

Jochen Brunk

**Optimale Beschichtung
von Laserspiegeln zur
Erzeugung ultrakurzer
Laserpulse**



Jochen Brunk

**Optimale Beschichtung von Laserspiegeln
zur Erzeugung ultrakurzer Laserpulse**

Optimale Beschichtung von Laserspiegeln zur Erzeugung ultrakurzer Laserpulse

von
Jochen Brunk



universitätsverlag karlsruhe

Dissertation, Universität Karlsruhe (TH)
Fakultät für Mathematik, 2006

Impressum

Universitätsverlag Karlsruhe
c/o Universitätsbibliothek
Straße am Forum 2
D-76131 Karlsruhe
www.uvka.de



Dieses Werk ist unter folgender Creative Commons-Lizenz
lizenziert: <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/2.0/de/>

Universitätsverlag Karlsruhe 2006
Print on Demand

ISBN-13: 978-3-86644-078-4
ISBN-10: 3-86644-078-2

Optimale Beschichtung von Laserspiegeln zur Erzeugung ultrakurzer Laserpulse

Zur Erlangung des akademischen
Grades eines

**Doktors der
Naturwissenschaften**

von der Fakultät für Mathematik der
Universität Karlsruhe
genehmigte

Dissertation

von

Dipl.-Math. Jochen Brunk
aus Karlsruhe

Tag der mündlichen Prüfung:

26. Juli 2006

Referent:

Prof. Dr. Andreas Rieder

Korreferent:

Prof. Dr. Andreas Kirsch

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Angestellter am Institut für Praktische Mathematik der Universität Karlsruhe.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. Andreas Rieder, der die Betreuung der Arbeit übernommen hat und mir durch seinen Kontakt zum Institut für Hochfrequenztechnik die Möglichkeit gab, dieses interessante Thema zu bearbeiten. Während der gesamten Zeit hatte er immer ein offenes Ohr für meine Fragen und seine zahlreichen Anregungen gaben mir immer wieder neue Impulse bei der Anfertigung der Arbeit.

Bedanken möchte ich mich auch bei Herrn Prof. Dr. Uwe Morgner vom Institut für Quantenoptik der Universität Hannover, der während seiner Zeit am Institut für Hochfrequenztechnik und danach die Arbeit begleitet und mir die physikalischen Grundlagen und Probleme näher gebracht hat. Er gab mir außerdem die Möglichkeit zu zwei Vorträgen in Heidelberg und Hannover, bei denen ich in der Diskussion mit den Experten vor Ort wichtige neue Erkenntnisse sammeln konnte.

Mein Dank gilt ferner Herrn Prof. Dr. Andreas Kirsch für die freundliche Übernahme des Korreferats sowie Frau Dr. Natalia Grinberg, deren Wissen und Erfahrung über inverse Streuprobleme mir das tiefere Verständnis der Zusammenhänge erleichtert haben.

Schließlich möchte ich meinem Kollegen Dr. Rainer Keppler danken, der das Manuskript Korrektur gelesen hat und dessen Anregungen zum Gelingen der Arbeit beigetragen haben.

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	i
Einleitung	1
1 Physikalische Grundlagen	3
1.1 Dispersion und Reflektivität	3
1.2 Ultrakurzlaser und doppelt durchgestimmte Spiegel	5
2 Mathematische Modellierung	9
2.1 Die Maxwell-Gleichungen	9
2.1.1 Die Helmholtz-Gleichung	10
2.1.2 Die Schrödinger-Gleichung	10
2.2 Der Spiegel-Design-Algorithmus	12
3 Mathematische Analyse des Spiegel-Design-Problems	17
3.1 Das direkte Problem	17
3.1.1 Die Jost-Lösungen f_p und f_m	18
3.1.1.1 Eigenschaften der Jost-Lösungen	19
3.1.1.1.1 Implizite Darstellung von f_p	22
3.1.1.1.2 Implizite Darstellung von f_m	26
3.1.1.1.3 Holomorphie der Jost-Lösungen	27
3.1.1.1.4 Zusammenfassung der Ergebnisse	31
3.1.1.2 Explizite Darstellung der Jost-Lösungen	32
3.1.1.2.1 Definition der Funktionen K_p und K_m	32
3.1.1.2.2 Integralgleichungen für K_p und K_m	34
3.1.1.2.3 Existenz und Eindeutigkeit von K_p und K_m	37
3.1.1.2.4 Zusammenfassung der Ergebnisse	44
3.1.2 Die Streumatrix und ihre Eigenschaften	45
3.1.3 Das Charakterisierungsproblem	51

3.2	Das inverse Problem	56
3.2.1	Herleitung der Marchenko-Integralgleichungen	56
3.2.2	Eindeutige Lösbarkeit der Marchenko-Integralgleichungen	59
3.2.3	Lösung des inversen Problems	63
4	Numerische Lösung des Spiegel-Design-Problems	65
4.1	Die explizite Lösung der Marchenko-Integralgleichung	65
4.1.1	Die Modellierung von r	73
4.1.2	Die Berechnung von q	80
4.2	Die numerische Lösung der Marchenko-Integralgleichung	85
4.2.1	Die Leapfrogging-Methode	85
4.2.2	Alternative Modellierung von r	91
4.3	Die Berechnung des Brechungsindex n	92
	Zusammenfassung	97
	Literaturverzeichnis	101

Einleitung

Laser spielen in der heutigen Zeit eine bedeutende Rolle in zahlreichen Bereichen des alltäglichen Lebens und sind wesentliches Bauelement verschiedener technischer Anwendungen. Neben den kontinuierlich Licht emittierenden Lasern werden dabei insbesondere auch gepulste Laser verwendet, die Energie auf eine sehr kurze Zeitdauer von wenigen Femtosekunden komprimieren und das Licht in einzelnen Pulsen nacheinander emittieren. In der Materialbearbeitung, bei der optischen Kohärenz-Tomographie in der Augenheilkunde oder in der Präzisions-Laserspektroskopie ist der Pulslaser ohne Konkurrenz.

Die Erzeugung ultrakurzer Laserpulse im Femtosekundenbereich beruht im wesentlichen auf der Erfindung phasenkorrigierender (durchgestimmter) Laserspiegel von Krausz und Szipöcs Anfang der neunziger Jahre ([51]). Das Konzept basierte auf reiner Computeroptimierung und war lange Zeit sehr erfolgreich. Mitte der neunziger Jahre wurde das Konzept von Kärtner, Matuschek und Keller erstmals auf ein analytisches Fundament gestellt und deutlich weiterentwickelt zum doppelt durchgestimmten Spiegel ([36]).

Ultrakurze Laserpulse werden heutzutage mit Hilfe von speziellen Versuchsanordnungen erzeugt, deren wesentliches Bauelement doppelt durchgestimmte Spiegel sind. Die geeignete Beschichtung der Spiegel sorgt dafür, dass die gewünschten Pulse entstehen können. Forschungsgruppen der ehemaligen Karlsruher Universitätsangehörigen Prof. Franz Kärtner und Prof. Uwe Morgner arbeiten intensiv an diesem Problem. Ihre Ergebnisse haben dazu geführt, daß sich die Qualität der Laserpulse in letzter Zeit weiter nachhaltig verbessert hat.

Aktuell wird zur Bestimmung der optimalen Beschichtung ein diskretes Modell für die doppelt durchgestimmten Spiegel verwendet. Das ideale Spiegeldesign ergibt sich dann als Lösung eines nichtlinearen Minimierungsproblems, wobei die hierfür erforderliche Startbeschichtung aus bereits vorhandenen “guten“ Spiegeln bzw. aus dem sogenannten Chirp-Gesetz gewonnen wird ([34]).

In jüngster Zeit ist man mit dieser Vorgehensweise bei der Entwicklung verbesserter Anordnungen an Grenzen gestoßen, denn die Vorwärtsrechnung über eine Minimierungsaufgabe führt in der Regel nur zu lokalen Extremstellen; außerdem treten oftmals unerwünschte Nebeneffekte wie Oszillationen in der Phase auf, die den praktischen Nutzen der Spiegel einschränken. Schließlich gibt es bisher kein allgemeines, mathematisches Verfahren, das die relevanten physikalischen Größen in einen direkten funktionellen Zusammenhang bringt und zu beliebig vorgegebenen Spektraleigenschaften die zugehörige Spiegelbeschichtung berechnet, also das Spiegel-Design-Problem löst.

Diese Lücken zu schließen ist das Ziel der vorliegenden Arbeit. Ausgehend von einem mathematisch-physikalisch motivierten Modell wird ein Algorithmus vorgestellt, der zu den Spektraldaten als Eingabegröße die zugehörige Beschichtung des Spiegels als Ausgabegröße liefert. Die Praxisrelevanz der Ergebnisse ist bei der Modellbildung und anschließenden Auswahl des Lösungsverfahrens ein wichtiges Leitmotiv. Der hier präsentierte Algorithmus soll den Physikern und Ingenieuren einerseits helfen, ohne zeitaufwendige Optimierungen ihre bisherigen Ergebnisse zu verbessern und die Forschung auf diesem Gebiet ein Stück weiter voran zu bringen. Andererseits kann er ein theoretisches Fundament zur Ultrakurzlaserspektroskopie liefern und damit Antworten auf die Frage geben,

ob man mit der Technik der doppelt durchgestimmten Spiegel auf dem richtigen Weg ist oder ob andere Beschichtungsmethoden zukünftig erfolgsversprechender sind.

Schließlich gibt die Methode Einblick in die Vielfältigkeit möglicher Lösungen und kann auf diesem Weg neue Impulse für die Verbesserung und Konstruktion neuer Laserspiegel in beliebigen Versuchsanordnungen bringen.

Das erste Kapitel enthält eine Einführung in die Funktionsweise von Ultrakurzlasern und doppelt durchgestimmten Spiegeln. Es werden der Reflektionskoeffizient r und der Brechungsindex n als Kenngrößen für die Spektraleigenschaften des Spiegels und dessen zugehörige Beschichtung definiert. Die beiden Variablen sind Ein- und Ausgabegröße des vorgestellten Spiegel-Design-Algorithmuses.

Der Brechungsindex tritt als Koeffizientenfunktion in den Maxwell-Gleichungen auf, die im zweiten Kapitel als Ausgangspunkt für eine mathematisch-physikalisch motivierte Modellbildung eingeführt werden. Die anschließende Transformation des Modells auf die Form der eindimensionalen Schrödinger-Gleichung ermöglicht dann die Skizzierung der einzelnen Schritte des Spiegel-Design-Algorithmuses, dessen Kern die Lösung des inversen Problems für die Schrödinger-Gleichung ist. Hier tritt der gegebene Reflektionskoeffizient als Parameter einer speziellen Lösung auf, und der gesuchte Brechungsindex ergibt sich aus dem Potential q der Gleichung.

Die mathematische Analyse in Kapitel 3 bildet den theoretischen Rahmen zur Lösung des Spiegel-Design-Problems. Gesucht ist eine Abbildung, die jedem Reflektionskoeffizienten ein eindeutiges Potential und umgekehrt zuordnet. Dazu müssen zunächst die Mengen möglicher Reflektionskoeffizienten und Potentiale geeignet eingeschränkt werden.

Im ersten Teil wird eine Potential-Klasse definiert und daraus mit der Vorwärtsanalyse für die Schrödinger-Gleichung notwendige Bedingungen an den Reflektionskoeffizienten für das inverse Problem hergeleitet. Das Charakterisierungstheorem macht dann eine Aussage darüber, welche weiteren Bedingungen gestellt werden müssen, damit das inverse Problem eindeutig lösbar ist und die gewünschte umkehrbare Abbildung existiert.

Aus der Vorwärtsanalyse der Schrödinger-Gleichung ergeben sich außerdem wichtige analytische Eigenschaften von speziellen Lösungen, den sogenannten Jost-Lösungen. Mit deren Hilfe wird im zweiten Teil die Marchenko-Integralgleichung hergeleitet, die das inverse Problem vollständig charakterisiert und deren Lösung das gesuchte Potential liefert.

Die numerische Lösung des Spiegel-Design-Problems ist Gegenstand des vierten Kapitels. Für bestimmte Klassen von Reflektionskoeffizienten kann die Marchenko-Integralgleichung explizit gelöst werden. Im ersten Teil wird ein entsprechender Ansatz vorgestellt und daraus eine explizite Darstellung für das gesuchte Potential hergeleitet. Der zweite Abschnitt erläutert ein Verfahren zur numerischen Lösung der Marchenko-Gleichung. Für beide Methoden werden Beispielrechnungen mit Echtdateien gezeigt und deren Ergebnisse analysiert und bewertet.

Mit den berechneten Werten für das Potential wird im dritten Teil der ortsabhängige Brechungsindex bestimmt, der die gewünschte Spiegelbeschichtung charakterisiert.

Kapitel 1

Physikalische Grundlagen

1.1 Dispersion und Reflektivität

Laserpulse bestehen aus einer Überlagerung ebener Wellen unterschiedlicher Frequenzen. Die Pulslänge wird durch das Verhältnis der Phasengeschwindigkeiten der einzelnen Wellen bestimmt. Sie vergrößert sich durch Dispersion, wenn der Laserpuls ein Medium durchläuft.

Unter Dispersion versteht man das Auseinanderlaufen des Pulses innerhalb des Mediums aufgrund der unterschiedlichen Ausbreitungsgeschwindigkeiten seiner einzelnen Frequenzen. Die Dispersion oder Phasenverschiebung φ kann über den Brechungsindex n quantifiziert werden. Dieser kennzeichnet das Verhältnis zwischen der Phasengeschwindigkeit jeder Spektralkomponente des Laserpulses im Vakuum und seiner Phasengeschwindigkeit im Medium. Jedes Medium mit frequenzabhängigem Brechungsindex $n(\omega)$ produziert also eine Materialdispersion, die eine Auffächerung des Laserpulses verursacht. Im konkreten Fall eines homogenen, dispersiven Mediums der Länge L_m ergibt sich die Phasenverschiebung jeder Spektralkomponente in Abhängigkeit der Kreisfrequenz ω zu

$$\varphi(\omega) = \omega \cdot n(\omega) \cdot L_m / c_0$$

mit der Vakuum-Lichtgeschwindigkeit $c_0 = 3 \cdot 10^8 \frac{m}{s}$.

Die Dispersion der Phasengeschwindigkeit sorgt für ein "Verschmieren" des Lichtimpulses, der damit für hochauflösende Anwendungen unbrauchbar wird. Zur Erzeugung ultrakurzer Lichtimpulse sollte die Pulslänge möglichst kurz gehalten werden, d.h. auftretende Phasenverschiebungen müssen durch geeignete Techniken so kompensiert werden, daß alle Wellenlängen des erwünschten Spektrums an einer Auskopplungsstelle phasengleich eintreffen und damit das "Verschmieren" verhindert wird.

Jedem Laserpuls kann eine Zentralfrequenz ω_0 zugeordnet werden, deren Phasengeschwindigkeit als Gruppengeschwindigkeit des Laserpulses bezeichnet wird. Für praktische Berechnungen geht man nun davon aus, daß die Phasenverschiebung φ in einer Umgebung um ω_0 durch ihr k -tes Taylorpolynom approximierbar ist ([34]):

$$\varphi(\omega) = \sum_{n=0}^k \frac{1}{n!} \frac{d^n \varphi(\omega_0)}{d\omega^n} (\omega - \omega_0)^n = \sum_{n=0}^k \frac{1}{n!} D_n (\omega - \omega_0)^n. \quad (1.1)$$

Die Taylorkoeffizienten D_i , $i = 1, \dots, k$, werden dabei aus den experimentellen Daten des jeweiligen Versuchsaufbaus über ein lineares Ausgleichsproblem berechnet, wobei man in den Anwendungen üblicherweise mit $k \leq 6$ auskommt. Koeffizienten höherer Ordnung sind vernachlässigbar, da $|\omega - \omega_0| < 1$ für alle relevanten Frequenzen ω ist.

Die Zentralfrequenz ω_0 durchläuft das Medium mit der Gruppengeschwindigkeit $v_g(\omega_0)$, d.h. die Zeit $T_g(\omega_0)$, die der Puls benötigt, um das Ende des Mediums zu erreichen ist gegeben durch

$$T_g(\omega_0) = \varphi'(\omega_0) = \frac{L_m}{v_g(\omega_0)}.$$

Die Größe $T_g(\omega_0)$ wird als Gruppenverzögerung in der Zentralfrequenz bezeichnet. Sie ist frequenzabhängig und damit verantwortlich für das Auffächern des Laserpulses. Nach Gleichung (1.1) kann sie ebenfalls als Taylorpolynom um w_0 dargestellt werden:

$$T_g(\omega) = \frac{d\varphi(\omega)}{d\omega} = \sum_{n=0}^{k-1} \frac{1}{n!} D_{n+1}(\omega - \omega_0)^n. \quad (1.2)$$

Der dispersive Charakter des Mediums ist nun festgelegt durch die Änderung der Gruppenverzögerung mit der Kreisfrequenz, d.h. die (Material-) Dispersion des Systems ist gegeben durch die Ableitung von (1.2)

$$GDD(\omega) = \frac{d^2\varphi(\omega)}{d\omega^2} = \sum_{n=0}^{k-2} \frac{1}{n!} D_{n+2}(\omega - \omega_0)^n. \quad (1.3)$$

GDD heißt Gruppenverzögerungsdispersion (group delay dispersion) oder als zweite Ableitung der Phase nach der Frequenz auch Dispersion 2. Ordnung. Entsprechend lassen sich die Terme höherer Dispersionsordnungen durch weitere Ableitungen von (1.3) gewinnen:

$$\begin{aligned} TOD(\omega) &= \frac{d^3\varphi(\omega)}{d\omega^3}, \quad (\text{third order dispersion}), \\ FOD(\omega) &= \frac{d^4\varphi(\omega)}{d\omega^4}, \quad (\text{fourth order dispersion}). \end{aligned}$$

Bei der Erzeugung ultrakurzer Laserpulse kommt es also vor allem darauf an, die auftretenden Dispersionseffekte zu kompensieren und damit die Pulslänge klein zu halten. Die meisten Medien weisen eine positive GDD auf, d.h. die größeren Frequenzen bzw. kleineren Wellenlängen des Pulsspektrums benötigen mehr Zeit für den Materialdurchlauf als die kleineren Frequenzen bzw. größeren Wellenlängen und bleiben hinter diesen zurück. Man spricht in diesem Fall von einem Chirp des Laserpulses.

Zur Dispersionskompensation muß dieser Laufzeitunterschied wieder ausgeglichen werden. Man läßt dazu den aufgefächerten Laserpuls an sogenannten gechirpten oder durchgestimmten Spiegeln reflektieren. Diese müssen für jede relevante Frequenz ω gerade die negative $GDD(\omega)$ erzeugen, d.h. größere Wellenlängen dürfen erst tiefer im Spiegel reflektiert werden als kleinere.

Die Kürze des Pulses wird letztlich durch die Größe des Pulsspektrums bestimmt. Je größer es ist umso kürzer wird der Puls, aber umso mehr Einfluß haben Dispersionseffekte höherer Ordnung. Es reicht daher nicht aus, die GDD nur auf kleinen Bereichen um die

Zentralfrequenz zu kontrollieren. Die Spiegel müssen vielmehr Dispersionseffekte über eine enorme spektrale Bandbreite ausgleichen, was mit einigen Problemen verbunden ist.

Zur Quantifizierung der erwünschten spektralen Bandbreite des Pulses definiert man die Reflektivität $r_{\text{ampl}}(\omega)$. Sie hat Werte zwischen 0 und 1 und gibt den durch den Spiegel reflektierten Anteil der Frequenz ω an. Für Frequenzen ω aus dem Pulsspektrum ist also $r_{\text{ampl}}(\omega) \approx 1$, für alle anderen gilt $r_{\text{ampl}}(\omega) \approx 0$.

Die beiden Größen Reflektivität r_{ampl} und Phase φ bzw. deren 1. und 2. Ableitung charakterisieren die erwünschten Spektraleigenschaften eines Spiegels zur Dispersionskompensation vollständig. Mathematisch stellt man sie in Form des komplexen Reflektionskoeffizienten r dar:

$$r(\omega) = r_{\text{ampl}}(\omega) \cdot e^{i\varphi(\omega)}. \quad (1.4)$$

Idealerweise sollen die zu konstruierenden Spiegel die Dispersion auf einer maximalen spektralen Bandbreite kompensieren. Die obigen Bemerkungen zeigen aber, daß hier ein Zielkonflikt auftritt. Ultrakurze Pulse bedeuten einen breiten spektralen Bandbereich, also $r_{\text{ampl}}(\omega) \approx 1$ für ω aus einem großen Intervall I , gleichzeitig aber auch Dispersionseffekte auf dem gesamten Bereich, die kompensiert werden müssen. In der Praxis werden dazu sogenannte doppelt durchgestimmte (doubled chirped) Spiegel verwendet, deren spezielle Beschichtung mit unterschiedlichen Materialien für die Dispersionskompensation sorgt. Ihre optischen Eigenschaften hängen von der Art der Materialien, sowie der Anzahl und Dicke der Schichten ab. Der genaue Aufbau dieser Spiegel wird in Abschnitt 1.2 erklärt.

Die Aufgabe der optimalen Beschichtung von Laserspiegeln zur Erzeugung ultrakurzer Laserpulse läßt sich somit als inverses Problem formulieren. Die Grundfrage lautet:

Wie müssen die Spiegel beschichtet werden, damit die resultierende Laseranordnung vorgegebene Spektraleigenschaften besitzt?

Die Spektraldaten sind über den komplexen Reflektionskoeffizient r festgelegt. Der Spiegelaufbau ist durch den ortsabhängigen Brechungsindex n charakterisiert. Dieser gibt an jeder Stelle z des Spiegels den Brechungsindex des dort plazierten Materials und damit dessen dispersive Eigenschaften an. Das inverse Problem lautet somit

Bestimme n zu gegebenem r .

1.2 Ultrakurzlaser und doppelt durchgestimmte Spiegel

Ein typischer Laseraufbau zur Erzeugung ultrakurzer Pulse ist in Abbildung 1.1 dargestellt ([47]). Der Laser emittiert ständig monochromatisches grünes Pumplicht, das auf ein Titan/Saphir-Laserkristall trifft, wo es durch Absorption in rotes Laserlicht, also in ein Spektrum niedrigeren Energieniveaus transformiert wird. Die einzelnen Wellenlängen dieses Spektrum laufen nun dispersiv auseinander, zuerst im Kristall und anschließend auf dem weiteren Weg durch das Umgebungsmedium bis zum Spiegel M_3 . Hier werden sie reflektiert und laufen über das Kristall zurück zum Spiegel M_2 . Dieser ist transmittierend für das von links kommende grüne Pumplicht und reflektierend für das von rechts

kommende rote Laserlicht. Dieses wird dort erneut reflektiert und trifft wiederum auf den Kristall und anschließend auf den Spiegel M_3 .

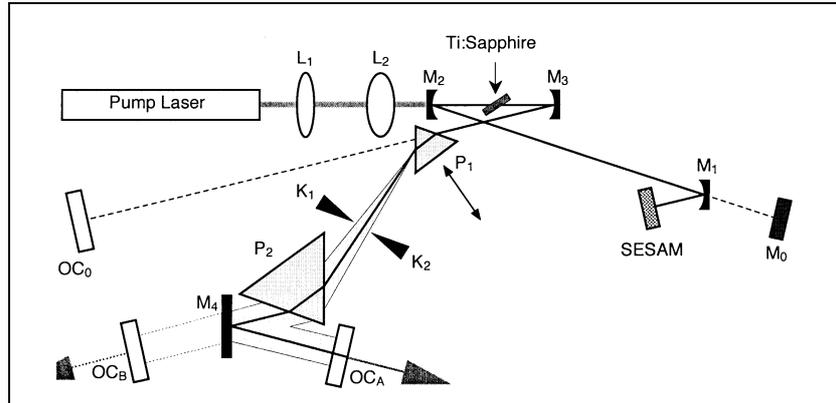


Abbildung 1.1: Schematischer Aufbau eines Lasers zur Erzeugung ultrakurzer Laserpulse (L : Teleskoplinsen, M : hochreflektierende Spiegel, OC : Auskopplungsspiegel). Die Elemente $OC_{0,B}$ und M_0 sind in dieser Anordnung nicht in Gebrauch.

Insgesamt erzeugt der Laseraufbau zu jeder Frequenz ω des Pulsspektrums eine Dispersion $GDD_K(\omega)$ aus dem Kristall und eine $GDD_U(\omega)$ aus dem Umgebungsmedium. Die anschließende mehrfache Reflexion des Laserlichts an den beschichteten Spiegeln hat das Ziel, diese Dispersion für jede relevante Frequenz zu kompensieren, d.h. die Summe aus der GDD_U aller Laufwege im Umgebungsmedium und der GDD_K des Kristalls muß gleich der negativen Summe der GDD aller Spiegelreflexionen sein. Das ständige Pumpen mit grünem Licht und die Hin- und Rückreflexionen an den Spiegeln M_2 und M_3 sorgen zudem für eine kontinuierliche Verstärkung des Laserlichts. Hat die Konstruktion den gewünschten Verstärkungsgrad erreicht, wird das Laserlicht über eine Prismensequenz P_1 und P_2 an der Stelle OC_A ausgekoppelt. Die Details und die genaue Funktionsweise des Laseraufbaus finden sich z.B. in [47]. Die in der Versuchsanordnung auftretenden Winkel können als klein angesehen und vernachlässigt werden, d.h. die Beschichtung eines Spiegels wird als eindimensionales Problem aufgefaßt.

In der Praxis (Abbildung 1.2) wählt man für die Beschichtung zwei feste Materialien mit unterschiedlichen Brechungsindizes $n_l < n_h$ und beschichtet die Spiegel abwechselnd mit beiden Materialien, beginnend mit dem niedrigbrechenden. Außerdem werden benachbarte Schichten jeweils zu einem Schichtpaar zusammengefaßt.

Bei einem einfach durchgestimmten (simple chirped) Spiegel wird nur die Dicke eines Schichtpaares erhöht (chirped), während das Größenverhältnis innerhalb des Schichtpaares unverändert bleibt. Damit wird erreicht, daß kürzere Wellenlängen im Spiegel früher reflektiert werden als längere, womit eine negative GDD erzeugt und die entstandene positive GDD kompensiert wird.

Leider stimmt diese Kompensation nur im Mittel mit den gewünschten Zielwert überein. Es treten unerwünschte Oszillationen in der Gruppenverzögerung auf (siehe Abbildung 1.3), was die Verwendung der einfach durchgestimmten Spiegel für ultrakurze Pulse unmöglich macht. Die Oszillationen resultieren aus der Interferenz von leichten Reflexionen im vorderen und starken Reflexionen im hinteren Bereich des Spiegels.

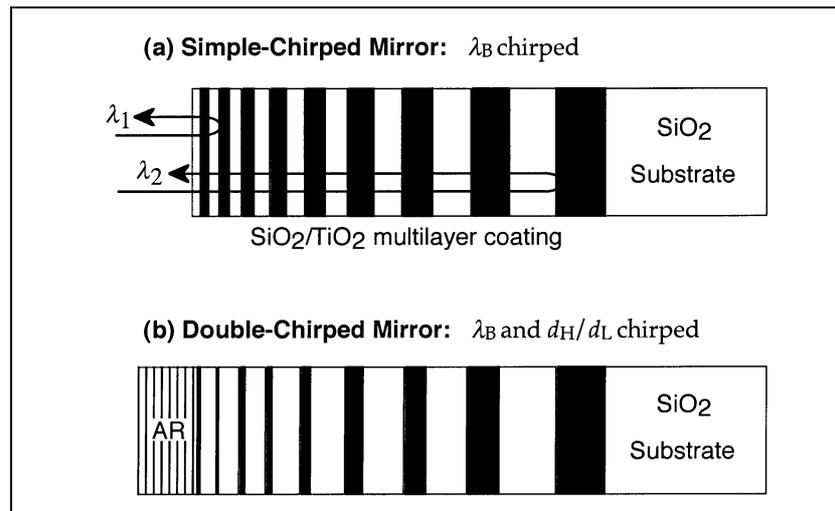


Abbildung 1.2: Schematischer Aufbau der einfach und doppelt durchgestimmten Spiegel. In einfach durchgestimmten Spiegeln wird nur die sogenannte Bragg-Wellenlänge λ_B erhöht (chirped), während bei doppelt durchgestimmten Spiegeln zusätzlich noch das Größenverhältnis d_h/d_l der einzelnen Schichtpaare verändert wird.

In doppelt durchgestimmten (double chirped) Spiegeln können diese Oszillationen reduziert werden, indem neben der absoluten Dicke eines Schichtpaares auch das Größenverhältnis innerhalb des Schichtpaares variiert, d.h. doppelt gechirpt, wird.

Diese Spiegel sind durch einen zwei- bis viergliedrigen Aufbau gekennzeichnet. Ganz vorne befindet sich das Breitband-AR-Coating (Breitband-Anti-Reflektions-Beschichtung), das für die Anpassung des optischen Gitters an das umgebende Medium sorgt. Das AR-Coating besitzt eine ähnliche Struktur wie der doppelt durchgestimmte Spiegel und ist das Ergebnis empirischer Untersuchungen; eine exakte Theorie existiert bislang noch nicht.

Es schließt sich der Doppel-Chirp-Bereich an, in dem Länge und Größenverhältnis der Schichten gleichzeitig gechirpt werden. Dies reduziert unerwünschte Oszillationen in der Gruppenverzögerung. Die optionalen Bereiche drei und vier bestehen zum einen aus dem Einfach-Chirp-Bereich, in dem nur die Länge der Schichten gechirpt wird, und einem sogenannten Viertel-Wellenlängen-Bereich. Die beiden letzten Teile bewirken die Breitbandreflektivität des Spiegels, die beiden vorderen sorgen für die Dispersionskompensation.

Ein Vergleich von einfach und doppelt durchgestimmten Spiegeln zeigt die wesentlich besseren Dispersionseigenschaften von letzteren, was allerdings auch eine Reduzierung der Reflektivitätsbandbreite bedeutet, wie Abbildung 1.3 veranschaulicht ([47]).

Prinzipiell ist es möglich, die auftretenden Oszillationen zu reduzieren, wenn man das Größenverhältnis der beiden Schichten im vorderen Spiegelbereich hinreichend langsam erhöht. Das geschieht jedoch auf Kosten einer ebenfalls reduzierten Bandbreite im Reflektivitätsbereich.

Oberste Priorität in der Praxis haben die exakten Dispersionseigenschaften des Spiegels in Form der Phase $\varphi(\omega)$ bzw. deren 1. und 2. Ableitung, so daß die doppelt durchgestimmten Spiegel nach derzeitigem Forschungsstand als einzig vernünftiges Bauteil zur Erzeugung ultrakurzer Laserpulse gelten.

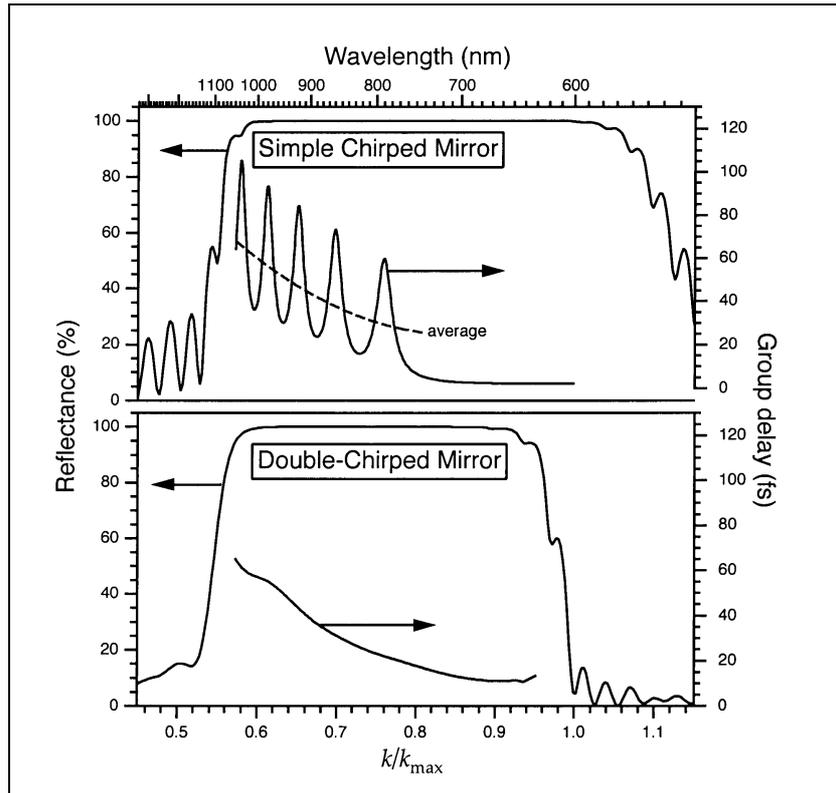


Abbildung 1.3: Vergleich der Spektraleigenschaften eines einfach und eines doppelt durchgestimmten Spiegels. Der einfach durchgestimmte weist einen breiteren Bereich hoher Reflektivität auf. Die Gruppenverzögerung zeigt aber starke Oszillationen. Diese werden beim doppelt durchgestimmten auf Kosten eines schmaleren Reflektivitätsbereichs kompensiert.

Die Struktur der doppelt durchgestimmten Spiegel legt es nahe, die Designfrage als diskretes Problem anzusehen. Die Spiegel bestehen aus einer endlichen Anzahl von Schichten und auch die möglichen Materialien, d.h. die Brechungsindizes sind auf wenige Werte begrenzt. Moderne Techniken erlauben es aber in zunehmendem Maß die Spiegel auch kontinuierlich zu beschichten. Dabei sind im Prinzip alle Werte zwischen zwei vorgegebenen Randwerten produzierbar.

Aus diesem Grund wird das Spiegeldesignproblem rein kontinuierlich betrachtet, was insbesondere für die Lösung des inversen Problems die Anwendbarkeit geeigneter mathematischer Methoden verbessert bzw. überhaupt erst ermöglicht. In dem stetigen Modell wird außerdem die Frequenz- bzw. Wellenlängenabhängigkeit des Brechungsindex n vernachlässigt. Aufgrund der angesprochenen technischen Möglichkeiten bedeutet das keine wesentliche Einschränkung für die praktische Umsetzung.

Kapitel 2

Mathematische Modellierung

2.1 Die Maxwell-Gleichungen

Optische Vielschichtstrukturen wie doppelt durchgestimmte Spiegel werden durch eine reduzierte Form der **Maxwell-Gleichungen** mathematisch beschrieben ([42],[46]):

$$\begin{aligned}\frac{dE}{dz}(z) &= -i\omega\mu_0 H(z), \\ \frac{dH}{dz}(z) &= -i\omega\varepsilon_0 n^2(z) E(z),\end{aligned}\tag{2.1}$$

mit den (ortsabhängigen) Amplitudenfunktionen des elektrischen und magnetischen Feldes $E(z)$ und $H(z)$ an der Position z , sowie der Permeabilität $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \frac{Vs}{Am}$ und der Permittivität $\varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \frac{As}{Vm}$ im Vakuum.

Der Brechungsindex n eines Mediums gibt das Verhältnis der Vakuum-Lichtgeschwindigkeit c_0 zur entsprechenden Ausbreitungsgeschwindigkeit c des Lichts im Medium an, d.h. es gilt $n \geq 1$. Bei einem ortsabhängigen Brechungsindex hängt die Ausbreitungsgeschwindigkeit c damit ebenfalls vom Ort ab.

Dem Modell (2.1) liegen die folgenden vereinfachenden Annahmen zugrunde:

- Die einzelnen Schichten werden als nichtabsorbierend und homogen vorausgesetzt, d.h. der Brechungsindex n ist eine reelle Größe.
- Das einfallende Licht trifft senkrecht auf die Schichten.
- Das elektromagnetische Feld kann durch ebene Wellen beschrieben werden.
- Das Licht ist linear polarisiert und läuft in der z -Richtung.
- Der elektrische Feldvektor E ist parallel zur x -Achse, der magnetische Feldvektor H ist parallel zur y -Achse.

2.1.1 Die Helmholtz-Gleichung

In den reduzierten Maxwell-Gleichungen (2.1) können wir die magnetische Feldstärke H eliminieren, und es resultiert die eindimensionale Helmholtz-Gleichung für das elektrische Feld:

$$\frac{d^2 E}{dz^2} + \omega^2 \mu_0 \varepsilon_0 n^2(z) E(z) = \frac{d^2 E}{dz^2} + k^2 n^2(z) E(z) = 0 \quad (2.2)$$

mit der Vakuum-Wellenzahl $k = \omega/c_0$ und dem Zusammenhang $c_0 = 1/\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}$.

Die Helmholtz-Gleichung (2.2) beschreibt das Verhalten der elektrischen Feldamplitude beim Durchlauf einer elektromagnetischen Welle durch ein inhomogenes Medium mit dem Brechungsindex $n(z)$. Dies entspricht genau der Situation im Innern eines Laserspiegels. Außerhalb des Spiegels befindet sich ein homogenes Medium, in der Regel Luft, so daß hier $n(z) \equiv \text{const} = 1$ ist. Der Spiegel beginnt auf der reellen z -Achse an der Stelle $z = 0$ und ist in deren positivem Bereich lokalisiert. Dann ergibt sich die folgende Modellierung:

$$\frac{d^2 E(k, z)}{dz^2} + k^2 n^2(z) E(k, z) = 0, \quad z \geq 0, \quad (2.3)$$

$$\frac{d^2 E(k, z)}{dz^2} + k^2 E(k, z) = 0, \quad z < 0. \quad (2.4)$$

Gleichung (2.4) beschreibt demnach die Situation in einem homogenen Medium (hier Luft), Gleichung (2.3) die in einem inhomogenen Medium. In beiden Fällen hängt die Lösung E von der Variablen z und dem Parameter k ab. Diese Parameterabhängigkeit wird in (2.2) und den folgenden Gleichungen immer dann unterdrückt, wenn durch Umformungen k in ω und umgekehrt transformiert wird.

2.1.2 Die Schrödinger-Gleichung

Die Helmholtz-Gleichung (2.2) läßt sich in eine sogenannte Schrödinger-Gleichung transformieren. Dazu definieren wir die neue Variable

$$x(z) = \int_0^z \frac{n(u)}{c_0} du = \int_0^z \frac{1}{c(u)} du. \quad (2.5)$$

Sie gibt die Laufzeit an, die das Licht benötigt, um vom Beginn des Spiegels ($z = 0$) zur Position $z > 0$ zu gelangen.

Mit einer entsprechenden Substitution ist die Helmholtz-Gleichung (2.2) in Abhängigkeit der neuen Variablen x darstellbar:

$$\frac{d^2 E}{dx^2} \cdot \frac{n^2(x)}{c_0^2} + \frac{n\dot{n}}{c_0^2} \cdot \frac{dE}{dx} + k^2 n^2(x) E(x) = 0, \quad (2.6)$$

wobei der ‘‘Punkt‘‘ über einer Variablen deren Ableitung nach x bezeichnet. In diesem Zusammenhang sei darauf hingewiesen, daß für die auftretenden Ableitungen der Differentialausdruck verwendet wird, wenn es sich um die Lösung der Differentialgleichung handelt und ‘‘Punkt‘‘ bzw. ‘‘Strich‘‘, wenn ein Koeffizient der Gleichung vorliegt.

Nach einer Multiplikation von (2.6) mit $\frac{c_0^2}{n^2(x)}$ ergibt sich

$$\frac{d^2 E}{dx^2} + \frac{\dot{n}(x)}{n(x)} \cdot \frac{dE}{dx} + \omega^2 E(x) = 0, \quad (2.7)$$

und mit der Transformation

$$n(x) = \frac{W^2(x)}{\varepsilon_0 c_0} \quad (2.8)$$

erhalten wir aus Gleichung (2.7):

$$\frac{d^2 E}{dx^2} + 2 \frac{\dot{W}(x)}{W(x)} \cdot \frac{dE}{dx} + \omega^2 E(x) = 0.$$

Schließlich definieren wir

$$y(\omega, x) := W(x) \cdot E(\omega, x) = \frac{E(\omega, x)}{\sqrt{Z(x)}}, \quad (2.9)$$

wobei $Z(x) = 1/W^2(x)$ die charakteristische Impedanz und y die zugehörige normalisierte Wellenamplitude bezeichnen. Insgesamt erhalten wir die eindimensionale Schrödinger-Gleichung

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}(\omega, x) + \left(\omega^2 - \frac{\ddot{W}(x)}{W(x)} \right) y(\omega, x) = 0$$

mit der Lösung y und dem entsprechenden Potential q , definiert durch

$$q := \frac{\ddot{W}}{W} = \frac{1}{W} \cdot \frac{d^2 W}{dx^2}. \quad (2.10)$$

Für den Nachweis der Äquivalenz von Schrödinger- und Helmholtz-Gleichung müssen wir nun zeigen, daß alle durchgeführten Umformungen invertierbar sind, d.h. daß die Schrödinger-Gleichung mit den entsprechenden inversen Transformationen wieder auf die Helmholtz-Gestalt führt.

Dazu gehen wir von der Schrödinger-Gleichung

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}(\omega, x) + (\omega^2 - q(x)) y(\omega, x) = 0 \quad (2.11)$$

aus und wählen die inverse Variablentransformation

$$z(x) = \int_0^x \frac{c_0}{n(t)} dt = \int_0^x c(t) dt. \quad (2.12)$$

Diese überführt die Laufzeit x zurück in die physikalische Eindringtiefe z und aus Gleichung (2.11) folgt

$$\frac{\partial^2 y}{\partial z^2} + \frac{\ddot{z}}{\dot{z}^2} \frac{\partial y}{\partial z} + \frac{(\omega^2 - q(x))}{\dot{z}^2} y(\omega, z) = 0.$$

Führen wir nun wieder die obige Substitution (2.9)

$$y(\omega, z) = W(z) \cdot E(\omega, z) = C \cdot \frac{E(\omega, z)}{\sqrt{\dot{z}(x(z))}}$$

mit $C = \sqrt{c_0^2 \varepsilon_0}$ durch, so ergibt sich

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} + \left(\frac{3}{4} \frac{\ddot{z}^2}{\dot{z}^4} - \frac{1}{2} \frac{\ddot{z}}{\dot{z}^3} - \frac{q(z)}{\dot{z}^2} \right) E(z) + \frac{\omega^2}{\dot{z}^2} E(z) = 0.$$

Wegen $\omega^2/\dot{z}^2 = k^2 n^2$ ist E Lösung der Helmholtz-Gleichung (2.2), falls

$$\frac{3}{4} \frac{\ddot{z}^2}{\dot{z}^4} - \frac{1}{2} \frac{\ddot{z}}{\dot{z}^3} - \frac{q(z)}{\dot{z}^2} = 0$$

gilt. Diese Bedingung ist aber immer erfüllt, wie folgende Rechnung zeigt. Zunächst gilt unter der Annahme, daß \ddot{n} existiert

$$\dot{z} = \frac{c_0}{n}, \quad \ddot{z} = -c_0 \frac{\dot{n}}{n^2}, \quad \ddot{\ddot{z}} = c_0 \frac{2\dot{n}^2 - \ddot{n}n}{n^3},$$

sowie

$$q = \frac{\ddot{W}}{W} = \frac{1}{4} \frac{2\ddot{n}n - \dot{n}^2}{n^2}.$$

Damit folgt

$$\frac{3}{4} \frac{\ddot{z}^2}{\dot{z}^4} - \frac{1}{2} \frac{\ddot{z}}{\dot{z}^3} - \frac{q(z)}{\dot{z}^2} = \frac{3}{4} \frac{\dot{n}^2}{c_0^2} + \frac{1}{2} \frac{\ddot{n}n - 2\dot{n}^2}{c_0^2} - \frac{1}{4} \frac{2\ddot{n}n - \dot{n}^2}{c_0^2} = 0.$$

Insgesamt gilt also

Satz 2.1 *Helmholtz- und Schrödinger-Gleichung sind äquivalente Modellierungen des Spiegel-Design-Problems, falls der Brechnungsindex $n \in C^2(0, \infty)$ ist. Zwischen dem Brechnungsindex n und dem Potential q der Schrödinger-Gleichung gilt der Zusammenhang (2.10) mit (2.8).*

2.2 Der Spiegel-Design-Algorithmus

In Abschnitt 1.1 haben wir das Spiegel-Design-Problem rein qualitativ über die Zuordnung $r \rightarrow n$ charakterisiert. Nun wollen wir mehr quantitativ vorgehen und uns mit den funktionellen Zusammenhängen zwischen beiden Größen beschäftigen.

