



UNIVERSITÄT ZU LÜBECK
INSTITUTE OF MATHEMATICS AND
IMAGE COMPUTING

Modellierung und Simulation der Röntgenmikroskopie durch das Lösen der Helmholtz-Gleichung mit der Fourier-Transformation

Masterarbeit

im Rahmen des Studiengangs
Mathematik in Medizin und Lebenswissenschaften
der Universität zu Lübeck

vorgelegt von
Jannes Quer

ausgegeben und betreut von
Prof. Dr. Jan Modersitzki
Institute of Mathematics and Image Computing

mit Unterstützung von
Dipl.-Math. Dipl.-Phys. Christoph Pratsch
Helmholtz-Zentrum Berlin

Lübeck, den 1. Juni 2014



Eidesstattliche Erklärung

Ich versichere, die Masterarbeit selbständig und lediglich unter Benutzung der angegebenen Quellen und Hilfsmittel verfasst zu haben.

Ich erkläre weiterhin, dass die vorliegende Arbeit noch nicht im Rahmen eines anderen Prüfungsverfahrens eingereicht wurde.

Ort, Datum

Unterschrift

Zusammenfassung

Die Röntgenmikroskopie ist in den letzten Jahren zunehmend wichtiger für beispielsweise die Materialwissenschaften und die Biologie geworden. Die Ortsauslösung der Röntgenmikroskopie ist durch die zur Fokussierung eingesetzten Fresnel Zonenplatten beschränkt. Deshalb hat es Versuche gegeben modifizierte Fresnel Zonenplatten zu entwickeln, deren Fokus kleiner ist als der einer vergleichbaren Fresnel Zonenplatte. Um die Abbildungseigenschaften und den Fokus dieser modifizierten Fresnel Zonenplatten vorab zu erforschen, ist eine Simulation der Röntgenmikroskopie notwendig geworden. In dieser Arbeit wird ein skalares Modell zur Wellenausbreitung entwickelt. Dazu wird die Helmholtz-Gleichung genutzt. Die homogene Helmholtz-Gleichung wird analytisch mit der Fourier-Transformation gelöst. Das Ergebnis der analytischen Berechnung wird im Anschluss diskretisiert und modifiziert, um einen Algorithmus zur Wellenausbreitung in homogenen und inhomogenen Medien herzu-leiten. Der Algorithmus wird getestet und der Einsatz einer modifizierten Fresnel Zonenplatte ebenso wie einer vergleichbaren Fresnel Zonenplatte in der Röntgenmikroskopie wird simuliert. Die Ergebnisse lassen den Schluss zu, dass die Bilderzeugung mit Fresnel Zonenplatten nicht linear ist.

Abstract

The X-ray microscopy has become important in materials science and biology during the last years. The resolution of X-ray microscopy depends on the Fresnel zone plates, which are used for focusing the X-radiation. Due to this dependents there have been attempts on developing new modified Fresnel zone plates, which produce a smaller focus. In order to investigate the properties of this new Fresnel zone plates a simulation has become necessary. In this work a skalar model for wave propagation is developed. Therefore the the Helmholtz-equation is used. Then the analytical Fourier-transformation is used to solve the Helmholtz-equation. A discretization of the analytical solution is modified and an algorithm, using the discrete Fourier-transformation and this modified solution, is presented to simulate X-ray microscopy. In the end the algorithm is tested and a simulation for a Fresnel zone plate and a modified Fresnel Zone plate is done. The results of the simulation allow the conclusion that imaging with Fresnel zone plates is not a linear process.

Danksagungen

Ich möchte mich als erstes bei Dipl.-Math. Dipl-Phys. Christoph Pratsch. Dank dir für die viele Zeit und Geduld dich meinen Fragen zu stellen. Danke für die vielen Diskussionen und Anregungen.

Weiter möchte ich mich bei Prof. Dr. Jan Modersitzki bedanken. Danke für die Unterstützung bei der Erstellung dieser Masterarbeit, für die vielen guten kritischen Anmerkungen. Ich habe noch einmal viel gelernt.

Ich bedanke mich bei all meinen Freunden, die sich die Zeit genommen haben Teile dieser Masterarbeit zu lesen und sie mit mir anschließend zu diskutieren und zu korrigieren. Es war mir eine sehr große Hilfe und ohne euch wäre niemals diese Arbeit fertig geworden.

Ich bedanke mich bei meinen Eltern, die mir mein Studium ermöglicht haben und mir viele Freiheiten gelassen haben. Danke für eure Unterstützung in den schwierigen Phasen und für eure vielen guten Anmerkungen.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	13
2	Mathematische Beschreibung abbildender Systeme	17
2.1	Notation	17
2.2	Beschreibung linearer zeitinvarianter Systeme	19
3	Röntgenstrahlung als elektromagnetische Welle	23
3.1	Grundlagen elektromagnetischer Wellen	23
3.2	Überblick über die physikalischen Phänomene der Wellenoptik	25
3.3	Maxwell-Gleichungen	28
3.3.1	Vektorielle Theorie	28
3.3.2	Skalare Theorie	33
3.4	Rayleigh-Sommerfeld Integral zur Darstellung von Beugung	34
4	Fresnel Zonenplatten	39
4.1	Nicht modifizierte Fresnel Zonenplatten	39
4.2	Modifizierte Fresnel Zonenplatten	44
5	Das Röntgenmikroskop am Speicherring Bessy II	49
5.1	Transmissions-Röntgenmikroskop am Bessy II	49
5.2	Simulation des Röntgenmikroskops und Annahmen in dieser Arbeit	50
6	Lösen der Helmholtz-Gleichung mit der Fourier-Transformation	51
6.1	Definitionen und Sätze	51
6.2	Lösungsstrategie für partielle Differentialgleichungen mittels der Fourier-Transformation	54
6.2.1	Anwendung der Lösungsstrategie auf die Helmholtz-Gleichung	55
6.2.2	Diskussion der Lösung	58
7	Herleitung des Algorithmus zur Darstellung von Wellenausbreitung	59
7.1	Diskretisierung in die Ausbreitungsrichtung	59
7.2	Diskretisierung in die Nichtausbreitungsrichtungen	63
7.3	Algorithmus zur Darstellung von Wellenausbreitung	64

