



**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA**
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Kateřina Barotová

**Optická odrazivost periodických
struktur**

Katedra chemické fyziky a optiky (KCHFO)

Vedoucí bakalářské práce: doc. RNDr. Tomáš Ostatnický, Ph.D.

Studijní program: Fyzika (B0533A110001)

Studijní obor: Fyzika

Praha 2024

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracovala samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů. Tato práce nebyla využita k získání jiného nebo stejného titulu.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V dne

Podpis autora

Mé dík patří především mému vedoucímu, doc. Ostatnickému, za vypsání velmi zajímavého tématu a za veškerý čas, který mi věnoval. Dále děkuji své spolubydlící za odlehčení vtipkováním o ještěrci Sandře a ježkovi Alexandrovi, Elišce za nefyzikální pohled, Šimonovi za smajlíky a barvičky v textu a v neposlední řadě profesoru Hechtovi za skvělou a čtivou učebnici optiky.

Název práce: Optická odrazivost periodických struktur

Autor: Kateřina Barotová

Katedra: Katedra chemické fyziky a optiky (KCHFO)

Vedoucí bakalářské práce: doc. RNDr. Tomáš Ostatnický, Ph.D., Katedra chemické fyziky a optiky

Abstrakt: Odrazivost biologických tkání, ve kterých se s různou mírou uspořádanosti střídající prostředí o různých indexech lomu, vyústuje v selekci určitých vlnových délek. Vzniklé strukturální barvy je v zájmu umět předpovídat. Práce reaguje na nápad aplikovat Fourierovu transformaci na rozložení indexu lomu v biologické tkáni. Pomocí analytického, grafického i numerického porovnání s dalšími metodami (zejména s metodou matice přenosu) ukazujeme, jak se projevuje chybovost této metody na jednoduchých, jednodimenzionálních systémech. Omezujeme se přitom na kolmý dopad paprsků. Navrhujeme použití Fourierovy transformace derivace zmíněného rozložení a variantu této metody rozšířitelnou na dvoudimenzionální případy. Vyšetřujeme souvislost metod využívající Fourierovu transformaci s Bornovou aproximací odrazu prvního řádu.

Klíčová slova: Fourierova transformace. Rozhraní indexu lomu. Částečně uspořádané vrstvy. Matice přenosu.

Title: Optical reflectivity of periodical structures

Author: Kateřina Barotová

Department: Department of Chemical Physics and Optics

Supervisor: doc. RNDr. Tomáš Ostatnický, Ph.D., Department of Chemical Physics and Optics

Abstract: The reflectivity of biological tissues, in which environments of different refractive indices alternate with varying degrees of order, results in the selection of certain wavelengths. It is of interest to be able to predict the resulting structural colours. This work responds to the idea of applying the Fourier transform to the refractive index distribution in biological tissue. Using analytical, graphical and numerical comparisons with other methods (e.g. the transfer matrix method), we show how the error rate of this method manifests itself on simple, one-dimensional systems. In doing so, we restrict ourselves to the perpendicular incidence of rays. We propose the application of the Fourier transform to the derivative of the aforementioned distribution and a variant of this method extensible to two-dimensional cases. We investigate the relation of methods using the Fourier transform to the first-order Born approximation of reflection.

Keywords: Fourier transform. Refractive index interface. Quasi-ordered layers. Transfer matrix.

Obsah

Úvod	2
1 Analytické srovnání I: Jednoduchá vrstva	4
1.1 Použité metody	4
1.1.1 Metody Born, BornG a BornT	5
1.1.2 Metoda Fabry	6
1.1.3 Metoda Matp	7
1.1.4 Metody FTn a FTdn	7
1.2 Porovnání metod pro jednoduchou vrstvu	7
1.3 Diskuze výsledků úlohy jednoduché vrstvy	9
1.4 Závěr kapitoly	10
2 Analytické srovnání II: Dvojrstva	11
2.1 Formulace úlohy	11
2.2 Výpočty a porovnání základních metod	11
2.2.1 Metoda Born	11
2.2.2 Metody FTn a FTdn s lokálním přeškálováním	12
2.2.3 Metoda Matp	13
2.3 Výsledky a kvantifikace chyby	13
2.4 Metody se střední hodnotou indexu lomu	19
2.5 Diskuze	19
2.6 Závěr kapitoly	21
3 Jednorozměrná multivrstva	22
3.1 Algoritmy numerických metod	22
3.1.1 Born, BornG a Matp	22
3.1.2 Fourierova transformace	23
3.2 Numerické řešení	24
3.2.1 Neuspořádanost makrostruktury	24
3.2.2 Neuspořádanost mikrostruktury	25
3.3 Diskuze a závěr 1D multivrstvy	25
Závěr	30
Seznam použité literatury	31
Seznam obrázků	33
Seznam zkratk použitých metod	34
A Přílohy	35
A.1 Odrazivost nepolarizovaného světla	35
A.2 Matice přenosu	35
A.3 Bornova aproximace odrazu 1.řádu	37
A.4 Fourierova transformace indexu lomu a jeho derivace	39

Úvod

Motivací této práce je problematika modelů zbarvení exotických ještěřů a nedostupnost dostatečně přesných numerických nástrojů, které nevyžadují použití superpočítačů k analýze strukturálních barev biologické tkáně.

V přírodě se vyskytuje hned několik způsobů vzniku barev. Pigmentové zbarvení, tedy případ, kdy tkáně a buňky obsahují konkrétní molekuly, které selektivně absorbují záření, a tím tkáně zbarvují, je vůbec nejběžnější. Nejsou ale úplně vzácné ani strukturální barvy způsobené interferencí na uspořádaných nebo částečně uspořádaných vrstvách, které mají za následek jasné, pigmentovým zbarvením nedosažitelné, zbarvení, nejčastěji modré či zelené. Tím doplňují paletu přírody o značnou část, neboť právě barvám ve spektru modré přísluší jen velmi málo pigmentů nebo vůbec žádné. Kromě toho může interference na vrstvách zjasnit již přítomné pigmentové zbarvení (Saenko a kol., 2013).

O strukturální barvách mluvíme v případě zbarvení mnohých motýlích křídel, dále pak cizokrajního, často tropického ptactva, ještěrek subtropického pásu a z oblasti středozevního moře (Saenko a kol., 2013), ale také některých bobulí (Vignolini a kol., 2012), perel (Ozaki a kol., 2021), zooplanktonu (Kimura a kol., 2020), hmyzu (Prum a kol., 2004) nebo dokonce modré zbarvení kůže savců (Prum a Torres, 2004). Za poslední tři desetiletí se výzkum těchto strukturálních barev pro konkrétní druhy živočichů stal poměrně populárním, a to zejména díky dostupnosti elektronových mikroskopů umožňující zkoumat strukturu tkání s výbornou rozlišitelností, a dále díky rozvoji numerických metod a možnosti sestavovat tak teoretické modely chování světla v tkáních. Některé teorie pracují s Braggovým zákonem a konstrukcí Ewaldovy koule založené na Bornově aproximaci rozptylu prvního řádu (Maiwald a kol., 2018), často počítají propagaci světelné vlny přímo z Maxwellových rovnic metodou FDTD („the finite-difference time-domain method“) (např. Kimura a kol. (2020)), oblíbená je také metoda přenosové matice (Saenko a kol., 2013), Ozaki a kol. (2021) či aproximativnější metoda BPM (beam propagation method) využívající zjednodušené Helmholtzovy rovnice (Sato a kol., 2016), případně se užívá algoritmus rychlé Fourierovy transformace.

Úloha odrazivosti elektromagnetických vln od reálné skladby biologické tkáně sestává ze spousta rozhraní a okrajových podmínek, je proto pro přímé, „tvrdé“ numerické počítání značně náročná. Tato práce se zabývá možnostmi méně náročných přístupů a jejich vylepšením, konkrétně pak zkoumá metodu Fourierovy transformace.

Fourierovu transformaci začal na biologické struktury používat na přelomu tisíciletí Richard O. Prum. Vychází ze snímků transmisního elektronového mikroskopu, na které aplikuje 2D diskretní Fourierovu transformaci (DFT) použitím MATLABové funkce `fft2` (2D rychlá Fourierova transformace) (Prum a kol. (1998); Prum a kol. (1999a); Prum a kol. (1999b); Prum a Torres (2003)). Později byl nástroj dokonce rozšířen na 3D struktury (Shawkey a kol., 2009). Spektrum druhé mocniny Fourierových koeficientů pak nazývá Fourierovo výkonnostní spektrum, které je srovnáváno se spektrometricky naměřeným spektrem, především se zbarvením exotického ptactva.

V obecném popisu Fourierovy metody Prum zdůrazňuje rozdíl mezi koherent-

ním a nekoherentním rozptylem záření. Zatímco v případě Rayleighova rozptylu, používaného např. pro popis modrého zbarvení oblohy, vzniká nekoherentní záření, v případě struktur, které vykazují míru pravidelnosti ve střídání vrstev, je nutné zvážit vznik koherentního záření a vliv interference.

Matematické odůvodnění užití Fourierovy transformace čerpá R. O. Prum z práce věnované průhlednosti oka (G.B.Benedek, 1971) a shrnuje ho, ovšem bez větších matematických odvození, v jednom ze svých klíčových článků (Prum a Torres, 2003). Tento matematický podklad považujeme za nedostatečný a příslušné fyzikální a matematické stránce problému se v této práci zabýváme.

S použitím Fourierovy transformace se ale setkáváme i při modelování odrazivosti použitím Ewaldovy sféry a v souvislosti s Bornovou aproximací (Maiwald a kol., 2018). V kvantové teorii rozptylu tato aproximace popisuje rozptyl prvního řádu a je možné se s ním setkat jako aproximace prvního řádu poruchové funkce prostorové permitivity (Lang a kol., 2018). Jak Bornova aproximace, tak konstrukce Ewaldovy sféry se používá při zkoumání difrakce röntgenova záření na krystalech. Je známo, že skutečný prostor a reciprokový prostor jsou v případě difrakce vzájemně spjaty Fourierovou transformací, což podporuje užití Fourierovy transformace pro modelování odrazivosti systému vrstev a myšlenku, že Bornova aproximace prvního řádu bude této transformaci odpovídat (Maiwald a kol., 2018).

1. Analytické srovnání I: Jednoduchá vrstva

Úloha odraženého spektra od vrstev uspořádaných nebo částečně uspořádaných vrstev krystalků v živočišné tkáni je značně složitá a lze ji řešit pouze numericky. Matematické modely využívané k numerickým výpočtům ale musí být aplikovatelné i pro jednoduché systémy, které je možné řešit různými způsoby analyticky. Otvírá se tak prostor na jasných, jednoduchých případech vyzkoušet, do jaké míry a za jakých podmínek odpovídají tomuto řešení aproximativní modely a přímo také otestovat využívanou Fourierovu transformaci.

V této a následující kapitole analyticky řešíme dva jednoduché systémy, jejichž řešení jsou dobře známa: interference kolmo dopadajícího světla na jednoduché, tenké vrstvě, tedy případ dvou rozhraní mezi materiály o indexech lomu n_0 a n_1 , a dále dvojvrstvou, tedy skládání paprsků (opět kolmo dopadajících) odražených od dvou přilehlých vrstev o indexech lomu n_1 , n_2 vložených do prostředí o indexu lomu n_0 .

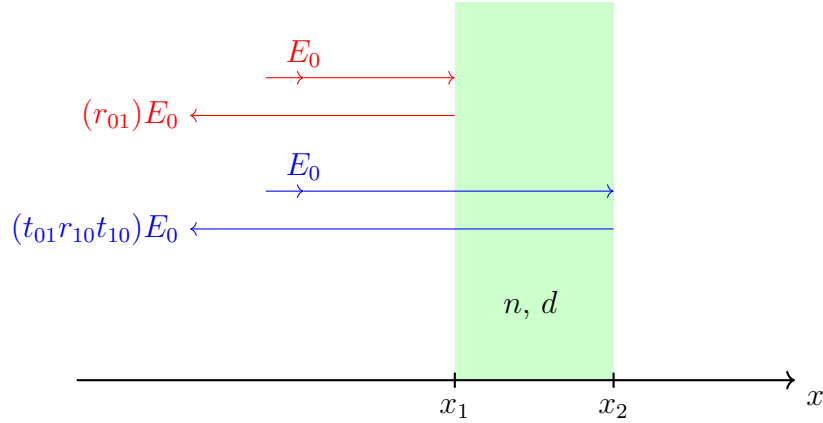
1.1 Použité metody

Úlohy výpočtu spektra odrazivosti jsou řešené čtyřmi základními způsoby: s použitím analogie Bornovy aproximace (zkr. Born), druhou mocninou Fourierovy transformace indexu lomu (zkr. FTn), druhou mocninou Fourierovy transformace derivace indexu lomu (zkr. FTdn) a přímými metodami podle vzorce pro Fabry - Pérotův interferometr (zkr. Fabry) a pomocí matice přenosu (zkr. Matp).

Pojem Bornova aproximace pochází z kvantové teorie rozptylu a zde je jím označen případ, kdy se do výpočtu odrazivosti na vrstvě zahrnuje pouze jeden vnitřní odraz. Světlo interaguje s dielektrickou látkou rozptylem na jednotlivých atomech a skládání jednotlivých rozptylů můžeme charakterizovat paprskem odpovídající směru pohybu výsledné vlny. Výsledkem složité interference příspěvků od jednotlivých rozptylů jsou tři rovinné vlny - vlna dopadající na rozhraní, vlna od něho odražená a vlna procházející skrz. Vlny vzniklé odrazem od libovolného vnitřního rozhraní se skládají a interferují s paprsky odraženými již na prvním rozhraní.

Pokud bychom v případě průchodu paprsku materiálem v analogii s kvantovou Bornovou aproximací připustili pouze jediný poruchový jev, a to odraz na jednom z rozhraní, jednalo by se o nefyzikální model nezahrnující jednak aspekt změny optické dráhy v prostředí o jiném indexu lomu, jednak transmisní ztráty při průchodu některým z rozhraní. Metoda Born sice zachovává zanedbání odrazů vyšších řádů, nezahrnutí optické dráhy by však znamenalo zanedbání efektu značně významnějšího, než je zanedbání vyšších řádů v kvantové teorii slabého rozptylu.

Má-li však Fourierova transformace indexu lomu odpovídat aproximaci pouze jediné poruchy, můžeme očekávat, že její čistá, neupravená podoba bude spíše odpovídat Bornově aproximaci bez transmisních koeficientů a s uvažování geometrické, nikoli optické dráhy. Nefyzikálnost Fourierovy transformace indexu lomu vyplývající z této úvahy, je dalším argumentem proti jejímu použití v čisté,



Obrázek 1.1: Odrazy paprsků od rozhraní jednoduché vrstvy

neupravené podobě. Pokud ale Bornova aproximace dává relevantní odhad odrazivosti vrstev, poukazuje na důležitost nikoli samotného průběhu indexu lomu, který je vstupem do Fourierovy transformace, ale spíše polohy a existence jednotlivých rozhraní.

Tento přístup vede k myšlence zkusit místo Fourierovy transformace průběhu indexu lomu aplikovat Fourierovu transformaci na jeho derivaci, neboť uvažujeme-li průběh indexu lomu ve tvaru obdélníkové funkce, derivaci tohoto průběhu budou odpovídat delta distribuce v bodech rozhraní. Takový případ zároveň rozliší přechod do opticky hustšího prostředí (kladná delta funkce) od přechodu do opticky řidšího prostředí (záporná delta funkce). V Bornově aproximaci je toto rozlišení podstatné, protože oba případy se liší hodnotou koeficientů odrazu, a tudíž i intenzitou odražené vlny.

Ve skutečnosti ve vrstvě dochází ne k jednomu, ale k vícenásobným odrazům, která jdou sečíst za použití geometrické řady do Airyho funkce (Hecht, 2017). Výsledek se pak užívá k popisu Fabry-Pérotova etalonu.