Der gesuchte Brechnungsindex n hängt über die Beziehung (2.8) von der Funktion W ab, die wiederum Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichung (2.10) ist, wobei das Potential q der Schrödinger-Gleichung (2.11) als Koeffizient auftritt. Nach Vorgabe von geeigneten Anfangswerten ist n mit Kenntnis von q eindeutig bestimmt. Diese Freiheit für n ist aus praktischer Sicht von Vorteil, wie wir am Ende dieses Abschnitts noch sehen werden.

Wir können also in der rechten Seite der obigen Zuordnung n durch q ersetzen. Das grundlegende Modell für einen beschichteten Spiegel ist damit durch die Schrödinger-Gleichung (2.11) auf der reellen Achse gegeben:

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}(\omega, x) + (\omega^2 - q(x)) y(\omega, x) = 0, \quad x \in \mathbb{R}.$$

Die dispersiven Eigenschaften des Spiegels sind durch das Potential q charakterisiert. In den Bereichen des Umgebungsmediums, d.h. außerhalb des Spiegels, treten keine dispersiven Effekte auf, was bedeutet, daß hier $q \equiv 0$ gilt. Im vorliegenden Modell wird der Beginn des Spiegels an die Stelle $z = 0$ gelegt bzw. der Laufzeit $x = 0$ zugeordnet. Das Spiegelende wollen wir nicht explizit festlegen, es bleibt offen, aber das Potential soll für $x \rightarrow +\infty$ verschwinden. Da wir außerdem in der Praxis nur an reellwertigen, stückweise stetigen und beschränkten n interessiert sind, betrachten wir im folgenden nur Potentiale q mit den folgenden Eigenschaften:

- (q1) $q(x) = 0, x < 0,$
- (q2) $\lim_{x \rightarrow +\infty} q(x) = 0,$
- (q3) $q(x)$ ist reell für reelles $x,$
- (q4) q ist beschränkt und stückweise stetig auf $\mathbb{R}.$

Wir wenden uns nun der Lösung der Schrödinger-Gleichung unter eben diesen Voraussetzungen zu. Im Bereich vor dem Spiegel gilt $q \equiv 0$ und (2.11) reduziert sich zu

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}(\omega, x) + \omega^2 y(\omega, x) = 0. \quad (2.13)$$

Die reduzierte Gleichung (2.13) läßt sich in ein System mit konstanten Koeffizienten transformieren, dessen Matrix die Eigenwerte $\pm i\omega$ besitzt. Alle Lösungen lassen sich daher explizit als Linearkombination der beiden Exponentialfunktionen $e^{i\omega x}$ und $e^{-i\omega x}$ darstellen. Da weiterhin $q(x)$ für $x \rightarrow +\infty$ verschwindet besitzt jede Lösung y der Schrödinger-Gleichung (2.11) - wie wir später noch zeigen werden - folgende (asymptotische) Eigenschaften:

$$y(\omega, x) = \alpha(\omega)e^{i\omega x} + \beta(\omega)e^{-i\omega x}, \quad x < 0, \quad (2.14)$$

$$0 = \lim_{x \rightarrow +\infty} (y(\omega, x) - (\gamma(\omega)e^{i\omega x} + \delta(\omega)e^{-i\omega x})). \quad (2.15)$$

Die physikalische Bedeutung des Schrödinger-Koeffizienten q überträgt sich nun auf die zugehörigen Lösungen y . Jedes y läßt sich nach (2.14), (2.15) im Unendlichen, also in dem Bereich, in dem das Potential q verschwindet, als Überlagerung zweier gegenläufiger Wellen $e^{i\omega x}, e^{-i\omega x}$ darstellen. Dabei wird das Vorzeichen im Argument der Exponentialfunktion als Richtungsinformation interpretiert, und wir unterscheiden nach links laufende Wellen als asymptotisch proportional zu $e^{-i\omega x}$ und nach rechts laufende Wellen als asymptotisch proportional zu $e^{i\omega x}$. Bezogen auf den Spiegel, der auf der positiven reellen Achse lokalisiert ist, werden außerdem einlaufende und auslaufende Wellen definiert. Die in den Spiegel einlaufenden sind demnach entweder von $x = -\infty$ aus nach rechts oder von $x = +\infty$ nach links laufende Wellen, während die den Spiegel verlassenden auslaufenden entweder nach rechts ins positiv Unendliche laufende oder nach links ins negativ Unendliche laufende Wellen beschreiben.

Die Mengen der ein- und auslaufenden Wellen können jeweils als zweidimensionaler Vektorraum aufgefaßt werden, wobei die erste Komponente jedes Vektors die Amplitude des

nach rechts laufenden Anteils und die zweite die Amplitude des nach links laufenden Anteils bezeichnet. Mit den Variablen aus (2.14), (2.15) beschreiben damit die Vektoren

$$\begin{pmatrix} \alpha(\omega) \\ \delta(\omega) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \gamma(\omega) \\ \beta(\omega) \end{pmatrix}$$

die Vektorräume der ein- und auslaufenden Wellen.

Weiter gehen wir davon aus, daß eine von links einlaufende Welle beim Durchlauf durch den Spiegel zum einen Teil reflektiert und zum anderen Teil transmittiert wird. Vor dem Spiegel überlagern sich also an jeder Position einlaufende Welle und deren durch den Spiegel reflektierter Anteil. Diese Situation beschreibt die spezielle Lösung y mit $\alpha \equiv 1$ und $\delta \equiv 0$:

$$y(\omega, x) = e^{i\omega x} + r(\omega) e^{-i\omega x}, \quad x < 0, \quad (2.16)$$

$$0 = \lim_{x \rightarrow +\infty} (y(\omega, x) - t(\omega) e^{i\omega x}). \quad (2.17)$$

Eine Welle der Amplitude 1 überlagert sich also vor dem Spiegel mit ihrem im Spiegel reflektierten Anteil, charakterisiert durch $r(\omega)$. Jenseits des Spiegels im positiven x -Bereich bleibt nur deren transmittierter Anteil übrig, charakterisiert durch den komplexen Transmissionskoeffizienten $t(\omega)$.

Im allgemeineren Fall $\delta \equiv 0$ und $\alpha \neq 1$ gilt

$$r(\omega) = \frac{\beta(\omega)}{\alpha(\omega)},$$

d.h. der komplexe Reflektionskoeffizient r ist definiert durch das Amplituden-Verhältnis der reflektierten zur einlaufenden Welle. Er ist das Ergebnis aller abgelaufenen Reflexionsvorgänge im Innern des Spiegels und ist daher nur von der Frequenz ω bzw. von der Wellenlänge λ abhängig.

Die erläuterte (mathematische) Definition des komplexen Reflektionskoeffizienten r ist konsistent mit der physikalischen aus Kapitel 1. Wir behandeln den Spiegel als “black box“ und vergleichen den Input in den Spiegel mit dem reflektierten Output am Eingang des Spiegels ($x = z = 0$). Das ist hinreichend, um alle relevanten Spiegeldaten zu erfassen, denn uns interessiert nur, welcher Anteil der jeweiligen Frequenzen insgesamt reflektiert wird und nicht an welcher Stelle im Spiegel diese Reflexionen vorwiegend auftreten bzw. wie sie sich über die gesamte Spiegellänge verteilen. Das läßt bereits für die späteren konkreten Berechnungen einen gewissen Freiheitsgrad vermuten. Zur Reflektion eines bestimmten Prozentsatzes einer festen Wellenlänge kommen mehrere Spiegelstrukturen in Betracht, etwa könnte gleich zu Beginn alles reflektiert werden oder erst weiter im Innern, was einen anderen Verlauf des Brechungsindex zur Folge hätte. Diese Fragestellung wird uns nochmals bei den numerischen Experimenten in Kapitel 4 beschäftigen.

Zu gegebenem Potential q der Schrödinger-Gleichung existieren neben $r(\omega)$ und $t(\omega)$ zwei weitere physikalisch relevante Koeffizienten $\rho(\omega)$ und $\tau(\omega)$. In Kapitel 3 gehen wir darauf in einem abstrakteren Rahmen ein. Dabei werden alle Größen nochmals exakt definiert, sowie deren analytische Eigenschaften hergeleitet.

Wir haben die für die Spektraleigenschaften des Spiegels relevante Funktion $r(\omega)$ für festes ω als Koeffizient einer speziellen Lösung $y(\omega, x)$ der Schrödinger-Gleichung identifiziert. Auf dem Weg zum gesuchten Spiegel-Design müssen wir also zunächst ein inverses

Problem für die Schrödinger-Gleichung lösen. Das Ergebnis q ist dann Koeffizient der gewöhnlichen Differentialgleichung (2.10), die in einem zweiten Schritt mit geeigneten Anfangswerten zu lösen ist und deren Lösung W den gesuchten Brechungsindex n über den Zusammenhang (2.8) ergibt.

Damit sind die wesentlichen Schritte des zu konstruierenden Spiegel-Design-Algorithmuses skizziert und können zusammengefaßt werden:

Spiegel-Design-Algorithmus

- (a) Zu gegebenem komplexen Reflektionskoeffizienten r bestimme den Koeffizient q in der Schrödinger-Gleichung (**inverses Problem**)

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}(\omega, x) + (\omega^2 - q(x)) y(\omega, x) = 0, \quad x \geq 0.$$

- (b) Löse das Anfangswertproblem 2. Ordnung (**direktes Problem**)

$$\begin{aligned} \frac{d^2 W(x)}{dx^2} - q(x) \cdot W(x) &= 0, \quad x \geq 0, \\ W(0) &= \sqrt{\varepsilon_0 c_0}, \\ W'(0) &= 0. \end{aligned}$$

- (c) Berechne den laufzeitabhängigen Brechungsindex:

$$n(x) = \frac{W^2(x)}{\varepsilon_0 c_0}.$$

- (d) Bestimme den ortsabhängigen Brechungsindex durch Rücktransformation der Variablen:

$$z(x) = \int_0^x \frac{c_0}{n(t)} dt \longrightarrow n(z).$$

Die Frage der optimalen Beschichtung von Laserspiegeln zur Erzeugung ultrakurzer Laserpulse läßt sich demnach auf das Problem reduzieren, zu vorgegebenen Spektraleigenschaften des Spiegels in Form des komplexen Reflektionskoeffizienten r die zugehörige optimale Spiegelbeschichtung in Form des orts- bzw. laufzeitabhängigen Brechungsindex n zu berechnen. Die Situation im Innern des Spiegels ($x \geq 0$) wird durch die eindimensionale Schrödinger-Gleichung mit dem Potential q modelliert, im Außenbereich ($x < 0$) gilt sie mit $q \equiv 0$. Die Eingabegröße r des Algorithmuses ist Koeffizient einer speziellen Lösung (2.16) dieser Gleichung, das daraus berechnete Potential q ergibt die gesuchte Ausgabegröße n über die Gleichungen in (b), (c) und (d).

Wesentliches und schwierigstes Element ist die Lösung des inversen Problems (a). Das Vorwärtsproblem (b) ist eine gewöhnliche Anfangswertaufgabe, die mit numerischen Verfahren gelöst werden kann. Die Anfangswerte sind hier zu einem gewissen Grad frei wählbar, was den zu Anfang erläuterten physikalischen Bedingungen entspricht. Im vorliegenden Fall wurde am Spiegeleingang ($x = 0$) der Anfangswert für Luft $n(0) = 1$ sowie ein sanfter Materialübergang $n'(0) = 0$ in den Spiegel modelliert. Die Schritte (c) und (d) enthalten lediglich elementare Transformationen, die ohne größere Probleme durchführbar sind.

An dieser Stelle wird deutlich, dass wir nur von der Abbildung $r \rightarrow q$ eine eindeutige Zuordnung erwarten dürfen. Der Brechungsindex n bzw. W als direkte Lösung einer gewöhnlichen Differentialgleichung ist nur bis auf Anfangswerte eindeutig bestimmt. Diese Mehrdeutigkeit ist aber hier gerade erwünscht, denn anschaulich bedeutet sie, daß umgekehrt mehrere Spiegel dasselbe Potential q und damit denselben Reflektionskoeffizient r erzeugen können. Das ist nachvollziehbar, denn r beschreibt die Gesamtheit aller abgelaufenen Reflektionsvorgänge im Innern des Spiegels unabhängig davon, an welcher Stelle diese auftreten. Die Spiegelschichten können demnach so gebaut sein, daß alle auftretenden Reflektionen bereits weit vorne im Spiegel stattfinden oder nach Wellenlängen selektiert wird, wie es bei den doppelt durchgestimmten Spiegeln der Fall ist.

Besonders zu berücksichtigen ist auch die Tatsache, daß als Bauelemente für die Spiegel nur gewisse Materialien mit einem bestimmten Brechungsindexbereich zu Verfügung stehen. Konkret machen nur Spiegeldesigns Sinn mit $1 \leq n(x) \leq 4$. Für $n < 1$ tritt unerwünschte Absorption auf, Materialien mit $n > 4$ existieren nicht. Mit der geschickten Wahl der Anfangsbedingungen, insbesondere der für die Ableitung, läßt sich aus der zum berechneten Potential q möglichen Menge von Brechungsindizes n derjenige auswählen, der am besten den technischen Bauvorgaben entspricht.

Kapitel 3

Mathematische Analyse des Spiegel-Design-Problems

3.1 Das direkte Problem

Zur Lösung des inversen Problems für die Schrödinger-Gleichung (2.11) wollen wir in folgender Art und Weise vorgehen. Im ersten Teil des Kapitels analysieren wir das Vorwärtsproblem und definieren eine für die Umkehrung der Gleichung geeignete Potential-Klasse. Für diese Potentiale q berechnen wir spezielle Lösungen, die sogenannten Jost-Lösungen, und gehen auf deren analytische Eigenschaften ein. Daraus leiten wir anschließend explizite Darstellungen für die Jost-Lösungen her, die den Schlüssel für die Lösung des inversen Problems liefern.

Jedem Potential q aus der gewählten Klasse sind die Spektraleigenschaften des zugehörigen Spiegels in Form der sogenannten (2×2) -Streumatrix $S(\omega)$ zugeordnet, wobei der in Kapitel 2 eingeführte komplexe Reflektionskoeffizient $r(\omega)$ als eines der Elemente auftritt. Für das inverse Problem müssen wir aber das Potential q allein aus r rekonstruieren. Das bedeutet, daß wir Bedingungen benötigen, unter denen die übrigen Elemente der Streumatrix bereits durch Vorgabe von $r(\omega)$ eindeutig festgelegt sind. Wir gehen im zweiten Teil des Kapitels auf diese Frage ein, definieren die Streumatrix S , untersuchen ihre Eigenschaften und leiten explizite Beziehungen zwischen ihren Elementen her.

Das führt uns dann im dritten Teil zur Lösung des Charakterisierungsproblems, nämlich zur Beantwortung der Frage, welche Klasse von Reflektionskoeffizienten r die Zuordnung $r \rightarrow q$ zu einer wohldefinierten und umkehrbaren Abbildung macht, d.h. welche Voraussetzungen r erfüllen muß, daß q genau das Potential der Schrödinger-Gleichung mit dem Reflektionskoeffizienten r ist. Wie sich zeigen wird, müssen wir dazu die eingangs gewählte Potential-Klasse nur geringfügig einschränken.

Die besondere Bedeutung der Jost-Lösungen ist physikalisch begründet. Es gibt zwei spezielle Lösungen, die sogenannten physikalischen Lösungen der Schrödinger-Gleichung, die für festes ω als Linearkombination dieser Jost-Lösungen darstellbar sind, wobei die Koeffizienten genau mit den Elementen der Streumatrix übereinstimmen.

Diese Beziehungen sind der Ausgangspunkt für die Lösung des inversen Problems. Je nach Wahl der physikalischen Lösung ergeben sich zwei Integralgleichungen, die sogenannten

Marchenko-Integralgleichungen. Wir werden zeigen, daß beide Gleichungen das inverse Problem vollständig charakterisieren und geben Rahmenbedingungen an, unter denen sie eine eindeutige Lösung besitzen. Die entsprechende Lösung bestimmt dann das zu rekonstruierende Potential in eindeutiger Weise, wobei q in der für das Vorwärtsproblem gewählten Klasse liegt.

Die Lösung des inversen Problems für die Schrödinger-Gleichung wurde bereits unter verschiedensten Voraussetzungen und Modellierungsannahmen in der Literatur behandelt. Als Beispiele seien hier die Arbeiten von Faddeev ([16]), Agranovich/Marchenko ([1]), Berezin/Shubin ([7]), Deift/Trubowitz ([14]) oder Chadan ([12], [13]) erwähnt.

Die hier gewählte Vorgehensweise orientiert sich an diesen Arbeiten. Wesentliche Ergebnisse daraus werden auf das vorliegende konkrete Problem übertragen, ausführlich hergeleitet und zu einem mathematisch schlüssigen Gesamtkonzept verknüpft. Dies liefert ein theoretisches Fundament zur Ultrakurzlasersproblematik, mit dessen Hilfe in Zukunft zu beliebig vorgegebenen Spektraleigenschaften die zugehörige Spiegelbeschichtung bestimmt werden kann.

3.1.1 Die Jost-Lösungen f_p und f_m

Zu Beginn der Vorwärtsanalyse wollen wir zunächst eine geeignete Potential-Klasse definieren. Wir erweitern dazu die bisherigen Bedingungen (q1)-(q4) an q um eine zusätzliche Eigenschaft:

$$(Q1) \quad q(x) = 0, \quad x < 0,$$

$$(Q2) \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} q(x) = 0,$$

$$(Q3) \quad q(x) \text{ ist reell für reelles } x,$$

$$(Q4) \quad q \text{ ist stückweise stetig auf } \mathbb{R},$$

$$(Q5) \quad \int_0^{\infty} (1+x) |q(x)| dx < \infty.$$

Die Schrödinger-Gleichung (2.11) in der Form

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}(\omega, x) + \omega^2 y(\omega, x) = q(x) y(\omega, x). \quad (3.1)$$

ist eine gewöhnliche Differentialgleichung 2. Ordnung in $x \in \mathbb{R}$. Nach Vorgabe von geeigneten Anfangsbedingungen existiert zu gegebenem Potential $q(x)$ mit den Eigenschaften (Q1)-(Q5) eine eindeutige Lösung y . Aufgrund der asymptotischen Beziehungen (2.14), (2.15) können dabei auch insbesondere Anfangs- bzw. Randwerte an den Stellen $x = \pm\infty$ vorgegeben werden. Die entsprechenden Funktionswerte sind dann über einen Grenzwert definiert:

Definition 3.1 Die Lösungen $y_1(\omega, x) = f_p(\omega, x)$ und $y_2(\omega, x) = f_m(\omega, x)$ von (3.1) mit

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} e^{-i\omega x} f_p(\omega, x) = 1, \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} e^{-i\omega x} f_p'(\omega, x) = i\omega, \quad (3.2)$$

bzw.

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} e^{i\omega x} f_m(\omega, x) = 1, \quad \lim_{x \rightarrow -\infty} e^{i\omega x} f'_m(\omega, x) = -i\omega, \quad (3.3)$$

heißen Jost-Lösungen.

Die Bedingung (Q5) von q ist von zentraler Bedeutung für die folgenden Berechnungen, denn sie sichert unter anderem die Existenz und Eindeutigkeit einer expliziten Darstellung von f_p und f_m , mit deren Hilfe das inverse Problem gelöst wird.

Da wir $q(x) = 0$ für $x < 0$ vorausgesetzt haben, stimmt $f_m(\omega, x)$ dort mit $e^{-i\omega x}$ überein und die (asymptotischen) Randbedingungen sind für alle $x < 0$ erfüllt:

$$f_m(\omega, x) = e^{-i\omega x}, \quad x < 0.$$

3.1.1.1 Eigenschaften der Jost-Lösungen

In diesem Abschnitt wollen wir die analytischen und asymptotischen Eigenschaften der soeben definierten Jost-Lösungen f_p und f_m der Schrödinger-Gleichung (3.1) herleiten. Dazu ist es sinnvoll, (3.1) mit den jeweiligen Randbedingungen (3.2) bzw. (3.3) in eine äquivalente Integralgleichung zu transformieren.

Zu diesem Zweck schreiben wir (3.1) als gewöhnliches Differentialgleichungssystem 1. Ordnung, wobei ω als Parameter aufzufassen ist:

$$z'(\omega, x) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\omega^2 & 0 \end{pmatrix} z(\omega, x) + \begin{pmatrix} 0 \\ q(x)y(\omega, x) \end{pmatrix}, \quad z(\omega, x) = \begin{pmatrix} y(\omega, x) \\ y'(\omega, x) \end{pmatrix}.$$

Mit der Transformation haben wir ein System in z mit konstanten Koeffizienten erzeugt. Zu vorgegebenen Anfangswerten für die Funktion y und ihre Ableitung y' an einer Stelle $x \in \mathbb{R}$ können wir nun aus der "Variation der Konstanten" eine Darstellung der Lösung z des Systems und damit von y und y' gewinnen. Die Darstellung für y ist dabei implizit, da y auch in der Inhomogenität des Systems auftritt.

In unserem Fall sind die Funktionswerte der Lösung f_p an der Stelle $x = +\infty$ gegeben. Übertragen wir die Vorgehensweise für endliche Werte von x auf diesen Fall, dann ergibt sich aus der 1. Komponente des Vektors z die folgende implizite Darstellung für f_p :

$$f_p(\omega, x) = e^{i\omega x} - \int_x^\infty \frac{\sin \omega(x-t)}{\omega} q(t) f_p(\omega, t) dt. \quad (3.4)$$

Die Lösung f_m ist für $x < 0$ in expliziter Form bekannt, für $x \geq 0$ gehen wir wie bei f_p vor. Unter Berücksichtigung von $q(x) = 0$ für $x < 0$ ergibt sich damit insgesamt die Darstellung

$$f_m(\omega, x) = e^{-i\omega x} + \int_0^x \frac{\sin \omega(x-t)}{\omega} q(t) f_m(\omega, t) dt. \quad (3.5)$$

Die Gleichungen (3.4) und (3.5) sind lineare Integralgleichungen für die Lösungen f_p und f_m der Schrödinger-Gleichung. Im folgenden wollen wir zeigen, daß damit eine äquivalente Formulierung zu (3.1) mit (3.2) bzw. (3.3) vorliegt, d.h. daß die Integralgleichungen die Jost-Lösungen f_p bzw. f_m in eindeutiger Weise festlegen.

Für die weiteren Schritte benötigen wir zwei Lemmata:

Lemma 3.2 Für alle $z \in \mathbb{C}$ gibt es eine Konstante $C \geq 2$ mit

$$\left| \frac{\sin z}{z} \right| \leq C \cdot \frac{1}{1 + |z|} \cdot e^{|\operatorname{Im} z|}.$$

Beweis: Zunächst gilt für $z \in \mathbb{C}$:

$$\sin z = \frac{1}{2i} (e^{iz} - e^{-iz}).$$

Daraus folgt

$$\left| \frac{\sin z}{z} \right| \leq \frac{1}{|z|} \cdot e^{|\operatorname{Im} z|}.$$

Wir unterscheiden nun die Fälle $|z| \geq 1$ und $|z| < 1$. Für $|z| \geq 1$ ergibt sich

$$\left| \frac{\sin z}{z} \right| \leq \frac{1}{\frac{1}{2}|z| + \frac{1}{2}|z|} \cdot e^{|\operatorname{Im} z|} = 2 \cdot \frac{1}{1 + |z|} \cdot e^{|\operatorname{Im} z|}.$$

Für $|z| < 1$ betrachten wir $f(z) = \frac{\sin z}{z}$. Die Funktion f ist holomorph in $\mathbb{D} = \{z \in \mathbb{C} \mid |z| < 1\}$ und stetig für $|z| = 1$. Nach dem Maximumprinzip nimmt f das Maximum auf dem Rand von \mathbb{D} an, d.h. $\max |f(z)| = |f(z_0)|$, $|z_0| = 1$. Mit $z_0 = x + iy$ gilt $|x| \leq 1$, $|y| \leq 1$ und

$$|f(z)|^2 \leq |\sin z_0|^2 = \sin^2 x + \sinh^2 y \leq D^2,$$

d.h.

$$|f(z)| \leq D \leq D \cdot \frac{2}{1 + |z|} \cdot e^{|\operatorname{Im} z|},$$

also insgesamt die Behauptung mit $C := \max\{2, 2D\}$. □

Lemma 3.3 Sei $f \in C(0, t)$, $t > 0$. Dann gilt für beliebiges $n \in \mathbb{N}$

$$\frac{1}{n!} \left(\int_0^t f(x) dx \right)^n = \int_0^t \int_0^{x_1} \cdots \int_0^{x_{n-1}} f(x_1) f(x_2) \cdots f(x_n) dx_n \cdots dx_1.$$

Beweis: Vollständige Induktion über n :

Im Fall $n = 1$ ist nichts zu zeigen. Für $n = 2$ definieren wir die Funktionen

$$G_1(t) := \int_0^t \int_0^{x_1} f(x_1) f(x_2) dx_2 dx_1, \quad G_2(t) := \frac{1}{2!} \left(\int_0^t f(x) dx \right)^2$$

Dann gilt $G_1(0) = G_2(0) = 0$ und

$$G_1'(t) = f(t) \int_0^t f(x_2) dx_2 = G_2'(t),$$

also folgt

$$G_1(t) = \int_0^t G'_1(x_1) dx_1 = \int_0^t G'_2(x_1) dx_1 = G_2(t).$$

Wir nehmen an, daß die obige Gleichung für $n - 1$ gilt und definieren für n entsprechend

$$H_1(t) := \int_0^t \int_0^{x_1} \cdots \int_0^{x_{n-1}} f(x_1) f(x_2) \cdots f(x_n) dx_n \cdots dx_1, \quad H_2(t) = \frac{1}{n!} \left(\int_0^t f(x) dx \right)^n.$$

Es gilt wieder $H_1(0) = H_2(0)$ und mit der Induktionsvoraussetzung folgt

$$H'_1(t) = H'_2(t),$$

also auch

$$H_1(t) = H_2(t),$$

womit die Aussage bewiesen ist. □

Lemma 3.3 gilt auch in allgemeinerer Form, wenn wir 0 durch eine Konstante c ersetzen. Diese kann auch den Wert $\pm\infty$ annehmen, vorausgesetzt das zugehörige uneigentliche Integral existiert.

Zur Vereinfachung der weiteren Umformungen definieren wir

$$F_p(\omega, x) := e^{-i\omega x} f_p(\omega, x), \quad F_m(\omega, x) := e^{i\omega x} f_m(\omega, x),$$

sowie

$$D_\omega(x) := \frac{1}{2i\omega} (e^{2i\omega x} - 1) = \int_0^x e^{2i\omega t} dt = \frac{\sin \omega x}{\omega} e^{i\omega x}.$$

Die Funktionen F_p und F_m erfüllen die Bedingungen

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} F_p(\omega, x) = 1, \tag{3.6}$$

$$F_m(\omega, x) \equiv 1, \quad x < 0, \tag{3.7}$$

und die Integralgleichungen (3.4) und (3.5) transformieren sich zu

$$F_p(\omega, x) = 1 + \int_x^\infty D_\omega(t - x) q(t) F_p(\omega, t) dt, \tag{3.8}$$

$$F_m(\omega, x) = 1 + \int_0^x D_\omega(x - t) q(t) F_m(\omega, t) dt. \tag{3.9}$$

Wir betrachten die Folge der sukzessiven Approximationen

$$\begin{aligned} F_p^{(0)}(\omega, x) &= 1, \\ F_p^{(n)}(\omega, x) &= 1 + \int_x^\infty D_\omega(t - x) q(t) F_p^{(n-1)}(\omega, t) dt, \quad n \in \mathbb{N}, \end{aligned} \tag{3.10}$$

bzw.

$$\begin{aligned} F_m^{(0)}(\omega, x) &= 1, \\ F_m^{(n)}(\omega, x) &= 1 + \int_0^x D_\omega(x-t) q(t) F_m^{(n-1)}(\omega, t) dt, \quad n \in \mathbb{N}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Für den Nachweis der Äquivalenz der Schrödinger-Gleichung (3.1) mit Jost-Randwerten und der entsprechenden Integralgleichungen (3.4) und (3.5) gehen wir nun wie folgt vor:

Zunächst ist die Existenz der in (3.10) auftretenden uneigentlichen Integrale für alle $n \in \mathbb{N}$ zu zeigen. Anschließend beweisen wir, daß die in (3.10) und (3.11) definierten Funktionenfolgen $\{F_p^{(n)}(\omega, x)\}_{n \in \mathbb{N}}$ und $\{F_m^{(n)}(\omega, x)\}_{n \in \mathbb{N}}$ bezüglich x lokal gleichmäßig gegen die Grenzfunktionen F_p und F_m konvergieren, woraus die Existenz einer Lösung von (3.8), (3.9) und damit auch von (3.4), (3.5) folgt. Zum Schluß weisen wir nach, daß diese Lösungen f_p und f_m auch die Schrödinger-Gleichung mit den entsprechenden Jost-Randwerten erfüllen, also demnach eindeutig durch (3.4) und (3.5) festgelegt sind.

Die Jost-Lösungen f_p und f_m sind zunächst über die Schrödinger-Gleichung als Funktionen von x mit festem Parameter ω definiert worden. Sie können aber genauso für festes x als komplexwertige Funktionen in $\omega \in \mathbb{C}$ aufgefaßt werden. Mit der Wahl eines geeigneten Definitionsbereichs wird sich zeigen, daß f_p und f_m und damit auch F_p und F_m holomorphe Funktionen bezüglich ω darstellen. Diese zusätzliche Eigenschaft der Jost-Lösungen ist von fundamentaler Bedeutung für die Lösung des inversen Problems, wie wir später noch sehen werden.

Als Definitionsbereich für ω wählen wir im folgenden die obere komplexe Halbebene $D = \{\omega \in \mathbb{C} \mid \text{Im } \omega > 0\}$. Damit sind die Startfunktionen $F_p^{(0)}$ und $F_m^{(0)}$ holomorphe Funktionen auf D in ω . Diese Holomorphieeigenschaft soll sich nun über die obigen Iterationen hinweg fortpflanzen und sich schließlich auf die Grenzfunktionen F_p und F_m übertragen. Dazu müssen $\{F_p^{(n)}(\omega, x)\}_{n \in \mathbb{N}}$ und $\{F_m^{(n)}(\omega, x)\}_{n \in \mathbb{N}}$ in jedem Schritt holomorph sein und lokal gleichmäßig auf D gegen F_p bzw. F_m konvergieren. Dann sind nach dem Weierstraßschen Konvergenzsatz die Grenzfunktionen F_p und F_m und damit auch die Jost-Lösungen f_p und f_m holomorph in D .

3.1.1.1.1 Implizite Darstellung von f_p Wir beginnen mit dem Fall F_p und zeigen zunächst die Existenz aller uneigentlichen Integrale in (3.10). Mit Hilfe von Lemma 3.2 erhalten wir für den Betrag von D_ω :

$$|D_\omega(x)| \leq C \frac{x}{1 + |\omega|x}, \quad x \geq 0, \quad \text{Im } \omega \geq 0, \quad (3.12)$$

und damit

$$|D_\omega(x)| \leq C x, \quad (3.13)$$

$$|D_\omega(x)| \leq C \frac{1}{|\omega|}, \quad \text{für } \omega \neq 0. \quad (3.14)$$

Für reelles ω folgt (3.13) direkt aus der Definition von D_ω mit $C = 1$.

Diese Ergebnisse verwenden wir nun, um den Betrag der n -ten Iterierten $F_p^{(n)}(\omega, x)$ abzuschätzen. Mit Lemma 3.3 und (3.14) folgt für allgemeines $x \in \mathbb{R}$ und $\omega \neq 0$

$$\begin{aligned}
& |F_p^{(n)}(\omega, x)| \\
&= \left| 1 + \int_x^\infty D_\omega(t-x) q(t) F_p^{(n-1)}(\omega, t) dt \right| \\
&\leq 1 + \int_x^\infty |D_\omega(t-x)| |q(t)| |F_p^{(n-1)}(\omega, t)| dt \\
&\leq 1 + \int_x^\infty C \cdot \frac{1}{|\omega|} |q(t)| |F_p^{(n-1)}(\omega, t)| dt \\
&= 1 + \frac{C}{|\omega|} \int_x^\infty |q(t)| dt + \dots + \left(\frac{C}{|\omega|} \right)^n \int_x^\infty \int_{x_1}^\infty \dots \int_{x_{n-1}}^\infty |q(x_1)| \dots |q(x_n)| dx_n \dots dx_1 \\
&= 1 + \frac{C \int_x^\infty |q(t)| dt}{|\omega|} + \dots + \frac{\left(C \int_x^\infty |q(t)| dt \right)^n}{|\omega|^n n!} = 1 + \frac{C \sigma(x)}{|\omega|} + \dots + \frac{(C \sigma(x))^n}{|\omega|^n n!},
\end{aligned}$$

mit der Funktion

$$\sigma(x) := \int_x^\infty |q(t)| dt.$$

Die rechte Seite in der letzten Abschätzung enthält genau die ersten n Summanden der Taylorreihe der Exponentialfunktion, ausgewertet an der Stelle $\frac{C}{|\omega|} \sigma(x) > 0$. Die Funktion $\sigma(x)$ ist wegen (Q5) monoton fallend, positiv und nach oben durch die Konstante C_σ beschränkt. Damit folgt

$$|F_p^{(n)}(\omega, x)| \leq e^{\frac{C \sigma(x)}{|\omega|}} \leq e^{\frac{C C_\sigma}{|\omega|}}, \quad n \in \mathbb{N}, \quad x \in \mathbb{R}, \quad \text{Im } \omega \geq 0, \quad \omega \neq 0. \quad (3.15)$$

Eine weitere Abschätzung für $F_p^{(n)}(\omega, x)$ und $\text{Im } \omega \geq 0$ erhalten wir analog aus (3.13):

$$\begin{aligned}
|F_p^{(n)}(\omega, x)| &\leq 1 + C \int_x^\infty (t-x) |q(t)| |F_p^{(n-1)}(\omega, t)| dt \\
&\stackrel{t \geq x}{\leq} 1 + C \int_x^\infty (t-x) |q(t)| dt + \dots + \frac{\left(\int_x^\infty (t-x) |q(t)| dt \right)^n}{n!} \\
&= 1 + C \sigma_1(x) + \dots + \frac{(\sigma_1(x))^n}{n!}
\end{aligned}$$

mit der Funktion

$$\sigma_1(x) := \int_x^\infty (t-x) |q(t)| dt.$$

Daraus ergibt sich

$$|F_p^{(n)}(\omega, x)| \leq e^{C\sigma_1(x)}, \quad n \in \mathbb{N}, \quad x \in \mathbb{R}, \quad \operatorname{Im} \omega \geq 0. \quad (3.16)$$

Die Funktion $\sigma_1(x)$ ist ebenfalls positiv, monoton fallend und für positives x nach (Q5) durch die Konstante C_{σ_1} nach oben beschränkt:

$$\sigma_1(x) \leq \int_x^\infty t |q(t)| dt \leq C_{\sigma_1}.$$

In (3.10) können wir uns wegen $q(t) = 0$ für $t < 0$ auf den Fall $t \geq 0$ beschränken. Dann ist im Integrand der Betrag von $F_p^{(n-1)}(\omega, t)$ nach (3.16) durch die von t unabhängige Konstante $e^{C C_{\sigma_1}}$ abschätzbar. Mit den Abschätzungen für den Betrag von D_ω folgt daraus für jedes $x \in \mathbb{R}$ und jedes $n \in \mathbb{N}$ die Existenz des uneigentlichen Integrals.

An dieser Stelle wird auch deutlich, weshalb wir uns bei ω auf die positive komplexe Halbebene einschränken müssen. Andernfalls divergiert der Exponentialausdruck in (3.8) und das uneigentliche Integral existiert nicht mehr.

Wir wollen nun zeigen, daß die Folge $\{F_p^{(n)}(\omega, x)\}_{n \in \mathbb{N}}$ in (3.10) konvergiert. Dazu schätzen wir

$$|F_p^{(n)}(\omega, x) - F_p^{(n-1)}(\omega, x)| = \left| \int_x^\infty D_\omega(t-x) q(t) (F_p^{(n-1)}(\omega, t) - F_p^{(n-2)}(\omega, t)) dt \right|$$

ab, indem wir (3.10) rekursiv einsetzen:

$$\begin{aligned} & |F_p^{(n)}(\omega, x) - F_p^{(n-1)}(\omega, x)| \\ & \leq \int_x^\infty \int_{x_1}^\infty \cdots \int_{x_{n-1}}^\infty |D_\omega(x_1 - x)| \cdots |D_\omega(x_n - x_{n-1})| |q(x_1)| \cdots |q(x_n)| dx_n \cdots dx_1. \end{aligned}$$

Wegen $x_i - x \geq 0$ für $i = 1, \dots, n-1$, können wir (3.13) verwenden:

$$\begin{aligned} & |F_p^{(n)}(\omega, x) - F_p^{(n-1)}(\omega, x)| \\ & \leq C^n \int_x^\infty \int_{x_1}^\infty \cdots \int_{x_{n-1}}^\infty (x_1 - x) \cdots (x_n - x) |q(x_1)| \cdots |q(x_n)| dx_n \cdots dx_1. \end{aligned}$$

Jetzt nutzen wir wieder Lemma 3.3 aus und erhalten

$$|F_p^{(n)}(\omega, x) - F_p^{(n-1)}(\omega, x)| \leq \frac{(C \sigma_1(x))^n}{n!}. \quad (3.17)$$

Der Betrag der Folge $\{g_p^{(n)}(\omega, x)\}_{n \in \mathbb{N}}$ mit

$$g_p^{(n)}(\omega, x) := F_p^{(n)}(\omega, x) - F_p^{(n-1)}(\omega, x)$$

ist also abschätzbar durch das n -te Element einer Exponentialreihe, d.h. die Teleskopreihe

$$\sum_{n=1}^{\infty} g_p^{(n)}(\omega, x) = \sum_{n=1}^{\infty} (F_p^{(n)}(\omega, x) - F_p^{(n-1)}(\omega, x))$$

konvergiert und für den Reihenwert gilt

$$F_p(\omega, x) := 1 + \sum_{n=1}^{\infty} g_p^{(n)}(\omega, x).$$

Damit konvergiert die Folge $\{F_p^{(n)}(\omega, x)\}_{n \in \mathbb{N}}$ gegen $F_p(\omega, x)$. Für die Existenz einer Lösung von (3.8) müssen wir noch zeigen, daß F_p die Gleichung (3.8) erfüllt. Dazu setzen wir die obige Darstellung für F_p in die rechte Seite von (3.8) ein:

$$1 + \int_x^{\infty} D_{\omega}(t-x) q(t) \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} g_p^{(n)}(\omega, t)\right) dt = 1 + g_p^{(1)}(\omega, x) + \int_x^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} D_{\omega}(t-x) q(t) g_p^{(n)}(\omega, t) dt.$$

Da $q(t) = 0$ für $t < 0$ ist, genügt es, $t \geq 0$ zu betrachten. Hier gilt wegen (3.17)

$$|D_{\omega}(t-x) q(t) g_p^{(n)}(\omega, t)| \leq \underbrace{C(t-x) |q(t)|}_{\leq C(x)} \frac{(CC_{\sigma_1})^n}{n!},$$

d.h. die Reihe

$$\sum_{n=1}^{\infty} D_{\omega}(t-x) q(t) g_p^{(n)}(\omega, t)$$

konvergiert für festes x gleichmäßig in $t \geq 0$ und wir können Integration und Summation vertauschen:

$$\begin{aligned} & 1 + g_p^{(1)}(\omega, x) + \sum_{n=1}^{\infty} \int_x^{\infty} D_{\omega}(t-x) q(t) g_p^{(n)}(\omega, t) dt \\ &= 1 + g_p^{(1)}(\omega, x) + \sum_{n=1}^{\infty} g_p^{(n+1)}(\omega, x) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} g_p^{(n)}(\omega, x) = F_p(\omega, x). \end{aligned}$$

Damit erfüllt F_p Gleichung (3.8), und wir haben die Existenz einer Lösung von (3.8) gezeigt. Sie überträgt sich auf (3.4), wenn wir (3.8) auf beiden Seiten mit $e^{i\omega x}$ multiplizieren.

Zum Beweis von deren Eindeutigkeit differenzieren wir (3.4) zweimal nach x :

$$\begin{aligned} f_p'(\omega, x) &= i\omega e^{i\omega x} - \int_x^{\infty} \cos \omega(x-t) q(t) f_p(\omega, t) dt, \\ f_p''(\omega, x) &= -\omega^2 e^{i\omega x} + \int_x^{\infty} \omega \sin \omega(x-t) q(t) f_p(\omega, t) dt + q(x) f_p(\omega, x), \end{aligned} \tag{3.18}$$

wobei die auftretenden uneigentlichen Integrale wie in (3.4) für alle ω mit $\text{Im } \omega \geq 0$ existieren. In der Gleichung für f_p'' klammern wir ω^2 aus und erhalten:

$$f_p''(\omega, x) = -\omega^2 f_p(\omega, x) + q(x) f_p(\omega, x).$$

Jede Lösung von (3.4) ist demnach auch Lösung der Schrödinger-Gleichung (3.1). Mit (3.4) und (3.18) zeigt sich außerdem, daß jedes f_p die Jost-Randbedingungen (3.2) erfüllt. Da hierüber die Lösung der Schrödinger-Gleichung eindeutig festgelegt ist und jede Lösung von (3.4) diese Eigenschaft hat, folgt die Eindeutigkeit der Lösung von (3.4). Wir haben also mit (3.4) eine äquivalente Darstellung zu (3.1), die (3.2) erfüllt.