8 Numerische Experimente und Diskussion	69
8.1 Simulation der Wellenausbreitung im Vakuum	69
8.2 Simulation der Wellenausbreitung in inhomogenen Medien am Beispiel einer Fresnel Zonenplatte	71
8.3 Berechnung der Foki der unterschiedlichen Zonenplatten	72
8.4 Abbildungseigenschaften der unterschiedlichen Zonenplatten	73
8.5 Diskussion	75
9 Fazit und Ausblick	79
Literaturverzeichnis	82

1 Einleitung

Die Simulation abbildender Systeme ist für deren Entwicklung und Verbesserung ein wichtiger Bestandteil der Forschung geworden [Sch06]. Durch die immer leistungsfähigeren Computer ist es in der heutigen Zeit möglich, zunehmend realistischere Simulationen von immer komplexeren abbildenden Systemen durchzuführen. Durch die Simulation kann der Einfluss einzelner Komponenten auf die Bildentstehung untersucht werden. So können eventuelle Fehler vorher untersucht und Weiterverarbeitungsprozesse auf diese abgestimmt werden. Ein abbildendes System, welches sich noch in der Optimierungsphase befindet, ist die Röntgenmikroskopie.

Die Röntgenmikroskopie ist ein neuartiges abbildendes System zur Gewinnung von dreidimensionalen Bildern kleiner Objekte [Sch99]. Ähnlich wie in der Computertomographie werden Datensätze gewonnen, aus denen dreidimensionale Bilder rekonstruiert werden. Die Röntgenmikroskopie unterscheidet sich von der Computertomographie dadurch, dass die untersuchten Objekte nur einige μm klein sind. Dadurch wird eine Fokussierung der Röntgenstrahlung notwendig, um eine sehr hohe Ortsauflösung sicherzustellen [KJH95]. Diese Fokussierung erfolgt bei Röntgenstrahlung mit Fresnel Zonenplatten (FZP), die die einfallende Strahlung über Beugung im Fokus bündelt [KJH95]. Die Abbildungseigenschaften der als Linse genutzten FZP bestimmen vorrangig die Charakteristiken des Röntgenmikroskops [Knö05, KJH95].

Fresnel Zonenplatten bestehen aus konzentrischen absorbierenden und nicht absorbierenden Kreisringen abnehmender Breite, die den Anteil der Röntgenstrahlung absorbieren, der destruktive Interferenz in der Fokusebene erzeugt. Die Auflösung der Fresnel Zonenplatten ist durch die Breite des äußeren Kreisringes begrenzt [Knö05]. Um die Auflösung zu verbessern hat es Versuche gegeben, sogenannte modifizierte Fresnel Zonenplatten (MFZP) für die Röntgenmikroskopie zu nutzen. Diese erzeugen durch eine andere Anordnung der absorbierenden Kreisringe einen kleineren Fokus als vergleichbare FZP [CJ03]. Um diese MFZP untersuchen zu können, ohne einen aufwendigen Herstellungsprozess durchlaufen zu müssen, ist eine Simulation der Röntgenmikroskopie notwendig. Die Simulation soll zudem in der Lage sein Fehler, die während des Herstellungsprozesses auftreten können, zu untersuchen.

Weiter sollen unterschiedliche Beleuchtungsmodelle, die in der Röntgenmikroskopie eine Rolle spielen, zu simulieren sein.

Es hat es einige Ansätze gegeben, die für die Röntgenmikroskopie charakteristischen Fresnel Zonenplatten zu modellieren und zu simulieren [Sch99, YJA⁺07, Sch06]. Dabei wird meist ein skalares Modell der Wellenausbreitung in inhomogenen Medien entwickelt, mit dem der Durchgang durch die Fresnel Zonenplatten simuliert werden kann. Die Ansätze sind häufig analytisch mit anschließender numerischer Simulation. Zum Beispiel wurde in der Habilitationsschrift von Gerd Schneider die Coupled-Wave Theorie auf Fresnel Zonenplatten angewendet und eine numerische Matrixlösung der skalaren Wellengleichung ist präsentiert [Sch99]. In der Doktorarbeit von Christian Knöchel wurde ein analytischer Ansatz zur Lösung der Helmholtz-Gleichung mit Green-Funktionen entwickelt, mit dem eine teilkohärente Beleuchtung im Röntgenmikroskop darstellbar ist [Knö05]. Von Christian Schröer wurde ein Ansatz präsentiert, indem die Wellenausbreitung in Fresnel Zonenplatten mit Eigenfunktionen der Helmholtz-Gleichung in paraxialer Näherung errechnet werden [Sch06]. Von Hanfei Yan et al. gab es den Vorschlag, die Fresnel Zonenplatten mit einer Fourier-Reihe in die Helmholtz-Gleichung zu modellieren und für diese modifizierte Helmholtz-Gleichung eine Lösung zu berechnen [YJA⁺07]. Von Joaquin Oton et al. wurde eine Analyse der Bildentstehung in der Röntgenmikroskopie durchgeführt und eine dreidimensionale Impulsantwort des Röntgenmikroskops berechnet. Ziel dieser Arbeit ist es, ein zweidimensionales mathematisches Modell zu entwickeln, mit dem es möglich ist, die Abbildungseigenschaften unterschiedlicher Fresnel Zonenplatten, die in der Röntgenmikroskopie eingesetzt werden, zu untersuchen und mögliche Fehler eines Algorithmus, die durch die Diskretisierung entstehen können, zu analysieren.

Der erste Ansatz dieser Arbeit für die Simulation war eine sogenannte Strahlenverfolgung (engl.: Raytracing). Dieser Ansatz wurde wieder verworfen, da dies eine Betrachtung in der geometrischen Optik voraussetzt, in der Beugungsphänomene nicht darstellbar sind [ST08]. In der vorliegenden Arbeit wird nun eine wellenoptische Betrachtungsweise präsentiert.