Společným rysem postupu metody Born a postupu vedoucí k Airyho funkci je popis zeslabování intenzity rovinné vlny pomocí koeficientů odrazu a transmise. Jiný postup vedoucí taktéž ke správnému odhadu odrazivosti nabízí maticový formalismus a metoda matice přenosu.

1.1.1 Metody Born, BornG a BornT

Máme-li systém několika rozhraní, přes které se světlo ve formě rovinné vlny pohybuje, na každém rozhraní dojde k částečnému průchodu vlny a zároveň ke vzniku odražené vlny, která se vrací a znovu interaguje s již prošlými rozhraními. Metodou Born označíme aproximaci, ve které se omezíme pouze na jeden vnitřní odraz vlny v systému vrstev (viz Dodatek A.3). Odrazivost od jednoduché vrstvy můžeme určit sledováním a skládáním jednotlivých paprsků, které vybíhají z počátku $x = 0$ v kladném směru osy x a dopadají kolmo na vrstvu v intervalu (x_1, x_2) . V Bornově aproximaci se odráží buď na prvním, anebo druhém rozhraní, vrací se stejnou dráhou zpět a setkávají se opět v počátku soustavy (viz obrázek 1.1).

Sečtením těchto příspěvků a započítáním všech koeficientů dostaneme pro čas $t = 0$ a fázový rozdíl $\delta = 0$ dle (A.27) následující podobu elektrické intenzity TE

vlny (vektor její elektrické intenzity kmitá kolmo k rovině dopadu):

$$E_{\perp} = E_0 \left[\frac{1-n}{1+n} e^{2i \int_0^{x_1} k(x) dx} + \frac{4n}{(1+n)^2} \frac{n-1}{n+1} e^{2i \int_0^{x_2} k(x) dx} \right]. \quad (1.1)$$

Elektrická intenzita TM vlny (vektor její elektrické intenzity kmitá v rovině dopadu) E_{\parallel} je rovna opačné hodnotě.

Díky rovnosti odrazivosti TE a TM vlny pro kolmý dopad (A.4), můžeme psát

$$R = \left(\frac{n-1}{n+1} \right)^2 + \frac{16n^2}{(n+1)^4} \left(\frac{n-1}{n+1} \right)^2 - \frac{4n}{(n+1)^2} \left(\frac{n-1}{n+1} \right)^2 2 \cos [2k(x_2 - x_1)]. \quad (1.2)$$

Rozdíl souřadnic rozhraní je roven tloušťce vrstvy $x_2 - x_1 = d$, která je vynásobená vlnovým číslem. Kromě funkce kosinu, která vznikla součtem dvou komplexně sdružených exponenciál a která zmíněný součin nese v exponentu, se ostatní exponenciály ve výpočtu vyruší. Díky tomu je přechod mezi metodou Born (se započítanou optickou dráhou) a metodou BornG (se započítanou geometrickou dráhou) jednoduchý, neboť vrstvě d je přiřazen právě jeden vlnový vektor $k = k_0 n$ daný indexem lomu vrstvy n . Metody Born a BornG vyjádřené pomocí koeficientů C_j (A.26) se pak skutečně liší pouze indexem lomu v argumentu kosinu

$$R_{Born} = C_1^2 + C_2^2 + 2 C_1 C_2 \cos(2k_0 n d), \quad (1.3)$$

$$R_{BornG} = C_1^2 + C_2^2 + 2 C_1 C_2 \cos(2k_0 d). \quad (1.4)$$

Pro potřeby diskuze doplňme, že bez započítání transmisních koeficientů by výkonový koeficient odrazivosti metody Born měl podobu následující

$$R_{BornT} = 2 \left(\frac{1-n}{1+n} \right)^2 - 2 \left(\frac{1-n}{1+n} \right)^2 \cos(2k_0 n d). \quad (1.5)$$

Tuto variantu označme za metodu BornT.

1.1.2 Metoda Fabry

Na rozdíl od Bornovy aproximace omezené pouze na jeden vnitřní odraz, metoda Fabry, pojmenovaná podle Fabry-Pérotova ethanolu, počítá s vícenásobnými odrazy paprsků a jejich opětovným procházením systémem vrstev. Sečtením příspěvků ze všech odrazů pomocí geometrické řady získáváme exaktní vzorec pro výpočet odrazivosti ve tvaru (Hecht, 2017)

$$R_A = \frac{2r^2(1 - \cos \delta)}{(1 + r^4) - 2r^2 \cos \delta}, \quad (1.6)$$

kde r označuje koeficient odrazivosti (A.16) a δ fázový rozdíl paprsku odraženého od prvního rozhraní a paprsku odraženého od druhého rozhraní. Dosazení za koeficient odrazivosti (pro TM a TE vlnu jsou koeficienty opačné, ale ve výsledku se vyskytují pouze v druhé mocnině, pro obě varianty bude tedy výsledek shodný) dává tvar:

$$R_A = \frac{2(n-1)^2 - 2(n-1)^2 \cos(\delta)}{(n-1)^2 + \frac{(n-1)^4}{(n+1)^2} - 2(n-1)^2 \cos(\delta)}. \quad (1.7)$$

Argument kosinu daný fázovým rozdílem δ je roven $\delta = 2k_0nd$ kvůli rozdílu optických drah paprsku, který se odráží od prvního rozhraní, a paprsku, který se odráží od druhého.

1.1.3 Metoda Matp

Výpočet spektra metodou přenosové matice (viz Dodatek A.2), zde nazývanou zkráceně Matp, je stejně jako Fabry přímou metodou. Ačkoli k problematice přistupuje odlišně a místo řešení postupujících a odražených vln počítá se spojitostí dvou dvojic vln před a za rozhraním, výsledek odraženého spektra by měla odhadovat shodně s metodou Fabry. Protože v případě vícevrstevnatého systému je o mnoho výhodnější použít metodu Matp než sčítat příspěvky intenzity od jednotlivých odrazů v řadu, poskytne metoda Fabry, která je jasným zpřesněním metody Born, přemostění mezi metodou Matp a Bornovou aproximací.

1.1.4 Metody FTn a FTdn

Pro účely Fourierovy transformace budeme průběh indexu lomu uvažovat ve tvaru obdélníkové funkce:

$$n(x) = \begin{cases} n, & x \in (x_1, x_2) \\ 1, & x \notin (x_1, x_2). \end{cases}$$

Zkonkretizováním výsledku (A.40) pro tuto naši funkci $n(x)$ a speciálně v případě nenulovosti proměnné výsledného prostoru $\xi \neq 0$, kdy nemusíme delta distribuci uvažovat, dostáváme

$$\mathcal{F}(n(x))(\xi) = \frac{(n-1)}{-i2\pi\xi} (e^{-i\pi x_2\xi} - e^{-i\pi x_1\xi}). \quad (1.8)$$

Vodorovné posunutí schodu nemá na výsledek reflektivity vliv, můžeme tedy položit $x_1 = -\frac{d}{2}$, $x_2 = \frac{d}{2}$, kde d je šířka vrstvy $d = (x_2 - x_1)$. Pak

$$\mathcal{F}(n(x))(\xi) = 2d(n-1) \operatorname{sinc}(\pi\xi d) \quad (1.9)$$

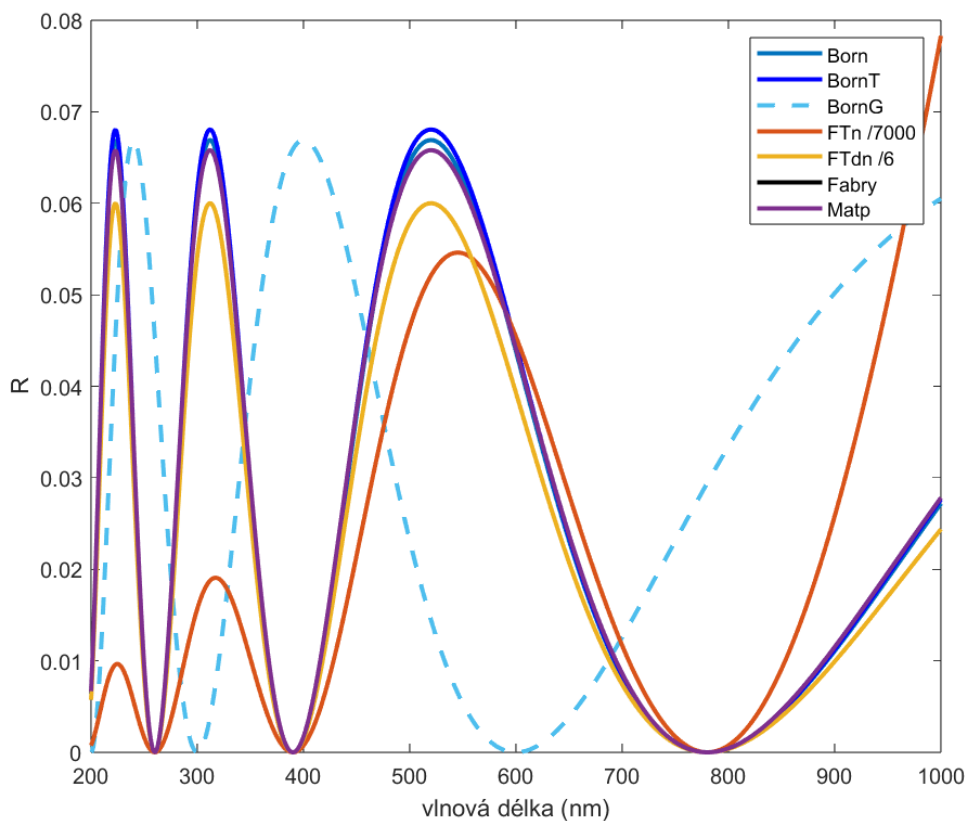
a podle vzorce (A.32) platí

$$\mathcal{F}\left(\frac{\partial n(x)}{\partial x}\right)(\xi) = (n-1)2i \sin(\pi\xi d). \quad (1.10)$$

Za metody FTn a FTdn odhadující odrazivost jednoduché vrstvy označíme druhé mocniny vzorců (1.9) a (1.10).

1.2 Porovnání metod pro jednoduchou vrstvu

Srovnání výše uvedených metod je možné udělat jak graficky, tak analyticky srovnáním vzorců jednotlivých metod.



Obrázek 1.2: Srovnání metod pro jednoduchou vrstvu s parametry $d = 300$ nm, $n = 1,3$ pro okno spektra o vlnových délkách 200 – 1000 nm. Funkce metody Matp zcela překrývá funkci metody Fabry.

V analytickém případě nám k tomu pomůže úvaha z úvodu o použitých metodách (viz 1.1 Použité metody), o souvislosti Bornovy aproximace a Fourierovy transformace a také nápadný společný rys vzorců. Je jím výskyt buď funkce kosinu, nebo funkce sinus v druhé mocnině (srov. druhá mocnina vzorců (1.9) a (1.10)). Aplikace goniometrického vzorce $\sin^2 x = \frac{1}{2} - \frac{\cos 2x}{2}$ srovnání dále vyjasní, zjednoduší, a metody FTdn a FTn získají podobu tříčlenného součtu závislého na kosinu, jak je tomu stejně u metody Born. Srovnání argumentu kosinu v těchto třech funkcích nás přivádí k zásadnímu výsledku, jímž je hodnota proměnné ξ ve Fourierově transformaci

$$\xi = \frac{2nf}{c} = \frac{2n}{\lambda}. \quad (1.11)$$

Po dosazení této hodnoty do vztahů (1.9) a (1.10) a po jejich umocnění na druhou, jak vyžadují metody FTn a FTdn, přejdou vztahy (1.2), (1.9), (1.10) a (1.6), vyjádřené navíc v závislosti na vlnové délce dopadajícího světla λ , popořadě na funkce:

$$R_{Born} = \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2 + \frac{16n^2}{(n+1)^4} \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2 - \frac{8n}{(n+1)^2} \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2 \cos\left(\frac{4\pi nd}{\lambda}\right) \quad (1.12)$$

pro metodu Born,

$$|\mathcal{F}(n(x))|^2 = \frac{(n-1)^2}{8\left(\frac{\pi n}{\lambda}\right)^2} - \frac{(n-1)^2}{8\left(\frac{\pi n}{\lambda}\right)^2} \cos\left(\frac{4\pi nd}{\lambda}\right) \quad (1.13)$$

pro metodu FTn,

$$\left|\mathcal{F}\left(\frac{\partial n(x)}{\partial x}\right)\right|^2 = 2(n-1)^2 - 2(n-1)^2 \cos\left(\frac{4\pi nd}{\lambda}\right) \quad (1.14)$$

pro metodu FTdn a

$$R_A = \frac{2\left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2 - 2\left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2 \cos\left(\frac{4\pi nd}{\lambda}\right)}{1 + \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^4 - 2\left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2 \cos\left(\frac{4\pi nd}{\lambda}\right)} \quad (1.15)$$

pro metodu Fabry.

Názornější, grafické srovnání křivek funkcí jednotlivých metod bylo provedeno pro jednoduchou vrstvu o indexu lomu n a tloušťce 300 nm (obrázek 1.2). Ve vybraném příkladu jednoduché vrstvy jsou v oblasti 200 – 1000 nm, zahrnující viditelnou část spektra a jeho nejbližší okolí, zřetelné tři interferenční maxima a čtyři minima u všech metod kromě metody BornG, která jich vykazuje méně. Podle předpokladů (viz 1.1 Použité metody) její shoda se správnými výsledky nebyla ani očekávána.

1.3 Diskuze výsledků úlohy jednoduché vrstvy

Důvodem porovnávání škály metod pro jednoduchou vrstvu bylo především vyšetření chování Fourierovy transformace indexu lomu a ozkoušení nově navrhované metody Fourierovy transformace derivace indexu lomu na jednoduché a snadno interpretovatelné úloze. Dalším cílem bylo ozkoušet, zda a kdy aproximace odrazu prvního řádu (metoda Born) metodám využívající Fourierovu transformaci odpovídá.

Kvůli funkci sinc ve výsledku metody FTn, která typicky osciluje mezi lokálními minimy a maximy rostoucími ve směru jdoucím k počátku, neodpovídá intenzita maxim ve spektru metody FTn adekvátním výsledkům. V praxi se tato neshoda projeví výsledkem značně preferujícím modré zbarvení a posunutí celkové intenzity barev do modré oblasti.

Navrhovaná metoda FTdn nežádoucí funkci sinc redukuje na jednoduchý kosinus a výsledek je, co se týče poměrů intenzit maxim, ve shodě s metodou Born. Ukazuje se ale, že FTdn zcela, až na škálovací konstantu, odpovídá metodě bez započítání transmisních koeficientů BornT (1.5). FTdn proto nese chybu nezapočítání těchto koeficientů, což se projeví pravděpodobně pro velký kontrast indexů lomu. V případě velkého kontrastu indexů lomu zároveň ztrácí platnost aproximace odrazu prvního řádu neboť větší kontrast indexu lomu vede k zesílení intenzity odražené vlny, a tudíž k významější roli jejích dalších interakcí v systému vrstev. Metoda FTdn (a FTn) pak díky analytické podobnosti s metodou Born sdílí její chybovost.

Hodnota proměnné $\xi = 2n/\lambda$ ve Fourierově transformaci, která je výsledkem porovnání metod Born, FTn, FTdn a Fabry, sedí pro jednoduchou vrstvu, protože

pro popis indexu lomu systému stačí kromě indexu okolí jediný parametr n . Už u dvojné vrstvy by ale bylo potřeba lokálních vztahů pro proměnnou ξ pro každou vrstvu zvlášť. Pokud by se podařilo ošetřit tento problém, princip výpočtu perspektivní metody FTdn by pak ale měl být rozšířitelný na jakoukoli jednodimenzionální strukturu uspořádaných, částečně uspořádaných či neuspořádaných vrstev.

