei nicht idealen Polarisatoren erhält man folgende Intensität für $\phi_1 = 0^\circ$:

$$\begin{aligned} I_{\phi_2}(\phi_2) &= (\mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}_{\text{L}}(\Psi_t, \Delta_t, T), \phi_2) \mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}_{\text{L}}(\Psi_t, \Delta_t, T), \phi_1))_{11}, \\ &= T^2 (\mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}_{\Psi}(\Psi_t), \phi_2) \mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}_{\Psi}(\Psi_t), \phi_1))_{11} \end{aligned} \quad (7.9)$$

Für $\Psi_t \approx 90^\circ$ gilt:

$$ER = \tan^2 \Psi_t = \frac{T_p}{T_s} \approx \frac{T_p + \frac{T_s^2}{T_p}}{T_s} = 2 \frac{I_{\phi_2}(0^\circ)}{I_{\phi_2}(90^\circ)}. \quad (7.10)$$

¹ Bei einem optisch homogenen Medium sind Dichroismus und Doppelbrechung über den gesamten Spektralbereich miteinander verknüpft und können nicht exklusiv auftreten [Azz99].

Das Lösungsverhältnis des Polfilters ITOS XP38-18 wurde auf diese Weise mit dem Photometer ILX Lightwave OMM-6810B gemessen und beträgt ca. 1127. Die Abweichung zum spezifizierten Wert 7500 bei $\lambda = 564$ nm lässt sich z. B. durch eine Dispersion des Polfilters erklären, da für die Messung eine rote LED-Beleuchtung mit $\bar{\lambda} = 625$ nm verwendet wurde. Das abbildende Ellipsometer liefert für das Lösungsverhältnis dagegen einen Messwert in der Größenordnung $1 \cdot 10^3$, wobei zunächst die RPE-Messungen in UE-Messungen umgerechnet werden müssen und auch eine suboptimale Polarisationserhaltung des Retroreflektors in das Ergebnis mit einfließt. Mit dem spektroskopischen Ellipsometer wird ein Lösungsverhältnis in der Größenordnung $1 \cdot 10^2$ gemessen, wobei anhand der spektralen Messdaten die rote LED-Beleuchtung simuliert wurde. Wird das Lösungsverhältnis nicht auf Basis der gemessenen Müller-Matrix berechnet, sondern anhand des daraus extrahierten Wertes Ψ_t , so liegt das Lösungsverhältnis beim abbildenden Ellipsometer in der Größenordnung $1 \cdot 10^3$ und beim spektroskopischen Ellipsometer in der Größenordnung $1 \cdot 10^6$. In allen Fällen wurde die Müller-Matrix entsprechend der Gleichung (5.36) rotiert, um eine Achsen-ausgerichtete Müller-Matrix zu erhalten. Ursächlich für die Abweichungen der ellipsometrischen Messungen zu den photometrischen Messungen ist die vergleichsweise große Messunsicherheit der Elemente der Müller-Matrix.

7.3.3 Modulations- und Analysematrix

Ein Makropixel der Polarisationskamera hat vier Linearpolarisatoren und aus den daraus resultierenden Intensitätsmessungen ließen sich bei idealen Linearpolarisatoren die ersten drei Elemente des Stokes-Vektors direkt berechnen. Laut Datenblatt¹ beträgt das Lösungsverhältnis bei $\lambda = 625$ nm ca. 140, was für einen Analysator im Vergleich zu anderen ellipsometrischen Aufbauten

¹ https://www.sony-semicon.co.jp/products/common/pdf/IMX250_253MZR_MYR_Flyer_en.pdf
(04.11.2020)

ein relativ geringer Wert ist¹. Allerdings sind hochqualitative optische Bauelemente für eine präzise Polarisationszustandsmessung nicht zwingend nötig, solange eine Sensorkalibrierung die systematischen Fehler herausrechnet. Anhand des Kalibrierverfahrens aus Abschnitt 6.1 lässt sich eine Pixel-abhängige Modulationsmatrix $\mathbf{W}_B(u,v)$ und eine Pixel-abhängige Analysematrix $\mathbf{A}_B(u,v)$ berechnen. Exemplarisch werden hier die Mittelwerte und Standardabweichungen für eine Untermenge der Zeilen- und Spaltenvektoren dieser beiden Matrizen angegeben:

$$E_{uv}\{(\mathbf{A}_B(u,v))_{\mathcal{I}_1 \times \llbracket 1,4 \rrbracket}\} = \begin{pmatrix} 0,257 & 0,242 & 0,073 & 0,008 \\ 0,337 & -0,088 & 0,075 & -0,297 \\ 0,337 & -0,129 & -0,081 & 0,281 \\ 0,317 & -0,003 & -0,294 & -0,074 \end{pmatrix} \quad (7.11)$$

$$S_{uv}\{(\mathbf{A}_B(u,v))_{\mathcal{I}_1 \times \llbracket 1,4 \rrbracket}\} = \begin{pmatrix} 0,018 & 0,018 & 0,014 & 0,002 \\ 0,024 & 0,008 & 0,014 & 0,021 \\ 0,025 & 0,018 & 0,008 & 0,020 \\ 0,024 & 0,013 & 0,023 & 0,007 \end{pmatrix} \quad (7.12)$$

$$E_{uv}\{(\mathbf{W}_B(u,v))_{\llbracket 1,4 \rrbracket \times \mathcal{I}_2}\} = \begin{pmatrix} 0,572 & 0,489 & 0,531 & 0,406 \\ 0,450 & 0,046 & 0,260 & -0,346 \\ 0,222 & -0,476 & 0,050 & 0,215 \\ 0,275 & 0,103 & -0,459 & -0,017 \end{pmatrix} \quad (7.13)$$

$$S_{uv}\{(\mathbf{W}_B(u,v))_{\llbracket 1,4 \rrbracket \times \mathcal{I}_2}\} = \begin{pmatrix} 0,005 & 0,006 & 0,005 & 0,005 \\ 0,005 & 0,004 & 0,004 & 0,004 \\ 0,004 & 0,006 & 0,006 & 0,004 \\ 0,003 & 0,004 & 0,005 & 0,002 \end{pmatrix} \quad (7.14)$$

wobei $\mathcal{I}_1 \subset \llbracket 1,8 \rrbracket$ und $\mathcal{I}_2 \subset \llbracket 1,20 \rrbracket$ mit $|\mathcal{I}_1| = |\mathcal{I}_2| = 4$ zwei ausgewählte Indextmengen sind. Die Standardabweichungen der Elemente der Modulations- und Analysematrix bzw. deren Varianz entstehen größtenteils aufgrund von herstellungsbedingten, örtlich niederfrequenten Schwankungen der Elemente der Müller-Matrix des Strahlteilers. Bei der Analysematrix kommen Schwankungen der Elemente der Müller-Matrix des Objektivs hinzu. Aufgrund der

¹ Glan-Thompson-Polarisationsprismen sind mit Lösungsverhältnissen von 10^7 erhältlich.

vergleichsweise großen Schwankung ist eine örtlich aufgelöste Kalibrierung unerlässlich.

7.3.4 Polarisations Eigenschaften des Strahlteilers

Einen Teil des Kalibrieralgorithmus bildet die Charakterisierung des Strahlteilers. Der Algorithmus aus Abschnitt 6.5 wird nachfolgend am optischen Aufbau des abbildenden Ellipsometers evaluiert. Die Abb. 7.12a zeigt den so berechneten polarisationsabhängigen Verlustwinkel Ψ_t , der über das gesamte Bild um ca. 1° variiert. Δ_t kann mit dem beschriebenen Kalibrierverfahren nicht direkt bestimmt werden, da unklar ist, ob die Verzögerung Δ_t Teil der Müller-Matrix $\mathbf{M}_{B,f}^t$ oder der Modulationsmatrix \mathbf{W}_1 ist. Da nur $\mathbf{W}_B = \mathbf{M}_{B,f}^t \mathbf{W}_1$ während der Kalibrierung berechnet werden muss, ist diese Unterscheidung irrelevant. Im Gegensatz zu Δ_t kann die Differenz $\Delta_t - \Delta_r$ berechnet werden und ist in Abb. 7.12b dargestellt. Auch hier sind deutliche örtliche Schwankungen von fast 1° erkennbar. Mit dem spektroskopischen Ellipsometer wurden an einem Messpunkt die Werte $\Psi_t = 50,6^\circ$ und $\Delta_t - \Delta_r \bmod \pi = 19,5^\circ$ gemessen, was die Plausibilität der Messwerte des abbildenden Ellipsometers bestätigt. Eine mögliche Ursache für die unterschiedlichen Messwerte könnte eine zu grobe Ausrichtung des Einfallswinkels des Strahlteilers sein, der 45° betragen muss. Zusätzlich ist das spektroskopische Ellipsometer aufgrund eines Strahlversatzes nicht für eine Transmissionsmessung unter schrägem Lichteinfall vorgesehen.

Zusätzlich zu $\Delta_t - \Delta_r$ kann auch die Differenz $\Delta_t - \Delta_1$ gemessen werden, wobei Δ_1 ein aus dem Kalibrieralgorithmus resultierendes numerisches Artefakt ist und für jedes Pixel einen beliebigen Winkel annehmen kann; siehe Abb. 7.12c. Es lässt sich feststellen, dass die Schwankungen von Ψ_t und $\Delta_t - \Delta_r$ nicht durch den Retroreflektor hervorgerufen werden, da dieser Signalschwankungen mit höheren Ortsfrequenzen induziert. Dagegen ist es prinzipiell möglich, dass der für die Kalibrierung verwendete Polfilter einen örtlich variierenden Dichroismus aufweist, welcher den Wert Ψ_t des Strahlteilers beeinflusst. Dass der Polfilter entgegen der getroffenen Annahmen im Kalibrieralgorithmus nicht ideal ist ($\Psi_t \approx 89,3^\circ$), wurde bereits in Abschnitt 7.3.2 gezeigt. Die Abb. 7.12d

zeigt schließlich die örtliche Variation des Azimutwinkels des Polfilters. Mögliche Ursachen für die Variation des Azimutwinkels sind herstellungsbedingte Abweichungen und eine Welligkeit des Polfilters.

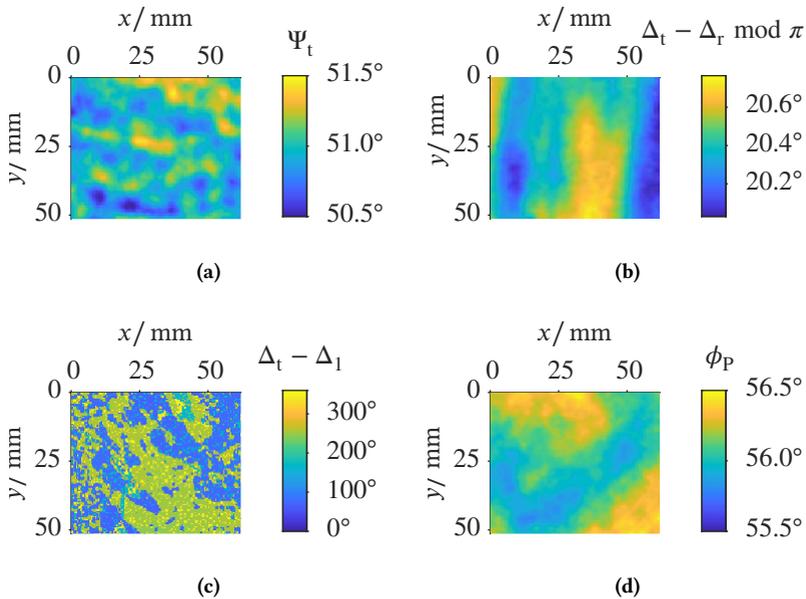


Abbildung 7.12: Die Schaubilder (a)-(c) zeigen verschiedene, örtlich aufgelöste Kenngrößen des Strahlteilers, die vom Kalibrieralgorithmus aus den Intensitätsmessungen berechnet wurden. In (a) ist der Dichroismus, in (b) die Differenz der Verzögerung einer Transmissions- und Reflexionsmessung und in (c) die Differenz der Verzögerung einer Transmissionsmessung und Δ_1 abgebildet, wobei Δ_1 eine statistisch verteilte, aus dem Kalibrieralgorithmus resultierende Zufallsvariable ist. Der örtlich aufgelöste Azimutwinkel der Polarisationsfolie ist in (d) abgebildet.

7.3.5 Brechungsindex des Oberflächenspiegels

Das Verfahren aus Abschnitt 5.7.3 zur Bestimmung der Oberflächenneigung einer Probe erfordert einen Oberflächenspiegel bestehend aus optisch isotropen Medien. Vereinfachend wurde dabei ein metallisches Substrat angenommen, welches jedoch nur im Vakuum stabil ist, da jedes Metall

in Luft eine Oxidschicht ausbildet¹. Im abbildenden Ellipsometer wird ein Aluminiumspiegel verwendet, dessen Oxidschicht i. d. R. bis zu 6 nm dick sein kann [Eve15]. Messungen mit dem spektroskopischen Ellipsometer ergeben Schichtdicken von bis zu 4 nm. Rechnerisch bietet es sich an, die Oxidschicht zu vernachlässigen und stattdessen den Brechungsindex des Substrats zu ändern [Neg20a]. Hat bspw. ein Aluminium-Substrat einen Brechungsindex von $\underline{n}_{\text{Al}} = 1,318 - 7,515i$ und die Oxidschicht einen Brechungsindex von $n_{\text{AlO}_2} = 1,765$, so erhält man die Kurven aus Abb. 7.13a für Ψ_{O} , Δ_{O} und R_{O} . Bei einem unbeschichteten Substrat mit Brechungsindex $0,836 - 5,950i$ erhält man zwar andere Kurven, jedoch gilt für die Differenzen der Messwerte Δ_{O}^{Ψ} , $\Delta_{\text{O}}^{\Delta}$ und Δ_{O}^R für Ψ , Δ bzw. R im Intervall $\theta_{\text{O}} \in [30^\circ, 60^\circ]$: $|\Delta_{\text{O}}^{\Psi}| \leq 0,002^\circ$, $|\Delta_{\text{O}}^{\Delta}| \leq 0,014^\circ$ und $|\Delta_{\text{O}}^R| \leq 0,0015$; siehe Abb. 7.13b. Der Brechungsindex \underline{n}_{O} der sog. pseudo-dielektrischen Funktion des Oberflächenspiegels wurde sowohl mit dem spektroskopischen als auch (indirekt) mit dem abbildenden Ellipsometer gemessen. Drei Rotationswinkel des Reflektors sind für eine eindeutige Neigungswinkelbestimmung mit dem abbildenden Ellipsometer erforderlich. Der resultierende Informationsgewinn bei Verwendung von acht Rotationswinkeln ermöglicht die zusätzliche Bestimmung von $\underline{n}_{\text{O}} = 0,9051 - 5,7304i$ über ein Modell-Fitting. Mit dem spektroskopischen Ellipsometer erhält man bei $\lambda = 625 \text{ nm}$ und $\theta_{\text{O}} = 45^\circ$ den Brechungsindex $\underline{n}_{\text{O}} = 1,085 - 6,226i$, wenn man die Schichtdicke der Oxidschicht unter Verwendung von Literaturangaben von $\underline{n}_{\text{Al}}$ und n_{AlO_2} fittet und nach dem Fitting den Brechungsindex der pseudo-dielektrischen Funktion \underline{n}_{O} simuliert. Unpassende Literaturangaben für die Brechungsindizes von Al und AlO_2 sowie ein evtl. nicht adäquates Schichtmodell aufgrund von Rauigkeiten o. ä. könnten die unterschiedlichen Werte von \underline{n}_{O} zwischen dem spektroskopischen und dem abbildenden Ellipsometer erklären.

¹ Nur bei Gold ist die Oxidschicht sehr dünn und i. Allg. vernachlässigbar.

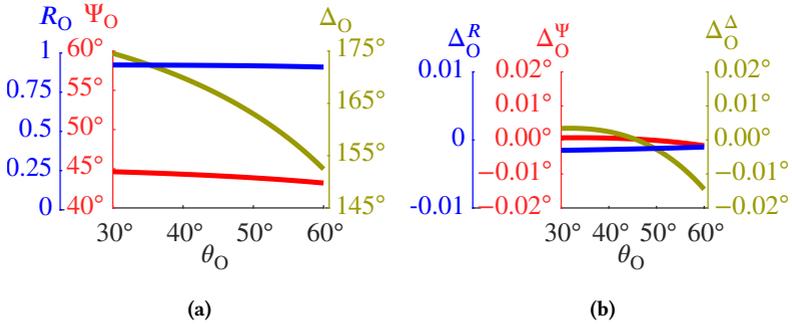


Abbildung 7.13: In (a) sind die Werte für Ψ_O , Δ_O und R_O eines Al-Substrats mit natürlicher Oxidschicht abhängig vom Einfallswinkel aufgetragen. In (b) sind die Differenzen Δ_O^Ψ , Δ_O^Δ , Δ_O^R der Werte Ψ_O , Δ_O und R_O eines Al-Substrats mit Oxidschicht und eines fiktiven Substrats ohne Beschichtung aufgetragen. Abgeänderter Nachdruck von (a) mit Genehmigung aus Negara et al., J. Vac. Sci. Technol. B 38, 014016 (2020). Copyright 2020, AVS.

7.4 Messung bei gedrehtem Polarisator

Eine Möglichkeit, die Messunsicherheit eines PSD zu bestimmen, besteht in der Messung einer Kalibrierprobe wie einem Polarisationsprisma mit großem Lösungsverhältnis. Der Azimutwinkel eines solchen Polarisationsprismas lässt sich mechanisch präzise einstellen und wird mit ϕ_{rs} bezeichnet. Aus den Messwerten können anhand der Gleichungen (3.79) und (3.80) die Gütemaße $DoCP$, $DoLP$ und $AoP := \vartheta$ bestimmt werden. Dieses Vorgehen ist nicht nur für einen gemessenen Stokes-Vektor \mathbf{S}_d , sondern auch für eine gemessene Müller-Matrix \mathbf{M}_S anwendbar, indem bspw. die Detektion des Stokes-Vektors \mathbf{S}_d bei unpolarisierter Beleuchtung $\mathbf{S}_{is} = \mathbf{diag}(1,0,0,0)$ simuliert wird:

$$\mathbf{S}_d = \mathbf{M}_S \mathbf{S}_{is}. \quad (7.15)$$

Um einen Vergleich zu den Messwerten der RPE herzustellen, muss die Müller-Matrix mit Lichtwegumkehrung in eine unidirektionale Müller-Matrix entsprechend der Gleichung (5.27) umgerechnet werden. Die Evaluation wurde mit einem Glan-Thompson-Polarisationsprisma (B. Halle Nachf. PGT 2.08.05, Lösungsverhältnis $> 1 \cdot 10^6$, $\varnothing = 8$ mm, Fassungsdurchmesser

25 mm) und einer Drehbühne (Zaber RS60A, Genauigkeit unidirektional $0,1^\circ$, Wiederholbarkeit $0,02^\circ$) zur Einstellung des Azimutwinkels durchgeführt. Die Abb. 7.14a zeigt den Messwert des Grads der zirkularen Polarisation $DoCP_{\text{exp}}$ abhängig vom Drehwinkel ϕ_{rs} , wobei die maximale Abweichung vom Ideal $\Delta_{DoCP_{\text{exp}}} = 1,5 \cdot 10^{-2}$ beträgt. Ebenso zeigt die Abb. 7.14b die Winkelabhängigkeit des Grads der linearen Polarisation $DoLP_{\text{exp}}$ mit einer maximalen Abweichung von $\Delta_{DoLP}^{\text{exp}} = 3 \cdot 10^{-3}$. Der Azimutwinkel der Polarisation AoP_{exp} ist als Absolutwert in Abb. 7.14c und als Abweichung zwischen experimentellem Messwert und ϕ_{rs} in Abb. 7.14d abgebildet, wobei die maximale Abweichung $\Delta_{AoP}^{\text{exp}} = 0,33^\circ$ beträgt und somit etwas oberhalb der Genauigkeit der Drehbühne liegt. Die Berechnung des Azimutwinkels der Polarisation erfolgte dabei nicht anhand des Stokes-Vektors, sondern anhand der gemessenen Müller-Matrix nach Gleichung (5.36). Ein weiteres Gütemaß zur Charakterisierung des PSD ist die in Gleichung (3.94) eingeführte normierte Konditionszahl, deren Wert $\text{cond}_{\text{norm}}(\mathbf{A}_{\text{B}}(p_u, p_v)) = 0,73$ beträgt, wobei $\mathbf{p} = (p_u, p_v)$ ein exemplarisches, zufällig ausgesuchtes Pixel ist.

Diese Werte lassen sich mit den Werten anderer abbildenden Polarisationszustandsdetektoren vergleichen. Die Polarisationskamera SALSA von Bossa Nova Vision [Ved11] enthält folgende Spezifikationen der Maximalabweichungen: für den linearen Polarisationsgrad $\Delta_{DoLP}^{\text{SALSA}} = 1,4 \cdot 10^{-2}$, für den zirkularen Polarisationsgrad $\Delta_{DoCP}^{\text{SALSA}} = 1,2 \cdot 10^{-2}$ und für den Azimutwinkel der Polarisation $\Delta_{AoP}^{\text{SALSA}} = 0,81^\circ$. Die normierte Konditionszahl der Analysematrix $\mathbf{A}_{\text{SALSA}}$ ¹ beträgt $\text{cond}_{\text{norm}}(\mathbf{A}_{\text{SALSA}}) = 0,26$. Die Gütemaße des abbildenden Ellipsometers sind mit der Polarisationskamera SALSA durchaus vergleichbar oder liegen sogar näher an den Optimalwerten.

¹ <https://www.bossanovavision.com/wp-content/uploads/Publications/SALSA-Calibrationreport.pdf> (20.07.2021)

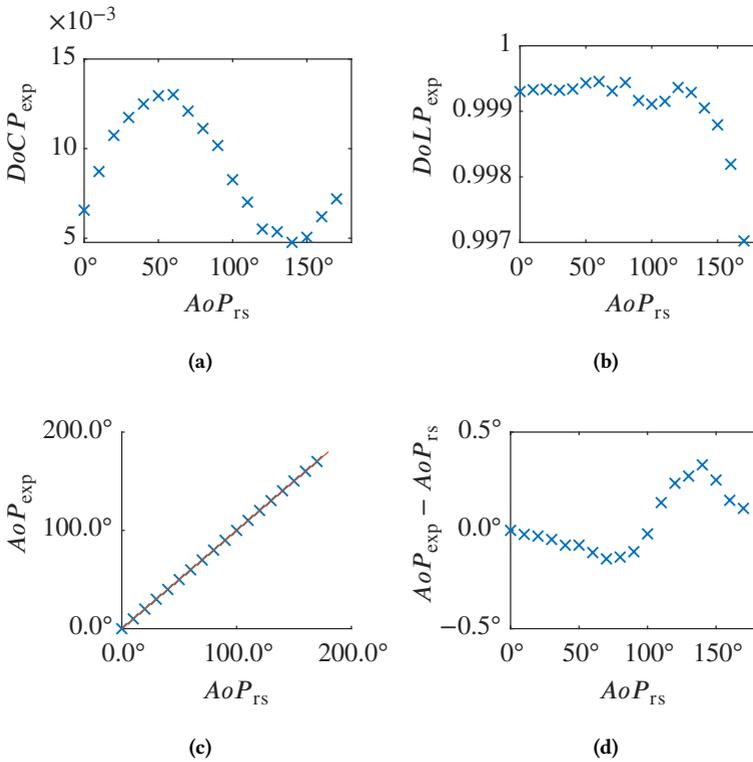


Abbildung 7.14: Die Schaubilder zeigen verschiedene Kenngrößen des detektierten Polarisationszustands während der Rotation eines Polarisationsprismas mit einer Drehbühne. Der Grad der zirkularen Polarisation ist in (a), der Grad der linearen Polarisation in (b), die detektierten Azimutwinkel in (c) und die Differenz zwischen den detektierten Azimutwinkeln und den Drehwinkeln der Drehbühne in (d) abgebildet.

7.5 Untersuchung gekrümmter Oberflächen

In diesem Abschnitt werden die vorgestellten, verschiedenen Methoden zur Messung des Oberflächenreliefs und des Normalenfelds untersucht. Dazu gehört die Verwendung von monokularem Stereo mittels Orthogonalprojektionen, die Messung bei Substraten mit bekanntem Brechungsindex und die Messung bei unbekanntem Medien mithilfe eines rotierenden Reflektors.

7.5.1 Bestimmung der Topographie-bezogenen Modellparameter mit Probenpräparation

Die Messung des Oberflächenreliefs mithilfe des Marker-basierten Verfahrens aus Abschnitt 5.7.1 wurde an einer plan-konvexen Zylinderlinse (Abmessung $50 \times 60 \text{ mm}^2$, $f = -90 \text{ mm}$, Krümmungsradius ca. $46,5 \text{ mm}$) evaluiert. Die Probe wurde auf ein Goniometer (Zaber LMG40-T4, Wiederholbarkeit $0,005^\circ$) montiert und in $0,4^\circ$ -Schritten von -8° bis $6,8^\circ$ in der Winkellage variiert, um eine Kamerabewegung zu simulieren. Insbesondere plane und rundförmige Oberflächen wie die verwendete plan-konvexe Linse können mit einer sehr hohen Präzision hergestellt werden, wodurch Abweichungen zum CAD-Modell üblicherweise im Wellenlängenbereich liegen. Daher eignet sich die Linse als Referenzobjekt für die 3D-Rekonstruktion. Die verwendeten Marker sind Schnipsel einer Retroreflexfolie mit einer Größe von ca. 4 mm^2 , die entsprechend der Abb. 7.15a auf die Oberfläche der plan-konvexen Linse statistisch verteilt aufgestreut wurden. Abb. 7.15b zeigt das Rekonstruktionsergebnis für einen Ausschnitt von $50 \times 52 \text{ mm}^2$. Zu sehen sind die Retroreflex-Schnipsel als schwarze Flecken, die gefittete B-Spline-Oberfläche als Heatmap, die Oberflächennormalen als blaue Linien und vier der insgesamt 38 Kameraposen. Betrachtet man die Differenz des Höhenprofils zwischen gefitteter B-Spline-Oberfläche und CAD-Modell an mehreren Abtastpunkten, so beträgt der RMSE $80 \mu\text{m}$ [Neg19a]. Der RMSE der Winkelabweichung der Oberflächennormalen beträgt $0,3^\circ$. Das Rekonstruktionsverfahren setzt kein Vorwissen über die Kameraposen voraus, sondern berechnet diese simultan mit der Oberflächenrekonstruktion. Der RMSE der Winkelabweichung zwischen den berechneten Kameraposen und den Goniometerwinkeln beträgt $0,1^\circ$.

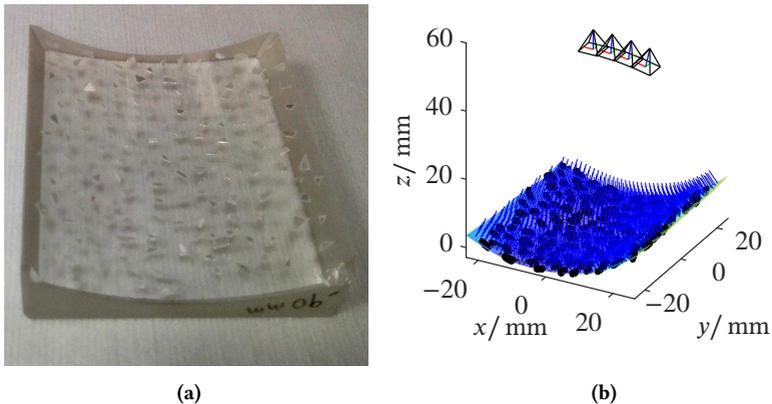


Abbildung 7.15: In (a) ist ein Schaubild der plan-konvexen Zylinderlinse mit aufliegenden Markern visualisiert. Das Ergebnis der 3D-Rekonstruktion ist in (b) dargestellt. Abgeänderter Nachdruck mit Genehmigung aus [Neg19a]. Copyright 2019, De Gruyter.