Die Arbeit unterteilt sich in neun Kapitel. Nach der Einleitung erfolgt im 2. Kapitel eine mathematische Betrachtung linearer, zeitinvarianter, zweidimensionaler abbildender Systeme. Das 3. Kapitel beinhaltet eine physikalische Darstellung von Wellen und Wellenausbreitung. Ein skalares Modell wird mit der Helmholtz-Gleichung angegeben. Im 4. Kapitel wird die Funktionsweise von Fresnel Zonenplatten erläutert und eine theoretische Beschreibung modifizierter Fresnel Zonenplatten gegeben. Anschließend wird im 5. Kapitel das Röntgenmikroskop am Speicherring Bessy II beschrieben. Im Kapitel 6 wird eine analytische Lösungsstrategie für partielle Differentialgleichungen mit der Fourier-Transformation auf die homogene Helmholtz-

Gleichung angewandt. Das Ergebnis der analytischen Berechnung wird im 7. Kapitel dazu genutzt, einen Algorithmus zur Wellenausbreitung in inhomogenen und homogenen Medien zu entwickeln. In Kapitel 8 werden numerische Experimente mit dem Algorithmus ausgeführt und diskutiert. Abschließend erfolgt in Kapitel 9 ein Fazit und ein Ausblick.

2 Mathematische Beschreibung abbildender Systeme

Die in dieser Arbeit betrachtete Röntgenmikroskopie lässt sich als ein zweidimensionales abbildendes System beschreiben. Sehr häufig lassen sich abbildende Systeme als Faltung zweier Funktionen darstellen, [Goo96, BW70, Ers06, Buz04]. Diese Beschreibung eines bildgebenden Verfahrens ermöglicht es, die Abbildungseigenschaften des Verfahrens mit einer Funktion zu beschreiben. Diese Funktion heißt Impulsantwort oder Point-Spread-Function (PSF) [Buz04].

In diesem Kapitel wird eine mathematische Beschreibung zweidimensionaler Systeme gegeben. Dafür werden zunächst einige Begriffe definiert und Zusammenhänge gezeigt. Im Anschluss erfolgt eine Betrachtung linearer zeitinvarianter Systeme, mit deren Hilfe eine Definition der PSF möglich ist.

2.1 Notation

Die folgenden Notationen wird im weiteren Text verwendet, um einige Formeln zu simplifizieren, vgl. [Wer06]. Es seien $x, \omega \in \mathbb{R}^n$ Vektoren. Im weiteren gilt

$$x\omega = \sum_{k=1}^n x_k \omega_k, \quad |x| = \left(\sum_{k=1}^n x_k^2 \right)^{1/2}.$$

Mit \mathbb{R}_+ wird der Raum der positiven reellen Zahlen inklusive der Null bezeichnet. Weiter sollen die hier betrachteten Funktionen $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ komplexwertige Funktionen sein, wenn die Funktionen nicht anders gekennzeichnet sind.

Die in dieser Arbeit genutzten mathematischen Vektorräume sind nach [Wer06] in der folgenden Tabelle zusammengefasst.

Bezeichnung	Symbol
Vektorraum bzgl. der Addition und Multiplikation der reellen Vektoren der Länge n	\mathbb{R}^n

Tabelle 2.1: Aufzählung der für diese Arbeit wichtigen mathematischen Räume

Fortsetzung der Tabelle	
Raum der stetigen Funktionen	$\mathcal{C}(\mathbb{R}^n)$
Raum der stetigen Funktionen mit kompaktem Träger	$\mathcal{C}_c(\mathbb{R}^n)$
Raum der l -mal stetig differenzierbaren Funktionen	$\mathcal{C}^k(\mathbb{R}^n)$
Raum der unendlich oft differenzierbaren Funktionen mit kompaktem Träger oder Raum der Grundfunktionen	$\mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^n)$
Raum der in p -ter Potenz Lebesgue-integrierbaren Funktionen	$\mathcal{L}^p(\mathbb{R}^n)$

Satz 1 (Banachraum $\mathcal{L}^p(\mathbb{R}^n)$)

Der Raum $\mathcal{L}^p(\mathbb{R}^n)$ ist bezüglich der punktweisen Addition und der punktweisen Multiplikation ein Vektorraum. Mit der Norm

$$\|f\|_{\mathcal{L}^p} = \left(\int_{\mathbb{R}^n} |f(x)|^p dx \right)^{\frac{1}{p}}$$

ist der Raum $\mathcal{L}^p(\mathbb{R}^n)$ ein Banachraum.

Beweis: siehe [Wer07].

Definition 1 (Faltung)

Sind $g, f \in \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^n)$, dann heißt

$$\begin{aligned} (f \star g)(t) &:= \int_{\mathbb{R}^n} f(t-s)g(s)ds \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} g(t-s)f(s)ds = (g \star f)(t) \end{aligned}$$

die Faltung von f mit g .

Definition 2 (lineares Funktional)

Sei V ein Vektorraum über \mathbb{C} , so nennt man eine Abbildung $\varphi : V \rightarrow \mathbb{C}$ ein Funktional. Ist φ eine lineare Abbildung, so nennt man es ein lineares Funktional.

Definition 3 (Delta-Distribution)

Seien $x, x_0 \in \mathbb{R}^n$ Vektoren. Dann ist die Delta-Distribution (δ -Distribution) definiert durch

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} 0 & x \neq x_0 \\ \infty & x = x_0 \end{cases} \quad \int_{\mathbb{R}^n} \delta(x - x_0) dx = 1.$$

Satz 2

Die δ -Distribution ist ein lineares Funktional über dem Vektorraum \mathbb{R}^n . Sei $f \in$

$\mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^n)$, dann ist f darstellbar als

$$f(x) = \int_{\mathbb{R}^n} f(x_0)\delta(x - x_0)dx \quad \forall x \in \mathbb{R}^n. \quad (2.2)$$

Beweis: siehe [AHK⁺08].