3.1.1.1.2 Implizite Darstellung von f_m Im Fall F_m treten keine uneigentlichen Integrale auf. Wir gehen wie bei F_p vor und zeigen die Existenz einer Lösung von (3.5). Wir definieren zunächst

$$\mu(x) := \int_0^x |q(t)| dt, \quad \mu_1(x) := \int_0^x (x-t) |q(t)| dt.$$

Beide Funktionen sind positiv und monoton wachsend, μ ist wie σ nach oben durch C_σ beschränkt. Damit erhalten wir mit den zum Fall F_p analogen Transformationen für $n \in \mathbb{N}$ die Abschätzungen

$$|F_m^{(n)}(\omega, x)| \leq e^{\frac{C\mu(x)}{|\omega|}} \leq e^{\frac{C C_\sigma}{|\omega|}}, \quad (3.19)$$

$$|F_m^{(n)}(\omega, x)| \leq e^{C\mu_1(x)}. \quad (3.20)$$

Wir untersuchen nun die Konvergenz der Folge $\{F_m^{(n)}(\omega, x)\}_{n \in \mathbb{N}}$ in (3.11) und erhalten mit denselben Umformungen wie bei F_p die Abschätzungen

$$|F_m^{(n)}(\omega, x) - F_m^{(n-1)}(\omega, x)| \leq \frac{(C\mu(x))^n}{|\omega|^n n!},$$

$$|F_m^{(n)}(\omega, x) - F_m^{(n-1)}(\omega, x)| \leq \frac{(C\mu_1(x))^n}{n!}.$$

Also konvergiert die Teleskop-Reihe

$$\sum_{n=1}^{\infty} g_m^{(n)}(\omega, x) := \sum_{n=1}^{\infty} (F_m^{(n)}(\omega, x) - F_m^{(n-1)}(\omega, x))$$

und somit die Folge $\{F_m^{(n)}(\omega, x)\}_{n \in \mathbb{N}}$ gegen $F_m(\omega, x)$, wobei

$$F_m(\omega, x) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} g_m^{(n)}(\omega, x).$$

Die Funktion F_m erfüllt die Gleichung (3.9), da in (3.5) wieder Summation und Integration vertauschbar sind. Damit existiert eine Lösung von (3.9). Die Existenz überträgt sich wiederum auf (3.5), wenn wir (3.9) auf beiden Seiten mit $e^{-i\omega x}$ multiplizieren.

Für den Beweis der Eindeutigkeit differenzieren wir entsprechend (3.5) zweimal nach x und erhalten

$$f_m'(\omega, x) = -i\omega e^{-i\omega x} + \int_0^x \cos \omega(x-t) q(t) f_m(\omega, t) dt,$$

$$f_m''(\omega, x) = -\omega^2 e^{-i\omega x} - \int_0^x \omega \sin \omega(x-t) q(t) f_m(\omega, t) dt + q(x) f_m(\omega, x)$$

$$= -\omega^2 f_m(\omega, x) + q(x) f_m(\omega, x).$$

Jede Lösung von (3.5) erfüllt also die Jost-Randbedingungen (3.3) und löst die Schrödinger-Gleichung (3.1), womit f_m ebenfalls eindeutig bestimmt ist. Demnach ist (3.5) eine äquivalente Darstellung zu (3.1), die (3.3) erfüllt.

3.1.1.1.3 Holomorphie der Jost-Lösungen Die gewonnenen Ergebnisse können wir nun verwenden, um weitere Eigenschaften der Jost-Lösungen f_p und f_m herzuleiten. Wir beginnen dazu wieder mit dem Fall f_p bzw. F_p . Die Abschätzungen (3.15), (3.16) gelten für alle $n \in \mathbb{N}$ und damit im Grenzübergang auch für F_p selbst:

$$|F_p(\omega, x)| \leq e^{\frac{C C_\sigma}{|\omega|}}, \quad \text{Im } \omega \geq 0, \quad \omega \neq 0, \quad (3.21)$$

bzw.

$$|F_p(\omega, x)| \leq e^{C \sigma_1(x)}, \quad \text{Im } \omega \geq 0. \quad (3.22)$$

Unter Verwendung der bisherigen Ergebnisse können wir nun noch eine dritte Abschätzung für F_p herleiten:

$$\begin{aligned} |F_p(\omega, x)| &\leq 1 + C \int_x^\infty (t-x) |q(t)| |F_p(\omega, t)| dt \\ &= 1 + C \int_x^\infty t |q(t)| |F_p(\omega, t)| dt + C \int_x^\infty (-x) |q(t)| |F_p(\omega, t)| dt \\ &\leq 1 + C \int_0^\infty t |q(t)| |F_p(\omega, t)| dt + C \int_x^\infty (-x) |q(t)| |F_p(\omega, t)| dt. \end{aligned}$$

Im ersten Integral ist $t \geq 0$, d.h. mit (3.22) folgt

$$|F_p(\omega, t)| \leq e^{C \sigma_1(t)} \leq e^{C C_{\sigma_1}}$$

und damit

$$|F_p(\omega, x)| \leq \underbrace{1 + C C_{\sigma_1} e^{C C_{\sigma_1}}}_{=: B} + C \int_x^\infty (-x) |q(t)| |F_p(\omega, t)| dt.$$

Für den nächsten Schritt definieren wir die Funktion

$$M_p(\omega, x) := \frac{F_p(\omega, x)}{B(1+|x|)}.$$

Die obige Abschätzung für F_p transformiert sich dann zu

$$\begin{aligned} |M_p(\omega, x)| &\leq \frac{1}{1+|x|} + C \int_x^\infty \frac{-x}{1+|x|} (1+|t|) |q(t)| |M_p(\omega, t)| dt \\ &\leq 1 + C \int_x^\infty (1+|t|) |q(t)| |M_p(\omega, t)| dt. \end{aligned}$$

Genauso wie F_p ist M_p Lösung einer Integralgleichung in x . Aus der zugehörigen Iteration erhalten wir dann

$$|M_p^{(n)}(\omega, x)| \leq 1 + C \int_x^\infty (1+|t|) |q(t)| dt + \dots + \frac{\left(C \int_x^\infty (1+|t|) |q(t)| dt \right)^n}{n!},$$

also

$$|M_p(\omega, x)| \leq e^{C(C_{\sigma_1} + C_{\sigma})} =: B_1.$$

Damit ergibt sich die gewünschte Abschätzung für F_p in Form von

$$|F_p(\omega, x)| \leq \underbrace{B B_1}_{=: B_2} \cdot (1 + |x|), \quad \text{Im } \omega \geq 0. \quad (3.23)$$

Mit den hergeleiteten Beziehungen (3.21)-(3.23) können wir schließlich die Asymptotik (3.6) genauer quantifizieren:

$$\begin{aligned} |F_p(\omega, x) - 1| &\leq \int_x^\infty |D_\omega(t-x)| |q(t)| |F_p(\omega, t)| dt \\ &\leq \frac{C C_\sigma}{|\omega|} e^{\frac{C C_\sigma}{|\omega|}}, \quad \omega \neq 0, \end{aligned} \quad (3.24)$$

bzw. mit (3.12)

$$\begin{aligned} |F_p(\omega, x) - 1| &\leq \frac{C}{1 + |\omega|} \cdot \int_x^\infty \frac{(t-x)(1 + |\omega|)}{1 + |\omega|(t-x)} |q(t)| |F_p(\omega, t)| dt \\ &\leq \frac{C}{1 + |\omega|} \cdot \left[\int_x^\infty t |q(t)| |F_p(\omega, t)| dt + (1-x) \int_x^\infty |q(t)| |F_p(\omega, t)| dt \right] \\ &\leq \frac{C}{1 + |\omega|} \cdot (e^{C C_{\sigma_1}} + (1-x) B_2) \int_x^\infty (1 + |t|) |q(t)| dt \\ &\leq \frac{B_3 (1 + \max\{-x, 0\})}{1 + |\omega|} \cdot \int_x^\infty (1 + |t|) |q(t)| dt, \end{aligned} \quad (3.25)$$

mit $B_3 = C (e^{C C_{\sigma_1}} + B_2)$. Da die obigen Abschätzungen für alle ω in der oberen komplexen Halbebene gelten, folgt aus (3.24) insbesondere

$$\lim_{|\omega| \rightarrow \infty} F_p(\omega, x) = 1, \quad \text{Im } \omega \geq 0.$$

Im Fall $F_m(\omega, x)$ gehen wir nun in analoger Weise vor. Aus den Abschätzungen (3.19), (3.20) erhalten wir

$$|F_m(\omega, x)| \leq e^{\frac{C C_\sigma}{|\omega|}}, \quad \text{Im } \omega \geq 0, \quad \omega \neq 0, \quad (3.26)$$

bzw.

$$|F_m(\omega, x)| \leq e^{C \mu_1(x)}, \quad \text{Im } \omega \geq 0, \quad (3.27)$$

Weiter ergibt sich

$$|F_m(\omega, x)| \leq 1 + C \int_0^x x |q(t)| |F_m(\omega, t)| dt - C \int_0^x t |q(t)| |F_m(\omega, t)| dt.$$

Das zweite Integral verschwindet für negatives x und ist positiv für positives x . Also gilt

$$|F_m(\omega, x)| \leq 1 + C \int_0^x x |q(t)| |F_m(\omega, t)| dt. \quad (3.28)$$

Wir definieren entsprechend

$$M_m(\omega, x) := \frac{F_m(\omega, x)}{1 + |x|},$$

wodurch sich (3.28) wie oben transformiert zu

$$\begin{aligned} |M_m(\omega, x)| &\leq \frac{1}{1 + |x|} + C \int_0^x \frac{x}{1 + |x|} (1 + |t|) |q(t)| |M_m(\omega, t)| dt \\ &\leq 1 + C \int_0^x (1 + |t|) |q(t)| |M_m(\omega, t)| dt. \end{aligned}$$

Damit gilt auch

$$|M_m(\omega, x)| \leq e^{C(C_1 + C_\sigma)} = B_1,$$

woraus

$$|F_m(\omega, x)| \leq B_1 \cdot (1 + |x|), \quad \text{Im } \omega \geq 0, \quad (3.29)$$

folgt. Mit diesen Abschätzungen erhalten wir wie im Fall F_p

$$\begin{aligned} |F_m(\omega, x) - 1| &\leq \int_0^x |D_\omega(x - t)| |q(t)| |F_m(\omega, t)| dt \\ &\leq \frac{CC_\sigma}{|\omega|} e^{\frac{CC_\sigma}{|\omega|}}, \quad \omega \neq 0 \end{aligned} \quad (3.30)$$

bzw.

$$|F_m(\omega, x) - 1| \leq \frac{CB_1(1 + \max\{x, 0\})}{1 + |\omega|} \cdot \int_0^x (1 + |t|) |q(t)| dt. \quad (3.31)$$

Bisher wissen wir, daß die Folgen $\{F_p^{(n)}(\omega, x)\}_{n \in \mathbb{N}}$ und $\{F_m^{(n)}(\omega, x)\}_{n \in \mathbb{N}}$ für festes ω punktweise in x gegen F_p und F_m konvergieren. Im folgenden wollen wir zeigen, daß diese Konvergenz sogar (lokal) gleichmäßig sowohl in x als auch in ω ist, wenn wir die Folgenglieder wie eingangs bereits erwähnt einmal als Funktionen in x zu festem ω und einmal als holomorphe Funktionen in ω zu festem x betrachten. Dann übertragen sich gewisse analytische Eigenschaften auf die Grenzfunktionen F_p und F_m und damit auf f_p und f_m .

Wir schätzen ab:

$$|F_p^{(n)}(\omega, x) - F_p(\omega, x)| \leq \int_x^\infty |D_\omega(t - x)| |q(t)| |F_p^{(n-1)}(\omega, t) - F_p(\omega, t)| dt.$$

Entsprechend der beiden für $|D_\omega|$ hergeleiteten Schranken können wir nun auf zwei Arten weiter vorgehen. Mit (3.14) und (3.24) folgt für $\omega \neq 0$ und $\text{Im } \omega \geq 0$

$$\begin{aligned} |F_p^{(n)}(\omega, x) - F_p(\omega, x)| &\leq C \int_x^\infty \frac{|q(t)|}{|\omega|} |F_p^{(n-1)}(\omega, t) - F_p(\omega, t)| dt \\ &\vdots \\ &\leq \frac{CC_\sigma}{|\omega|} e^{\frac{CC_\sigma}{|\omega|}} \frac{\left(\frac{C}{|\omega|} \sigma(x)\right)^n}{n!}. \end{aligned}$$

Ohne die Einschränkung $\omega \neq 0$ erhalten wir die folgende Abschätzung, wenn wir (3.13) und (3.25) verwenden, sowie berücksichtigen, daß $F_p^{(0)} \equiv 1$ gilt:

$$\begin{aligned} &|F_p^{(n)}(\omega, x) - F_p(\omega, x)| \\ &\leq C \int_x^\infty (t-x) |q(t)| |F_p^{(n-1)}(\omega, t) - F_p(\omega, t)| dt \\ &\leq C^n \int_x^\infty \int_{x_1}^\infty \cdots \int_{x_{n-1}}^\infty (x_1-x) \cdots (x_n-x) |q(x_1)| \cdots |q(x_n)| |F_p(\omega, x_n) - 1| dx_n \cdots dx_1 \\ &\leq \frac{B_3(1 + \max\{-x, 0\})}{1 + |\omega|} \cdot \int_x^\infty (1 + |t|) |q(t)| dt \frac{(C \sigma_1(x))^n}{n!} \\ &\leq B_3(1 + \max\{-x, 0\}) (C_{\sigma_1} + C_\sigma) \frac{(C \sigma_1(x))^n}{n!}. \end{aligned}$$

In der letzten Ungleichung haben wir ausgenutzt, daß $x_n \geq x$ und damit

$$\max\{-x_n, 0\} \leq \max\{-x, 0\}$$

ist. Bei der Folge $\{F_m^{(n)}(\omega, x)\}_{n \in \mathbb{N}}$ gehen wir genauso vor und erhalten

$$|F_m^{(n)}(\omega, x) - F_m(\omega, x)| \leq \frac{CC_\sigma}{|\omega|} e^{\frac{CC_\sigma}{|\omega|}} \frac{\left(\frac{C}{|\omega|} \mu(x)\right)^n}{n!}, \quad \omega \neq 0,$$

bzw.

$$|F_p^{(n)}(\omega, x) - F_p(\omega, x)| \leq CB_1 (1 + \max\{x, 0\}) (C_{\sigma_1} + C_\sigma) \frac{(C \mu_1(x))^n}{n!}.$$

Die Folgen in D holomorpher Funktionen $\{F_p^{(n)}(\omega, x)\}_{n \in \mathbb{N}}$ und $\{F_m^{(n)}(\omega, x)\}_{n \in \mathbb{N}}$ konvergieren also für festes $x \in \mathbb{R}$ als Funktion von ω lokal gleichmäßig gegen F_p bzw. F_m in D genauso wie für festes $\omega \in D$ als Funktion von x in \mathbb{R} . Die Grenzfunktionen $F_p(\omega, x)$ und $F_m(\omega, x)$ sind damit ebenfalls holomorph in $\omega \in D$ und stetig für jedes endliche $x \in \mathbb{R}$. Damit sind auch $f_p(\omega, x)$ und $f_m(\omega, x)$ holomorph in D und erfüllen die folgenden Beziehungen:

$$|f_p(\omega, x)| \leq e^{-\text{Im } \omega x} e^{\frac{CC_\sigma}{|\omega|}}, \quad \text{Im } \omega \geq 0, \quad \omega \neq 0, \quad (3.32)$$

$$|f_p(\omega, x)| \leq e^{-\text{Im } \omega x} e^{C \sigma_1(x)}, \quad \text{Im } \omega \geq 0, \quad (3.33)$$

$$|f_p(\omega, x)| \leq e^{-\text{Im } \omega x} B_2 \cdot (1 + |x|), \quad (3.34)$$

bzw.

$$|f_p(\omega, x) - e^{i\omega x}| \leq e^{-\operatorname{Im} \omega x} \frac{CC_\sigma}{|\omega|} e^{\frac{CC_\sigma}{|\omega|}}, \quad \omega \neq 0, \quad (3.35)$$

$$|f_p(\omega, x) - e^{i\omega x}| \leq e^{-\operatorname{Im} \omega x} \frac{B_3(1 + \max\{-x, 0\})}{1 + |\omega|} \cdot \int_x^\infty (1 + |t|) |q(t)| dt, \quad (3.36)$$

und für f_m :

$$|f_m(\omega, x)| \leq e^{\operatorname{Im} \omega x} e^{\frac{CC_\sigma}{|\omega|}}, \quad \operatorname{Im} \omega \geq 0, \quad \omega \neq 0, \quad (3.37)$$

$$|f_m(\omega, x)| \leq e^{\operatorname{Im} \omega x} e^{C\mu_1(x)}, \quad \operatorname{Im} \omega \geq 0, \quad (3.38)$$

$$|f_m(\omega, x)| \leq e^{\operatorname{Im} \omega x} B_1 \cdot (1 + |x|), \quad (3.39)$$

bzw.

$$|f_m(\omega, x) - e^{-i\omega x}| \leq e^{\operatorname{Im} \omega x} \frac{CC_\sigma}{|\omega|} e^{\frac{CC_\sigma}{|\omega|}}, \quad \omega \neq 0, \quad (3.40)$$

$$|f_m(\omega, x) - e^{-i\omega x}| \leq e^{\operatorname{Im} \omega x} \frac{CB_1(1 + \max\{x, 0\})}{1 + |\omega|} \cdot \int_0^x (1 + |t|) |q(t)| dt. \quad (3.41)$$

Das Potential $q(x)$ ist nach Voraussetzung reell für $x \in \mathbb{R}$. Aus (3.10) und (3.11) sehen wir, daß F_p und F_m die Symmetriebedingung

$$F_p(-\bar{\omega}, x) = \overline{F_p(\omega, x)}, \quad \omega \in \bar{D}, \quad (3.42)$$

bzw.

$$F_m(-\bar{\omega}, x) = \overline{F_m(\omega, x)}, \quad \omega \in \bar{D}, \quad (3.43)$$

erfüllen. Gleichung (3.42) beispielsweise gilt sicher für $F_p^{(0)}$, damit rekursiv für alle $F_p^{(n)}$ und somit auch für deren Grenzwert F_p . Die Gleichung ist mathematisch sinnvoll, denn mit $\operatorname{Im} \omega \geq 0$ ist auch $\operatorname{Im} (-\bar{\omega}) \geq 0$, d.h. mit $\omega \in \bar{D}$ ist auch $-\bar{\omega} \in \bar{D}$.

Die Symmetrieeigenschaften (3.42), (3.43) von F_p und F_m übertragen sich auf f_p und f_m :

$$f_p(-\bar{\omega}, x) = \overline{f_p(\omega, x)}, \quad \omega \in \bar{D}, \quad (3.44)$$

bzw.

$$f_m(-\bar{\omega}, x) = \overline{f_m(\omega, x)}, \quad \omega \in \bar{D}, \quad (3.45)$$

3.1.1.1.4 Zusammenfassung der Ergebnisse Damit haben wir alle wesentlichen Eigenschaften der Jost-Lösungen $f_p(\omega, x)$ und $f_m(\omega, x)$ hergeleitet und können nun die Ergebnisse in folgendem Satz zusammenfassen:

Satz 3.4 Die durch (3.2) und (3.3) definierten Jost-Lösungen f_p und f_m haben unter den Voraussetzungen (Q1)-(Q5) die folgenden Eigenschaften:

- (a) f_p und f_m sind die eindeutigen Lösungen der Schrödinger-Gleichung mit den Randbedingungen (3.2) und (3.3).

- (b) f_p und f_m sind in eindeutiger Weise in der impliziten Form (3.4) bzw. (3.5) darstellbar.
- (c) f_p und f_m sind für festes $x \in \mathbb{R}$ als Funktionen von ω holomorph für $\omega \in D$ und stetig für $\omega \in \overline{D}$.
- (d) Es gelten die Abschätzungen (3.32)-(3.36) für f_p und (3.37)-(3.41) für f_m .
- (e) Für $\text{Im } \omega \geq 0$ gilt: $f_{p/m}(-\overline{\omega}, x) = \overline{f_{p/m}(\omega, x)}$.

Neben den Jost-Lösungen $f_p(\omega, x)$ und $f_m(\omega, x)$ sind auch die Funktionen $f_p(-\omega, x)$ und $f_m(-\omega, x)$ von Interesse. Alle Aussagen von Satz 3.4 lassen sich ohne Probleme auf diese Funktionen übertragen, wenn man überall ω durch $-\omega$ ersetzt.

3.1.1.2 Explizite Darstellung der Jost-Lösungen

3.1.1.2.1 Definition der Funktionen K_p und K_m Die Holomorphie von $f_p(\omega, x)$ und $f_m(\omega, x)$ bezüglich ω in der oberen komplexen Halbebene D ermöglicht die Herleitung einer expliziten Integraldarstellung für f_p und f_m . Wir betrachten wieder zunächst den Fall f_p und definieren die Funktion $G_p(\omega, x) := f_p(\omega, x) - e^{i\omega x}$. G_p ist für festes $x \in \mathbb{R}$ holomorph in $\omega \in D$. Als Funktion von $\omega \in \mathbb{R}$ ist G_p nach (3.32) ein Element von $L^2(\mathbb{R})$. Die Funktion $H_p(\omega, x, z) := G_p(\omega, x) e^{-i\omega z}$ ist ebenfalls holomorph in D und jedes Integral von H_p über einen geschlossenen Halbkreis mit Radius $R_\Gamma > 0$ in D verschwindet:

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\Gamma} H_p(\omega, x, z) d\omega \\ &= \underbrace{\int_{-R_\Gamma}^{R_\Gamma} (f_p(\omega, x) - e^{i\omega x}) \cdot e^{-i\omega z} d\omega}_{I_1} + i \cdot \underbrace{\int_0^\pi (f_p(R_\Gamma e^{i\theta}, x) - e^{iR_\Gamma e^{i\theta} x}) \cdot e^{-iR_\Gamma e^{i\theta} z} R_\Gamma e^{i\theta} d\theta}_{I_2}. \end{aligned}$$

Interessant ist nun der Grenzfall $R_\Gamma \rightarrow +\infty$. Da $G_p(\cdot, x)$ für jedes feste x und reelles ω eine $L^2(\mathbb{R})$ -Funktion ist, existiert das erste Integral I_1 in der obigen Summe auch für $R_\Gamma = +\infty$. Aus (3.32) folgt außerdem

$$|f_p(R_\Gamma e^{i\theta}, x) - e^{iR_\Gamma e^{i\theta} x}| \leq e^{-R_\Gamma \sin \theta \cdot x} e^{\frac{C C_\sigma}{R_\Gamma}} \frac{C C_\sigma}{R_\Gamma}.$$

Bei festem x und z konvergiert damit I_2 für $R_\Gamma \rightarrow +\infty$ gegen 0, falls der Dämpfungsfaktor $e^{R_\Gamma \sin \theta (z-x)}$ gegen 0 strebt. Da $\sin \theta \geq 0$ ist für $\theta \in [0, \pi]$, tritt dieser Fall genau dann ein, wenn $z < x$ gilt, und damit folgt insbesondere

$$\int_{-\infty}^{\infty} (f_p(\omega, x) - e^{i\omega x}) \cdot e^{-i\omega z} d\omega = 0, \quad z < x. \quad (3.46)$$

Das Integral in (3.46) können wir nun für festes $x \in \mathbb{R}$ als Fouriertransformation der $L^2(\mathbb{R})$ -Funktion $G_p(\cdot, x)$, ausgewertet an der Stelle z , auffassen. Wir definieren die Funktion K_p als

$$K_p(x, z) := \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (f_p(\omega, x) - e^{i\omega x}) \cdot e^{-i\omega z} d\omega. \quad (3.47)$$

Aus Gleichung (3.46) ergibt sich sofort

$$K_p(x, z) = 0, \quad z < x. \quad (3.48)$$

Wegen (3.44) ist $K_p(x, z)$ reell für $x, z \in \mathbb{R}$. Da $G_p \in L^2(\mathbb{R})$ gilt, ist die Inversionsformel für die Fouriertransformation anwendbar und es ergibt sich

$$f_p(\omega, x) - e^{i\omega x} = \int_{-\infty}^{\infty} K_p(x, z) e^{i\omega z} dz,$$

und mit (3.48) folgt schließlich

$$f_p(\omega, x) = e^{i\omega x} + \int_x^{\infty} K_p(x, z) e^{i\omega z} dz. \quad (3.49)$$

Im Fall der Jost-Lösung $f_m(\omega, x)$ können wir in gleicher Weise vorgehen. Wir definieren entsprechend $G_m(\omega, x) := f_m(\omega, x) - e^{-i\omega x}$ und $H_m(\omega, x, z) := G_m(\omega, x) e^{i\omega z}$. Dann sind G_m und H_m wiederum holomorphe Funktionen bezüglich $\omega \in D$ und das Integral von H_m über einen geschlossenen Halbkreis in D mit Radius R_Γ verschwindet:

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\Gamma} H_m(\omega, x, z) d\omega \\ &= \underbrace{\int_{-R_\Gamma}^{R_\Gamma} (f_m(\omega, x) - e^{-i\omega x}) \cdot e^{i\omega z} d\omega}_{I_3} + i \cdot \underbrace{\int_0^\pi (f_m(R_\Gamma e^{i\theta}, x) - e^{-iR_\Gamma e^{i\theta} x}) \cdot e^{iR_\Gamma e^{i\theta} z} R_\Gamma e^{i\theta} d\theta}_{I_4}. \end{aligned}$$

Da G_m für reelles ω nach (3.37) ebenfalls eine $L^2(\mathbb{R})$ -Funktion ist, existiert I_3 auch für $R_\Gamma \rightarrow +\infty$. Das zweite Integral I_4 verschwindet für $x < 0$ und wegen

$$|f_m(R_\Gamma e^{i\theta}, x) - e^{-iR_\Gamma e^{i\theta} x}| \leq e^{R_\Gamma \sin \theta \cdot x} e^{\frac{C C_\sigma}{R_\Gamma}} \frac{C C_\sigma}{R_\Gamma},$$

falls $z > x \geq 0$ ist. Wie im Fall f_p definieren wir nun K_m über

$$K_m(x, z) := \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (f_m(\omega, x) - e^{-i\omega x}) \cdot e^{i\omega z} d\omega \quad (3.50)$$

und erhalten entsprechend

$$K_m(x, z) = 0, \quad z > x. \quad (3.51)$$

Nach (3.45) ist auch $K_m(x, z)$ reell für $x, z \in \mathbb{R}$. Mit der Inversionsformel für die Fouriertransformation folgt schließlich

$$f_m(\omega, x) = e^{-i\omega x} + \int_{-\infty}^x K_m(x, z) e^{-i\omega z} dz. \quad (3.52)$$

Über die Darstellungen (3.49) und (3.52) für f_p und f_m haben wir die Existenz der Funktionen K_p und K_m nachgewiesen. Die Gleichungen gelten aber zunächst unabhängig von der Tatsache, daß f_p und f_m spezielle Lösungen der Schrödinger-Gleichung sind. Wir wollen das nun berücksichtigen und zeigen, daß K_p und K_m dadurch eindeutig festgelegt werden.

3.1.1.2 Integralgleichungen für K_p und K_m Wie im vorherigen Abschnitt gezeigt, erfüllen die Jost-Lösungen f_p und f_m die Schrödinger-Gleichung (2.11) mit den jeweiligen Randwerten bzw. die entsprechenden Integralgleichungen (3.4) und (3.5). Wir können nun die Ausdrücke (3.49) bzw. (3.52) in beide Gleichungen einsetzen. Im ersten Fall führt uns das auf eine Differentialgleichung, im zweiten auf eine Integralgleichung für K_p bzw. K_m . Wir wählen den zweiten Weg, beginnen wieder mit f_p und setzen (3.49) in die linke Seite von (3.4) ein:

$$\int_x^\infty K_p(x, t) e^{i\omega t} dt = - \int_x^\infty \frac{\sin \omega(x-t)}{\omega} q(t) f_p(\omega, t) dt. \quad (3.53)$$

Für reelle ω folgt aus der Beziehung (3.34) für die rechte Seite von (3.53):

$$\left| \underbrace{\int_x^\infty \frac{\sin \omega(t-x)}{\omega} q(t) f_p(\omega, t) dt}_{=: \tilde{I}_p(\omega, x)} \right| \leq \frac{B_2}{|\omega|} \cdot \int_x^\infty (1+|t|) |q(t)| dt \leq \frac{B_2(C_{\sigma_1} + C_\sigma)}{|\omega|},$$

d.h. für festes x gilt $\tilde{I}_p(\omega, x) \in L^2(\mathbb{R})$. Die linke Seite von (3.53) ist nach den vorangegangenen Überlegungen ebenfalls eine $L^2(\mathbb{R})$ -Funktion in ω , d.h. wir können auf beiden Seiten der Gleichung die Fouriertransformation nach ω durchführen und erhalten

$$K_p(x, z) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \int_x^\infty \frac{\sin \omega(x-t)}{\omega} q(t) f_p(\omega, t) dt e^{-i\omega z} d\omega. \quad (3.54)$$

Nun können wir (3.49) nochmals in die rechte Seite von (3.54) einsetzen:

$$\begin{aligned} K_p(x, z) &= \frac{1}{2\pi} \int_x^\infty \int_{-\infty}^\infty \frac{\sin \omega(t-x)}{\omega} q(t) e^{i\omega(t-z)} d\omega dt \\ &\quad + \int_x^\infty \int_t^\infty \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{\sin \omega(t-x)}{\omega} e^{i\omega(s-z)} d\omega K_p(t, s) ds q(t) dt. \end{aligned}$$

Aufgrund der Eigenschaft (3.48) von K_p genügt es, sich im folgenden auf den Fall $z \geq x$ zu beschränken. Dann ist $z - x \geq 0$ und mit den Variablentransformationen $\xi = \frac{1}{2}(z + x)$ und $\eta = \frac{1}{2}(z - x) \geq 0$, d.h. $x = \xi - \eta$, $z = \xi + \eta$, folgt weiter

$$\begin{aligned} \tilde{K}_p(\xi, \eta) &:= K_p(\xi - \eta, \xi + \eta) \\ &= \int_{\xi - \eta}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin \omega(t - \xi + \eta)}{\omega} e^{-i\omega(-t + \xi + \eta)} d\omega}_{T_1} q(t) dt + \\ &\quad \int_{\xi - \eta}^{\infty} \int_t^{\infty} \frac{1}{2\pi} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin \omega(t - \xi + \eta)}{\omega} e^{i\omega(s - \xi - \eta)} d\omega}_{T_2} K_p(t, s) ds q(t) dt. \end{aligned}$$

Die Integrale T_1 und T_2 sind Fouriertransformationen der in ω geraden Funktion

$$\frac{\sin \omega(t - \xi + \eta)}{\omega}.$$

Damit reduziert sich in beiden Fällen das Integral auf den Cosinus-Term:

$$\begin{aligned} \tilde{K}_p(\xi, \eta) &= \int_{\xi - \eta}^{\infty} \frac{1}{\pi} \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{\sin \omega(t - \xi + \eta)}{\omega} \cos \omega(-t + \xi + \eta) d\omega}_{T_3} q(t) dt \\ &\quad + \int_{\xi - \eta}^{\infty} \int_t^{\infty} \frac{1}{\pi} \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{\sin \omega(t - \xi + \eta)}{\omega} \cos \omega(s - \xi - \eta) d\omega}_{T_4} K_p(t, s) ds q(t) dt. \end{aligned}$$

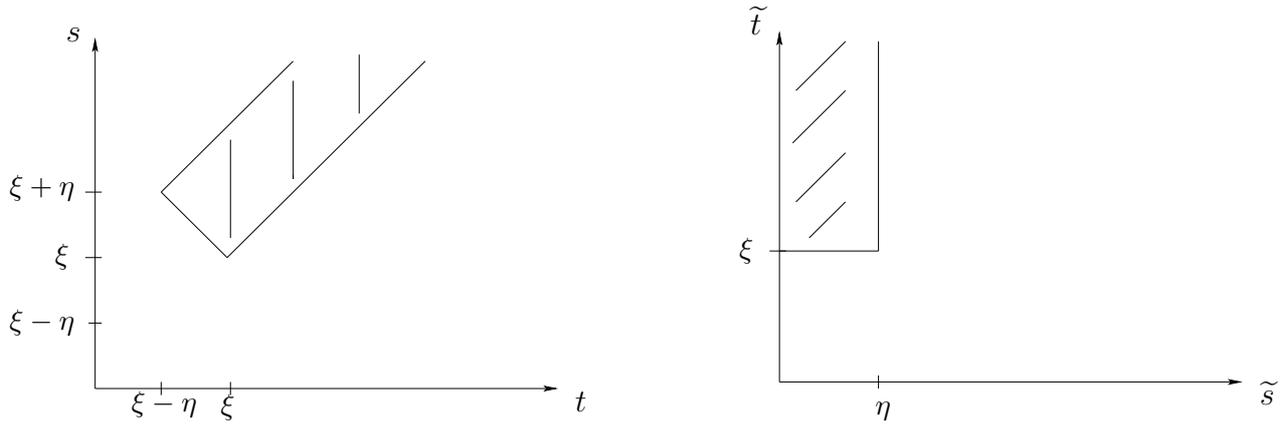
Das Integral T_3 ist eine spezielle Fourier-Cosinus-Transformation und hat den Wert 0 für $\xi > t$ und den Wert $\pi/2$ für $\xi < t$ ([10]). Wegen $\xi - \eta \leq \xi$ ist damit die untere Grenze $\xi - \eta$ des verbliebenen Integrals durch ξ zu ersetzen. Die gleichen Überlegungen ergeben, daß T_4 für $s > t + 2\eta$ und $s < 2\xi - t$ zu 0 wird. Insgesamt folgt also

$$\tilde{K}_p(\xi, \eta) = \frac{1}{2} \int_{\xi}^{\infty} q(t) dt + \frac{1}{2} \int_{\xi - \eta}^{\infty} \int_{\max\{t, 2\xi - t\}}^{t + 2\eta} K_p(t, s) ds q(t) dt. \quad (3.55)$$

Im Doppel-Integral des zweiten Summanden führen wir nun die beiden Variablentransformationen

$$\tilde{s} = \frac{1}{2}(s - t), \quad \tilde{t} = \frac{1}{2}(s + t),$$

durch, die das Integrationsgebiet von der s/t -Ebene auf die \tilde{s}/\tilde{t} -Ebene transformieren:



Wir haben also eine Entkopplung der beiden Integrale erreicht, was für die weitere Untersuchung der Integralgleichung von großem Vorteil ist. Anschließend ersetzen wir ξ und η wieder durch x und z und erhalten

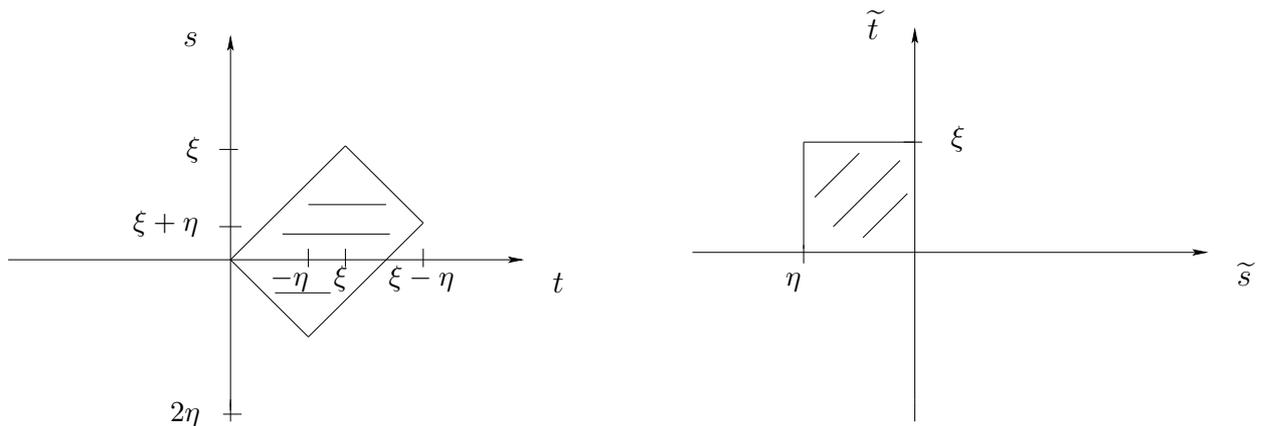
$$K_p(x, z) = \frac{1}{2} \int_{\frac{z+x}{2}}^{\infty} q(t) dt + \int_{\frac{z+x}{2}}^{\infty} \int_0^{\frac{z-x}{2}} q(\tilde{t} - \tilde{s}) K_p(\tilde{t} - \tilde{s}, \tilde{t} + \tilde{s}) d\tilde{s} d\tilde{t}, \quad z \geq x. \quad (3.56)$$

Die gesuchte Funktion K_p ist also die Lösung der linearen Integralgleichung (3.55) bzw. (3.56). Aus der zweiten Darstellung lassen sich später gewisse Eigenschaften von K_p wesentlich einfacher ablesen. Für die weiteren Umformungen aber ist die Darstellung (3.55) vorteilhafter.

Im Fall f_m bzw. K_m gehen wir in analoger Weise vor. Jetzt gilt $x \geq z$ und mit den Variablentransformationen $\xi = \frac{1}{2}(z + x)$, $\eta = \frac{1}{2}(z - x) \leq 0$ folgt eine entsprechende Integralgleichung für K_m :

$$\tilde{K}_m(\xi, \eta) := K_m(\xi - \eta, \xi + \eta) = \frac{1}{2} \int_0^{\xi} q(t) dt + \frac{1}{2} \int_0^{\xi - \eta} \int_{\max\{-t, t + 2\eta\}}^{\min\{t, 2\xi - t\}} K_m(t, s) ds q(t) dt. \quad (3.57)$$

Wir transformieren wieder das Integrationsgebiet von der s/t -Ebene auf die \tilde{s}/\tilde{t} -Ebene:



Unter Verwendung der Ausgangsvariablen x und z anstelle von ξ und η folgt dann

$$K_m(x, z) = \frac{1}{2} \int_0^{\frac{z+x}{2}} q(t) dt + \int_0^{\frac{z+x}{2}} \int_{\frac{z-x}{2}}^0 q(\tilde{t} - \tilde{s}) K_m(\tilde{t} - \tilde{s}, \tilde{t} + \tilde{s}) d\tilde{s} d\tilde{t}, \quad x \geq z. \quad (3.58)$$

3.1.1.2.3 Existenz und Eindeutigkeit von K_p und K_m Aus den Integraldarstellungen der Jost-Lösungen (3.49) und (3.52) wissen wir, daß die gesuchten Funktionen $K_p(x, z)$ bzw. $K_m(x, z)$ für festes x Elemente von $L^2(x, \infty)$ bzw. $L^2(-\infty, x)$ sind. Im folgenden wollen wir zeigen, daß (3.55) und (3.57) eindeutige Lösungen besitzen und diese in den entsprechenden L^2 -Räumen liegen. Wir wenden uns zunächst dem Fall K_p zu und zeigen die Existenz einer Lösung von (3.56). Dazu formen wir (3.56) um in

$$\begin{aligned} K_p(x, z) &= \frac{1}{2} \int_{\frac{z+x}{2}}^{\infty} q(t) dt + \frac{1}{2} \int_x^{\infty} \int_{\max\{t, z+x-t\}}^{t+z-x} K_p(t, s) ds q(t) dt, \quad z \geq x, \\ &= \frac{1}{2} \int_{\frac{z+x}{2}}^{\infty} q(t) dt + \frac{1}{2} \int_x^{\frac{z+x}{2}} \int_{z+x-t}^{t+z-x} K_p(t, s) ds q(t) dt + \frac{1}{2} \int_{\frac{z+x}{2}}^{\infty} \int_t^{t+z-x} K_p(t, s) ds q(t) dt, \end{aligned}$$

und betrachten für $n \in \mathbb{N}$ die Folge der sukzessiven Approximationen

$$\begin{aligned} K_p^{(0)}(x, z) &= \frac{1}{2} \int_{\frac{z+x}{2}}^{\infty} q(t) dt, \\ K_p^{(n)}(x, z) &= \frac{1}{2} \int_x^{\frac{z+x}{2}} \int_{z+x-t}^{t+z-x} K_p^{(n-1)}(t, s) ds q(t) dt + \frac{1}{2} \int_{\frac{z+x}{2}}^{\infty} \int_t^{t+z-x} K_p^{(n-1)}(t, s) ds q(t) dt. \end{aligned}$$

Für die erste Iterierte $K_p^{(0)}(x, z)$ gilt insbesondere

$$|K_p^{(0)}(x, z)| \leq \frac{1}{2} \int_{\frac{z+x}{2}}^{\infty} |q(t)| dt = \frac{1}{2} \sigma \left(\frac{z+x}{2} \right).$$

Daraus folgt für die zweite Iterierte

$$|K_p^{(1)}(x, z)| \leq \frac{1}{2} \int_x^{\frac{z+x}{2}} \int_{z+x-t}^{t+z-x} \frac{1}{2} \sigma \left(\frac{s+t}{2} \right) ds |q(t)| dt + \frac{1}{2} \int_{\frac{z+x}{2}}^{\infty} \int_t^{t+z-x} \frac{1}{2} \sigma \left(\frac{s+t}{2} \right) ds |q(t)| dt.$$

Die Funktion $\sigma(t)$ ist positiv und monoton fallend. Im ersten Summanden können wir demnach in $\sigma(\frac{s+t}{2})$ die Variable s durch die untere Integrationsgrenze des s -Integrals ersetzen, im zweiten führen wir die Substitution $\tilde{s} = (t+s)/2$ durch:

$$\begin{aligned} |K_p^{(1)}(x, z)| &\leq \frac{1}{2} \int_x^{\frac{z+x}{2}} \int_{z+x-t}^{t+z-x} \frac{1}{2} \sigma \left(\frac{z+x}{2} \right) ds |q(t)| dt + \frac{1}{2} \int_{\frac{z+x}{2}}^{\infty} \int_t^{t+\frac{z-x}{2}} \sigma(\tilde{s}) d\tilde{s} |q(t)| dt, \\ &\leq \frac{1}{2} \sigma \left(\frac{z+x}{2} \right) \int_x^{\frac{z+x}{2}} (t-x) |q(t)| dt + \frac{1}{2} \int_{\frac{z+x}{2}}^{\infty} \int_{\frac{z+x}{2}}^{t+\frac{z-x}{2}} \sigma(\tilde{s}) d\tilde{s} |q(t)| dt. \end{aligned}$$

Im zweiten Summanden nutzen wir erneut die Monotonie von σ aus und erhalten

$$\begin{aligned} |K_p^{(1)}(x, z)| &\leq \frac{1}{2} \sigma\left(\frac{z+x}{2}\right) \int_x^{\frac{z+x}{2}} (t-x) |q(t)| dt + \frac{1}{2} \sigma\left(\frac{z+x}{2}\right) \int_{\frac{z+x}{2}}^{\infty} (t-x) |q(t)| dt \\ &= \frac{1}{2} \sigma\left(\frac{z+x}{2}\right) \int_x^{\infty} (t-x) |q(t)| dt \\ &= \frac{1}{2} \sigma\left(\frac{z+x}{2}\right) \sigma_1(x). \end{aligned}$$

Die gewonnene Abschätzung für $K_p^{(1)}(x, z)$ läßt sich für beliebiges $n \in \mathbb{N}$ verallgemeinern:

$$|K_p^{(n)}(x, z)| \leq \frac{1}{2} \sigma\left(\frac{z+x}{2}\right) \frac{\sigma_1^n(x)}{n!}. \quad (3.59)$$

Die Aussage ist für $n = 1$ bereits gezeigt, d.h. wir nehmen an sie gelte bis zu einem gewissen n und führen den Induktionsschritt durch:

$$\begin{aligned} |K_p^{(n+1)}(x, z)| &\leq \frac{1}{2} \int_x^{\frac{z+x}{2}} \int_{z+x-t}^{t+z-x} \frac{1}{2} \sigma\left(\frac{s+t}{2}\right) \frac{\sigma_1^n(t)}{n!} ds |q(t)| dt \\ &\quad + \frac{1}{2} \int_{\frac{z+x}{2}}^{\infty} \int_t^{t+z-x} \frac{1}{2} \sigma\left(\frac{s+t}{2}\right) \frac{\sigma_1^n(t)}{n!} ds |q(t)| dt \\ &\leq \frac{1}{2} \sigma\left(\frac{z+x}{2}\right) \int_x^{\infty} (t-x) |q(t)| \frac{\sigma_1^n(t)}{n!} dt. \end{aligned}$$

Im Integral der letzten Ungleichungen können wir nun zweimal Lemma 3.3 anwenden. Zunächst schreiben wir den Bruch im Integranden als n -faches Integral. Damit wird das Integral zu einem $(n+1)$ -fachen Integral mit der in Lemma 3.3 verlangten Struktur. Wir können es also nochmals umgekehrt anwenden und erhalten die gewünschte Abschätzung

$$|K_p^{(n+1)}(x, z)| \leq \frac{1}{2} \sigma\left(\frac{z+x}{2}\right) \frac{\sigma_1^{n+1}(x)}{(n+1)!},$$

womit wir die Aussage bewiesen haben.