1.4 Závěr kapitoly

Úlohu jednoduché vrstvy jsme řešili metodami Born, BornG, BornT, Fabry, Matp, FTn a FTdn. Metoda BornG byla vyhodnocena jako nefyzikální, proto vznikla její varianta, metoda Born, která započítává optickou, ne pouze geometrické dráhu. V případě vrstvy o indexu $n = 1,3$ obklopené vzduchem odpovídá metoda Born velmi dobře přímým metodám Fabry a Matp. Ačkoli obě přímé metody se přístupem výpočtu liší, dávají shodný výsledek. Srovnáním metody Born s obecně vzatými druhými mocninami Fourierovy transformace indexu lomu (metoda FTn) a jeho derivace (metoda FTdn) jsme stanovili hodnotu proměnné Fourierovy transformace pro jednoduchou vrstvu na $\xi = 2n/\lambda$ a tím doplnili chybějící informaci pro metody FTn a FTdn.

Metoda FTn odhaduje pozice maxim s malou, ale okem znatelnou nepřesností. Jejich hodnotu ale silně podhodnocuje v kratších vlnových délkách a silně nadhodnocuje v delších vlnových délkách. V navrhované metodě FTdn, Fourierově transformaci aplikované na derivaci indexu lomu, jsou oba problémy eliminovány. Je to také právě metoda FTdn, která se nejlépe shoduje s analogií Bornovy aproximace, konkrétně s její variantou bez transmisních koeficientů, metodou BornT, od které se liší pouhým násobkem $1/(n + 1)^2$.

Metody FTn a FTdn nedávají odhad absolutní hodnoty odrazivosti správně, je možné je ale přenásobit škálovací konstantu tak, aby docházelo k co nejlepší shodě s dalšími metodami.

2. Analytické srovnání II: Dvojvrstva

V této kapitole testujeme závěry úlohy jednoduché vrstvy na o něco složitějším, stále ale analyticky řešitelném systému dvojvrstvy. Hlavním předmětem kapitoly je návrh lokálního škálování v metodách využívající Fourierovu transformaci. Provedeme také grafické znázornění odchýlení výsledků aproximativních metod od metody matice přenosu v závislosti na indexech lomu vrstev ve dvojvrstvě a navrhneme nové metody – Fourierovu transformaci průběhu indexu lomu globálně přeškálovaného střední hodnotou indexu lomu (FTnN) a Fourierovu transformaci derivace průběhu indexu lomu globálně přeškálovaného střední hodnotou indexu lomu (FTdnN).

2.1 Formulace úlohy

V případě dvojnásobné vrstvy, či dále i v případě multivrstvy, vycházíme z aplikace metod u jednoduché vrstvy. Důležitým závěrem jednoduché vrstvy, který je významný pro další výpočty, je podoba argumentu kosinu v metodách Fabry, Born, FTn i FTdn a s ním spojená hodnota proměnné ξ Fourierovy transformace (viz její definice (A.28)). Z důvodu výskytu indexu lomu $n(x)$ v této proměnné, či jinak řečeno z důvodu závěru, že je nutné brát optickou, ne pouze geometrickou dráhu paprsků, nemůžeme Fourierovu transformaci aplikovat přímo na funkci průběhu indexu lomu. Lze ale pracovat s transformací funkce průběhu indexu lomu, ve které za tloušťku vrstev bereme $n_1d_1, n_2d_2, \dots, n_id_i$. V případě jednoduché vrstvy stačí celý systém globálně přeškálovat indexem lomu vrstvy. V případě vícero vrstev je však toto škálování třeba provést pouze lokálně.

Průběhy indexu lomu skrz jednotlivé vrstvy, ze kterých se dvojvrstva, a dále i multivrstva skládá, budeme opět uvažovat za obdélníkové funkce. Jejich poloha je dána souřadnicemi x_1, x_2 pro první vrstvu, x_2, x_3 pro druhou vrstvu, tedy pro k -tou vrstvu x_k, x_{k+1} . Šířka vrstvy pak odpovídá rozdílu těchto souřadnic $d_k = x_{k+1} - x_k$. Vrstvy na sebe bezprostředně navazují, a tak je možné některé z nich uvažovat za vzduchové mezery s indexem lomu $n_0 = 1$ (viz multivrstva).

Jako přímou, referenční metodu v případě více než jedné vrstvy, tedy i v případě dvojvrstvy, použijeme metodu přechodových matic (zkr. Matp). Stejně jako Fabry započítává vícenásobné odrazy, je ale také snadno použitelná na vícevrstevné systémy.

2.2 Výpočty a porovnání základních metod

2.2.1 Metoda Born

Pro účely metody Born opět uvážíme Fresnelovy koeficienty (A.18) – (A.21) pro kolmý dopad, tentokrát vztažené i k druhému rozhraní mezi indexy lomu prvního a druhého prostředí n_1, n_2 a také ke třetímu rozhraní mezi n_2 a vzduchem. Aplikováním postupu popsány vztahy (A.26), (A.27) a se započtením

optické, ne jen geometrické dráhy dostaneme po převedení exponenciál na kosiny následující výraz pro odrazivost

$$R = (C_1)^2 + (C_2)^2 + (C_3)^2 + 2C_1C_2 \cos\left(\frac{4\pi}{\lambda}n_1d_1\right) + 2C_1C_3 \cos\left[\frac{4\pi}{\lambda}(n_1d_1 + n_2d_2)\right] + 2C_2C_3 \cos\left(\frac{4\pi}{\lambda}n_2d_2\right) \quad (2.1)$$

s hodnotami koeficientů

$$C_1 = \frac{1 - n_1}{1 + n_1}, \quad (2.2)$$

$$C_2 = \frac{2}{1 + n_1} \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \frac{2n_1}{n_1 + 1}, \quad (2.3)$$

$$C_3 = \frac{2}{1 + n_1} \frac{2n_1}{n_1 + n_2} \frac{n_2 - 1}{n_2 + 1} \frac{2n_2}{n_2 + n_1} \frac{2n_1}{n_1 + 1}. \quad (2.4)$$

2.2.2 Metody FTn a FTdn s lokálním přeškálováním

Před provedením Fourierovy transformace v metodách FTn a FTdn nejprve provedeme korekci průběhu indexu lomu na změnu z geometrické na optickou dráhu. Zavedeme funkci průběhu indexu lomu jako funkci proměnné t

$$t = \int_0^{x'} n(x) dx, \quad (2.5)$$

platí tedy $t_1 = x_1$, $t_3 = x_1 + (x_2 - x_1)n_1 + (x_3 - x_2)n_2$ apod. a funkce $n(t)$ je pak definována následovně:

$$n(t) = \begin{cases} n_1, & t \in (t_1, t_2) \\ n_2, & t \in (t_2, t_3) \\ 1, & t \notin (t_1, t_2) \wedge (t_2, t_3). \end{cases}$$

Nyní stačí provést Fourierovu transformaci jednotlivých schodů, sečíst (viz (A.36)), výsledek umocnit a pak má metoda FTn tvar

$$\begin{aligned} |\mathcal{F}(n(t))|^2 &= 4\pi^2\xi^2(2(1 - n_1)^2 + 2(1 - n_2)^2 - 2(1 - n_1)(1 - n_2) \\ &\quad + 2[(1 - n_1)(1 - n_2) - (1 - n_1)^2] \cos(2\pi\xi d_1 n_1) \\ &\quad + 2[(1 - n_1)(1 - n_2) - (1 - n_2)^2] \cos(2\pi\xi d_2 n_2) \\ &\quad - 2(1 - n_1)(1 - n_2) \cos[2\pi\xi(d_1 n_1 + d_2 n_2)]). \end{aligned} \quad (2.6)$$

Použitím vztahu (A.32) pak získáme výsledek metody FTdn odpovídající Fourierově transformaci derivace indexu lomu:

$$\left| \mathcal{F}\left(\frac{\partial n(t)}{\partial t}\right) \right|^2 = \frac{1}{4\pi^2\xi^2} |\mathcal{F}(n(t))|^2. \quad (2.7)$$

Srovnáním s metodou Born (2.1) vychází $\xi = \frac{2}{\lambda}$. Výsledek argumentu kosinu přitom odpovídá tvaru u jednoduché vrstvy.

2.2.3 Metoda Matp

Vynásobením všech matic přenosu (viz Dodatek A.2) příslušející rozhraním vyskytujících se v systému o N vrstvách získáváme celkovou matici přenosu $M = M_1 M_2 \dots M_N$ a když neuvažujeme, že by na vrstvu dopadlo záření i z druhé strany ($E_{N-} = 0$), získáme jednoduchý vztah pro koeficient odrazivosti sestávající z prvků inverzní výsledné matice

$$r = \frac{E_{0-}}{E_{0+}} = \frac{(M^{-1})_{21}}{(M^{-1})_{11}}. \quad (2.8)$$

Odrazivost je pak rovna kvadrátu tohoto koeficientu

$$R = |r|^2. \quad (2.9)$$

Doposud byla uvažována pouze matice přenosu pro TE vlnu. Pro nepolarizované, kolmo dopadající světlo, ale tato matice pro výpočty postačí (viz komentář u vzorce (A.3)).

2.3 Výsledky a kvantifikace chyby

Na obrázcích 2.1, 2.2, 2.3 a 2.4 jsou zobrazeny příklady porovnání všech čtyř metod použitých na čtyři různé dvojvrstvy o různých tloušťkách a indexech lomu. Metody FTn a FTdn jsou přeškálované konstantou (viz legendy jednotlivých grafů). Podle očekávání a výsledků jednoduché vrstvy dává metoda FTn značný a zásadní nesoulad, co se týče rozložení intenzity. Zatímco polohu maxim odhaduje poměrně dobře s mírným posunutím směrem k delším vlnovým délkám, jejich velikost má v zobrazené části spektra 200 – 1000 nm rostoucí charakter a větší vlnové délky jsou nadhodnoceny, menší naopak podhodnoceny.

Nepřesnost jednotlivých metod ale jde v příkladech grafů pozorovat také i u zbylých dvou metod, FTdn a Born, a to zejména v oblastech interferenčních minim.

Odchylky metod od referenční metody (Matp) lze přehledně znázornit jako funkci dvou proměnných – v závislosti na indexech lomu n_1 , n_2 nebo případně v závislosti na tloušťkách vrstev d_1 , d_2 . Dříve zmíněné grafy jsou pro přehlednost znázorněny jako funkce vlnové délky. V případě kvantifikace chyby ale potřebujeme ekvidistantní úseky, což splňuje vzorkování ve frekvenčním spektru, nikoli ale v krocích vlnové délky.

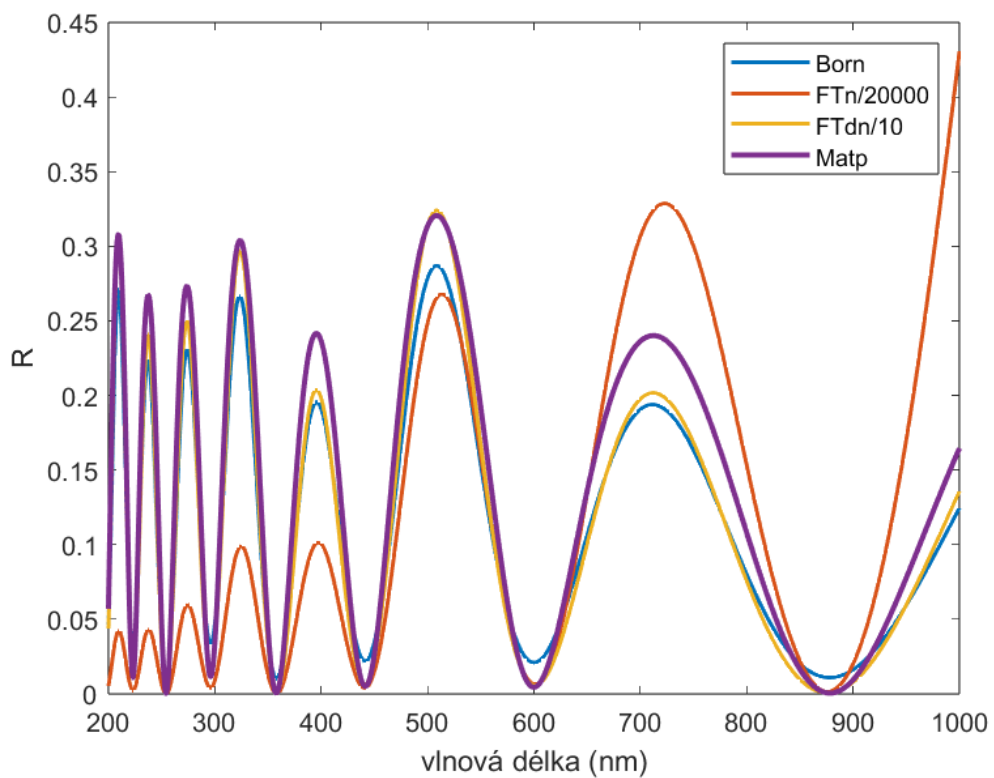
Uvážíme-li obecnou, zdiskretizovanou funkci určité metody F_i , navzorkovanou rovnoměrně N body ve frekvenčním spektru a znormovanou na jednotkový objem

$$F'_i = \frac{F_i}{\sum_{i=0}^N F_i}, \quad (2.10)$$

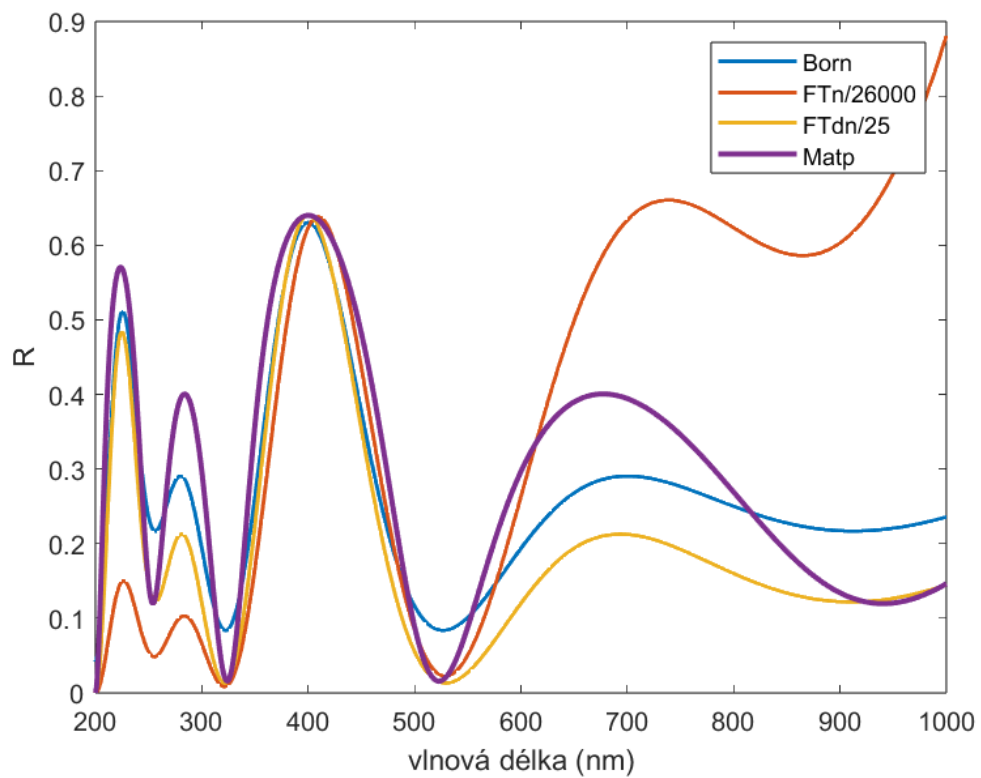
pak odchylku od taktéž znormované funkce referenční metody M'_i , metody přenosových matic Matp, můžeme definovat podobně jako první statistický moment