Lemma 1

Seien $x, \omega \in \mathbb{R}^n$. Dann gilt für $f \in \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^n)$ ist die Funktion $f(x)e^{-i2\pi x\omega}$ wieder in $\mathcal{L}^1(\mathbb{R}^n)$.

Beweis: siehe [Wer07].

Definition 4 (Fourier-Transformation)

Mit Lemma 1 existiert die Integraltransformation $\mathcal{F} : \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathcal{C}_c(\mathbb{R}^n)$ definiert durch

$$\mathcal{F}(f)(\omega) = \int_{\mathbb{R}^n} f(x)e^{-i2\pi x\omega} dx \quad \forall \omega \in \mathbb{R}^n \quad (2.3)$$

und heißt Fourier-Transformation. Die dadurch definierte Abbildung $\mathcal{F}(f) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ heißt Fourier-Transformierte von f .

Satz 3 (Faltungssatz)

Seien $f, g \in \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^n)$. Dann gilt folgender Zusammenhang

$$\mathcal{F}(f \star g) = \mathcal{F}(f)\mathcal{F}(g).$$

Beweis: siehe [Wer07].

2.2 Beschreibung linearer zeitinvarianter Systeme

Im Allgemeinen lässt sich ein zweidimensionales, bildgebendes, von der Zeit unabhängiges System O definieren als eine Eingabe-Ausgabe-Zuordnung, wie in Abbildung 2.1 gezeigt [Ers06, Buz04].

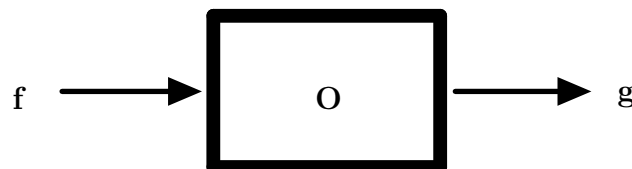


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung einer Eingabe-Ausgabe-Zuordnung (entnommen aus [Buz04])

Sei $f \in \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^2)$ eine Funktion, hier als Eingabe oder Eingangssignal bezeichnet, und $g \in \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^2)$ eine Funktion, hier als eine Ausgabe oder ein Ausgangssignal bezeichnet,

dann kann das System mathematisch beschrieben werden als

$$g = \mathbf{O}[f], \quad (2.4)$$

wobei $\mathbf{O} : \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^2) \rightarrow \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^2)$ ein Operator ist, der die Eingabe auf eine Ausgabe abbildet. Ein System heißt linear falls für $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}$ und $\forall f_1, f_2 \in \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^2)$ gilt

$$\mathbf{O}[\alpha f_1 + \beta f_2] = \alpha \mathbf{O}[f_1] + \beta \mathbf{O}[f_2].$$

Im Weiteren werden ausschließlich lineare Systeme betrachtet. Wie in Satz 2 gezeigt, lässt sich eine Funktion $f \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ darstellen als

$$f(x) = \int_{\mathbb{R}^2} f(x_1) \delta(x - x_1) dx.$$

Für ein abbildendes System folgt

$$\begin{aligned} g &= \mathbf{O}[f] \\ &= \mathbf{O}\left[\int_{\mathbb{R}^2} f(x_1) \delta(x - x_1) dx_1\right]. \end{aligned}$$

Die Linearität des Abbildungsoperators ermöglicht die Vertauschung von Integral und Operator. Somit ergibt sich

$$\begin{aligned} g(x) &= \int_{\mathbb{R}^2} \mathbf{O}[f(x_1) \delta(x - x_1)] dx_1 = \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} \mathbf{O}[f(x_1)] \mathbf{O}[\delta(x - x_1)] dx_1 = \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} g(x_1) h(x, x_1) dx_1 \end{aligned} \quad (1.6)$$

wobei $\mathbf{O}[\delta(x - x_1)] = h(x, x_1)$ die Impulsantwort des abbildenden Systems (engl.: Point-Spread-Function (PSF)) heißt. Das Integral (1.6) wird Superpositionsintegral genannt.

Ein lineares System heißt translationsinvariant, falls eine Translation der Eingabe die gleiche Translation der Ausgabe bewirkt, also gilt

$$g(x - x_1) = \mathbf{O}[f(x - x_1)] \quad \forall x, x_1 \in \mathbb{R}^2.$$

Im Weiteren werden nur noch translationsinvariante Systeme betrachtet. Die PSF am Ursprung kann nun geschrieben werden als

$$h(x, 0) = \mathbf{O}[\delta(x)] \quad \forall x \in \mathbb{R}^2.$$

Seien $x, x_1 \in \mathbb{R}^2$, dann kann aufgrund der Translationsinvarianz des abbildenden

Systems die PSF vereinfacht dargestellt werden als

$$h(x - x_1, 0) = h(x - x_1).$$

Das Superpositionsintegral lässt sich nun umschreiben zu

$$g(x) = \int_{\mathbb{R}^2} f(x_1)h(x - x_1) dx_1$$

[Buz04]. Nun kann der in Satz 3 dargestellte Zusammenhang zwischen Fourier-Transformation und Faltung ausgenutzt werden. Ein abbildendes System lässt sich dann als eine Multiplikation im Fourier-Raum darstellen

$$\mathcal{F}(g) = \mathcal{F}(f \star h) = \mathcal{F}(f)\mathcal{F}(h).$$

Somit kann ein abbildendes System als eine Faltung zweier Funktionen beschrieben werden. Die PSF gibt dabei an, wie ein einzelner Punkt vom abbildenden System verändert wird. Für ein ideal abbildendes System, wie zum Beispiel die Abbildung mit einer perfekten Linse, ist die PSF die Identität [BW70].

Aus physikalischer Sicht kann die δ -Distribution als eine Punktquelle aufgefasst werden [Ers06, Buz04]. Die mathematische Beschreibung optischer Systeme kann nun so gedeutet werden, dass es ausreichend ist, die Reaktionen eines linearen Systems auf einen einzelnen Punkt zu kennen, um es vollständig charakterisieren zu können. Somit kann ein abbildendes System als eine Faltung zweier Funktionen dargestellt werden.