Mehrere Optimierungen sind bei dem vorgestellten Verfahren denkbar. Die Bewegung der Probe mit dem Goniometer birgt die Gefahr, dass sich die Marker zwischen den Messungen verschieben. Die Montage des abbildenden Ellipsometers auf einem Goniometer entsprechend der Abb. 2.2 hätte sowohl bei der ellipsometrischen Datenaufnahme als auch bei der Marker-basierten 3D-Rekonstruktion Vorteile. Für eine präzise 3D-Rekonstruktion sind die verwendeten Marker noch zu groß und die Dichte der Markerpositionen zu gering. Das nicht-uniforme Abtasttheorem ist aufgrund der geringen Dichte trotz des guten Rekonstruktionsergebnisses nicht erfüllt [Neg19a]. Eine deutliche Verkleinerung der Marker auf einen Durchmesser von $\varnothing = 100 \mu\text{m}$ ist möglich [Nil04] und würde das Rekonstruktionsergebnis vermutlich deutlich verbessern.

7.5.2 Bestimmung der Topographie-bezogenen Modellparameter bei Substraten

Bei optisch isotropen Substraten mit bekanntem Brechungsindex lässt sich nach den Gleichungen (3.115) und (5.36) die Oberflächennormale direkt aus der Jones- bzw. Müller-Matrix berechnen. Die Rekonstruktion der Oberfläche wird an einem Parabolspiegel (Thorlabs MPD249-M03) bestehend aus einem unbeschichteten Gold-Substrat evaluiert ($n_{\text{Au}} = 0,208 - 2,938i$). Die Abb. 7.16a und 7.16b zeigen das Rekonstruktionsergebnis des Normalenfelds

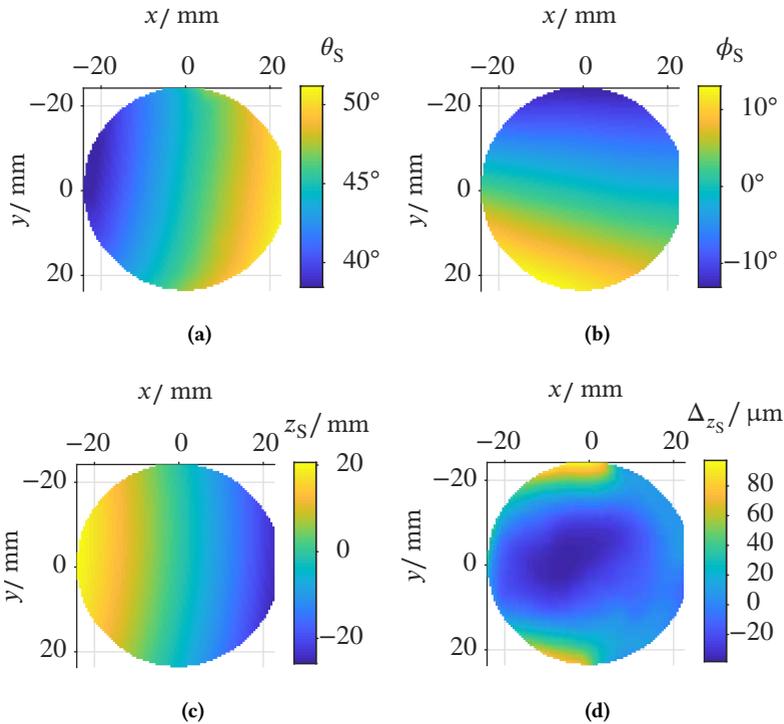


Abbildung 7.16: (a)-(c) zeigen jeweils die Messwerte eines Parabolspiegels für θ_S , ϕ_S und z_S , die aus der gemessenen Müller-Matrix unter der Annahme eines bekannten Brechungsindex berechnet wurden. Die Differenz von Oberflächenrelief und CAD-Modell ist in (d) abgebildet. Abgeänderter Nachdruck mit Genehmigung aus Negara et al., J. Vac. Sci. Technol. B 38, 034012 (2020). Copyright 2020, AVS.

der Oberfläche parametrisiert durch θ_S und ϕ_S . Basierend auf dem Verfahren aus [Neu02a] wird aus dem Normalenfeld das Oberflächenrelief $z_S(x,y)$ berechnet und daraus die Differenz $z_{S,\Delta}$ zwischen berechnetem Oberflächenrelief und dem CAD-Modell des Parabolspiegels; siehe Abb. 7.16c und 7.16d. Für einen Vergleich der Messwerte mit dem CAD-Modell ist zunächst eine Registrierung der 3D-Modelle erforderlich. Überführt man beide Modelle in 3D-Punktwolken, liefert der ICP-Algorithmus (engl. *iterative closest point*) die gesuchte Registrierung [Sze11]. Allerdings ist dieses Verfahren in dem hier betrachteten Anwendungsfall nicht ausreichend robust, so dass in einem Vorverarbeitungsschritt die Registrierung anhand der Normalenfelder über eine nichtlineare Optimierung berechnet wird. Ein Vergleich der Messdaten mit dem CAD-Modell liefert folgende Werte für den mittleren absoluten Fehler (engl. *mean absolute error*, MAE): $\text{MAE}(\theta_S) = 0,3^\circ$, $\text{MAE}(\phi_S) = 0,6^\circ$ und $\text{MAE}(z_{S,\Delta}) = 18 \mu\text{m}$ [Neg20a]. Die Fertigungstoleranz des Parabolspiegels ist nicht spezifiziert, allerdings ist von einer größeren Fertigungstoleranz als bei planen und rundförmigen Oberflächen auszugehen.

7.5.3 Bestimmung der Topographie- und Material-bezogenen Modellparameter

Im vorherigen Abschnitt wurde gezeigt, dass das Oberflächenrelief spiegelnder Oberflächen mit dem abbildenden Ellipsometer ziemlich präzise rekonstruiert werden kann, falls der Brechungsindex bekannt ist. Im Folgenden wird das Messverfahren aus Abschnitt 5.7.3 evaluiert, das ohne Vorwissen über die untersuchte Probe auskommt. Zunächst wird das Normalenfeld und das Oberflächenrelief eines Oberflächenspiegels untersucht, welcher in Abb. 7.17a abgebildet ist. Der Oberflächenspiegel wird unter einem schrägen Lichteinfall beleuchtet, wie an den Werten von θ_S und z_S aus den Abb. 7.17b und 7.17d ersichtlich. Idealerweise ist der Oberflächenspiegel eine Ebene. Die Werte für $z_{S,\Delta}$ werden daher über den Abstand der Werte z_S zu einer Ausgleichsebene berechnet und sind in Abb. 7.17e abgebildet. Ein Vergleich der Messdaten mit der Ausgleichsebene ergibt folgende Werte der Fehler- bzw. Streuungsmaße: $\text{MAE}(\theta_S) = 0,014^\circ$, $\text{MAE}(\phi_S) = 0,023^\circ$ und $\text{MAE}(z_{S,\Delta}) = 1,38 \mu\text{m}$.

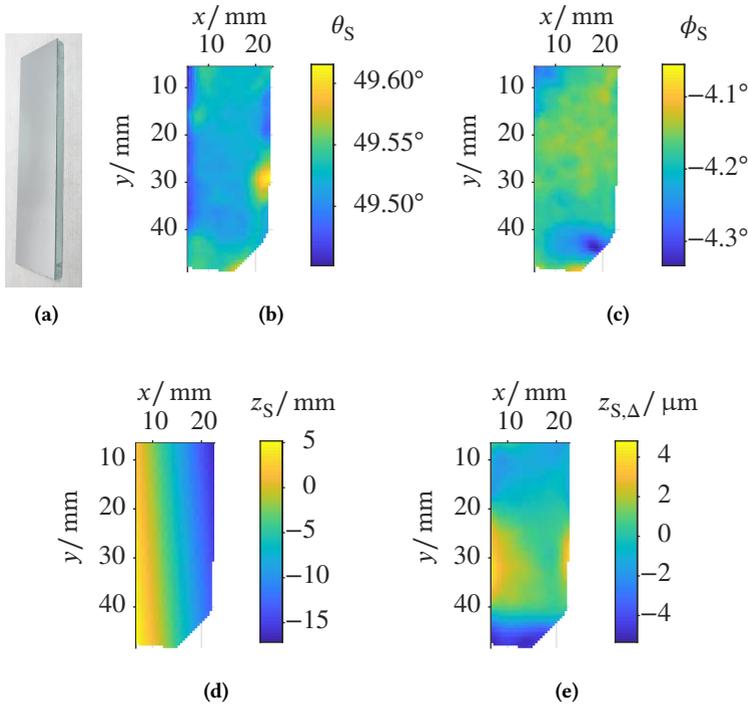


Abbildung 7.17: In (a) ist ein Foto eines Oberflächenspiegels abgebildet. Die Messwerte für θ_S sind in (b), für ϕ_S in (c), für z_S in (d) und für $z_{S,\Delta}$ in (e) abgebildet. Abgeänderter Nachdruck mit Genehmigung aus Negara et al., J. Vac. Sci. Technol. B 38, 014016 (2020). Copyright 2020, AVS.

Als Nächstes wird die Topographie und die Müller-Matrix des Parabolspiegels (Thorlabs MPD249-M03) untersucht. Die Abb. 7.18a bis 7.18d zeigen wieder die Einfallswinkel, das Oberflächenrelief und die Abweichung zum CAD-Modell. Es ergeben sich folgende Fehlermaße: $MAE(\theta_S) = 0,3^\circ$, $MAE(\phi_S) = 0,7^\circ$ und $MAE(z_{S,\Delta}) = 25 \mu\text{m}$ [Neg20a]. Die Abweichungen zum CAD-Modell sind mit denen aus Abschnitt 7.5.2 vergleichbar, obwohl völlig unterschiedliche Messverfahren genutzt wurden. Anhand des gemessenen Azimutwinkels kann nun zunächst die Müller-Matrix ohne Lichtwegumkehrung berechnet werden; siehe Gleichung (5.27).

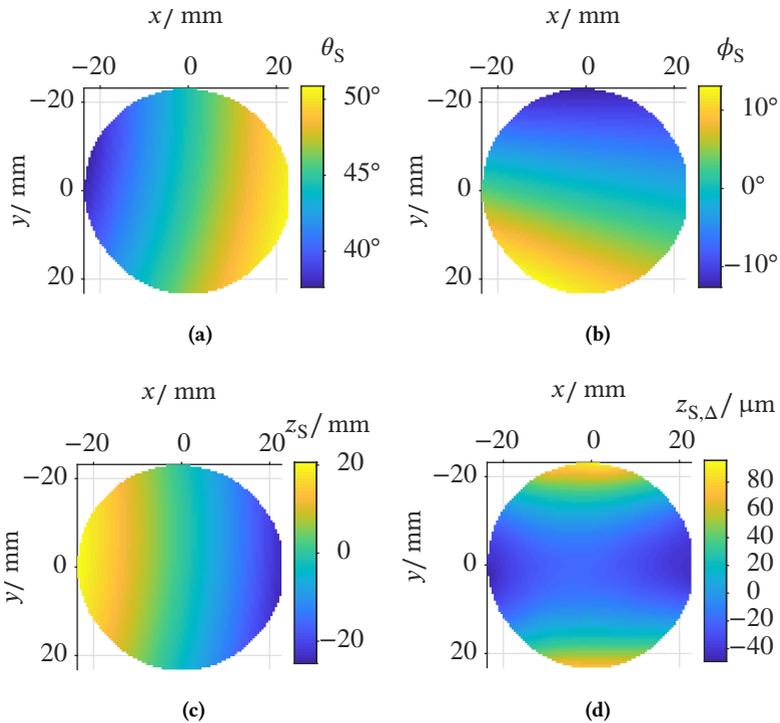


Abbildung 7.18: (a)-(c) zeigen jeweils die berechneten Messwerte für θ_s , ϕ_s und z_s mit der Methode des rotierenden Reflektors und (d) zeigt die Differenz von Oberflächenrelief und CAD-Modell. Abgeänderter Nachdruck mit Genehmigung aus Negara et al., J. Vac. Sci. Technol. B 38, 014016 (2020). Copyright 2020, AVS.

Schließlich lässt sich daraus über den Einfallswinkel der komplexe Brechungsindex des Gold-Substrats berechnen. Der reelle Brechungsindex und der Extinktionskoeffizient sind in den Abb. 7.19a und 7.19b abgebildet. Mit dem spektroskopischen Ellipsometer wurde ein Brechungsindex von $\underline{n} = 0,198 - 2,977i$ für einen vergoldeten Oberflächenspiegel (Thorlabs PF10-03-M03) bei $\lambda = 625$ nm gemessen. Unter der Annahme, dass die Brechungsindizes des Plan- und Parabolspiegels identisch sind, erhält man $\text{MAE}(n_s) = 0,013$ und $\text{MAE}(\kappa_s) = 0,037$ [Neg20a].

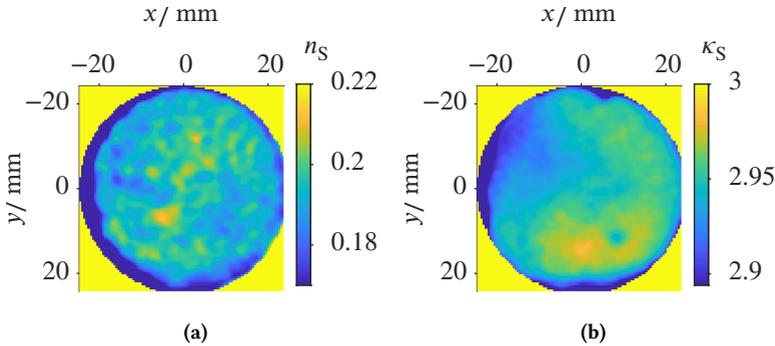


Abbildung 7.19: (a) zeigt den reellen Brechungsindex und (b) den Extinktionskoeffizienten, die über eine inverse analytische Abbildung aus der Müller-Matrix ohne Lichtwegumkehrung und dem Einfallswinkel berechnet wurden. Abgeänderter Nachdruck mit Genehmigung aus [Neg20a]. Copyright 2020, American Vacuum Society.

Zu guter Letzt wird eine $20 \times 20 \text{ mm}^2$ große, plane Si-Probe mit einer SiO_2 -Beschichtung untersucht. Die Abbildungen Abb. 7.20a und 7.20b zeigen den Einfallswinkel und den Azimutwinkel. Die Abweichungen des Oberflächenreliefs zu einer Ausgleichsebene ist in Abb. 7.20c abgebildet. Der Randbereich der Silizium-Probe wurde ausmaskiert, da im Grenzbereich zwischen Probe und Hintergrund die Messunsicherheit besonders hoch ist. Wie auch beim Oberflächenspiegel wird die Ebene mit geringer Messunsicherheit rekonstruiert. Aus den Müller-Matrizen kann über die Gleichung (3.122) die Schichtdicke bestimmt werden. Dabei ist die Kenntnis der Brechungsindizes von Substrat und Beschichtung erforderlich. Über den in der Formel eingehenden Einfallswinkel ist jedoch kein Vorwissen nötig. Die Referenzwerte der Brechungsindizes von Si und SiO_2 wurden der Auswertesoftware DeltaPsi2 von Horiba entnommen: $\underline{n}_{\text{Si}} = 3,885 - 0,0165i$ und $\underline{n}_{\text{SiO}_2} = 1,457$ bei $\lambda = 625 \text{ nm}$. Die damit berechneten Schichtdicken sind in Abb. 7.20d abgebildet. Mit dem Horiba-Ellipsometer wurde bei der Sensorkalibrierung durch den Hersteller eine Schichtdicke von $82,9 \text{ nm}$ an einem Messpunkt gemessen, wobei das Konfidenzintervall mit $\pm 15 \text{ \AA}$ spezifiziert ist. Der größte Anteil der Messwerte aus Abb. 7.20d liegt somit innerhalb dieses Konfidenzintervalls. Lediglich am

linken Rand der Probe erhält man Schichtdicken die größer sind und außerhalb des Konfidenzintervalls liegen. Im oberen, mittleren Bereich sind Ausreißer zu sehen, die weiß markiert wurden. Man erhält folgende Fehlermaße für die Topographie und Schichtdicke: $MAE(\theta_S) = 0,007^\circ$, $MAE(\phi_S) = 0,008^\circ$, $MAE(d_S) = 9,9 \text{ \AA}$. Insgesamt stehen die Messwerte beider Ellipsometer in guter Übereinstimmung. Um die Plausibilität der örtlichen Schichtdickenverteilung abschließend zu beurteilen, wäre jedoch eine zweidimensionale Abtastung der Probe mit dem spektroskopischen Ellipsometer erforderlich.

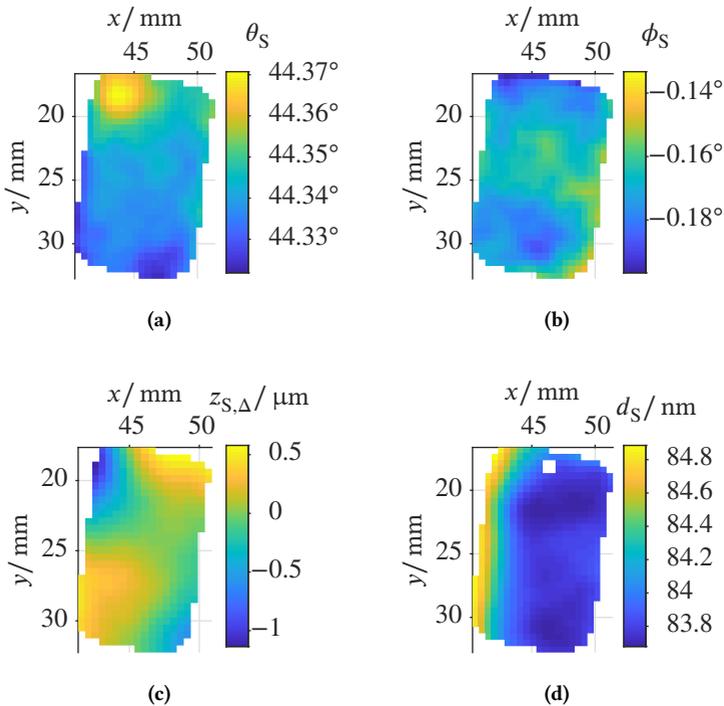


Abbildung 7.20: (a)-(c) zeigen die Topographie-bezogenen Modellparameter und (d) die Schichtdicke einer SiO_2 -Beschichtung auf einem Si-Substrat.

8 Abschlussbemerkungen

In den letzten Jahren hat sich die Ellipsometrie mit Lichtwegumkehrung unter Verwendung von Retroreflexfolien als vielversprechende Möglichkeit herauskristallisiert, beliebig geformte Oberflächen zu vermessen und somit das Anwendungsfeld der Ellipsometrie sowohl in der industriellen Sichtprüfung als auch im akademischen Bereich zu erweitern. Das vorgestellte abbildende Ellipsometer erbringt den Machbarkeitsnachweis für das neuartige Messprinzip und zeigt eine Möglichkeit für die praktische Umsetzung auf. Zu diesem Themenfeld wurden Publikationen veröffentlicht und Patente eingereicht, um die mit früheren Publikationen verbundenen Einschränkungen zu überwinden und schließlich eine fast uneingeschränkte Erweiterung der „klassischen“ Ellipsometrie hin zur Vermessung beliebig geformter Oberflächen zu ermöglichen. Im Folgenden werden die wichtigsten Ergebnisse und Erkenntnisse aus den vorhergehenden Kapiteln zusammengefasst und weitere, mögliche Entwicklungen vorgeschlagen.

8.1 Zusammenfassung der Beiträge und Ergebnisse

In dieser Arbeit wurde das Potenzial der Ellipsometrie mit Lichtwegumkehrung allgemein und speziell bei Verwendung von mikrostrukturierten Retroreflexfolien beleuchtet. In Kapitel 2 wurde ein Überblick über die grundlegenden Messgrößen in der Ellipsometrie, das Messprinzip, wesentliche Entwicklungen und verschiedene Aufbauten eines Ellipsometers wiedergegeben. Abbildende Ellipsometer sind für die industrielle Sichtprüfung

zwar prädestiniert, erfordern jedoch im Vergleich zu punktmessenden Laser-Ellipsometern i. d. R. einiges an Mehraufwand, um eine quantitative Messung zu ermöglichen [Asi08]. Bisherige Ellipsometer sind zudem nur eingeschränkt für die Charakterisierung von gekrümmten Oberflächen verwendbar. Es wurden im Stand der Technik zwar vielversprechende punktmessende Systeme zur Charakterisierung von gekrümmten Oberflächen realisiert, die Lösung aus [Neu02b] erfordert jedoch bspw. eine kontinuierliche mechanische Höhengachführung bzw. Fokusvariation beim Abscannen einer gekrümmten Oberfläche. Die Punktmessung und die Fokusvariation verringern die Messgeschwindigkeit. Ebenfalls im Stand der Technik wurde ein grundlegend neuartiger optischer Aufbau vorgestellt, bei dem das Problem der spekularen Reflexion an gekrümmten Oberflächen mithilfe der polarisationserhaltenden Retroreflexion gelöst wird [Har99, Har12], was den Ausgangspunkt der vorliegenden Arbeit bildete.

In Kapitel 3 wurden zunächst die theoretischen Grundlagen der linearen und nichtlinearen Wellenoptik wiedergegeben, um darauf aufbauend den Jones- und Müller-Formalismus herzuleiten und für (fast) beliebige örtlich und zeitlich variierende Lichtwellen zu verallgemeinern. Für die Messung des Polarisationszustands wurde eine neue Variante des DoAmP theoretisch erarbeitet [Neg19b], deren Analysematrix sich durch besonders hohe Werte der normierten Determinante und Konditionszahl auszeichnet und eine besonders einfache Fertigung erlaubt. Erstmals wurde dabei eine Variante des DoAmP vorgeschlagen, um über das gesamte visuelle Spektrum eine niedrige Messunsicherheit zu erreichen. Auf wichtige analytische Formeln für die Ellipsometrie an ebenen Oberflächen wurde in dem Kapitel ebenfalls eingegangen.

Das Funktionsprinzip der verwendeten polarisationserhaltenden Retroreflexfolie im Speziellen und von mikrostrukturierten Retroreflexfolien im Allgemeinen wurde in Kapitel 4 behandelt. Aufgrund von räumlichen Symmetrien der Mikroelemente sind die allermeisten Retroreflexfolien unter Normallichteinfall polarisationserhaltend, es sei denn, die Polarisationserhaltung wird durch andere Effekte gestört, wie die Transmission in anisotropen Medien oder eine nichtideale Mikrostruktur. Während Mikrokugel-basierte Retroreflektoren über einen großen Einfallswinkelbereich polarisationserhaltend

wirken, ist dies bei Mikrotripel-Retroreflektoren nicht der Fall. Allerdings gibt es Anwendungsfälle, wo eine Einfallswinkel-abhängige Polarisationszustandsänderung erwünscht ist. Neben den Polarisationseigenschaften wurde auch der Reflexionsgrad untersucht, da dieser das Signal-Rausch-Verhältnis beeinflusst.

In Kapitel 5 wurde das abbildende Ellipsometer basierend auf dem neuen Messprinzip und die dazugehörige Messgleichung für die RPE vorgestellt. Es wurde ein funktionaler Zusammenhang zwischen der UE und der RPE bei Betrachtung der Messwerte Ψ und Δ sowie der Müller-Matrizen hergestellt. Die Messwerte ohne Retroreflexion können aus den Messwerten mit Retroreflexion zurückgerechnet werden. Für Ψ und Δ sowie für die Jones-Matrix verdoppelt sich die Anzahl der Mehrdeutigkeiten. Die Anzahl der Mehrdeutigkeiten ist somit bei isotropen und anisotropen, nicht-depolarisierenden Medien identisch. Bei depolarisierenden Medien können im Müller-Formalismus bis zu acht mögliche Lösungen auftreten. Viele wichtige Probleme in der UE sind über direkte Verfahren lösbar. Aufgrund des funktionalen Zusammenhangs zwischen der UE und der RPE können diese direkten Verfahren bei der RPE wiederverwendet werden, solange die Oberflächennormale bekannt ist. Durch Verkettung der genannten funktionalen Abhängigkeiten erhält man eine Auswertalgorithmik, die mit direkten Verfahren ein breites Anwendungsspektrum abdeckt. Beispielsweise lässt sich damit das Schichtwachstum eines Schichtstapels auf einer Linsenoberfläche in einer Beschichtungsanlage in-situ messen. Direkte Verfahren vermeiden einige Probleme der numerischen Optimierung wie lokale Minima, geeignete Startwerte sowie die Suche aller globalen Minima und bringen insbesondere für die abbildende Ellipsometrie eine große Performancesteigerung mit sich. Die vorgestellten funktionalen Abhängigkeiten zwischen der UE und der RPE helfen zudem, bekannte Methoden der explorativen Analyse für die RPE wiederzuverwenden. Dazu gehört die Messung des Depolarisationsindex, der Kreuzpolarisation, des Dichroismus, der Verzögerung und die Untersuchung von Symmetrien. Dafür ist die Kenntnis des Azimutwinkels nötig, der z. B. bei isotropen Medien aus der Müller-Matrix mithilfe der vorgestellten analytischen Funktionen berechnet werden kann. Im Vergleich zu alternativen Berechnungsformeln erreicht man damit eine minimale Messunsicherheit

bei der Messung des Azimutwinkels. Für unbekannte Medien kann der Azimutwinkel aus einer gemessenen Müller-Matrix nicht bestimmt werden. Um dies zu zeigen wurden die Freiheitsgrade der Müller-Matrizen, die mit der UE und der RPE aufgenommen wurden, miteinander verglichen und zu den Materialklassen in Beziehung gesetzt. Weiter wurde gezeigt, dass die RPE in den meisten Anwendungsfällen das gleiche Potenzial wie die UE aufweist, da die untersuchten Medien in Reflexionsanordnung meist reziprok und richtungsinvariant sind. Allerdings wurde auch gezeigt, dass nicht alle Anwendungsfälle durch die RPE abgedeckt werden. Möchte man nur die Oberflächennormale bestimmen, so wurden zwei Verfahren vorgestellt, die für alle Materialklassen angewendet werden können. Das erste Verfahren berechnet eine 3D-Rekonstruktion des Oberflächenreliefs einer präparierten Oberfläche anhand von Aufnahmen einer Kamera mit telezentrischer Abbildungsoptik. Dieses Verfahren erfordert keine geänderte Sensorkonfiguration und stellt keine Anforderungen an die Genauigkeit der Polarisationsmessungen. Es eignet sich besonders für Laborumgebungen im akademischen Umfeld, welches ein wichtiges Einsatzfeld der Ellipsometrie bildet. Das zweite Verfahren berechnet das Normalenfeld aus den Richtungsvektoren der reflektierten Lichtstrahlen, die aus den modulierten Müller-Matrizen eines rotierenden Reflektors gewonnen werden. Motiviert wurde dieses Verfahren durch die winkelabhängigen Polarisationsseigenschaften von unbeschichteten Mikrotripeln, die in der Theorie ebenfalls eine Topographie-Messung ermöglichen. Praktisch scheitert dies jedoch an der Verfügbarkeit solcher Folien mit den gewünschten Polarisationsseigenschaften. Die zweite Methode setzt allerdings voraus, dass die Müller-Matrix der Probe regulär ist. Beide Methoden zur separaten Messung der Oberflächennormalen bieten den Vorteil, Mehrdeutigkeiten zu reduzieren und große Messunsicherheiten aufgrund von Parameter-Korrelationen zu vermeiden, was bei einer Modell-basierten Messung mit spektroskopischer Ellipsometrie zu Problemen führen kann. Beispielsweise kann es in manchen Anwendungsfällen schwierig bis unmöglich sein die Schichtdicke und den Einfallswinkel simultan zu bestimmen.