$$\Sigma_{err} = \sum_{i=0}^N (F'_i - M'_i)^2. \quad (2.11)$$

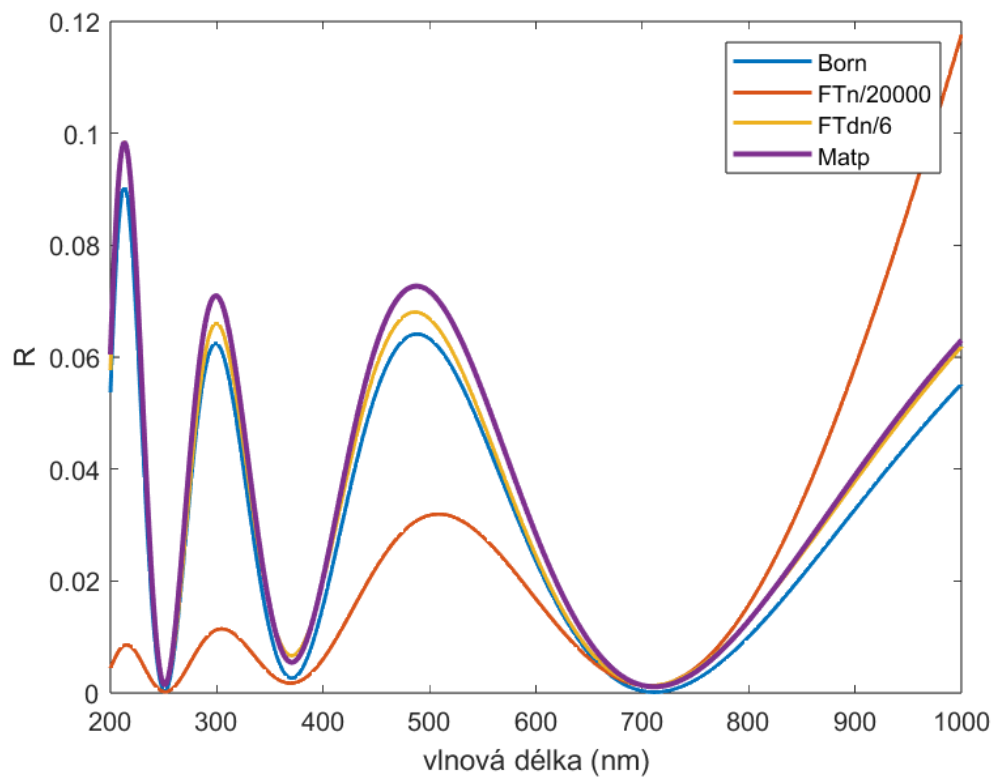
Tyto chybové funkce jsou vizualizovány (viz obrázek 2.5) pro metody FTn, FTdn, Born a pro ucelenější obrázek situace i pro metodu BornG, ve které se započítává jen geometrická dráha.



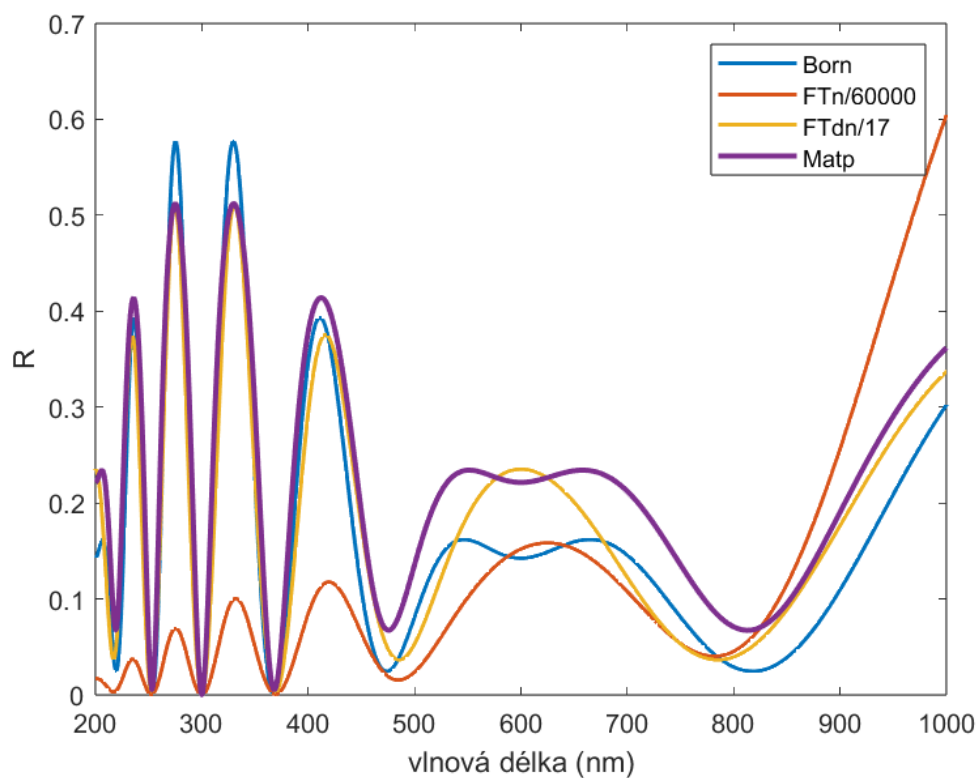
Obrázek 2.1: Odrazivost systému dvou vrstev o tloušťkách $d_1=200$ nm, $d_2=300$ nm a indexech lomu $n_1=1,9$ a $n_2=1,7$ vypočtená čtyřmi metodami. Je zřetelné, že metoda Born na základě srovnání s referenční Matp hodnotu minim nadhodnocuje a hodnotu maxim podhodnocuje.



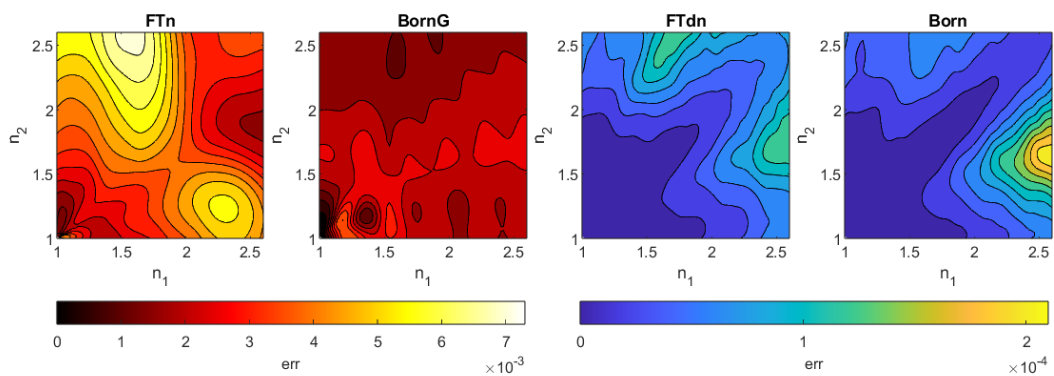
Obrázek 2.2: Odrazivost dvojné vrstvy vypočtená čtyřmi různými metodami o parametrech $d_1=100$ nm, $d_2=100$ nm, $n_1=3$, $n_2=2$. V grafu je zřetelný nesoulad všech metod.



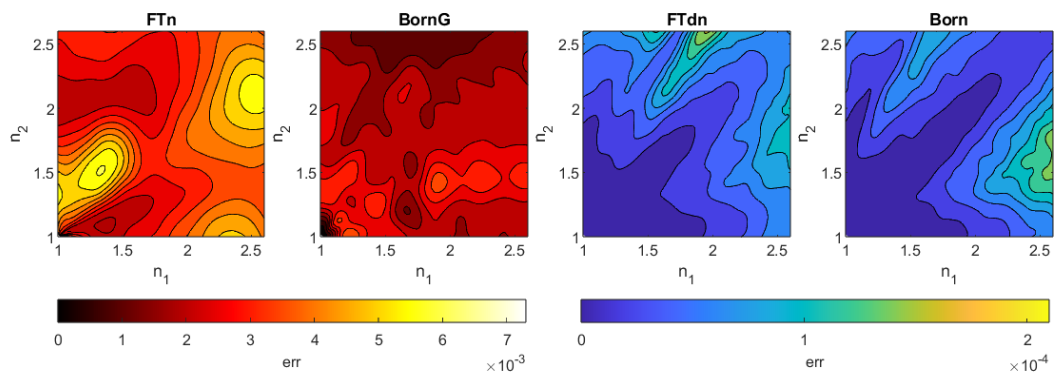
Obrázek 2.3: Graf odrazivosti dvojné vrstvy o parametrech $d_1=70$ nm, $d_2=200$ nm, $n_1=1,3$ a $n_2=1,4$. Metoda FTn oproti ostatním metodám příliš zdůrazňuje červenou část spektra, modrou naopak podhodnocuje.



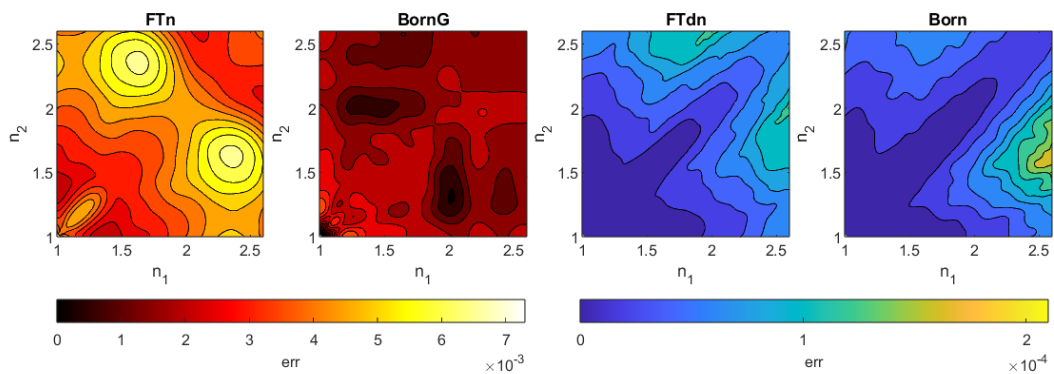
Obrázek 2.4: Graf odrazivost dvojn  vrstvy o parametrech $d_1=100$ nm, $d_2=300$ nm, $n_1=1,5$ a $n_2=2,5$. Jedn  se o p p d odch len  FTn i FTdn metody od metod Born a Matp mezi hodnotami 500 – 800 nm vlnov  d lky.



(a) $d_1 = 100$ nm a $d_2 = 300$ nm



(b) $d_1 = 200$ nm a $d_2 = 300$ nm



(c) $d_1 = 300$ nm a $d_2 = 300$ nm

Obrázek 2.5: Grafické zobrazení odchylek metod FTn, FTdn, Born a BornG od referenční metody Matp v závislosti na hodnotách indexů lomu dvojvrstvy pro různé kombinace tloušťek vrstev.

2.4 Metody se střední hodnotou indexu lomu

Fourierova transformace zavedená na jednodimenzionální případy je základní a nutný předstupeň uvažování její aplikace na 2D (popř. 3D) snímky struktur biologických tkání. Výsledkem dosavadního postupu je závěr o nutnosti lokálního škálování funkce průběhu indexu lomu předtím, než je na ní Fourierova transformace aplikována. Stejně lokální přeskálování u 2D varianty není možné. Výsledek by kvůli různému „natahování“ dílčích sloupců a řádků zdiskretizované 2D funkce indexu lomu nezachovával celkový tvar diskretizační mřížky. Nabízí se ale jako škálovací faktor místo dosavadní hodnoty lokálního indexu lomu vyzkoušet globální hodnotu, a to střední hodnotu indexu lomu celé struktury. Protože aritmetický průměr by adekvátní výsledek dával pouze při vyváženém složení obou prostředí v systému vrstev (cytoplasmy a krystalů), vhodné je použití váženého průměru indexu lomu, pro dvojvrstvu ve tvaru

$$N = \frac{d_1 n_1 + d_2 n_2}{d_1 + d_2}. \quad (2.12)$$

Varianty metody FTn a FTdn s globálním přeskálováním váženým průměrem N nazveme FTnN a FTdnN. Od FTn a FTdn se v postupu liší funkcí vstupující do Fourierovy transformace, kterou je varianta funkce $n(x)$ (A.33):

$$n(s) = n(Nx) = \begin{cases} n_1, & x \in (Nx_1, Nx_2) \\ n_2, & x \in (Nx_2, Nx_3) \\ 1, & x \notin (Nx_1, Nx_2) \wedge (Nx_2, Nx_3). \end{cases} \quad (2.13)$$

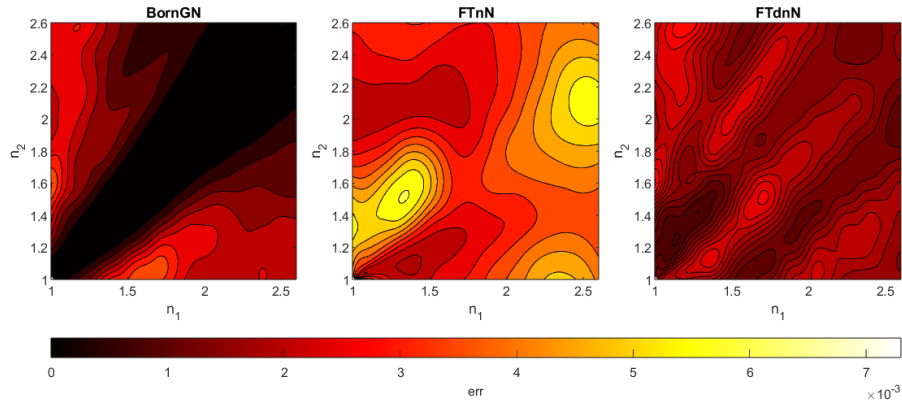
Metody FTnN a FTdnN nemají v Bornově aproximaci odpovídající analogii. Ani jedna z metod FTnN, FTdnN totiž neodpovídá případu použití středního indexu lomu v optické dráze Born metody (ozn. BornGN), kde se jedná o nahrazení role indexů lomu jednotlivých vrstev jednotnou hodnotou indexu lomu N a zaniká tak kontrast indexů lomu v rozhraní.

V obrázku 2.6 jsou vyobrazeny chybové funkce metod nově zavedených metod FTnN, FTdnN a varianty BornG metody, BornGN.

2.5 Diskuze

Dosud bylo zváženo pět základních modelů: Born, BornG, FTn FTdn a přímá metoda, Matp (Fabry v jednoduché vrstvě). Byly ale také jako varianty základních aproximativních metod zavedeny metody FTnN, FTdnN a BornGN, které užívají průměrného indexu lomu váženého tloušťkou vrstev.

Metoda FTn dle očekávání nesedí a charakteristická preference červené a podceňování modré části spektra se projevuje zcela zásadně i v dvojvrstvě. Není překvapující ani to, že nesedí metoda BornG – zahrnutí optické dráhy bylo přirozenou součástí postupu (viz 1.1 Použité metody). Aproximativní metody Born a FTdn mají ale hodnotu chybové funkce do $3 \cdot 10^{-4}$, tedy víc než o řád méně než FTn a BornG. Hodnota chybové funkce pro FTdn (a Born) $\Sigma_{err} = 3 \cdot 10^{-4}$ odpovídá 1,7 % výchozí hodnoty, což je stále dobrý výsledek oproti chybě až 8 %, kterou vykazuje metoda FTn. Metody FTdn a Born se dokonce většinou pohybují v nižších hodnotách chybové funkce odpovídající chybě 0,1 %, která vypovídá o výborné přesnosti obou metod. Hodnota $\Sigma_{err} = 1 \cdot 10^{-3}$ charakteristická pro podstatnou



Obrázek 2.6: Chybová funkce variant metod FTnN, FTdnN a BornGN pro tloušťky vrstev $d_1 = 200$ nm, $d_2 = 300$ nm.

část BornGN, FTdnN a BornG odpovídá odchylce 3,2 %, což je hodnota stále poměrně přijatelná.