In diesem Kapitel ist eine mathematische Beschreibung von abbildenden Systemen gezeigt worden. Lineare zeitinvariante Systeme können über die Impulsantwort beschrieben werden. Im nächsten Kapitel erfolgt die physikalische Beschreibung von Wellen und eine mathematische Modellierung von Wellenausbreitung.

3 Röntgenstrahlung als elektromagnetische Welle

Röntgenstrahlung kann im Allgemeinen als elektromagnetische Strahlung betrachtet werden [Gia06]. Dabei hat Röntgenstrahlung sowohl Teilchen- als auch Welleneigenschaften. Dies wird in der Literatur als Welle-Teilchen-Dualismus bezeichnet [Gia06]. In dieser Arbeit wird nur auf die Welleneigenschaften eingegangen. Die Röntgenstrahlung, mit der die Bilder in der Röntgenmikroskopie akquiriert werden, wird deshalb in dieser Arbeit als elektromagnetische Welle betrachtet. Dies ist notwendig, da in der Röntgenmikroskopie Fresnel Zonenplatten (FZP) zum Einsatz kommen, die Beugung nutzen, um die Röntgenstrahlung zu bündeln [Sch99, KJH95]. Zunächst erfolgt eine allgemeine Beschreibung elektromagnetischer Wellen. Danach werden die Phänomene, die bei der Betrachtung von Röntgenstrahlung auftreten, dargestellt. Anschließend erfolgt eine vektorielle Betrachtung der Maxwell-Gleichungen, da mit Hilfe dieses Systems aus Differentialgleichungen die Wellenausbreitung beschrieben werden kann. Aus den Maxwell-Gleichungen wird dann die vektorielle Wellengleichung entwickelt. Die vektorielle Wellengleichung wird dann in die skalare Theorie übertragen. Am Ende dieses Kapitels wird dann auf die allgemeine Behandlung von Beugung in der Literatur eingegangen.

3.1 Grundlagen elektromagnetischer Wellen

Ganz allgemein lassen sich elektromagnetische Wellen als eine räumliche Veränderung einer physikalischen Größe auffassen, die orts- und zeitabhängig ist. Jede Welle entsteht an einer **Quelle** und breitet sich mit einer **Ausbreitungsgeschwindigkeit** in einem **Medium** aus. Medien wird ein **Brechungsindex** zugeordnet, mit dem die Charakteristika des Mediums spezifiziert werden können. Medien, für die der Brechungsindex gleich ist, heißen **homogene Medien**. Medien mit unterschiedlichen Brechungsindizes heißen **inhomogene Medien**. Die maximale Auslenkung einer Welle wird **Amplitude** oder auch **Feldstärke** genannt und mit $E_0 \in \mathbb{R}$ bezeichnet. Weitere relevante Parameter, mit der sich Wellen charakterisieren lassen,

sind in der Tabelle (3.1) zusammengefasst.

Tabelle 3.1: Eigenschaften einer Welle

Bezeichnung	Symbol	Raum	Beziehung
Wellenvektor	\mathbf{k}	\mathbb{R}^3	Ausbreitungsrichtung
Wellenzahl	k	\mathbb{R}	$k= \mathbf{k} $
Wellenlänge	λ	\mathbb{R}	$2\pi/k$
Kreisfrequenz	ω	\mathbb{R}	
Ort	\mathbf{r}	\mathbb{R}^3	Abstand zur Quelle
Zeit	t	\mathbb{R}	Zeit
Phase	φ	\mathbb{R}	$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t$ ¹

¹ $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ ist hier als Skalarprodukt $v : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ aufzufassen.

Eine **Wellenfront** beschreibt alle Punkte einer Fläche, die gleiche Phase haben. Die Wellenfront bewegt sich in Richtung der Flächennormalen der Wellenfront. Die Form der Wellenfront ist zum einen von der Quelle abhängig, zum anderen von dem Medium, das die Welle durchläuft.

Die **Kohärenz** beschreibt, ob Wellen in ihrem Verlauf einer festen Regel folgen und die Wellen somit die gleiche Phasenbeziehung haben [Gia06]. Die Kohärenz lässt sich in zeitliche und räumliche Kohärenz aufteilen. Die Welle heißt zeitlich kohärent, wenn sie am gleichen Ort zu verschiedenen Zeiten eine feste Phasenbeziehung hat. Sie wird räumlich kohärent genannt, wenn sie zur gleichen Zeit an unterschiedlichen Orten eine feste Phasenbeziehung hat.

Eine weitere relevante Eigenschaft von Wellen ist die Abhängigkeit von der Wellenlänge. Über die Wellenlänge kann die Energie, die ein Photon der Welle trägt, bestimmt werden. Es gilt der Zusammenhang: Je kleiner die Wellenlänge, desto größer die Energie [Gia06]. Sind Wellen nur von einer definierten Wellenlänge abhängig sind, heißen diese **monochromatisch**. Wellen, die von mehreren Wellenlängen abhängig sind, heißen **polychromatisch**. Im Folgenden werden nur noch monochromatische Wellen betrachtet.

Ein Spezialfall einer sich ausbreitenden monochromatischen Welle mit drei räumlichen und einer zeitlichen Komponente kann als eine Kugelwelle modelliert werden.

Definition 5 (Kugelwelle)

Sei $q \in \mathbb{R}^3$ die Quelle einer Welle, $x \in \mathbb{R}^3$, $t \in \mathbb{R}$ und E_0 die maximale Amplitude an der Quelle. Dann lässt sich eine Kugelwelle mathematisch darstellen als eine Abbildung $E : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$, für die gilt

$$E(x, t; q) = \frac{E_0}{\|x - q\|_2} e^{ik\|x - q\|_2 - \omega t}. \tag{3.1}$$

Der Radius R der Kugelwelle kann angegeben werden mit $R = \|x - q\|_2$. Weiter gilt für die Kugelwelle, dass alle Punkte, die den gleichen Abstand zum Startpunkt haben, die gleiche Phase haben, also eine Wellenfront bilden.