Die Funktionsfähigkeit des abbildenden Ellipsometers beruht auf der Annahme, dass eine präzise Polarisationsmessung auch dann möglich ist, wenn die

Parameter des optischen Systems unbekannt sind. Dies wird durch eine Sensorkalibrierung sichergestellt. Auch handelsübliche Ellipsometer erfordern in regelmäßigen Abständen eine Sensorkalibrierung. Die Kalibrierroutine aus Kapitel 6 ist an den optischen Aufbau des abbildenden Ellipsometers angepasst und berechnet die Kalibrierung pixelweise in drei Stufen unter geänderten Bedingungen. Bis auf einen Polfilter und einen Spiegel bzw. Retroreflektor werden keine Kalibrierproben benötigt, insbesondere keine Verzögerungselemente, die herstellungsbedingt größere Toleranzen aufweisen als Polfilter. Diese Einfachheit im Vergleich zum de-facto Standard der UE, der Eigenwertbasierten Kalibrierung [Com99], funktioniert nur unter gewissen Annahmen: Erstens muss das emittierte Licht polarisationsunabhängig die gleiche Intensität aufweisen und zweitens muss es vollständig polarisiert sein. Ob es sich um harte Annahmen oder, aufgrund von Mittelungseffekten bei der Modulation des PSG, um weiche Annahmen handelt, bedarf weiterer Untersuchung. Jedenfalls ist die Eigenwertbasierte Kalibrierung nicht ohne Weiteres auf die RPE übertragbar, da gemessene Müller-Matrizen nur einen 10-dimensionalen Unterraum aufspannen, während der Raum bei der UE 16-dimensional ist. Gegenüber anderen, mehrstufigen Kalibrierverfahren für RPE [Mac12] erfordert das vorgestellte Verfahren keine Änderungen innerhalb des Sensors, insbesondere keine mechanischen Änderungen und keine Einbringung und Justierung von Kalibrierproben, was einen großen Vorteil darstellt.

Experimentelle Ergebnisse des Laser-Messsystems, des spektroskopischen Ellipsometers und des abbildenden Ellipsometers wurden in Kapitel 7 präsentiert. Die theoretisch vorhergesagte Wellenlängen-unabhängige Polarisationserhaltung symmetrischer Strukturen konnte experimentell für die Retroreflexfolie mit offenliegenden Mikrokugeln über einen Einfallswinkelbereich von $\pm 30^\circ$ bestätigt werden. Für Retroreflexfolien bestehend aus Mikrotripeln gilt dies nur zum Teil. Zwar wurde eine Retroreflexfolie mit der erwarteten achromatischen Polarisationserhaltung gefunden, der auf einen geometrisch-optischen Effekt als Ursache hindeutet. Allerdings weist die Mikroskopaufnahme nicht die erwartete Mikrostruktur auf. Eine mögliche Ursache für die beobachteten Polarisationszustandsänderungen bei den übrigen Retroreflexfolien bildet die Lichttransmission durch die Schutzschicht der pyramidalen Mikrotripel.

Die Genauigkeit der Messwerte des abbildenden Ellipsometers wurde an verschiedenen Proben mit ebenen und gekrümmten Oberflächen untersucht. Die auf der Rotation des Reflektors basierende Messmethode zur Bestimmung von θ_S und ϕ_S wurde mit einer direkten Messung von θ_S und ϕ_S an einem Substrat mit bekanntem Brechungsindex verglichen. In beiden Fällen erhielt man ähnliche Messabweichungen für θ_S und ϕ_S . Mit dem rotierenden Reflektor wurde zusätzlich der Brechungsindex und die Schichtdicke an ebenen und gekrümmten Oberflächen aus isotropen Medien gemessen. Darüber hinaus ist auch die Oberflächencharakterisierung anisotroper und depolarisierender Proben möglich. Die Charakterisierung einer Calcit-Oberfläche erwies sich jedoch aufgrund der geringen Reflektanz als problematisch. Für die Winkelkoordinaten der Oberflächennormalen, das Oberflächenrelief, den Brechungsindex sowie die Schichtdicke wurden die folgenden mittleren absoluten Fehler gemessen: $0,3^\circ$ für θ_S , $0,7^\circ$ für ϕ_S , $25\ \mu\text{m}$ für $z_{S,\Delta}$, $0,013$ für n , $0,037$ für κ und $9,9\ \text{\AA}$ für d . Als Referenzwerte diente dabei ein CAD-Modell, Referenzwerte des spektroskopischen Ellipsometers und eine beschichtete Kalibrierprobe. Diese geometrischen Messabweichungen sind als Maximalwerte zu interpretieren, da sie auch andere Ursachen haben könnten, wie eine unpassende Registrierung oder ein ungenaues 3D-Modell.

8.2 Ausblick

Das Messprinzip lässt sich ohne Weiteres auf eine Multi- oder Hyperspektalmessung erweitern, welche in den letzten Jahrzehnten sich zum Standard entwickelt hat. Dies ließe sich beim abbildenden Ellipsometer z. B. durch Verwendung von Filterrädern oder einer breitbandigen Beleuchtung und akustooptischen Modulatoren auf Beleuchtungsseite erreichen. Solange kein Vorwissen über die Oberfläche in Form eines Dispersionsmodells vorhanden ist, kann die Datenaufnahme und Datenauswertung analog zur Einwellenlängen-Ellipsometrie erfolgen. Andernfalls sind numerische Optimierungsverfahren bei der Auswertung von spektral-aufgelösten Messwerten unumgänglich. Die zuvor genannten Vorteile einer separaten Messung der Oberflächennormalen gelten bei der spektroskopischen Ellipsometrie analog.

Weitere Untersuchung ist zudem zu den Möglichkeiten der Modulation der Polarisations-eigenschaften des Retroreflektors erforderlich. Eine solche Modulation kann nicht nur für eine Topographie-Messung genutzt werden, sondern birgt auch das Potenzial, die Einschränkung der RPE auf zehn Freiheitsgrade bei der Messung der Müller-Matrix zu umgehen. Ob diese Grenze überschritten werden kann, ist bislang ungeklärt.

Für einen Produktiveinsatz gibt es noch viel Verbesserungspotenzial bei der Messgeschwindigkeit, die nicht optimiert wurde. Momentan werden Bilder einzeln aufgenommen und gemittelt. Durch Aufnahme einer Bildserie mit der maximalen Bildfrequenz der Polarisationskamera von 163 fps würde die Bildaufnahme nur noch einen Bruchteil beanspruchen. Um die Umschaltzeiten des PSG und PSD zu verringern, gibt es zwei Ansätze: Entweder man ersetzt die mechanische Bewegung durch Flüssigkristalle oder photoelastische Modulatoren [Qi17]. Oder man verwendet eine Aktorik mit kürzeren Umschaltzeiten, wie Filterräder und Kugeldrehverbindungen. Für die Modulation der Polarisations-eigenschaften des Retroreflektors wie im vorgestellten Verfahren zur Topographie-Messung erscheint jedoch nur eine mechanische Variante sinnvoll.

Ein wichtiges Anwendungsfeld, das vom abbildenden Ellipsometer nicht abgedeckt wird, für die Vermarktung jedoch von herausragendem Interesse ist, ist die mikroskopische Ellipsometrie. Insbesondere im wichtigen, akademischen Umfeld benötigt man nicht nur eine hohe Tiefenauflösung, sondern auch eine hohe laterale Auflösung. Wenig erfolgversprechend scheint es, durch Bewegung eines mikrostrukturierten Retroreflektors und Bildfilterung ein hochauflösendes Abbild der untersuchten Probe zu gewinnen. Das Problem liegt darin, dass die Wellenfront des auftreffenden Lichtes durch die Mikrostruktur gestört wird. Gepumpte phasenkonjugierende Spiegel scheinen dagegen eine vielversprechende Möglichkeit zu sein, auf einem kleinen Raumvolumen durch Verwendung starker Laser das auftreffende Licht mit einer fast idealen Wellenfront zu reflektieren. Die nachteilhaften Polarisations-eigenschaften phasenkonjugierender Spiegel sind vermutlich durch zusätzliche Polarisationsoptiken und einem damit einhergehenden

Intensitätsverlust beherrschbar. Ob phasenkonjugierende Spiegel tatsächlich mit den gewünschten optischen Eigenschaften und Raumdimensionen hergestellt werden können, bedarf einer tiefer gehenden Untersuchung. Eine spektrale Messung scheint mit phasenkonjugierenden Spiegeln nur im Zeitmultiplexverfahren möglich zu sein.

Literatur

- [Abo15] ABOU-RAS, Daniel; CABALERO, Raquel; STREECK, Cornelia; BECKHOFF, Burkhard; IN, Jung-Hwan und JEONG, Sungho: „Comprehensive Comparison of Various Techniques for the Analysis of Elemental Distributions in Thin Films: Additional Techniques“. In: *Microscopy and Microanalysis* 21.6 (2015), S. 1644–1648 (siehe S. 2).
- [Ahm08] AHMAD, Jawad Elsayed und TAKAKURA, Yoshitane: „Estimation of physically realizable Mueller matrices from experiments using global constrained optimization“. In: *Optics Express* 16.18 (2008), S. 14274–14287 (siehe S. 151).
- [Akk86] AKKERMANS; WOLF und MAYNARD: „Coherent backscattering of light by disordered media: Analysis of the peak line shape“. In: *Physical review letters* 56.14 (1986), S. 1471–1474 (siehe S. 19).
- [Art11] ARTEAGA, Oriol; GARCIA-CAUREL, Enric und OSSIKOVSKI, Razvigor: „Anisotropy coefficients of a Mueller matrix“. In: *Journal of the Optical Society of America. A, Optics, image science, and vision* 28.4 (2011), S. 548–553 (siehe S. 18).
- [Art13] ARTEAGA, Oriol: „Number of independent parameters in the Mueller matrix representation of homogeneous depolarizing media“. In: *Optics Letters* 38.7 (2013), S. 1131–1133 (siehe S. 58, 148).
- [Art14] ARTEAGA, Oriol; BALDRÍS, Marta; ANTÓ, Joan; CANILLAS, Adolf; PASCUAL, Esther und BERTRAN, Enric: „Mueller matrix microscope with a dual continuous rotating compensator setup and digital demodulation“. In: *Applied optics* 53.10 (2014), S. 2236–2245 (siehe S. 13, 14).

- [Asi08] ASINOVSKI, L.; BEAGLEHOLE, D. und CLARKSON, M. T.: „Imaging ellipsometry: quantitative analysis“. In: *physica status solidi (a)* 205.4 (2008), S. 764–771 (siehe S. 6, 14, 214).
- [Asp13] ASPNES, D. E.: „Spectroscopic ellipsometry—A perspective“. In: *Journal of Vacuum Science & Technology A* 31.5 (2013) (siehe S. 2).
- [Asp14] ASPNES, D. E.: „Spectroscopic ellipsometry — Past, present, and future“. In: *Thin Solid Films* 571 (2014), S. 334–344 (siehe S. 10).
- [Aza07] AZAD, Pedram; GOCKEL, Tilo und DILLMANN, Rüdiger: *Computer Vision: Das Praxisbuch*. Elektor-Verl., 2007 (siehe S. 167).
- [Azz03] AZZAM, R. M. A. und DE, A.: „Optimal beam splitters for the division-of-amplitude photopolarimeter“. In: *Journal of the Optical Society of America A* 20.5 (2003), S. 955–958 (siehe S. 4).
- [Azz05] AZZAM, R. M. A. und SUDRADJAT, Faisal F.: „Single-layer-coated beam splitters for the division-of-amplitude photopolarimeter“. In: *Applied Optics* 44.2 (2005), S. 190–196 (siehe S. 49, 51).
- [Azz08] AZZAM, R. M. A. und KHANFAR, H. K.: „Polarization properties of retroreflecting right-angle prisms“. In: *Applied Optics* 47.3 (2008), S. 359–364 (siehe S. 20).
- [Azz10] AZZAM, R. M. A.: „Ellipsometry“. In: *Handbook of Optics*. Hrsg. von BASS, Michael. Bd. I. McGraw-Hill, 2010. Kap. 16 (siehe S. 47, 50).
- [Azz77a] AZZAM, R. M. A.: „Return-path Ellipsometry and a Novel Normal-incidence Null Ellipsometer (NINE)“. In: *Optica Acta: International Journal of Optics* 24.10 (1977), S. 1039–1049 (siehe S. 15, 18, 150).
- [Azz77b] AZZAM, R.M.A.: „NIRSE: Normal-incidence rotating-sample ellipsometer“. In: *Optics Communications* 20.3 (1977), S. 405–408 (siehe S. 15).

- [Azz78a] AZZAM, R. M. A.: „A simple Fourier photopolarimeter with rotating polarizer and analyzer for measuring Jones and Mueller matrices“. In: *Optics Communications* 25.2 (1978), S. 137–140 (siehe S. 12).
- [Azz78b] AZZAM, R. M. A.: „Propagation of partially polarized light through anisotropic media with or without depolarization: A differential 4×4 matrix calculus“. In: *Journal of the Optical Society of America* 68.12 (1978), S. 1756–1767 (siehe S. 58).
- [Azz81a] AZZAM, R. M. A.: „Backscattering Mueller-matrix photopolarimeter with nonreciprocal polarizing–analyzing optics“. In: *Optics Letters* 6.9 (Sep. 1981), S. 417–418 (siehe S. 15).
- [Azz81b] AZZAM, R. M. A.: „Ellipsometric Configurations And Techniques“. In: *Optical Characterization Techniques for Semiconductor Technology*. Hrsg. von ASPNES, David E.; POTTER, Roy F. und SO, Samuel S. Proc. SPIE. 1981, S. 180–187 (siehe S. 3, 15).
- [Azz81c] AZZAM, R. M. A.: „Measurement of the Jones Matrix of an Optical System by Return-path Null Ellipsometry“. In: *Optica Acta: International Journal of Optics* 28.6 (1981), S. 795–800 (siehe S. 15).
- [Azz82a] AZZAM, R. M. A.: „Division-of-amplitude Photopolarimeter (DO-AP) for the Simultaneous Measurement of All Four Stokes Parameters of Light“. In: *Optica Acta: International Journal of Optics* 29.5 (1982), S. 685–689 (siehe S. 51).
- [Azz82b] AZZAM, R. M. A.: „Stationary property of normal-incidence reflection from isotropic surfaces“. In: *Journal of the Optical Society of America* 72.9 (1982), S. 1187–1189 (siehe S. 281).
- [Azz85] AZZAM, R. M. A.: „Beam-splitters for the Division-of-amplitude Photopolarimeter“. In: *Optica Acta: International Journal of Optics* 32.11 (1985), S. 1407–1412 (siehe S. 51).

- [Azz88] AZZAM, R. M. A.; MASETTI, E.; ELMINYAWI, I. M. und GROSZ, F. G.: „Construction, calibration, and testing of a four–detector photopolarimeter“. In: *Review of Scientific Instruments* 59.1 (1988), S. 84–88 (siehe S. 46).
- [Azz89a] AZZAM, R. M. A.: „Accurate calibration of the four-detector photopolarimeter with imperfect polarizing optical elements (FDP and DOAP)“. In: *Journal of the Optical Society of America A* 6.10 (1989), S. 1513–1521 (siehe S. 17, 163, 176, 194, 281).
- [Azz89b] AZZAM, R. M. A.: „Analytical determination of the complex dielectric function of an absorbing medium from two angles of incidence of minimum parallel reflectance“. In: *Journal of the Optical Society of America A* 6.8 (1989), S. 1213–1216 (siehe S. 4, 59).
- [Azz92] AZZAM, R. M. A.: „Division-of-amplitude photopolarimeter based on conical diffraction from a metallic grating“. In: *Applied Optics* 31.19 (1992), S. 3574–3576 (siehe S. 51).
- [Azz99] AZZAM, R. M. A. und BASHARA, Nicholas Mitchell: *Ellipsometry and polarized light*. ngerman. North-Holland personal library. Elsevier, 1999 (siehe S. 1, 3, 11, 35, 39, 42, 44, 46, 50, 60, 61, 151, 195).
- [Bam19] BAMMER, Ferdinand und HUEMER, Florian: „Inline thickness measurement with imaging ellipsometry“. In: *Photonics and Education in Measurement Science 2019*. Hrsg. von ROSENBERGER, Maik; DITTRICH, Paul-Gerald und ZAGAR, Bernhard. Bd. 11144. Proc. SPIE. 2019 (siehe S. 14).
- [Bar79] BARRETT, H. H. und JACOBS, S. F.: „Retroreflective arrays as approximate phase conjugators“. In: *Optics Letters* 4.6 (1979), S. 190–192 (siehe S. 133).
- [Ber10] BERTONI, B: Multi-dimensional ellipsoidal fitting. Department of Physics, South Methodist University. Techn. Ber. Technical Report No. SMU-HEP-10-14, 2010 (siehe S. 168).

- [Bey16] BEYERER, Jürgen; PUENTE LEÓN, Fernando und FRESE, Christian: Automatische Sichtprüfung: Grundlagen, Methoden und Praxis der Bildgewinnung und Bildauswertung. Springer Vieweg, 2016 (siehe S. 18, 32, 38, 49, 91, 93, 94, 139, 153, 154, 167, 189, 260, 276, 287, 288).
- [Bha08] BHANDARI, Rajendra: „Transpose symmetry of the Jones matrix and topological phases“. In: *Optics Letters* 33.8 (2008), S. 854–856 (siehe S. 148, 149).
- [Bha09] BHANDARI, Rajendra: „Reciprocity constraints on the matrix of reflection from optically anisotropic surfaces“. In: *Journal of the Optical Society of America A* 26.11 (2009), S. 2368–2372 (siehe S. 148).
- [Bia93] BIAN, S.; ZHANG, J.; SU, X.; XU, K.; SUN, W.; JIANG, Q.; CHEN, H. und SUN, D.: „Self-pumped phase conjugation of 18 degrees -cut Ce-doped KNSBN crystal at 632.8 nm“. In: *Optics Letters* 18.10 (1993), S. 769–771 (siehe S. 125).
- [Bor19] BORN, Max; WOLF, Emil und KNIGHT, Peter: Principles of optics. Cambridge University Press, 2019 (siehe S. 22, 28, 31, 32, 34, 35, 40, 56, 77, 267).
- [Boy08] BOYD, Robert W.: Nonlinear optics. Elsevier/Academic Press, 2008 (siehe S. 25, 129, 264).
- [Bra00] BRACEWELL, Ronald Newbold: The Fourier transform and its applications. McGraw-Hill series in electrical and computer engineering. McGraw Hill, 2000 (siehe S. 25, 109).
- [Bre01] BREVET, Pierre-Francois: „Nonlinear Optics at Liquid-Liquid Interfaces“. In: *Liquid Interfaces in Chemical, Biological and Pharmaceutical Applications*. CRC Press, 2001, S. 170–204 (siehe S. 31).
- [Bre96] BREVET, Pierre F.: „Phenomenological three-layer model for surface second-harmonic generation at the interface between two centrosymmetric media“. In: *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* 92.22 (1996), S. 4547–4554 (siehe S. 31).

- [Bro09] BROWN, James Ward und CHURCHILL, Ruel Vance: Complex variables and applications. Brown and Churchill series. McGraw-Hill, 2009 (siehe S. 261).
- [Bro19] BROKATE, Martin und KERSTING, Götz: Maß und Integral. Mathematik Kompakt. Springer, 2019 (siehe S. 257, 259).
- [Bru91] BRUDZEWSKI, K.: „Static Stokes Ellipsometer: General Analysis and Optimization“. In: *Journal of Modern Optics* 38.5 (1991), S. 889–896 (siehe S. 50).
- [Bu-86] BU-ABBUD, G. H.; BASHARA, N. M. und WOOLLAM, John A.: „Variable wavelength, variable angle ellipsometry including a sensitivities correlation test“. In: *Thin Solid Films* 138.1 (1986), S. 27–41 (siehe S. 153).
- [Cha05] CHAO, Yu Faye und LEE, Kan Yan: „Index Profile of Radial Gradient Index Lens Measured by Imaging Ellipsometric Technique“. In: *Japanese Journal of Applied Physics* 44.2 (2005), S. 1111–1114 (siehe S. 15, 157, 158).
- [Cha06] CHAO, Yu Faye; LEE, Kan Yan und LIN, Yi de: „Analytical solutions of the azimuthal deviation of a polarizer and an analyzer by polarizer-sample-analyzer ellipsometry“. In: *Applied Optics* 45.17 (2006), S. 3935–3939 (siehe S. 157, 158).
- [Cha17] CHAO, Yu-Faye: „The Development of Three-Intensity Measurement in PSA Ellipsometry and Photoelastic Modulation Ellipsometry“. In: *Ellipsometry - Principles and Techniques for Materials Characterization*. Hrsg. von WAHAIA, Faustino. InTech, 2017 (siehe S. 15).
- [Cha71] CHANG, R. F.; CURRIE, D. G.; ALLEY, C. O. und PITTMAN, M. E.: „Far-Field Diffraction Pattern for Corner Reflectors with Complex Reflection Coefficients“. In: *Journal of Vacuum Science & Technology A* 61.4 (1971), S. 431–438 (siehe S. 20).
- [Cha90] CHAMPENEY, D. C.: A handbook of Fourier theorems. Cambridge Univ. Press, 1990 (siehe S. 258, 259, 261, 266, 268).

- [Che19] CHEN, Chia-Wei; HARTRUMPF, Matthias; LÄNGLE, Thomas und BEYERER, Jürgen: „Measurement of ellipsometric data and surface orientations by modulated circular polarized light“. In: *tm - Technisches Messen* 86.s1 (2019), S. 32–36 (siehe S. 157).
- [Che20] CHEN, Chia-Wei; HARTRUMPF, Matthias; LÄNGLE, Thomas und BEYERER, Jürgen: „Retroreflex ellipsometry for isotropic substrates with nonplanar surfaces“. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B* 38.1 (2020) (siehe S. 162).
- [Che21a] CHEN, Chia-Wei: „Characterization of Mueller matrices in retroreflexellipsometry“. In: *Proceedings of the 2020 Joint Workshop of Fraunhofer IOSB and Institute for Anthropomatics, Vision and Fusion Laboratory*. Hrsg. von BEYERER, Jürgen und ZANDER, Tim. Bd. 51. Karlsruher Schriften zur Anthropomatik. KIT Scientific Publishing, 2021, S. 19–32 (siehe S. 158).
- [Che21b] CHEN, Chia-Wei; HARTRUMPF, Matthias; LÄNGLE, Thomas und BEYERER, Jürgen: „Analytical determination of the complex refractive index and the incident angle of an optically isotropic substrate by ellipsometric parameters and reflectance“. In: *Applied Optics* 60.22 (2021) (siehe S. 61, 162).
- [Chi07] CHIPMAN, Russell A.: „Degrees of freedom in depolarizing Mueller matrices“. In: *Polarization Science and Remote Sensing III*. Hrsg. von SHAW, Joseph A. und TYO, J. Scott. Bd. 6682. Proc. SPIE. 2007 (siehe S. 151).
- [Chi10] CHIPMAN, Russell A.: „Polarimetry“. In: *Handbook of Optics*. Hrsg. von BASS, Michael. Bd. I. McGraw-Hill, 2010. Kap. 15 (siehe S. 42).
- [Cli06] CLINE, Alan K. und DHILLON, Inderjit S.: „Computation of the Singular Value Decomposition“. In: *Handbook of Linear Algebra*. CRC Press, 2006. Kap. 45 (siehe S. 165).
- [Clo89] CLOUDE, Shane R.: „Conditions For The Physical Realisability Of Matrix Operators In Polarimetry“. In: *Polarization Considerations for Optical Systems II*. Hrsg. von CHIPMAN, Russell A. Bd. 1166. Proc. SPIE. 1989 (siehe S. 151, 152).

- [Com98] COMPAIN, Eric und DREVILLON, Bernard: „Broadband division-of-amplitude polarimeter based on uncoated prisms“. In: *Applied Optics* 37.25 (1998), S. 5938–5944 (siehe S. 51).
- [Com99] COMPAIN, Eric; POIRIER, Stéphane und DREVILLON, Bernard: „General and self-consistent method for the calibration of polarization modulators, polarimeters, and Mueller-matrix ellipsometers“. In: *Applied Optics* 38.16 (Juni 1999), S. 3490–3502 (siehe S. 18, 217).
- [Dan09] DANNER, Aaron J. und LEONHARDT, Ulf: „Lossless design of an Eaton lens and invisible sphere by transformation optics with no bandwidth limitation“. In: *Conference on Lasers and Electro-Optics/International Quantum Electronics Conference*. 2009 (siehe S. 88).
- [Dei17] DEITMAR, Anton: Analysis. Lehrbuch. Springer Spektrum, 2017 (siehe S. 261, 262).
- [Den17] DENG, Yuanbo und CHU, Daping: „Coherence properties of different light sources and their effect on the image sharpness and speckle of holographic displays“. In: *Scientific reports* 7.1 (2017) (siehe S. 87).
- [Dep80] DEPATIE, D. und HAUEISEN, D.: „Multiline phase conjugation at 4 microm in germanium“. In: *Optics Letters* 5.6 (1980), S. 252–254 (siehe S. 131).
- [Die18] DIEBOLD, Alain C.; ANTONELLI, Andy und KELLER, Nick: „Perspective: Optical measurement of feature dimensions and shapes by scatterometry“. In: *APL Materials* 6.5 (2018) (siehe S. 149).
- [DIN13] DIN 67520:2013-10: Retroreflektierende Materialien zur Verkehrssicherung – Lichttechnische Mindestanforderungen an Reflexstoffe. Beuth Verlag GmbH. 2013 (siehe S. 20, 65, 105).
- [Dru88] DRUDE, P.: „Beobachtungen über die Reflexion des Lichtes am Antimonglanz“. In: *Annalen der Physik und Chemie* 270.7 (1888), S. 489–531 (siehe S. 10).

- [Dru89] DRUDE, P.: „Ueber Oberflächenschichten. I. Theil“. In: *Annalen der Physik und Chemie* 272.2 (1889), S. 532–560 (siehe S. 1, 10).
- [Dun88] DUNFORD, Nelson und SCHWARTZ, Jacob T.: General Theory. Bd. 1. Linear operators. New York: Interscience Publ, 1988 (siehe S. 270).
- [Dup94a] DUPERTUIS, M. A.; ACKLIN, B. und PROCTOR, M.: „Generalization of complex Snell–Descartes and Fresnel laws“. In: *Journal of the Optical Society of America A* 11.3 (März 1994), S. 1159–1166 (siehe S. 33, 56).
- [Dup94b] DUPERTUIS, M. A.; ACKLIN, B. und PROCTOR, M.: „Generalized energy balance and reciprocity relations for thin-film optics“. In: *Journal of the Optical Society of America A* 11.3 (März 1994), S. 1167–1174 (siehe S. 34, 56).
- [Duw19] DUWE, Matthias; QUAST, Jan-Henrik; SCHNEIDER, Stefan; FISCHER, Daniel und BECK, Uwe: „Thin-film metrology of tilted and curved surfaces by imaging Mueller-matrix ellipsometry“. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B* 37.6 (2019) (siehe S. 3, 15, 145).
- [Eck36] ECKART, Carl und YOUNG, Gale: „The approximation of one matrix by another of lower rank“. In: *Psychometrika* 1.3 (1936), S. 211–218 (siehe S. 165).
- [Ega76] EGAN, W. G. und HILGEMAN, T.: „Retroreflectance measurements of photometric standards and coatings“. In: *Applied Optics* 15.7 (1976), S. 1845–1849 (siehe S. 19).
- [Eve15] EVERTSSON, J. u. a.: „The thickness of native oxides on aluminum alloys and single crystals“. In: *Applied Surface Science* 349 (2015), S. 826–832 (siehe S. 200).
- [Fei80] FEINBERG, J. und HELLWARTH, R. W.: „Phase-conjugating mirror with continuous-wave gain“. In: *Optics Letters* 5.12 (1980), S. 519–521 (siehe S. 130).