Da die Funktionen σ und σ_1 für $x \geq 0$ unabhängig von x und z nach oben beschränkt sind, folgt aus (3.59), daß die Reihe

$$\sum_{n=0}^{\infty} K_p^{(n)}(x, z) =: K_p(x, z)$$

in $z \geq x \geq 0$ gleichmäßig konvergiert.

Wir wollen nun zeigen, daß die so definierte Funktion K_p Lösung von (3.55) ist. Dazu setzen wir die obige Reihe für K_p in die rechte Seite von (3.55) ein:

$$\frac{1}{2} \int_{\frac{z+x}{2}}^{\infty} q(t) dt + \frac{1}{2} \int_x^{\frac{z+x}{2}} \int_{z+x-t}^{t+z-x} \sum_{n=0}^{\infty} K_p^{(n)}(t, s) ds q(t) dt + \frac{1}{2} \int_{\frac{z+x}{2}}^{\infty} \int_t^{t+z-x} \sum_{n=0}^{\infty} K_p^{(n)}(t, s) ds q(t) dt.$$

Wegen der gleichmäßigen Konvergenz der Reihe können wir Summation und Integration vertauschen:

$$\frac{1}{2} \int_{\frac{z+x}{2}}^{\infty} q(t) dt + \frac{1}{2} \int_x^{\frac{z+x}{2}} \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \int_{z+x-t}^{t+z-x} K_p^{(n)}(t, s) ds}_{=:f^{(n)}(t)} q(t) dt + \frac{1}{2} \int_{\frac{z+x}{2}}^{\infty} \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} \int_t^{t+z-x} K_p^{(n)}(t, s) ds}_{=:g^{(n)}(t)} q(t) dt.$$

Die beiden neu definierten Funktionenfolgen $\{f^{(n)}(t)\}_{n \in \mathbb{N}}$ und $\{g^{(n)}(t)\}_{n \in \mathbb{N}}$ bilden ebenfalls gleichmäßig konvergente Reihen, da

$$|f^{(n)}(t)| \leq \int_{z+x-t}^{t+z-x} |K_p^{(n)}(t, s)| ds |q(t)| \leq \int_{z+x-t}^{t+z-x} C_{\sigma} (t-x) |q(t)| \frac{\sigma_1^n(t)}{n!} \stackrel{t \geq x \geq 0}{\leq} C_{\sigma} t |q(t)| \frac{C_{\sigma_1}^n}{n!}$$

und

$$|g^{(n)}(t)| \leq C_{\sigma} (z-x) |q(t)| \frac{C_{\sigma_1}^n}{n!}$$

gilt. Das bedeutet, wir können Integration und Summation nochmals vertauschen und erhalten für die rechte Seite von (3.55)

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int_{\frac{z+x}{2}}^{\infty} q(t) dt + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2} \int_x^{\frac{z+x}{2}} \int_{z+x-t}^{t+z-x} K_p^{(n)}(t, s) ds q(t) dt + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2} \int_{\frac{z+x}{2}}^{\infty} \int_t^{t+z-x} K_p^{(n)}(t, s) ds q(t) dt \\ &= K^{(0)}(x, z) + \sum_{n=0}^{\infty} K_p^{(n+1)}(x, z) = \sum_{n=0}^{\infty} K_p^n(x, z), \end{aligned}$$

wodurch wir die Existenz einer Lösung K_p von (3.55) gezeigt haben. Mit Hilfe von (3.59) erhalten wir weiter

$$|K_p(x, z)| \leq \sum_{n=0}^{\infty} |K_p^{(n)}(x, z)| \leq \frac{1}{2} \sigma \left(\frac{z+x}{2} \right) e^{\sigma_1(x)} \leq \frac{1}{2} C_{\sigma} e^{C_{\sigma_1}}, \quad x \geq 0, \quad (3.60)$$

d.h. K_p ist für $z \geq x \geq 0$ beschränkt. Außerdem ist

$$\int_x^{\infty} \sigma(u) du = \int_x^{\infty} \int_u^{\infty} |q(t)| dt du = \int_x^{\infty} \int_x^t |q(t)| du dt = \int_x^{\infty} (t-x) |q(t)| dt = \sigma_1(x),$$

womit

$$\int_x^{\infty} |K_p(x, z)| dz \leq \frac{1}{2} e^{\sigma_1(x)} \int_x^{\infty} \sigma \left(\frac{z+x}{2} \right) dz = e^{\sigma_1(x)} \int_x^{\infty} \sigma(u) du = e^{\sigma_1(x)} \sigma_1(x)$$

folgt. Für festes $x \in \mathbb{R}$ gilt also

$$K_p(x, \cdot) \in L^1(x, \infty) \cap L^\infty(x, \infty)$$

und damit auch $K_p(x, \cdot) \in L^2(x, \infty)$.

Zum Beweis der Eindeutigkeit von K_p transformieren wir (3.55) zunächst in eine Differentialgleichung. Dazu überführen wir (3.55) in (3.56) mit den neuen Variablen ξ, η :

$$\tilde{K}_p(\xi, \eta) = K_p(\xi - \eta, \xi + \eta) = \frac{1}{2} \int_{\xi}^{\infty} q(t) dt + \int_{\xi}^{\infty} \int_0^{\eta} q(\tilde{t} - \tilde{s}) \tilde{K}_p(\tilde{t}, \tilde{s}) d\tilde{s} d\tilde{t}. \quad (3.61)$$

Anschließend bilden wir die partiellen Ableitungen von $\tilde{K}_p(\xi, \eta)$:

$$\frac{\partial \tilde{K}_p}{\partial \xi}(\xi, \eta) = -\frac{1}{2} q(\xi) - \int_0^{\eta} q(\xi - \tilde{s}) \tilde{K}_p(\xi, \tilde{s}) d\tilde{s}, \quad (3.62)$$

$$\frac{\partial \tilde{K}_p}{\partial \eta}(\xi, \eta) = \int_{\xi}^{\infty} q(\tilde{t} - \eta) \tilde{K}_p(\tilde{t}, \eta) d\tilde{t}, \quad (3.63)$$

$$\frac{\partial^2 \tilde{K}_p}{\partial \xi \partial \eta}(\xi, \eta) = -q(\xi - \eta) \tilde{K}_p(\xi, \eta). \quad (3.64)$$

Alle auftretenden Integrale und damit die partiellen Ableitungen von \tilde{K}_p existieren, d.h. $\tilde{K}_p(\xi, \eta)$ ist zweimal nach beiden Variablen differenzierbar und erfüllt die partielle Differentialgleichung

$$\frac{\partial^2 \tilde{K}_p}{\partial \xi \partial \eta}(\xi, \eta) + q(\xi - \eta) \tilde{K}_p(\xi, \eta) = 0, \quad \eta \geq 0. \quad (3.65)$$

Aus (3.61), (3.62) und (3.63) ergeben sich zudem die folgenden weiteren Eigenschaften von \tilde{K}_p :

$$\tilde{K}_p(\xi, 0) = \frac{1}{2} \int_{\xi}^{\infty} q(t) dt, \quad (3.66)$$

$$\lim_{\xi \rightarrow +\infty} \tilde{K}_p(\xi, \eta) = 0, \quad (3.67)$$

$$\lim_{\xi \rightarrow +\infty} \frac{\partial \tilde{K}_p}{\partial \xi}(\xi, \eta) = 0, \quad (3.68)$$

$$\lim_{\xi \rightarrow +\infty} \frac{\partial \tilde{K}_p}{\partial \eta}(\xi, \eta) = 0. \quad (3.69)$$

Mit der für (3.55) gefundenen Lösung K_p können wir nun die Funktion \tilde{f}_p durch

$$\tilde{f}_p(\omega, x) = e^{i\omega x} + \int_x^{\infty} K_p(x, z) e^{i\omega z} dz$$

bestimmen und zeigen, daß \tilde{f}_p genau die Jost-Lösung f_p ist. Dazu setzen wir $\tilde{f}_p(\omega, x)$ in die Schrödinger-Gleichung ein und integrieren das dabei auftretende Integral

$$\omega^2 \int_x^\infty K_p(x, t) e^{i\omega t} dt$$

zweimal partiell. Als Resultat ergibt sich

$$\begin{aligned} \tilde{f}_p''(\omega, x) + (\omega^2 - q(x)) \tilde{f}_p(\omega, x) &= \int_x^\infty \left(\frac{\partial^2 K_p}{\partial x^2}(x, t) - \frac{\partial^2 K_p}{\partial t^2}(x, t) - q(x) K_p(x, t) \right) e^{i\omega t} dt \\ &+ \left(-2 \frac{dK_p}{dx}(x, x) - q(x) \right) e^{i\omega x} \\ &- \lim_{z \rightarrow \infty} \left(\frac{\partial K_p}{\partial z}(x, z) - i\omega K_p(x, z) \right) e^{i\omega z}. \end{aligned}$$

Der geklammerte Term im Integrand stimmt mit (3.65) überein. Wenn wir in (3.65) zu den Ausgangsvariablen zurückkehren und \tilde{K}_p wieder als K_p schreiben, verschwindet dieser Term und mit ihm das Integral. Die zweite Klammer ist wegen (3.66) ebenfalls 0, da $\eta = 0$ äquivalent zu $x = z$ ist. Der Grenzwert im letzten Term schließlich verschwindet ebenfalls, was aus (3.67) - (3.69) folgt. Also gilt insgesamt

$$\tilde{f}_p''(\omega, x) + (\omega^2 - q(x)) \tilde{f}_p(\omega, x) = 0,$$

d.h. \tilde{f}_p erfüllt die Schrödinger-Gleichung.

Nun wollen wir das asymptotische Verhalten von \tilde{f}_p für $x \rightarrow +\infty$ untersuchen. Aus der obigen Darstellung für \tilde{f}_p folgt

$$|\tilde{f}_p(\omega, x) - e^{i\omega x}| \leq \int_x^\infty |K_p(x, t)| |e^{i\omega t}| dt.$$

Da wir uns nur für den Grenzfall $x \rightarrow +\infty$ interessieren, können wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit $x \geq 0$ voraussetzen. Dann ist der Betrag der Exponentialfunktion auf der rechten Seite wegen $\text{Im } \omega \geq 0$ durch 1 abschätzbar und wir erhalten

$$|\tilde{f}_p(\omega, x) - e^{i\omega x}| \leq \int_x^\infty |K_p(x, t)| dt \leq e^{\sigma_1(x)} \sigma_1(x).$$

Für $x \geq 0$ gilt außerdem

$$|\sigma_1(x)| \leq \int_x^\infty (t - x) |q(t)| dt \leq \int_x^\infty t |q(t)| dt,$$

d.h. wir haben $\lim_{x \rightarrow +\infty} \sigma_1(x) = 0$ und damit

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} (\tilde{f}_p(\omega, x) - e^{i\omega x}) = 0.$$

Die Funktion \tilde{f}_p ist also genau die Jost-Lösung f_p . Da diese als Lösung der Schrödinger-Gleichung eindeutig festgelegt ist, kann es nur eine Funktion K_p geben, die f_p über (3.49) bestimmt, woraus die Eindeutigkeit von K_p als Lösung von (3.55) folgt.

Für den Fall K_m gehen wir genauso vor, formen (3.57) um in

$$K_m(x, z) = \frac{1}{2} \int_0^{\frac{z+x}{2}} q(t) dt + \frac{1}{2} \int_0^{\frac{z+x}{2}} \int_{t+z-x}^t K_m(t, s) ds q(t) dt + \frac{1}{2} \int_{\frac{z+x}{2}}^x \int_{t+z-x}^{z+x-t} K_m(t, s) ds q(t) dt$$

und betrachten die Iteration

$$K_m^{(0)}(x, z) = \frac{1}{2} \int_0^{\frac{z+x}{2}} q(t) dt,$$

$$K_m^{(n)}(x, z) = \frac{1}{2} \int_0^{\frac{z+x}{2}} \int_{t+z-x}^t K_m^{(n-1)}(t, s) ds q(t) dt + \frac{1}{2} \int_{\frac{z+x}{2}}^x \int_{t+z-x}^{z+x-t} K_m^{(n-1)}(t, s) ds q(t) dt.$$

Dann gilt

$$|K_m^{(0)}(x, z)| \leq \frac{1}{2} \int_0^{\frac{z+x}{2}} |q(t)| dt = \frac{1}{2} \mu \left(\frac{z+x}{2} \right).$$

Wie im Fall K_p können wir damit zeigen, daß für $n \in \mathbb{N}$ gilt:

$$|K_m^{(n)}(x, z)| \leq \frac{1}{2} \mu \left(\frac{z+x}{2} \right) \frac{\mu_1^n(x)}{n!}. \quad (3.70)$$

Daraus folgt die Existenz einer Lösung K_m von (3.57) mit

$$K_m(x, z) = \sum_{n=0}^{\infty} K_m^{(n)}(x, z),$$

$$|K_m(x, z)| \leq \frac{1}{2} \mu \left(\frac{z+x}{2} \right) e^{\mu_1(x)}, \quad (3.71)$$

$$\int_{-\infty}^x |K_m(x, z)| dz \leq e^{\mu_1(x)} \mu_1(x).$$

Da außerdem $\mu(x) = 0$ für $x \leq 0$ ist, folgt

$$K_m(x, z) = 0, \quad z \leq -x,$$

also gilt für festes $x \in \mathbb{R}$

$$K_m(x, \cdot) \in L^1(-x, x) \cap L^\infty(-x, x)$$

und damit auch $K_m(x, \cdot) \in L^2(-x, x)$.

Wir transformieren nun Gleichung (3.57) auf die neuen Variablen ξ und η

$$\tilde{K}_m(\xi, \eta) := K_m(\xi - \eta, \xi + \eta) = \frac{1}{2} \int_0^\xi q(t) dt + \int_0^\xi \int_\eta^0 q(\tilde{t} - \tilde{s}) \tilde{K}_m(\tilde{t}, \tilde{s}) d\tilde{s} d\tilde{t} \quad (3.72)$$

und bilden wieder die partiellen Ableitungen

$$\frac{\partial \tilde{K}_m}{\partial \xi}(\xi, \eta) = \frac{1}{2} q(\xi) + \int_\eta^0 q(\xi - \tilde{s}) \tilde{K}_m(\xi, \tilde{s}) d\tilde{s},$$

$$\frac{\partial \tilde{K}_m}{\partial \eta}(\xi, \eta) = - \int_0^\xi q(\tilde{t} - \eta) \tilde{K}_m(\tilde{t}, \eta) d\tilde{t},$$

$$\frac{\partial^2 \tilde{K}_m}{\partial \xi \partial \eta}(\xi, \eta) = -q(\xi - \eta) \tilde{K}_m(\xi, \eta),$$

d.h. $\tilde{K}_m(\xi, \eta)$ erfüllt dieselbe partielle Differentialgleichung wie $\tilde{K}_p(\xi, \eta)$:

$$\frac{\partial^2 \tilde{K}_m}{\partial \xi \partial \eta}(\xi, \eta) + q(\xi - \eta) \tilde{K}_m(\xi, \eta) = 0, \quad \eta \leq 0. \quad (3.73)$$

Aus (3.72) folgt außerdem

$$\tilde{K}_m(\xi, 0) = \frac{1}{2} \int_0^\xi q(t) dt, \quad \tilde{K}_m(0, \eta) = 0,$$

bzw. in Abhängigkeit der Ausgangsvariablen x und z

$$K_m(x, x) = \frac{1}{2} \int_0^x q(t) dt, \quad K_m(x, -x) = 0. \quad (3.74)$$

Mit der gefundenen Lösung K_m von (3.57) ist nun die Funktion \tilde{f}_m festgelegt durch

$$\tilde{f}_m(\omega, x) = e^{-i\omega x} + \int_{-x}^x K_m(x, z) e^{-i\omega z} dz,$$

und wir beweisen die Eindeutigkeit von K_m , indem wir zeigen, daß \tilde{f}_m genau die eindeutige Jost-Lösung f_m ist. Dazu setzen wir wie im ersten Fall die obige Darstellung in die Schrödinger-Gleichung ein und erhalten

$$\begin{aligned} \tilde{f}_m''(\omega, x) + (\omega^2 - q(x)) \tilde{f}_m(\omega, x) &= \int_{-x}^x \left(\frac{\partial^2 K_m}{\partial x^2}(x, t) - \frac{\partial^2 K_m}{\partial t^2}(x, t) - q(x) K_m(x, t) \right) e^{-i\omega t} dt \\ &+ \left(2 \frac{dK_m}{dx}(x, x) - q(x) \right) e^{-i\omega x} + 2 \frac{dK_m}{dx}(x, -x) e^{i\omega x}. \end{aligned}$$

Die beiden Klammerausdrücke verschwinden wegen (3.73) und (3.74) genauso wie der dritte Term der rechten Seite, da mit $K_m(x, -x) = 0$ auch $\frac{dK_m}{dx}(x, -x) = 0$ gilt, und es ergibt sich

$$\tilde{f}_m''(\omega, x) + (\omega^2 - q(x)) \tilde{f}_m(\omega, x) = 0.$$

Ferner wissen wir daß $K_m(x, z) \neq 0$ nur für $-x \leq z \leq x$ bzw. $0 \leq (z+x)/2 \leq x$ gilt. Damit folgt aus (3.71) für $x < 0$, daß $K_m(x, z) \equiv 0$ ist, da in diesem Fall auch $(z+x)/2 < 0$ und somit $\mu((z+x)/2) = 0$ ist. Also gilt für $x < 0$

$$|\tilde{f}_m(\omega, x) - e^{-i\omega x}| \leq \int_{-x}^x |K_m(x, z)| |e^{-i\omega z}| dz \equiv 0,$$

d.h.

$$\tilde{f}_m(\omega, x) = e^{-i\omega x}.$$

Die Funktion \tilde{f}_m ist also genau die eindeutige Jost-Lösung f_m der Schrödinger-Gleichung, und es folgt wie im ersten Fall die Eindeutigkeit von K_m als Lösung von (3.57).

3.1.1.2.4 Zusammenfassung der Ergebnisse

Satz 3.5 Die Jost-Lösungen f_p und f_m der Schrödinger-Gleichung (2.11) besitzen die Integraldarstellungen

$$f_p(\omega, x) = e^{i\omega x} + \int_x^\infty K_p(x, z) e^{i\omega z} dz$$

und

$$f_m(\omega, x) = e^{-i\omega x} + \int_{-x}^x K_m(x, z) e^{-i\omega z} dz.$$

Die Funktionen K_p und K_m sind dabei eindeutig bestimmt und erfüllen die folgenden Gleichungen

$$\frac{\partial^2 K_p}{\partial x^2}(x, z) - \frac{\partial^2 K_p}{\partial z^2}(x, z) = q(x) K_p(x, z), \quad z \geq x, \quad (3.75)$$

$$\frac{dK_p}{dx}(x, x) = -\frac{1}{2}q(x), \quad x \geq 0, \quad (3.76)$$

$$K_p(x, z) = 0, \quad z < x,$$

bzw.

$$\frac{\partial^2 K_m}{\partial x^2}(x, z) - \frac{\partial^2 K_m}{\partial z^2}(x, z) = q(x) K_m(x, z), \quad z \leq x, \quad (3.77)$$

$$\frac{dK_m}{dx}(x, x) = \frac{1}{2}q(x), \quad x \geq 0, \quad (3.78)$$

$$K_m(x, z) = 0, \quad z > x.$$

Mit Satz 3.5 steht uns nun das erste wesentliche Zwischenergebnis auf dem Weg zur Lösung des Spiegel-Design-Problems zur Verfügung. Die Vorwärtsanalyse der Schrödinger-Gleichung hat gezeigt, daß zu jedem Potential q aus der vorgegebenen Klasse eindeutig bestimmte Funktionen K_p und K_m existieren, die einerseits die expliziten Darstellungen (3.49) und (3.52) für die Jost-Lösungen liefern und andererseits direkt mit q über die Beziehungen (3.76) und (3.78) zusammenhängen. Mit den Funktionen K_p und K_m haben wir also eine gemeinsame Bezugsgröße für die Lösung der Schrödinger-Gleichung und den Koeffizienten der Gleichung gefunden.

Für das inverse Problem bedeutet das, daß wir zu gegebenem Reflektionskoeffizienten r zunächst K_p oder K_m berechnen und anschließend q aus (3.76) oder (3.78) bestimmen. Aus Gleichung (2.16) wissen wir, daß r Koeffizient einer speziellen Lösung y der Schrödinger-Gleichung ist. Wie der folgende Abschnitt zeigen wird, läßt sich y als Linearkombination der Jost-Lösungen f_p und f_m darstellen und wir können die expliziten Darstellungen (3.49) und (3.52) verwenden. Damit erhalten wir einen direkten Zusammenhang zwischen r und K_p bzw. K_m und können damit die beiden Funktionen aus r berechnen.

Dieser Weg erfordert aber zunächst die Bereitstellung weiterer theoretischer Resultate. Dazu führen wir im nächsten Abschnitt die Streumatrix ein und untersuchen ihre analytischen und asymptotischen Eigenschaften.

3.1.2 Die Streumatrix und ihre Eigenschaften

Die Paare $f_p(-\omega, x), f_p(\omega, x)$ bzw. $f_m(-\omega, x), f_m(\omega, x)$ sind für reelles $\omega \neq 0$ linear unabhängige Lösungen der Schrödinger-Gleichung. Fassen wir diese als System 1. Ordnung auf, d.h.

$$z'(\omega, x) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\omega^2 + q(x) & 0 \end{pmatrix} z(\omega, x), \quad z(\omega, x) = \begin{pmatrix} y(\omega, x) \\ y'(\omega, x) \end{pmatrix},$$

dann bilden die Vektoren

$$(f_p(\omega, x), f_p'(\omega, x))^T, \quad (f_p(-\omega, x), f_p'(-\omega, x))^T$$

bzw.

$$(f_m(\omega, x), f_m'(\omega, x))^T, \quad (f_m(-\omega, x), f_m'(-\omega, x))^T$$

ein Fundamentalsystem. Da die Spur der Systemmatrix verschwindet, ist die Wronski-Determinante jedes Lösungssystems konstant für alle $x \in \mathbb{R}$ ([54]). Es genügt demnach, sie für f_p an der Stelle $x = +\infty$ und für f_m an der Stelle $x = -\infty$ zu betrachten, wo sie unter Verwendung der asymptotischen Eigenschaften von f_p und f_m berechnet werden kann:

$$\begin{aligned} W[f_p(\omega, x), f_p(-\omega, x)] &= f_p(\omega, x) f_p'(-\omega, x) - f_p'(\omega, x) f_p(-\omega, x) \\ &= \lim_{x \rightarrow +\infty} (-i\omega e^{i\omega x} e^{-i\omega x} - i\omega e^{-i\omega x} e^{i\omega x} + o(1)) = -2i\omega \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} W[f_m(\omega, x), f_m(-\omega, x)] &= f_m(\omega, x) f_m'(-\omega, x) - f_m'(\omega, x) f_m(-\omega, x) \\ &= \lim_{x \rightarrow -\infty} (i\omega e^{i\omega x} e^{-i\omega x} + i\omega e^{-i\omega x} e^{i\omega x} + o(1)) = 2i\omega. \end{aligned}$$

Jede Lösung der Schrödinger-Gleichung kann als Linearkombination von $f_p(\pm\omega, x)$ oder $f_m(\pm\omega, x)$ dargestellt werden. Speziell für die Jost-Lösungen ergibt sich dann

$$f_p(\omega, x) = \frac{r(\omega)}{t(\omega)} f_m(\omega, x) + \frac{1}{t(\omega)} f_m(-\omega, x), \quad (3.79)$$

$$f_m(\omega, x) = \frac{\rho(\omega)}{\tau(\omega)} f_p(\omega, x) + \frac{1}{\tau(\omega)} f_p(-\omega, x) \quad (3.80)$$

bzw.

$$\begin{aligned} \psi_p(\omega, x) &:= f_p(-\omega, x) + \rho(\omega) f_p(\omega, x) = \tau(\omega) f_m(\omega, x), \\ \psi_m(\omega, x) &:= f_m(-\omega, x) + r(\omega) f_m(\omega, x) = t(\omega) f_p(\omega, x). \end{aligned}$$

Die durch (3.79) und (3.80) eindeutig bestimmten Koeffizientenfunktionen $r(\omega)$, $\rho(\omega)$, $t(\omega)$ und $\tau(\omega)$ haben physikalische Bedeutung. So bezeichnet etwa $r(\omega)$ den in Abschnitt 2.2 eingeführten Reflektionskoeffizienten und $t(\omega)$ den Transmissionskoeffizienten.

Mathematisch gesehen existieren die Koeffizienten $1/\tau(\omega)$ und $1/t(\omega)$ für alle reellen $\omega \neq 0$ und sind damit endlich, was bedeutet, daß τ und t dort keine Nullstellen besitzen und ihre Pole die Nullstellen des entsprechenden Quotienten sind.

Die neu definierten Funktionen ψ_p und ψ_m bezeichnet man als physikalische Lösungen der Schrödinger-Gleichung (2.11). Unter Berücksichtigung der asymptotischen Eigenschaften der Jost-Lösungen f_p und f_m folgt

$$\psi_p(\omega, x) \quad \begin{cases} = \tau(\omega) e^{-i\omega x}, & x < 0, \\ \cong e^{-i\omega x} + \rho(\omega) e^{i\omega x}, & x \rightarrow +\infty, \end{cases} \quad (3.81)$$

$$\psi_m(\omega, x) \quad \begin{cases} \cong t(\omega) e^{i\omega x}, & x \rightarrow +\infty, \\ = e^{i\omega x} + r(\omega) e^{-i\omega x}, & x < 0, \end{cases} \quad (3.82)$$

d.h. die physikalische Lösung ψ_m stimmt genau mit der in (2.16), (2.17) zur Definition des komplexen Reflektionskoeffizienten r eingeführten speziellen Lösung y der Schrödinger-Gleichung überein.

Die Koeffizientenfunktionen $r(\omega)$, $\rho(\omega)$, $t(\omega)$ und $\tau(\omega)$ definieren die Streumatrix

$$S(\omega) = \begin{pmatrix} t(\omega) & \rho(\omega) \\ r(\omega) & \tau(\omega) \end{pmatrix},$$

wobei deren einzelne Elemente folgende physikalische Bedeutung haben:

$t(\omega)$: Transmissionskoeffizient auf der rechten Spiegel-Seite,

$\tau(\omega)$: Transmissionskoeffizient auf der linken Spiegel-Seite,

$\rho(\omega)$: Reflektionskoeffizient auf der rechten Spiegel-Seite,

$r(\omega)$: Reflektionskoeffizient auf der linken Spiegel-Seite.

Wir wollen nun einige wichtige Beziehungen zwischen den Elementen der Streumatrix herleiten. Wegen

$$W[f_p(\omega, x), f_p(\omega, x)] = W[f_m(\omega, x), f_m(\omega, x)] = 0$$

folgt für reelle $\omega \neq 0$ aus (3.79) und (3.80)

$$\begin{aligned}\frac{1}{\tau(\omega)} &= -\frac{1}{2i\omega} W[f_p(\omega, x), f_m(\omega, x)] = \frac{1}{t(\omega)}, \\ \frac{\rho(\omega)}{\tau(\omega)} &= -\frac{1}{2i\omega} W[f_m(\omega, x), f_p(-\omega, x)], \\ \frac{r(\omega)}{t(\omega)} &= -\frac{1}{2i\omega} W[f_m(-\omega, x), f_p(\omega, x)].\end{aligned}\tag{3.83}$$

Aus der ersten Gleichung (3.83) läßt sich ablesen, daß

$$\tau(\omega) = t(\omega)$$

gilt, woraus sich zusammen mit der zweiten und dritten Gleichung

$$\rho(\omega) t(-\omega) + r(-\omega) t(\omega) = 0$$

ergibt. Wegen $f_{p/m}(-\omega, x) = \overline{f_{p/m}(\omega, x)}$ für $\omega \in \mathbb{R}$ folgt außerdem

$$\overline{t(\omega)} = t(-\omega), \quad \overline{\rho(\omega)} = \rho(-\omega), \quad \overline{r(\omega)} = r(-\omega).$$

Setzen wir schließlich (3.79) in (3.80) ein, ergibt ein Koeffizientenvergleich

$$|t(\omega)|^2 + |r(\omega)|^2 = 1 = |t(\omega)|^2 + |\rho(\omega)|^2.$$

Für reelles $\omega \neq 0$ ist damit

$$|\det S(\omega)| = \left| \frac{t(\omega)}{t(-\omega)} \right| = 1,$$

d.h. $S(\omega)$ ist eine unitäre Matrix.

Die Gleichungen (3.79) und (3.80) können wir wieder auf die eingeführten Funktionen F_p und F_m transformieren und erhalten

$$F_m(\omega, x) = \frac{\rho(\omega)}{\tau(\omega)} e^{2i\omega x} F_p(\omega, x) + \frac{1}{\tau(\omega)} F_p(-\omega, x),\tag{3.84}$$

$$F_p(\omega, x) = \frac{r(\omega)}{t(\omega)} e^{-2i\omega x} F_m(\omega, x) + \frac{1}{t(\omega)} F_m(-\omega, x).\tag{3.85}$$

Im folgenden wollen wir die asymptotischen und analytischen Eigenschaften der Streumatrix-Koeffizienten herleiten, die sich aus den Eigenschaften der Jost-Lösungen zu gegebenem Potential q ergeben. Dazu gehen wir einerseits von der impliziten Integraldarstellung (3.8) für F_p aus:

$$\begin{aligned}F_p(\omega, x) &= 1 + \int_x^\infty \frac{e^{2i\omega(\xi-x)} - 1}{2i\omega} q(\xi) F_p(\omega, \xi) d\xi \\ &= e^{-2i\omega x} \left(\frac{1}{2i\omega} \int_x^\infty e^{2i\omega\xi} q(\xi) F_p(\omega, \xi) d\xi \right) + 1 - \frac{1}{2i\omega} \int_x^\infty q(\xi) F_p(\omega, \xi) d\xi.\end{aligned}$$

Andererseits gilt (3.85), d.h.

$$F_p(\omega, x) = \frac{r(\omega)}{t(\omega)} e^{-2i\omega x} F_m(\omega, x) + \frac{1}{t(\omega)} F_m(-\omega, x),$$

und weiter wissen wir, daß

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} F_m(\pm\omega, x) = 1$$

ist. Betrachten wir nun den Grenzfall $x \rightarrow -\infty$ und vergleichen die beiden obigen Darstellungen von F_p miteinander, dann folgt

$$\begin{aligned} \frac{r(\omega)}{t(\omega)} &= \frac{1}{2i\omega} \int_{-\infty}^{\infty} e^{2i\omega\xi} q(\xi) F_p(\omega, \xi) d\xi, \\ \frac{1}{t(\omega)} &= 1 - \frac{1}{2i\omega} \int_{-\infty}^{\infty} q(\xi) F_p(\omega, \xi) d\xi. \end{aligned}$$

Da $q(\xi) = 0$ für $\xi < 0$ gilt, ergibt sich daraus

$$\frac{r(\omega)}{t(\omega)} = \frac{1}{2i\omega} \int_0^{\infty} e^{2i\omega\xi} q(\xi) F_p(\omega, \xi) d\xi, \quad (3.86)$$

$$\frac{1}{t(\omega)} = 1 - \frac{1}{2i\omega} \int_0^{\infty} q(\xi) F_p(\omega, \xi) d\xi. \quad (3.87)$$

Für $\text{Im } \omega \geq 0$ gilt nach (3.23):

$$\left| \int_0^{\infty} e^{2i\omega\xi} q(\xi) F_p(\omega, \xi) d\xi \right| \leq B_2 \int_0^{\infty} e^{-2\text{Im } \omega\xi} (1 + \xi) |q(\xi)| d\xi \leq B_2 (C_{\sigma_1} + C_{\sigma})$$

und

$$\left| \int_0^{\infty} q(\xi) F_p(\omega, \xi) d\xi \right| \leq B_2 (C_{\sigma_1} + C_{\sigma}),$$

d.h. die in (3.86) und (3.87) auftretenden Integrale existieren und definieren holomorphe Funktionen. Also besitzen $r(\omega)/t(\omega)$ und $1/t(\omega)$ analytische Fortsetzungen auf $\text{Im } \omega > 0$ und insbesondere gilt (3.83) auch für $\omega \in D$. Aus (3.86) und (3.87) folgt außerdem

$$\frac{r(\omega)}{t(\omega)} = O\left(\frac{1}{\omega}\right), \quad |\omega| \rightarrow \infty,$$

und

$$\frac{1}{t(\omega)} = 1 + O\left(\frac{1}{\omega}\right), \quad |\omega| \rightarrow \infty.$$

Daraus ergibt sich

$$t(\omega) = 1 + O\left(\frac{1}{\omega}\right), \quad |\omega| \rightarrow \infty, \quad \text{Im } \omega \geq 0,$$

und damit

$$r(\omega) = O\left(\frac{1}{\omega}\right), \quad |\omega| \rightarrow \infty, \quad \text{Im } \omega \geq 0.$$

Die analoge Vorgehensweise für F_m führt auf

$$\frac{\rho(\omega)}{t(\omega)} = \frac{1}{2i\omega} \int_0^\infty e^{-2i\omega\xi} q(\xi) F_m(\omega, \xi) d\xi, \quad (3.88)$$

$$\frac{1}{t(\omega)} = 1 - \frac{1}{2i\omega} \int_0^\infty q(\xi) F_m(\omega, \xi) d\xi. \quad (3.89)$$

Hier tritt im Betrag des ersten Integranden der Faktor $e^{2\text{Im}\omega\xi}$ auf. Das zugehörige Integral existiert in diesem Fall nur für ω mit $\text{Im } \omega \leq 0$. Wir verwenden die Abschätzung (3.29) und erhalten

$$\left| \int_0^\infty e^{-2i\omega\xi} q(\xi) F_m(\omega, \xi) d\xi \right| \leq B_1 \int_0^\infty (1 + \xi) |q(\xi)| d\xi \leq B_1 (C_{\sigma_1} + C_\sigma).$$

Da (3.29) nur für $\text{Im } \omega \geq 0$ möglich ist, gilt die entsprechende Gleichung für ρ nur für reelle ω :

$$\frac{\rho(\omega)}{t(\omega)} = O\left(\frac{1}{\omega}\right), \quad |\omega| \rightarrow \infty, \quad \omega \text{ reell,}$$

und damit wie bei r

$$\rho(\omega) = O\left(\frac{1}{\omega}\right), \quad |\omega| \rightarrow \infty, \quad \omega \text{ reell.}$$

Die im Vergleich zum rechtsseitigen Reflektionskoeffizienten ρ genauere Kenntnis der asymptotischen Eigenschaften von r ist eine direkte Folge aus der Tatsache, daß das Potential q auf der negativen Halbachse verschwindet. Dadurch wird die untere Grenze in den obigen Integralen zu 0 anstelle von $-\infty$ und es genügt die Einschränkung auf ω aus der abgeschlossenen, oberen komplexen Halbebene.

Mit Hilfe der bisherigen Ergebnisse können wir nun auch analytische Eigenschaften von t und r herleiten. Aus (3.83) folgt, daß $1/t(\omega) \neq 0$ für reelle $\omega \neq 0$ ist. Aufgrund von (3.87) gilt $1/t(\omega) \neq 0$ auch für hinreichend große $|\omega|$ mit $\text{Im } \omega \geq 0$, also besitzt $1/t(\omega)$ höchstens endlich viele Nullstellen in der oberen komplexen Halbebene D , d.h. t ist meromorph in D . Weiterhin ist $t(\omega) \neq 0$ für reelle $\omega \neq 0$.

Wir wollen nun die Lage der Polstellen von t in D bestimmen. Falls ω_0 Nullstelle von $1/t(\omega)$ in D und somit Polstelle von $t(\omega)$ ist, folgt aus (3.83)

$$W[f_p(\omega_0, x), f_m(\omega_0, x)] = 0,$$

d.h. die Jost-Lösungen $f_p(\omega_0, x), f_m(\omega_0, x)$ sind linear abhängig:

$$f_p(\omega_0, x) = \lambda \cdot f_m(\omega_0, x), \quad \lambda \neq 0. \quad (3.90)$$

Aus den asymptotischen Eigenschaften (3.2) und (3.3) sehen wir, daß $f_p(\omega, x)$ für $x \rightarrow +\infty$ und $f_m(\omega, x)$ für $x \rightarrow -\infty$ exponentiell abfallen, falls $\omega \in D$ ist. Nach (3.90) müssen demnach $f_p(\omega_0, x)$ und $f_m(\omega_0, x)$ beide für $x \rightarrow \pm\infty$ exponentiell abfallen, also insbesondere quadrat-integrierbar auf der ganzen reellen Achse sein, d.h. $f_p(\omega_0, \cdot), f_m(\omega_0, \cdot) \in L^2(\mathbb{R})$.

Die Schrödinger-Gleichung (2.11) mit Jost-Randwerten (3.2) bzw. (3.3) können wir nun als Eigenwertproblem formulieren. Dazu definieren wir den Operator T_s durch

$$-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + q =: T_s : \mathcal{D}(T_s) = H^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$$

mit

$$H^2(\mathbb{R}) := \{y \in L^2(\mathbb{R}) \mid y'' \in L^2(\mathbb{R})\}$$

und erhalten

$$T_s y = \omega^2 y. \quad (3.91)$$

Da das Potential $q(x)$ nach Voraussetzung beschränkt und reell für reelle x ist und $H^2(\mathbb{R})$ dicht in $L^2(\mathbb{R})$ liegt, ist T_s ein selbst-adjungierter Operator ([55]).

Im folgenden wollen wir nun einen Zusammenhang zwischen den Eigenwerten von T_s und den Polstellen von t herleiten. Dazu wählen wir eine Polstelle $\omega_0 \in D$ von t . Dann sind die Jost-Lösungen $f_p(\omega_0, \cdot)$ und $f_m(\omega_0, \cdot)$ der Schrödinger-Gleichung (3.1), wie oben gesehen, linear abhängig und Elemente von $L^2(\mathbb{R})$. Da q beschränkt ist, gilt $q f_p \in L^2(\mathbb{R})$ und damit auch $f_p'' = q f_p - \omega_0^2 f_p \in L^2(\mathbb{R})$. Also ist $f_p(\omega_0, \cdot)$ Element von $H^2(\mathbb{R})$ und damit Eigenfunktion von T_s zum reellen Eigenwert ω_0^2 . Da ω_0 in der oberen komplexen Halbebene D liegt, folgt $\omega_0 = ia$, $a > 0$. Die Polstellen von t in D liegen demnach alle auf der positiven imaginären Achse, denn gäbe es eine weitere Polstelle $\omega_1 \in D$ mit nichtverschwindendem Realteil, dann wären $f_p(\omega_1, \cdot)$ und $f_m(\omega_1, \cdot)$ Eigenfunktionen von T_s zu einem nicht-reellen Eigenwert ω_1^2 , was wegen der Selbstadjungiertheit von T_s nicht möglich ist.

Da t außerdem meromorph in D ist, besitzt t nur endlich viele Polstellen, die alle auf der imaginären Achse liegen und deren Quadrate Eigenwerte des Operators T_s sind. Die Anzahl und Lage der Polstellen hängt von der speziellen Wahl des Potentials q ab. Sie bezeichnen genau diejenigen Parameter ω der Schrödinger-Gleichung, bei denen die zugehörigen Jost-Lösungen f_p und f_m linear abhängig sind. Man bezeichnet sie deshalb in der Literatur auch als „gebundene Zustände“ (bound states). Da r/t in D holomorph ist, ist r dort ebenfalls meromorph und die Polstellen von t und r stimmen überein.