Sei c die Lichtgeschwindigkeit, ϵ_0 die elektrische Feldkonstante und E_0 die maximale Amplitude der Welle, dann ist die Intensität I gegeben mit

$$I = c\epsilon_0 \frac{E_0^2}{2}. \quad (3.2)$$

Kugelwellen, die sehr weit von ihrer Quelle entfernt sind, können zunächst durch parabolische und bei noch größerer Entfernung durch **ebene Wellen** approximiert werden. Wellenfronten ebener Wellen sind Ebenen [Gia06].

3.2 Überblick über die physikalischen Phänomene der Wellenoptik

Strahlung interagiert auf unterschiedliche Arten mit Materie und mit anderen Wellen. Über diese Interaktionen und die sich daraus ergebenden Phänomene wird an dieser Stelle ein Überblick über die in dieser Arbeit wichtigen Phänomene gegeben, um darzustellen, welche Eigenschaften bei der Ausbreitung von Wellen betrachtet werden müssen.

Da in dieser Arbeit nur eine skalare Theorie zur Wellenausbreitung betrachtet wird, wird auf eine Diskussion aller Phänomene, die bei elektromagnetischer Strahlung auftreten können, verzichtet. Für eine ausführliche Darstellung aller Phänomene sei dafür an dieser Stelle auf [Dem04] verwiesen.

Passieren zwei Wellen zum selben Zeitpunkt die gleiche Position, so interagieren diese miteinander. Dabei überlagern sich die Amplituden der Wellen additiv, auch Superposition genannt. Diese Interaktion heißt **Interferenz**. Sie kann unterschieden werden in auslöschende (destruktive), aufsummierende (konstruktive) und teil-auslöschende (teilkonstruktive) Interferenz. Die unterschiedlichen Interferenzen sind beispielhaft in Abbildung 3.1 dargestellt.

Die Interaktion von Röntgenstrahlung und dem Medium ist bei den hier betrachteten Wellenlängen dominiert durch **Absorption** und **Streuung** [KJH95]. Die Absorption beschreibt die Abschwächung der Feldstärke der Welle durch das Medium, das die Welle durchläuft. Sie ist die hauptsächliche Interaktion [Buz04].

Die Streuung beschreibt, wie eine Welle durch Wechselwirkungen mit einem anderen Objekt abgelenkt wird. Streuung kann aufgeteilt werden in elastische und unelastische Streuung. Bei unelastischer Streuung verbleibt ein Teil der Energie

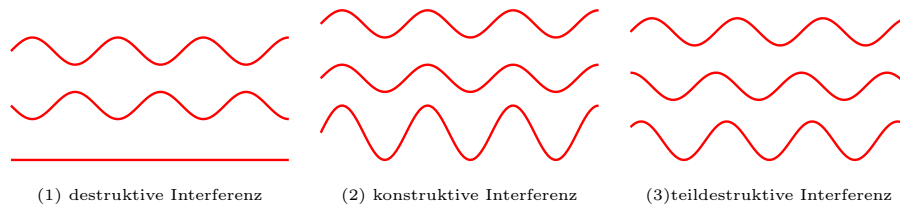


Abbildung 3.1: Darstellung der jeweils resultierenden Interferenz durch die Superposition der oberen beiden Wellen. Abbildung (1) zeigt die destruktive Interferenz, Abbildung (2) zeigt die konstruktive Interferenz und Abbildung (3) zeigt die teildestruktive Interferenz

eines Photons der Welle in dem Medium. Dadurch vergrößert sich die Wellenlänge der Welle. Bei der elastischen Streuung verändert sich der Phasenversatz einer Welle. Die Wellenlänge bleibt gleich. Bei der Interaktion von biologischer Materie und Röntgenstrahlung tritt mehr elastische Streuung als unelastische Streuung auf [Buz04, KJH95]. Für eine genaue Betrachtung der einzelnen Streuungseffekte sei an dieser Stelle auf [KJH95] verwiesen.

Der Übergang von Wellen in ein Medium mit einem anderen Brechungsindex verursacht eine Veränderung der Ausbreitungsrichtung der Welle und wird **Brechung** genannt. Grund hierfür ist die Veränderung der Ausbreitungsgeschwindigkeit, die eine Veränderung der Wellenlänge zur Folge hat [Gia06]. Wie stark die Änderung der Wellenlänge und damit auch der Ausbreitungsrichtung ist, kann mit Hilfe der Brechungsindizes und dem Einfallswinkel bestimmt werden. Der Einfallswinkel θ_1 ist der Winkel zwischen dem Wellenvektor und der Flächennormalen der Übergangsebene. Brechung ist beschreibbar durch das Snellius'sche Gesetz [Gia06]. Dabei kann der Brechungsindex als eine stetige und nach oben und unten beschränkte Funktion $n : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ aufgefasst werden, die jedem Punkt eines Mediums einen Brechungsindex zuordnet. Sei nun $x_1 \in \mathbb{R}^3$ ein Punkt in dem einen Medium M_1 und $x_2 \in \mathbb{R}^3$ ein Punkt in dem anderen Medium M_2 und sei θ_2 der sich ergebende Ausfallwinkel zwischen dem neuen Wellenvektor und der Flächennormalen der Übergangsebene, dann lautet das Snellius'sche Gesetz

$$n(x_1) \sin(\theta_1) = n(x_2) \sin(\theta_2).$$

Das **Huygens-Prinzip** ist ein sehr wichtiges Konzept, um Wellenausbreitung zu beschreiben. Es besagt: *“Jeder Punkt einer Wellenfront kann als Quelle einer winzigen Welle angesehen werden, die sich in Vorwärtsrichtung mit der Geschwindigkeit der Welle ausbreitet. Die neue Wellenfront ist die Einhüllende der kleinen Wellen, d.h. die an diese angelegte Tangente.”*[Gia06] S.1161.