- [Fei82] FEINBERG, J.: „Self-pumped, continuous-wave phase conjugator using internal reflection“. In: *Optics Letters* 7.10 (1982), S. 486–488 (siehe S. 125, 126, 130).
- [Fu95] FU, H.; GOODMAN, T.; SUGAYA, S.; ERWIN, J. K. und MANSURIPUR, M.: „Retroreflecting ellipsometer for measuring the birefringence of optical disk substrates“. In: *Applied Optics* 34.1 (1995), S. 31–39 (siehe S. 15).
- [Fuj07] FUJIWARA, Hiroyuki: *Spectroscopic ellipsometry: Principles and applications*. John Wiley & Sons, 2007 (siehe S. 2, 13, 28, 40, 59, 142, 263).
- [Gar13a] GARCIA-CAUREL, E.; MARTINO, A. de; GASTON, J.-P. und YAN, L.: „Application of Spectroscopic Ellipsometry and Mueller Ellipsometry to Optical Characterization“. In: *Applied Spectroscopy* 67.1 (2013), S. 1–21 (siehe S. 53, 59).
- [Gar13b] GARCIA-CAUREL, Enric; OSSIKOVSKI, Razvigor; FOLDYNA, Martin; PIERANGELO, Angelo; DRÉVILLON, Bernard und MARTINO, Antonello de: „Advanced Mueller Ellipsometry Instrumentation and Data Analysis“. In: *Ellipsometry at the Nanoscale*. Hrsg. von LOSURDO, Maria und HINGERL, Kurt. Springer, 2013, S. 31–143 (siehe S. 1, 44, 48).
- [Gar13c] GARG, Ravi; ROUSSOS, Anastasios und AGAPITO, Lourdes: „A Variational Approach to Video Registration with Subspace Constraints“. In: *International journal of computer vision* 104 (2013), S. 286–314 (siehe S. 155).
- [Gar19] GARCIA-ORTIZ, C. E.; CORTES, R.; GÓMEZ-CORREA, J. E.; PISANO, E.; FIUTOWSKI, J.; GARCIA-ORTIZ, D. A.; RUIZ-CORTES, V.; RUBAHN, H.-G. und COELLO, V.: „Plasmonic metasurface Luneburg lens“. In: *Photonics Research* 7.10 (2019), S. 1112–1118 (siehe S. 19, 88).
- [Geo08] GEORGIEV, Georgi T. und BUTLER, James J.: „BRDF study of gray-scale Spectralon“. In: *Earth Observing Systems XIII*. Hrsg. von BUTLER, James J. und XIONG, Jack. Proc. SPIE. 2008 (siehe S. 96).

- [Geo09] GEORGII, Hans-Otto: Stochastik: Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie und Statistik. De-Gruyter-Lehrbuch. de Gruyter, 2009 (siehe S. 12).
- [Gil86] GIL, José Jorge und BERNABEU, Eusebio: „Depolarization and Polarization Indices of an Optical System“. In: *Optica Acta: International Journal of Optics* 33.2 (1986), S. 185–189 (siehe S. 45).
- [Gol12] GOLDSTEIN, Herbert; POOLE, Jr. Charles P. und SAFKO, Sr. John L.: Klassische Mechanik. Wiley-VCH, 2012 (siehe S. 172).
- [Gol13] GOLUB, Gene H. und VAN LOAN, Charles F.: Matrix computations. Johns Hopkins studies in mathematical sciences. Johns Hopkins Univ. Press, 2013 (siehe S. 41, 165).
- [Gol96] GOLDMAN, M. A.: „Ball retroreflector optics“. In: *Green Bank Telescope Memo 148* (1996) (siehe S. 19).
- [Gon02] GONÇALVES, Débora und IRENE, Eugene A.: „Fundamentals and applications of spectroscopic ellipsometry“. In: *Química Nova* 25.5 (2002), S. 794–800 (siehe S. 9).
- [Goo15] GOODMAN, Joseph W.: Statistical Optics. Wiley Series in Pure and Applied Optics. Wiley, 2015 (siehe S. 22, 24, 26, 36, 75, 77, 87, 140, 274).
- [Goo96] GOODMAN, Joseph W.: Introduction to Fourier optics. Electromagnetics. McGraw-Hill, 1996 (siehe S. 107).
- [Gre10] GREENE, Nathaniel R. und FILKO, Brian J.: „Animal-eyeball vs. road-sign retroreflectors“. In: *Ophthalmic & physiological optics: the journal of the British College of Ophthalmic Opticians (Optometrists)* 30.1 (2010), S. 76–84 (siehe S. 19, 20).
- [Gri13] GRIFFITHS, David J.: Introduction to electrodynamics. Always learning. Pearson, 2013 (siehe S. 21).
- [Gru13] GRUNA, Robin: „Beleuchtungsverfahren zur problemspezifischen Bildgewinnung für die automatische Sichtprüfung“. Diss. Karlsruher Institut für Technologie, 2013 (siehe S. 94).

- [Gu18] GU, Honggang; CHEN, Xiuguo; ZHANG, Chuanwei; JIANG, Hao und LIU, Shiyuan: „Study of the retardance of a birefringent waveplate at tilt incidence by Mueller matrix ellipsometer“. In: *Journal of Optics* 20.1 (2018) (siehe S. 145).
- [Han08] HAN, Chien-Yuan; LEE, Zhen-You und CHAO, Yu-Faye: „Determining thickness of films on a curved substrate by use of ellipsometric measurement“. In: *Reflection, Scattering, and Diffraction from Surfaces*. Hrsg. von GU, Zu-Han und HANSEN, Leonard M. Bd. 7065. Proc. SPIE. 2008, S. 276–282 (siehe S. 15).
- [Han09] HAN, Chien-Yuan; LEE, Zhen-You und CHAO, Yu-Faye: „Determining thickness of films on a curved substrate by use of ellipsometric measurements“. In: *Applied Optics* 48.17 (2009), S. 3139–3143 (siehe S. 3, 15, 145).
- [Han20] HAN, Chien-Yuan; CHEN, Meng-Ting; LAI, Hong-Bin; LAI, Shih-Hsiang und LIN, Shih-Chin: „Dynamic Stokes polarimetric imaging system with dual-wavelength operation“. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B* 38.1 (2020) (siehe S. 47).
- [Hap86] HAPKE, Bruce: „Bidirectional reflectance spectroscopy“. In: *Icarus* 67.2 (1986), S. 264–280 (siehe S. 19).
- [Hap93] HAPKE, B. W.; NELSON, R. M. und SMYTHE, W. D.: „The opposition effect of the moon: the contribution of coherent backscatter“. In: *Science (New York, N.Y.)* 260.5107 (1993), S. 509–511 (siehe S. 19).
- [Har12] HARTRUMPF, Matthias: Apparatus and method for optically characterizing materials. 29. März 2012 (siehe S. 4, 9, 16, 63, 135, 214).
- [Har17] HARTRUMPF, Matthias und NEGARA, Christian: „Configurable retro-reflective sensor system for the improved characterization of the properties of a sample“. WO 2017/207681 A2. 2017 (siehe S. 63, 135, 157, 191).

- [Har20] HARTRUMPF, Matthias; CHEN, Chia-Wei; LÄNGLE, Thomas und BEYERER, Jürgen: „Ellipsometric inline inspection of dielectric substrates with nonplanar surfaces“. In: *tm - Technisches Messen* 87.6 (2020), S. 383–391 (siehe S. 16, 61).
- [Har99] HARTRUMPF, Matthias: Laser scanner measurement System. 26. Aug. 1999 (siehe S. 4, 9, 16, 63, 135, 214).
- [Hau80] HAUGE, P. S.; MULLER, R. H. und SMITH, C. G.: „Conventions and formulas for using the Mueller-Stokes calculus in ellipsometry“. In: *Surface Science* 96.1-3 (1980), S. 81–107 (siehe S. 13, 263).
- [Hec02] HECHT, Eugene: Optics. Addison-Wesley, 2002 (siehe S. 1, 18, 21, 23, 33, 34, 38, 39, 56, 86, 118).
- [Hoh13] HOHN, Franz E.: Elementary Matrix Algebra. Dover Books on Mathematics. Dover Publications, 2013 (siehe S. 166).
- [Hol96] HOLZAPFEL, Wolfgang; NEUSCHAEFER-RUBE, Ulrich und DOBERITZSCH, Jochen: „Ellipsometric topometry for technical surfaces“. In: *International Symposium on Polarization Analysis and Applications to Device Technology*. Hrsg. von YOSHIZAWA, Toru und YOKOTA, Hideshi. Bd. 2873. Proc. SPIE. 1996, S. 172–175 (siehe S. 15, 145, 157).
- [Hua07] HUANG, Yunbao und QIAN, Xiaoping: „Dynamic B-spline surface reconstruction: Closing the sensing-and-modeling loop in 3D digitization“. In: *Computer-Aided Design* 39.11 (2007), S. 987–1002 (siehe S. 155, 156).
- [Hul81] HULST, Hendrik Christoffel van de: Light scattering by small particles. Dover classics of science and mathematics. Dover Publications, 1981 (siehe S. 63, 71).
- [Ili13] ILIENKO, Andrii: Continuous counterparts of Poisson and binomial distributions and their properties. e-print arXiv:1303.5990v1. 2013 (siehe S. 288).
- [Jac06] JACKSON, John David: Klassische Elektrodynamik. De Gruyter, 2006 (siehe S. 22, 23, 27, 29–31).

- [Jäh20] JÄHNE, Bernd: Release 4 of the EMVA 1288 Standard: Adaption and Extension to Modern Image Sensors. 2020 (siehe S. 287).
- [Jai82] JAIN, R. K.: „Degenerate Four-Wave Mixing In Semiconductors: Application To Phase Conjugation And To Picosecond-Resolved Studies Of Transient Carrier Dynamics“. In: *Optical Engineering* 21.2 (1982) (siehe S. 126).
- [Jai95] JAIN, Ramesh; KASTURI, Rangachar und SCHUNCK, Brian G.: Machine vision. McGraw-Hill series in computer science. McGraw-Hill, 1995 (siehe S. 173).
- [JCG09] JCGM: Evaluation of measurement data—an introduction to the “Guide to the expression of uncertainty in measurement” and related documents (JCGM 104: 2009). Techn. Ber. Joint Committee for Guides in Metrology (JCGM), 2009 (siehe S. 12, 17).
- [Jel91] JELLISON, G. E.: „Use of the biased estimator in the interpretation of spectroscopic ellipsometry data“. In: *Applied Optics* 30.23 (1991), S. 3354–3360 (siehe S. 1).
- [Joe97] JOERGER, R.; FORCHT, K.; GOMBERT, A.; KÖHL, M. und GRAF, W.: „Influence of incoherent superposition of light on ellipsometric coefficients“. In: *Applied optics* 36.1 (1997), S. 319–327 (siehe S. 140).
- [Joh11] JOHS, Blaine und HE, Ping: „Substrate wobble compensation for in situ spectroscopic ellipsometry measurements“. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B* 29.3 (2011) (siehe S. 15, 101, 144, 151).
- [Jon41] JONES, R. Clark: „A New Calculus for the Treatment of Optical Systems, I. Description and Discussion of the Calculus“. In: *Journal of the Optical Society of America* 31.7 (1941), S. 488–493 (siehe S. 35).
- [Käl21] KÄLÄNTÄR, K.: „Optical performance characterization of curved OLED light sources“. In: *Journal of the Society for Information Display* 29.2 (2021), S. 105–114 (siehe S. 3).

- [Kar03] KARU, Tiina: „Low-Power Laser Therapy“. In: *Biomedical Photonics: Handbook*. Hrsg. von VO-DINH, Tuan. CRC Press, März 2003. Kap. 48 (siehe S. 87).
- [Kaw76] KAWABATA, S. und ICHIJI, K.: „Optical anisotropy in the plane parallel to the surface of obliquely evaporated gold films“. In: *Surface Science* 56 (1976), S. 316–321 (siehe S. 15).
- [Kim18] KIM, Sang-Hoon: Generalized Eaton Lens at Arbitrary Refraction Angles. e-print arXiv:1109.3977v1. 2018 (siehe S. 88).
- [Kit02] KITTEL, Charles: Einführung in die Festkörperphysik. Oldenbourg, 2002 (siehe S. 25, 94).
- [Kon72] KONG, Jin Au: „Theorems of bianisotropic media“. In: *Proceedings of the IEEE* 60.9 (1972), S. 1036–1046 (siehe S. 30).
- [Lec06] LECARUYER, Pierre; MAILLART, Emmanuel; CANVA, Michael und ROLLAND, Jannick: „Generalization of the Rouard method to an absorbing thin-film stack and application to surface plasmon resonance“. In: *Applied Optics* 45.33 (2006), S. 8419–8423 (siehe S. 57).
- [Lee05] LEE, Kan Yan und CHAO, Yu Faye: „The Ellipsometric Measurements of a Curved Surface“. In: *Japanese Journal of Applied Physics* 44.No. 32 (2005) (siehe S. 15, 157, 158).
- [Lee08] LEE, Hakchu: „Optical thin films on polarization preserving cube corner retroreflectors“. In: *Advances in Optical Thin Films III*. Hrsg. von KAISER, Norbert; LEQUIME, Michel und MACLEOD, H. Angus. Proc. SPIE. 2008 (siehe S. 20).
- [Li16] LI, Weiqi; JIANG, Hao; ZHANG, Chuanwei; CHEN, Xiuguo; GU, Honggang und LIU, Shiyuan: „Characterization of curved surface layer by Mueller matrix ellipsometry“. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B* 34.2 (2016) (siehe S. 15).
- [Li17a] LI, Chunfei: Nonlinear optics: Principles and applications. Shanghai Jiao Tong University Press und Springer, 2017 (siehe S. 25).

- [Li17b] LI, Yahong; FU, Yuegang; HE, Wenjun; LIU, Zhiying und ZHAO, Yu: „Polarization characteristics analysis of cat’s eye retroreflector“. In: *Infrared and Laser Engineering* 46.6 (2017) (siehe S. 19, 90, 102, 103, 127–129).
- [Lie13] LIEBIG, Thorsten; RENNINGS, Andreas; HELD, Sebastian und ERNI, Daniel: „openEMS - a free and open source equivalent-circuit (EC) FDTD simulation platform supporting cylindrical coordinates suitable for the analysis of traveling wave MRI applications“. In: *International Journal of Numerical Modelling: Electronic Networks, Devices and Fields* 26.6 (2013), S. 680–696 (siehe S. 106).
- [Liu21] LIU, Jinchao; DI ZHANG, YU, Dianqiang; REN, Mengxin und XU, Jingjun: „Machine learning powered ellipsometry“. In: *Light, science & applications* 10.1 (2021) (siehe S. 10).
- [Liu97] LIU, Jian und AZZAM, R. M. A.: „Polarization properties of corner-cube retroreflectors: theory and experiment“. In: *Applied Optics* 36.7 (1997), S. 1553–1559 (siehe S. 20).
- [Lu96] LU, Shih-Yau und CHIPMAN, Russell A.: „Interpretation of Mueller matrices based on polar decomposition“. In: *Journal of the Optical Society of America A* 13.5 (1996), S. 1106–1113 (siehe S. 152).
- [Lun03] LUNDVALL, Axel; NIKOLAJEFF, Fredrik und LINDSTROM, Tomas: „High performing micromachined retroreflector“. In: *Optics Express* 11.20 (2003), S. 2459–2473 (siehe S. 95).
- [Lun64] LUNEBURG, Rudolf Karl: *Mathematical Theory of Optics*. University of California Press, 1964 (siehe S. 87).
- [Ma09] MA, Yun Gui; ONG, C. K.; TYC, Tomás und LEONHARDT, Ulf: „An omnidirectional retroreflector based on the transmutation of dielectric singularities“. In: *Nature materials* 8.8 (2009), S. 639–642 (siehe S. 19, 88).
- [Mac12] MACIAS-ROMERO, C. und TÖRÖK, P.: „Eigenvalue calibration methods for polarimetry“. In: *Journal of the European Optical Society - Rapid publications* 7.0 (2012) (siehe S. 18, 163, 217).

- [Mar01] MARVASTI, Farokh A., Hrsg.: Nonuniform sampling: Theory and practice. Information technology. Kluwer Academic/Plenum Publ., 2001 (siehe S. 155).
- [Mar04] MARKOVSKY, I.; KUKUSH, A. und VAN HUFFEL, S.: „Consistent least squares fitting of ellipsoids“. In: *Numerische Mathematik* 98.1 (2004), S. 177–194 (siehe S. 168).
- [Mar98] MAROZAS, John Arthur: „Angular spectrum representation of ultrawideband electromagnetic pulse propagation in lossy, dispersive dielectric slab waveguides“. Diss. University of Vermont, 1998 (siehe S. 34).
- [Mat12] MATKOVIĆ, Aleksandar; BELTAOS, Angela; MILIĆEVIĆ, Marijana; RALEVIĆ, Uroš; VASIĆ, Borislav; JOVANOVIĆ, Djordje und GAJIĆ, Radoš: „Spectroscopic imaging ellipsometry and Fano resonance modeling of graphene“. In: *Journal of Applied Physics* 112.12 (2012) (siehe S. 13).
- [McL08] McLEAN, Ian S.: Electronic Imaging in Astronomy: Detectors and Instrumentation. Springer Praxis Books. Praxis Publishing Ltd Chichester UK, 2008 (siehe S. 194).
- [Mue48] MUELLER, Hans: „The Foundation of Optics“. In: *Proceedings of the Winter Meeting of the Optical Society of America*. Bd. 38. OSA, Juli 1948 (siehe S. 44).
- [Mug87] MUGLER, Dale H. und SPLETTSTÖßER, Wolfgang: „Reconstruction of Two-Dimensional Signals from Irregularly Spaced Samples“. In: *ASST '87 6. Aachener Symposium für Signaltheorie*. Hrsg. von MEYER-EBRECHT, Dietrich. Bd. 153. Informatik-Fachberichte. Springer, 1987, S. 41–44 (siehe S. 155).
- [Neg12] NEGARA, Christian und ROSCHANI, Masoud: „Effiziente probabilistische B-Spline-Oberflächenrekonstruktion durch Verwendung eines Informationsfilters“. In: *Forum Bildverarbeitung 2012*. Hrsg. von PUENTE LEÓN, Fernando. Technische Informationsbibliothek u. Universitätsbibliothek und KIT Scientific Publishing, 2012, S. 131–142 (siehe S. 156).

- [Neg14] NEGARA, Christian und HARTRUMPF, Matthias: „Ellipsometrie an gekrümmten Oberflächen“. In: *Forum Bildverarbeitung 2014*. Hrsg. von PUENTE LEÓN, Fernando und HEIZMANN, Michael. KIT Scientific Publishing, 2014, S. 227–238 (siehe S. 144, 150).
- [Neg15] NEGARA, Christian: „Thickness Measurement of Thin Films on Curved Surfaces with Ellipsometry“. In: *Proceedings of the 2014 Joint Workshop of Fraunhofer IOSB and Institute for Anthropomatics, Vision and Fusion Laboratory*. Bd. 20. Karlsruher Schriften zur Anthropomatik. KIT Scientific Publishing, 2015, S. 49–65 (siehe S. 50, 150).
- [Neg16a] NEGARA, Christian: „Fast Polarization State Detection by Division-of-Amplitude in a Simple Configuration Setup“. In: *Proceedings of the 2015 Joint Workshop of Fraunhofer IOSB and Institute for Anthropomatics, Vision and Fusion Laboratory*. Hrsg. von BEYERER, Jürgen und PAK, Alexey. Bd. 24. Karlsruher Schriften zur Anthropomatik. KIT Scientific Publishing, 2016, S. 75–89 (siehe S. 51).
- [Neg16b] NEGARA, Christian; HARTRUMPF, Matthias; LÄNGLE, Thomas und BEYERER, Jürgen: „Retroreflective Laser Scanner System for Inline Ellipsometric Measurements at Curved Surfaces“. 7th International Conference on Spectroscopic Ellipsometry (ICSE-7), Berlin (Kurzzusammenfassung). 2016 (siehe S. 63).
- [Neg17a] NEGARA, Christian: „Different Designs for a Polarization State Detector Based on Division-of-Amplitude“. In: *Proceedings of the 2016 Joint Workshop of Fraunhofer IOSB and Institute for Anthropomatics, Vision and Fusion Laboratory*. Hrsg. von BEYERER, Jürgen und PAK, Alexey. Bd. 33. Karlsruher Schriften zur Anthropomatik. KIT Scientific Publishing, 2017, S. 85–107 (siehe S. 51).
- [Neg17b] NEGARA, Christian und HARTRUMPF, Matthias: „Device for determining the polarization state by measuring at least three Stokes parameters“. WO 2017/207751 A1. 2017 (siehe S. 51, 54).

- [Neg18] NEGARA, Christian und LÄNGLE, Thomas: „Kalibrierfreie 3D-Rekonstruktion von spiegelnden Oberflächen mittels Orthogonalprojektionen unter Verwendung von Reflexionsmarkern“. In: *Forum Bildverarbeitung 2018: [29.-30. November 2018 in Karlsruhe]*. Hrsg. von LÄNGLE, Thomas; PUENTE LEÓN, Fernando und HEIZMANN, Michael. KIT Scientific Publishing, 2018, S. 47–58 (siehe S. 154).
- [Neg19a] NEGARA, Christian; LÄNGLE, Thomas und BEYERER, Jürgen: „Kalibrierfreie 3D-Rekonstruktion von gekrümmten Oberflächen mittels orthographischer Projektion unter Verwendung von Reflexionsmarkern“. In: *tm - Technisches Messen* 86.7-8 (2019), S. 373–383 (siehe S. 154, 204, 205).
- [Neg19b] NEGARA, Christian; LI, Zheng; LÄNGLE, Thomas und BEYERER, Jürgen: „Simplified Stokes polarimeter based on division-of-amplitude“. In: *Photonics and Education in Measurement Science 2019*. Hrsg. von ROSENBERGER, Maik; DITTRICH, Paul-Gerald und ZAGAR, Bernhard. Bd. 11144. Proc. SPIE. 2019 (siehe S. 48–52, 214).
- [Neg20a] NEGARA, Christian; LÄNGLE, Thomas und BEYERER, Jürgen: „Analytic solutions for calculating the surface inclination of isotropic media and bare substrates by using reflection-based generalized ellipsometry“. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B* 38.3 (2020). URL: <https://doi.org/10.1116/1.5144506> (siehe S. 60, 144, 153, 158, 200, 207–210).
- [Neg20b] NEGARA, Christian; LÄNGLE, Thomas und BEYERER, Jürgen: „Imaging ellipsometry for curved surfaces“. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B* 38.1 (2020). URL: <https://doi.org/10.1116/1.5129654> (siehe S. 148–150, 159, 160, 162, 280).
- [Neu02a] NEUSCHAEFER-RUBE, Ulrich, Hrsg.: *Optische Oberflächenmesstechnik für Topografie und Material*. Bd. 953. Fortschritt-Berichte VDI Reihe 8, Meß-, Steuerungs- und Regelungstechnik. VDI-Verl., 2002 (siehe S. 207).

- [Neu02b] NEUSCHAEFER-RUBE, Ulrich und HOLZAPFEL, Wolfgang: „Simultaneous measurement of surface geometry and material distribution by focusing ellipsotopometry“. In: *Applied Optics* 41.22 (2002), S. 4526–4535 (siehe S. 15, 145, 157, 158, 214).
- [Nil04] NILSEN, Robert B. und LU, Xiao Jing: „Retroreflection technology“. In: *Optics and Photonics for Counterterrorism and Crime Fighting*. Hrsg. von DONALDSON, Tim P. und LEWIS, Colin. Bd. 5616. Proc. SPIE. 2004, S. 47–60 (siehe S. 19, 117, 205).
- [OBr36] O'BRYAN, H. M.: „The Optical Constants of Several Metals in Vacuum“. In: *Journal of the Optical Society of America* 26.3 (1936), S. 122–127 (siehe S. 15).
- [OBr99] O'BRIEN, Dominic C.; FAULKNER, Grahame E. und EDWARDS, David J.: „Optical properties of a retroreflecting sheet“. In: *Applied Optics* 38.19 (1999), S. 4137–4144 (siehe S. 20).
- [Oss11] OSSIKOVSKI, Razvigor: „Differential matrix formalism for depolarizing anisotropic media“. In: *Optics Letters* 36.12 (2011), S. 2330–2332 (siehe S. 58).
- [Oug94] OUGHSTUN, K. E. und SHERMAN, G. C.: *Electromagnetic Pulse Propagation in Causal Dielectrics*. Springer, 1994 (siehe S. 34, 107).
- [Par02] PARK, Sunglim; JUNG, Jaewha; GWEON, DaeGab und KIM, Young Dong: „Precision auto-alignment for the specimen stage of an ellipsometer“. In: *Review of Scientific Instruments* 73.8 (2002), S. 2988–2993 (siehe S. 2).
- [Pas13] PASISKEVICIUS, V.: „Nonlinear crystals for solid-state lasers“. In: *Handbook of Solid-State Lasers*. Elsevier, 2013, S. 139–167 (siehe S. 23).
- [Pas17] PASSLER, Nikolai Christian und PAARMANN, Alexander: „Generalized 4×4 matrix formalism for light propagation in anisotropic stratified media: study of surface phonon polaritons in polar dielectric heterostructures“. In: *Journal of the Optical Society of America B* 34.10 (2017) (siehe S. 58).

- [Pep82] PEPPER, David M.: „Nonlinear Optical Phase Conjugation“. In: *Optical Engineering* 21.2 (1982), S. 156–183 (siehe S. 20, 125, 129–131).
- [Pie97] PIEGL, Les und TILLER, Wayne: *The NURBS book*. Monographs in visual communications. Springer, 1997 (siehe S. 155).
- [Piz99] PIZIAK, R. und ODELL, P. L.: „Full Rank Factorization of Matrices“. In: *Mathematics Magazine* 72.3 (1999), S. 193–201 (siehe S. 166).
- [Pla11] PLAKHOV, Alexander: „Mathematical retroreflectors“. In: *Discrete and Continuous Dynamical Systems* 30.4 (2011), S. 1211–1235 (siehe S. 65).
- [Pon91] PONATH, H.-E. und STEGEMAN, G. I.: *Nonlinear Surface Electromagnetic Phenomena*. Modern Problems in Condensed Matter Sciences. Elsevier Science, 1991 (siehe S. 31).
- [Qi17] QI, Ji; HE, Chao und ELSON, Daniel S.: „Real time complete Stokes polarimetric imager based on a linear polarizer array camera for tissue polarimetric imaging“. In: *Biomedical optics express* 8.11 (2017), S. 4933–4946 (siehe S. 219).
- [Ren98] RENNILSON, Justin: „Retroreflection“. In: *Handbook of Applied Photometry*. Hrsg. von DECUSATIS, Casimer M. Springer, 1998, S. 289–325 (siehe S. 19, 20, 90, 105).
- [Rho95] RHORER, Richard L. und EVANS, Chris J.: „Fabrication of Optics by Diamond Turning“. In: *Handbook of Optics*. Hrsg. von BASS, Michael. Bd. I. McGraw-Hill, 1995. Kap. 41 (siehe S. 113).
- [Rob13] ROBLES-KELLY, Antonio A. und JUYNH, Cong Phuoc: *Imaging spectroscopy for scene analysis*. Advances in computer vision and pattern recognition. Springer, 2013 (siehe S. 276).
- [Rot45] ROTHEN, Alexandre: „The Ellipsometer, an Apparatus to Measure Thicknesses of Thin Surface Films“. In: *Review of Scientific Instruments* 16.2 (1945), S. 26–30 (siehe S. 9, 10).

- [Rus91] RUSSEV, S. C. und GEORGIEVA, D. D.: „Analytical Solution of Another Ellipsometric Inverse Problem“. In: *Journal of Modern Optics* 38.7 (1991), S. 1217–1222 (siehe S. 4, 59).
- [Rus99] RUSSEV, S. C.; BOYANOV, M. I.; DROLET, J.-P. und LEBLANC, R. M.: „Analytical determination of the optical constants of a substrate in the presence of a covering layer by use of ellipsometric data“. In: *Journal of the Optical Society of America A* 16.6 (1999), S. 1496–1500 (siehe S. 4, 59).
- [Sab00] SABATKE, D. S.; DESCOUR, M. R.; DERENIAK, E. L.; SWEATT, W. C.; KEMME, S. A. und PHIPPS, G. S.: „Optimization of retardance for a complete Stokes polarimeter“. In: *Optics Letters* 25.11 (2000), S. 802–804 (siehe S. 50).
- [Sch07] SCHUBERT, E. F.; KIM, J. K. und XI, J.-Q.: „Low-refractive-index materials: A new class of optical thin-film materials“. In: *physica status solidi (b)* 244.8 (2007), S. 3002–3008 (siehe S. 88).
- [Sch87] SCHÖNHOFER, Alfred und KUBALL, Hans-Georg: „Symmetry properties of the Mueller matrix“. In: *Chemical Physics* 115.2 (1987), S. 159–167 (siehe S. 148).
- [Seg03] SEGRE, Sergio E. und ZANZA, Vincenzo: „Mueller calculus of polarization change in the cube-corner retroreflector“. In: *Journal of the Optical Society of America A* 20.9 (2003), S. 1804–1811 (siehe S. 20).
- [Sem96] SEMCHENKO, I. V.; TRETJAKOV, S. A. und SERDYUKOV, A. N.: „Research on chiral and bianisotropic media in Byelorussia and Russia in the last ten years“. In: *Progress in Electromagnetics Research* 12 (1996), S. 335–370 (siehe S. 30).
- [Sha14] SHAN, Ambalanath u. a.: „High-Speed Imaging/Mapping Spectroscopic Ellipsometry for In-Line Analysis of Roll-to-Roll Thin-Film Photovoltaics“. In: *IEEE Journal of Photovoltaics* 4.1 (2014), S. 355–361 (siehe S. 14).