Metody Fourierovy transformace nesou chybu v nezapočítání transmisních koeficientů zahrnutých v metodě Born. V případě jednoduché vrstvy se nezapočítání transmisních koeficientů projevilo zvýšením všech hodnot maxim (viz metoda BornT v grafu na obrázku 1.2). U metod FTn a FTdn obecně nebereme absolutní velikost maxim, naopak počítáme s tím, že je třeba celé spektrum přenásobit konstantou (viz legendy na obrázcích 1.2 – 2.4). V případě dvojrstvy však toto přeškálování nepokryje absenci transmisních koeficientů. Nejzřetelněji je tato odchylka FTn a FTdn od metody Born (a Matp) patrná v grafu na obrázku 2.4, kde hraje roli dokonce v pozicích lokálních maxim.

Důvodem uvažování dodatečných metod, FTnN (Fourierovy transformace průběhu indexu lomu globálně přeškálovaného střední hodnotou indexu lomu) a FTdnN (Fourierovy transformace derivace průběhu indexu lomu globálně přeškálovaného střední hodnotou indexu lomu), je jejich potenciálně možné rozšíření na 2D strukturu. Nabízejí totiž škálování na jednotnou hodnotu indexu lomu N , jsou tudíž jednodušší a aplikovatelné i do dvou směrů.

Metoda BornGN by se zdála být adepthem metody odpovídající FTdnN, stejně jako metoda Born odpovídá (až na transmisní koeficienty) metodě FTdn v jednoduché vrstvě. Metody FTn a FTdn ale zachovávají charakter jednotlivých rozhraní a nijak nemění indexy lomu vrstev. Metoda BornGN naopak vrstvám přiřadí jednotnou hodnotu indexu lomu N . Díky započítání průměrné optické dráhy odpovídá metoda BornGN pro oblast malých kontrastů indexů lomu lépe (viz oblast nízké chyby na diagonále chybové funkce metody BornGN 2.6) než metoda BornG, která optickou dráhu neuvažuje vůbec.

2.6 Závěr kapitoly

Na řešení úlohy dvojvrstvy bylo potvrzeno nežádoucí chování metody FTn a dobrý odhad spektra dává metoda FTdn. Bylo však potřeba obě metody lépe rozpracovat s použitím lokálního přeskálování průběhu indexu lomu jeho lokální hodnotou. Proměnná Fourierovy transformace této nové, přeskálované funkce průběhu indexu lomu pak nabývá podoby $\xi = 2/\lambda$. Byly taky zavedeny metody FTnN a FTdnN rozšířitelné na 2D multivrstevné struktury, z nichž metoda FTdnN je perspektivní, ačkoli není tak přesná jako metoda FTdn pro 1D strukturu.

3. Jednorozměrná multivrstva

Strukturální charakter živočišných či rostlinných tkání, na kterých vznikají strukturální barvy, odpovídá několika vrstvám uspořádaných nebo částečně uspořádaných krystalků např. guaninu (Saenko a kol., 2013) v prostředí cytoplasmy o jiném indexu lomu. Ze snímků elektronového mikroskopu lze zjistit rozdělení a střední hodnotu rozměrů vrstev krystalků i jejich střední vzájemnou vzdálenost. V jednorozměrném případě bude úloha redukována na střídání dvou typů vrstev: vrstev krystalků a vrstev o indexu lomu okolí, přičemž tloušťkám vrstev je přiřazeno určité statistické rozdělení.

Takto definovanou úlohu nazveme jednorozměrnou multivrstvou a většinou se k ní budeme vztahovat zkráceně jako k multivrstvě. Aby se statistický charakter tloušťek vrstev projevil, počítáme s počtem dvaceti vrstev rovnoběžně naskládaných za sebe. Jinak řečeno se jedná o deset vrstev krystalků proloženými a obklopenými okolím, v našem případě vzduchem.

Co se týče nutnosti interpretace výsledků, takto variabilní systém je v některých aspektech nečitelný. Problematiku lze přiblížit na příkladu difrakce na krystalické mřížce, která obsahuje poruchové jevy. Zkoumaný difrakční obrazec takové mřížky nutně nese informace o makroskopické i mikroskopické struktuře, a zároveň je kvůli poruchám rozostřen. Všechny tři příspěvky do celkového obrazce se ale mohou překrývat a správné přiřazení částí obrazce konkrétním jevům nemusí být zřejmé.

Aby byly jednotlivé příspěvky snadněji rozlišitelné, tloušťky prokládaných vrstev vzduchu položíme řádově menším hodnotám než tloušťky vrstev krystalků. Rozlišíme pak dva případy neuspořádanosti vrstev: neuspořádanost danou nahodilostí tenkých mezer vzduchu (řádově v desetinných mikrometru) a neuspořádanost danou nahodilostí mikrometrových tloušťek vrstev krystalků.

Úlohu multivrstvy v této kapitole řešíme numericky. Přejít mezi analytickým řešením jednoduchých systémů a numerickým řešením systémů složitějších zprostředkovává postup u dvojrstvy, ve kterém byla ošetřena aplikace Fourierovy transformace na vícevrstevnaté systémy a s tím spojená hodnota ξ . Pro numerický výpočet této transformace použijeme známý a často používaný algoritmus rychlé Fourierovy transformace (FFT). Analytické řešení dvojrstvy zároveň také pracuje s řešením metod Born a Matp ve formě, která je snadno rozšiřitelná pro numerické řešení multivrstvy.

3.1 Algoritmy numerických metod

3.1.1 Born, BornG a Matp

Z obecného postupu pro skládání intenzit odraženého světla v metodě Born (A.26) – (A.27) dostáváme pro obecný systém N rovnoběžných vrstev, na které kolmo dopadá světlo, vztah pro výslednou intenzitu odraženého světla

$$E_N = E_{r,1} + E_{r,2} + \dots + E_{r,N+1} = E_{N-1} + C_{N+1} E_0 e^{\frac{4i\pi}{\lambda} \int_0^{x(N+1)} n(x) dx}, \quad (3.1)$$

kde $x_{(N+1)}$ je pozice posledního rozhraní, E_{N-1} výsledná elektrická intenzita systému $(N - 1)$ vrstev, C_i konstanta zahrnující příslušné transmisní koeficienty a

koeficienty odrazu a E_0 amplituda původní vlny dopadající na systém. Celkovou odrazivost metody Born počítáme opět jako druhou mocninu součtu intenzit odražených vln:

$$R = |E_N|^2. \quad (3.2)$$

Vztah pro BornG vypadá analogicky, ale vypustíme $n(x)$ v integrálu v exponentu – zbyde integrál pouze přes dráhu paprsku, což odpovídá souřadnici rozhraní, ke kterému se exponent vztahuje.

V metodě Matp se odrazivost i nadále počítá dle vzorců (2.8) a (2.9).

3.1.2 Fourierova transformace

Analogií k řešení odrazivosti dvojvrstvy pomocí Fourierovy transformace by v případě multivrstvy byla Fourierova transformace aplikovaná na průběh indexu lomu lokálně přeskálovaného tak, aby odpovídal optické dráze (viz zavedení proměnné t vzorcem (2.5)).

Při úvaze nad rozšířením metody na 2D strukturu už ale s tímto lokálním přeskálováním nastává problém, jelikož nezachovává návaznost vrstev na sebe a celkový charakter struktury. Nabízí se namísto lokálního přeskálování příslušným indexem lomu n_l možnost globálního přeskálování střední hodnotou indexu lomu N (metody FTnN a FTdnN, viz oddíl 2.4). Při střídání dvou vrstev o středních hodnotách tlouštěk \hat{d}_1, \hat{d}_2 a indexech lomu n_1, n_2 použijeme pro jeho hodnotu vzorec

$$N = \frac{n_1 \hat{d}_1 + n_2 \hat{d}_2}{\hat{d}_1 + \hat{d}_2}. \quad (3.3)$$

Rekurentní vztah dráhy t průběhu indexu lomu $n(t)$ pak má tvar

$$t' = G_j = G_{j-1} + d_j N \quad (3.4)$$

namísto původního

$$t = O_j = O_{j-1} + d_j n_j. \quad (3.5)$$

DFT a FFT

Algoritmus rychlé Fourierovy transformace (FFT) pro numerický výpočet diskrétní Fourierovy transformace (DFT), který využívá i MATLABová funkce `fft`, se vyznačuje, jak už napovídá samotný název, velkou výhodou v rychlosti provedení. Na rozdíl od přímého řešení matice DFT, která má časovou náročnost $O(n^2)$, FFT ji radikálně snižuje na pouhé $O(n \ln(n))$. DFT a FFT ale skýtají několik omezení, před kterými je třeba se mít na pozoru.

Máme-li vytvořenou funkci f , na kterou chceme FFT aplikovat, následující krok spočívá v její diskretizaci, tj. v určení vzorkovacího kroku. Kdykoliv je však ve Fourierově analýze provedena diskretizace v časovém spektru, důsledkem je periodizace ve frekvenčním spektru. Kromě určení vzorkovacího kroku je proto zásadní také výběr intervalu funkce, na kterou FFT aplikujeme. Při nutnosti vzít větší interval, než jaká je délka průběhu indexu lomu, je možné funkci doplnit o dráhu paprsků před vstupem a po výstupu do systému vrstev.

V případě schodovitého charakteru funkcí, se kterými pracujeme v našem případě, je třeba zvolit velikost vzorkovacího kroku tak, aby byly zachyceny všechny

vrstvy a nemohlo dojít k případu, že by některou z vrstev krok „přeskočil“, protože její tloušťka by byla menší než velikost kroku.

Dvojice těchto parametrů, vzorkovací krok a interval funkce, je zásadní pro vyhnutí se efektu alias a pro dosažení přijatelné šířky funkce ve frekvenční oblasti. Zároveň je třeba vzít v úvahu, že frekvenční oblast pro nás znamená zobrazení v proměnné ξ . Hledané spektrum leží ale v reciproké proměnné ke ξ , neboť $\xi = 1/\lambda$.

Může být překvapivé, že po diskretizaci a určení intervalu funkce je třeba ještě jednoho kroku. Je jím posunutí spektra tak, aby první index nesl hodnotu funkce v počátku. V MATLABu tuto operaci zprostředkovává funkce `ifftshift`.

Dále je třeba vzít v potaz, že Fourierova transformace indexu lomu obecně ve vztahu analytického řešení (A.40) obsahuje delta distribuci. Výsledkem FFT je pak velmi velká hodnota maxima, kterou lze snížit posunutím funkce o její průměrnou hodnotu.

Provedení FFT v MATLABu po zahrnutí výše uvedených faktorů vypadá následně, předpis pro vzorkování byl převzat z Voelz (2011):

```
>> L=4.9797e+05;           % šířka intervalu
>> dx=5;                  % velikost kroku
>> x=-L/2:dx:L/2-dx;     % diskretizace v časové oblasti
>> f=f-sum(f)/length(f);
>> fx=-1/(2*dx):1/L:1/(2*dx)-(1/L); % diskretizace ve frekv. spektru
>> F0=fft(f);             % FFT
>> F=ifftshift(F0);       % vycentrování F
>> fxLb=2*fx.\^(-1);     % dosazení hodnoty \xi
>> plot(fxLb,F)           % graf spektra ve vlnové délce
```

3.2 Numerické řešení

Vzhledem k nahodilosti šířky vrstev krystalků a charakteru biologických struktur, které obsahují mnoho vícevrstevnatých systémů, potřebujeme statistický soubor mnoha řešení multivrstvy. Výsledkem úlohy multivrstvy pak považujeme střední hodnoty odrazivosti příslušející daným vlnovým délkám. Počet iterací se pro pravidelné a nepravidelné varianty multivrstvy lišil, pohyboval se od 100 po 10000 podle míry hladkosti křivek výsledných grafů a časové náročnosti programu.

3.2.1 Neuspořádanost makrostruktury

První model souboru vrstev sestával z deseti dvojic vrstev o indexu lomu $n_{2k-1} = n_1 = 1,3$ a $n_{2k} = n_2 = 1$ vsazených do prostoru o indexu lomu $n_0 = 1$ ($k \in \mathbb{Z}$). Tloušťky všech mezer měly stejnou hodnotu $d_{2k} = d_2 = 100$ nm a vrstvy krystalů měly v metodách Born, FTn, FTdn a Matp rozdělení

$$d_1 = (1000 + 300 |N(0,1)|) \text{ nm}, \quad (3.6)$$

které bylo použito pro generování náhodných čísel pomocí MATLABové funkce `randn`, která využívá Gaussova rozdělení $N(\mu, \sigma^2)$ o jednotkové variaci $\sigma = 1$ a

nulové střední hodnotě $\mu = 0$. Střední hodnota rozdělení $d(x)$ vystupující ve vzorci (3.3) pak odpovídá hodnotě $\hat{d} = (1000 + 300\sqrt{2/\pi})$ nm.

Celkově bylo spočteno sedm modelů: Born, BornG, FTn, FTdn, FTnN, FTdnN a referenční Matp. Jejich řešení jsou vykreslena v grafech na obrázku 3.1.

Druhý model slouží k porovnání neuspořádanosti prvního modelu s jeho uspořádanou variantou. Hodnoty indexů lomu zůstávají stejné, za tloušťky jsou vzaty střední hodnoty tloušťek z prvního modelu. Ve výsledném spektru jsou znatelné ostré maxima a minima (viz grafy na obrázku 3.2).

3.2.2 Neuspořádanost mikrostruktury

Zkoumání příspěvku neuspořádanosti tenkých vzduchových vrstev bylo provedeno opět po systém 20 vrstev, ale s odlišnými parametry. Pro zachycení větší části vnější obálky spektra byla tloušťka vrstev krystalků zvětšena na $d_1 = 2000$ nm. Tloušťka vzduchových vrstev byla náhodně generována podle vzorce $d_2 = (200 + 60|N(0,1)|)$ nm. Volba rozdělení není náhodná, snahou bylo zachovat charakter rozdělení předchozí případu neuspořádanosti makrostruktury. Hodnotu indexů lomu zachováváme ($n_1 = 1,3$ a $n_2 = 1$).

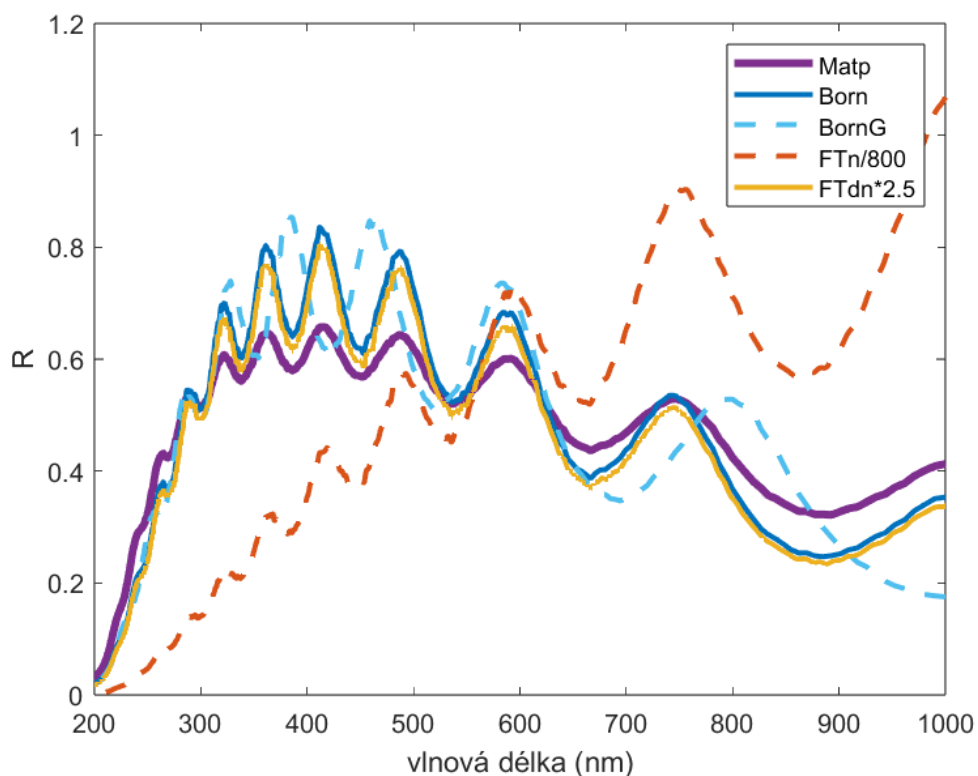
Pro srovnání byla opět spočtena i pravidelná, uspořádaná varianta s fixní tloušťkou vzduchových mezer $d_2 = (200 + 60\sqrt{2/\pi})$ nm. Patrným efektem neuspořádanosti tenkých vzduchových vrstev je zakulacení obálky spektra metody Matp a celkové snížení intenzity maxim (viz obrázek 3.3).