Wir wollen nun die Ergebnisse dieses Abschnitts zusammenfassen:

Satz 3.6 *Zu jedem Potential $q(x)$ der Schrödinger-Gleichung (2.11) mit den Eigenschaften (Q1)-(Q5) (siehe Seite 18) existiert die eindeutig bestimmte Streumatrix*

$$S(\omega) = \begin{pmatrix} t(\omega) & \rho(\omega) \\ r(\omega) & \tau(\omega) \end{pmatrix}$$

mit den folgenden Eigenschaften:

(a) Die Elemente von $S(\omega)$ sind stetig für alle reellen $\omega \neq 0$, und es gelten die folgenden Beziehungen:

$$\tau(\omega) = t(\omega), \quad (3.92)$$

$$\rho(\omega) t(-\omega) = -r(-\omega) t(\omega), \quad (3.93)$$

$$|t(\omega)|^2 + |r(\omega)|^2 = 1, \quad (3.94)$$

$$|t(\omega)|^2 + |\rho(\omega)|^2 = 1, \quad (3.95)$$

$$\overline{t(\omega)} = t(-\omega), \quad \overline{r(\omega)} = r(-\omega), \quad \overline{\rho(\omega)} = \rho(-\omega). \quad (3.96)$$

(b) Die Elemente von $S(\omega)$ haben die folgenden asymptotischen Darstellungen:

$$t(\omega) = 1 + O\left(\frac{1}{\omega}\right), \quad |\omega| \rightarrow \infty, \quad \text{Im } \omega \geq 0, \quad (3.97)$$

$$r(\omega) = O\left(\frac{1}{\omega}\right), \quad |\omega| \rightarrow \infty, \quad \text{Im } \omega \geq 0, \quad (3.98)$$

$$\rho(\omega) = O\left(\frac{1}{\omega}\right), \quad |\omega| \rightarrow \infty, \quad \omega \text{ reell.} \quad (3.99)$$

(c) $t(\omega) \neq 0$, $|r(\omega)| < 1$, $|\rho(\omega)| < 1$, für reelles $\omega \neq 0$.

(d) $t(\omega)$ und $r(\omega)$ sind meromorph in der oberen komplexen Halbebene D . Ihre Pole $\{\omega_1, \dots, \omega_n\}$ stimmen überein, sind rein imaginär und deren Quadrate sind Eigenwerte des Operators $T_s = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + q$.

3.1.3 Das Charakterisierungsproblem

In den bisherigen Abschnitten wurde nur das Vorwärtsproblem für die Schrödinger-Gleichung (2.11) betrachtet. Ausgehend von einer Klasse von Potentialen q , definiert durch die Bedingungen (Q1)-(Q5) haben wir die daraus resultierenden Eigenschaften der Jost-Lösungen f_p und f_m hergeleitet. Die Bedingungen an q genügen den physikalischen Anforderungen. Jedem Potential q ist außerdem eine eindeutige Streumatrix S zugeordnet, die das spektrale Verhalten des gesuchten Spiegels charakterisiert. Aus den Eigenschaften von f_p und f_m ergeben sich notwendige Bedingungen an das asymptotische Verhalten und an die analytischen Eigenschaften der Streumatrixelemente, die wir in Satz 3.6 zusammengefaßt haben.

Für das inverse Problem stellt sich nun die Frage, ob die Aussage des Satzes 3.6 auch umgekehrt gilt, d.h. es ist zu klären, ob aus einer gegebenen Streumatrix S mit den hergeleiteten Eigenschaften das zugehörige eindeutige Potential q mit (Q1)-(Q5) zu rekonstruieren ist.

Unsere zu Beginn festgelegte Vorgehensweise zur Lösung des Spiegel-Design-Problems ging davon aus, daß die Spektraleigenschaften des Spiegels einzig und allein über den Reflektionskoeffizienten r festgelegt sind. Für die Umkehrung von Satz 3.6 müssen wir zu gegebenem r alle übrigen Elemente der Streumatrix berechnen können, d.h. S muß alleine durch r eindeutig bestimmt sein.

Gleichung (3.94) zeigt, daß aus r zunächst nur der Betrag der komplexen Funktion t berechnet werden kann. Da die Polstellen von t mit denen von r in D übereinstimmen und auf der positiven imaginären Achse liegen, existiert der komplexe Logarithmus $\log t(\omega)$ und wir können daraus das zugehörige Argument von $t(\omega)$ berechnen. Der zweite Reflektionskoeffizient $\rho(\omega)$ ergibt sich dann aus (3.93) und wir erhalten die gesamte Streumatrix.

Für das inverse Problem stellt sich die Frage, ob damit auch das Potential q eindeutig festgelegt ist. Aktosun ([2]) und Grebert/Weder ([19]) zeigen, daß ein reelles Potential $q(x)$ der Schrödinger-Gleichung (2.11), welches die Bedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty} (1 + |x|) |q(x)| dx < \infty$$

erfüllt, eindeutig festgelegt ist durch den linksseitigen Reflektionskoeffizienten $r(\omega)$ und die Kenntnis von q auf der negativen Halbachse, in unserem Fall $q(x) = 0$, $x < 0$.

Die Kenntnis des Potentials auf der negativen Halbachse sorgt dafür, daß r/t zu einer holomorphen Funktion in D wird, die Pole von t also mit Vorgabe von r bekannt sind. Ohne dieses Wissen über q können die Pole von t und damit die Funktion t nicht aus r berechnet werden, sondern müssen extra vorgegeben werden, womit die Eindeutigkeit von q zu gegebenem r verloren geht.

Die für das Spiegel-Design-Problem gewählte Klasse von Potentialen q gewährleistet also, daß jedem Reflektionskoeffizienten r höchstens ein q aus dieser Klasse zugeordnet ist. Zur Sicherung der Existenz eines solchen Potentials q müssen aber weitere Anstrengungen unternommen werden. Aus Satz 3.6 ergeben sich bereits notwendige Bedingungen an die analytischen und asymptotischen Eigenschaften von r . Diese sind aber noch nicht hinreichend, um die Existenz von q sicherzustellen, sondern müssen durch zusätzliche Bedingungen an r und q ergänzt werden.

Im folgenden wollen wir nur Reflektionskoeffizienten r betrachten, die holomorph in D sind. Das bedeutet keine wesentliche Einschränkung, da in der Praxis der Laseroptik alle stabilen Systeme diese Bedingung erfüllen. Nach den bisherigen Ausführungen ist dann $t(\omega)$ ebenfalls holomorph für $\omega \in D$ und hat dort und auf der reellen Achse, außer möglicherweise für $\omega = 0$, keine Nullstellen. Dann ist auch

$$\log t(\omega) = \log |t(\omega)| + i\theta(\omega)$$

holomorph in D und wegen (3.97) gilt

$$\lim_{|\omega| \rightarrow \infty} \log t(\omega) = 0, \quad \text{Im } \omega \geq 0. \quad (3.100)$$

Aus (3.96) ergibt sich außerdem

$$\log t(-\omega) = \log \overline{t(\omega)} = \log |t(\omega)| - i\theta(\omega) = \overline{\log t(\omega)}. \quad (3.101)$$

Nach dem Hauptsatz der Cauchyschen Funktionentheorie folgt

$$n(\Gamma, \omega) \cdot \log t(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{\log t(k)}{k - \omega} dk, \quad \text{Im } \omega > 0, \quad \omega \notin |\Gamma|,$$

wobei Γ einen geschlossenen Halbkreis auf der reellen Achse und der oberen komplexen Halbebene mit Radius R_Γ bezeichnet. Wir betrachten wieder den Grenzfall $R_\Gamma \rightarrow +\infty$. Für die Umlaufzahl $n(\Gamma, \omega)$ gilt dann

$$n(\Gamma, \omega) = \begin{cases} 1, & \text{Im } \omega > 0, \\ 0, & \text{Im } \omega < 0. \end{cases}$$

Wegen (3.100) konvergiert das Integral über dem Halbkreisbogen gegen Null und übrig bleibt das Integral über der reellen Achse. Mit den Werten für die Umlaufzahl ergibt sich

$$\log t(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\log t(k)}{k - \omega} dk, \quad \text{Im } \omega > 0, \quad (3.102)$$

$$0 = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\log t(k)}{k - \omega} dk, \quad \text{Im } \omega < 0. \quad (3.103)$$

In (3.103) gehen wir zur konjugiert komplexen Gleichung über und mit (3.101) folgt:

$$0 = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\log t(-k)}{k - \omega} dk, \quad \text{Im } \omega > 0. \quad (3.104)$$

Nun subtrahieren wir (3.104) von (3.102) und erhalten

$$\log t(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\log t(k) + \log t(-k)}{k - \omega} dk, \quad \text{Im } \omega > 0.$$

Da die komplexen Zahlen $t(k)$ und $t(-k) = \overline{t(k)}$ jeweils die negative Phase der anderen besitzen, gilt das Gesetz über die Summe der Logarithmen wie in \mathbb{R} und mit (3.95) und (3.96) folgt

$$\begin{aligned} \log t(\omega) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\log(t(k)t(-k))}{k - \omega} dk \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\log(1 - r(k)r(-k))}{k - \omega} dk, \quad \text{Im } \omega > 0. \end{aligned} \quad (3.105)$$

Zum Schluß integrieren wir beide Seiten der Gleichung, die Integrationskonstante verschwindet wegen (3.100), und wir erhalten die explizite Darstellung für $t(\omega)$:

$$t(\omega) = \exp \left(\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\log(1 - r(k)r(-k))}{k - \omega} dk \right), \quad \text{Im } \omega > 0. \quad (3.106)$$

Ferner ist t stetig fortsetzbar auf die reelle Achse durch

$$t(\omega) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} t(\omega + i\varepsilon), \quad \omega \neq 0, \quad \omega \text{ reell.}$$

Mit der Kenntnis von t kann nun auch der rechtsseitige Reflektionskoeffizient ρ über (3.93), also die gesamte Streumatrix S aus r berechnet werden.

Über einen in D holomorphen Reflektionskoeffizienten r als Eingabegröße für das inverse Spiegel-Design-Problem erhalten wir also explizite Darstellungen für die anderen Elemente der Streumatrix S und ein eindeutiges Potential q , daß diesem S zugeordnet ist. In Satz 3.6 haben wir gesehen, daß r zusätzlich die asymptotische Eigenschaft (3.98) besitzen muß. Unklar ist aber weiterhin, ob diese Bedingungen bereits hinreichend sind, um die Existenz eines Potentials q sichern, daß die für das Vorwärtsproblem geforderten Eigenschaften (Q1)-(Q5) erfüllt.

Die diesbezüglichen mathematischen Analysen von Chadan/Sabatier ([12]) oder Deift/Trubowitz ([14]) für allgemeines q , d.h. ohne Kenntnis von q auf der negativen Halbachse, haben gezeigt, daß wir hierfür die Potential-Klasse durch die zusätzliche Bedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x|^2 |q(x)| dx < \infty \quad (\text{Q6})$$

weiter einschränken müssen. Unter dieser zusätzlichen Voraussetzung sind die Streumatrixelemente auch stetig in $\omega = 0$ und wir erhalten das bekannte und in der einschlägigen Literatur vielfach verwendete Charakterisierungstheorem:

Satz 3.7 (*Charakterisierungstheorem*)

Eine Matrix

$$S(\omega) = \begin{pmatrix} t(\omega) & \rho(\omega) \\ r(\omega) & \tau(\omega) \end{pmatrix}$$

ist die Streumatrix für ein reelles Potential q ohne „gebundene Zustände“ mit

$$\int_{-\infty}^{\infty} (1 + |x|) |q(x)| dx < \infty,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x|^2 |q(x)| dx < \infty,$$

genau dann, wenn die Koeffizientenfunktionen t, τ, ρ, r die folgenden Bedingungen erfüllen:

(a) $S(\omega)$ ist stetig für reelle ω , und es gelten die folgenden Beziehungen:

$$\begin{aligned} \tau(\omega) &= t(\omega), \\ \rho(\omega) t(-\omega) &= -r(-\omega) t(\omega), \\ |t(\omega)|^2 + |r(\omega)|^2 &= 1, \\ |t(\omega)|^2 + |\rho(\omega)|^2 &= 1, \\ \overline{t(\omega)} &= t(-\omega), \quad \overline{r(\omega)} = r(-\omega), \quad \overline{\rho(\omega)} = \rho(-\omega). \end{aligned}$$

(b) $t(\omega)$ ist holomorph in $\text{Im } \omega > 0$ und stetig in $\text{Im } \omega = 0$.

(c) $|t(\omega)| > 0$, $|r(\omega)| < 1$, $|\rho(\omega)| < 1$, für $\text{Im } \omega \geq 0$, $\omega \neq 0$, und für $\omega = 0$ gilt entweder

$$0 < c < |t(\omega)|$$

oder

$$t(\omega) = t'(\omega)\omega + o(\omega), \quad |\omega| \rightarrow 0, \quad \text{Im } \omega \geq 0,$$

und

$$1 + r(\omega) = \alpha\omega + o(\omega), \quad |\omega| \rightarrow 0, \quad \omega \text{ reell}, \quad \alpha \in \mathbb{C},$$

$$1 + \rho(\omega) = \beta\omega + o(\omega), \quad |\omega| \rightarrow 0, \quad \omega \text{ reell}, \quad \beta \in \mathbb{C}.$$

(d) Die Elemente von $S(\omega)$ haben die folgenden asymptotischen Darstellungen:

$$t(\omega) = 1 + O\left(\frac{1}{\omega}\right), \quad |\omega| \rightarrow \infty, \quad \text{Im } \omega \geq 0,$$

$$r(\omega) = O\left(\frac{1}{\omega}\right), \quad |\omega| \rightarrow \infty, \quad \omega \text{ reell},$$

$$\rho(\omega) = O\left(\frac{1}{\omega}\right), \quad |\omega| \rightarrow \infty, \quad \omega \text{ reell}.$$

(e) Die Fouriertransformierten von r und ρ , definiert durch

$$R(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} r(k) e^{-ikz} dk, \quad (3.107)$$

$$P(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \rho(k) e^{-ikz} dk, \quad (3.108)$$

sind absolut stetig mit

$$\int_{-\infty}^a |R'(t)|(1+t^2)dt \leq c(a) < \infty, \quad (3.109)$$

$$\int_{-\infty}^a |P'(t)|(1+t^2)dt \leq d(a) < \infty \quad (3.110)$$

für beliebiges, endliches $a \in \mathbb{R}$.

Beweis: Deift/Trubowitz ([14]), Faddeev ([16]), Chadan/Sabatier ([12]).

In unserem Fall gilt nun zusätzlich $q(x) = 0$, $x < 0$. Wie wir weiter oben bereits gezeigt haben, fallen dann die Pole von r und t in D zusammen und r/t wird zu einer holomorphen Funktion. Für die im Charakterisierungstheorem gewählte Potentialklasse ohne gebundene Zustände folgt, daß t und damit r selbst holomorph in D sind. Außerdem gilt Gleichung (3.106), mit deren Hilfe t aus r berechnet werden kann. Die übrigen Elemente τ und ρ der Streumatrix ergeben sich dann aus (3.92) und (3.93).

Aktosun ([2], [3]) zeigt außerdem, daß auch die umgekehrte Richtung gilt, nämlich daß jedem in D holomorphen Reflektionskoeffizienten r ein eindeutiges Potential q aus der gewünschten Klasse zugeordnet ist, welches auf der negativen Halbachse verschwindet.

Für die Lösung des inversen Spiegel-Design-Problems wählen wir also stets einen in D holomorphen Reflektionskoeffizienten r mit den zusätzlichen Eigenschaften gemäß des allgemeinen Charakterisierungstheorems und erhalten das entsprechend unserer Modellierung gewünschte eindeutige Potential q der Schrödinger-Gleichung mit $q(x) = 0$, $x < 0$.

Mit der auf unsere Situation angepaßten Form des Charakterisierungstheorems haben wir unser inverses Problem hinreichend quantifiziert. Wir kennen nun den Bild- und Urbildbereich, die die Zuordnung $M : r \rightarrow q$ zu einer wohldefinierten und umkehrbaren Abbildung machen. Die Klassen möglicher q und r mußten wir dazu einschränken, um den physikalischen und mathematischen Anforderungen wie etwa der Existenz und Eindeutigkeit der Lösung gerecht zu werden. Im folgenden wollen wir nun einen Algorithmus entwickeln, der uns das Potential q zu gegebenem r liefert.

3.2 Das inverse Problem

3.2.1 Herleitung der Marchenko-Integralgleichungen

In den vorherigen Abschnitten haben wir zunächst das Vorwärtsproblem für eine festgelegte Klasse von Potentialen q der Schrödinger-Gleichung analysiert. Die spezielle Wahl war dadurch motiviert, daß die aus Potentialen dieser Klasse resultierende 2×2 -Streumatrix S gewisse analytische und asymptotische Eigenschaften besitzt, die für die eindeutige Lösbarkeit des Rückwärtsproblems von grundlegender Bedeutung sind. Hier ist die Matrix S vorzugeben und daraus das zu diesem S führende reelle Schrödinger-Potential q zu berechnen, was bedeutet, daß die Matrix S bereits mit der Vorgabe einer ihrer Koeffizientenfunktionen eindeutig bestimmt sein muß.

Aus der Analyse des Vorwärtsproblems haben wir hierfür notwendige Bedingungen an die Elemente von S hergeleitet. Mit der Festlegung weiterer Vorgaben an S und einer geringfügigen Einschränkung der gewählten Potential-Klasse werden diese notwendig und hinreichend und machen die Zuordnung $r \leftrightarrow q$ zu einer eineindeutigen Abbildung. Die entsprechende Aussage haben wir im Charakterisierungstheorem 3.7 mathematisch präzise formuliert.

In diesem Abschnitt geht es nun um die Frage, wie man das Rückwärtsproblem konkret löst, also zu gegebener Streumatrix S , d.h. zu gegebenem Reflektionskoeffizienten r , das zugehörige Potential q berechnet. Wie wir in Abschnitt 3.1 gesehen haben, liegt der Schlüssel zur Lösung des inversen Problems in der Berechnung der Funktion $K_p(x, z)$ bzw. $K_m(x, z)$. Wir haben gezeigt, daß dieses K_p bzw. K_m die eindeutige Lösung der Integralgleichung (3.55) bzw. (3.57) ist und sich das gesuchte Potential q aus (3.76) bzw. (3.78) ergibt.

Die unmittelbare Verwendung der Gleichungen (3.55) und (3.57) zur Lösung des inversen Problems ist nicht möglich, da sie aus der Analyse des Vorwärtsproblems resultieren und anstelle des Reflektionskoeffizienten vom ebenfalls unbekanntem Potential abhängen. Sie liefern aber wichtige Erkenntnisse über die (notwendigen) analytischen Eigenschaften von K_p und K_m , die wir in Satz 3.5 zusammengefaßt haben. Insbesondere sind $K_p(x, z)$ und $K_m(x, z)$ danach zweimal stetig differenzierbar und erfüllen die hyperbolischen Differentialgleichungen (3.75) und (3.77).

Die inverse Berechnung von K_p und K_m soll diese Eigenschaften erhalten. Besonders beim Einsatz numerischer Verfahren ist es notwendig, daß (3.75) und (3.77) im klassischen Sinn gelten, d.h. daß mindestens alle partiellen Ableitungen 2. Ordnung von $K_p(x, z)$ und $K_m(x, z)$ existieren und stückweise stetig sind. Ausgehend von den Vorgaben des Charakterisierungstheorems 3.7 an den Reflektionskoeffizienten r können wir das noch nicht garantieren, sondern müssen die Klasse möglicher Koeffizienten etwas weiter einschränken. Wie diese weiteren Bedingungen an r genau aussehen, sehen wir im Rahmen der folgenden Herleitung.

Aus den Integralgleichungen (3.55) und (3.57) der Vorwärtsrechnung lassen sich K_p und K_m als eindeutige Lösungen zu gegebenem Potential q berechnen. Für die Rückwärtsrichtung wollen wir genauso vorgehen und eine Gleichung herleiten, deren Lösung K_p bzw. K_m zu gegebenem Reflektionskoeffizienten r eindeutig festgelegt ist und die gewünschten analytischen Eigenschaften besitzt.

Dazu gehen wir aus von den Gleichungen (3.79) und (3.80), die in eindeutiger Weise die Elemente der Streumatrix S definieren, und multiplizieren beide Seiten mit dem Transmissionskoeffizienten $t(\omega)$:

$$t(\omega) f_m(\omega, x) = f_p(-\omega, x) + \rho(\omega) f_p(\omega, x), \quad (3.111)$$

$$t(\omega) f_p(\omega, x) = f_m(-\omega, x) + r(\omega) f_m(\omega, x). \quad (3.112)$$

Anschließend führen wir auf beiden Seiten der Gleichungen die Fouriertransformation nach ω durch. Diese existiert formal nur, wenn wir die auftretenden Funktionen als temperierte Distributionen auffassen und die fouriertransformierten Distributionen wieder mit den zugehörigen fouriertransformierten Funktionen identifizieren. Für (3.111) erhalten wir

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} t(\omega) f_m(\omega, x) e^{-i\omega z} d\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f_p(-\omega, x) e^{-i\omega z} d\omega + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\omega) f_p(\omega, x) e^{-i\omega z} d\omega.$$

Nun ersetzen wir die Jost-Lösungen f_p und f_m durch ihre Integraldarstellungen (3.49) und (3.52):

$$\begin{aligned} & \underbrace{\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} t(\omega) e^{-i\omega(x+z)} d\omega}_{=:T(x+z)} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} t(\omega) \int_{-x}^x K_m(x, t) e^{-i\omega t} dt e^{-i\omega z} d\omega \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega(x+z)} d\omega + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_x^{\infty} K_p(x, t) e^{-i\omega t} dt e^{-i\omega z} d\omega \\ &+ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\omega) e^{-i\omega(z-x)} d\omega + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\omega) \int_x^{\infty} K_p(x, t) e^{i\omega t} dt e^{-i\omega z} d\omega, \end{aligned}$$

d.h. T bezeichnet die Fouriertransformierte des Transmissionskoeffizienten t . Das erste Integral der rechten Seite führt auf eine Delta-Distribution δ , alle übrigen Fourierintegrale existieren auch im gewöhnlichen Sinn. Aus diesem Grund fassen wir δ ebenfalls als Funktion auf mit

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0, \\ \infty, & x = 0, \end{cases}$$

und

$$\delta(x+z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega(x+z)} d\omega.$$

Diese anschauliche Vorgehensweise ist mathematisch nicht vollständig korrekt, entspricht aber der gängigen Praxis in der einschlägigen Literatur ([13], [27], [7]). In den weiteren Rechnungen bezeichnet δ stets die Delta-Distribution und ist nicht zu verwechseln mit dem Koeffizienten $\delta(\omega)$ im Zusammenhang mit der Streumatrix S . Die Fouriertransformierten der Reflektionskoeffizienten r und ρ bezeichnen wir wie im Charakterisierungstheorem mit R und P . Damit ergibt sich

$$T(z+x) + \int_{-x}^x K_m(x,t) T(z+t) dt = K_p(x,-z) + \int_x^{\infty} K_p(x,t) P(z-t) dt + P(z-x) + \delta(z+x).$$

Wir ersetzen nun x durch $-x$ und erhalten

$$\begin{aligned} T(z-x) + \int_x^{-x} K_m(-x,-t) T(z-t) dt \\ = K_p(-x,-z) + \int_{-\infty}^x K_p(-x,-t) P(z+t) dt + P(z+x) + \delta(z-x). \end{aligned} \quad (3.113)$$

Im nächsten Schritt wollen wir den δ -Term eliminieren. Da $K_p(-x,-z) = 0$ für $-z < -x$ ist, genügt es, die Gleichung nur für $z < x$ zu betrachten. Unter den Voraussetzungen des Charakterisierungstheorems 3.7 wissen wir außerdem, daß $t(\omega)$ holomorph in der oberen komplexen Halbebene D ist und sich für $|\omega| \rightarrow \infty$ wie $1 + O(\frac{1}{\omega})$ verhält. Damit ist auch $t(\omega) e^{-i\omega z}$ holomorph für jedes $z \in \mathbb{R}$ und das Integral über einen geschlossenen Halbkreis mit Radius R_Γ in D verschwindet:

$$0 = \int_{\Gamma} t(\omega) e^{-i\omega z} d\omega = \int_{-R_\Gamma}^{R_\Gamma} t(\omega) e^{-i\omega z} d\omega + i \cdot \int_0^\pi t(R_\Gamma e^{i\theta}) e^{-iR_\Gamma e^{i\theta} z} R_\Gamma e^{i\theta} d\theta.$$

Für $R_\Gamma \rightarrow +\infty$ strebt das erste Integral in der Summe für festes z gegen $2\pi T(z)$. Das zweite Integral strebt gegen 0, falls $z < 0$ ist. Also folgt

$$T(z) = 0, \quad z < 0.$$

Da wir nur in D holomorphe Reflektionskoeffizienten $r(\omega)$ betrachten, folgt mit derselben Argumentation

$$R(z) = 0, \quad z < 0.$$

Für $\rho(\omega)$ bzw. dessen Fouriertransformierte P gilt diese Beziehung nicht, da $\rho(\omega)$ nach (3.93) Polstellen in D besitzt.

In Gleichung (3.113) folgt für $z < x$ also $T(z-x) = 0$ und unter dem Integral wegen $z-t < z-x < 0$ auch $T(z-t) = 0$. Die linke Seite verschwindet damit und wir erhalten

die Marchenko-Integralgleichung für K_p :

$$0 = K_p(-x, -z) + \int_{-\infty}^x K_p(-x, -t) P(z+t) dt + P(z+x), \quad z < x, \quad (3.114)$$

oder mit $\tilde{P}(z) := P(-z)$

$$0 = K_p(x, z) + \int_x^{\infty} K_p(x, t) \tilde{P}(z+t) dt + \tilde{P}(z+x), \quad z > x. \quad (3.115)$$

Im Fall K_m gehen wir von (3.112) aus, führen wieder auf beiden Seiten die Fouriertransformation nach ω durch und erhalten entsprechend

$$T(z-x) + \int_x^{\infty} K_p(x, t) T(z-t) dt = K_m(x, z) + \int_{-x}^x K_m(x, t) R(z+t) dt + R(z+x) + \delta(z-x). \quad (3.116)$$

Hier haben wir auf die Transformation $x \rightarrow -x$ verzichtet, damit beide Gleichungen dieselbe Struktur haben. Dieses Mal gilt $K_m(x, z) = 0$ für $z > x$ und $z < -x$, und wir erhalten die Marchenko-Integralgleichung für K_m :

$$0 = K_m(x, z) + \int_{-x}^x K_m(x, t) R(z+t) dt + R(z+x), \quad |z| < x. \quad (3.117)$$

Da $R(z) = 0$ für $z < 0$ ist, kann die untere Integralgrenze $-x$ durch $-z$ ersetzt werden.

Mit (3.114) und (3.117) haben wir nun zwei lineare Integralgleichungen hergeleitet, deren Kern und rechte Seite gerade die Fouriertransformierten P bzw. R der Reflektionskoeffizienten ρ bzw. r und deren Lösung die gesuchten Funktionen K_p bzw. K_m sind.

3.2.2 Eindeutige Lösbarkeit der Marchenko-Integralgleichungen

Im folgenden werden wir uns damit auseinandersetzen, unter welchen Voraussetzungen die Marchenko-Integralgleichungen eindeutig lösbar sind und welche Glattheitseigenschaften die Lösungen besitzen. Insbesondere ist die Frage zu beantworten, ob diese Lösungen mit den gesuchten, eindeutig bestimmten Funktionen K_p und K_m aus dem Vorwärtsproblem übereinstimmen, d.h. ob sie zweimal stetig differenzierbar sind und die Gleichungen (3.75), (3.76) bzw. (3.77), (3.78) erfüllen, also der geforderte Zusammenhang mit dem Potential q besteht.

Wir legen nun die Voraussetzungen des Charakterisierungstheorems 3.7 zugrunde. Aus den Symmetriebedingungen für die Elemente der Streumatrix folgt zunächst, daß deren Fouriertransformierten T, R und P reellwertige Funktionen für reelles Argument sind. Nach (3.109) und (3.110) ergibt sich weiter, daß P' bzw. R' existieren und für festes $a \in \mathbb{R}$ Element von $L^1(-\infty, a)$ sind. Ferner folgt mit dem Lemma von Riemann-Lebesgue

$$\lim_{|t| \rightarrow \infty} P(t) = \lim_{|t| \rightarrow \infty} R(t) = 0.$$

Die Funktionen P und R besitzen also die Darstellungen

$$P(t) = P(b) + \int_b^t P'(u) du,$$

$$R(t) = R(b) + \int_b^t R'(u) du$$

und für $b \rightarrow -\infty$ folgt

$$P(t) = \int_{-\infty}^t P'(u) du, \quad R(t) = \int_{-\infty}^t R'(u) du.$$

Daraus ergibt sich weiter für festes $a \in \mathbb{R}$:

$$\int_{-\infty}^a |P(t)| dt \leq \int_{-\infty}^a \int_{-\infty}^t |P'(u)| du dt = \int_{-\infty}^a \int_u^a |P'(u)| dt du = \int_{-\infty}^a (a-u) |P'(u)| du < \infty,$$

d.h. $P \in L^1(-\infty, a)$ bzw. $\tilde{P} \in L^1(-a, \infty)$. Genauso gehen wir im zweiten Fall vor und sehen, daß $R \in L^1(-\infty, a)$ ist. Aus der Vorwärtsrechnung wissen wir, daß für festes $x \in \mathbb{R}$ die gesuchten Funktionen $K_p(x, \cdot)$ in $L^1(x, \infty)$ und $K_m(x, \cdot)$ in $L^1(-x, x)$ liegen.

Die Marchenko-Gleichungen (3.115) und (3.117) können wir nun für festes x als Fredholm'sche Integralgleichungen 2. Art auffassen und uns dabei wegen $q(x) = 0$, $x < 0$ auf den Fall $x \geq 0$ beschränken. Wie wir gerade gesehen haben, sind in beiden Fällen der Integralkern, die rechte Seite und die Lösung der inhomogenen Integralgleichung Elemente desselben L^1 -Raumes. Wir definieren daher die Operatoren B_p und B_m durch

$$B_p : L^1(x, \infty) \rightarrow L^1(x, \infty),$$

$$B_p K_p(x, z) := \int_x^\infty K_p(x, t) P(-z-t) dt, \quad z > x \geq 0,$$

und

$$B_m : L^1(-x, x) \rightarrow L^1(-x, x),$$

$$B_m K_m(x, z) := \int_{-x}^x K_m(x, t) R(z+t) dt, \quad x > z \geq 0.$$

Damit transformieren sich (3.115) und (3.117) in

$$(I + B_p) K_p = g_p, \tag{3.118}$$

$$(I + B_m) K_m = g_m \tag{3.119}$$

mit den rechten Seiten

$$g_p(x, z) := -P(-x-z), \quad g_m(x, z) := -R(x+z).$$

Z. Agranovich und V. Marchenko ([1]) zeigen, daß die Gleichungen (3.118) und (3.119) unter den gegebenen Voraussetzungen an Kern und rechte Seite für $x \geq 0$ die eindeutigen Lösungen K_p und K_m besitzen.

Unter den Bedingungen des Charakterisierungstheorems existieren also eindeutige Lösungen $K_p(x, \cdot) \in L^1(x, \infty)$ und $K_m(x, \cdot) \in L^1(-x, x)$ der Marchenko-Integralgleichungen (3.115) und (3.117). Aus der Vorwärtsanalyse wissen wir, welche weiteren analytischen Eigenschaften diese Lösungen haben müssen, damit wir ein mathematisch sinnvolles Ergebnis für unser inverses Problem erhalten.

Die Funktionen K_p und K_m bestimmen zunächst über (3.49) und (3.52) die Jost-Lösungen f_p und f_m der Schrödinger-Gleichung. Daraus folgt, daß K_p und K_m notwendigerweise die hyperbolischen Differentialgleichungen

$$\frac{\partial^2 K_p}{\partial x^2}(x, z) - \frac{\partial^2 K_p}{\partial z^2}(x, z) = q(x) K_p(x, z), \quad z \geq x, \quad (3.120)$$

$$\frac{\partial^2 K_m}{\partial x^2}(x, z) - \frac{\partial^2 K_m}{\partial z^2}(x, z) = q(x) K_m(x, z), \quad z \leq x, \quad (3.121)$$

und die Beziehungen

$$\frac{dK_p}{dx}(x, x) = -\frac{1}{2}q(x), \quad x \geq 0, \quad (3.122)$$

$$\frac{dK_m}{dx}(x, x) = \frac{1}{2}q(x), \quad x \geq 0, \quad (3.123)$$

erfüllen, d.h. $K_p(x, z)$ und $K_m(x, z)$ müssen mindestens zweimal partiell nach x und z differenzierbar sein, damit alle Gleichungen im klassischen Sinn gelten.

Die analytischen Eigenschaften der gefundenen Marchenko-Lösungen K_p und K_m hängen von den Eigenschaften der Kerne R und P ab. Es stellt sich nun die Frage, ob die bisher gewählte Klasse von Reflektionskoeffizienten r für die geforderte Glattheit von K_p und K_m hinreichend ist oder weiter eingeschränkt werden muß.

Agranovich/Marchenko ([1], Kapitel V) beweisen, daß unter den Voraussetzungen des Charakterisierungstheorems die partiellen Ableitungen von $K_p(x, z)$ und $K_m(x, z)$ nach x und z existieren und die Marchenko-Integralgleichungen (3.115) und (3.117) nach x und z differenziert werden dürfen. Weiter zeigen sie, daß auch die zweiten partiellen Ableitungen von $K_p(x, z)$ und $K_m(x, z)$ nach x und z existieren und stetig sind, wenn wir zusätzlich fordern, daß $R(t)$ bzw. $P(t)$ zweimal stetig differenzierbar in t sind und für jedes endliche $a_1 \in \mathbb{R}$ gilt

$$\int_{-\infty}^{a_1} |R''(t)| |t| dt < \infty, \quad (3.124)$$

$$\int_{-\infty}^{a_1} |P''(t)| |t| dt < \infty. \quad (3.125)$$

Unter diesen erweiterten Voraussetzungen können wir nun die Gleichungen (3.115) und (3.117) entsprechend umformen. Im Fall K_p ergibt zweimaliges Differenzieren nach x

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial^2 K_p}{\partial x^2}(x, z) + \tilde{P}''(x+z) - \frac{dK_p}{dx}(x, x)\tilde{P}(x+z) - \tilde{P}'(x+z)K_p(x, x) \\
&\quad - \frac{\partial K_p}{\partial x}(x, x)\tilde{P}(x+z) + \int_x^\infty \frac{\partial^2 K_p}{\partial x^2}(x, t)\tilde{P}(z+t) dt,
\end{aligned} \tag{3.126}$$

sowie ein- und zweimaliges Differenzieren nach z

$$\frac{\partial K_p}{\partial z}(x, z) = -\tilde{P}'(x+z) - \int_x^\infty K_p(x, t)\tilde{P}'(z+t) dt, \tag{3.127}$$

$$0 = \frac{\partial^2 K_p}{\partial z^2}(x, z) + \tilde{P}''(x+z) + \int_x^\infty K_p(x, t)\tilde{P}''(z+t) dt. \tag{3.128}$$

Aus den Voraussetzungen an \tilde{P} wissen wir, daß

$$\lim_{z \rightarrow +\infty} \tilde{P}(z) = \lim_{z \rightarrow +\infty} \tilde{P}'(z) = 0 \tag{3.129}$$

gilt. Damit folgt aus (3.115) und (3.127)

$$\lim_{z \rightarrow +\infty} K_p(x, z) = \lim_{z \rightarrow +\infty} \frac{\partial K_p}{\partial z}(x, z) = 0. \tag{3.130}$$

Wir integrieren nun das in (3.128) auftretende Integral zweimal partiell und mit (3.129) und (3.130) erhalten wir

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial^2 K_p}{\partial z^2}(x, z) + \tilde{P}''(x+z) - K_p(x, x)\tilde{P}'(x+z) + \frac{\partial K_p}{\partial z}(x, x)\tilde{P}(x+z) + \int_x^\infty \frac{\partial^2 K_p}{\partial t^2}(x, t)\tilde{P}(z+t) dt.
\end{aligned} \tag{3.131}$$

Anschließend subtrahieren wir (3.131) von (3.126)

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial^2 K_p}{\partial x^2}(x, z) - \frac{\partial^2 K_p}{\partial z^2}(x, z) - 2\frac{dK_p}{dx}(x, x)\tilde{P}(x+z) \\
&\quad + \int_x^\infty \left(\frac{\partial^2 K_p}{\partial x^2}(x, t) - \frac{\partial^2 K_p}{\partial t^2}(x, t) \right) \tilde{P}(z+t) dt
\end{aligned}$$

und setzen für $\tilde{P}(x+z)$ die Marchenko-Gleichung (3.115) ein:

$$\begin{aligned}
0 &= \left(\frac{\partial^2 K_p}{\partial x^2}(x, z) - \frac{\partial^2 K_p}{\partial z^2}(x, z) + 2\frac{dK_p}{dx}(x, x)K_p(x, z) \right) \\
&\quad + \int_x^\infty \left(\frac{\partial^2 K_p}{\partial x^2}(x, t) - \frac{\partial^2 K_p}{\partial t^2}(x, t) + 2\frac{dK_p}{dx}(x, x)K_p(x, t) \right) \tilde{P}(z+t) dt.
\end{aligned}$$

Die Funktion

$$V(x, z) := \frac{\partial^2 K_p}{\partial x^2}(x, z) - \frac{\partial^2 K_p}{\partial z^2}(x, z) + 2\frac{dK_p}{dx}(x, x)K_p(x, z)$$

löst also die zur Marchenko-Integralgleichung (3.115) gehörende homogene Gleichung und ist für festes x nach Agronovich/Marchenko ([1], Kapitel V) ein Element von $L^1(x, \infty)$. Da (3.115) in $L^1(x, \infty)$ eindeutig lösbar ist, besitzt die zugehörige homogene Gleichung nur die Trivallösung und es folgt

$$V(x, z) = 0.$$

Aus der Vorwärtsanalyse kennen wir den Zusammenhang zwischen K_p und q , den wir zu gegebenem q erhalten. Setzen wir umgekehrt

$$q(x) = -2 \frac{dK_p}{dx}(x, x),$$

dann erfüllt K_p die Differentialgleichung (3.120) sowie die Bedingung (3.122). Gehen wir ferner wieder zu den Variablen ξ und η für x und z über, dann ergeben sich aus (3.115) die weiteren Eigenschaften (3.67)-(3.69), womit gezeigt ist, daß das aus der Marchenko-Gleichung berechnete K_p mit dem K_p aus dem Vorwärtsproblem übereinstimmt und ein Potential aus der gewählten Klasse liefert.

Die analogen Umformungen im Fall K_m führen auf

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial^2 K_m}{\partial x^2}(x, z) - \frac{\partial^2 K_m}{\partial z^2}(x, z) + 2 \frac{dK_m}{dx}(x, x) R(x+z) \\ &\quad + \int_{-x}^x \left(\frac{\partial^2 K_m}{\partial x^2}(x, t) - \frac{\partial^2 K_m}{\partial t^2}(x, t) \right) R(z+t) dt. \end{aligned}$$

Setzen wir für $R(z+x)$ die entsprechende Marchenko-Gleichung (3.117) ein, ergibt sich

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\frac{\partial^2 K_m}{\partial x^2}(x, z) - \frac{\partial^2 K_m}{\partial z^2}(x, z) - 2 \frac{dK_m}{dx}(x, x) K_m(x, z) \right) \\ &\quad + \int_{-x}^x \left(\frac{\partial^2 K_m}{\partial x^2}(x, t) - \frac{\partial^2 K_m}{\partial t^2}(x, t) - 2 \frac{dK_m}{dx}(x, x) K_m(x, t) \right) R(z+t) dt \end{aligned}$$

und wie eben können wir daraus folgern, daß das gefundene K_m genau mit demjenigen des Vorwärtsproblems übereinstimmt und somit das zugehörige Potential q in eindeutiger Weise aus K_m über

$$q(x) = 2 \frac{dK_m}{dx}(x, x)$$

berechnet werden kann.

3.2.3 Lösung des inversen Problems

Wir können nun die Ergebnisse der vorherigen Abschnitte zusammenfassen:

Satz 3.8 (*Lösung des inversen Problems*)

Gegeben seien die Voraussetzungen des Charakterisierungstheorems 3.7. Ferner erfüllen die Fouriertransformierten R und P der Reflektionskoeffizienten r und ρ die zusätzlichen Bedingungen (3.124), (3.125). Dann existieren eindeutige Lösungen $K_p(x, \cdot) \in L^1(x, \infty)$

und $K_m(x, \cdot) \in L^1(-x, x)$ der Marchenko-Integralgleichungen (3.114) und (3.117). Diese Lösungen sind zweimal stetig differenzierbar und erfüllen die Gleichungen (3.120) bzw. (3.121). Das Potential q der Schrödinger-Gleichung ergibt sich aus (3.122) bzw. (3.123).

Damit haben wir das inverse Spiegel-Design-Problem vollständig gelöst. Zu gegebenen Spektraleigenschaften in Form des Reflektionskoeffizienten r existieren die eindeutig bestimmten Funktionen K_p und K_m , mit deren Kenntnis das gesuchte Potential q der Schrödinger-Gleichung über die einfachen Beziehungen (3.122) bzw. (3.123) zu berechnen ist.

In die Marchenko-Gleichung (3.117) für K_m geht r direkt über seine Fouriertransformierte R ein, während Gleichung (3.114) für K_p von ρ abhängt. Hier ist zunächst zu gegebenem r der Transmissionskoeffizient t aus (3.106) und anschließend ρ aus (3.93) zu berechnen. Welche der beiden Funktionen K_p oder K_m berechnet wird, d.h. welche der beiden Gleichungen gelöst wird, hängt von der speziellen Wahl von r ab.

Neben der vorgestellten Methode gibt es in der Literatur eine Vielzahl weiterer Ansätze zur Lösung des inversen Problems für die Schrödinger-Gleichung. Als Beispiele seien die Arbeiten von Deift/Trubowitz ([14]), Chadan/Sabatier ([12]), Aktosun et al. ([3]), Berezin/Shubin ([7]) oder Faddeev ([16]) erwähnt.

Andere Ansätze gehen von der Helmholtz-Gleichung anstelle der Schrödinger-Gleichung als Modell aus und berechnen den Brechungsindex direkt aus dem Reflektionskoeffizienten. In diesem Zusammenhang sind z.B. die Arbeiten von Sylvester et al. ([48], [49], [50]), Somersalo ([45]), Jaggard et al. ([24], [23]), Skaar et al. ([43], [44]), oder Grinberg ([20], [21]) zu nennen.

Kapitel 4

Numerische Lösung des Spiegel-Design-Problems

In Kapitel 3 haben wir die theoretischen Grundlagen und relevanten Schritte zur Lösung des Spiegel-Design-Problems kennengelernt. Zu gegebenem Reflektionskoeffizienten

$$r(\omega) = r_{\text{ampl}}(\omega) \cdot e^{i\varphi(\omega)}$$

ist die Lösung der Marchenko-Integralgleichung zu berechnen, woraus sich das Potential q der Schrödinger-Gleichung über eine einfache Transformationsbeziehung ergibt.