- [Sha86] SHARP, E. J.; MILLER, M. J.; WOOD, G. L.; CLARK, W. W.; SALAMO, G. und NEURGAONKAR, R. R.: „SBN as a Broadband Self-Pumped Phase Conjugate Mirror“. In: *International Symposium on Applications of Ferroelectrics*. Proc. IEEE. 1986, S. 51–56 (siehe S. 125).
- [She03] SHEN, Yuen R.: Principles of nonlinear optics. Wiley classics library. Wiley, 2003 (siehe S. 20, 129).
- [Shi12] SHIN, Wonseok und FAN, Shanhui: „Choice of the perfectly matched layer boundary condition for frequency-domain Maxwell’s equations solvers“. In: *Journal of Computational Physics* 231.8 (2012), S. 3406–3431 (siehe S. 106).
- [Sho18] SHORES, Thomas S.: Applied linear algebra and matrix analysis. Undergraduate Texts in Mathematics. Springer, 2018 (siehe S. 41).
- [Sim06] SIMON, Dan: Optimal state estimation : Kalman, H_∞ and nonlinear approaches. Wiley-Interscience, 2006 (siehe S. 155, 156).
- [Sim10] SIMON, B. N.; SIMON, S.; MUKUNDA, N.; GORI, F.; SANTARSIERO, M.; BORGHI, R. und SIMON, R.: „A complete characterization of pre-Mueller and Mueller matrices in polarization optics“. In: *Journal of the Optical Society of America A* 27.2 (2010), S. 188–199. DOI: [10.1364/JOSAA.27.000188](https://doi.org/10.1364/JOSAA.27.000188) (siehe S. 152).
- [Sim87] SIMON, R.: „Mueller Matrices and Depolarization Criteria“. In: *Journal of Modern Optics* 34.4 (1987), S. 569–575 (siehe S. 151).
- [Sny75] SNYDER, J. J.: „Paraxial ray analysis of a cat’s-eye retroreflector“. In: *Applied Optics* 14.8 (1975), S. 1825–1828 (siehe S. 19).
- [Sto09] STOKES, George Gabriel: „On the Composition and Resolution of Streams of Polarized Light from different Sources“. In: *Mathematical and Physical Papers*. Bd. 3. Cambridge Library Collection - Mathematics. Cambridge University Press, 2009, S. 233–258 (siehe S. 40).

- [Str19] STROHMEIER, Michael; SCHRÖDER, Matthias und FABER, Christian: „Optical inline inspection detecting 3D defects on complex free-form surfaces in harsh production environments“. In: *tm - Technisches Messen* 86.6 (2019), S. 335–344 (siehe S. 2).
- [Sut03] SUTHERLAND, Richard L.: *Handbook of Nonlinear Optics*. CRC Press, 2003 (siehe S. 23, 264).
- [Sze11] SZELISKI, Richard: *Computer Vision: Algorithms and Applications*. Springer London, 2011 (siehe S. 105, 154, 207).
- [Tag97] TAGA, Y.: „Recent progress in coating technology for surface modification of automotive glass“. In: *Journal of Non-Crystalline Solids* 218 (1997), S. 335–341 (siehe S. 3).
- [Tan95] TANG, Chung L.: „Nonlinear Optics“. In: *Handbook of Optics*. Hrsg. von BASS, Michael. Bd. II. McGraw-Hill, 1995. Kap. 38 (siehe S. 31).
- [The10] THE SCOTT PARTNERSHIP: „Optical simulation software“. In: *Nature Photonics* 4.4 (2010), S. 256–257 (siehe S. 106).
- [The81] THEETEN, J. B. und ASPNES, D. E.: „Ellipsometry in Thin Film Analysis“. In: *Annual Review of Materials Science* 11.1 (1981), S. 97–122 (siehe S. 9).
- [Tom05] TOMPKINS, Harland G. und IRENE, Eugene A.: *Handbook of ellipsometry*. William Andrew Pub. und Springer, 2005 (siehe S. 17, 42, 60).
- [Tom92] TOMASI, Carlo und KANADE, Takeo: „Shape and motion from image streams under orthography: a factorization method“. In: *International journal of computer vision* 9.2 (1992), S. 137–154 (siehe S. 155).
- [Tom99] TOMPKINS, Harland G. und MCGAHAN, William A.: *Spectroscopic ellipsometry and reflectometry: A user's guide*. Wiley, 1999 (siehe S. 1, 2, 10, 18, 55, 56, 59).

- [Tri00] TRIGGS, Bill; McLAUCHLAN, Philip F.; HARTLEY, Richard I. und FITZGIBBON, Andrew W.: „Bundle Adjustment – A Modern Synthesis“. In: *Vision Algorithms: Theory and Practice*. Hrsg. von TRIGGS, Bill; ZISSERMAN, Andrew und SZELISKI, Richard. Bd. 1883. Lecture Notes in Computer Science. Springer, 2000, S. 298–372 (siehe S. 155).
- [Tsu13] TSURU, Toshihide: „Tilt-ellipsometry of object surface by specular reflection for three-dimensional shape measurement“. In: *Optics Express* 21.5 (2013), S. 6625–6632 (siehe S. 145).
- [Tur11] TURUNEN, Jari: „Elementary-field representations in partially coherent optics“. In: *Journal of Modern Optics* 58.5-6 (2011), S. 509–527 (siehe S. 109).
- [Tyo06a] TYO, J. Scott: „Hybrid division of aperture/division of a focal-plane polarimeter for real-time polarization imagery without an instantaneous field-of-view error“. In: *Optics Letters* 31.20 (2006), S. 2984–2986 (siehe S. 47).
- [Tyo06b] TYO, J. Scott; GOLDSTEIN, Dennis L.; CHENAULT, David B. und SHAW, Joseph A.: „Review of passive imaging polarimetry for remote sensing applications“. In: *Applied Optics* 45.22 (2006), S. 5453–5469 (siehe S. 47, 135).
- [Vah06] VAHIMAA, Pasi und TURUNEN, Jari: „Finite-elementary-source model for partially coherent radiation“. In: *Optics Express* 14.4 (2006), S. 1376–1381 (siehe S. 44, 109).
- [Ved11] VEDEL, M.; BREUGNOT, S. und LECHOCINSKI, N.: „Full Stokes polarization imaging camera“. In: *Polarization Science and Remote Sensing V*. Hrsg. von JOSEPH A. SHAW und J. SCOTT TYO. Bd. 8160. Proc. SPIE. 2011, S. 299–311 (siehe S. 42, 202).
- [Vig00] VIGOUREUX, Jean Marie und GUST, Remo: „Explicit Stokes reciprocity relations for plane stratified media“. In: *Optics Communications* 176.1 (2000), S. 1–8 (siehe S. 143).

- [Wan94] WANG, Y. F. und WANG, J. F.: „On 3D model construction by fusing heterogeneous sensor data“. In: *CVGIP-Image Understanding* 60.2 (1994), S. 210–229 (siehe S. 155).
- [Whe15] WHEEDEN, Richard L. und ZYGMUNT, Antony: *Measure and Integral: An Introduction to Real Analysis, Second Edition*. Bd. v.308. Chapman & Hall / CRC Pure and Applied Mathematics. CRC Press, 2015 (siehe S. 262).
- [Whi82] WHITE, Jeffrey O.; CRONIN-GOLOMB, Mark; FISCHER, Baruch und YARIV, Amnon: „Coherent oscillation by self-induced gratings in the photorefractive crystal BaTiO₃“. In: *Optics Letters* 40.6 (1982), S. 450–452 (siehe S. 125).
- [Whi92] WHITE, J. O.: „Response of a BaTiO₃ phase conjugate mirror to broadband and narrowband radiation“. In: *Applied Physics A Solids and Surfaces* 55.1 (1992), S. 82–90 (siehe S. 130).
- [Wir08] WIRTH, Frank: „Zur Erfassung von form- und materialbedingten Oberflächenstrukturen mit Mikro-Deflexions-Ellipsometrie“. Diss. Uni Kassel, 2008 (siehe S. 15).
- [Wol82] WOLF, Emil: „New theory of partial coherence in the space–frequency domain Part I: spectra and cross spectra of steady-state sources“. In: *Journal of the Optical Society of America* 72.3 (1982), S. 343–351 (siehe S. 25).
- [Wyr07] WYROWSKI, Frank; SCHIMMEL, Hagen und KUHN, Michael: „Elektromagnetisches Optikrechnen - Modellierung realer Lichtquellen“. In: *Photonik* 39.2 (2007), S. 66–70 (siehe S. 44, 85).
- [Wyr11] WYROWSKI, F. und KUHN, M.: „Introduction to field tracing“. In: *Journal of Modern Optics* 58.5-6 (2011), S. 449–466 (siehe S. 24, 107–109, 269).
- [Yam74] YAMAMOTO, Masaki: „A new type of precision ellipsometer without employing a compensator“. In: *Optics Communications* 10.2 (1974), S. 200–202 (siehe S. 15).

- [Yam80] YAMAMOTO, M. und HEAVENS, O. S.: „A vacuum automatic ellipsometer for principal angle of incidence measurement“. In: *Surface Science* 96.1 (1980), S. 202–216 (siehe S. 15).
- [Yan99] YANG, B. und FRIEDSAM, H.: „Ray-Tracing Studies for a Whole-Viewing-Angle Retroreflector“. In: *International Workshop on Accelerator Alignment* (1999) (siehe S. 90).
- [Yar77] YARIV, A. und PEPPER, D. M.: „Amplified reflection, phase conjugation, and oscillation in degenerate four-wave mixing“. In: *Optics Letters* 1.1 (1977), S. 16–18 (siehe S. 128).
- [Yua14] YUAN, Wenjia; SHEN, Weidong; ZHANG, Yueguang und LIU, Xu: „Dielectric multilayer beam splitter with differential phase shift on transmission and reflection for division-of-amplitude photopolarimeter“. In: *Optics Express* 22.9 (2014) (siehe S. 49, 51).
- [Zan20] ZANDER, Tim und BEYERER, Juergen: „Mueller matrix cone and its application to filtering“. In: *OSA Continuum* 3.6 (2020), S. 1376–1384 (siehe S. 151, 152).
- [Zel85] ZEL’DOVIČ, Boris Y.; PILIPECKIJ, Nikolaj F. und SKUNOV, Vladimir V.: Principles of phase conjugation. Bd. 42. Springer Series in Optical Sciences. Springer, 1985 (siehe S. 20).
- [Zen17] ZENG, Liangwei; CAI, Yuanjing; TAN, Chushen und HUANG, Zuhua: „Optimization of optical Stokes’ polarization measurement system“. In: *Laser Technology* 41.1 (2017). (auf Chinesisch), S. 74–78 (siehe S. 51).
- [Zha02] ZHAN, Qiwen und LEGER, James R.: „High-resolution imaging ellipsometer“. In: *Applied Optics* 41.22 (2002), S. 4443–4450 (siehe S. 14).
- [Zha16] ZHAO, Yuan-Yuan; ZHANG, Yong-Liang; ZHENG, Mei-Ling; DONG, Xian-Zi; DUAN, Xuan-Ming und ZHAO, Zhen-Sheng: „Three-dimensional Luneburg lens at optical frequencies“. In: *Laser & Photonics Reviews* 10.4 (2016), S. 665–672 (siehe S. 19, 88).

- [Zür20] ZÜRN, Siegfried und LÜCKEN, Hermann: „Chancen und Risiken von Industrie 4.0 für die Qualitätssicherung“. In: *Zeitschrift für wirtschaftlichen Fabrikbetrieb* 115.4 (2020), S. 248–251 (siehe S. 3).

Eigene Publikationen

- [1] NEGARA, Christian und ROSCHANI, Masoud: „Effiziente probabilistische B-Spline-Oberflächenrekonstruktion durch Verwendung eines Informationsfilters“. In: *Forum Bildverarbeitung 2012*. Hrsg. von PUENTE LEÓN, Fernando. Technische Informationsbibliothek u. Universitätsbibliothek und KIT Scientific Publishing, 2012, S. 131–142.
- [2] NEGARA, Christian und HARTRUMPF, Matthias: „Ellipsometrie an gekrümmten Oberflächen“. In: *Forum Bildverarbeitung 2014*. Hrsg. von PUENTE LEÓN, Fernando und HEIZMANN, Michael. KIT Scientific Publishing, 2014, S. 227–238.
- [3] NEGARA, Christian: „Thickness Measurement of Thin Films on Curved Surfaces with Ellipsometry“. In: *Proceedings of the 2014 Joint Workshop of Fraunhofer IOSB and Institute for Anthropomatics, Vision and Fusion Laboratory*. Bd. 20. Karlsruher Schriften zur Anthropomatik. KIT Scientific Publishing, 2015, S. 49–65.
- [4] NEGARA, Christian: „Fast Polarization State Detection by Division-of-Amplitude in a Simple Configuration Setup“. In: *Proceedings of the 2015 Joint Workshop of Fraunhofer IOSB and Institute for Anthropomatics, Vision and Fusion Laboratory*. Hrsg. von BEYERER, Jürgen und PAK, Alexey. Bd. 24. Karlsruher Schriften zur Anthropomatik. KIT Scientific Publishing, 2016, S. 75–89.
- [5] NEGARA, Christian: „Different Designs for a Polarization State Detector Based on Division-of-Amplitude“. In: *Proceedings of the 2016 Joint Workshop of Fraunhofer IOSB and Institute for Anthropomatics, Vision and Fusion Laboratory*. Hrsg. von BEYERER, Jürgen und PAK, Alexey. Bd. 33. Karlsruher Schriften zur Anthropomatik. KIT Scientific Publishing, 2017, S. 85–107.

- [6] NEGARA, Christian und LÄNGLE, Thomas: „Kalibrierfreie 3D-Rekonstruktion von spiegelnden Oberflächen mittels Orthogonalprojektionen unter Verwendung von Reflexionsmarkern“. In: *Forum Bildverarbeitung 2018: [29.-30. November 2018 in Karlsruhe]*. Hrsg. von LÄNGLE, Thomas; PUENTE LEÓN, Fernando und HEIZMANN, Michael. KIT Scientific Publishing, 2018, S. 47–58.
- [7] NEGARA, Christian; LÄNGLE, Thomas und BEYERER, Jürgen: „Kalibrierfreie 3D-Rekonstruktion von gekrümmten Oberflächen mittels orthographischer Projektion unter Verwendung von Reflexionsmarkern“. In: *tm - Technisches Messen* 86.7-8 (2019), S. 373–383.
- [8] NEGARA, Christian; LI, Zheng; LÄNGLE, Thomas und BEYERER, Jürgen: „Simplified Stokes polarimeter based on division-of-amplitude“. In: *Photonics and Education in Measurement Science 2019*. Hrsg. von ROSENBERGER, Maik; DITTRICH, Paul-Gerald und ZAGAR, Bernhard. Bd. 11144. Proc. SPIE. 2019.
- [9] NEGARA, Christian; LÄNGLE, Thomas und BEYERER, Jürgen: „Analytic solutions for calculating the surface inclination of isotropic media and bare substrates by using reflection-based generalized ellipsometry“. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B* 38.3 (2020). URL: <https://doi.org/10.1116/1.5144506>.
- [10] NEGARA, Christian; LÄNGLE, Thomas und BEYERER, Jürgen: „Imaging ellipsometry for curved surfaces“. In: *Journal of Vacuum Science & Technology B* 38.1 (2020). URL: <https://doi.org/10.1116/1.5129654>.

Patentanmeldungen

- [1] HARTRUMPF, Matthias und NEGARA, Christian: „Configurable retro-reflective sensor system for the improved characterization of the properties of a sample“. WO 2017/207681 A2. 2017.
- [2] NEGARA, Christian und HARTRUMPF, Matthias: „Device for determining the polarization state by measuring at least three Stokes parameters“. WO 2017/207751 A1. 2017.

Abkürzungsverzeichnis

BRDF	bidirektionale Reflektanzverteilungsfunktion (engl. <i>bidirectional reflectance distribution function</i>)
CIL	CIL-Code (engl. <i>common intermediate language</i>)
DoAmP	Polarisationszustandsdetektor mit Amplitudenteilung (engl. <i>division-of-amplitude polarimeter</i>)
DoAp	Polarisationszustandsdetektor mit Aperturteilung (engl. <i>division-of-aperture polarimeter</i>)
DoFP	Polarisationszustandsdetektor mit Unterteilung der Bildebene (engl. <i>division-of-focal-plane polarimeter</i>)
DoT	Polarisationszustandsdetektor mit Zeitunterteilung (engl. <i>division-of-time polarimeter</i>)
EM-Feld	elektromagnetisches Feld
FDP	Polarisationszustandsdetektor mit teilspiegelnden Detektoren (engl. <i>four detector polarimeter</i>)
FEM	Finite-Elemente-Methode
FFT	schnelle Fourier-Transformation (engl. <i>fast fourier transform</i>)

GHPW	generelle homogene ebene Welle (engl. <i>general homogeneous plane wave</i>)
GIPW	generelle inhomogene ebene Welle (engl. <i>general inhomogeneous plane wave</i>)
HIPW	harmonische inhomogene ebene Welle (engl. <i>harmonic inhomogeneous plane wave</i>)
IR	infraroter Wellenlängenbereich
LED	Leuchtdiode (engl. <i>light-emitting diode</i>)
MAE	mittlerer absoluter Fehler (engl. <i>mean absolute error</i>)
NIR	naher infraroter Wellenlängenbereich (bis 3 μm)
OLED	organische Leuchtdiode (engl. <i>organic light emitting diode</i>)
PSD	Polarisationszustandsdetektor (engl. <i>polarization state detector</i>)
PSG	Polarisationszustandsgenerator (engl. <i>polarization state generator</i>)
RMSE	quadratisches Mittel (engl. <i>root-mean-square error</i>)
RPE	Ellipsometrie mit Lichtwegumkehrung (engl. <i>return-path ellipsometry</i>)
SNR	Signal-Rausch-Verhältnis (engl. <i>signal-to-noise ratio</i>)
TIR	totale interne Reflexion

UE	Ellipsometrie ohne Lichtwegumkehrung (engl. <i>unidirectional ellipsometry</i>)
VIS	visueller Wellenlängenbereich

A Anhang

A.1 Fourier-Transformation

A.1.1 Eindimensionale Fourier-Transformation

Die Integration bei der Fourier-Transformation beruht auf dem Integralbegriff von Lebesgue, der Maßräume und messbare Funktionen voraussetzt [Bro19].

Definition 7. (p-fache Integrierbarkeit) Eine messbare Funktion $\underline{f}(t)$ heißt p-fach integrierbar, falls gilt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\underline{f}(t)|^p dt < \infty. \quad (\text{A.1})$$

Der lineare Funktionenraum aller p-fach integrierbaren Funktionen wird als $L^p(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ bezeichnet [Bro19] und nachfolgende Definitionen von Funktionenräumen und Distributionsmengen enthalten als Argumente die Definitions- und Zielmenge. Für die gewöhnliche Fourier-Transformation und die Inverse wird folgende Definition verwendet:

$$\underline{\tilde{f}}(\omega) = (\mathcal{F}\underline{f})(\omega) := \int_{-\infty}^{\infty} \underline{f}(t) e^{-i\omega t} dt, \quad (\text{A.2})$$

$$\underline{f}(t) = (\mathcal{F}^{-1}\underline{\tilde{f}})(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \underline{\tilde{f}}(\omega) e^{i\omega t} d\omega. \quad (\text{A.3})$$

\mathcal{R} sei ein Operator mit der Definition $\mathcal{R}\{f(x)\} := \underline{f}(-x)$ für eine beliebige Funktion \underline{f} . Dann gilt: $\mathcal{R}\mathcal{F} = 2\pi\mathcal{F}^{-1}$. Neben der gewöhnlichen Fourier-Transformation gibt es auch die komplexe Fourier-Transformation \mathcal{F}_c :

$$\underline{\tilde{f}}(\underline{\omega}) = (\mathcal{F}_c \underline{f})(\underline{\omega}) := \int_{-\infty}^{\infty} \underline{f}(t) e^{-i\underline{\omega}t} dt, \quad (\text{A.4})$$

$$\underline{f}(t) = (\mathcal{F}_c^{-1} \underline{\tilde{f}})(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty+i b}^{\infty+i b} \underline{\tilde{f}}(\underline{\omega}) e^{i\underline{\omega}t} d\underline{\omega} \quad (\text{A.5})$$

wobei $b \in \mathbb{R}$. Statt der Integration über eine Achse parallel zur Frequenzachse kann auch entlang anderer Konturen integriert werden. Wichtig ist hierbei, dass fast immer dasselbe Ergebnis herauskommt. Für \mathcal{F}_c wird vereinfachend auch \mathcal{F} geschrieben.

Eine hinreichende und notwendige Bedingung für die Existenz der Fourier-Transformation ist, dass $\underline{f} \in L^1(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ [Cha90]. Ungeachtet von Definitionslücken im Frequenzbereich einer Funktion \underline{f} , kann auch für $\underline{f} \in L^p(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ mit $1 < p \leq 2$ eine Fourier-Transformation berechnet werden, wenn man die Definition der Fourier-Transformation abändert [Cha90]. Die Forderung $\underline{f} \in L^p(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ mit $1 \leq p \leq 2$ ist jedoch immer noch zu weitreichend: stetige, periodische Funktionen sind nicht in $L^p(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ für $0 < p < \infty$. Um diese Einschränkung zu umgehen, wird auf sog. generalisierte Funktionen bzw. Distributionen zurückgegriffen [Cha90]. Diese sind stetige, lineare Funktionale auf einem Funktionenraum mit sog. Testfunktionen. Eine reguläre Distribution $\underline{\dot{f}}$ wird aus einer Funktion \underline{f} und einer beliebigen Testfunktion \underline{g} folgendermaßen gebildet:

$$\underline{\dot{f}}(\underline{g}) := \int_{-\infty}^{\infty} \underline{f}(x) \underline{g}(x) dx. \quad (\text{A.6})$$

Für die Existenz der Fourier-Transformation einer messbaren Funktion $\underline{f}(t)$ in Form einer Distribution ist es hinreichend, dass $\underline{f}(t)$ auf jedem endlichen Teilintervall beschränkt ist. Die Menge dieser Funktionen sei $L_{\text{LOC}}(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ [Cha90]¹. Eine Funktion ist auf einem endlichen Intervall $[a, b]$ beschränkt, falls:

$$\sup_{t \in [a, b]} \left| \underline{f}(t) \right| < \infty. \tag{A.7}$$

Es sei $\mathcal{S}(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \subset L^1(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ der Schwartz-Raum der schnell-fallenden und somit beschränkten Funktionen [Cha90], $\mathcal{D}(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \subset \mathcal{S}(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ der Funktionenraum der glatten Funktionen mit kompaktem Träger und $\mathcal{Z}(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \subset \mathcal{S}(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ der Funktionenraum der Fourier-Transformationen aus $\mathcal{D}(\mathbb{R}, \mathbb{C})$. Für alle $\mathcal{X} \in \{\mathcal{S}, \mathcal{D}, \mathcal{Z}\}$ wird die Menge der Distributionen $\underline{\dot{f}} : \mathcal{X}(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \rightarrow \mathbb{C}$ mit $\mathcal{X}'(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ bezeichnet. Die Fourier-Transformation $\underline{\tilde{f}} \in \mathcal{Z}'(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ einer Distribution $\underline{\dot{f}} \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ lässt sich über eine beliebige Testfunktion $\underline{g} \in \mathcal{Z}(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ auf folgende Art definieren [Cha90]²:

$$\underline{\tilde{f}}(\underline{g}) = (\mathcal{F}\underline{\dot{f}})(\underline{g}) := \underline{\dot{f}}(2\pi\mathcal{R}\mathcal{F}^{-1}\underline{g}) = \underline{\dot{f}}(\mathcal{F}\underline{g}). \tag{A.8}$$

Aus $\underline{g} \in \mathcal{Z}(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ folgt $\mathcal{F}\underline{g} \in \mathcal{D}(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ und aus $\underline{g} \in \mathcal{D}(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ folgt $\mathcal{F}\underline{g} \in \mathcal{Z}(\mathbb{R}, \mathbb{C})$. Daraus folgt, dass die Fourier-Transformierte einer Distribution $\underline{\dot{f}} \in \mathcal{Z}'(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ eine Distribution $\underline{\tilde{f}} \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ ist.

In der Optik spielt die Exponentialfunktion im Zusammenhang mit evaneszenten Wellen eine besondere Rolle:

$$f(t) = e^t = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{t^j}{j!} \tag{A.9}$$

¹ Ist die Funktion nur auf einer Nullmenge unbeschränkt, ist dies ebenfalls hinreichend [Cha90]. Zur Definition von Nullmengen siehe [Bro19].

² Da sich die Definition der Fourier-Transformation in Gleichung (A.2) zu [Cha90] unterscheidet, ist aus Konsistenzgründen zwischen Funktionen und regulären Distributionen ein Faktor 2π erforderlich.

Die Fourier-Transformation von $f(t)$ kann nicht als gewöhnliche Funktion dargestellt werden, da das Integral divergiert. Da $f(t)$ auf jedem Teilintervall beschränkt ist, ist die Fourier-Transformierte der dazugehörigen regulären Distribution $\underline{f} : \mathcal{D}(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \rightarrow \mathbb{C}$:

$$\begin{aligned} \underline{f}(\underline{g}) &= \underline{f}(\mathcal{F}\underline{g}) = \sum_{j=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{t^j}{j!} (\mathcal{F}\underline{g})(t) dt = 2\pi \sum_{j=0}^{\infty} \frac{i^{-j}}{j!} \frac{\partial^j \underline{g}}{\partial \omega^j}(0) \\ &= 2\pi \sum_{j=0}^{\infty} \frac{i^j}{j!} \delta^{(j)}(\underline{g}), \end{aligned} \tag{A.10}$$

wobei

$$\delta^{(j)}(\underline{g}) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta^{(j)}(\omega) \underline{g}(\omega) d\omega := (-1)^j \frac{\partial^j \underline{g}}{\partial \omega^j}(0). \tag{A.11}$$

Das Integral ist hierbei symbolisch und nicht im Sinne des Integralbegriffs von Lebesgue zu verstehen, da $\delta^{(j)}$ die j -te Ableitung der Delta-Distribution darstellt. Da diese nur im Ursprung ungleich Null ist, wird über eine Nullmenge integriert, was nach dem Integralbegriff von Lebesgue Null ergibt. Das zweite Gleichheitszeichen in Gleichung (A.10) resultiert aus dem Momentensatz für Fourier-Transformationen [Bey16]. Der Einfachheit halber wird für die Fourier-Transformierte von $f(t) = e^t$ folgende Notation verwendet und ebenfalls als Distribution bezeichnet:

$$\underline{f}(\omega) = 2\pi \sum_{j=0}^{\infty} \frac{i^j}{j!} \delta^{(j)}(\omega), \tag{A.12}$$

wobei dies keine vollständige Definition einer Distribution ist und die Konvergenz des Grenzwerts nur für Testfunktionen $\underline{g} \in \mathcal{Z}(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ sichergestellt ist¹. Die im Folgenden verwendete unscharfe Trennung in der Notation zwischen

¹ Da $\mathcal{F}\underline{g} \in \mathcal{D}(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \subset L^1(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ einen kompakten Träger hat und beschränkt ist, gilt $f \cdot \mathcal{F}\underline{g} \in L^1(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ und somit $|\underline{f}(\mathcal{F}\underline{g})| < \infty$, wobei $f(t) = e^t$.