3.3 Diskuze a závěr 1D multivrstvy

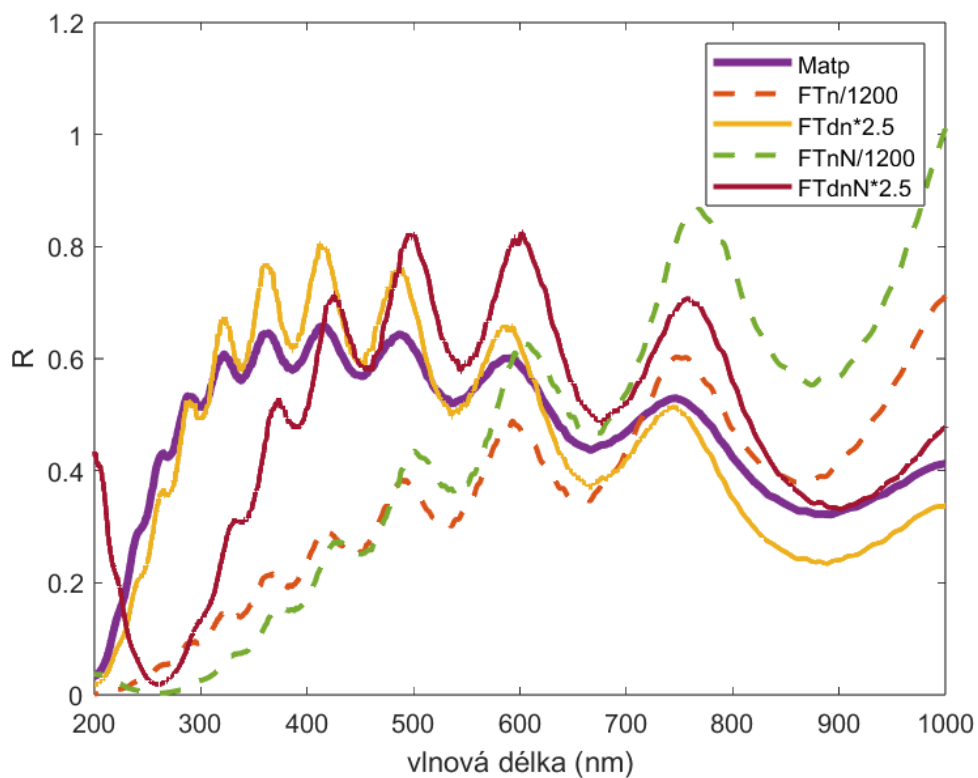
Pro porozumění tvaru výsledných spekter uvažujme pravidelnou multivrstvu, která se skládá z dvojvrstev s parametry $n_1 = 1$, $n_2 = 1,3$ a $d_1 = 100$ nm a d_2 také o fixní hodnotě. U každé mezery vzduchu o tloušťce 100 nm dojde ke složení odrazů od dvou rozhraní, která mezeru definují. Z fázového rozdílu odražených vln a podmínek pro konstruktivní interferenci $4nd_1/\lambda = (2m + 1)$ a destruktivní interferenci $4nd_1/\lambda = 2m$ ($m \in \mathbb{Z}$) můžeme zjistit, že pro vlnovou délku $\lambda = 400$ nm nastane ve spektru maximum a pro $\lambda = 200$ nm minimum. Interference na těchto malých vrstvách nám tedy (podobně jako u difrakce na mřížce) vytváří obálku spektra širokou přes celé viditelné spektrum. Určuje tak globální maxima a minima.

Vrstvy krystalků o mikrometrové tloušťce přidávají do spektra jemnější strukturu mnoha maxim a minim. Naznačuje to i fakt, že pro vrstvu o tloušťce $d_1 = 1300$ nm v rozmezí 200 – 1000 nm vychází z podmínky konstruktivní interference 14 maxim. V případě pravidelných struktur s nulovou nahodilostí tloušťek jsou všechna minima i maxima ostrá. Jak je zřejmé ze srovnání výsledků spektra pravidelné struktury s nepravidelnou (obrázky 3.1, 3.2), v případě nenulové míry nahodilosti tloušťek se příspěvky interference od jednotlivých vrstev liší, nepřispívají jen do společného maxima, ale i do hodnot kolem něho a maxima i minima ztrácejí na ostroiti. Jemná struktura tak může potenciálně i zaniknout.

V případě, kdy se neuspořádanost týká tenkých vzduchových mezer (viz 3.2.2. Neuspořádanost mikrostruktury), dochází ke snižování intenzity globálních maxim. Pokud bychom zvyšovali rozptyl rozdělení tloušťek mezer, mohlo by dojít

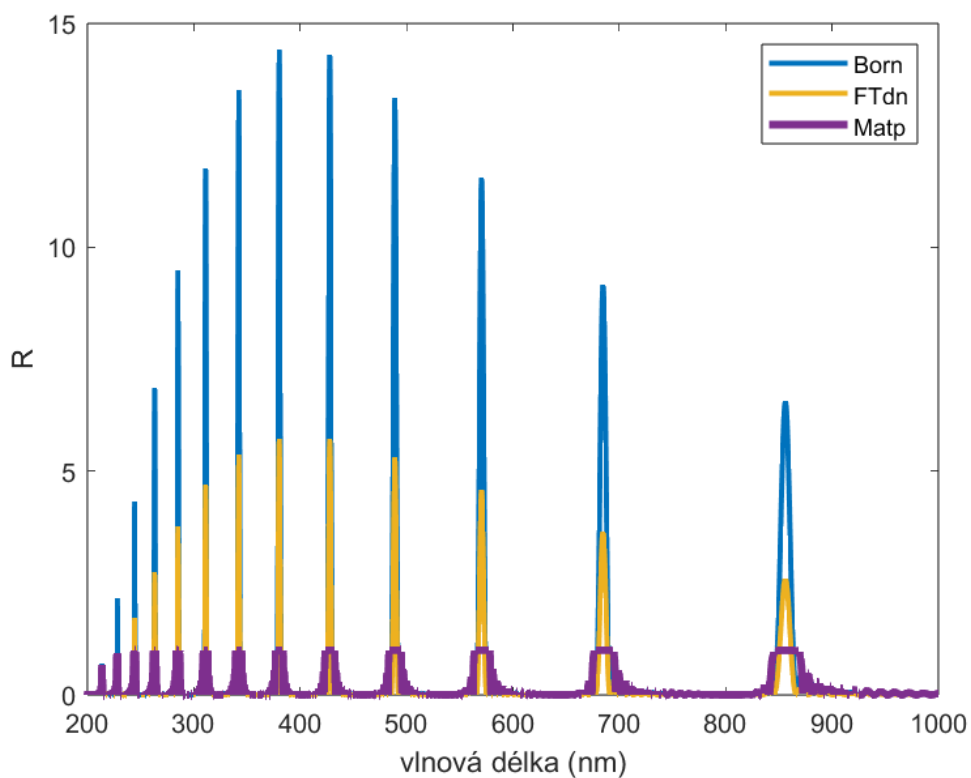


(a) Srovnání základních metod: Matp, Born, BornG, FTn a FTdn

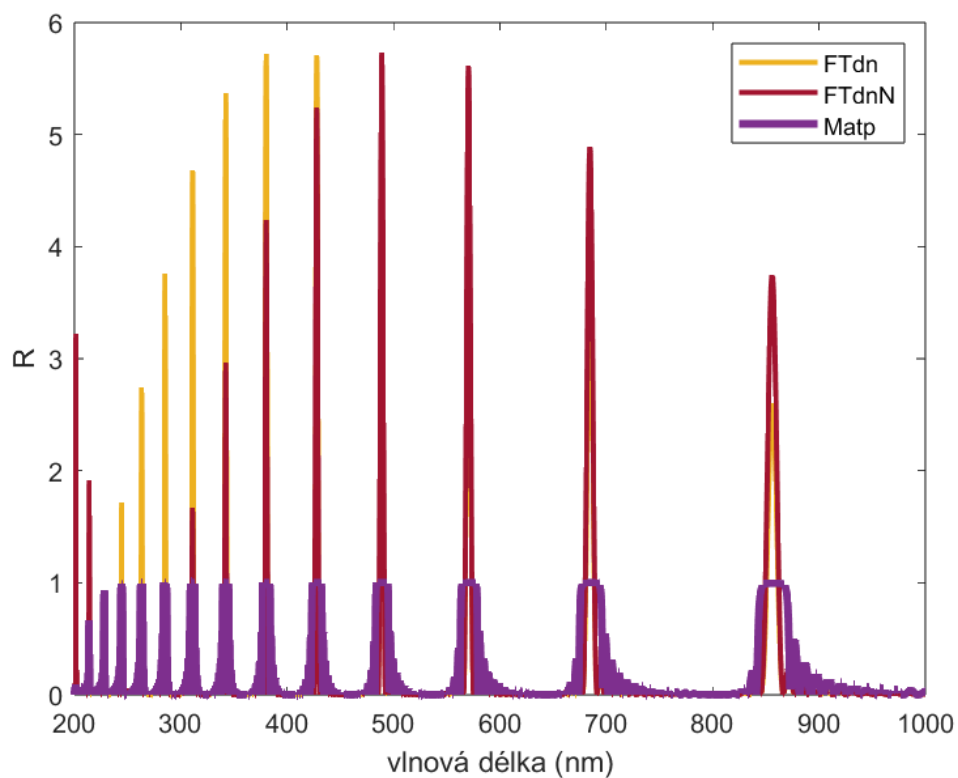


(b) Srovnání metod FTnN a FTdnN s metodami Matp, FTn a FTdn

Obrázek 3.1: Srovnání průměrných numerických řešení odrazivosti systému 10 dvojrstev s parametry $d_1 = (1000 + 300 |N(0,1)|)$ nm, $d_2 = 100$ nm, $n_1 = 1,3$ a $n_2 = 1$ spočtenými sedmi metodami.

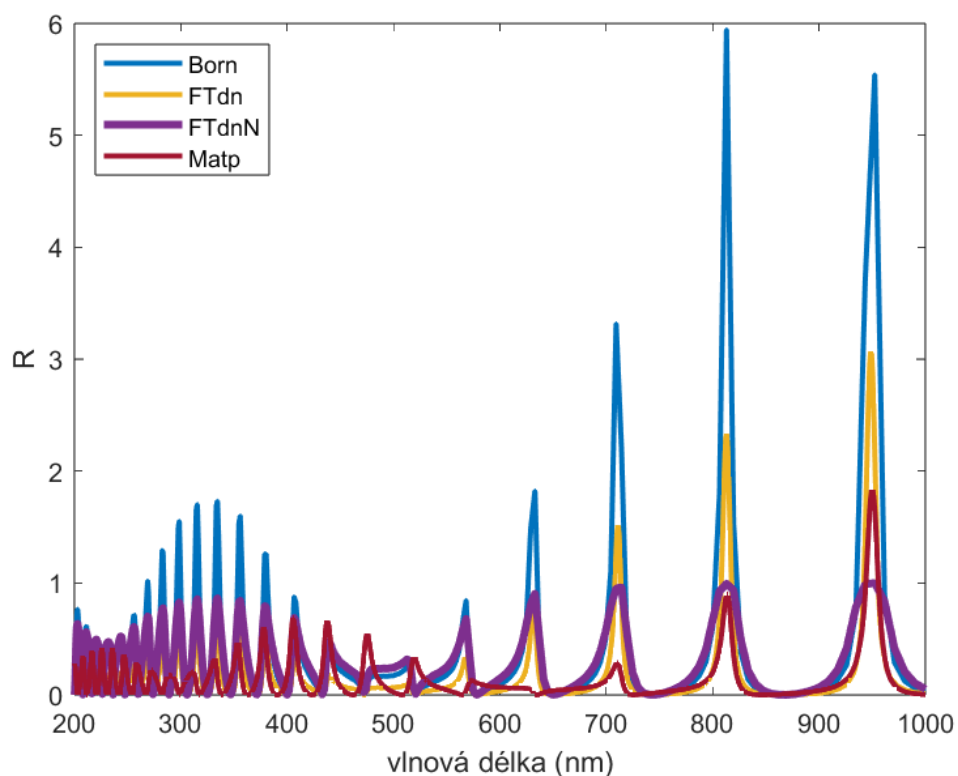


(a) Srovnání metody Matp, Born a FTdn

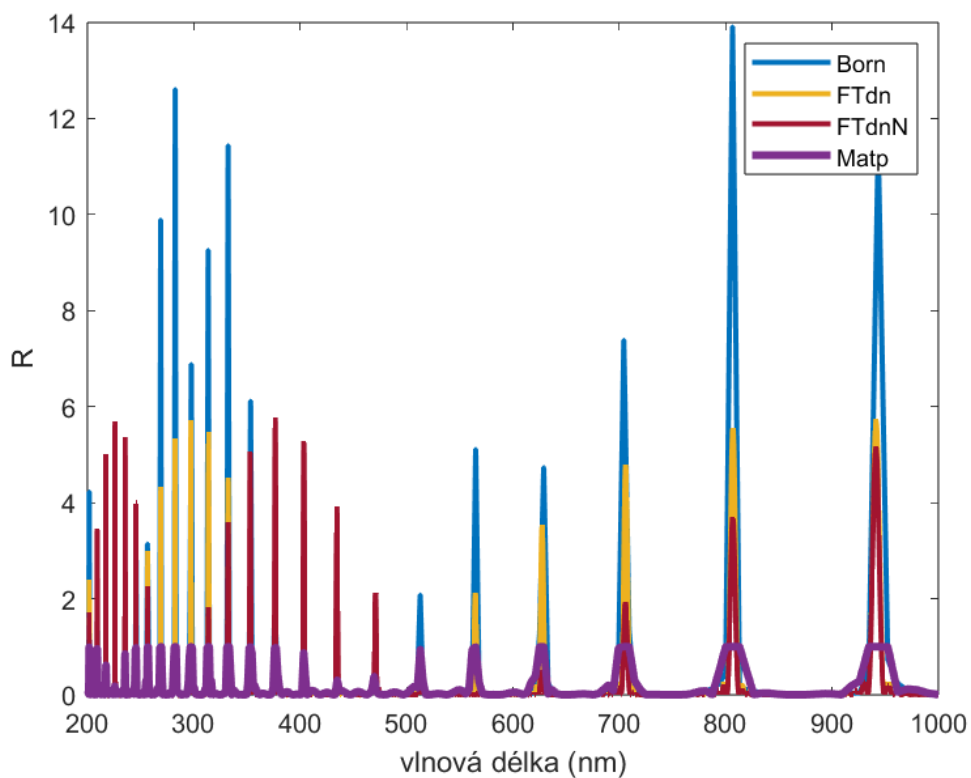


(b) Srovnání metod FTnN a FTdnN s metodou Matp

Obrázek 3.2: Odrazivost pravidelné varianty multivrstvy s parametry $n_1 = 1,3$ a $n_2 = 1$, $d_1 = (1000 + 300\sqrt{2/\pi})$ nm, $d_2 = 100$ nm.



(a) Mírně neuspořádaný systém s parametry $d_1 = 2000$ nm, $d_2 = (200 + 60 |N(0,1)|)$ nm



(b) Pravidelný systém s parametry $d_1 = 2000$ nm, $d_2 = (200 + 60\sqrt{2/\pi})$ nm

Obrázek 3.3: Srovnání výsledků odrazivosti multivrstvy ($n_1 = 1,3$ a $n_2 = 1$) s nahodilou a s pravidelnou tloušťkou tenkých vzduchových mezer.

k zaniknutí obálky spektra.