Nun werden wir uns damit beschäftigen, wie die Eingabegröße r geeignet mathematisch modelliert werden kann. Diese Frage erfordert eine besondere Sorgfalt und Genauigkeit. Einerseits muß das Modell die physikalischen Vorgaben äußerst exakt abbilden, da sonst die Ergebnisse für Anwendungen im Hochfrequenzbereich unbrauchbar sind. Andererseits aber soll eine auf diesem Weg gefundene Modellfunktion für r auf ein praxisrelevantes Potential q , d.h. auf ein realisierbares Spiegel-Design führen. Ein weiteres Problem besteht darin, daß die gesuchte Funktion nach der obigen Definition komplexwertig für reelles Argument sein muß, also Amplitude und Phase gleichzeitig optimal zu modellieren sind. Wie die konkreten Beispielrechnungen später zeigen werden, läßt sich dieses Ziel nur schwer erreichen. Schließlich muß das Modell die im Charakterisierungstheorem 3.7 geforderten analytischen und asymptotischen Eigenschaften besitzen.

4.1 Die explizite Lösung der Marchenko-Integralgleichung

Bevor wir einen ersten Modellansatz für r angeben können, müssen wir uns über die Struktur der gegebenen Daten für $r(\omega)$ klar werden. Aus den Anwendungen ist bekannt ([34]), daß die Phasenfunktion $\varphi(\omega)$ als Taylorpolynom sechsten Grades um eine Zentralfrequenz ω_0 vorliegt, wobei die Taylorkoeffizienten aus den experimentellen Daten durch lineare Ausgleichsrechnung gewonnen wurden. Die Amplitudenfunktion $r_{\text{ampl}}(\omega)$ hat die Form eines Bandpaßfilters mit dem Zentrum ω_0 . Das gesuchte Modell soll Amplitude und Phase von $r(\omega)$ in einem eng begrenzten Intervall um die Zentralfrequenz exakt abbilden, außerhalb werden keine Vorgaben gemacht.

Unter Berücksichtigung aller mathematischer und physikalischer Rahmenbedingungen erscheint es nun sinnvoll, r als rationale Funktion zu modellieren. Dieser Ansatz ist im Filter-Design weit verbreitet und wird in zahlreichen Anwendungen verwendet ([41], [32], [33]). Im Gegensatz zum vorliegenden Spiegel-Design-Problem wird dort aber nur die Amplitude von r berücksichtigt, während in unserem Fall auch und gerade insbesondere die Phase exakt abzubilden ist, was das Modellierungsproblem um einiges komplizierter macht.

Die rationale Funktion soll nach dem Charakterisierungstheorem 3.7 als Funktion von ω holomorph in D und stetig auf der reellen Achse sein, was bedeutet, daß alle Polstellen in der negativen komplexen Halbebene liegen müssen. Weiterhin muß sie die Symmetrieeigenschaft (3.96) und die Asymptotik (3.98) erfüllen. Wir berücksichtigen das und wählen den folgenden rationalen Modellansatz für r :

$$r(\omega) := r_0 \cdot \frac{p(\omega)}{q(\omega)} = r_0 \cdot \frac{\prod_{j=1}^n (\omega - \mu_j)}{\prod_{l=1}^m (\omega - \lambda_l)} \quad (4.1)$$

mit

- (i) $r_0, \mu_j, \lambda_l \in \mathbb{C}$ so, daß $r(\omega) = \overline{r(-\omega)}$, $\forall \omega \in \mathbb{R}$,
- (ii) $|r(\omega)| < 1$, $\forall \omega \in \mathbb{R}$,
- (iii) $\text{Im}(\lambda_l) < 0 \quad \forall l \in \{1, \dots, m\}$,
- (iv) $n \leq m - 3$.

Die erste Bedingung sorgt dafür, daß die Fouriertransformierte R von r in der Marchenko-Integralgleichung (3.117) reellwertig wird und somit ein reellwertiges Potential q liefert. Das hat zur Folge, daß alle Null- und Polstellen von r entweder rein imaginär sind oder in zur imaginären Achse symmetrischen Paaren der Form $\mu_j, -\overline{\mu_j}$ bzw. $\lambda_l, -\overline{\lambda_l}$ auftreten. Für die Mengen der Null- und Polstellen gilt also

$$\{\mu_1, \dots, \mu_n\} = \{-\overline{\mu_1}, \dots, -\overline{\mu_n}\}, \quad (4.2)$$

$$\{\lambda_1, \dots, \lambda_m\} = \{-\overline{\lambda_1}, \dots, -\overline{\lambda_m}\}. \quad (4.3)$$

Aus der zweiten Forderung folgt mit (3.94), daß die Funktion

$$h(\omega) := 1 - r(\omega) r(-\omega) \quad (4.4)$$

keine Nullstellen in \mathbb{R} besitzt. Wegen der Symmetrie von h bezüglich $\pm\omega$ und der Tatsache, daß h insgesamt genau $2m$ Nullstellen besitzt, liegen damit jeweils genau m Nullstellen von h in der oberen und unteren komplexen Halbebene. Die Nullstellen der oberen Halbebene D wollen wir im folgenden mit κ_i , $i = 1, \dots, m$, bezeichnen. Die obigen Symmetrieeigenschaften der Null- und Polstellen von r übertragen sich auf h , d.h. es gilt auch

$$\{\kappa_1, \dots, \kappa_m\} = \{-\overline{\kappa_1}, \dots, -\overline{\kappa_m}\}. \quad (4.5)$$

Die letzte Bedingung über das Größenverhältnis von Zähler- und Nennergrad der rationalen Funktion ist durch das Charakterisierungstheorem 3.7 begründet. Daraus folgt nämlich

$$r(\omega) = O\left(\frac{1}{\omega^3}\right), \quad |\omega| \rightarrow \infty,$$

und damit

$$\omega r(\omega) = O\left(\frac{1}{\omega^2}\right), \quad |\omega| \rightarrow \infty,$$

also ist $\omega r(\omega)$ ein Element von $L^1(\mathbb{R})$. Ebenso ist $(\omega r(\omega))''$ eine $L^1(\mathbb{R})$ -Funktion, woraus folgt, daß die Ableitung R' der Fouriertransformierten von r die Voraussetzungen des Charakterisierungstheorems erfüllt.

Wir wollen uns nun den übrigen beiden Elementen t und ρ der Streumatrix zuwenden. Aus Kapitel 3 kennen wir bereits die Darstellung (3.106) für t . Diese enthält allerdings einen komplizierten Integralterm, der im allgemeinen nicht explizit berechenbar ist. Im Fall eines rationalen Reflektionskoeffizienten der obigen Bauart vereinfacht sich die Situation aber erheblich und $t(\omega)$ wird ebenfalls zu einer rationalen Funktion in ω . Wir wollen diese Darstellung nun herleiten und beginnen mit Gleichung (3.105) aus Kapitel 3:

$$\log t(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\log(1 - r(k)r(-k))}{k - \omega} dk, \quad \text{Im } \omega > 0.$$

Anschließend leiten wir nach ω ab

$$\frac{d}{d\omega} \log t(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\log(1 - r(k)r(-k))}{(k - \omega)^2} dk, \quad \text{Im } \omega > 0,$$

und ersetzen die Integrationsvariable k durch $-k$:

$$\frac{d}{d\omega} \log t(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\log(1 - r(k)r(-k))}{(k + \omega)^2} dk, \quad \text{Im } \omega > 0.$$

Jetzt integrieren wir einmal partiell und unter Berücksichtigung von (3.100) ergibt sich

$$\frac{d}{d\omega} \log t(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{-\frac{1}{k + \omega} \frac{d}{dk} r(k)r(-k)}_{=: F_I(k)} dk, \quad \text{Im } \omega > 0. \quad (4.6)$$

Nun schreiben wir r wie in (4.1) definiert als Quotient zweier Polynome, berechnen die Ableitung im Zähler des Integranden und erhalten für die Integrandenfunktion

$$F_I(k) = \frac{[p'(k)q(k) - q'(k)p(k)]p(-k)q(-k) + [q'(-k)p(-k) - p'(-k)q(-k)]p(k)q(k)}{-(k + \omega)[q(k)q(-k) - p(k)p(-k)]q(-k)q(k)}.$$

$F_I(k)$ ist also eine rationale Funktion in k und damit für komplexes k meromorph in der oberen komplexen Halbebene $D = \{\omega \in \mathbb{C} \mid \text{Im } \omega > 0\}$ mit genau $2m$ Polstellen

$\kappa_i, -\lambda_i, i = 1, \dots, m$. Wir wollen annehmen, daß alle Pole einfach sind, d.h. alle κ_i und $-\lambda_i$ paarweise verschieden sind. Sollte das nicht der Fall sein, muß das Modell für r in (4.1) entsprechend angepaßt werden, was aber keine wesentliche Schwierigkeit bedeutet.

Unter diesen Voraussetzungen können wir den Residuensatz auf das Integral in (4.6) anwenden. Dazu berechnen wir die Residuen von F_I an den Polen $-\lambda_i$:

$$\begin{aligned} \text{Res}(F_I, -\lambda_i) &= \lim_{k \rightarrow -\lambda_i} F_I(k) (k + \lambda_i) \\ &= \lim_{k \rightarrow -\lambda_i} \frac{q'(-k) p(-k) p(k) (k + \lambda_i)}{-(k + \omega) [q(k) q(-k) - p(k) p(-k)] q(-k)} \\ &= -\frac{1}{\omega - \lambda_i}. \end{aligned}$$

Genauso ergibt sich für die Pole κ_i

$$\text{Res}(F_I, \kappa_i) = \frac{1}{\omega + \kappa_i},$$

und wir erhalten

$$\frac{d}{d\omega} \log t(\omega) = \sum_{i=1}^n \frac{1}{\omega + \kappa_i} - \sum_{i=1}^n \frac{1}{\omega - \lambda_i}.$$

Nun integrieren wir beide Seiten der Gleichung:

$$\log t(\omega) = \log \left(\frac{\prod_{i=1}^n (\omega + \kappa_i)}{\prod_{i=1}^n (\omega - \lambda_i)} \right) + c.$$

Wegen (3.100) ist die Integrationskonstante $c = 0$, und es folgt die explizite Darstellung des Transmissionskoeffizienten $t(\omega)$:

$$t(\omega) = \frac{\prod_{i=1}^n (\omega + \kappa_i)}{\prod_{i=1}^n (\omega - \lambda_i)}. \quad (4.7)$$

Wie im Charakterisierungstheorem verlangt, ist also t ebenfalls holomorph in D und die Polstellen stimmen mit denen von r überein. Aus (3.93) folgt damit die explizite Darstellung des rechtsseitigen Reflektionskoeffizienten $\rho(\omega)$ durch

$$\rho(\omega) = \frac{(-1)^{n-m+1} r_0 \prod_{i=1}^n (\omega + \mu_i) \prod_{j=1}^m (\omega + \kappa_j)}{\prod_{i=1}^m (\omega - \lambda_i) \prod_{j=1}^m (\omega - \kappa_j)}, \quad (4.8)$$

die nach dem Satz über die Partialbruchzerlegung meromorpher Funktionen ([40]) äquivalent ist zu

$$\rho(\omega) = \sum_{k=1}^m \frac{\rho_k}{\omega - \lambda_k} + \sum_{k=1}^m \frac{\rho_{k+m}}{\omega - \kappa_k}. \quad (4.9)$$

Wegen (4.3), (4.5) und (3.96) folgt dann für die Koeffizienten ρ_i , $i = 1, \dots, 2m$, ebenfalls

$$\{\rho_1, \dots, \rho_{2m}\} = \{-\bar{\rho}_1, \dots, -\bar{\rho}_{2m}\}. \quad (4.10)$$

Für einen rationalen Reflektionskoeffizienten r in der angegebenen Form sind also die übrigen Elemente der Streumatrix S ebenfalls rationale Funktionen und ihre Null- und Polstellen liegen symmetrisch zur imaginären Achse. Dieser spezielle Ansatz für r wurde bereits 1960 von I. Kay vorgestellt. In seiner Arbeit [28] zeigt er, daß dann die Marchenko-Integralgleichung (3.114) in expliziter Form lösbar ist. Wir wollen nun seiner Vorgehensweise folgen und auf die wesentlichen Beweisschritte eingehen.

Am Ende von Kapitel 3 haben wir die beiden Marchenko-Integralgleichungen hergeleitet, deren eindeutige Lösungen K_p und K_m das gesuchte Potential q über die Gleichung (3.76) bzw. (3.78) bestimmen. Welche der beiden Gleichungen wir verwenden, hängt davon ab, ob wir mit dem rechtsseitigen Reflektionskoeffizienten ρ oder mit dem linksseitigen r starten.

Aus den bisherigen Überlegungen wissen wir, daß das Potential q mit der Zusatzeigenschaft $q(x) = 0$ für $x < 0$ eindeutig durch die Vorgabe des linksseitigen Koeffizienten r festgelegt ist. Daher ist es naheliegend, die Marchenko-Gleichung (3.117) für K_m aus Ausgangspunkt zu wählen, da hier r in Form seiner Fouriertransformierten R eingeht.

Im Fall eines rationalen Reflektionskoeffizienten r sind aber, wie wir gerade gezeigt haben, auch die übrigen Elemente t und ρ der Streumatrix S rationale Funktionen, so daß wir hier auch von der Marchenko-Gleichung (3.114) oder (3.115) für K_p ausgehen können, in die ρ über seine Fouriertransformierte P eingeht.

Für nicht-rationales r können die expliziten Darstellungen für t und ρ sehr kompliziert und numerisch schwierig auszuwerten sein, weshalb wir in diesem Fall auf die Berechnung von ρ verzichten und direkt mit der Marchenko-Gleichung (3.117) für K_m starten.

Im vorliegenden rationalen Fall besitzt ρ im Gegensatz zu r genau m Polstellen κ_i in D , die symmetrisch zur imaginären Achse liegen. Diese spezielle Struktur ist der Schlüssel zu einem expliziten Lösungsansatz für K_p in der zugehörigen Marchenko-Gleichung (3.114):

$$0 = K_p(-x, -z) + \int_{-\infty}^x K_p(-x, -t) P(z+t) dt + P(z+x), \quad z < x.$$

In der analogen Gleichung (3.117) für K_m konnten wir die untere Integrationsgrenze $-\infty$ durch $-z$ ersetzen, weil die Fouriertransformierte R von r wegen der Holomorphie von r , wie in Abschnitt 3.2.1 bereits gezeigt, die Eigenschaft

$$R(z) = 0, \quad z < 0,$$

besitzt. Für die Fouriertransformierte P der in D meromorphen Funktion ρ wollen wir nun eine entsprechende Beziehung herleiten. Wir gehen vor wie in Kapitel 3 und integrieren $\rho(\omega) e^{-i\omega z}$ über einen geschlossenen Halbkreis Γ mit Radius R_Γ in D und auf der reellen Achse:

$$\int_{\Gamma} \rho(\omega) e^{-i\omega z} d\omega = \int_{-R_\Gamma}^{R_\Gamma} \rho(\omega) e^{-i\omega z} d\omega + i \cdot \int_0^\pi \rho(R_\Gamma e^{i\theta}) e^{-iR_\Gamma e^{i\theta} z} R_\Gamma e^{i\theta} d\theta.$$

Für $R_{\Gamma} \rightarrow +\infty$ strebt das zweite Integral auf der rechten Seite für $z < 0$ gegen 0. Auf die linke Seite können wir den Residuensatz anwenden und mit (4.9) folgt

$$P(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\omega) e^{-i\omega z} d\omega = i \sum_{k=1}^m \rho_k e^{-i\kappa_k z}, \quad z < 0. \quad (4.11)$$

Im Unterschied zu R verschwindet P also nicht bei negativem Argument. Diese Tatsache führt uns nun zu folgendem expliziten Ansatz:

$$\widehat{K}(x, z) := K_p(-x, -z) = \sum_{k=1}^m f_k(x) e^{-i\kappa_k z}, \quad (4.12)$$

mit den stetigen Koeffizientenfunktionen f_k , $k = 1, \dots, m$. Die Lösung K_p liefert das gesuchte Potential q über die Beziehung (3.122) für jedes positive $x \in \mathbb{R}$, dementsprechend beschränken wir uns bei \widehat{K} auf den Fall $x < 0$. Ferner sind wir an einem reellen Potential interessiert, d.h. $\widehat{K}(x, z)$ muß reell für reelle x und z sein. Diese Bedingung ist aber wegen der Symmetrieeigenschaft (4.5) der Polstellen κ_k , $k = 1, \dots, m$, erfüllt, wenn wir zusätzlich fordern, daß für die Koeffizientenfunktionen $f_k(x)$, $k = 1, \dots, m$, für jedes x die Beziehung

$$\{f_1(x), \dots, f_m(x)\} = \{\bar{f}_1(x), \dots, \bar{f}_m(x)\} \quad (4.13)$$

gilt. Gleichung (4.13) ist dabei so zu verstehen, daß zu jedem Polstellenpaar $\kappa_i = -\bar{\kappa}_j$ die Koeffizientenfunktionen $f_i = \bar{f}_j$ für $i, j \in \{1, \dots, m\}$ gehören, wodurch die Darstellung (4.12) für reelle Argumente als Summe einer komplexen Zahl mit ihrer konjugiert komplexen aufgefaßt werden kann und somit reellwertig ist.

An dieser Stelle wollen wir uns auf gerades $m \in \mathbb{N}$ beschränken. Für ungerades m gelten die angegebenen Bedingungen ebenfalls, dann existiert mindestens eine rein imaginäre Polstelle κ_i und die zugehörige Koeffizientenfunktion f_i ist reellwertig. Die numerische Umsetzung und die Rechnungen mit Echtdaten haben aber gezeigt, daß es besser ist, von einem komplexen Reflektionskoeffizienten r mit geradem Nennergrad m auszugehen.

Weiter wollen wir annehmen, daß keine rein imaginären Polstellen κ_i auftreten, was in den Anwendungen fast immer der Fall ist und was andernfalls durch geringe Modifikationen der rationalen Funktion r erreicht werden kann.

Aus Abschnitt 3.4 wissen wir, daß die Marchenko-Integralgleichung (3.114) für festes $x \in \mathbb{R}$ eine eindeutige Lösung im Raum $L^1(-\infty, x)$ besitzt. Wir wollen nun zeigen, daß \widehat{K} genau diese Lösung ist. Dazu schätzen wir ab:

$$\int_{-\infty}^x |\widehat{K}(x, z)| dz = \int_{-\infty}^x \left| \sum_{k=1}^m f_k(x) e^{-i\kappa_k z} \right| dz \leq \sum_{k=1}^m \int_{-\infty}^x |f_k(x)| \cdot e^{\operatorname{Im} \kappa_k z} dz.$$

Für festes x ist $|f_k(x)|$ für jedes $k \in \{1, \dots, m\}$ ein endlicher Wert, unabhängig von z . Die Exponentialfunktion fällt gegen 0 für $z \rightarrow -\infty$, da alle Polstellen κ_i positiven Imaginärteil haben. Damit existieren alle auftretenden uneigentlichen Integrale und somit auch deren endliche Summe. Also ist die gewählte Ansatzfunktion \widehat{K} ein Element von $L^1(-\infty, x)$.

Wir betrachten nun den Fall $x < 0$ und setzen den Ansatz für \widehat{K} sowie die Darstellung (4.11) von P in (3.114) ein:

$$\begin{aligned}
0 &= \sum_{k=1}^m f_k(x) e^{-i\kappa_k z} + \int_{-\infty}^x \sum_{j=1}^m f_j(x) e^{-i\kappa_j t} \sum_{k=1}^m i \rho_k e^{-i\kappa_k(z+t)} dt + \sum_{k=1}^m i \rho_k e^{-i\kappa_k(z+x)} \\
&= \sum_{k=1}^m f_k(x) e^{-i\kappa_k z} + \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^m i \rho_k f_j(x) e^{-i\kappa_k z} \int_{-\infty}^x e^{-i(\kappa_j + \kappa_k)t} dt + i \cdot \sum_{k=1}^m \rho_k e^{-i\kappa_k(z+x)} \\
&= \sum_{k=1}^m f_k(x) e^{-i\kappa_k z} - \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^m \rho_k f_j(x) e^{-i\kappa_k z} \frac{e^{-i(\kappa_j + \kappa_k)x}}{\kappa_j + \kappa_k} + i \cdot \sum_{k=1}^m \rho_k e^{-i\kappa_k(z+x)} \\
&= \sum_{k=1}^m \left(f_k(x) - \rho_k \sum_{j=1}^m f_j(x) \frac{e^{-i(\kappa_j + \kappa_k)x}}{\kappa_j + \kappa_k} + i \rho_k e^{-i\kappa_k x} \right) \cdot e^{-i\kappa_k z}. \tag{4.14}
\end{aligned}$$

Die rechte Seite von Gleichung (4.14) ist gerade eine Linearkombination der für festes $x < 0$ linear unabhängigen Funktionen $e^{-i\kappa_k z}$, $k = 1, \dots, m$, d.h. die letzte Gleichung ist äquivalent zu

$$f_k(x) - \rho_k \sum_{j=1}^m f_j(x) \frac{e^{-i(\kappa_j + \kappa_k)x}}{\kappa_j + \kappa_k} + i \rho_k e^{-i\kappa_k x} = 0, \quad k = 1, \dots, m. \tag{4.15}$$

Für jedes feste $x < 0$ sind die Koeffizientenfunktionen $\{f_1(x), \dots, f_m(x)\}$ also Lösungen des linearen Gleichungssystems (4.15). Wir wollen nun zeigen, daß dieses System eindeutig lösbar ist und betrachten die zu (4.15) gehörende homogene Gleichung

$$f_k^0(x) - \rho_k \sum_{j=1}^m f_j^0(x) \frac{e^{-i(\kappa_j + \kappa_k)x}}{\kappa_j + \kappa_k} = 0, \quad k = 1, \dots, m, \tag{4.16}$$

mit der Lösung $\{f_1^0(x), \dots, f_m^0(x)\}$. Wir formen äquivalent um, indem wir Gleichung (4.16) mit $e^{-i\kappa_k z}$ multiplizieren und über k summieren, also genau umgekehrt wie bei der Herleitung von (4.15) vorgehen, und erhalten die homogene Version von Gleichung (4.14):

$$0 = \sum_{k=1}^m \left(f_k^0(x) - \rho_k \sum_{j=1}^m f_j^0(x) \frac{e^{-i(\kappa_j + \kappa_k)x}}{\kappa_j + \kappa_k} \right) \cdot e^{-i\kappa_k z}.$$

Nun können wir die Umformungsschritte bis Gleichung (4.14) rückwärts gehen und mit der Definition

$$\widehat{K}^0(x, z) := \sum_{k=1}^m f_k^0(x) e^{-i\kappa_k z} \tag{4.17}$$

folgt

$$0 = \widehat{K}^0(x, z) + \int_{-\infty}^x \widehat{K}^0(x, t) P(z+t) dt, \quad z < x < 0. \tag{4.18}$$

Gleichung (4.18) ist gerade die zur Marchenko-Integralgleichung (3.114) für \widehat{K} gehörende homogene Gleichung. Aus der eindeutigen Lösbarkeit von (3.114) folgt dann, daß (4.18) nur die Trivallösung

$$\widehat{K}^0(x, z) \equiv 0$$

besitzt. Aus (4.17) sehen wir aber, daß das genau dann der Fall ist, wenn alle Koeffizientenfunktionen $f_k^0(x)$, $k = 1, \dots, m$, für $z < x < 0$ identisch verschwinden. Also besitzt das zu (4.15) gehörende homogene System nur die Trivallösung, woraus die Existenz und Eindeutigkeit der Lösung von (4.15) folgen.

Wir gehen nun zur konjugiert komplexen Form von (4.15) über:

$$\bar{f}_k(x) - \bar{\rho}_k \sum_{j=1}^m \bar{f}_j(x) \frac{e^{i(\bar{\kappa}_j + \bar{\kappa}_k)x}}{\bar{\kappa}_j + \bar{\kappa}_k} - i \bar{\rho}_k e^{i\bar{\kappa}_k x} = 0, \quad k = 1, \dots, m.$$

Aufgrund der Beziehungen (4.5) und (4.10) stimmen $\bar{\kappa}_k$ und $\bar{\rho}_k$ für jedes $k = 1, \dots, m$, mit einem $-\kappa_l$ bzw. $-\rho_l$, $l = 1, \dots, m$, überein und können durch diese ersetzt werden:

$$\bar{f}_k(x) + \rho_l \sum_{j=1}^m \bar{f}_j(x) \frac{e^{i(\bar{\kappa}_j - \kappa_l)x}}{\bar{\kappa}_j - \kappa_l} + i \rho_l e^{-i\kappa_l x} = 0, \quad l = 1, \dots, m.$$

Die Summe läuft für festes l über $j = 1, \dots, m$, d.h. wir können auch $\bar{\kappa}_j$ durch das zugehörige $-\kappa_s$, $s = 1, \dots, m$, ersetzen und erhalten:

$$\bar{f}_k(x) - \rho_l \sum_{s=1}^m \bar{f}_j(x) \frac{e^{-i(\kappa_s + \kappa_l)x}}{\kappa_s + \kappa_l} + i \rho_l e^{-i\kappa_l x} = 0, \quad l = 1, \dots, m.$$

Also ist mit $\{f_1(x), \dots, f_m(x)\}$ auch $\{\bar{f}_1(x), \dots, \bar{f}_m(x)\}$ Lösung von (4.15) und wegen der Eindeutigkeit folgt die geforderte Eigenschaft (4.13).

Mit dem Ansatz (4.12) haben wir demnach die eindeutige, reellwertige Lösung $\widehat{K}(x, z)$ der Marchenko-Integralgleichung (3.114) gefunden. Die Voraussetzungen des Charakterisierungstheorems 3.7 sind erfüllt, die partiellen Ableitungen von \widehat{K} existieren, und es ergibt sich eine explizite Darstellung für das gesuchte Potential q aus (3.76):

$$q(-x) = 2 \sum_{j=1}^m \left\{ \frac{df_j}{dx}(x) - i\kappa_j f_j(x) \right\} e^{-i\kappa_j x}, \quad x < 0. \quad (4.19)$$

Die in (4.19) auftretenden Ableitungen $\frac{df_j}{dx}(x)$, $j = 1, \dots, m$, erhalten wir, indem wir (4.15) nach x differenzieren:

$$\frac{df_k}{dx}(x) - \rho_k \sum_{j=1}^m \frac{df_j}{dx}(x) \frac{e^{-i(\kappa_j + \kappa_k)x}}{\kappa_j + \kappa_k} + i \rho_k \sum_{j=1}^m f_j(x) e^{-i(\kappa_j + \kappa_k)x} + \rho_k e^{-i\kappa_k x} = 0, \quad k = 1, \dots, m. \quad (4.20)$$

Für festes x ergeben sich demnach die $\frac{df_j}{dx}(x)$, $j = 1, \dots, m$, als Lösungen eines linearen Gleichungssystems mit derselben Matrix wie in (4.15) und einer von den f_k , $k = 1, \dots, m$, abhängenden rechten Seite. Der Übergang zur konjugiert komplexen Gleichung von (4.20) und dieselben Umformungen wie bei Gleichung (4.15) zeigen, daß auch die Ableitungen für jedes x die Symmetrieeigenschaft

$$\left\{ \frac{df_1}{dx}(x), \dots, \frac{df_m}{dx}(x) \right\} = \left\{ \overline{\frac{df_1}{dx}(x)}, \dots, \overline{\frac{df_m}{dx}(x)} \right\} \quad (4.21)$$

besitzen und somit durch (4.19) tatsächlich ein reellwertiges Potential q definiert ist.

Wir können nun die Ergebnisse dieses Abschnitts zusammenfassen:

Satz 4.1 (Kay, 1960)

Zu gegebenem rationalen linksseitigen Reflektionskoeffizienten r der Form (4.1) mit den Eigenschaften (i)-(iv) ist die Marchenko-Integralgleichung (3.114) eindeutig lösbar und das gesuchte Potential q der Schrödinger-Gleichung (3.1) besitzt die explizite Darstellung (4.19). Die Koeffizienten κ_j , $j = 1, \dots, m$, sind die Nullstellen der Funktion h aus (4.4) und die Polstellen des rechtsseitigen Reflektionskoeffizienten ρ in D mit den zugehörigen Residuen ρ_j , $j = 1, \dots, m$.

Die Koeffizientenfunktionen $f_j(x)$, $\frac{df_j}{dx}(x)$, $j = 1, \dots, m$, in (4.19) ergeben sich für jedes $x < 0$ als eindeutige Lösung des linearen Gleichungssystems (4.15) bzw. (4.20).

Nach Satz 4.1 können wir den Algorithmus zur Berechnung der expliziten Lösung der Marchenko-Integralgleichung und damit zur Lösung des Spiegel-Design-Problems in die folgenden Schritte einteilen:

- (a) Bestimme eine rationale Funktion mit den in Satz 4.1 geforderten Zusatzeigenschaften als Modell für den linksseitigen Reflektionskoeffizienten r .
- (b) Berechne die m Nullstellen κ_k der Funktion $h(\omega) = 1 - r(\omega)r(-\omega)$ in D .
- (c) Berechne die Residuen ρ_k an den Polstellen κ_k des rechtsseitigen Reflektionskoeffizienten ρ .
- (d) Berechne für jedes $x < 0$ die Lösung der linearen Gleichungssysteme (4.15) und (4.20) für die Koeffizientenfunktionen f_k , $k = 1, \dots, m$, und deren Ableitungen.
- (e) Berechne das Potential q aus (4.19).

Im folgenden Abschnitt wollen wir den Algorithmus in **Matlab** implementieren und auf ein konkretes Beispiel aus der Praxis des Laserdesigns anwenden.

4.1.1 Die Modellierung von r

Die Daten für die Beschreibung von $r(\omega)$ als komplexwertige, rationale Funktion stammen aus den physikalischen Anwendungen und sind über Betrag (Amplitude) und Phase komplexer Zahlen gegeben. Die Amplitude $r_{\text{ampl}}(\omega)$ hat die Form eines Bandpaßfilters um eine vorgegebene Zentralfrequenz ω_0 , d.h. $r_{\text{ampl}}(\omega) \equiv c \leq 1$. Die Phase $\varphi(\omega)$ ist in expliziter Form als Polynom gegeben:

$$\varphi(\omega) = \sum_{k=1}^6 \frac{\varphi^{(k)}(\omega_0)}{k!} (\omega - \omega_0)^k = \sum_{k=1}^6 \frac{1}{k!} D_k (\omega - \omega_0)^k.$$

In den folgenden Beispielen wollen wir stets einen Echtdatensatz aus der Arbeit von Matuschek ([34]) verwenden. Die Amplitude $r_{\text{ampl}}(\omega)$ von r ist zentriert um die Frequenz $\omega_0 = 2,48 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$. Für die Rechnungen haben wir einen möglichen Amplitudenverlauf angenommen und durch eine geeignete rationale Funktion approximiert. Die Phase $\varphi(\omega)$ ist durch ihre Taylorkoeffizienten gegeben:

$$D_1 = 27fs, \quad D_2 = -50fs^2, \quad D_3 = 32.2fs^3, \quad D_4 = 268.2fs^4, \quad D_5 = -62.3fs^5, \quad D_6 = 0.$$

Die Schaubilder von Amplitude und Phase sind in den beiden folgenden Abbildungen dargestellt, wobei die Werte der Phasenfunktion $\varphi(\omega)$ jeweils modulo 2π zu verstehen sind.

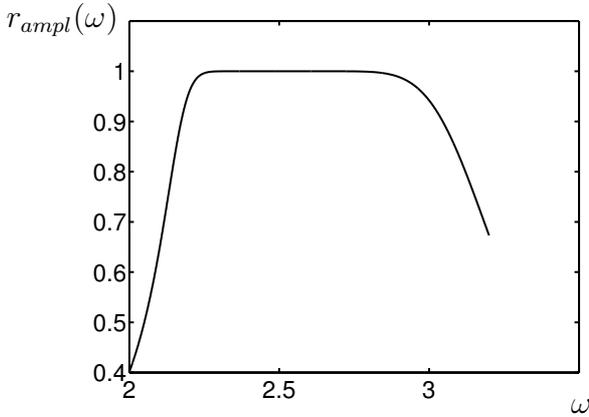


Abbildung 4.1: Amplitude $r_{\text{ampl}}(\omega)$ in Abhängigkeit der Frequenz ω [10^{15}s^{-1}].

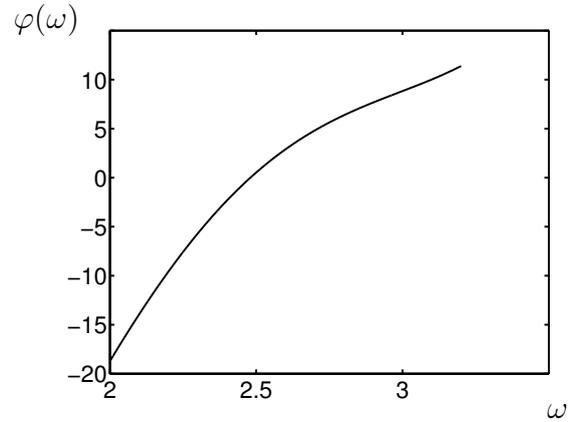


Abbildung 4.2: Phase $\varphi(\omega)$ in Abhängigkeit der Frequenz ω [10^{15}s^{-1}].

Wir suchen nun eine komplexwertige, rationale Funktion mit den angegebenen Zusatzeigenschaften, die dieses Verhalten von Amplitude und Phase zeigt. Dazu setzen wir $r_{\text{ampl}}(\omega) \equiv c < 1$, und erhalten für r die vereinfachte Darstellung

$$r(\omega) = c \cdot e^{i\varphi(\omega)}. \quad (4.22)$$

Da $\varphi(\omega)$ als Taylorpolynom in ω mit Entwicklungsstelle ω_0 gegeben ist, können wir r als Potenzreihe der Form

$$r(\omega) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k (\omega - \omega_0)^k = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \hat{\omega}^k = \hat{r}(\hat{\omega})$$

schreiben. Für Funktionen r bzw. \hat{r} dieses Typs existieren nun rationale Funktionen r_p derart, daß

$$\hat{r}(\hat{\omega}) - r_p(\hat{\omega}) = O(\hat{\omega}^{m+n+1}) \quad (\hat{\omega} \rightarrow 0) \quad (4.23)$$

gilt, wobei

$$r_p(\hat{\omega}) = \frac{a_0 + a_1 \hat{\omega} + \dots + a_n \hat{\omega}^n}{b_0 + b_1 \hat{\omega} + \dots + b_m \hat{\omega}^m} =: \frac{U(\hat{\omega})}{V(\hat{\omega})}, \quad b_0 \neq 0.$$

Die Funktion r_p heißt Padé-Approximation an \hat{r} vom Index (n, m) ([5], [6]). Sie approximiert in einer Umgebung von $\hat{\omega} = 0$ bzw. $\omega = \omega_0$ die Funktion \hat{r} bzw. r von der Genauigkeit einer Taylorreihe, wobei der Fehlergrad durch die Summe des Zähler- und Nennergrads von r_p bestimmt ist. Im Fall ihrer Existenz ist die Padé-Approximation eindeutig festgelegt, denn falls es zwei Approximationen U/V und U_1/V_1 dieser Art gäbe, müßte gelten

$$\frac{U(\hat{\omega})}{V(\hat{\omega})} - \frac{U_1(\hat{\omega})}{V_1(\hat{\omega})} = O(\hat{\omega}^{m+n+1}),$$

da jeweils die Zähler- und Nennerpolynome den gleichen Grad besitzen und die Quotienten dieselbe Reihe approximieren. Die anschließende Multiplikation mit den Nennerpolynomen liefert dann

$$U(\hat{\omega}) V_1(\hat{\omega}) - U_1(\hat{\omega}) V(\hat{\omega}) = O(\hat{\omega}^{m+n+1}).$$

Auf der linken Seite der Gleichung steht nun ein Polynom vom Höchstgrad $n+m$ und muß daher mit dem Nullpolynom übereinstimmen. Da nach Definition der Padé-Approximation weder V noch V_1 in einer Umgebung der Null verschwinden, folgt

$$\frac{U}{V} = \frac{U_1}{V_1}.$$

Die Existenz der Padé-Approximation ist nicht in allen Fällen gesichert. Es gilt aber ein Resultat von Baker ([5]):

Satz 4.2 (*Baker, 1973*)

Zu einer gegebenen Potenzreihe mit $c_0 \neq 0$, existiert für jedes m eine unendliche Folge von n_j , $j = 1, 2, \dots$, für die die Padé-Approximation vom Index (n_j, m) existiert. Genauso existiert zu jedem festen n eine unendliche Folge von m_j , $j = 1, 2, \dots$, für die die Padé-Approximation vom Index (n, m_j) existiert.

Funktionen vom Typ der Padé-Approximation sind das ideale Konstruktionselement für eine geeignete mathematisch-physikalische Modellierung des komplexen Reflektionskoeffizienten r . In den Anwendungen müssen die Phaseneigenschaften von r nur für reelle ω in einem Intervall der maximalen Länge eins um die Zentralfrequenz ω_0 exakt durch das Modell abgebildet werden. Die Padé-Approximation in der angegebenen Form ist in diesem Bereich bereits für kleine Werte n und m von Zähler- und Nennergrad hinreichend genau.

Gleiches gilt für die Genauigkeit der Amplitude im relevanten Intervall um ω_0 . Das erwünschte Abfallen außerhalb ergibt sich automatisch, wenn wir ein geeignetes Größenverhältnis von Zähler- und Nennergrad wählen.

Als weiterer Freiheitsgrad neben n und m steht der Dispersionskoeffizient 1. Ordnung D_1 zur Verfügung. Er charakterisiert die Breite der Luftschicht vor dem Spiegel und ist irrelevant für dessen Spektraleigenschaften. Aus technischen Gründen sollte sein Wert jedoch im Intervall $[20, 100]$ liegen. Im relevanten Bereich um ω_0 gilt $|\omega - \omega_0| < 1$, wodurch D_1 in φ zum führenden Koeffizienten wird und die Genauigkeit der Padé-Approximation in der Phase beeinflusst.

Wir wollen nun für den vorliegenden Beispieldatensatz die Padé-Approximation berechnen. Dazu gehen wir aus von (4.23) in der Form

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_k \hat{\omega}^k = \frac{\sum_{i=0}^n a_i \hat{\omega}^i}{\sum_{j=0}^m b_j \hat{\omega}^j} + O(\hat{\omega}^{m+n+1})$$

und multiplizieren beide Seiten der Gleichung mit dem Nennerpolynom:

$$\left(\sum_{k=0}^{\infty} c_k \hat{\omega}^k \right) \cdot \left(\sum_{j=0}^m b_j \hat{\omega}^j \right) = \sum_{i=0}^n a_i \hat{\omega}^i + O(\hat{\omega}^{m+n+1}).$$

Der anschließende Koeffizientenvergleich ergibt

$$\begin{aligned}
 a_0 &= c_0, \\
 a_1 &= c_1 + b_1 c_0, \\
 a_2 &= c_2 + b_1 c_1 + b_2 c_0, \\
 &\vdots \\
 a_n &= c_n + \sum_{i=1}^{\min\{n,m\}} b_i c_{n-i},
 \end{aligned} \tag{4.24}$$

sowie

$$\begin{aligned}
 b_m c_{n-m+1} + b_{m-1} c_{n-m+2} + \cdots + b_0 c_{m+1} &= 0, \\
 b_m c_{n-m+2} + b_{m-1} c_{n-m+3} + \cdots + b_0 c_{m+2} &= 0, \\
 &\vdots \\
 b_m c_n + b_{m-1} c_{n+1} + \cdots + b_0 c_{n+m} &= 0,
 \end{aligned} \tag{4.25}$$

wobei wir $c_j = 0$ setzen, sobald der Index $j < 0$ ist.

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit können wir in (4.25) $b_0 = 1$ setzen. In der rationalen Padé-Approximation treten $n + m + 2$ Koeffizienten auf, die sich durch Skalierung immer so transformieren lassen, daß $b_0 = 1$ wird, also nur noch $n + m + 1$ Unbekannte zu bestimmen sind.

Damit wird (4.25) zu einem m -dimensionalen linearen Gleichungssystem für die m unbekanntenen Koeffizienten b_1, \dots, b_m des Nennerpolynoms. Nach den vorherigen Überlegungen können wir annehmen, daß das Gleichungssystem eindeutig lösbar ist. Andernfalls verändern wir den freien Parameter D_1 oder ändern den Zähler- oder Nennergrad der Approximation. Das müssen wir in den praktischen Anwendungen ohnehin tun, wenn der Bereich, auf dem die Werte der Padé-Approximation mit den den Vorgaben übereinstimmen noch nicht hinreichend groß ist. Mit Kenntnis der Lösung von (4.25) ergeben sich dann die Koeffizienten a_j , $j = 1, \dots, n$, des Zählerpolynoms aus (4.24).

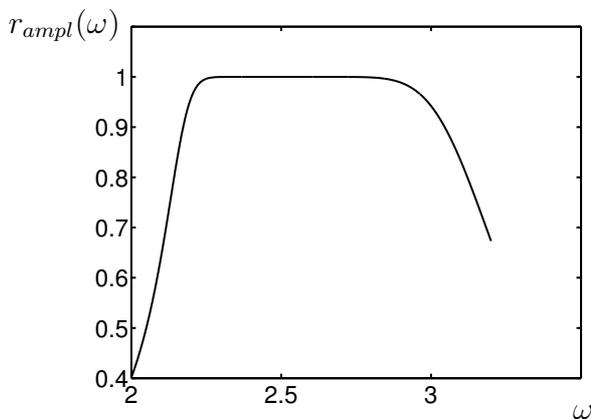


Abbildung 4.3: Amplitude $r_{\text{ampl}}(\omega)$ der Padé-Approximation an $r(\omega)$.

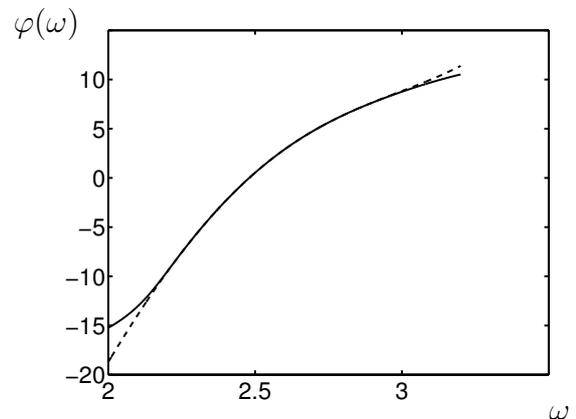


Abbildung 4.4: Phase $\varphi(\omega)$ der Padé-Approximation (gestrichelt: gegebene Phase).

Im vorliegenden Beispiel wurden $n = 5$, $m = 8$ und $D_1 = 27fs$ gewählt. Aus den beiden Abbildungen sehen wir, daß dann die Padé-Approximation das geforderte Verhalten von Amplitude und Phase in einem Intervall der Länge 0,8 um $w_0 = 2,48 \cdot 10^{15} s^{-1}$ nahezu exakt abbildet. Das Intervall entspricht einem Wellenlängenbereich von ca. 230 nm, dessen Größe für die meisten Anwendungen bereits hinreichend ist. Er läßt sich weiter vergrößern, wenn wir den Zähler- und Nennergrad erhöhen und damit die lokale Genauigkeit der Padé-Approximation weiter verbessern.