Distributionen und Funktionen ist u. a. dadurch begründet, dass für eine Distribution eine Folge von regulären Distributionen (also Funktionen) angegeben werden kann, sodass der resultierende Grenzwert dieser Folge aus Gleichung (A.6) mit dem Distributionswert übereinstimmt [Cha90]¹. Somit kann einer Distribution für ein Funktionsargument ein Funktionswert zugewiesen werden, falls für dieses Funktionsargument die Funktionswerte der Funktionen gegen einen Grenzwert konvergieren².

Definition 8. (Holomorphe Funktion) Eine Funktion $\underline{g} : \mathcal{U} \rightarrow \mathbb{C}$ heißt holomorph auf $\mathcal{U} \subset \mathbb{C}$, falls sie in jedem Punkt $\underline{u} \in \mathcal{U}$ komplex differenzierbar ist [Dei17]. Im Fall von $\mathcal{U} = \mathbb{C}$ nennt man die Funktion ganz.

Der Funktionenraum $\mathcal{Z}(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ kann mithilfe von Gleichung (A.4) zum Funktionenraum $\mathcal{Z}(\mathbb{C}, \mathbb{C}) = \{\mathcal{F}_c g \mid g \in \mathcal{D}(\mathbb{R}, \mathbb{C})\}$ erweitert werden. Des Weiteren kann zu einer Distribution aus $\mathcal{D}'(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ die komplexe Fourier-Transformation aus $\mathcal{Z}'(\mathbb{C}, \mathbb{C})$ mithilfe von Gleichung (A.8) berechnet werden. Testfunktionen $\underline{g}_c \in \mathcal{Z}(\mathbb{C}, \mathbb{C})$ sind ganz [Cha90] und können daher in jedem Punkt durch eine Taylor-Reihe entwickelt werden [Bro09]. Aus Gleichung (A.12) und dem Satz von Taylor in der komplexen Ebene folgt [Cha90]:

$$\begin{aligned} \underline{\tilde{f}}(\underline{g}) &= 2\pi \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-i)^j}{j!} \frac{\partial^j \underline{g}}{\partial \underline{\omega}^j}(0) = 2\pi \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-i)^j}{j!} \frac{\partial^j \underline{g}_c}{\partial \underline{\omega}^j}(0) = 2\pi \underline{g}_c(-i) \\ &= 2\pi \int_{-\infty-i}^{\infty-i} \delta(\underline{\omega} + i) \underline{g}_c(\underline{\omega}) d\underline{\omega} = \underline{\delta}(\underline{g}_c), \end{aligned} \tag{A.13}$$

wobei $\underline{\tilde{f}} \in \mathcal{Z}'(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ und $\underline{\delta} \in \mathcal{Z}'(\mathbb{C}, \mathbb{C})$. Vereinfacht schreibt man:

$$\underline{\tilde{f}}(\underline{\omega}) = 2\pi \delta(\underline{\omega} + i). \tag{A.14}$$

¹ Dies gilt zumindest für die in dieser Arbeit betrachteten Klassen von Distributionen.

² Bei der Delta-Distribution gilt dies für alle Funktionsargumente aus $\mathbb{R} \setminus \{0\}$.

Das zweite Gleichheitszeichen in Gleichung (A.13) resultiert aus der Tatsache, dass komplexe Differenzierbarkeit reelle Differenzierbarkeit¹ impliziert [Dei17]. Darüber hinaus sind für ganze Funktionen die Werte der komplexen und reellen Ableitung auf der reellen Achse und somit auch im Ursprung identisch. Da die Ableitung ganzer Funktionen eine ganze Funktion ist, gilt diese Eigenschaft auch für Ableitungen höherer Ordnungen.

A.1.2 Mehrdimensionale Fourier-Transformation

Die Berechnung der Fourier-Transformation einer Funktion mit mehrdimensionalem Definitionsbereich $\underline{f} : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{C}$ erfolgt analog zum eindimensionalen Fall, da jede Dimension separat in den Frequenzbereich transformiert werden kann. Die Menge der p -integrierbaren Funktionen wird analog zum eindimensionalen Fall mit $L^p(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$ bezeichnet (vgl. [Whe15]):

$$\underline{f}(\mathbf{x}) \in L^p(\mathbb{R}^m, \mathbb{C}) : \Leftrightarrow \int_{\mathbb{R}^m} |\underline{f}(\mathbf{x})|^p d\mathbf{x} < \infty. \quad (\text{A.15})$$

Die Fourier-Transformation einer Funktion mit mehrdimensionalem Definitionsbereich $\underline{f} : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{C}$ wird wie folgt berechnet:

$$\underline{\tilde{f}}(\mathbf{y}) = (\mathcal{F}_m \underline{f})(\mathbf{y}) := \int_{\mathbb{R}^m} \underline{f}(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{y}^\top \mathbf{x}} d\mathbf{x}, \quad (\text{A.16})$$

$$\underline{f}(\mathbf{x}) = (\mathcal{F}_m^{-1} \underline{\tilde{f}})(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^m} \int_{\mathbb{R}^m} \underline{\tilde{f}}(\mathbf{y}) e^{i\mathbf{y}^\top \mathbf{x}} d\mathbf{y}. \quad (\text{A.17})$$

Eine hinreichende Bedingung für die Existenz der Fourier-Transformation ist, dass $\underline{f} \in L^1(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$ [Whe15]. Schnell-fallende Funktionen mit mehrdimensionalem Definitionsbereich werden mit $\mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C})$ bezeichnet [Whe15]. Die

¹ Damit ist an dieser Stelle die Ableitung einer komplexwertigen Funktion nach einer reellen Variablen gemeint.

Erweiterung der anderen Funktionenräume und Distributionsmengen erfolgt analog unter Verwendung der mehrdimensionalen Fourier-Transformation.

Für die m -dimensionale Delta-Distribution wird folgende Notation verwendet:

$$\delta_m(\mathbf{k}) = \prod_j \delta(k_j), \quad (\text{A.18})$$

wobei $\mathbf{k} = (k_1, \dots, k_m)$. Die Erweiterung der Fourier-Transformation auf Funktionen mit mehrdimensionalem Wertebereich $\underline{f} : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{C}^n$ erfolgt trivialerweise durch elementweise Berechnung der Fourier-Transformation für jede Dimension des Wertebereichs. Im Fall von schnell-fallenden Funktionen $\underline{f} : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{C}^n$ wird der entsprechende Funktionenraum mit $\mathcal{S}(\mathbb{R}^m, \mathbb{C}^n)$ bezeichnet. Die anderen Funktionenräume und Distributionsmengen werden analog bezeichnet.

Bei zeitvarianten Vektorfeldern ist es sinnvoll, zwischen der örtlichen und zeitlichen Fourier-Transformation zu unterscheiden. Die zeitliche Fourier-Transformation wird definiert als:

$$\mathcal{F}_T := \mathcal{F}_1, \quad \mathcal{F}_T^{-1} = \mathcal{F}_1^{-1}. \quad (\text{A.19})$$

Die örtliche Fourier-Transformation $\tilde{\underline{f}}(\mathbf{k}) := (\mathcal{F}_S \underline{f})$ wird abweichend definiert:

$$\left(\mathcal{F}_S \underline{f}\right)(\mathbf{k}) := (2\pi)^3 \left(\mathcal{F}_3^{-1} \underline{f}\right)(\mathbf{k}), \quad \left(\mathcal{F}_S^{-1} \tilde{\underline{f}}\right)(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-3} \left(\mathcal{F}_3 \tilde{\underline{f}}\right)(\mathbf{x}). \quad (\text{A.20})$$

Motiviert ist dieser Unterschied durch die Definition der Phase einer zeitharmonischen Welle entsprechend der verwendeten Nebraska-Konvention in der Ellipsometrie [Hau80, Fuj07]:

$$\underline{E}(\mathbf{x}, t) = \underline{E}_0 e^{i(\omega_0 t - \langle \mathbf{k}_0, \mathbf{x} \rangle)}. \quad (\text{A.21})$$

Gemäß den Gleichungen (A.19) und (A.20) gilt:

$$(\mathcal{F}_S \mathcal{F}_T \underline{\mathbf{E}})(\mathbf{k}, \omega) = (2\pi)^4 \underline{\mathbf{E}}_0 \delta(\omega - \omega_0) \delta_3(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0). \quad (\text{A.22})$$

A.2 Notation für Tensorrechnung

Die Anwendung eines Tensors $\underline{\mathbf{T}}^{(l)} = \left(T_{i_1 i_2 \dots i_{l+1}}^{(l)} \right)$ der Stufe $l + 1$ auf einen Vektor $\underline{\mathbf{V}} = \left(V_i \right)$ erfolgt über die Notation $\underline{\mathbf{T}}^{(l)} \underline{\mathbf{V}} \underline{\mathbf{V}} \dots \underline{\mathbf{V}}$ und das i -te Element des resultierenden Vektors lässt sich folgendermaßen berechnen:

$$\left(\underline{\mathbf{T}}^{(l)} \underbrace{\underline{\mathbf{V}} \underline{\mathbf{V}} \dots \underline{\mathbf{V}}}_{l\text{-mal}} \right)_i := \sum_{j_2} \sum_{j_3} \dots \sum_{j_{l+1}} T_{i j_2 j_3 \dots j_{l+1}}^{(l)} V_{j_2} V_{j_3} \dots V_{j_{l+1}} \quad (\text{A.23})$$

A.3 Fourier-Transformation der Suszeptibilität

Zur Berechnung der zeitlichen Fourier-Transformierten der elektrischen Polarisation $\underline{\tilde{\mathbf{P}}}(\mathbf{x}, \omega)$ wird zunächst die Annahme getroffen, dass sich das elektrische Feld in eine Summe von zeit-harmonischen Wellen zerlegen lässt [Sut03]:

$$\underline{\mathbf{E}}(\mathbf{x}, t) = \sum_k \underline{\mathbf{E}}'_k(\mathbf{x}) e^{i\omega_k t}, \quad (\text{A.24})$$

wobei sowohl positive als auch negative Kreisfrequenzen vorkommen. Dabei wird die Konvention $\omega_k = -\omega_{-k}$ sowie $\underline{\mathbf{E}}'_k(\mathbf{x}) = \left(\underline{\mathbf{E}}'_{-k}(\mathbf{x}) \right)^*$ getroffen. $\underline{\mathbf{E}}(\mathbf{x}, t)$ und $\underline{\mathbf{P}}(\mathbf{x}, t)$ sind dann reelle Größen [Boy08]. Aus $i \neq j$ folgt nicht zwangsläufig $\omega_i \neq \omega_j$. $\underline{\tilde{\mathbf{P}}}(\mathbf{x}, \omega)$ lässt sich anhand der Potenzreihenzerlegung aus Gleichung (3.8) wie folgt berechnen:

$$\underline{\tilde{\mathbf{P}}}(\mathbf{x}, \omega) = (\mathcal{F}_T \underline{\mathbf{P}})(\mathbf{x}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \underline{\mathbf{P}}(\mathbf{x}, t) e^{-i\omega t} dt$$

$$\begin{aligned}
&= \epsilon_0 \left(\sum_i \iint_{-\infty}^{\infty} \chi_e^{(1)}(\mathbf{x}, \tau) \underline{E}'_i(\mathbf{x}) e^{i\omega_i(t-\tau)} e^{-i\omega t} d\tau dt \right. \\
&+ \sum_{i,j} \iint_{-\infty}^{\infty} \chi_e^{(2)}(\mathbf{x}, \tau_1, \tau_2) \underline{E}'_i(\mathbf{x}) \underline{E}'_j(\mathbf{x}) e^{i\omega_i(t-\tau_1)} e^{i\omega_j(t-\tau_2)} \\
&\quad \left. \times e^{-i\omega t} d\tau_1 d\tau_2 dt + \dots \right) \\
&= \epsilon_0 \left(\sum_i \int_{-\infty}^{\infty} \chi_e^{(1)}(\mathbf{x}, \tau) e^{-i\omega_i\tau} d\tau \underline{E}'_i(\mathbf{x}) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(\omega-\omega_i)t} dt \right. \\
&+ \sum_{i,j} \iint_{-\infty}^{\infty} \chi_e^{(2)}(\mathbf{x}, \tau_1, \tau_2) e^{-i(\omega_i\tau_1+\omega_j\tau_2)} d\tau_1 d\tau_2 \underline{E}'_i(\mathbf{x}) \underline{E}'_j(\mathbf{x}) \\
&\quad \left. \times \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(\omega-\omega_i-\omega_j)t} dt + \dots \right) \\
&= \epsilon_0 \left(\sum_i \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \chi_e^{(1)}(\mathbf{x}, \tau) e^{-i\omega_i\tau} d\tau}_{=:\underline{\tilde{\chi}}_e^{(1)}(\mathbf{x}, \omega_i)} 2\pi\delta(\omega - \omega_i) \underline{E}'_i(\mathbf{x}) \right. \\
&\quad \left. + \sum_{i,j} \underbrace{\iint_{-\infty}^{\infty} \chi_e^{(2)}(\mathbf{x}, \tau_1, \tau_2) e^{-i(\omega_i\tau_1+\omega_j\tau_2)} d\tau_1 d\tau_2}_{=:\underline{\tilde{\chi}}_e^{(2)}(\mathbf{x}, \omega_i, \omega_j)} 2\pi\delta(\omega - \omega_i - \omega_j) \right. \\
&\quad \left. \times \underline{E}'_i(\mathbf{x}) \underline{E}'_j(\mathbf{x}) + \dots \right). \tag{A.25}
\end{aligned}$$

Die zeitliche Fourier-Transformation der Magnetisierung $\underline{\tilde{M}}$ lässt sich in analoger Weise berechnen. Dazu sind \mathbf{P}, \mathbf{E} und χ_e entsprechend durch \mathbf{M}, \mathbf{B} und ζ_m zu ersetzen.

A.4 Generelle harmonische ebene Wellen

A.4.1 Homogene Wellen

Für reelle Größen ϵ und μ folgt aus Gleichung (3.38):

$$\omega^2 \mu \epsilon = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 = \left(\frac{\omega n}{c_0}\right)^2 = \langle \mathbf{k}, \mathbf{k} \rangle. \quad (\text{A.26})$$

Es sei \mathbf{s} ein Einheitsvektor und $\underline{\tilde{E}}_g(\omega) \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}, \mathbb{C}^3)$ eine Distribution mit kompaktem Träger¹. Für die inverse Fourier-Transformierte \underline{E}_g gilt, dass sie ein sog. Multiplikator in $\mathcal{Z}'(\mathbb{R}, \mathbb{C}^3)$ ist [Cha90]. Multiplikatoren sind reguläre Distributionen und können somit als gewöhnliche Funktion dargestellt werden. Eine mögliche Lösung der Wellengleichung aus Gleichung (3.38) stellt das folgende elektrische Feld dar:

$$\underline{\tilde{E}}(\mathbf{k}, \omega) = (2\pi)^3 \underline{\tilde{E}}_g(\omega) \delta_3\left(\mathbf{k} - \mathbf{s} \frac{\omega}{c}\right). \quad (\text{A.27})$$

Um die Maxwell'schen Gleichungen zu erfüllen, muss $\underline{\tilde{E}}_g$ so gewählt werden, dass $\langle \mathbf{s}, \underline{\tilde{E}}(\mathbf{k}, \omega) \rangle = 0$ und somit $\langle \mathbf{s}, \underline{\tilde{E}}_g(\omega) \rangle = 0$ für alle ω gilt. Bis auf diese Einschränkung kann $\underline{\tilde{E}}_g$ eine beliebige Distribution aus $\mathcal{S}'(\mathbb{R}, \mathbb{C}^3)$ mit kompaktem Träger sein. Zudem wird c im Träger von $\underline{\tilde{E}}_g$ als konstant angenommen.

¹ Distributionen aus $\mathcal{S}'(\mathbb{R}, \mathbb{C}^3)$ mit einem kompakten Träger bilden alle Testfunktionen auf Null ab, die im Träger den Wert Null besitzen.

Durch Rücktransformation erhält man für eine GHPW die Formel aus [Bor19] im Zeitbereich:

$$\begin{aligned}
\underline{\mathbf{E}}(\mathbf{x}, t) &= (\mathcal{F}_T^{-1} \mathcal{F}_S^{-1} \tilde{\underline{\mathbf{E}}})(\mathbf{x}, t) \\
&= \frac{1}{2\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} \tilde{\underline{\mathbf{E}}}_g(\omega) \delta_3\left(\mathbf{k} - \mathbf{s} \frac{\omega}{c}\right) e^{i(\omega t - \langle \mathbf{k}, \mathbf{x} \rangle)} d\mathbf{k} d\omega \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\underline{\mathbf{E}}}_g(\omega) e^{i\omega\left(t - \frac{\langle \mathbf{s}, \mathbf{x} \rangle}{c}\right)} d\omega = \underline{\mathbf{E}}_g\left(t - \frac{\langle \mathbf{s}, \mathbf{x} \rangle}{c}\right). \tag{A.28}
\end{aligned}$$

Bei der letzten Umformung wurde die Annahme ausgenutzt, dass $\tilde{\underline{\mathbf{E}}}_g$ einen kompakten Träger hat und c in diesem Frequenzband annähernd konstant ist.

Im Frequenzbereich ist das magnetische Feld gegeben durch:

$$\begin{aligned}
\tilde{\underline{\mathbf{B}}}(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{1}{\omega} \mathbf{k} \times \tilde{\underline{\mathbf{E}}}(\mathbf{k}, \omega) \\
&= \frac{(2\pi)^3}{c} \mathbf{s} \times \tilde{\underline{\mathbf{E}}}_g(\omega) \delta_3\left(\mathbf{k} - \mathbf{s} \frac{\omega}{c}\right) \\
&= (2\pi)^3 \tilde{\underline{\mathbf{B}}}_g(\omega) \delta_3\left(\mathbf{k} - \mathbf{s} \frac{\omega}{c}\right), \tag{A.29}
\end{aligned}$$

wobei $\tilde{\underline{\mathbf{B}}}_g(\omega) := \mathbf{s} \times \tilde{\underline{\mathbf{E}}}_g(\omega)/c$. Mit der Definition $\underline{\mathbf{B}}_g := \mathcal{F}_T^{-1} \tilde{\underline{\mathbf{B}}}_g$ folgt für das magnetische Feld im Zeitbereich:

$$\underline{\mathbf{B}}(\mathbf{x}, t) = \underline{\mathbf{B}}_g\left(t - \frac{\langle \mathbf{s}, \mathbf{x} \rangle}{c}\right). \tag{A.30}$$

A.4.2 Inhomogene Wellen

Lässt man die Einschränkung auf nicht-absorbierende Medien fallen, so folgt aus Gleichung (3.46):

$$\omega^2 \underline{\epsilon}_v \underline{\mu} = \left(\frac{\omega}{\underline{c}} \right)^2 = \left(\frac{\omega n}{c_0} \right)^2 = \langle \underline{\mathbf{k}}, \underline{\mathbf{k}} \rangle. \quad (\text{A.31})$$

Es sei $\underline{\mathbf{s}}$ ein komplexer Einheitsvektor mit $\langle \underline{\mathbf{s}}, \underline{\mathbf{s}} \rangle = 1$. Folgende Lösung der Wellengleichung wird als GIPW definiert¹:

$$\tilde{\underline{\mathbf{E}}}(\underline{\mathbf{k}}, \omega) = (2\pi)^3 \tilde{\underline{\mathbf{E}}}_g(\omega) \delta_3 \left(\underline{\mathbf{k}} - \underline{\mathbf{s}} \frac{\omega}{\underline{c}} \right), \quad (\text{A.32})$$

wobei das elektrische Feld $\tilde{\underline{\mathbf{E}}}_g(\omega)$ eine beliebige Distribution aus $\mathcal{S}'(\mathbb{R}, \mathbb{C}^3)$ mit kompaktem Träger sein kann, aber analog zum homogenen Fall und entsprechend Gleichung (3.42) die Bedingung $\langle \underline{\mathbf{s}}, \tilde{\underline{\mathbf{E}}}_g(\omega) \rangle = 0$ für alle ω erfüllen muss. Die inverse Fourier-Transformation von $\tilde{\underline{\mathbf{E}}}_g$ ist eine reguläre Distribution aus $\mathcal{Z}'(\mathbb{R}, \mathbb{C})$. Verwendet man bei der inversen Fourier Transformation die komplexe Erweiterung, erhält man eine Funktion $\underline{\mathbf{E}}_g \in \mathcal{Z}'(\mathbb{C}, \mathbb{C})$, die ganz ist [Cha90]. Im Träger von $\tilde{\underline{\mathbf{E}}}_g(\omega)$ sei \underline{c} konstant. Unter diesen Voraussetzungen erhält man aus $\tilde{\underline{\mathbf{E}}}(\underline{\mathbf{k}}, \omega)$ analog zu Gleichung (A.28) die folgende inverse Fourier-Transformation $\underline{\mathbf{E}}(\underline{\mathbf{x}}, t)$ im Orts- und Zeitbereich:

$$\underline{\mathbf{E}}(\underline{\mathbf{x}}, t) = (\mathcal{F}_T^{-1} \mathcal{F}_S^{-1} \tilde{\underline{\mathbf{E}}})(\underline{\mathbf{x}}, t) = \underline{\mathbf{E}}_g \left(t - \frac{\langle \underline{\mathbf{s}}, \underline{\mathbf{x}} \rangle}{\underline{c}} \right). \quad (\text{A.33})$$

Es sei:

$$\underline{\tilde{\mathbf{B}}}_g(\omega) := \underline{\mathbf{s}} \times \tilde{\underline{\mathbf{E}}}_g(\omega) / \underline{c}, \quad (\text{A.34})$$

¹ Zu Delta-Distributionen mit komplexem Funktionsargument siehe Gleichung (A.14)

woraus analog zu Gleichung (A.29) folgendes Magnetfeld im Orts-/Zeitfrequenzbereich resultiert:

$$\underline{\tilde{\mathbf{B}}}(\underline{\mathbf{k}}, \omega) = (2\pi)^3 \underline{\tilde{\mathbf{B}}}_g(\omega) \delta_3\left(\underline{\mathbf{k}} - \underline{\mathbf{s}} \frac{\omega}{\underline{c}}\right), \quad (\text{A.35})$$

Über die inverse Fourier-Transformation $\underline{\mathbf{B}}_g$ von $\underline{\tilde{\mathbf{B}}}_g$ erhält man auch das magnetische Feld im Zeitbereich:

$$\underline{\mathbf{B}}(\mathbf{x}, t) = (\mathcal{F}_T^{-1} \mathcal{F}_S^{-1} \underline{\tilde{\mathbf{B}}})(\mathbf{x}, t) = \underline{\mathbf{B}}_g\left(t - \frac{\langle \underline{\mathbf{s}}, \mathbf{x} \rangle}{\underline{c}}\right). \quad (\text{A.36})$$

A.5 Ortsaufgelöste Jones-Matrizen

Für die Herleitung von ortsaufgelösten Jones- und Müller-Matrizen wird zunächst das elektrische Feld $\underline{\mathbf{E}}_k(\mathbf{x})$ zur Kreisfrequenz ω_k in einer Referenzebene \mathcal{A}_1 betrachtet und der Rest des optischen Systems ignoriert. O. B. d. A. sei die Referenzebene parallel zur Ebene $z = 0$ angeordnet. In \mathcal{A}_1 ist eine Feldkomponente des elektrischen Feldes redundant [Wyr11] (vgl. Abschnitt 4.4.2). Sind die Feldkomponenten in x - und y -Richtung gegeben, kann die Feldkomponente in z -Richtung daraus abgeleitet werden, um in \mathcal{A}_1 die Maxwell'schen Gleichungen zu lösen [Wyr11]. Die Feldkomponenten in x - und y -Richtung können zudem beliebig gewählt werden.

Zunächst wird die Propagation des elektrischen Feldes von \mathcal{A}_1 zu einem Punkt \mathbf{x}_2 untersucht. Da die Feldkomponente in z -Richtung in \mathcal{A}_1 redundant ist, hängt das elektrische Feld in \mathbf{x}_2 nur von den Feldkomponenten in x - und y -Richtung ab. Der Operator \mathcal{P} sei definiert als die Abbildung des elektrischen Feldes in \mathcal{A}_1 auf das elektrische Feld in \mathbf{x}_2 , wobei nur die ersten beiden Feldkomponenten abgebildet werden:

$$\left(\underline{\mathbf{E}}_k(\mathbf{x}_2)\right)_{\|1,2\|} = \mathcal{P}\left\{\left(\underline{\mathbf{E}}_k|_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{x})\right)_{\|1,2\|}\right\}. \quad (\text{A.37})$$

Als Nächstes wird gezeigt, dass \mathcal{P} ein linearer Operator ist. Es seien $\underline{\mathbf{E}}_{k1}(\mathbf{x}) e^{i\omega_k t}$ und $\underline{\mathbf{E}}_{k2}(\mathbf{x}) e^{i\omega_k t}$ zwei Lösungen der Maxwell'schen Gleichungen. Somit gilt:

$$\left(\underline{\mathbf{E}}_{k1}(\mathbf{x}_2)\right)_{\|1,2\|} = \mathcal{P} \left\{ \left(\underline{\mathbf{E}}_{k1}|_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{x})\right)_{\|1,2\|} \right\}, \quad (\text{A.38})$$

$$\left(\underline{\mathbf{E}}_{k2}(\mathbf{x}_2)\right)_{\|1,2\|} = \mathcal{P} \left\{ \left(\underline{\mathbf{E}}_{k2}|_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{x})\right)_{\|1,2\|} \right\}. \quad (\text{A.39})$$

Aufgrund der Linearität der Ableitung in Gleichung (3.22) ist der Ausdruck $(\underline{\mathbf{E}}_{k1}(\mathbf{x}) + \underline{a}\underline{\mathbf{E}}_{k2}(\mathbf{x})) e^{i\omega_k t}$ für ein Skalar \underline{a} ebenfalls eine Lösung der Maxwell'schen Gleichungen, falls das Medium linear ist. \mathcal{P} ist somit ein linearer Operator:

$$\left(\underline{\mathbf{E}}_{k1}(\mathbf{x}_2) + \underline{a}\underline{\mathbf{E}}_{k2}(\mathbf{x}_2)\right)_{\|1,2\|} = \mathcal{P} \left\{ \left(\underline{\mathbf{E}}_{k1}|_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{x}) + \underline{a}\underline{\mathbf{E}}_{k2}|_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{x})\right)_{\|1,2\|} \right\}. \quad (\text{A.40})$$

Da das Feld $\left(\underline{\mathbf{E}}_k|_{\mathcal{A}_1}\right)_{\|1,2\|}$ in \mathcal{A}_1 beliebig gewählt werden kann, können die Feldkomponenten in x - und y -Richtung getrennt propagiert werden. Die Superposition beider Feldkomponenten ergibt aufgrund der Linearität von \mathcal{P} wieder das ursprüngliche Feld aus Gleichung (A.37):

$$\left(\underline{\mathbf{E}}_k(\mathbf{x}_2)\right)_1 = \mathcal{P}_{xx} \left\{ \left(\underline{\mathbf{E}}_k|_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{x})\right)_1 \right\} + \mathcal{P}_{xy} \left\{ \left(\underline{\mathbf{E}}_k|_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{x})\right)_2 \right\}, \quad (\text{A.41})$$

$$\left(\underline{\mathbf{E}}_k(\mathbf{x}_2)\right)_2 = \mathcal{P}_{yx} \left\{ \left(\underline{\mathbf{E}}_k|_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{x})\right)_1 \right\} + \mathcal{P}_{yy} \left\{ \left(\underline{\mathbf{E}}_k|_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{x})\right)_2 \right\}. \quad (\text{A.42})$$

wobei \mathcal{P}_{xx} , \mathcal{P}_{xy} , \mathcal{P}_{yx} und \mathcal{P}_{yy} lineare Funktionale sind. Aufgrund des Satzes von Radon-Nikodým und der daraus resultierenden Dualität von L^p -Räumen folgt, dass diese linearen Funktionale durch Integraloperatoren darstellbar sind, falls $\underline{\mathbf{E}}_k \in L^p(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^3)$ mit $1 < p < \infty$ [Dun88]. Demnach lassen sich die

Terme auf der rechten Seite der Gleichungen (A.41) und (A.42) durch Integratoren beschreiben. Zusammenfassend erhält man folgende Beziehung:

$$\left(\underline{\mathbf{E}}_k(\mathbf{x}_2)\right)_{\|1,2\|} = \int_{\mathcal{A}_1} \underline{\mathbf{K}}_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2) \left(\underline{\mathbf{E}}_k(\mathbf{x})\right)_{\|1,2\|} dA, \quad (\text{A.43})$$

wobei $\underline{\mathbf{K}}_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2)$ ein matrixwertiger Integralkern ist. Für beliebige \mathbf{G}_1 und \mathbf{G}_2 ist in den Gleichungen (A.37) bis (A.43) eine Koordinatentransformation durch Berechnung der dritten Feldkomponente erforderlich¹:

$$\left(\mathbf{G}_2^\top \underline{\mathbf{E}}_k(\mathbf{x}_2)\right)_{\|1,2\|} = \int_{\mathcal{A}_1} \underline{\mathbf{K}}'_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2) \left(\mathbf{G}_1^\top \underline{\mathbf{E}}_k(\mathbf{x})\right)_{\|1,2\|} dA, \quad (\text{A.44})$$

wobei $\underline{\mathbf{K}}'_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2)$ ein matrixwertiger Integralkern ist, der i. Allg. von $\underline{\mathbf{K}}_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2)$ verschieden ist. Im Jones-Formalismus erhält man schließlich mit Gleichung (3.57):

$$\underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}_2; \mathbf{G}_2) = \int_{\mathcal{A}_1} \underline{\mathbf{J}}_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2) \underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}; \mathbf{G}_1) dA, \quad (\text{A.45})$$

wobei $\underline{\mathbf{J}}_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2) := \underline{\mathbf{K}}_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2)$.