Mit Hilfe der Interferenz und Huygens-Prinzip lässt sich die Ablenkung von Wel-

len durch Hindernisse beschreiben, die sogenannte **Beugung**. Trifft eine Welle nun auf ein Hindernis, so entstehen nach Huygens-Prinzip dadurch neue Wellen entlang der Wellenfront, die auf das Hindernis trifft. Die so neu entstandenen Wellen interagieren miteinander und es kommt somit zur Interferenz. Da sich die Wellen in alle Raumrichtungen ausbreiten, kommt es somit zur Interferenz von Wellen, die an unterschiedlichen Orten entstanden sind. Das sich daraus ergebende Muster der Beugung heißt auch **Beugungsmuster**. Am Beispiel des Beugungsmusters des Einfachspalt können weitere wichtige Begriffe leicht verdeutlicht werden. Im Einfachspalt Experiment wird ein Spalt mit der Breite a mit einer monochromatischen ebenen Wellen beleuchtet. Die durch den Spalt durchlaufende Strahlung ergibt dann auf einem Schirm das in Abbildung (3.2) gezeigte Muster.

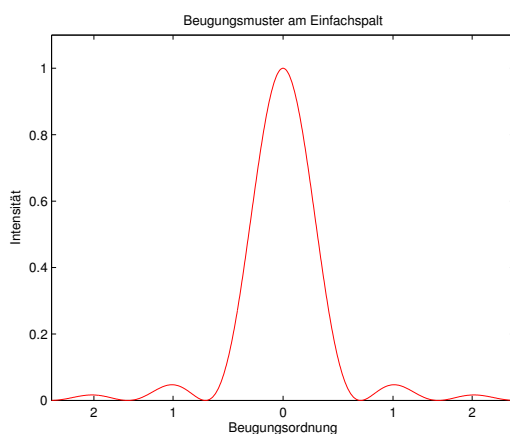


Abbildung 3.2: Beugungsmuster am Einfachspalt

Die Orte der lokal maximalen Intensitäten dieses Beugungsmusters werden **Beugungsordnung** genannt. Im Allgemeinen ist das Beugungsmuster abhängig vom Hindernis, durch das die Welle gebeugt worden ist. Die Positionen der Beugungsordnungen lassen sich ungefähr angeben mit

$$a \sin(\theta) = \frac{m}{2} \lambda \quad m \in \mathbb{N},$$

wobei der Winkel θ der Winkel zwischen der Flächennormalen und dem Wellenvektor ist.

Beugung beschränkt die Auflösung abbildender Systeme. Die Auflösungsgrenze ist mit dem Rayleigh-Kriterium beschreibbar. Das Rayleigh-Kriterium für abbildende Systeme mit kreisförmigen Linsen besagt: *“Die Abbildungen zweier Objekte sind gerade noch auflösbar, wenn die nullte Beugungsordnung direkt über dem ersten Minimum des Beugungsmuster des anderen Objekts liegt.”* [Gia06] S.1196. Es wird ein kreisförmiges abbildendes System, welche des Durchmesser $D \in \mathbb{R}$ hat, mit dem zwei Objekte abgebildet werden, betrachtet. Die zwei Objekte werden jeweils

von einer Welle durchlaufen. Der Winkel θ beschreibt den Winkel zwischen den Wellenvektoren dieser Wellen. Der Winkel muss mindestens die Größe

$$\theta = \frac{1.22\lambda}{D}$$

sein, damit die beiden Objekte in der Abbildung noch voneinander unterscheidbar sind.

3.3 Maxwell-Gleichungen

Für eine Beschreibung von Röntgenstrahlung aus wellenoptischer Sicht werden üblicherweise die Maxwell-Gleichungen herangezogen [Gia06]. Jedoch reicht unter gewissen Umständen eine skalare Betrachtung aus [Goo96]. Dieses Kapitel betrachtet die Wellenausbreitung zunächst über die Maxwell-Gleichungen aus denen eine vektorielle Wellengleichung hergeleitet wird. Diese wird dann in eine skalare Theorie übertragen. Da hier nur die physikalische Motivation der Wellengleichung skizziert werden soll, wird an dieser Stelle auf eine Betrachtung der Anfangs- und Randbedingungen in der vektoriellen Theorie verzichtet. Für eine ausführliche Behandlung der Maxwell-Gleichungen sei auf [BW70] verwiesen.

Der Übergang in die skalare Theorie hat den Vorteil, dass die Theorie leichter handhabbar ist. Allerdings sind nicht mehr alle physikalischen Phänomene, wie zum Beispiel Polarisation darstellbar [Goo96]. Unter gewissen Voraussetzungen allerdings bleibt die skalare Theorie hinreichend präzise [Goo96, Ers06].

Weiter soll an dieser Stelle nur eine Betrachtung im Vakuum stattfinden, obwohl eine Betrachtung in einem inhomogenen Medium notwendig wäre. Eine Darstellung von inhomogenen Medien erfolgt dann in der skalaren Theorie.

3.3.1 Vektorielle Theorie

Definition 6 (partielle Ableitung von Funktionen)

Sei $f \in \mathcal{C}^k(\mathbb{R}^n)$. Dann existiert für $a = (a_l)_{l=1,\dots,n} \in \mathbb{N}^n$ mit $|a| = a_1 + a_2 + \dots + a_n \leq k$ die partielle Ableitung

$$D^a(f) = \frac{\partial^{a_1} \partial^{a_2} \dots \partial^{a_n}}{\partial x_1^{a_1} \partial x_2^{a_2} \dots \partial x_n^{a_n}} f$$

der Ordnung $|a|$.

Sei $p \leq k$ und $1 \leq i \leq n$, so bezeichnet

$$\frac{\partial^p f}{\partial x_i^p}$$

den Spezialfall für D^a mit $a = (a_l)_{l=1,\dots,n} = 0 \ \forall l \neq i, a_i = p$ [Wer06].