Der Erfolg dieser Strategie hängt bei den Phaseneigenschaften von den gegebenen Taylorkoeffizienten D_1, \dots, D_6 ab. In der Praxis gibt es Datensätze, bei denen auch eine wesentliche Erhöhung von n und m den Genauigkeitsbereich nur unwesentlich verbreitert. Grundsätzlich wollen wir eine Padé-Approximation an r mit möglichst kleinem Zähler- und Nennergrad finden, die unsere Vorgaben in zufriedenstellender Weise erfüllt.

Wir haben also mit der Padé-Approximation U/V eine komplexwertige, rationale Funktion gefunden, die das Verhalten des Reflektionskoeffizienten r im praxisrelevanten Frequenzbereich nahezu exakt beschreibt und die Zusatzbedingungen (ii) und (iv) erfüllt. Allerdings können wir nicht erwarten, daß gleichzeitig auch die Symmetrieeigenschaft (i) und die Holomorphiebedingung (iii) erfüllt sind.

Zur Erfüllung von (i) suchen wir eine rationale Funktion $r_m(\omega)$, deren Null- und Polstellen symmetrisch zur imaginären Achse liegen. Dazu transformieren wir die Frequenz ω auf die neue Variable s über $s = -i\omega$, was einer Drehung um $\pi/2$ im Uhrzeigersinn entspricht, und erhalten die neue Funktion

$$\tilde{r}_m(s) := r_m(is) = r_m(\omega).$$

Die Null- und Polstellen von $\tilde{r}_m(s)$ in der s -Skala sollen nun symmetrisch zur reellen Achse liegen. Eine passende Modellfunktion ist somit

$$\tilde{r}_m(s) = \frac{B(s)}{A(s)} = \frac{b_n s^n + \dots + b_1 s^1 + b_0}{s^m + a_{m-1} s^{m-1} + \dots + a_0},$$

wobei A und B reelle Polynome bezeichnen, d.h. alle Null- und Polstellen sind entweder reell oder treten in zueinander konjugiert komplexen, also zur reellen Achse symmetrischen Paaren auf.

In Abhängigkeit von ω ergibt sich

$$r_m(\omega) = \frac{B(-i\omega)}{A(-i\omega)} = \frac{a(\omega) + i\omega b(\omega)}{c(\omega) + i\omega d(\omega)}$$

mit den reellen, geraden Polynomen a, b, c, d , woraus sofort

$$r_m(-\omega) = \overline{r_m(\omega)}, \quad \omega \in \mathbb{R},$$

also Bedingung (i) folgt.

Wir wollen nun r_m bzw. \tilde{r}_m konkret berechnen. Dazu wählen wir eine äquidistante Zerlegung ω_j , $j = 1, \dots, M$, des relevanten Frequenzbereichs [2, 3] und transformieren diese in die entsprechende Zerlegung $\{s_j\}$ in der s -Skala. Die gesuchte rationale Funktion B/A

soll in jedem Zerlegungspunkt einen komplexen Wert annehmen, den wir aus der Padé-Approximation $r_p(\omega) = \tilde{r}_p(s)$ bestimmen:

$$\frac{b_n s_j^n + \dots + b_1 s_j^1 + b_0}{s_j^m + a_{m-1} s_j^{m-1} + \dots + a_0} - \tilde{r}_p(s_j) \stackrel{!}{=} 0, \quad j = 1, \dots, M,$$

oder

$$b_n s_j^n + \dots + b_1 s_j^1 + b_0 - \tilde{r}_p(s_j) (a_{m-1} s_j^{m-1} + \dots + a_0) \stackrel{!}{=} \tilde{r}_p(s_j) \cdot s_j^m, \quad j = 1, \dots, M. \quad (4.26)$$

In (4.26) haben wir also ein lineares Ausgleichsproblem für die $n + m + 1$ Koeffizienten der rationalen Funktion \tilde{r}_m zu lösen, wobei wir davon ausgehen wollen, daß die Anzahl M der Gleichungen groß gegen die Anzahl der Unbekannten ist.

Die aus (4.26) berechnete Lösung \tilde{r}_m bzw. r_m erfüllt nun die Bedingung (i), aber in der Regel noch nicht Bedingung (iii), d.h. das Nennerpolynom A besitzt Nullstellen mit positivem Realteil. Wir spiegeln alle Nullstellen dieser Art am Ursprung, so daß aus A das neue Polynom \tilde{A} und daraus die modifizierte rationale Funktion

$$\tilde{r}_{mi}(s) = \frac{B(s)}{\tilde{A}(s)}$$

entsteht, die nun alle geforderten Zusatzeigenschaften besitzt. Die Spiegelung verursacht aber ein zusätzlichen Fehler, so daß wir nun nicht mehr davon ausgehen, mit \tilde{r}_{mi} auch die Lösung des linearen Ausgleichsproblems (4.26) vorliegen zu haben. Wir müssen daher neu ansetzen:

$$\frac{B(s_j)}{\tilde{A}(s_j)} \stackrel{!}{=} \tilde{r}_p(s_j), \quad j = 1, \dots, M. \quad (4.27)$$

Das überbestimmte System (4.27) fassen wir als nicht-lineares Ausgleichsproblem für eine Funktion G auf:

$$G(x) := \left\| \frac{B}{\tilde{A}}(x, \cdot) - \tilde{r}_p(\cdot) \right\|_2^2, \quad (4.28)$$

wobei $x = (b_n, \dots, b_0, a_{m-1}, \dots, a_0)^T$ gerade die gesuchten Koeffizienten von Zähler- und Nennerpolynom enthält. Wir berechnen die Lösung iterativ, indem wir mit \tilde{r}_{mi} bzw. x_0 starten und eine Modifikation des gedämpften Gauß-Newton-Verfahrens verwenden.

In jedem Schritt k bestimmen wir zunächst die Newton-Korrektur s_k und daraus die neue Iterierte x_k zum Dämpfungsfaktor $\alpha = 1$. Anschließend berechnen wir die Nullstellen des x_k zugeordneten Nennerpolynoms und spiegeln diejenigen mit positivem Realteil am Ursprung. Mit dem in dieser Art modifizierten Nenner ermitteln wir in (4.28) die Euklid-Norm des neuen Fehlers. Falls $G(x_k) < G(x_{k-1})$ gilt, gehen wir zum nächsten Gauß-Newton-Schritt über, andernfalls halbieren wir α so lange, bis der neue Fehler kleiner als der alte ist oder wir eine feste Maximalzahl an Schritten durchgeführt haben.

Zur Bestimmung eines rationalen Modells \tilde{r}_{mi} mit den Zusatzeigenschaften (i)-(iv) für den Reflektionskoeffizienten r müssen also ein lineares und ein nicht-lineares Ausgleichsproblem gelöst werden, wobei die zu approximierenden Daten von der Padé-Approximation r_p an r stammen. Diese besitzt bis auf die Symmetrieeigenschaften ihrer Null- und Polstellen alle gewünschten Modelleigenschaften, was dazu führt, daß wir im relevanten Datenbereich

bei \tilde{r}_{mi} trotz zweier Optimierungsschritte nahezu keinen Genauigkeitsverlust im Vergleich zu r_p hinnehmen müssen, wie die folgenden beiden Abbildungen zeigen:

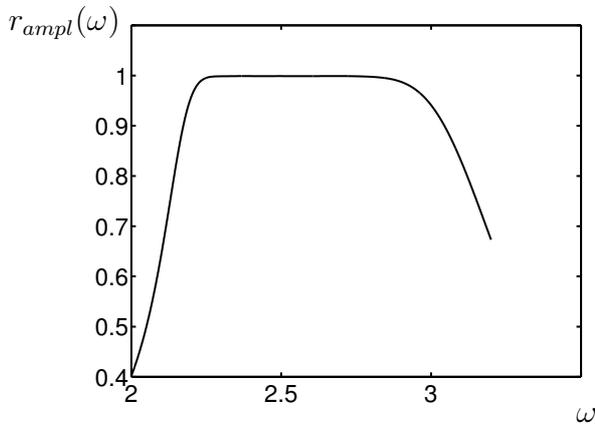


Abbildung 4.5: Amplitude $r_{ampl}(\omega)$ der rationalen Funktion $\tilde{r}_{mi}(\omega)$.

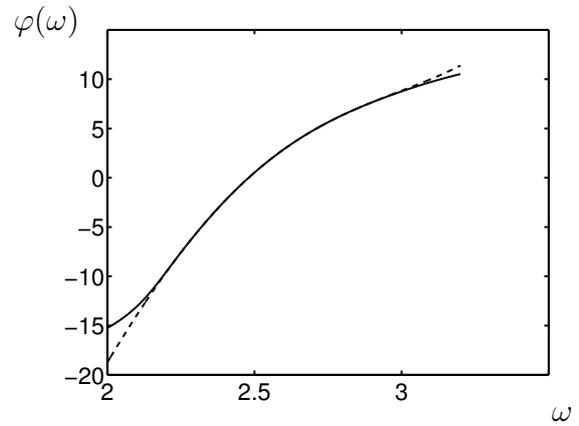


Abbildung 4.6: Phase $\varphi(\omega)$ der rationalen Funktion $\tilde{r}_{mi}(\omega)$ (gestrichelt: gegebene Phase).

Die exakten Phaseneigenschaften in einem Intervall um die Zentralfrequenz ω_0 allein reichen aber für Anwendungen im Ultrakurzlaserbereich noch nicht aus. Vielmehr müssen auch die Gruppenverzögerung φ' und die Gruppenverzögerungsdispersion φ'' exakt durch ein Modell für r abgebildet werden.

Unser gefundenes Modell \tilde{r}_{mi} erfüllt auch diese Forderungen in zufriedenstellender Weise und eignet sich damit hervorragend als Eingabefunktion für den Spiegel-Design-Algorithmus.

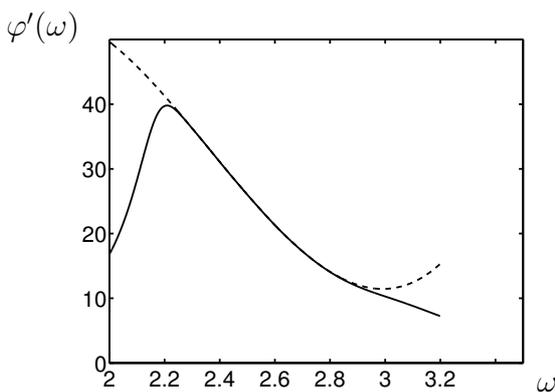


Abbildung 4.7: Gruppenverzögerung $\varphi'(\omega)$ von der gegebenen Phasenfunktion (gestrichelt) und der rationalen Modellfunktion \tilde{r}_{mi} .

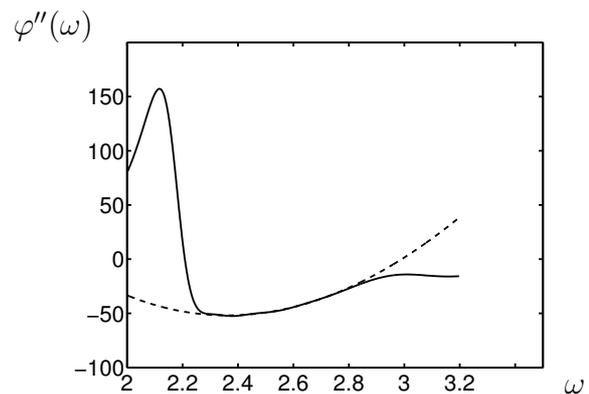


Abbildung 4.8: Gruppenverzögerungsdispersion $\varphi''(\omega)$ von der gegebenen Phasenfunktion (gestrichelt) und der rationalen Modellfunktion \tilde{r}_{mi} .

Die einzelnen Modellierungsschritte zu einem rationalen Reflektionskoeffizienten r mit den Zusatzeigenschaften (i)-(iv) können nun zusammengefaßt werden:

Algorithmus 4.1 (*Modellierung des Reflektionskoeffizienten*)

- (a) Experimentelle Daten für r sind gegeben über ein Potenzreihe für r um die Zentralfrequenz ω_0 .
- (b) Bestimme aus den Freiheitsgraden n, m und D_1 eine Padé-Approximation r_p vom Index (n, m) , die diese Daten approximiert.
- (c) Berechne eine rationale Approximation \tilde{r}_m an r_p mit zur imaginären Achse symmetrischen Pol- und Nullstellen über ein lineares Ausgleichsproblem.
- (d) Berechne iterativ eine rationale Approximation \tilde{r}_{mi} an r_p , die holomorph in der oberen Halbebene D ist, mit dem Startwert \tilde{r}_m über ein nicht-lineares Ausgleichsproblem.
- (e) Das Endergebnis \tilde{r}_{mi} hat die Form (4.1) und ist der Input für den Design-Algorithmus.

Die Schritte (c) und (d) basieren auf dem Ansatz von Levy ([31]) und sind in der `Matlab`-Routine `invfreqs` realisiert. Für die rationale Eingabefunktion \tilde{r}_{mi} wollen wir im folgenden wieder die Bezeichnung r verwenden.

4.1.2 Die Berechnung von q

Mit dem rationalen Reflektionskoeffizienten r können wir nun das zugehörige Potential q der Schrödinger-Gleichung explizit berechnen. Dazu benötigen wir zunächst die Nullstellen der Funktion h in D , d.h.

$$h(\omega) = 1 - r(\omega)r(-\omega) = 1 - \frac{p(\omega)}{q(\omega)} \frac{p(-\omega)}{q(-\omega)} = 0$$

oder

$$q(\omega)q(-\omega) - p(\omega)p(-\omega) = 0.$$

Wir müssen also die Nullstellen eines komplexen Polynoms vom Grad $2m$ berechnen. Diese Aufgabe kann mit Hilfe der `Matlab`-Routine `eig` gelöst werden, die die Eigenwerte der zum Polynom gehörigen Begleitmatrix bestimmt. Die Nullstellen in der oberen Halbebene sind dann die Koeffizienten κ_i , $i = 1, \dots, m$, und aus (4.8) erhalten wir die explizite Darstellung für den rechtsseitigen Reflektionskoeffizienten ρ .

Im nächsten Schritt benötigen wir die Residuen von ρ in den Polen der oberen Halbebene. Wir berechnen dazu die Partialbruchzerlegung von ρ mit der `Matlab`-Routine `residue`. Damit haben wir alle Koeffizienten der linearen Gleichungssysteme (4.15) und (4.20) bestimmt und können daraus für festes x die Koeffizientenfunktionen $f_k(x)$ und $f'_k(x)$, $k = 1, \dots, m$, berechnen, wobei wir jeweils die Symmetrieeigenschaften von f_k und f'_k für eine Partitionierung der Gleichungssysteme nutzen. Mit den gewonnenen Größen ergibt sich das Potential q dann aus (4.19).

Der zweite Teil des Design-Algorithmuses besteht also aus den folgenden Schritten:

Algorithmus 4.2 (*Explizite Berechnung des Potentials q*)

- (a) Berechne die Nullstellen κ_i , $i = 1, \dots, m$, der Funktion h in D und die Residuen ρ_i , $i = 1, \dots, m$, des Reflektionskoeffizienten ρ in seinen (einfachen) Polen κ_i .
- (b) Löse für festes x die linearen Gleichungssysteme (4.15) und (4.20) für die Koeffizientenfunktionen $f_k(x)$, $f'_k(x)$, $k = 1, \dots, m$.
- (c) Berechne $q(x)$ für festes x aus der expliziten Darstellung (4.19).

Für den gewählten Beispieldatensatz und den daraus im ersten Schritt modellierten rationalen Reflektionskoeffizienten r ergibt sich für q konkret:

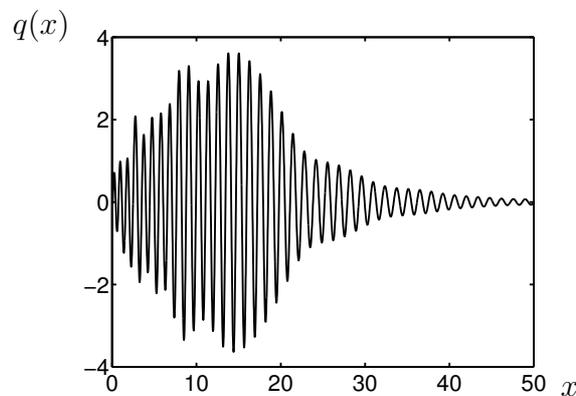


Abbildung 4.9: *Potential $q(x)$ der Schrödinger-Gleichung für den Beispieldatensatz in Abhängigkeit der Laufzeit x [fs]. Berechnung über Algorithmus 4.2.*

Das berechnete Potential q ist Koeffizient der gewöhnlichen Differentialgleichung (2.10), woraus sich der gesuchte Brechungsindex n nach Vorgabe geeigneter Anfangsbedingungen als Lösung ergibt. Bevor wir auf diesen letzten Schritt des Design-Algorithmuses eingehen, wollen wir die gewonnenen Daten für q etwas genauer analysieren.

Zunächst zeigt q in Abbildung 4.9 ein Abfallverhalten gegen $+\infty$, wie wir es aus der Theorie erwarten würden. Der überwiegende Teil reflektiver Vorgänge spielt sich im vorderen Bereich zwischen 0 und 20 ab, dahinter fällt q stark ab und oszilliert um die 0. Der Träger von q beschreibt die Gesamtdicke der Spiegelbeschichtung. Da wir nur an Spiegeln endlicher Ausdehnung interessiert sind, müssen wir uns eine Grenze $x = d1$ vorgeben, ab der wir annehmen können, daß $|q(x)|$ hinreichend klein ist, d.h. alle relevanten Reflexionsvorgänge im Spiegelinnern bereits abgelaufen sind. Wir approximieren für die Anwendungen also den Träger von q durch einen kompakten Träger.

Die konkrete Wahl von $d1$ hängt einerseits ab vom Verhalten von q , d.h. je langsamer q im Unendlichen fällt, umso dicker wird die zugehörige Spiegelbeschichtung. Dieser Aspekt

ist in den technischen Anwendungen von großer Bedeutung, da für Spiegel in Ultrakurz-laseranwendungen gewisse Obergrenzen für die Beschichtungsdicke gelten. Ein zu frühes Abschneiden von q führt aber andererseits zu Fehlern in den gewünschten Amplituden- und Phaseneigenschaften des Spiegels. Besonders die exakte Abbildung der vorgegebenen Gruppenverzögerung sowie der Gruppenverzögerungsdispersion sind aber für die Funktionsfähigkeit von Ultrakurzlasern unerlässlich und erfordern eine extrem hohe Genauigkeit.

Für die Wahl eines geeigneten $d1$ müssen wir also die entsprechenden Auswirkungen auf die Spektraleigenschaften des Spiegels untersuchen. Dazu setzen wir die berechneten Daten für q in die Schrödinger-Gleichung ein

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}(\omega, x) + (\omega^2 - q(x)) y(\omega, x) = 0$$

und verwenden die aus Kapitel 2 und 3 bekannten (asymptotischen) Darstellungen für die allgemeine Lösung y :

$$\begin{aligned} y(\omega, x) &= \alpha(\omega)e^{i\omega x} + \beta(\omega)e^{-i\omega x}, \quad x < 0, \\ 0 &= \lim_{x \rightarrow +\infty} (y(\omega, x) - (\gamma(\omega)e^{i\omega x} + \delta(\omega)e^{-i\omega x})). \end{aligned}$$

Da wir annehmen, daß $q(x) = 0$ für $x \geq d1$ ist, folgt

$$y(\omega, x) = \gamma(\omega)e^{i\omega x} + \delta(\omega)e^{-i\omega x}, \quad x \geq d1.$$

Im nächsten Schritt müssen wir Bedingungen angeben, die die allgemeine Lösung y eindeutig festlegen. Dazu wählen wir die speziellen Koeffizienten $\gamma \equiv 1$, $\delta \equiv 0$. Diese Festlegung erzeugt eine physikalisch relevante Lösung der Schrödinger-Gleichung und der Reflektionskoeffizient r ergibt sich zu

$$r(\omega) = \frac{\beta(\omega)}{\alpha(\omega)}.$$

Wir geben also die Anfangswerte

$$y(\omega, d1) = e^{i\omega d1}, \quad y'(\omega, d1) = i\omega e^{i\omega d1}$$

vor und berechnen die Lösung der Schrödinger-Gleichung rückwärts im Intervall $[0, d1]$. Wir erhalten die Funktionswerte

$$\begin{aligned} y(\omega, 0) &= \alpha(\omega) + \beta(\omega), \\ y'(\omega, 0) &= i\omega (\alpha(\omega) - \beta(\omega)), \end{aligned}$$

woraus

$$r(\omega) = \frac{i\omega y(\omega, 0) - y'(\omega, 0)}{i\omega y(\omega, 0) + y'(\omega, 0)}$$

folgt. Für den Beispieldatensatz haben wir $d1 = 50$ gewählt und die Lösung numerisch mit Hilfe der `Matlab`-Routine `ode45` berechnet.

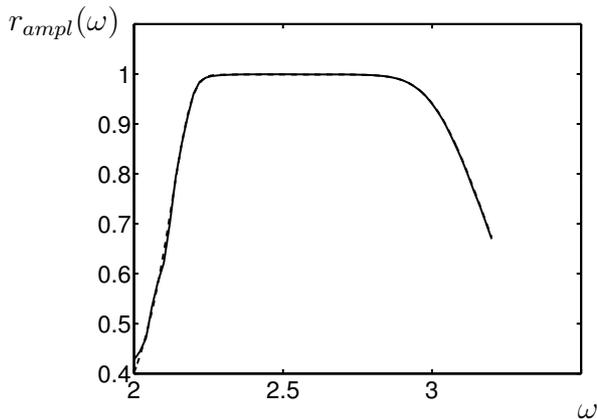


Abbildung 4.10: Amplitude $r_{\text{ampl}}(\omega)$ des Reflektionskoeffizienten, berechnet aus der Schrödinger-Gleichung zu gegebenem Potential q (gestrichelt: Amplitude der Eingabefunktion r aus der Modellierungsphase).

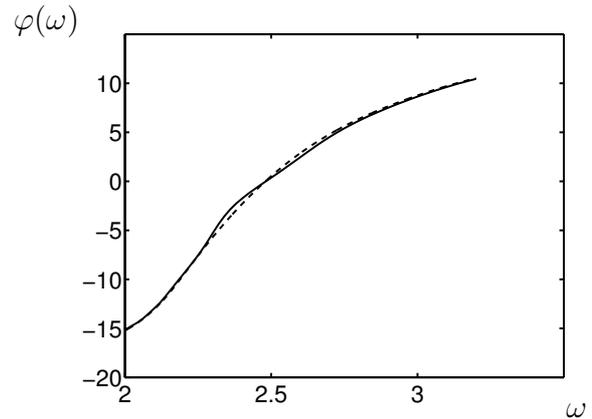


Abbildung 4.11: Phase $\varphi(\omega)$ des Reflektionskoeffizienten, berechnet aus der Schrödinger-Gleichung zu gegebenem Potential q (gestrichelt: Phase der Eingabefunktion r).

Die Abbildungen 4.10 und 4.11 bestätigen also auf den ersten Blick die Richtigkeit des eingeschlagenen Weges. Das zu gegebenem Reflektionskoeffizienten r berechnete Potential q liefert umgekehrt in der Rückwärtsrechnung über die Schrödinger-Gleichung gerade wieder r . Die Amplitude stimmt im relevanten Frequenzbereich bereits hinreichend genau mit der gestrichelt dargestellten Vorgabe überein, für die Phase scheint das ebenfalls zuzutreffen.

An dieser Stelle müssen wir aber genauer hinsehen. Die berechnete Spiegelbeschichtung hat nur dann einen praktischen Nutzen, wenn neben der Phase φ auch und gerade insbesondere die Gruppenverzögerung φ' und die Gruppenverzögerungsdispersion φ'' auf dem relevanten Bereich exakt mit den Vorgaben übereinstimmen. In unserem Beispielfall zeigt φ' das folgende Verhalten:

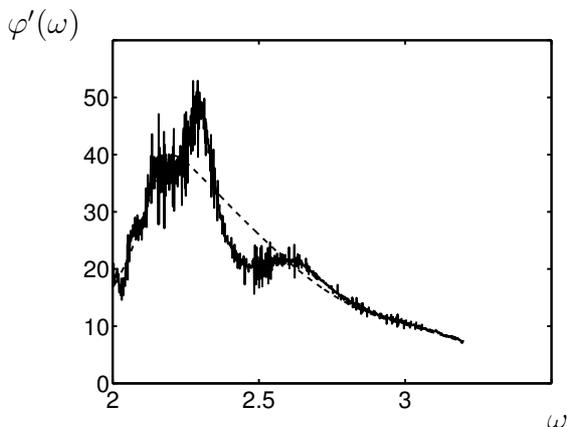


Abbildung 4.12: Gruppenverzögerung $\varphi'(\omega)$ des Reflektionskoeffizienten, berechnet aus der Schrödinger-Gleichung zu gegebenem Potential q mit $d_1 = 50$ (gestrichelt: Gruppenverzögerung der Eingabefunktion r).

Es treten also bereits in der 1. Ableitung der Phase starke Oszillationen auf, die den zugehörigen Spiegel für jegliche Anwendung im Ultrakurzlaserbereich unbrauchbar machen.

Aus der Theorie wissen wir, daß jedem Reflektionskoeffizienten r ein eindeutiges Potential q zugeordnet ist. Da unsere Eingabefunktion r die gewünschte Genauigkeit in der Phase und ihren beiden ersten Ableitungen besitzt, müßten wir in der Rückwärtsrichtung mit dem aus r berechneten q gerade wieder dieses Verhalten rekonstruieren können.

Auf dem beschriebenen Weg treten demnach Fehler auf, deren Ursachen wir nun analysieren wollen. Für die Kontrollrechnung zurück über die Schrödinger-Gleichung haben wir das Spiegelende künstlich an einer von uns gewählten Stelle $d1$ lokalisiert, von der wir annahmen, daß jenseits dieses Punktes keine weiteren reflektiven Vorgänge stattfinden. Diese Annahme verursacht einen Fehler, der sich besonders auf die Phaseneigenschaften des Spiegels niederschlägt. Tatsächlich zeigen weitere Experimente mit unterschiedlichen $d1$, daß bereits für relativ kleine Werte das gewünschte Amplitudenverhalten erreicht wird. Für höhere Exaktheit bei den Phaseneigenschaften müssen wir dagegen $d1$ wesentlich vergrößern und zwar so, daß $|q(x)| < \varepsilon$ für $x \geq d1$ gilt, wobei ε eine vorgegebene Genauigkeit bezeichnet. Im konkreten Beispiel ist eine deutliche Verbesserung erkennbar, wenn wir $d1$ von 50 auf 70 erhöhen:

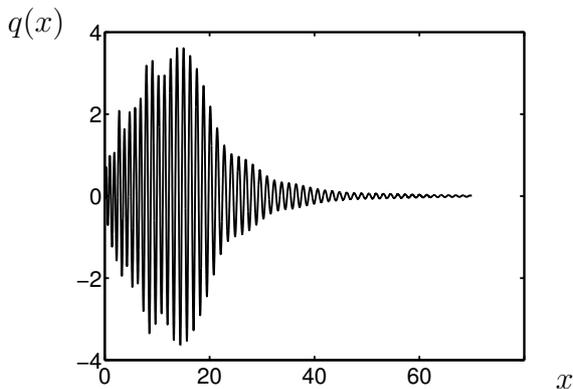


Abbildung 4.13: Potential $q(x)$ der Schrödinger-Gleichung bis zur Stelle $d1 = 70$.

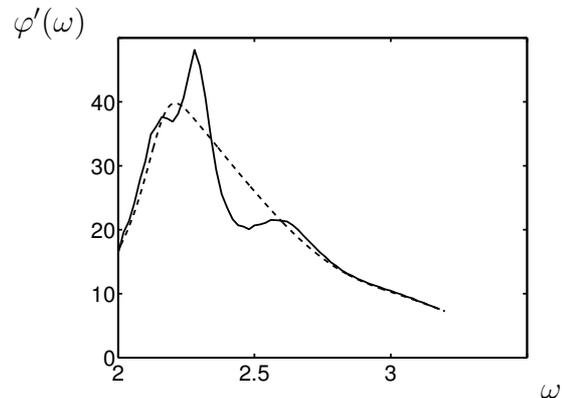


Abbildung 4.14: Gruppenverzögerung $\varphi'(\omega)$ des Reflektionskoeffizienten, berechnet aus der Schrödinger-Gleichung zu gegebenem Potential q mit $d1 = 70$ (gestrichelt: Gruppenverzögerung der Eingabefunktion r).

Weiterhin existieren aber größere Abweichungen, vor allem im Bereich der Zentralfrequenz $\omega_0 = 2.48$, obwohl der Betrag von q in der Nähe von $d1$ nur noch Werte bis maximal 0.015 besitzt. Wir müssen daher nach weiteren Fehlerquellen suchen.

Bei der Berechnung von q sind die Pole und zugehörigen Residuen des Reflektionskoeffizienten ρ zu bestimmen. Die hierfür benötigte Partialbruchzerlegung ist ein schlecht gestelltes Problem. Wenn das Nennerpolynom in der Nähe eines Polynoms mit mehrfachen Nullstellen liegt, können sich kleine Änderungen in den Daten in großen Änderungen der Pole und Residuen auswirken.

Im Lösungsalgorithmus 4.2 müssen wir zur Festlegung der Funktion ρ zuerst deren Pole in D als Nullstellen eines Polynoms bestimmen. Diese liegen häufig nah zusammen, so daß sich die Approximations- oder Rundungsfehler bei der Residuenberechnung

verstärken. Insgesamt reagiert dieser Algorithmusteil sehr empfindlich auf Datenänderungen, so z.B. auch bei geringfügigen Änderungen der Amplitudeneigenschaften von r durch einen Dämpfungsfaktor.

Wie die weiteren Schritte zeigen werden, liegt hier auch die Hauptursache für die großen Unterschiede bei den Phaseneigenschaften. Der zusätzliche Fehler, der bei der numerischen Lösung der Schrödinger-Gleichung in der Rückwärtsrechnung von q auf r auftritt, sowie alle weiteren Approximations- oder Rundungsfehler können im Vergleich dazu vernachlässigt werden.

Da wir diese Fehleranfälligkeit nur schwer verringern können und für die praktischen Anwendungen aber hoch exakt arbeiten müssen, benötigen wir eine alternative Methode für die Berechnung von q .

4.2 Die numerische Lösung der Marchenko-Integralgleichung

4.2.1 Die Leapfrogging-Methode

In Kapitel 3 haben wir die beiden Marchenko-Integralgleichungen (3.114) und (3.117) für die Funktionen K_p und K_m hergeleitet, mit deren Kenntnis wir das Potential q über (3.76) bzw. (3.78) berechnen können. Welche der beiden Gleichungen wir dabei zur Lösung des Problems heranziehen, hängt von der Methode ab, mit der wir die Integralgleichung lösen wollen. Für rationale Reflektionskoeffizienten r mit den Zusatzbedingungen (i)-(iv) haben wir eine explizite Darstellung für q gefunden, indem wir von (3.114) ausgingen und die speziellen Eigenschaften des zweiten Reflektionskoeffizienten ρ ausnutzten.

Genauso können wir zur Berechnung von q aber auch von (3.117) aus starten. Die Vorgehensweise des ersten Lösungsansatzes ist jetzt nicht einsetzbar, weil r holomorph in D ist. Im ersten Fall lieferten gerade die Polstellen von ρ bzw. die Tatsache, daß dessen Fouriertransformierte $P(z)$ für $z < 0$ nicht verschwindet, den Ansatz für eine explizite Lösung der Marchenko-Integralgleichung. Im Fall der zweiten Gleichung (3.117) müssen wir deren Lösung numerisch bestimmen. Wir transformieren dazu in (3.117), ähnlich wie in Kapitel 3, die Variablen x und z in u und v über

$$u = \frac{x+z}{2}, \quad v = \frac{x-z}{2}$$

und definieren die neue Funktion

$$\overline{K}(u, v) := K_m(u+v, u-v).$$

Damit haben wir (3.117) in der Form

$$\overline{K}(u, v) + 2 \int_0^u \overline{K}(w+v, u-w) R(2w) dw + R(2u) = 0. \quad (4.29)$$

Außerdem wissen wir, daß K_m die Gleichungen (3.74) und (3.77) erfüllt. Diese transformieren sich mit den neuen Variablen zu

$$\frac{\partial^2 \bar{K}}{\partial u \partial v}(u, v) - 2 \frac{d\bar{K}}{du}(u, 0) \bar{K}(u, v) = 0, \quad (4.30)$$

$$q(u) = 2 \frac{d\bar{K}}{du}(u, 0), \quad u \geq 0, \quad (4.31)$$

$$\bar{K}(0, v) = 0. \quad (4.32)$$

Nun definieren wir in der u/v -Ebene ein Gitter mit Ausgangspunkt im Ursprung und der Gitterweite h in beiden Koordinatenrichtungen. Anschließend diskretisieren wir die Marchenko-Integralgleichung (4.29) und die partielle Differentialgleichung (4.30), indem wir das Integral in (4.29) durch die zusammengesetzte Trapezregel und die partiellen Ableitungen in (4.30) durch Differenzenquotienten in den Gitterpunkten ersetzen. Daraus ergibt sich für $m, n \in \mathbb{N}$

$$R_{2m-1} + K_{m,n} + 2h \sum_{k=2}^{m-1} K_{k+n-1, m-k+1} R_{2k-1} + h K_{m+n-1,1} R_{2m-1} = 0, \quad (4.33)$$

$$K_{m,n+1} + K_{m+1,n} + (2h(K_{m+1,1} - K_{m,1}) - 1) K_{m,n} = K_{m+1,n+1}, \quad (4.34)$$

$$K_{1,n} = 0. \quad (4.35)$$

Die Bezeichnungen $K_{m,n}$ und R_m haben die Bedeutung

$$K_{m,n} = \bar{K}((m-1)h, (n-1)h), \quad R_m = R((m-1)h),$$

wobei $R(0) = 0$ ist. Das Potential q folgt dann aus der diskretisierten Form von (4.31)

$$q_m = 2 \frac{K_{m+1,1} - K_{m,1}}{h}, \quad m \in \mathbb{N},$$

d.h. wir müssen die Lösung $K_{i,1}$, $i \in \mathbb{N}$, an allen Gitterpunkten auf der u -Achse berechnen.

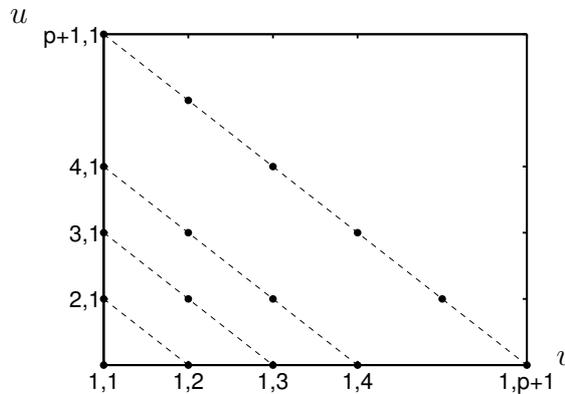


Abbildung 4.15: Gitter in der u/v -Ebene. Die diskreten Werte $K_{i,j}$ werden diagonalenweise berechnet.

In jedem Schritt $p > 1$ berechnen wir $K_{p,1}$ aus der diskretisierten Form (4.33) der Marchenko-Integralgleichung für $n = 1$. Dazu benötigen wir nur die übrigen Werte der p -ten Diagonalen. Diese erhalten wir sukzessive von links oben nach rechts unten aus Gleichung (4.34), wobei wir zur Berechnung nur auf Elemente der Diagonalen $p - 1$ und $p - 2$ zurückgreifen müssen.

Wir gehen demnach so vor, daß wir im p -ten Schritt ($p \geq 3$) zunächst alle inneren Elemente der p -ten Diagonalen aus (4.34) berechnen und dann mit den erhaltenen Werten das Element $K_{p,1}$ aus (4.33) bestimmen. Für $p = 2$ benötigen wir keine weiteren Werte aus (4.34) und können $K_{2,1}$ direkt aus (4.33) berechnen.

Nun springen wir auf die nächste Diagonale $p + 1$, berechnen sukzessive von links oben nach rechts unten alle inneren Einträge und erhalten damit $K_{p+1,1}$ wieder aus (4.33). Da wir nur an den Randelementen auf der u -Achse interessiert sind und bei der Berechnung der Diagonalelemente maximal auf Werte der beiden vorhergehenden Diagonalen zurückgreifen müssen, genügt es, von der Matrix $K_{m,n}$ nur die erste Spalte und im p -ten Schritt die Diagonalen p , $p - 1$ und $p - 2$ abzuspeichern. Wir rechnen entweder bis zu der vorgegebenen Grenze $x = d1$ oder wir brechen das Verfahren im Schritt p_0 ab, falls $K_{p,1}$ für wachsendes p annähernd konstant bleibt, d.h. q verschwindet.

Der beschriebene Algorithmus ist in der Literatur als Leapfrogging-Prozedur bekannt ([29], [39]). Die Grundversion verursacht allerdings recht große Fehler. Diese lassen sich deutlich verringern, wenn wir in jedem Schritt p eine Fixpunktiteration für die Elemente der p -ten Diagonalen durchführen. Wir berechnen also zuerst das Randelement $K_{p,1}$ wie in der Grundversion beschrieben aus (4.33). Danach schreiben wir (4.33) für jedes einzelne Nicht-Randelement der p -ten Diagonalen als Fixpunktiteration. Wir beginnen beim ersten Element links oben und berechnen eine vorgegebene Anzahl an Iterationsschritten. Mit dem verbesserten Wert für das erste Element führen wir die entsprechende Fixpunktiteration für das zweite Element durch. In dieser Art iterieren wir zuerst alle Nicht-Randelemente und dann das Randelement $K_{p,1}$ der p -ten Diagonalen. Anschließend springen wir wie in der Grundversion zur Diagonale $p + 1$ und wiederholen die Prozedur. Für viele Anwendungen genügen bereits 2 Schritte der Fixpunktiteration in jedem Schritt p , um die Fehler deutlich zu reduzieren.

Die Lösung der Marchenko-Integralgleichung über die Leapfrogging-Routine erfordert auch die Auswertung der Fouriertransformierten R des Reflektionskoeffizienten r an den Gitterpunkten u_i . Hier gehen wir vor wie bei Bailey/Swarztrauber ([4]). Wir nehmen an, daß $r(\omega)$ außerhalb des Intervalls $I = (-a/2, a/2)$ verschwindet, also zumindest näherungsweise einen kompakten Träger besitzt. Dann wird auf I die äquidistante Zerlegung

$$\omega_j = \left(j - \frac{m}{2}\right) \cdot \beta, \quad j = 0, \dots, m - 1,$$

definiert mit der Schrittweite $\beta = a/m$. Die Fouriertransformierte $R(z)$ wird nun ebenfalls äquidistant an den Stellen

$$z_k = \frac{2\pi \left(k - \frac{m}{2}\right)}{a}, \quad k = 0, \dots, m - 1,$$

ausgewertet, wobei die Zerlegungen der ω - und z -Achse etwa dieselbe Gitterweite haben sollen. Das führt auf die Bedingung

$$m = \frac{2\pi}{\beta^2}.$$

Für eine hohe Abtastgenauigkeit, d.h. kleines β , ist demnach eine große Anzahl an Funktionsauswertungen m erforderlich. Ein hohes m wiederum erfordert wegen $\beta = a/m$ ein großes a . Bei der Wahl von a orientieren wir uns an der Schrittweite im Leapfrogging-Algorithmus. Hier rechnen wir in den meisten Fällen mit $h = 0.01$, d.h. wir verwenden $\beta = 0.01$ als Gitterweite. Daraus ergibt sich $m = 62832$ und damit $a = 628.32$, d.h. $r(\omega)$ muß außerhalb des Intervalls $(-314.16, 314.16)$ verschwinden, was in den Anwendungen näherungsweise der Fall ist.

Mit den gefundenen Werten für a, β und m können wir nun R an den Stellen z_k numerisch berechnen:

$$R(z_k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} r(\omega) e^{-i\omega z_k} d\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-a/2}^{a/2} r(\omega) e^{-i\omega z_k} d\omega \approx \frac{1}{2\pi} \beta \sum_{j=0}^{m-1} r(\omega_j) e^{-i\omega_j z_k}.$$

Unter den gegebenen Voraussetzungen werden also die Integralgrenzen $\pm\infty$ durch $\pm a/2$ und das resultierende Integral durch die zusammengesetzte Trapezregel approximiert. Wir setzen die expliziten Darstellungen für ω_j und z_k ein und formen weiter um

$$\begin{aligned} R(z_k) &\approx \beta \sum_{j=0}^{m-1} r(\omega_j) e^{-2\pi i(j-m/2)(k-m/2)/m} \\ &= \beta e^{\pi i(k-m/2)} \sum_{j=0}^{m-1} r(\omega_j) e^{\pi i j} e^{-2\pi i j k/m} \\ &= (-1)^k \beta \mathcal{D}_k[\{(-1)^j r(\omega_j)\}], \quad 0 \leq k < m, \end{aligned}$$

wobei \mathcal{D}_k die k -te Komponente der diskreten Fouriertransformation des Vektors

$$\left((-1)^0 r(\omega_0), \dots, (-1)^{m-1} r(\omega_{m-1}) \right)^T$$

bezeichnet. Die Zerlegung z_k , $k = 0, \dots, m-1$, ist demnach gerade so gewählt, daß die Trapezsumme auf die Form einer diskreten Fouriertransformation gebracht und mit der `fft`-Routine in `Matlab` effizient berechnet werden kann.

Wir können nun die beiden Schritte zur numerischen Berechnung des Potentials q der Schrödinger-Gleichung zusammenfassen:

Algorithmus 4.3 (Numerische Berechnung des Potentials q)

- (a) Löse die diskretisierte Form der Marchenko-Integralgleichung (4.33) unter Verwendung von (4.34) mit dem iterativen Leapfrogging-Algorithmus zur Schrittweite h .
- (b) Berechne die auftretenden Auswertungen der Fouriertransformierten R von r aus den gegebenen Daten für r numerisch mit der angegebenen Methode.

Für den Beispieldatensatz wollen wir nun das Potential q über die Leapfrogging-Methode berechnen und die Ergebnisse mit denen des expliziten Lösungsansatzes vergleichen.

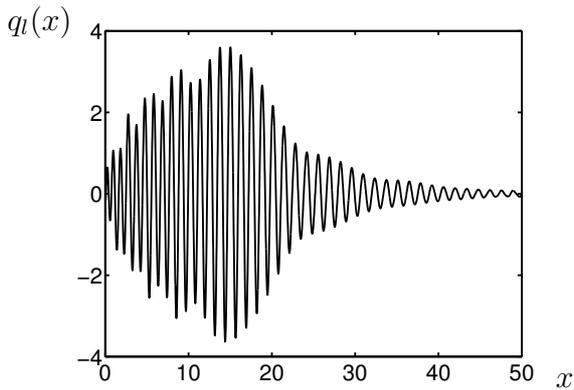


Abbildung 4.16: Potential $q_l(x)$ der Schrödinger-Gleichung bis zur Stelle $d1 = 50$, berechnet über die Leapfrogging-Methode.