Bei der Propagation von Licht gilt das Huygens'sche Prinzip. Dabei kann eine elektromagnetische Welle in Elementarwellen zerlegt werden. Die separate Propagation der Elementarwellen durch das optische System und die anschließende Superposition ergibt wieder die ursprüngliche elektromagnetische Welle. Dieses physikalische Prinzip gilt sowohl für den Operator \mathcal{P} , als auch für den daraus abgeleiteten Integraloperator aus Gleichung (A.45). Die

¹ Dafür muss der Operator \mathcal{F}_p auf das Feld $\left(\mathbf{G}_1^\top \underline{\mathbf{E}}_k(\mathbf{x})\right)_{\|1,2\|}$ angewendet werden und anschließend die dritte Feldkomponente ähnlich zu Gleichung (4.95) durch Lösung einer linearen Gleichung für jedes $\mathbf{x} \in \mathcal{A}_1$ und \mathbf{k} berechnet werden. Mit Gleichung (A.37) existiert somit ein Operator \mathcal{P}' , um $\left(\mathbf{G}_1^\top \underline{\mathbf{E}}_k(\mathbf{x})\right)_{\|1,2\|}$ auf $\left(\mathbf{G}_2^\top \underline{\mathbf{E}}_k(\mathbf{x}_2)\right)_{\|1,2\|}$ abzubilden, woraus die Gleichung (A.44) aus den Gleichungen (A.37) bis (A.43) folgt.

Jones-Matrix $\underline{\mathbf{J}}_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2)$ beschreibt daher die Änderung des Polarisationszustands einer in \mathbf{x} emittierten und in \mathbf{x}_2 detektierten Elementarwelle.

A.6 Ortsaufgelöste Müller-Matrizen

Bei Müller-Matrizen werden Intensitäten statt komplexe Amplituden miteinander in Beziehung gesetzt, weshalb die Definition des Polarisationszustands anhand des Stokes-Vektors auch für polychromatisches Licht gültig ist. Mithilfe der Gleichung (3.55) lässt sich die Matrix $\langle \underline{\mathbf{E}}\underline{\mathbf{E}}^\dagger \rangle_t$ aus Gleichung (3.69) spektral zerlegen. Hierfür wird eine homogene Beleuchtung angenommen, so dass die Faktorisierung aus Gleichung (3.59) für alle Kreisfrequenzen gilt. Unter der Annahme $\forall k \forall l : k \neq l \Rightarrow \omega_k \neq \omega_l$ folgt:

$$\begin{aligned} \langle \underline{\mathbf{E}}(\mathbf{x}, t)\underline{\mathbf{E}}(\mathbf{x}, t)^\dagger \rangle_t &= \sum_{k \geq 0, l \geq 0} \underline{\mathbf{E}}_k(\mathbf{x})\underline{\mathbf{E}}_l(\mathbf{x})^\dagger \underbrace{\langle e^{i(\omega_k - \omega_l)t} \rangle_t}_{=\delta_{kl}} \\ &= \sum_{k \geq 0} \underline{\mathbf{E}}_k(\mathbf{x})\underline{\mathbf{E}}_k(\mathbf{x})^\dagger. \end{aligned} \quad (\text{A.46})$$

Einsetzen von Gleichung (A.46) in Gleichung (3.75) liefert folgende spektrale Zerlegung des Stokes-Vektors $\mathbf{S}(\mathbf{x}, \mathbf{G})$:

$$\mathbf{S}(\mathbf{x}; \mathbf{G}) = \sum_{k \geq 0} \mathbf{S}_k(\mathbf{x}; \mathbf{G}), \quad (\text{A.47})$$

wobei $\mathbf{S}_k(\mathbf{x}; \mathbf{G})$ den Stokes-Vektor für die Kreisfrequenz ω_k bezeichnet:

$$\mathbf{S}_k(\mathbf{x}; \mathbf{G}) := \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{G}) \mathbf{vec} \left(\underline{\mathbf{E}}_k(\mathbf{x})\underline{\mathbf{E}}_k(\mathbf{x})^\dagger \right). \quad (\text{A.48})$$

Bei monochromatischem Licht muss die ortsaufgelöste Müller-Matrix aus der ortsaufgelösten Jones-Matrix hergeleitet werden. Im Müller-Formalismus

gilt folgende Beziehung, falls sich das Feld in \mathcal{A}_1 entsprechend der Gleichung (3.59) faktorisieren lässt:

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}_k(\mathbf{x}_2; \mathbf{G}_2) & \stackrel{(3.82)}{=} \underline{\mathbf{A}}_{\Gamma}(\underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}_2; \mathbf{G}_2) \otimes \underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}_2; \mathbf{G}_2)^*) \\
& \stackrel{(3.60)}{=} \underline{\mathbf{A}}_{\Gamma}(\underline{\mathbf{J}}_k(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2)\underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}_1; \mathbf{G}_1) \\
& \quad \otimes \underline{\mathbf{J}}_k(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2)^*\underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}_1; \mathbf{G}_1)^*) \\
& \stackrel{(3.74)}{=} \underline{\mathbf{A}}_{\Gamma}(\underline{\mathbf{J}}_k(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2) \otimes \underline{\mathbf{J}}_k(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2)^*) \\
& \quad \times (\underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}_1; \mathbf{G}_1) \otimes \underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}_1; \mathbf{G}_1)^*) \\
& = \underbrace{\underline{\mathbf{A}}_{\Gamma}(\underline{\mathbf{J}}_k(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2) \otimes \underline{\mathbf{J}}_k(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2)^*)}_{=: \mathbf{M}_k(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2)} \underline{\mathbf{A}}_{\Gamma}^{-1} \\
& \quad \times \underbrace{\underline{\mathbf{A}}_{\Gamma}(\underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}_1; \mathbf{G}_1) \otimes \underline{\mathbf{U}}_k(\mathbf{x}_1; \mathbf{G}_1)^*)}_{=: \mathbf{S}_k(\mathbf{x}_1; \mathbf{G}_1)} \\
& = \mathbf{M}_k(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2)\mathbf{S}_k(\mathbf{x}_1; \mathbf{G}_1). \tag{A.49}
\end{aligned}$$

Die Formel zeigt die Umrechnung von ortsaufgelösten Jones-Matrizen zu ortsaufgelösten Müller-Matrizen bzw. von Jones- zu Stokes-Vektoren für monochromatisches Licht. Es ist daher möglich, die Propagation von monochromatischem Licht im Jones-Formalismus auszuführen, um anschließend die Müller-Matrix eines optischen Systems für monochromatisches Licht zu berechnen. Der Müller-Formalismus ist besonders für Berechnungen mit inkohärentem Licht geeignet.

Zunächst soll der Fall von zeitlich inkohärentem, also polychromatischem Licht betrachtet werden. Die Variable k_0 wird definiert als der Index der Kreisfrequenz ω_{k_0} , die zur mittleren Kreisfrequenz des diskreten Intensitätsspektrums in \mathbf{x}_1 den kleinsten Abstand hat. Nun wird zum einen die Annahme getroffen, dass sich das elektrische Feld entsprechend der Gleichung (3.59) für alle Kreisfrequenzen ω_k faktorisieren lässt. Zum anderen wird darüber hinaus für das gesamte Spektrum ein annähernd konstanter Polarisationszustand im

Punkt \mathbf{x}_1 bzgl. des Rechtssystems \mathbf{G}_1 angenommen¹:

$$\forall k \exists \underline{q}_k : \underline{U}_k(\mathbf{x}_1; \mathbf{G}_1) = \underline{q}_k \underline{U}_{k_0}(\mathbf{x}_1, \mathbf{G}_1). \quad (\text{A.50})$$

Daraus lässt sich eine spektral gemittelte Müller-Matrix ableiten:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}(\mathbf{x}_2; \mathbf{G}_2) &:= \sum_{k \geq 0} \mathbf{S}_k(\mathbf{x}_2; \mathbf{G}_2) \\ &\stackrel{(\text{A.49})}{=} \sum_{k \geq 0} \mathbf{M}_k(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2) \mathbf{S}_k(\mathbf{x}_1; \mathbf{G}_1) \\ &\stackrel{(\text{A.50})}{=} \underbrace{\sum_{k \geq 0} \mathbf{M}_k(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2) |\underline{q}_k|^2 \mathbf{S}_{k_0}(\mathbf{x}_1; \mathbf{G}_1)}_{=: \mathbf{M}(\mathcal{A}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2)}. \end{aligned} \quad (\text{A.51})$$

Ist das Licht in einer Referenzebene \mathcal{A}_1 vollständig räumlich inkohärent, so kann die Intensität an einem Punkt \mathbf{x}_2 über einen Integraloperator aus der örtlichen Intensitätsverteilung in \mathcal{A}_1 berechnet werden (vgl. [Goo15]):

$$I(\mathbf{x}_2; \mathbf{G}_2) = \int_{\mathcal{A}_1} K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2) I(\mathbf{x}; \mathbf{G}_1) dA, \quad (\text{A.52})$$

wobei $K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2)$ einen Integrkern darstellt. Diese Formel weist starke Ähnlichkeiten zur Formel aus Gleichung (A.43) auf. Die Matrix $\underline{\mathbf{K}}_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2)$ in Gleichung (A.43) symbolisiert die Änderung der komplexen Amplitude einer Elementarwelle im Jones-Formalismus, die von \mathbf{x} emittiert und in \mathbf{x}_2 detektiert wird. Die Elementarwellen in \mathcal{A}_1 werden als räumlich kohärent angenommen. Demgegenüber beschreibt $K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2)$ die Intensitätsänderung einer aus \mathbf{x} emittierten und in \mathbf{x}_2 detektierten Elementarwelle, wobei die Elementarwellen in \mathcal{A}_1 als räumlich inkohärent angenommen werden. Dieser Elementarwelle kann man einen Polarisationszustand zuweisen und man erhält dann

¹ Im visuellen Bereich kann mit Polfiltern und dem Fresnel'schen Parallelepiped ein beliebiger und für alle Kreisfrequenzen annähernd konstanter Polarisationszustand eingestellt werden.

eine Verallgemeinerung von Gleichung (A.52) auf den vektoriellen Fall mithilfe des Müller-Formalismus¹:

$$\mathbf{S}(\mathbf{x}_2; \mathbf{G}_2) = \int_{\mathcal{A}_1} \mathbf{M}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2; \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2) \mathbf{S}(\mathbf{x}; \mathbf{G}_1) dA. \quad (\text{A.53})$$

A.7 Strahlstärke von reflektiertem Licht an Kugelreflektoren

Zu einem einfallenden Strahl mit dem Aufpunkt $(x, y, 0)^\top$ können die sphärischen Koordinaten des reflektierten Strahls anhand folgender Formel berechnet werden (vgl. Gleichung (4.68) und Abb. 4.9):

$$\theta_K = 4 \arcsin \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{n_K r_K} - 2 \arcsin \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{r_K}, \quad (\text{A.54})$$

$$\theta_o = |\theta_K|, \quad (\text{A.55})$$

$$\eta_o = \arctan2(y \operatorname{sgn} \theta_K, x \operatorname{sgn} \theta_K). \quad (\text{A.56})$$

Es sei \mathbf{t} eine Funktion mit folgender Definition:

$$\mathbf{t}: \begin{cases} (\mathcal{A}_d)_{\|1,2\|} & \rightarrow [0^\circ, 90^\circ] \times [0^\circ, 360^\circ] \\ (x, y) & \mapsto (\theta_o, \eta_o) \end{cases}. \quad (\text{A.57})$$

Des Weiteren sei \mathbf{J}_t die Jacobi-Matrix von \mathbf{t} . Zunächst werden nur sphärische Winkel $(\theta_o, \eta_o) \in \mathcal{A}_{\text{sp}}$ mit $\mathcal{A}_{\text{sp}} := \{(\theta_o, \eta_o) \mid \theta_o > \theta_K^{\max} \wedge \theta_o \leq |\theta_K^{\min}|\}$ betrachtet. Wird mit dA ein infinitesimales Flächenelement in $(\mathcal{A}_d)_{\|1,2\|}$ bezeichnet, lassen sich mithilfe von \mathbf{t} die infinitesimalen sphärischen Winkel $d\theta_o$ und

¹ Im Unterschied zu Gleichung (A.51) gilt Gleichung (A.53) auch für räumlich inhomogene, räumlich inkohärente Felder in \mathcal{A}_1 .

$d\eta_o$ anhand des Absolutbetrags der Determinante der Jacobi-Matrix berechnen:

$$d\theta_o d\eta_o = |\det \mathbf{J}_t(x,y)| dx dy = |\det \mathbf{J}_t(x,y)| dA, \quad (\text{A.58})$$

wobei (x,y) so gewählt wird, dass $\mathbf{t}(x,y) = (\theta_o, \eta_o)$. Die von der Beleuchtung auf die Reflektorebene auftreffende Intensität ist gegeben durch:

$$I_{1s}(x,y) = \frac{d\Phi_{1s}}{dA} = \text{const.}, \quad (\text{A.59})$$

wobei $d\Phi_{1s}$ die auf dA auftreffende infinitesimale Leistung ist.

Die Strahlstärke S_K beschreibt das reflektierte Lichtfeld. Diese entspricht der infinitesimalen Leistung des reflektierten Lichts $d\Phi_o$ pro infinitesimalem Raumwinkel $d\Omega_o$ [Bey16]:

$$S_K(\theta_o, \eta_o) = \frac{d\Phi_o}{d\Omega_o}. \quad (\text{A.60})$$

Der infinitesimale Raumwinkel steht mit dem infinitesimalen Polar- und Azimutwinkel in folgendem Zusammenhang [Rob13]:

$$d\Omega_o = \sin \theta_o d\theta_o d\eta_o. \quad (\text{A.61})$$

Einsetzen von Gleichung (A.58) liefert:

$$d\Omega_o = \sin \theta_o |\det \mathbf{J}_t(x,y)| dA. \quad (\text{A.62})$$

Würde bei der Reflexion an der Mikrokugel kein Intensitätsverlust auftreten, wäre die infinitesimale Leistung $d\Phi_{1s}$, die auf dA auftrifft identisch mit der infinitesimalen Leistung $d\Phi_o$, die im Raumwinkel $d\Omega_o$ emittiert wird. Der Intensitätsverlust wird durch den Reflexionsgrad R beschrieben und es gilt:

$$d\Phi_o = R d\Phi_{1s}. \quad (\text{A.63})$$

Der Reflexionsgrad lässt sich anhand der Fresnel'schen Transmissions- und Reflexionskoeffizienten aus Abschnitt 3.4 berechnen. Die Transmissionskoeffizienten von Luft zu Glas seien t_{12p} bzw. t_{12s} , von Glas zu Luft t_{21p} bzw. t_{21s} und die Reflexionskoeffizienten seien r_{-23p} bzw. r_{-23s} . Die Subindizes 1, 2 und 3 symbolisieren jeweils die Medien Luft, Glas und Metall. Für den Reflexionsgrad gilt:

$$R = \frac{|r_{-p}|^2 + |r_{-s}|^2}{2}, \quad (\text{A.64})$$

wobei

$$r_{-p} = t_{12p} r_{-23p} t_{21p}, \quad r_{-s} = t_{12s} r_{-23s} t_{21s}. \quad (\text{A.65})$$

Die Fresnel'schen Koeffizienten sowie der Reflexionsgrad sind vom Auftreffpunkt eines Lichtstrahls auf der Kugeloberfläche abhängig, so dass R eine Funktion von (x,y) ist und im Folgenden mit $R(x,y)$ bezeichnet wird. Einsetzen der Gleichungen (A.59), (A.62) und (A.63) in Gleichung (A.60) liefert:

$$S_K(\theta_o, \eta_o) = \frac{d\Phi_o}{d\Omega_o} = \frac{R(x,y) d\Phi_{ls}}{\sin \theta_o |\det \mathbf{J}_t(x,y)| dA} = I_{ls} \frac{R(x,y)}{\sin \theta_o |\det \mathbf{J}_t(x,y)|}, \quad (\text{A.66})$$

Für $(\theta_o, \eta_o) \in \mathcal{A}_{sp}$ ist das Urbild $\mathbf{t}^{-1}(\theta_o, \eta_o)$ eine einelementige Menge. \mathbf{t} ist jedoch nicht injektiv. Für $(\theta_o, \eta_o) \notin \mathcal{A}_{sp}$ enthält das Urbild abhängig vom Auftreffpunkt des Lichtstrahls (und vom Brechungsindex) zwischen null und drei Elemente. Die Formel aus Gleichung (A.66) lässt sich jedoch für diese Fälle verallgemeinern:

$$S_K(\theta_o, \eta_o) = \sum_{\substack{(x,y) \in \\ \mathbf{t}^{-1}(\theta_o, \eta_o)}} I_{ls} \frac{R(x,y)}{\sin \theta_o |\det \mathbf{J}_t(x,y)|}. \quad (\text{A.67})$$

A.8 Näherung erster Ordnung für polychromatisches, un kollimiertes Licht

In diesem Abschnitt wird der Einfluss von Einfallswinkel- und Wellenlängenvariationen auf eine gemessene, spektral gemittelte Müller-Matrix untersucht. Üblicherweise müssen solche Variationen im Müller-Formalismus durch eine Integration berücksichtigt werden, doch unter gewissen Annahmen und für die in der vorliegenden Arbeit betrachteten Proben ist eine Vereinfachung möglich. Die Beleuchtungsoptik und das Objektiv werden wieder in abstrahierter Form nur als Referenzebenen betrachtet, in denen sich jeweils eine Blende befindet. Die Menge $\mathcal{A}_{\text{ls}} \subset \mathbb{R}^3$ charakterisiert die Blendenöffnung der Beleuchtung, die sich in der x,y -Ebene befindet und es sei $\mathcal{A}'_{\text{ls}} := (\mathcal{A}_{\text{ls}})_{\llbracket 1,2 \rrbracket}$. Aus der Blendenöffnung wird ein räumlich inkohärentes, homozentrisches, annähernd kollimiertes, konvergentes oder divergentes Strahlenbündel emittiert. Das Strahlenbündel wird von \mathcal{A}_{ls} durch ein optisches System nach \mathcal{A}_{d} propagiert und an n optischen Elementen reflektiert oder transmittiert. Abb. A.1 zeigt die Propagation eines solchen Strahlenbündels durch das optische System in einem an den Spiegelflächen bzw. am Retroreflektor entfalteten Strahlengang. Die Oberflächen der optischen Elemente werden vereinfachend als eben angenommen. Neigungsänderungen der Oberflächen müssen also im Strahlquerschnitt vernachlässigbar sein.

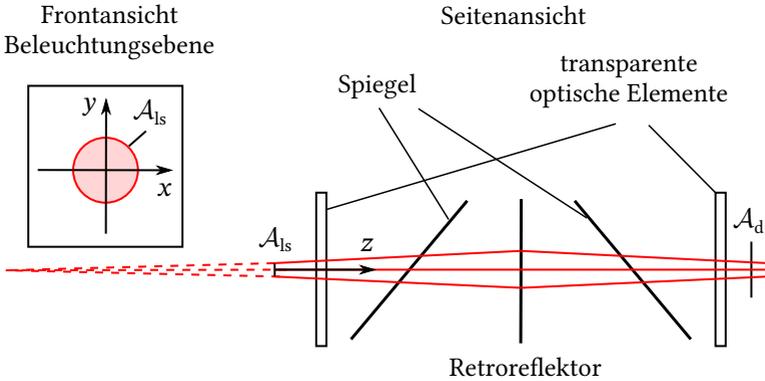


Abbildung A.1: Propagation eines eng gebündelten Strahlenbündels durch das optische System von der Beleuchtungsebene \mathcal{A}_{1s} zur Detektorebene \mathcal{A}_d . Der Strahlengang ist an den Spiegelflächen und am Retroreflektor entfaltet dargestellt.

Die Intensitäts- und Polarisationszustandsänderungen eines Lichtstrahls mit der Kreisfrequenz ω_k bei Reflexion oder Transmission an den optischen Elementen werden durch n matrixwertige Funktionen $\mathbf{M}_{k1}(\theta_{k1}, \eta_{k1})$, $\mathbf{M}_{k2}(\theta_{k2}, \eta_{k2})$ bis $\mathbf{M}_{kn}(\theta_{kn}, \eta_{kn})$ beschrieben. Die Richtungen und Azimutwinkel der auftreffenden Lichtstrahlen entsprechend der Abb. 3.4 und 5.6 werden für jedes optische Element durch die Parameter $(\theta_{k1}, \eta_{k1}, \phi_{k1})$, $(\theta_{k2}, \eta_{k2}, \phi_{k2})$ bis $(\theta_{kn}, \eta_{kn}, \phi_{kn})$ beschrieben. Die Lichtstrahlen des emittierten Strahlenbündels werden durch die (x, y) -Koordinaten in \mathcal{A}'_{1s} parametrisiert. Die geometrischen Parameter sind somit Funktionen von x und y . Die Abbildung \mathbf{t}_{kl} sei definiert als $\mathbf{t}_{kl} : \mathcal{A}'_{1s} \rightarrow \mathbb{R}^2, (\mathbf{x}) \mapsto (\theta_{kl}, \eta_{kl})$. Die Menge der Einfallswinkel zum optischen Element l wird mit $\mathcal{M}_{\theta\eta, kl} := \mathbf{t}_{kl}(\mathcal{A}'_{1s})$ bezeichnet. Des Weiteren werden für jedes optische Element l zwei Winkel θ_{0kl} und η_{0kl} mit $(\theta_{0kl}, \eta_{0kl}) = \mathbf{t}_{kl}(\mathbf{o}_2)$ definiert. Diese Winkel beschreiben die Richtung des Hauptstrahls auf das optische Element l und der dazugehörige Azimutwinkel sei ϕ_{0kl} . Die in \mathcal{A}_d detektierte Intensität ergibt sich entsprechend der Strahlenoptik bei inkohärenter Beleuchtung aus den Müller-Matrizen jedes einzelnen Lichtstrahls, der aus \mathcal{A}_{1s} emittiert und in \mathcal{A}_d detektiert wird. Der Einfluss der spektralen Abhängigkeit der Müller-Matrix führt zu folgender Formel für die spektral gemittelte Müller-Matrix $\mathbf{M}(\mathcal{A}_{1s}, \mathcal{A}_d)$ des gesamten optischen Systems zwischen den Referenzebenen

\mathcal{A}_{Is} und \mathcal{A}_{d} :

$$\mathbf{M}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathcal{A}_{\text{d}}) = \sum_{k \geq 0} |q_{-k}|^2 \int_{\mathcal{A}_{\text{Is}}} \prod_{l=1}^n \mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}_{kl}(\theta_{kl}, \eta_{kl}), \phi_{kl}) dA, \quad (\text{A.68})$$

wobei das Produktzeichen angewendet auf n Matrizen $\mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2, \dots, \mathbf{M}_n$ wie folgt definiert wird:

$$\prod_{l=1}^n \mathbf{M}_l = \mathbf{M}_n \mathbf{M}_{n-1} \dots \mathbf{M}_1. \quad (\text{A.69})$$

Die Koeffizienten $|q_{-k}|^2$ sind in Anhang A.6 definiert und beschreiben das Emissionsspektrum. Dieses wird als schmalbandig angenommen. Die Bandbreite wird durch ein Intervall $[[k_-, k_+]]$ beschrieben, wobei gilt: $k \notin [[k_-, k_+]] \Rightarrow |q_{-k}|^2 \approx 0$.

Da ein annähernd kollimiertes Strahlenbündel angenommen wird, ist die Einfallswinkelvariation der Lichtstrahlen relativ gering. Insbesondere bei Substraten oder dünn beschichteten Medien kann die Müller-Matrix für einen kleinen Einfallswinkelbereich gut linearisiert werden. Es wird daher gefordert, dass die Müller-Matrizen $\mathbf{M}_{kl}(\theta_{kl}, \eta_{kl})$ in den Winkelbereichen $\mathcal{M}_{\theta\eta, kl}$ für alle ω_k durch eine Näherung erster Ordnung ausreichend genau approximiert werden können [Neg20b]:

$$\begin{aligned} & \forall i \forall j \forall l \forall k \in [[k_-, k_+]] \forall (\theta_{kl}, \eta_{kl}) \in \mathcal{M}_{\theta\eta, kl} : (\mathbf{M}_{kl}(\theta_{kl}, \eta_{kl}))_{ij} \\ & \approx (\mathbf{M}_{kl}(\theta_{0kl}, \eta_{0kl}))_{ij} + (\theta_{kl} - \theta_{0kl}) \frac{\partial (\mathbf{M}_{kl})_{ij}}{\partial \theta_{kl}}(\theta_{0kl}, \eta_{0kl}) \\ & + (\eta_{kl} - \eta_{0kl}) \frac{\partial (\mathbf{M}_{kl})_{ij}}{\partial \eta_{kl}}(\theta_{0kl}, \eta_{0kl}). \end{aligned} \quad (\text{A.70})$$

Zur Motivation dieser Abschätzung werden zwei Fälle unterschieden: $\theta_{0kl} \approx 0^\circ$ und $\theta_{0kl} \gg 0^\circ$. Abb. A.2 dient zur Veranschaulichung dieser beiden Fälle.

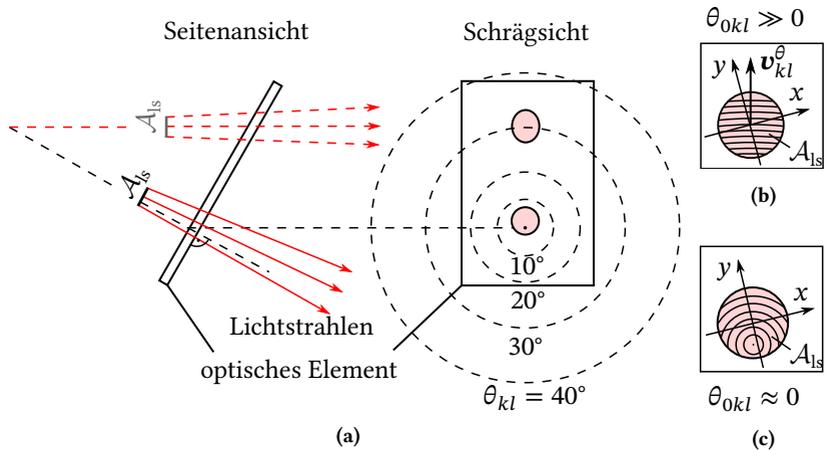


Abbildung A.2: Skizze zur Visualisierung der Einfallswinkel der einzelnen Strahlen des Strahlenbündels jeweils für einen kleinen ($\theta_{0kl} \approx 0$) und einen großen ($\theta_{0kl} \gg 0$) Einfallswinkel des Hauptstrahls.