Řešení multivrstvy dále potvrzuje velmi dobrou shodu metody FTdn s metodou Matp, ještě více však vykazuje shodu FTdn s metodou Born. Metoda FTdnN, která je perspektivní pro rozšíření na 2D struktury, má adekvátní charakter spektra, který nepřeceňuje červenou část spektra (jako metody FTn a FTnN) a v případě naší úlohy predikovala poměrně dobře, i když s pozorovatelnou chybou, maxima od jemné struktury. Znatelnou chybu dává v případě obálky spektra, ve které maximum předpověděla o cca 150 nm dál směrem k červenému spektru než metody Matp a FTdn. Znamená to, že přeskálování tloušťky tenkých vrstev vzduchu hodnotou N odhaduje optickou dráhu paprsků, procházejícími těmito tenkými vrstvami, delší, než je ve skutečnosti. Důvodem je kombinace menší tloušťky vrstvy s menší hodnotou indexu lomu z obou možných hodnot indexu lomu v multivrstvě. Index lomu vzduchových vrstev tak přispívá do středního indexu lomu pouze menšinou. Díky tomu je ale střední hodnota indexu lomu N blízká hodnotě indexu lomu krystalků n_1 a v jemné struktuře dochází k velmi dobré shodě s referenční metodou.

Metoda FTdnN je proto vhodná pro vrstvy s blízkým indexem lomu a srovnatelnou tloušťkou, kdy se hodnota středního indexu lomu blíží oběma indexům lomu. Metodu lze využít i pro odhad obálky spektra v multivrstvě s velkým kontrastem tlouštěk střídajících se vrstev (pokud je neuspořádanost natolik malá, že obálka existuje), pokud rozdíl jejich indexů lomu je malý a pokud větší index lomu náleží tenčím vrstvám. Selhání metody můžeme očekávat pro kombinace vrstev s velkým kontrastem indexu lomu, zvláště pokud vrstvám s vyšším indexem lomu je přiřazena větší tloušťka.

Metody Born, FTn a FTdn odhadují v maximech nereálnou hodnotu odrazivosti – pouze v metodě Matp je správně shora omezena hodnotou $R = 1$. Metoda Born totiž získává tolik příspěvků k celkové intenzitě, kolik je v systému rozhraní (A.27), a s navyšováním počtu vrstev se výsledná intenzitě neustále zvyšuje.

Závěr

Jako nástroj pro odhad spektra odrazivosti biologických struktur vyznačujícími se strukturálním zabarvením je možné použít Fourierovu transformaci. Je třeba ji však aplikovat na derivaci přeškálovaného průběhu indexu lomu. Fourierova transformace indexu lomu samotného upřednostňuje modrou část spektra. Požadované přeškálování může proběhnout dvojím způsobem: lokálně hodnotou lokálního indexu lomu, anebo globálně střední hodnotou indexu lomu celého systému. První z variant nese chybu odpovídající zanedbání vícenásobných odrazů a nezapočtení transmisních ztrát. Je ale aplikovatelná pouze na jednorozměrné problémy. Druhá varianta je návrhem pro 2D analýzu biologických tkání. Nese však už zásadnější chybu spočívající v posunu maxim a minim, zejména v případech, kdy je systém vrstev charakteristický velkým kontrastem indexů lomu a velkým rozpětím hodnot tloušťek.

Seznam použité literatury

- G.B.BENEDEK (1971). The theory of transparency of the eye. *APPLIED OPTICS*, **10**(3).
- HECHT, E. (2017). *Optics*. Fifth edition. Pearson, London. ISBN 1-292-09693-4.
- KIMURA, T., TAKASAKI, M., HATAI, R., NAGAI, Y., UEMATSU, K., OAKI, Y., OSADA, M., TSUDA, H., ISHIGURE, T., TOYOFUKU, T., SHIMODE, S. a IMAI, H. (2020). Guanine crystals regulated by chitin-based honeycomb frameworks for tunable structural colors of sapphirinid copepod, sapphirina nigromaculata. *Scientific Reports*, **10**. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:211067708>.
- LANG, S., MAIWALD, L., RENNER, H., JALAS, D., PETROV, A. Y. a EICH, M. (2018). A quantitative first-order approach for the scattering of light by structured thin films. *arXiv: Optics*. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:119467732>.
- MAIWALD, L., LANG, S., JALAS, D., RENNER, H., PETROV, A. Y. a EICH, M. (2018). Ewald sphere construction for structural colors. *Optics express*, **26** **9**, 11352–11365. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:13741784>.
- MALÝ, P. (2020). *Optika*. Karolinum. ISBN 9788024622460. URL <https://books.google.cz/books?id=sksEEAAQBAJ>.
- OZAKI, R., KIKUMOTO, K., TAKAGAKI, M., KADOWAKI, K. a ODAWARA, K. (2021). Structural colors of pearls. *Scientific Reports*, **11**. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:236472664>.
- PRUM, R. O. a TORRES, R. H. (2003). A Fourier Tool for the Analysis of Coherent Light Scattering by Bio-Optical Nanostructures1. *Integrative and Comparative Biology*, **43**(4), 591–602.
- PRUM, R. O. a TORRES, R. H. (2004). Structural colouration of mammalian skin: convergent evolution of coherently scattering dermal collagen arrays. *Journal of Experimental Biology*, **207**, 2157 – 2172. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:8268610>.
- PRUM, R. O., TORRES, R. H., WILLIAMSON, S. a DYCK, J. (1998). Coherent light scattering by blue feather barbs. *Nature*, **396**, 28–29. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:4393904>.
- PRUM, R. O., TORRES, R. H., KOVACH, C., WILLIAMSON, S. a GOODMAN, S. M. (1999a). Coherent light scattering by nanostructured collagen arrays in the caruncles of the malagasy asities (eurylaimidae: aves). *The Journal of experimental biology*, **202 Pt 24**, 3507–22. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:12327018>.

- PRUM, R. O., TORRES, R. H., WILLIAMSON, S. a DYCK, J. (1999b). Two-dimensional fourier analysis of the spongy medullary keratin of structurally coloured feather barbs. *Proceedings of the Royal Society of London. Series B: Biological Sciences*, **266**, 13 – 22. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:39146379>.
- PRUM, R. O., COLE, J. A. a TORRES, R. H. (2004). Blue integumentary structural colours in dragonflies (odonata) are not produced by incoherent tyn-dall scattering. *Journal of Experimental Biology*, **207**, 3999 – 4009. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:15900357>.
- SAENKO, S. V., TEYSSIER, J., VAN DER MAREL, D. a MILINKOVITCH, M. C. (2013). Precise colocalization of interacting structural and pigmentary elements generates extensive color pattern variation in phelsuma lizards. *BMC Biology*, **11**, 105 – 105. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:14828354>.
- SATO, K., YAMAUCHI, A., OZAKI, N., ISHIGURE, T., OAKI, Y. a IMAI, H. (2016). Optical properties of biosilicas in rice plants. *RSC Advances*, **6**, 109168–109173. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:99076300>.
- SHAWKEY, M. D., SARANATHAN, V., PALSDOTTIR, H., CRUM, J. K., ELLISMAN, M., AUER, M. a PRUM, R. O. (2009). Electron tomography, three-dimensional fourier analysis and colour prediction of a three-dimensional amorphous biophotonic nanostructure. *Journal of The Royal Society Interface*, **6**, S213 – S220. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:31706506>.
- SMITH, R. E. a HOUDE-WALTER, S. N. (1995). Leaky guiding in nontransparent waveguides. *Journal of The Optical Society of America A-optics Image Science and Vision*, **12**, 715–724. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:120199198>.
- VIGNOLINI, S., RUDALL, P. J., ROWLAND, A., REED, A., MOYROUD, E., FADEN, R. B., BAUMBERG, J. J., GLOVER, B. J. a STEINER, U. (2012). Pointillist structural color in pollia fruit. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **109**, 15712 – 15715. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:3246541>.
- VOELZ, D. (2011). *Computational Fourier Optics: A matlab tutorial*. SPIE Press, Bellingham, Washington.
- ČERNÝ, R. a POKORNÝ, M. (2024). *Základy matematické analýzy pro studenty fyziky 4*. Matfyzpress. ISBN 978-80-7378-509-3.
- ČIHÁK, P. (2003). *Matematická analýza pro fyziky V*. Matfyzpress, Praha. ISBN 80-86732-12-6.

Seznam obrázků

1.1	Odrazy paprsků od rozhraní jednoduché vrstvy	5
1.2	Srovnání metod pro jednoduchou vrstvu s parametry $d = 300$ nm, $n = 1,3$ pro okno spektra o vlnových délkách 200 – 1000 nm. Funkce metody Matp zcela překrývá funkci metody Fabry.	8
2.1	Odrazivost systému dvou vrstev o tloušťkách $d_1=200$ nm, $d_2=300$ nm a indexech lomu $n_1=1,9$ a $n_2=1,7$ vypočtená čtyřmi metodami. Je zřetelné, že metoda Born na základě srovnání s referenční Matp hodnotu minim nadhodnocuje a hodnotu maxim podhodnocuje.	14
2.2	Odrazivost dvojně vrstvy vypočtená čtyřmi různými metodami o parametrech $d_1=100$ nm, $d_2=100$ nm, $n_1=3$, $n_2=2$. V grafu je zřetelný nesoulad všech metod.	15
2.3	Graf odrazivost dvojně vrstvy o parametrech $d_1=70$ nm, $d_2=200$ nm, $n_1=1,3$ a $n_2=1,4$. Metoda FTn oproti ostatním metodám příliš zdůrazňuje červenou část spektra, modrou naopak podhodnocuje.	16
2.4	Graf odrazivost dvojně vrstvy o parametrech $d_1=100$ nm, $d_2=300$ nm, $n_1=1,5$ a $n_2=2,5$. Jedná se o případ odchýlení FTn i FTdn metody od metod Born a Matp mezi hodnotami 500 – 800 nm vlnové délky.	17
2.5	Grafické zobrazení odchylek metod FTn, FTdn, Born a BornG od referenční metody Matp v závislosti na hodnotách indexů lomu dvojrstvy pro různé kombinace tlouštěk vrstev.	18
2.6	Chybová funkce variant metod FTnN, FTdnN a BornGN pro tloušťky vrstev $d_1 = 200$ nm, $d_2 = 300$ nm.	20
3.1	Srovnání průměrných numerických řešení odrazivosti systému 10 dvojrstev s parametry $d_1 = (1000 + 300 N(0,1))$ nm, $d_2 = 100$ nm, $n_1 = 1,3$ a $n_2 = 1$ spočtenými sedmi metodami.	26
3.2	Odrazivost pravidelné varianty multivrstvy s parametry $n_1 = 1,3$ a $n_2 = 1$, $d_1 = (1000 + 300\sqrt{2/\pi})$ nm, $d_2 = 100$ nm.	27
3.3	Srovnání výsledků odrazivosti multivrstvy ($n_1 = 1,3$ a $n_2 = 1$) s nahodilou a s pravidelnou tloušťkou tenkých vzduchových mezer.	28
A.1	Značení intenzit na rozhraních vzdálených od sebe na tloušťku vrstvy d pro účel odvození matice přechodu.	37

Seznam zkratek použitých metod

Fabry	použití Airyho funkce
Matp	metoda matice přechodu
Born	aproximace odrazu 1. řádu
BornT	metoda Born bez transmisních koeficientů
BornG	metoda Born se započítáním geometrické, ne optické dráhy
BornGN	Born se započítáním geometrické dráhy přenásobené střední hodnotou indexu lomu
FTn	Fourierova transformace lokálně přeškálovaného průběhu indexu lomu
FTnN	Fourierova transformace průběhu indexu lomu globálně přeškálovaného střední hodnotou indexu lomu
FTdn	Fourierova transformace derivace lokálně přeškálovaného průběhu indexu lomu
FTdnN	Fourierova transformace derivace průběhu indexu lomu globálně přeškálovaného střední hodnotou indexu lomu

A. Přílohy

A.1 Odrazivost nepolarizovaného světla

Optická odrazivost povrchu, také nazývána výkonový koeficient odrazu, je zavedena jako podíl intenzity dopadající vlny I_i a intenzity vlny odražené I_r . Tomu pro monochromatickou vlnu odpovídá podíl kvadrátů amplitudy elektrické intenzity odražené a dopadající vlny a také kvadrát absolutní hodnoty koeficientu odrazu (A.16)

$$R = \frac{|E_r|^2}{|E_i|^2} = |r|^2. \quad (\text{A.1})$$

Kvadrát je vzhledem ke komplexní symbolice elektrické intenzity uvažován jako součin výrazu s výrazem k němu komplexně sdruženým.

Nepolarizované světlo, kterým je i dopadající sluneční záření, můžeme uvažovat za směs dvou, stejnou měrou zastoupených, polarizovaných složek: složky TE vlny $E_{\perp,i}$ (vektor elektrické intenzity kmitá kolmo k rovině dopadu) a složky TM vlny $E_{\parallel,i}$ (vektor elektrické intenzity kmitá v rovině dopadu)

$$|E_{0,i}| := |E_{\perp,i}| = |E_{\parallel,i}|. \quad (\text{A.2})$$

Výsledná odrazivost je pak rovna průměru odrazivosti od obou složek, neboť pro odražené vlny TE a TM složek $E_{\perp,r}$, $E_{\parallel,r}$ platí

$$R = \frac{1}{2} \left(\frac{|E_{\perp,r}|^2}{|E_{0,i}|^2} + \frac{|E_{\parallel,r}|^2}{|E_{0,i}|^2} \right) = \frac{1}{2} (R_{\perp} + R_{\parallel}). \quad (\text{A.3})$$

Pokud navíc uvažujeme pouze kolmo dopadající světlo ($\theta = 0$), z Fresnelových vzorců (A.18), (A.20) a vztahu (A.1) je pak patrná rovnost

$$R_{\perp} = R_{\parallel} = R. \quad (\text{A.4})$$

Pro nepolarizované a kolmo dopadající světlo proto není třeba počítat příspěvek TE i TM vlny, pro výpočet celkové odrazivosti postačí pouze jeden z nich.

A.2 Matice přenosu

Každou interakci paprsků s j -tým rozhraním v optickém systému vrstev můžeme popsat maticí přenosu M_j (Hecht, 2017), která je odvozená z hraničních podmínek pro elektrickou intenzitu a magnetickou indukci vyplývajících z Maxwellových rovnic. Jedná se o tvrzení o spojitosti tečné složky elektrické intenzity \mathbf{E} a o spojitosti normálových složek magnetické indukce \mathbf{B} při průchodu rozhraním. Každý vektor můžeme rozložit na příspěvky dvou na sebe kolmých směrů – v případě elektrické intenzity je označujeme jako TE a TM vlnu. V případě jediného rozhraní, na který paprsek dopadá pod úhlem θ , mají hraniční podmínky pro TE vlnu (kmitající v rovině kolmo na rozhraní) tvar (Malý, 2020)

$$E_0^{\perp} + E_r^{\perp} = E_t^{\perp}, \quad (\text{A.5})$$

$$B_0^\perp \cos \theta - B_r^\perp \cos \theta = B_t^\perp \cos \theta_t \quad (\text{A.6})$$

Indexy $0, r, t$ značí dopadající, odraženou a procházející vlnu. V případě, kdy bychom rádi pracovali pouze s hodnotami elektrické intenzity, protože hodnoty magnetických indukcí nepotřebujeme, můžeme použít vztah mezi magnetickou indukcí a elektrickou intenzitou pro nemagnetické prostředí (Malý, 2020)

$$E = \frac{c}{n} B \quad (\text{A.7})$$

a upravit rovnici (A.6) do tvaru

$$n_1 E_0^\perp \cos \theta - n_1 E_r^\perp \cos \theta = n_2 E_t^\perp \cos \theta_t. \quad (\text{A.8})$$

V případě TM vlny se role B a E v rovnicích (A.5) a (A.6) prohodí. Prozatím však dále pracujeme pouze s TE vlnou.