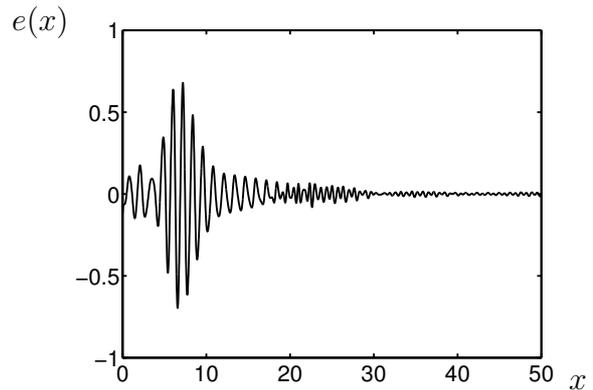


Abbildung 4.17: Differenz $e(x) = q_l(x) - q_k(x)$ mit q_l , berechnet über die Leapfrogging-Prozedur und q_k , berechnet über den expliziten Ansatz.

Abbildung 4.17 zeigt die Unterschiede zwischen den beiden Potentialen q_l und q_k , die einmal über die Leapfrogging-Routine und einmal über den expliziten Lösungsansatz berechnet wurden. Die größten Abweichungen treten im Bereich zwischen $x = 4$ und $x = 10$ auf. Daraus resultieren signifikante Unterschiede im Brechungsindex n , die keine zuverlässigen Vorgaben für die gesuchten Spiegel-Designs mehr möglich machen.

Wir müssen nun überprüfen, welche der beiden Approximationen q_l und q_k näher an der exakten Lösung q liegt. Dazu setzen wir wieder q_l in die Schrödinger-Gleichung ein, wählen die Anfangswerte an der Stelle $x = d1 = 50$ wie im ersten Fall, berechnen den zugehörigen Reflektionskoeffizienten r_l aus der Lösung der Gleichung an der Stelle $x = 0$.

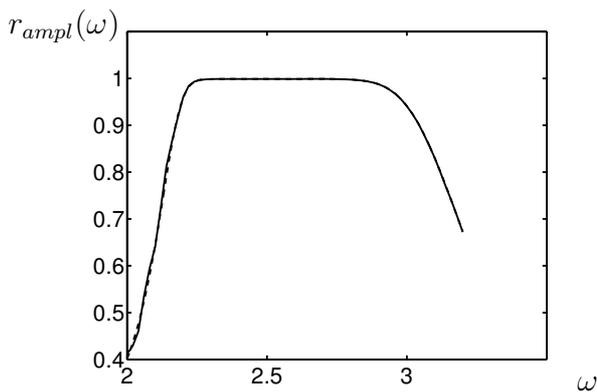


Abbildung 4.18: Amplitude $r_{ampl}(\omega)$ des Reflektionskoeffizienten, berechnet aus der Schrödinger-Gleichung zu gegebenem Potential q_l (gestrichelt: Amplitude der Eingabefunktion r aus der Modellierungsphase).

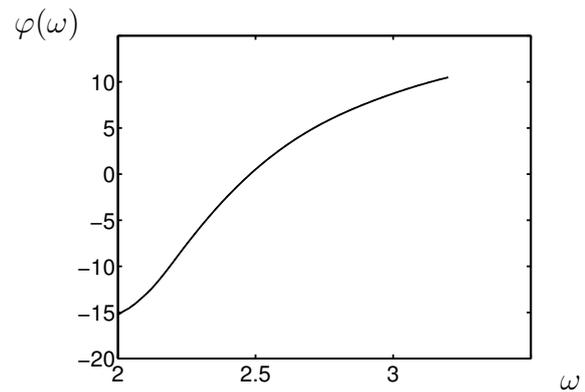


Abbildung 4.19: Phase $\varphi(\omega)$ des Reflektionskoeffizienten, berechnet aus der Schrödinger-Gleichung zu gegebenem Potential q_l (gestrichelt: Phase der Eingabefunktion r).

Auf den ersten Blick scheinen die Amplituden- und Phaseneigenschaften wesentlich genauer mit den Vorgaben übereinzustimmen als bei q_k aus dem expliziten Lösungsansatz. In Abbildung 4.19 scheint der Phasenwert von r_l sogar völlig deckungsgleich mit dem Wert der Eingabefunktion r zu sein. Für Hochfrequenz-Anwendungen muß aber auch die Gruppenverzögerung φ' exakt sein. Hier ergaben sich im ersten Fall sehr starke Oszillationen (siehe Abbildungen 4.12, 4.14), die auch durch Vergrößerung von $d1$ nicht auf ein zufriedenstellendes Maß reduziert werden konnten. Abbildung 4.20 zeigt das Verhalten von φ' für den Fall der Leapfrogging-Approximation:

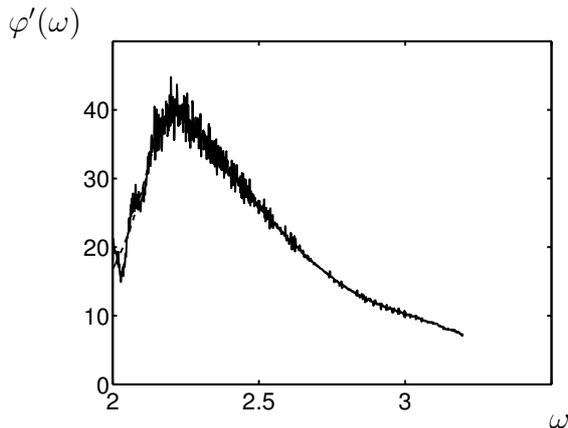


Abbildung 4.20: Gruppenverzögerung $\varphi'(\omega)$ des Reflektionskoeffizienten r_l , berechnet aus der Schrödinger-Gleichung zu gegebenem Potential q_l mit $d1 = 50$ (gestrichelt: Gruppenverzögerung der Eingabefunktion).

Auch hier treten Oszillationen auf, aber die Lösung liegt bereits deutlich näher an den Vorgaben, wie der Vergleich mit Abbildung 4.12 zeigt. Genau wie im ersten Fall haben wir uns mit der Wahl $d1 = 50$ einen Abbruchfehler eingehandelt, den wir durch Erhöhung von $d1$ reduzieren können. Für $d1 = 70$ ergibt die Rückwärtsrechnung von q auf r :

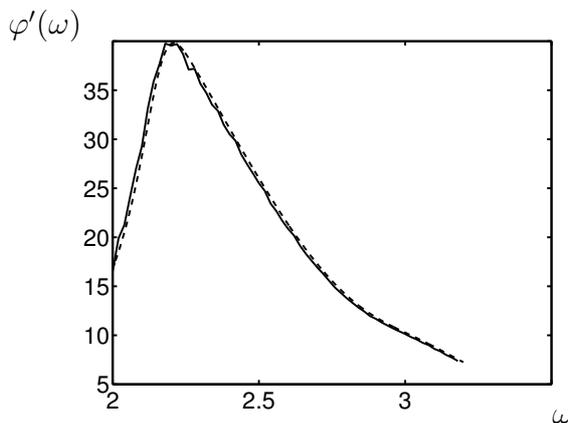


Abbildung 4.21: Gruppenverzögerung $\varphi'(\omega)$ des Reflektionskoeffizienten, berechnet aus dem Potential q_l der Leapfrogging-Prozedur für $d1 = 70$ (gestrichelt: Gruppenverzögerung der Eingabefunktion r).

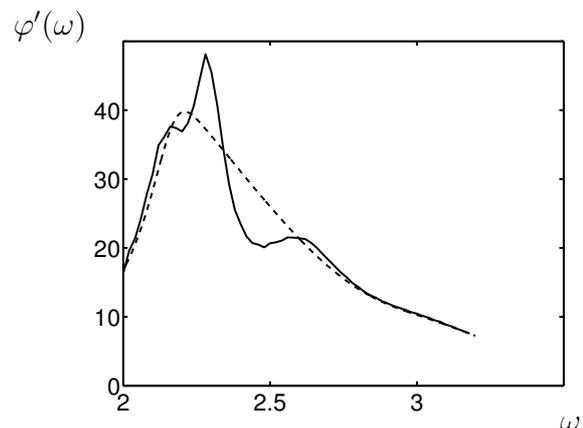


Abbildung 4.22: Gruppenverzögerung $\varphi'(\omega)$ des Reflektionskoeffizienten, berechnet aus dem Potential q_k des expliziten Ansatzes für $d1 = 70$ (gestrichelt: Gruppenverzögerung der Eingabefunktion r).

Wir erhalten also im Vergleich zum expliziten Lösungsansatz wesentlich exaktere Ergebnisse, die insbesondere auch für praktische Anwendungen geeignet sind. Aus der Instabilität der Residuenberechnung scheinen im ersten Fall Fehler zu resultieren, die zwar nur geringe bis moderate Fehler bei der Potentialberechnung aber große Fehler in den zugehörigen Spektraleigenschaften, besonders in der Gruppenverzögerung verursachen.

Da die Fehleranfälligkeit für die gegebenen experimentellen Daten nur schwer in den Griff zu bekommen ist und wir an hoch exakten Ergebnissen interessiert sind, ist für die Berechnung des Potentials q der Weg über die Leapfrogging-Routine vorzuziehen. Dieser verwendet als Eingabegröße nur Funktionsauswertungen der Fouriertransformierten R von r , die über die beschriebene numerische Methode sehr exakt berechnet werden können. Der Lösungsweg ist unabhängig von den fehlerbehafteten Polstellen und Residuen des Reflektionskoeffizienten ρ , weil man anstelle der Marchenko-Integralgleichung (3.114) für K_p von (3.117) für K_m und damit vom in D holomorphen Reflektionskoeffizienten r ausgeht. Die Kombination von Diskretisierung und Fixpunktiteration im iterativen Leapfrogging-Algorithmus sorgt zudem dafür, daß die auftretenden Fehler gering und kontrollierbar bleiben.

Dennoch ist der explizite Ansatz für q nicht gänzlich zu verwerfen. Die geforderte Exaktheit treibt den Aufwand beim Leapfrogging-Algorithmus enorm in die Höhe. Der explizite Ansatz dagegen benötigt bei gleicher Wahl von $d1$, also bei gleicher zu berechnender Datengröße, nur einen Bruchteil der Rechenzeit und sein Ergebnis für q weicht nur gering von dem aus der Leapfrogging-Routine ab. Außerdem scheint die Wahl von r als rationale Funktion mit den Zusatzeigenschaften (i)-(iv) ein geeignetes Modell für Anwendungen im Ultrakurzlaserbereich zu sein. Die vorhandenen Freiheitsgrade ermöglichen die Anpassung der Modellfunktion auf die jeweilige Problemstellung, wobei unterschiedliche Parameterkombinationen zu gleichwertigen Ergebnissen führen können. Da wir in der Modellierungsphase für r nur Werte auf einem kleinen Intervall vorgeben, lassen sich für ein konkretes Problem viele verschiedene Modelle für r finden, die die Vorgaben erfüllen. Entsprechend existiert eine Vielzahl von Potentialen q , die diese Spektraleigenschaften erzeugen, doch nicht jedes führt auf ein in der Praxis realisierbares Spiegel-Design.

Mit Hilfe des expliziten Ansatzes können wir ganz verschiedene Modelle in kurzer Zeit testen. Die Ergebnisse für q geben uns einen Anhaltspunkt, ob wir beim Eingabemodell mit einem praxisrelevanten Spiegel-Design rechnen können oder nicht. Auf diesem Weg treffen wir eine Vorauswahl und berechnen anschließend die in Frage kommenden Designs exakt mit der Leapfrogging-Routine. In diesem Zusammenhang dient der explizite Ansatz auch als Kontrollmöglichkeit für die erhaltenen numerischen Ergebnisse.

4.2.2 Alternative Modellierung von r

Im Gegensatz zum expliziten Ansatz ist die Leapfrogging-Methode nicht an rationale Eingabefunktionen für den Reflektionskoeffizienten r gebunden. Sie ist für beliebige Modelle von r einsetzbar, die die Zusatzeigenschaften (i)-(iv) erfüllen. Wir können also bei der Modellierung von r auch andere Funktionen verwenden, entweder wenn wir für gewisse Problemstellungen mit rationalen Funktionen keine realisierbaren Spiegel erzeugen können oder um zusätzliche Spiegel-Alternativen zu erhalten.

Die Funktion eines zweiten Modells für r soll holomorph in D sein und die Symmetriebedingung

$$r(-\omega) = \overline{r(\omega)}, \quad \omega \in \mathbb{R},$$

erfüllen. Die Fouriertransformierte der Modellfunktion muß hinreichend glatt sein und im Unendlichen schnell genug abfallen. Bei der Modellauswahl orientieren wir uns an der allgemeinen Darstellung

$$r(\omega) = r_{\text{ampl}}(\omega) \cdot e^{i\varphi(\omega)}$$

für r in Abhängigkeit von Amplitude r_{ampl} und Phase φ und definieren einen Modellprototyp durch

$$r(\omega) = r_0 \cdot \left(e^{-\left(\frac{\omega-\omega_0}{0.5}\right)^8} + e^{-\left(\frac{-\omega-\omega_0}{0.5}\right)^8} \right) \cdot \begin{cases} e^{i\varphi(\omega)}, & \omega \geq 0, \\ e^{-i\varphi(-\omega)}, & \omega < 0, \end{cases}$$

mit

$$\varphi(\omega) = \sum_{n=0}^6 \frac{1}{n!} D_n (\omega - \omega_0)^n.$$

Aus der Symmetriebedingung folgt, daß die Amplitude $r_{\text{ampl}}(\omega)$ eine gerade und die Phase $\varphi(\omega)$ eine ungerade Funktion in ω sein muß. Die Summe der beiden Exponentialfunktionen in der Amplitude sorgt dafür, daß $r_{\text{ampl}}(-\omega) = r_{\text{ampl}}(\omega)$ gilt und r_{ampl} auf \mathbb{R} zumindest aus numerischer Sicht hinreichend oft differenzierbar ist. Der Exponent ist so gewählt, daß die Amplitude im Bereich der Zentralfrequenz und in einer hinreichend großen Umgebung darum fast konstant eins ist und danach schnell abfällt. Der zweite Summand leistet für positive ω keinen meßbaren Beitrag zur Amplitude genauso wie umgekehrt für negative ω der erste Summand.

Bei der Phase verwenden wir deren Darstellung als Taylorpolynom, wobei wir einen Dispersionskoeffizient 0.ter Ordnung D_0 ergänzt haben, der so gewählt ist, daß $\varphi(0) = 0$ gilt, also φ ungerade und stetig ist. Dann erfüllt r bzw. dessen Fouriertransformierte R alle Forderungen des Charakterisierungstheorems 3.7.

Ein Vorteil des zweiten Modells könnte darin bestehen, daß R schneller als bei rationalen Ansatzfunktionen abfällt, wodurch sich die resultierende Spiegeldicke reduziert, was für die Anwendungen von Bedeutung ist. Auf der anderen Seite ist nun zusätzlich der Dispersionskoeffizient D_0 zu berücksichtigen, dessen Werte unter Umständen schwer zu realisieren sind. Erste Experimente haben außerdem gezeigt, daß der Dämpfungsfaktor r_0 kleiner als im Vergleich zu den rationalen Funktionen zu wählen ist. Das hat aber zur Folge, daß die Amplitude r_{ampl} im Bereich um ω_0 Werte annimmt, die deutlich unter den technischen Vorgaben liegen.

Der vorgeschlagene Prototyp beschreibt nur eine Möglichkeit für eine alternative Modellierung von r . Insgesamt müssen in dieser Richtung noch weitere Untersuchungen vorgenommen werden.

4.3 Die Berechnung des Brechungsindex n

Mit Kenntnis des Potentials q können wir nun im letzten Schritt des Spiegel-Design-Algorithmuses den ortsabhängigen Brechungsindex $n(z)$ berechnen, dessen Wert uns an jeder Stelle z des Spiegels die zugehörige Spiegelbeschichtung angibt.

Das Potential bestimmt als Koeffizientenfunktion in eindeutiger Weise eine gewöhnliche Differentialgleichung 2. Ordnung:

$$\frac{d^2W(x)}{dx^2} - q(x) \cdot W(x) = 0, \quad x \geq 0,$$

mit

$$W(x) = \sqrt{n(x) \varepsilon_0 c_0},$$

d.h. zwischen der Lösung W und n besteht ein einfacher expliziter Zusammenhang und wir können n aus W berechnen.

Die Lösung W der Differentialgleichung ist eindeutig bestimmt, wenn wir für die Funktion W und deren Ableitung Werte an der Stelle $x = 0$ vorgeben. Die Variable x bezeichnet nach Kapitel 2 die Laufzeit, die das Licht benötigt, um vom Beginn des Spiegels ($z = 0$) zur Position $z > 0$ zu gelangen, d.h. $x = 0$ charakterisiert den Spiegelanfang. Wir wollen annehmen, daß Luft das Umgebungsmedium des Spiegels ist und setzen $n(0) = 1$. Der Materialübergang soll sehr glatt sein und wir wählen $n'(0) = 1$. Transformiert auf W bedeutet das

$$W(0) = \sqrt{\varepsilon_0 c_0}, \quad W'(0) = 0.$$

Zu diesen Anfangswerten berechnen wir die Lösung W der Differentialgleichung über ein in `Matlab` implementiertes ODE-Verfahren und daraus anschließend den Brechungsindex $n(x)$ in Abhängigkeit der Laufzeit x über

$$n(x) = \frac{W^2(x)}{\varepsilon_0 c_0}.$$

Für das endgültige Spiegel-Design müssen wir dann noch die x -Skala über die Beziehung

$$z(x) = \int_0^x \frac{c_0}{n(t)} dt$$

in die z -Skala transformieren. Dazu lösen wir für jedes feste Element x_i unseres Laufzeitvektors X das Integral numerisch mit der Trapezregel, wobei wir in jedem Schritt die bereits berechneten Integrale verwenden können.

Da der Reflektionskoeffizient r nur mißt was insgesamt an reflektiven Vorgängen im Spiegel abläuft aber nicht welche Wellenlänge wo reflektiert wird, existieren mehrere unterschiedliche Spiegelbeschichtungen, die ein und dasselbe r erzeugen. Die Freiheit bei der Wahl der Anfangswerte für den Brechungsindex n können wir daher geschickt nutzen, um aus einem berechneten Potential q ein realisierbares Spiegel-Design zu erhalten.

Ein Blick auf die in Kapitel 1 eingeführten doppelt-durchgestimmten Spiegel zeigt in deren vorderem Bereich das sogenannte AR-Coating. Hier wird in einem Extra-Verfahren der Übergang vom Umgebungsmedium in den Spiegel modelliert. Starke Oszillationen in der Phase machen diesen Schritt erforderlich. In unserer Rechnung können wir nun den vorderen Spiegelteil, also das AR-Coating, miteinbeziehen oder erst an dessen Ende im Doppel-Chirp-Bereich beginnen. Im ersten Fall wählen wir dann $n(0) = 1$, im zweiten $n(0) = n_1 > 1$.

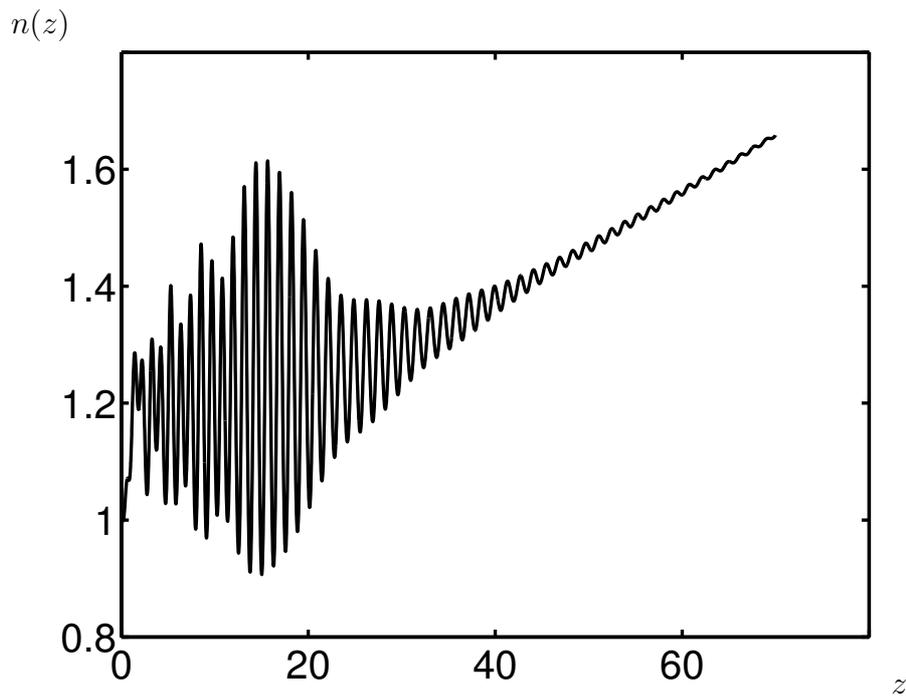


Abbildung 4.23: Brechungsindex $n(z)$ in Abhängigkeit des Ortes z (in μm), berechnet aus dem Potential q_1 der Leapfrogging-Prozedur für $d_1 = 70$ und dem Anfangswert $n'(0) = 0$.

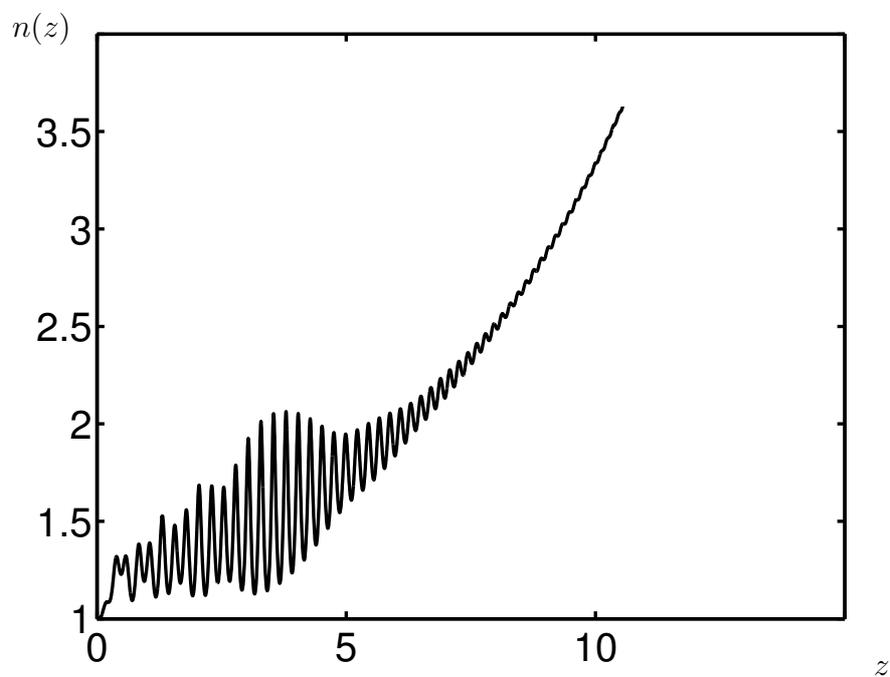


Abbildung 4.24: Brechungsindex $n(z)$ in Abhängigkeit des Ortes z (in μm), berechnet aus dem Potential q_1 der Leapfrogging-Prozedur für $d_1 = 70$ und dem Anfangswert $n'(0) \neq 0$.

Für das aus den Beispieldaten mit dem Leapfrogging-Algorithmus und $d_1 = 70$ gewonnene Potential q wurden zwei verschiedene Spiegel-Designs berechnet. Im ersten Fall haben wir die Anfangswerte für W wie oben vorgeschlagen gewählt, im zweiten wurde der Wert der Ableitung auf $W'(0) = 0.005$ gesetzt.

Das Ergebnis für den Brechungsindex im ersten Fall (Abbildung 4.23) liefert kein realisierbares Spiegel-Design. Zum einen sinkt n auf unzulässige Werte unter 1 ab, zum anderen liegt die Gesamtspiegeldicke bei über $60 \mu m$, was für die Anwendungen viel zu hoch ist. Im zweiten Fall (Abbildung 4.24) dagegen bewegt sich n im erwünschten Wertebereich zwischen 1 und 4 und auch die Spiegeldicke entspricht mit $10 \mu m$ den technischen Vorgaben.

Die Änderung des Anfangswerts für die Ableitung von n hat also weitreichende Konsequenzen für das resultierende Spiegel-Design. Das Änderungsverhalten von n beeinflusst die Spiegeldicke über die Variablentransformation von der Laufzeit x zur Eindringtiefe z . Ein schnelleres Anwachsen macht dort den Integrand und damit auch die Eindringtiefe z kleiner, genau wie es die beiden Abbildungen zeigen.

Dem Wunsch nach möglichst dünnen Spiegeln steht aber deren Realisierbarkeit entgegen. Wächst n zu schnell, kommt man viel zu früh in Wertebereiche, zu denen es keine Beschichtungsmaterialien mehr gibt. Die Anfangswerte müssen demnach - etwa wie im zweiten Fall- so gewählt werden, daß der vorgegebene Wertebereich nicht verlassen wird und trotzdem die Spiegeldicke unter einem gewissen Grenzwert bleibt.

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wird ein neues mathematisches Verfahren präsentiert, das zu vorgegebenen Spektraleigenschaften die optimale Beschichtung eines Laserspiegels liefert, mit dessen Hilfe ultrakurze Laserpulse erzeugt werden können.

Ausgehend von einer mathematisch-physikalisch motivierten Modellbildung wurden die einzelnen Schritte des Spiegel-Design-Algorithmuses hergeleitet, dessen Kern die Lösung des inversen Problems für die eindimensionale Schrödinger-Gleichung ist.

Die mathematische Analyse des direkten Problems führte auf das Charakterisierungstheorem, mit dem Bedingungen angegeben werden konnten, unter denen das Potential der Schrödinger-Gleichung und der Reflektionskoeffizient als Parameter einer speziellen Lösung der Gleichung eine eindeutige Zuordnung besitzen. Unter den Voraussetzungen des Charakterisierungstheorems existiert eine eindeutige Lösung der Marchenko-Integralgleichung, die das inverse Problem vollständig charakterisiert.

Kapitel 3 liefert das theoretische Fundament zur Lösung des Spiegel-Design-Problems. Die wesentlichen Schritte wurden motiviert und alle relevanten Zwischenergebnisse ausführlich hergeleitet. Die grundlegende Vorgehensweise wurde aus verschiedenen Arbeiten mit ähnlichen Fragestellungen entsprechend übertragen. Die einzelnen Ergebnisse wurden dazu auf die vorliegende Situation angepaßt und zu einem in sich schlüssig strukturierten Gesamtkonzept zusammengefügt.

Für die numerische Lösung des inversen Problems konnte in Kapitel 4 gezeigt werden, daß die Marchenko-Integralgleichung für spezielle rationale Reflektionskoeffizienten explizit lösbar ist. Erste praktische Beispiele weisen auf gewisse numerische Instabilitäten bei der konkreten Berechnung hin. Alternativ wurde deshalb die Leapfrogging-Methode vorgestellt, die die Integralgleichung approximativ löst und deren Ergebnisse bei geeigneter Parameterwahl wesentlich besser erscheinen. Der explizite Ansatz kann dennoch für konkrete Anwendungen von Nutzen sein, da er mit erheblich weniger Rechenaufwand auskommt. In einer Testphase können dadurch für jedes Problem relativ schnell gewisse Reflektionskoeffizienten ausgewählt werden, die auf vielversprechende Potentiale führen.

Die Modellierung des speziellen rationalen Reflektionskoeffizienten erfolgte in zwei Stufen. Zunächst wurden die Eingabedaten für Amplitude und Phase durch eine geeignete Padé-Approximation dargestellt. Diese liefert einen guten Startwert für das anschließende Minimierungsproblem, aus dem die endgültige rationale Funktion für den Reflektionskoeffizienten folgt. Für den angegebenen und weitere Beispieldatensätze ergab sich aus der Methode ein Modell, das die geforderten Phaseneigenschaften, insbesondere die vorgegebene Gruppenverzögerung und Gruppenverzögerungsdispersion, im relevanten Frequenzbereich exakt abbildet und daher auf praxistaugliche Ergebnisse hoffen läßt.

Der rationale Ansatz ist allerdings nicht in allen Fällen einsetzbar. Aus den Anwendungen ergeben sich Vorgaben, die nicht oder nur sehr schwierig über eine rationale Funktion für den Reflektionskoeffizienten dargestellt werden können.

Für diesen Fall wurde eine alternative, allgemeinere Funktion für den Reflektionskoeffizienten angegeben, die Amplitude und Phase getrennt über Exponentialfunktionen modelliert. Hier ist nur zu beachten, daß das Modell die Voraussetzungen des Charakterisierungstheorems erfüllt. Dann existiert eine eindeutige Lösung der Marchenko-Integralgleichung, die über die Leapfrogging-Methode berechnet werden kann.

Mit dem aus der Lösung der Marchenko-Integralgleichung bestimmten Potential der Schrödinger-Gleichung kann dann die gesuchte Spiegelbeschichtung in der Form des ortsabhängigen Brechungsindex berechnet werden. Dazu ist eine gewöhnliche Differentialgleichung 2. Ordnung zu lösen, wobei die Anfangswerte bis zu einem gewissen Grad frei wählbar sind. Das hat zur Folge, daß unter den gegebenen Voraussetzungen jedem Reflektionskoeffizienten genau ein Potential aber mehrere Brechungsindizes zugeordnet sind. Wie die Beispielrechnungen gezeigt haben, kann man hier durch geschickte Wahl der Anfangswerte ein Spiegel-Design erzeugen, welches den technischen Vorgaben nahe kommt.

Der Algorithmus gibt demnach einerseits Einblick in die Vielfältigkeit der Lösungen des Spiegel-Design-Problems, andererseits zeigen seine Ergebnisse auch die starke Sensibilität der Ausgabedaten gegenüber geringen Veränderungen in den Eingabedaten. So können zwei Reflektionskoeffizienten, die auf dem relevanten Frequenzbereich mit hoher Genauigkeit übereinstimmen von völlig unterschiedlichen Potentialen erzeugt werden.

Aktuell werden die Spiegel durch das diskrete Modell der (2×2) -Transfermatrizen beschrieben. Diese unterteilen sich zum einen in Matrizen, die das Spiegelverhalten innerhalb einer diskreten Schicht festlegen und zum anderen in Matrizen, die den Übergang von einer Schicht in die nächste charakterisieren. Die Spiegelbeschichtung ist dann durch die Vorgabe der Schichtdicken und Schichtenanzahl eindeutig bestimmt. Das Produkt aller dieser Matrizen bildet die Gesamtmatrix der Spiegelbeschichtung und der Reflektionskoeffizient $r(\omega)$ ergibt sich für festes ω aus dem Quotient der Einträge der ersten Spalte.

Zur Berechnung des Spiegel-Designs wird nun ein nicht-lineares Ausgleichsproblem der Form

$$J(x) = \|r_{amplt}(x, \cdot) - r_{amplt}(\cdot)\|_2^2 + \|\varphi_t(x, \cdot) - \varphi(\cdot)\|_2^2,$$

gelöst, wobei x den Vektor der Schichtdicken bezeichnet. Die Variablen $r_{amplt}(x, \omega)$ und $\varphi_t(x, \omega)$ bezeichnen die Amplitude und Phase des Reflektionskoeffizienten für die Frequenz ω , berechnet aus dem Modell der Transfermatrizen. Die Funktionen r_{amplt} und φ charakterisieren die vorgegebenen Spektraleigenschaften. Der Startwert für die Iteration wird aus dem sogenannten Chirp-Gesetz gewonnen, das aus einer vereinfachten Form der Helmholtz-Gleichung resultiert ([34]).

Wie sich zeigt, erfüllt das aus dem Chirp-Gesetz erhaltene Startdesign die geforderten Spektraleigenschaften nur bedingt. Der vorgestellte Spiegel-Design-Algorithmus sollte hier einen verbesserten Startwert und damit neue Impulse für die zukünftige Design-Technik liefern. Die hierfür erforderliche Diskretisierung des kontinuierlichen Brechungsindex könnte über das Konzept des sogenannten äquivalenten Brechungsindex erfolgen ([30]).

Aufgrund des technischen Fortschritts ist in naher Zukunft auch mit dem Bau kontinuierlicher Spiegelbeschichtungen zu rechnen. Der Spiegel-Design-Algorithmus liefert in diesem Fall Spiegel-Designs mit maßgeschneiderten Spektraleigenschaften.

Der Algorithmus in der hergeleiteten Form eignet sich insbesondere hervorragend für Anwendungen im Ultrakurzlaserbereich, denn für rationale Reflektionskoeffizienten ergibt sich eine explizite Lösung, die relativ einfach zu berechnen ist. Der Einsatz dieser rationalen Funktionen ist im Filter-Design weit verbreitet und hat bei ähnlichen Problemen bereits zu guten Ergebnissen geführt ([41]). Weiter liefert die Leapfrogging-Methode auch für nicht-rationale Reflektionskoeffizienten Resultate von hoher Genauigkeit, was entscheidend für die praktische Nutzbarkeit der Ergebnisse ist.

Das Problem des Spiegel-Designs für Laseranordnungen im Femtosekundenbereich ist ein aktuelles Forschungsgebiet mit großen Anwendungsmöglichkeiten. Die vorliegende Arbeit bildet einen neuen Baustein für die weitere Entwicklung in diesem Bereich.

Literaturverzeichnis

- [1] Z. S. Agranovich, V. A. Marchenko. *The inverse problem of scattering theory*. Gordon and Breach, 1964.
- [2] T. Aktosun. *Inverse Schrödinger scattering on the line with partial knowledge of the potential*. SIAM Journal of Applied Mathematics, Vol. 56, No. 1, pp. 219-231, February 1996.
- [3] T. Aktosun, M. Klaus, C. van der Mee. *On the Riemann-Hilbert problem for the one-dimensional Schrödinger equation*. Journal of Mathematical Physics, Vol. 34, No. 7, July 1993.
- [4] D. H. Bailey, P. N. Swarztrauber. *A fast method for the numerical evaluation of continuous fourier and laplace transforms*. SIAM Journal on Scientific Computing, Vol. 13, No. 5, pp. 1105-1110, September 1994.
- [5] G. A. Baker, JR. *Essentials of Padé approximants*. Academic Press, 1975.
- [6] G. A. Baker, JR., P. Graves-Morris. *Padé approximants*. Cambridge University Press, 1996.
- [7] F. A. Berezin, M. A. Shubin. *The Schrödinger equation*. Kluwer, 1991.
- [8] Ph. Blanchard, E. Brüning. *Distributionen und Hilbertraumoperatoren*. Springer, 1993.
- [9] R. Brigola. *Fourieranalysis, Distributionen und Anwendungen*. Vieweg, 1997.
- [10] I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew. *Taschenbuch der Mathematik*. Teubner, 1991.
- [11] J. A. Buck. *Fundamentals of optical fibers*. Wiley, 1995.
- [12] K. Chadan, P. C. Sabatier. *Inverse problems in quantum scattering theory*. 2. Auflage, Springer, 1989.
- [13] K. Chadan, D. Colton, L. Päivärinta, W. Rundell. *An introduction to inverse scattering and inverse spectral problems*. SIAM Monographs on Mathematical Modeling and Computation, 1997.
- [14] P. Deift, E. Trubowitz. *Inverse scattering on the line*. Communications on Pure and Applied Mathematics, Vol. 32, pp. 121-251, 1979.
- [15] H. W. Engl. *Integralgleichungen*. Springer, 1997.

- [16] L. D. Faddeev. *Properties of the S-matrix of the one-dimensional Schrödinger equation*. Translations of the American Mathematical Society 65, pp. 139-166, 1964.
- [17] L. D. Faddeev, B. Seckler. *The inverse problem in quantum theory of scattering*. Journal of Mathematical Physics, Volume 4, No. 1, pp. 72-104, January 1963.
- [18] J. G. Fujimoto, E. P. Ippen, H.A. Haus. *Ultrashort-Pulse Generation and Ultrafast Phenomena*. RLE Progress Report 143, Optics and Devices, 2001.
- [19] B. Grebert, R. Weder. *Reconstruction of a potential on the line that is a priori known on the half line*. SIAM Journal of Applied Mathematics, Vol. 55, No. 1, pp. 242-254, February 1995.
- [20] N. I. Grinberg. *The one-dimensional inverse scattering problem for the wave equation*. Math. USSR Sbornik, Vol. 70, No. 2, pp. 557-572, 1990.
- [21] N. I. Grinberg. *Inverse scattering problem for an elastic layered medium*. Inverse Problems, Vol. 7, pp. 567-576, 1991.
- [22] W. Hackbusch. *Integralgleichungen: Theorie und Numerik*. / von Wolfgang Hackbusch. Teubner, 1997.
- [23] D. L. Jaggard, P. V. Frangos. *The electromagnetic inverse scattering problem for layered dispersionless dielectrics*. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, Vol. AP-35, No. 8, pp. 934-946, August 1987.
- [24] D. L. Jaggard, Y. Kim. *Accurate one-dimensional inverse scattering using a nonlinear renormalization technique*. Journal of the Optical Society of America A, Vol. 2, No. 11, pp. 1922-1930, November 1985.
- [25] D. L. Jaggard, K. E. Olson. *Numerical reconstruction for dispersionless refractive profiles*. Journal of the Optical Society of America A, Vol. 2, No. 11, pp. 1931-1936, November 1985.
- [26] F. X. Kärtner, N. Matuschek et al. *Design and fabrication of double-chirped mirrors*. Optics Letters, Vol. 22, No. 11, pp. 831-833, June 1997.
- [27] I. Kay. *The inverse scattering problem*. New York University Research Report, EM-74, 1955.
- [28] I. Kay. *The Inverse Scattering Problem when the Reflection Coefficient is a Rational Function*. Communications on Pure and Applied Mathematics, Vol. XIII, pp. 371-393, 1960.
- [29] H. N. Kritikos, D. L. Jaggard, D. B. Ge. *Numeric reconstruction of smooth dielectric profiles*. Proceedings of the IEEE, Vol. 70, No. 3, pp. 295-297, March 1982.
- [30] C. J. van der Laan, H. J. Frankena. *Equivalent layers: another way to look at them*. Applied Optics, Vol. 34, No. 4, pp. 681-687, February 1995.
- [31] E. C. Levy. *Complex-curve fitting*. IRE Transactions on Automatic Control, Vol. AC-4, pp. 37-44. 1959.

- [32] H. A. Mcleod. *Thin-film optical filters*. Hilger, 1969.
- [33] Ch. K. Madsen, J. H. Zhao. *Optical filter design and analysis*. Wiley, 1999.
- [34] N. Matuschek. *Theory and design of double-chirped mirrors*. Series in Quantum Electronics, Vol. 13, 1999.
- [35] N. Matuschek, G. Steinmeyer, U. Keller. *Relation between coupled-mode theory and equivalent layers for multilayer interference coatings*. Applied Optics, Vol. 39, No. 10, pp. 1626-1632, April 2000.
- [36] U. Morgner. *Erzeugung kürzester Laserpulse im nahen Infraroten*. Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik, Universität Karlsruhe, Habilitationsschrift, 2001.
- [37] H. E. Moses. *Calculation of the scattering potential from reflection coefficients*. Physical Review, Vol. 102, No. 2, pp. 559-567, April 1956.
- [38] H. E. Moses, C. M. de Ridder. *Properties of dielectrics from reflection coefficients in one dimension*. MIT Lincoln Laboratory, Technical Report No. 322, July 1963.
- [39] C. Papachristos, P.V. Frangos. *Design of corrugated optical waveguide filters through a direct numerical solution of the coupled Gel'fand-Levitan-Marchenko integral equations*. Journal of the Optical Society of America A, Vol. 19, No. 5, pp. 1005-1012, May 2002.
- [40] R. Remmert. *Funktionentheorie II*. Springer, 2. Auflage 1994.
- [41] P. Roberts, G. E. Town. *Design of Microwave Filters by Inverse Scattering*. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, Vol. 43, No. 4, pp. 739-743, April 1995.
- [42] J. E. Sipe, L. Poladian, C. M. de Sterke. *Propagation through nonuniform grating structures*. Journal of the Optical Society of America, Vol. 11, No. 4, pp. 1307-1320, 1994.
- [43] J. Skaar, L. Wang, T. Erdogan. *On the synthesis of fiber Bragg gratings by layer peeling*. IEEE Journal of quantum electronics, Vol. 37, No. 2, pp. 165-173, February 2001.
- [44] J. Skaar et al. *High-reflectivity fiber-optics bandpass filter designed by use of the iterative solution to the Gel'fand-Levitan-Marchenko equations*. Optics Letters, Vol. 23, No. 12, pp. 933-935, June 1998.
- [45] E. Somersalo. *Layer stripping for time-harmonic Maxwell's equations with high frequency*. Inverse Problems, Vol. 10, pp. 449-466, 1994.
- [46] W. H. Southwell. *Spectral response calculations of rugate filters using coupled-wave theory*. Journal of the Optical Society of America A, Vol. 5, No. 9, pp. 1558-1564, 1988.

- [47] D. H. Sutter. *New frontiers of ultrashort pulse generation*. Zürich, Technische Hochschule, Dissertation, 2000.
- [48] J. Sylvester, D. Winebrenner, F. Gylys-Colwell. *Layer stripping for the helmholtz equation*. SIAM Journal of Applied Mathematics, Vol. 56, No. 3, pp. 736-754, June 1996.
- [49] J. Sylvester, D. Winebrenner. *Linear and nonlinear inverse scattering*. SIAM Journal of Applied Mathematics, Vol. 59, No. 2, pp. 669-699, April 1999
- [50] J. Sylvester. *Layer stripping*. Surveys on Solution Methods for Inverse Problems, Colton, Engl, Louis, McLaughlin ed., 2000.
- [51] R. Szipöcs et al. *Chirped multilayer coatings for broadband dispersion control in femtosecond lasers*. Optics Letters, Vol. 19, No. 3, pp. 201-203, February 1994.
- [52] A. Thelen. *Design of optical interference coatings*. McGraw-Hill, 1989.
- [53] E. C. Titchmarsh. *Introduction to the theory of Fourier integrals*. Oxford University Press, 1967.
- [54] W. Walter. *Gewöhnliche Differentialgleichungen*. Springer, 1993.
- [55] J. Weidmann. *Lineare Operatoren in Hilberträumen*. Teubner, 1976.

**Universität Karlsruhe (TH)
Institut für Angewandte und
Numerische Mathematik**

ISBN-13: 978-3-86644-078-4

ISBN-10: 3-86644-078-2

www.uvka.de