Im Fall $\theta_{0kl} \approx 0^\circ$ trifft das Strahlenbündel zur Kreisfrequenz ω_k annähernd senkrecht auf das optische Element l auf. Die Kreisfrequenzen aus den Abb. A.2b und A.2c bestehen aus Punkten in der x,y -Ebene, die verschiedenen emittierten Lichtstrahlen entsprechen. Jeder Kreisfrequenz entspricht eine Menge von Lichtstrahlen, die unter einem gegebenen Einfallswinkel θ_{kl} auf die Oberfläche des optischen Elements l auftreffen. Das x,y -Koordinatensystem ist schräg eingezeichnet, um eine optische Rotation um den Winkel ϕ_{kl} zu visualisieren. Bei kleinen Einfallswinkeln bis ca. 5° ist die Müller-Matrix kaum vom Einfallswinkel abhängig [Azz89a]. Dies gilt z. B. für Schichtstrukturen aus isotropen Medien oder anisotropen, uniaxialen Medien, bei denen die optische Achse und die Oberflächennormale senkrecht zueinander stehen [Azz82b]. Da diese Medien den Fokus dieser Arbeit bilden, ist für kleine Einfallswinkel sogar eine Näherung Nullter Ordnung ausreichend. Auch der Einfluss des Richtungswinkels η_{0kl} auf die Müller-Matrix ist in diesem Fall vernachlässigbar, wodurch eine optische Simulation entsprechend Abb. A.2c zur Berechnung der Müller-Matrix vermieden wird.

Als Nächstes wird der Fall $\theta_{0kl} \gg 0^\circ$ betrachtet und hierbei weiter angenommen, dass der Durchmesser der Blende \mathcal{A}_{ls} relativ klein ist. In diesem Fall bilden die Kreisabschnitte aus Abb. A.2b zu einem gegebenen Einfallswinkel annähernd parallele Linien. Diese Eigenschaft gilt für alle Richtungswinkel η_{0kl} . Es gilt daher folgende Näherung:

$$\forall k \in \llbracket k_-, k_+ \rrbracket \forall l \forall \mathbf{x} \in \mathcal{A}'_{\text{ls}} : \begin{pmatrix} \theta_{kl} - \theta_{0kl} \\ \eta_{kl} - \eta_{0kl} \end{pmatrix} \quad (\text{A.71})$$

$$\approx \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\partial \theta_{kl}}{\partial x} & \frac{\partial \theta_{kl}}{\partial y} \\ \frac{\partial \eta_{kl}}{\partial x} & \frac{\partial \eta_{kl}}{\partial y} \end{pmatrix}}_{=\mathbf{J}_{t_{kl}}}(\mathbf{o}_2) \cdot (\mathbf{x})_{\llbracket 1,2 \rrbracket}. \quad (\text{A.72})$$

wobei $\mathbf{J}_{t_{kl}}$ die Jacobi-Matrix von t_{kl} bezeichnet. Einsetzen der Gleichung (A.72) in Gleichung (A.70) ergibt:

$$\begin{aligned} \forall k \in \llbracket k_-, k_+ \rrbracket \forall l \forall \mathbf{x} \in \mathcal{A}'_{\text{ls}} : \mathbf{M}_{kl}(t_{kl}(\mathbf{x})) &\approx \overbrace{\mathbf{M}_{kl}(t_{kl}(\mathbf{o}_2))}^{=: \mathbf{M}_{0kl}} \\ &+ \left\langle \underbrace{(\mathbf{J}_{t_{kl}}^\top(\mathbf{o}_2))_{\llbracket 1,2 \rrbracket \times \{1\}}}_{=: v_{kl}^\theta}, \mathbf{x} \right\rangle \underbrace{\frac{\partial \mathbf{M}_{kl}}{\partial \theta_{kl}}(t_{kl}(\mathbf{o}_2))}_{=: \mathbf{M}_{kl}^\theta} \\ &+ \left\langle \underbrace{(\mathbf{J}_{t_{kl}}^\top(\mathbf{o}_2))_{\llbracket 1,2 \rrbracket \times \{2\}}}_{=: v_{kl}^\eta}, \mathbf{x} \right\rangle \underbrace{\frac{\partial \mathbf{M}_{kl}}{\partial \eta_{kl}}(t_{kl}(\mathbf{o}_2))}_{=: \mathbf{M}_{kl}^\eta}. \end{aligned} \quad (\text{A.73})$$

Entsprechend den Erläuterungen gilt für die beiden betrachteten Fälle folgende Abschätzung für die Müller-Matrizen der Lichtstrahlen:

$$\begin{aligned} \forall k \in \llbracket k_-, k_+ \rrbracket \forall l \forall \mathbf{x} \in \mathcal{A}'_{\text{ls}} : \mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}_{kl}(\theta_{kl}, \eta_{kl}), \phi_{kl}) \\ \approx \mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}_{kl}(\theta_{kl}, \eta_{kl}), \phi_{0kl}), \end{aligned} \quad (\text{A.74})$$

da $\forall k \in \llbracket k_-, k_+ \rrbracket \forall l \forall \mathbf{x} \in \mathcal{A}'_{\text{ls}} : \theta_{kl} \gg 0^\circ \Rightarrow \phi_{kl} \approx \phi_{0kl}$ und für $\theta_{kl} \approx 0^\circ$ die Müller-Matrix unabhängig von ϕ_{kl} ist. Einsetzen der Gleichungen (A.73)

und (A.74) in Gleichung (A.68) liefert:

$$\begin{aligned}
\mathbf{M}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathcal{A}_{\text{d}}) &\approx \sum_{k \geq 0} |q_{-k}|^2 \int_{\mathcal{A}_{\text{Is}}} \left(\prod_{l=1}^n \mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}_{0kl}, \phi_{0kl}) \right. \\
&+ \left. \left(\prod_{l=2}^n \mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}_{0kl}, \phi_{0kl}) \right) \mathbf{M}_{\text{Er}}(\langle \mathbf{v}_{k1}^{\theta}, \mathbf{x} \rangle \mathbf{M}_{k1}^{\theta}, \phi_{0k1}) \right. \\
&+ \left. \left(\prod_{l=3}^n \mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}_{0kl}, \phi_{0kl}) \right) \mathbf{M}_{\text{Er}}(\langle \mathbf{v}_{k2}^{\theta}, \mathbf{x} \rangle \mathbf{M}_{k2}^{\theta}, \phi_{0k2}) \mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}_{0k1}, \phi_{0k1}) \right. \\
&\dots \\
&+ \left. \left(\prod_{l=2}^n \mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}_{0kl}, \phi_{0kl}) \right) \mathbf{M}_{\text{Er}}(\langle \mathbf{v}_{k1}^{\eta}, \mathbf{x} \rangle \mathbf{M}_{k1}^{\eta}, \phi_{0k1}) \right. \\
&+ \left. \left(\prod_{l=3}^n \mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}_{0kl}, \phi_{0kl}) \right) \mathbf{M}_{\text{Er}}(\langle \mathbf{v}_{k2}^{\eta}, \mathbf{x} \rangle \mathbf{M}_{k2}^{\eta}, \phi_{0k2}) \mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}_{0k1}, \phi_{0k1}) \right. \\
&\dots) \text{d}A \tag{A.75}
\end{aligned}$$

Falls die Fläche von \mathcal{A}'_{Is} klein und kreisförmig ist und weiterhin die Bedingung $\forall \mathbf{x} \in \mathcal{A}'_{\text{Is}} \forall k \in \llbracket k_{-}, k_{+} \rrbracket \forall l : |\langle \mathbf{v}_{kl}^{\theta}, \mathbf{x} \rangle| \ll 1 \wedge |\langle \mathbf{v}_{kl}^{\eta}, \mathbf{x} \rangle| \ll 1$ erfüllt ist, dann können höhere Potenzen von x und y vernachlässigt werden. Nach Abb. A.1 gilt für beliebige $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^2$:

$$\int_{\mathcal{A}'_{\text{Is}}} \langle \mathbf{v}, \mathbf{x} \rangle \text{d}A = 0, \tag{A.76}$$

wobei der Kreismittelpunkt als Ursprung des x, y -Koordinatensystems gewählt wird. Daraus folgt:

$$\forall k \in \llbracket k_{-}, k_{+} \rrbracket \forall l \int_{\mathcal{A}'_{\text{Is}}} \mathbf{M}_{\text{Er}}(\langle \mathbf{v}_{kl}^{\theta}, \mathbf{x} \rangle \mathbf{M}_{kl}^{\theta}, \phi_{0kl}) \text{d}A = \mathbf{O}_4, \tag{A.77}$$

$$\forall k \in \llbracket k_{-}, k_{+} \rrbracket \forall l \int_{\mathcal{A}'_{\text{Is}}} \mathbf{M}_{\text{Er}}(\langle \mathbf{v}_{kl}^{\eta}, \mathbf{x} \rangle \mathbf{M}_{kl}^{\eta}, \phi_{0kl}) \text{d}A = \mathbf{O}_4. \tag{A.78}$$

Damit wird das Integral aus Gleichung (A.75) wie folgt vereinfacht:

$$\mathbf{M}(\mathcal{A}_s, \mathcal{A}_d) \approx \sum_{k \geq 0} |q_{\underline{k}}|^2 \prod_{l=1}^n \mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}_{0kl}, \phi_{0kl}). \quad (\text{A.79})$$

In dieser Gleichung wurde die Richtungsvariation der emittierten Lichtstrahlen eliminiert, so dass im Müller-Formalismus nur noch der Hauptstrahl übrig bleibt. Die chromatische Aberration der Optiken kann zwar prinzipiell den Lichtpfad des Hauptstrahls ändern, aufgrund der schmalbandigen LED-Beleuchtung wird jedoch angenommen, dass diese Änderung vernachlässigbar ist:

$$\exists k_0 \in \llbracket k_-, k_+ \rrbracket \forall k \in \llbracket k_-, k_+ \rrbracket \forall l : \begin{pmatrix} \theta_{0kl} \\ \eta_{0kl} \\ \phi_{0kl} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} \theta_{0k_0l} \\ \eta_{0k_0l} \\ \phi_{0k_0l} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.80})$$

Was nicht vernachlässigbar ist, ist z. B. die Frequenzabhängigkeit der Müller-Matrix bei Schichtstrukturen aus isotropen Medien, solange diese unter schrägem Lichteinfall beleuchtet werden. Für die in dieser Arbeit betrachteten Rahmenbedingungen wie senkrechter Einfall auf Breitband-Antireflexbeschichtungen von Optiken, lineare Abhängigkeit zwischen Verzögerung und Frequenz bei schmalbandiger Beleuchtung oder Reflexionsmessung an isotropen oder sehr dünn beschichteten Substraten gilt die Näherung erster Ordnung:

$$\forall l \exists \mathbf{M}'_l \in \mathbb{R}^{4 \times 4} \forall k_0 \in \llbracket k_-, k_+ \rrbracket \forall k \in \llbracket k_-, k_+ \rrbracket : \\ \mathbf{M}_{0kl} \approx \mathbf{M}_{0k_0l} + (k - k_0) \mathbf{M}'_l. \quad (\text{A.81})$$

Einsetzen in Gleichung (A.79) liefert:

$$\begin{aligned}
\mathbf{M}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathcal{A}_{\text{d}}) &\approx \sum_{k \geq 0} |q_{\underline{k}}|^2 \left(\prod_{l=1}^n \mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}_{0k_0l}, \phi_{0k_0l}) \right) \\
&\quad + \left(\prod_{l=2}^n \mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}_{0k_0l}, \phi_{0k_0l}) \right) (k - k_0) \mathbf{M}'_1 \\
&\quad + \left(\prod_{l=3}^n \mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}_{0k_0l}, \phi_{0k_0l}) \right) (k - k_0) \mathbf{M}'_2 \mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}_{0k_01}, \phi_{0k_01}) \\
&\quad \dots \Big). \tag{A.82}
\end{aligned}$$

Mit der zusätzlichen Annahme $\forall l_1 \forall l_2 : |\det \mathbf{M}'_{l_1}| \ll |\det \mathbf{M}_{0k_0l_2}|$ bleiben nur die linearen Terme von k übrig. Der Index k_0 ist in Anhang A.6 definiert, woraus $\sum_{k \geq 0} |q_{\underline{k}}|^2 (k - k_0) \approx 0$ folgt¹. Gleichung (A.82) vereinfacht sich zu:

$$\mathbf{M}(\mathcal{A}_{\text{Is}}, \mathcal{A}_{\text{d}}) \approx \overbrace{\sum_{k \geq 0} |q_{\underline{k}}|^2}^{=: a} \prod_{l=1}^n \mathbf{M}_{\text{Er}}(\mathbf{M}_{0k_0l}, \phi_{0k_0l}) \tag{A.83}$$

Aus der Gleichung geht hervor, dass unter den o. g. Voraussetzungen eine Integration über Einfallswinkel und Frequenz nicht zwingend erforderlich ist: Die Verwendung der Müller-Matrix des Hauptstrahls bei der mittleren Kreisfrequenz ω_{k_0} führt bis auf einen Vorfaktor a zu ähnlichen Ergebnissen wie die rigorose Berechnung über die Integration bzw. Summation. Einerseits erleichtert die Approximation die Rechnung mit Müller-Matrizen erheblich. Andererseits wird auch die Evaluation des abbildenden Ellipsometers vereinfacht, da nur die Messwerte bei der Kreisfrequenz ω_{k_0} und nur der Einfallswinkel des Hauptstrahls für einen Vergleich zwischen dem abbildenden Ellipsometer und einem spektroskopischen Ellipsometer betrachtet werden müssen. Die genaue Abweichung zwischen der approximativen und der rigorosen Berechnung ist von der konkreten Aufgabenstellung abhängig. Hierfür müssen die Winkel- und Frequenzabhängigkeiten aller optischen Elemente bekannt sein,

¹ Das Spektrum muss dabei um die mittlere Kreisfrequenz symmetrisch sein.

um das Integral bzw. die gewichtete Summe aus Gleichung (A.68) zu berechnen und mit der Approximation aus Gleichung (A.83) zu vergleichen. Insbesondere beim Lichteinfall unter dem kritischen Einfallswinkel führt eine lineare Approximation zu größeren Abweichungen zwischen der rigorosen und approximativen Berechnung. Nicht alle obigen Annahmen sind für eine adäquate Vernachlässigung von Winkel- und Frequenzabhängigkeiten erforderlich. Bspw. ist die Verwendung einer kreisrunden Apertur nicht zwingend (vgl. Abb. A.2), allerdings treten dann evtl. Abweichungen zur Müller-Matrix des Hauptstrahls auf, die jedoch für die gewünschte Vereinfachung der Messung der gemittelten Müller-Matrix der Probe anhand der Gleichung (3.99) keine Rolle spielen.

Nachfolgend wird der Einfluss der Dispersion auf das Messergebnis untersucht, ohne den Einfluss von Einfallswinkelvariationen zu berücksichtigen. Hierfür wurden alle optischen Komponenten mit dem spektroskopischen Ellipsometer bei einem festen Einfallswinkel gemessen. Beispielhaft wird die Messung einer Gold-beschichteten Oberfläche simuliert und die Müller-Matrix der Polarisationszustandsänderung zwischen der telezentrischen Beleuchtung und dem telezentrischen Objektiv berechnet. Die Müller-Matrix beinhaltet die Polarisationszustandsänderung der Polarisationsoptiken des PSG, des Strahlteilers, des Prüflings, des Oberflächenspiegels, des Retroreflektors¹ und des Verzögerungselements des PSD; siehe Abschnitt 5.7.3. Der Einfallswinkel der Probe wird auf 70° und der des Oberflächenspiegels auf 45° festgelegt. Werden mehrere Müller-Matrizen für alle 40 Rotationswinkelkombinationen der Polarisationsoptiken simuliert (vgl. Abschnitt 5.1), so beträgt der MAE der normierten Müller-Matrix zwischen der approximativen und der rigorosen Berechnung:

$$\text{MAE} = \begin{pmatrix} 0,0000 & 0,0006 & 0,0006 & 0,0003 \\ 0,0049 & 0,0027 & 0,0032 & 0,0004 \\ 0,0044 & 0,0024 & 0,0030 & 0,0004 \\ 0,0041 & 0,0024 & 0,0031 & 0,0005 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.84})$$

¹ Die Messung der Retroreflexfolie mit dem spektroskopischen Ellipsometer erfordert eine besondere Messprozedur, die zu erhöhter Messunsicherheit führt (vgl. Abschnitt 7.1).

Die mittleren absoluten Fehler sind eher als obere Abschätzung für den betrachteten Anwendungsfall zu interpretieren, da auch das relativ große Sensorrauschen des spektroskopischen Ellipsometers in die Berechnung einfließt. Bei der Multiplikation mehrerer Müller-Matrizen wird das Rauschen akkumuliert. Die tatsächlichen Abweichungen sind daher kleiner, da die Müller-Matrizen der einzelnen optischen Elemente des PSG und PSD normalerweise nicht separat gemessen und verrechnet werden. Stattdessen wird lediglich die Modulations- und Analysematrix während der Kalibrierung bestimmt. Die sehr kleinen Abweichungen in der letzten Spalte kommen durch die Rechtsmultiplikation der Müller-Matrix des (gedrehten) Polfilters des PSG zustande. Während in den ersten drei Spalten die Müller-Matrix-Messungen aller optischen Elemente eingehen, werden die Einträge der letzten Spalte durch die Messung des Polfilters dominiert.

A.9 Rauschunterdrückung bei digitalen Bildsensoren

Ein digitales Messsignal lässt sich für eine große Klasse von Bildsensoren über eine parametrische Wahrscheinlichkeitsverteilung beschreiben, die nur von wenigen Parametern abhängt. Die zugrundeliegenden Annahmen über das Rauschmodell werden im Standard EMVA 1288 zusammengefasst [Jäh20]. Die Zufallsvariable des digitalen Messsignals g kann als gewichtete Summe der Photonenzahl n_p , des Dunkelrauschens d und des Quantisierungsrauschens n dargestellt werden. Diese Rauschquellen hängen vom Quantenwirkungsgrad α , der Systemverstärkung K und dem Quantisierungsintervall Δg ab [Bey16]:

$$g = \alpha K n_p + K d + n, \tag{A.85}$$

wobei folgende Verteilungsannahmen getroffen werden¹:

$$n_p \sim \mathcal{P}(\mu_p), \quad (\text{A.86})$$

$$d_p \sim \mathcal{N}(\mu_d, \sigma_d^2), \quad (\text{A.87})$$

$$n \sim \frac{1}{\Delta g} \text{rect}\left(\frac{n}{\Delta g}\right). \quad (\text{A.88})$$

Die Zufallsvariablen d und n_p werden als stochastisch unabhängig angenommen und n_p und n sind näherungsweise unkorreliert, falls das Quantisierungstheorem erfüllt ist [Bey16]². Zusätzlich zum Bildsignal wird auch eine Messung des Dunkelsignals unter gleichen Bedingungen (Integrationszeit, Umgebungstemperatur etc.) aufgezeichnet, wobei die Lichtquelle ausgeschaltet oder abgedeckt wird³. Die Zufallsvariablen zur Messung des Dunkelsignals werden zur Unterscheidung zum Messsignal mit dem Index b versehen, wobei gilt:

$$g^b = K d^b + n^b. \quad (\text{A.89})$$

Nachfolgend wird eine Zeitreihe von N identisch verteilten Zufallsvariablen von Messwerten betrachtet, wobei die Zeitabhängigkeit durch den Index i gekennzeichnet wird: g_i , n_{pi} , d_i , n_i , g_i^b , d_i^b und n_i^b . Die Parameter K und α werden als bekannt vorausgesetzt und folgende Schätzfunktion zur Bestimmung von μ_p definiert:

$$T = \sum_{i=1}^N \frac{g_i - g_i^b}{NK\alpha}. \quad (\text{A.90})$$

¹ Zur Definition der kontinuierlichen Poisson-Distribution siehe [Ili13].

² Das Quantisierungstheorem ist bei der Kamera-basierten Ellipsometrie und der Laser-Ellipsometrie erfüllt, da einerseits die Wahrscheinlichkeitsdichte des Dunkelrauschens niederfrequent ist und andererseits Δg bei einer Auflösung von 12 Bit relativ klein ist.

³ In den Sensoreinstellungen muss der Schwarzpegel ggf. erhöht werden, um einen Informationsverlust an der unteren Grenze des Wertebereichs zu verhindern bzw. zu minimieren.

Zufallsvariablen zu unterschiedlichen Zeitpunkten werden üblicherweise als paarweise stochastisch unabhängig angenommen, doch ist eine Unkorreliertheit in dem hier betrachteten Fall ausreichend. Der Erwartungswert und die Varianz von τ sind:

$$\begin{aligned} E\{\tau\} &= E\left\{\sum_{i=1}^N \frac{g_i - g_i^b}{NK\alpha}\right\} = \mu_p, \\ V\{\tau\} &= V\left\{\sum_{i=1}^N \frac{g_i - g_i^b}{NK\alpha}\right\} = \frac{\mu_p + \frac{2K\sigma_d^2}{\alpha^2} + \frac{\sigma_n^2}{\alpha^2 K^2}}{N}. \end{aligned} \quad (\text{A.91})$$

Die Standardabweichung von τ ist somit proportional zu $N^{-1/2}$ und das Signal-Rausch-Verhältnis proportional zu N . Für den Grenzfall $N \rightarrow \infty$ folgt:

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} E\{\tau\} &= \mu_p, \\ \lim_{N \rightarrow \infty} V\{\tau\} &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.92})$$

Bei der zeitlichen Mittelung werden das Photonenrauschen, das Dunkelrauschen und das Quantisierungsrauschen entsprechend dem Gesetz der großen Zahlen reduziert. Trotz des Quantisierungsrauschens ist der Schätzer jedoch erwartungstreu. Dazu muss die Anzahl der Messwerte für Signal und Dunkelsignal übereinstimmen; eine einmalige Messung des Dunkelsignals reicht nicht aus. Signal und Dunkelsignal müssen jedoch nicht abwechselnd, sondern können bei konstanten Umgebungsbedingungen in beliebiger Reihenfolge aufgezeichnet werden. Es ist ebenfalls nicht zwingend, dass die Messwerte zeitlich gemittelt werden, da die Ergebnisse zur Rauschunterdrückung auch auf ein örtliches Binning übertragbar sind.

**SCHRIFTENREIHE AUTOMATISCHE SICHTPRÜFUNG UND BILDVERARBEITUNG
(ISSN 1866-5934)**

- Band 1 **JONATHAN BALZER**
Regularisierung des Deflektometrieproblems Grundlagen
und Anwendung.
ISBN 978-3-86644-230-6
- Band 2 **IOANA GHEȚA**
Fusion multivariater Bildserien am Beispiel eines Kamera-Arrays.
ISBN 978-3-86644-684-7
- Band 3 **STEFAN BRUNO WERLING**
Deflektometrie zur automatischen Sichtprüfung
und Rekonstruktion spiegelnder Oberflächen.
ISBN 978-3-86644-687-8
- Band 4 **JAN WASSENBERG**
Efficient Algorithms for Large-Scale Image Analysis.
ISBN 978-3-86644-786-8
- Band 5 **MARTIN GRAFMÜLLER**
Verfahrensfortschritte in der robusten Echtzeiterkennung
von Schriftzeichen.
ISBN 978-3-86644-979-4
- Band 6 **JÜRGEN BRAUER**
Human Pose Estimation with Implicit Shape Models.
ISBN 978-3-7315-0184-8
- Band 7 **MARKUS MÜLLER**
Szeneninterpretation unter Verwendung multimodaler Sensorik
und Salienzmaßen.
ISBN 978-3-7315-0240-1
- Band 8 **ROBIN GRUNA**
Beleuchtungsverfahren zur problemspezifischen Bildgewinnung
für die automatische Sichtprüfung.
ISBN 978-3-7315-0313-2
- Band 9 **THOMAS STEPHAN**
Beitrag zur Unterwasserbildrestauration.
ISBN 978-3-7315-0579-2

- Band 10 **JAN-PHILIP JARVIS**
A Contribution to Active Infrared Laser Spectroscopy
for Remote Substance Detection.
ISBN 978-3-7315-0725-3
- Band 11 **MIRO TAPHANEL**
Chromatisch konfokale Triangulation – Hochgeschwindigkeits 3D-Sensorik
auf Basis der Wellenlängenschätzung mit optimierten Filtern.
ISBN 978-3-7315-0646-1
- Band 12 **SEBASTIAN HÖFER**
Untersuchung diffus spiegelnder Oberflächen mittels
Infrarotdeflektometrie.
ISBN 978-3-7315-0711-6
- Band 13 **MATTHIAS RICHTER**
Über lernende optische Inspektion am Beispiel der
Schüttgutsortierung.
ISBN 978-3-7315-0842-7
- Band 14 **MATHIAS ZIEBARTH**
Wahrnehmungsgrenzen kleiner Verformungen auf
spiegelnden Oberflächen.
ISBN 978-3-7315-0890-8
- Band 15 **JOHANNES MEYER**
Light Field Methods for the Visual Inspection of Transparent Objects.
ISBN 978-3-7315-0912-7
- Band 16 **MASOUD ROSCHANI**
Probabilistische Planungsverfahren für die
deflektometrische Oberflächeninspektion.
ISBN 978-3-7315-0907-3
- Band 17 **MAHSA MOHAMMADIKAJI**
Simulation-based Planning of Machine Vision Inspection Systems
with an Application to Laser Triangulation.
ISBN 978-3-7315-0989-9
- Band 18 **DING LUO**
High-speed surface profilometry based on an adaptive microscope
with axial chromatic encoding.
ISBN 978-3-7315-1061-1
- Band 19 **ZHENG LI**
Application of diffractive lens arrays in confocal microscopy.
ISBN 978-3-7315-1188-5

- Band 20 GEORG MAIER
Bildfolgenbasierte Gewinnung und Nutzung partikelindividueller
Bewegungsinformation in der optischen Schüttgutsortierung.
ISBN 978-3-7315-1192-2
- Band 21 CHRISTIAN EMANUEL NEGARA
Abbildende Ellipsometrie mit Lichtwegumkehrung für die
optische Charakterisierung von gekrümmten Oberflächen.
ISBN 978-3-7315-1302-5

Die Ellipsometrie ist ein optisches Messverfahren zur Oberflächencharakterisierung und Dünnschichtmessung unter Verwendung von polarisiertem Licht. Ein Nachteil der Ellipsometrie ist die geometrische Einschränkung der Prüfanordnung, wodurch sich die Anwendung auf ebene Oberflächen beschränkt. Ein neues Messprinzip basierend auf Lichtwegumkehrung und mikrostrukturierten Retroreflektoren ermöglicht jedoch die Erfassung von beliebigen Freiformflächen. Dieses neue Messprinzip und die damit verbundenen Änderungen der Messabbildung, der Messunsicherheiten, der Mehrdeutigkeiten, der Freiheitsgrade und der Auswertalgorithmik bei unbekannter Oberflächenform bilden den Forschungsschwerpunkt dieser Arbeit.

Basierend auf diesem Messprinzip wird ein neues, abbildendes Einwellenlängen-Ellipsometer vorgestellt. Die Kalibrierung der Modulations- und Analysematrix erfolgt mittels Matrixfaktorisierung mit Nebenbedingungen über ein neu entwickeltes Verfahren. Für die Bestimmung des Normalenfelds der Oberfläche wurden zwei Verfahren entwickelt: eines basierend auf monokularem Stereo und ein anderes basierend auf polarisationszustandsändernden Retroreflektoren. Anwendungsmöglichkeiten des neuen Messprinzips finden sich in der Optik, Photovoltaik, Automobilindustrie und flexiblen Elektronik.

ISSN 1866-5934

ISBN 978-3-7315-1302-5

Gedruckt auf FSC-zertifiziertem Papier