Obecně pro j -té rozhraní v systému několika vrstev bude třeba zahrnout rozdíl ve fázi elektrické intenzity vzniklý poté, co vlna urazí vzdálenost d_j ve vrstvě, než se dostane k uvažovanému rozhraní (viz obrázek A.1). Zároveň se ale pro případ kolmého dopadu situace zjednoduší absencí kosinů. Naše podmínky na rozhraní tak dostávají tvar

$$E_{(j-1)+} e^{ik_0 n_{j-1} d_{j-1}} + E_{(j-1)-} e^{-ik_0 n_{j-1} d_{j-1}} = E_{j+} + E_{j-} \quad (\text{A.9})$$

a

$$n_{(j-1)} (E_{(j-1)+} e^{ik_0 n_{j-1} d_{j-1}} - E_{(j-1)-} e^{-ik_0 n_{j-1} d_{j-1}}) = n_j (E_{j+} - E_{j-}). \quad (\text{A.10})$$

Po zavedení dvou vektorů, vektoru tvořeného dopadající a odraženou intenzitou $E_{(j-1)+}$, $E_{(j-1)-}$ a vektoru obsahující intenzitu procházející vlny E_{j+} a intenzitu vlny dopadající na rozhraní z opačné strany E_{j-} , můžeme matici přechodu M_j definovat jako

$$\begin{pmatrix} E_{j+} \\ E_{j-} \end{pmatrix} = M_j \begin{pmatrix} E_{(j-1)+} \\ E_{(j-1)-} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.11})$$

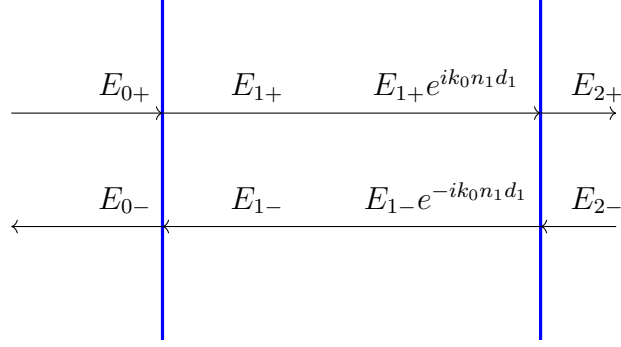
Jednotlivé členy matice přitom získáme sečtením nebo odečtením rovnic (A.9), (A.10) a několika drobnými úpravami:

$$M_j = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (1 + \frac{n_{j-1}}{n_j}) \exp(i2\pi d_j \frac{n_j}{\lambda}) & (1 - \frac{n_{j-1}}{n_j}) \exp(-i2\pi d_j \frac{n_j}{\lambda}) \\ (1 - \frac{n_{j-1}}{n_j}) \exp(i2\pi d_j \frac{n_j}{\lambda}) & (1 + \frac{n_{j-1}}{n_j}) \exp(-i2\pi d_j \frac{n_j}{\lambda}) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.12})$$

Takto odvozená matice přechodu je po transpozici ve shodě s tvarem (Smith a Houde-Walter, 1995)

$$A_j = M_j^T = \frac{1}{2\rho_j} \begin{pmatrix} (\rho_j + \frac{\alpha_{j-1}}{\alpha_j}) \exp(\delta_j) & (\rho_j - \frac{\alpha_{j-1}}{\alpha_j}) \exp(\delta_j) \\ (\rho_j - \frac{\alpha_{j-1}}{\alpha_j}) \exp(-\delta_j) & (\rho_j + \frac{\alpha_{j-1}}{\alpha_j}) \exp(-\delta_j) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.13})$$

pokud dosadíme $\rho_j=1$, odpovídající případu TE vlny, $\delta_j = in_j k_0 d_j$ a $\alpha_j = in_j k_0$. Pro případ TM vlny stačí dosadit $\rho_j = n_j^2/n_{j-1}$.



Obrázek A.1: Značení intenzit na rozhraních vzdálených od sebe na tloušťku vrstvy d pro účel odvození matice přechodu.

Vynásobením všech matic příslušející rozhraním vyskytujících se v systému o N vrstvách pak získáváme celkovou matici přechodu $M = M_N M_{N-1} \dots M_2 M_1$. Když navíc neuvažujeme, že by na systém dopadalo záření i z druhé strany ($E_{N-} = 0$), získáme jednoduchý vztah pro koeficient odrazivosti sestávající z prvků inverzní výsledné matice

$$r = \frac{E_{0-}}{E_{0+}} = \frac{(M^{-1})_{21}}{(M^{-1})_{11}}. \quad (\text{A.14})$$

A.3 Bornova aproximace odrazu 1.řádu

Mějme elektromagnetické záření ve formě rovinné vlny s amplitudou E_0 , úhlovou frekvencí $\omega = 2\pi/f$, fází δ a charakterizovanou vlnovým vektorem \vec{k} mající v čase t tvar

$$\vec{E} = E_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t + \delta)}. \quad (\text{A.15})$$

Bornovou aproximací pak nazveme aproximaci pouze jednoho vnitřního odrazu při průchodu vlny v systému vrstev. Vlna se na každém rozhraní dvou prostředí o různém indexu lomu částečně odrazí, a rozdělí se tak na procházející a odraženou vlnu. Odražená vlna zpětně prochází látkou, její intenzita se snižuje kvůli transmisním ztrátám, ale už neuvažujeme její další odraz.

Hodnotu intenzity odražené vlny od rozhraní a ztrátu intenzity při průchodu rozhraním popisují koeficienty odrazu a transmisní koeficienty, které jsou podílem velikosti odražené E_r , resp. průchozí intenzity E_t a intenzity počáteční vlny E_i

$$r = \frac{E_r}{E_i}, \quad (\text{A.16})$$

$$t = \frac{E_t}{E_i}, \quad (\text{A.17})$$

kteří jsou dány Fresnelovými vzorci.

Fresnelovy vzorce mají různé tvary pro odlišně polarizované světlo. Pro TE vlnu (jejíž elektrická intenzita kmitá v rovině kolmé k rovině dopadu) mají tvar (Hecht, 2017)

$$r_{\perp it} = \frac{n_i \cos \theta_i - n_t \cos \theta_t}{n_i \cos \theta_i + n_t \cos \theta_t}, \quad (\text{A.18})$$

$$t_{\perp it} = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_i \cos \theta_i + n_t \cos \theta_t} \quad (\text{A.19})$$

a pro TM vlnu (jejíž elektrická intenzita kmitá v rovině dopadu) tvar (Hecht, 2017)

$$r_{\parallel it} = \frac{n_t \cos \theta_i - n_i \cos \theta_t}{n_i \cos \theta_t + n_t \cos \theta_i}, \quad (\text{A.20})$$

$$t_{\parallel it} = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_i \cos \theta_t + n_t \cos \theta_i}. \quad (\text{A.21})$$

Ve vzorcích rozlišujeme index lomu prostředí, ze kterého světlo dopadá, n_i , a index lomu prostředí, do kterého se světelná vlna láme, n_t . Úhly θ_i a θ_t značí úhel dopadu na rozhraní a úhel, pod kterým se paprsek láme do prostředí o indexu lomu n_t .

Konkrétně pro kolmý dopad paprsků ($\theta_i = \theta_t = 0$) na vrstvu o indexu lomu n z okolí o indexu lomu $n_0 = 1$ a pro jejich průchod vrstvou do téhož okolí se situace jednotlivých koeficientů zjednoduší díky rovnostem

$$r_{\perp 01} = r_{\parallel 10} = \frac{1 - n}{1 + n}, \quad (\text{A.22})$$

$$r_{\perp 10} = r_{\parallel 01} = \frac{n - 1}{n + 1}, \quad (\text{A.23})$$

$$t_{\perp 01} = t_{\parallel 01} = \frac{2}{1 + n}, \quad (\text{A.24})$$

$$t_{\perp 10} = t_{\parallel 10} = \frac{2n}{n + 1}. \quad (\text{A.25})$$

Indexy 01 značí první rozhraní, kdy vzduch ($n_0 = 1$) je prostředí, ze kterého vlna dopadá (prostředí 0), indexy 10 pak druhé rozhraní, na které naopak vlna dopadá z prostředí o indexu $n_1 = n$ (prostředí 1).

Uvažujeme-li odraz na j -tém rozhraní ($j \in \mathbb{N}$), ztráty v intenzitě vlny budou zapříčiněny průchodem ($j - 1$) rozhraními, samotným odrazem na j -tém rozhraní a průchodem zpět

$$\begin{aligned} E_{r,j} &= t_{10}t_{21}\dots t_{(j-1)(j-2)}r_{j(j-1)}t_{(j-2)(j-1)}\dots t_{12}t_{01}E_0e^{2i\int_0^{x_j} k(x)dx} \\ &= C_jE_0e^{2i\int_0^{x_j} k(x)dx}. \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

Pokud bychom ve výpočtu brali pouze geometrickou dráhu bez započítání změny velikosti vlnového čísla $k(x) = 2\pi n(x)/\lambda$ kvůli závislosti na souřadnici x , stačilo by za něho v monochromatickém případě dosadit konstantu $k = 2\pi n_0/\lambda = k_0$.

Nyní známe hodnoty intenzity vln odražených od jednotlivých rozhraní. Jejich sečtením získáváme hodnotu elektrické intenzity výsledné vlny

$$E_r(\lambda) = \sum_{j=1}^{N+1} E_{r,j}, \quad (\text{A.27})$$

kde N odpovídá počtu vrstev a $(N + 1)$ počtu rozhraní.

A.4 Fourierova transformace indexu lomu a jeho derivace

Fourierova transformace funkce $f(x)$ zavedená předpisem

$$\mathcal{F}(f)(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-i2\pi x\xi} dx \quad (\text{A.28})$$

transformuje funkci $f(x)$ do prostoru proměnné ξ . Vzhledem k velmi častému uplatnění Fourierovy transformace (zkr. FT) v časových signálech je prostor vstupní funkce označován jako časová oblast a prostor výsledné funkce jako frekvenční oblast.

Výše uvedený integrál, a případně k němu inverzní operace (zpětná Fourierova transformace), je možný zavést např. na Schwartzově prostoru nebo za určitých podmínek na prostoru L_1 či L_2 (Černý a Pokorný, 2024). Vyplývá z něho i několik užitečných vlastností: především lineární kombinace Fourierovy transformace (vyplývající přímo z linearit integrálu)

$$\mathcal{F}(\alpha f + \beta g)(\xi) = \alpha \mathcal{F}(f) + \beta \mathcal{F}(g), \quad (\text{A.29})$$

posunutí signálu

$$\mathcal{F}(f(x - z))(\xi) = e^{-i2\pi z\xi} \mathcal{F}(f)(\xi), \quad (\text{A.30})$$

škálování signálu

$$\mathcal{F}(f(\epsilon x))(\xi) = \frac{1}{\epsilon} \mathcal{F}(f(x))\left(\frac{\xi}{\epsilon}\right), \quad (\text{A.31})$$

a vzorec pro výpočet Fourierovy transformace derivace funkce (Černý a Pokorný, 2024)

$$\mathcal{F}\left(\frac{d}{dx}f(x)\right)(\xi) = i2\pi\xi\mathcal{F}(f)(\xi). \quad (\text{A.32})$$

Tyto vlastnosti jsou zapsané pro jednodimenzionální případ, pro $z \in \mathbb{R}$ a $\epsilon \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$.

Průběh indexu lomu napříč systémem N vrstev ve směru souřadnicové osy x můžeme zavést jako součet obdélníkových funkcí

$$n(x) = \begin{cases} n_1, & x \in (x_1, x_2) \\ n_2, & x \in (x_2, x_3) \\ \dots & \\ n_N, & x \in (x_N, x_{N+1}) \\ n_0, & x \notin (x_1, x_2) \wedge (x_2, x_3) \wedge \dots \wedge (x_N, x_{N+1}). \end{cases} \quad (\text{A.33})$$

Obdélníkové funkci odpovídá přeškálovaná charakteristická funkce určitého intervalu (mimo interval je rovna nule, na intervalu rovna jedné), jejíž Fourierova transformace na zmíněných prostorech určitě existuje

$$\mathcal{F}\left(\chi_{[x_1, x_2]}\right)(\xi) = \frac{1}{-i2\pi\xi} \left(e^{-i\pi x_2\xi} - e^{-i\pi x_1\xi}\right). \quad (\text{A.34})$$

Fourierova transformace funkce $n(x)$ ani FT derivace této funkce ale navzdory vlastnostem (A.29) – (A.32) do prostoru funkcí nespádá. Všechny vlastnosti

(A.29) – (A.32) jsou však dobře definované v případě rozšíření definice Fourierovy transformace do prostoru distribucí a protože $n(x) \in L^\infty$, můžeme $n(x)$ uvažovat jako temperovanou distribuci.

Pro temperované distribuce $T \in S'$ je pak Fourierova transformace definovaná jako (Čihák, 2003)

$$\langle \mathcal{F}(T), \varphi \rangle := \langle T, \mathcal{F}(\varphi) \rangle \quad (\text{A.35})$$

pro všechny testovací funkce φ ze Schwartzova prostoru.

Díky linearitě (A.29) můžeme počítat Fourierovu transformaci jako

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(T_{n(x)}) &= \mathcal{F}(T_{n_0}) + \mathcal{F}(T_{(n_1-n_0)\chi_{[x_1, x_2]}}) \\ &\quad + \mathcal{F}(T_{(n_2-n_0)\chi_{[x_2, x_3]}}) + \dots + \mathcal{F}(T_{(n_N-n_0)\chi_{[x_N, x_{N+1}]}}), \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

přičemž pro Fourierovu transformaci distribuce přiřazené k přeškálované charakteristické funkci ($a \in \mathbb{R}$) platí

$$\mathcal{F}(T_{a\chi}) = T_{\mathcal{F}(a\chi)}. \quad (\text{A.37})$$

Fourierova transformace konstanty ($C \in \mathbb{R}$) odpovídá delta distribuci

$$\mathcal{F}(T_C) = C\delta(\xi) \quad (\text{A.38})$$

a jako analogii ke vztahu (A.32) pro FT derivace píšeme v případě temperovaných distribucí

$$\mathcal{F}\left(\frac{d}{dx}T\right) = i2\pi\xi\mathcal{F}(T). \quad (\text{A.39})$$

Kombinací vztah (A.39) se vztahy (A.37) a (A.34) získáme z FT derivace charakteristické funkce distribuci $T_{-(e^{-i\pi x_2\xi} - e^{-i\pi x_1\xi})}$. Výsledkem Fourierovy transformace $T_{n(x)}$ (A.40) pak po zahrnutí vzorce (A.38) bude

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(T_{n(x)}) &= n_0\delta(\xi) + T_{\frac{(n_1-n_0)}{-i2\pi\xi}}(e^{-i\pi x_2\xi} - e^{-i\pi x_1\xi}) \\ &\quad + T_{\frac{(n_2-n_0)}{-i2\pi\xi}}(e^{-i\pi x_3\xi} - e^{-i\pi x_2\xi}) + \dots + T_{\frac{(n_N-n_0)}{-i2\pi\xi}}(e^{-i\pi x_N\xi} - e^{-i\pi x_{N+1}\xi}) \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

a Fourierova transformace její derivace dle (A.35) vyjde jako

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\left(T_{\frac{d}{dx}n(x)}\right) &= T_{(n_0-n_1)}(e^{-i\pi x_2\xi} - e^{-i\pi x_1\xi}) \\ &\quad + T_{(n_0-n_2)}(e^{-i\pi x_3\xi} - e^{-i\pi x_2\xi}) + \dots + T_{(n_0-n_N)}(e^{-i\pi x_N\xi} - e^{-i\pi x_{N+1}\xi}). \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

Pro jednoduchost v této práci píšeme výsledky typu (A.40), resp (A.41) jako součet delta distribuce s funkcí, resp. jako funkci, či dokonce s podmínkou $\xi \neq 0$ bez delta distribuce, a odkazujeme se na vzorec (A.32) místo na korektnější variantu (A.39).