Definition 7 (Nabla Operator)

Sei $f \in \mathcal{C}^l(\mathbb{R}^n)$ eine Funktion mit $l \geq 1$. Dann heißt die Abbildung $\nabla : \mathcal{C}^l(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathcal{C}^{l-1}(\mathbb{R}^n)$ definiert durch

$$\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)^T \quad (3.3)$$

der Nabla-Operator von f . Der Operator ordnet einer Funktion einen Vektor aller partiellen Ableitungen der Funktion zu.

Definition 8 (Kreuzprodukt)

Seien $u, v \in \mathbb{R}^3$ zwei Vektoren. Dann heißt die Abbildung $k : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ definiert durch

$$u \times v = \begin{pmatrix} u_2 v_3 - u_3 v_2 \\ u_3 v_1 - u_1 v_3 \\ u_1 v_2 - u_2 v_1 \end{pmatrix}$$

Kreuzprodukt [AHK⁺08].

Lemma 2 (Graßmann Identität)

Seien $a, b, c \in \mathbb{R}^3$. Dann gilt die Identität

$$a \times (b \times c) = (a \cdot b)c - (a \cdot c)b, \quad (3.4)$$

wobei \cdot hier das euklidische Skalarprodukt des \mathbb{R}^3 bezeichnet und \times das Kreuzprodukt.

Beweis: siehe [AHK⁺08].

Definition 9 (Vektorfelder)

Vektorfelder sind Abbildungen $V : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ mit $m \leq n$. Die Abbildung bezeichnet $V = (v_1, v_2, \dots, v_n)^T$, wobei für die $v_i \ i \in \{1, 2, \dots, n\}$ Abbildungen $v_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ sind. Sind Vektorfelder l -mal stetig differenzierbar, so werden sie als $\mathcal{V}^l(\mathbb{R}^3)$ -Vektorfelder bezeichnet. Der Raum der l -mal stetig differenzierbaren Vektorfelder wird mit $\mathcal{V}^l(\mathbb{R}^3)$ gekennzeichnet.

Alle in dieser Arbeit betrachteten Vektorfelder seien Vektorfelder in kartesischen Koordinaten. Somit sind die im Weiteren definierten Operatoren welche, die auf Vektorfelder V wirken in kartesischen Koordinaten.

Definition 10 (partielle Ableitung von Vektorfeldern)

Sei $V \in \mathcal{V}^l(\mathbb{R}^3)$ -Vektorfeld mit $l \geq 1$. Dann ist die partielle Ableitung eine Abbildung

$\partial : \mathcal{V}^l \rightarrow \mathcal{V}^{l-1}$ definiert durch

$$\frac{\partial V}{\partial x_i} = \begin{pmatrix} \frac{\partial v_1}{\partial x_i} \\ \frac{\partial v_2}{\partial x_i} \\ \frac{\partial v_3}{\partial x_i} \end{pmatrix} \quad i = 1, 2, 3.$$

Definition 11 (Rotation)

Sei $V \in \mathcal{V}^l(\mathbb{R}^3)$. Dann heißt

$$\text{rot } V = \begin{pmatrix} \frac{\partial v_3}{\partial x_2} - \frac{\partial v_2}{\partial x_3} \\ \frac{\partial v_1}{\partial x_3} - \frac{\partial v_3}{\partial x_1} \\ \frac{\partial v_2}{\partial x_1} - \frac{\partial v_1}{\partial x_2} \end{pmatrix}$$

die Rotation von V . Die Rotation ist darstellbar als das Kreuzprodukt des Nabla Operators mit dem Vektorfeld. Es wird deshalb im Folgenden die Notation verwendet

$$\text{rot } v = \nabla \times v.$$

Definition 12 (Divergenz)

Sei $V \in \mathcal{V}^l(\mathbb{R}^3)$. Dann heißt

$$\text{div } V = \frac{\partial v_1}{\partial x_1} + \frac{\partial v_2}{\partial x_2} + \frac{\partial v_3}{\partial x_3}$$

die Divergenz. Die Divergenz ist darstellbar als das euklidische Skalarprodukt des \mathbb{R}^3 des Nabla-Operators mit dem Vektorfeld. Es wird deshalb im Folgenden die Notation verwendet

$$\text{div } V = \nabla \cdot V.$$

Definition 13 (Laplace-Operator für Vektorfelder)

Sei $V \in \mathcal{V}^l(\mathbb{R}^3)$. Dann heißt

$$\nabla_{\mathcal{V}}^2 V = \frac{\partial^2 V}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial x_3^2},$$

der Laplace-Operator für Vektorfelder. Der Laplace-Operator ist darstellbar als das euklidische Skalarprodukt des \mathbb{R}^3 zweier Nabla-Operatoren. Es wird deshalb im Folgenden die Notation verwendet

$$\nabla_{\mathcal{V}}^2 V = \nabla \cdot \nabla V.$$

Definition 14

- (i) Gleichungen, in denen eine Funktion und ihre Ableitung vorkommen, heißen Differentialgleichungen. Sei m die höchste Ableitung, dann ist die Differential-

gleichung von m -ter Ordnung.

- (ii) Differentialgleichungen mit Funktionen $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ einer reellen Veränderlichen heißen gewöhnliche Differentialgleichungen.
- (iii) Differentialgleichungen mit Funktionen $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ mehrerer Veränderlicher und partiellen Ableitungen heißen partielle Differentialgleichungen.
- (iv) Sowohl gewöhnliche als auch partielle Differentialgleichungen heißen linear, falls die Funktionen und alle auftretenden Ableitungen linear auftreten.

Die Begriffe homogene und inhomogene Differentialgleichung werden am Beispiel einer gewöhnlichen linearen Differentialgleichung erklärt und können äquivalent für partielle lineare Differentialgleichungen genutzt werden.

Definition 15

Sei $I \subset \mathbb{R}$, $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ eine stetig differenzierbare Funktion, $a, b : I \rightarrow \mathbb{R}$ stetige Funktionen, sei $x \in I$. Dann ist mit $\frac{\partial f}{\partial x} = a(x)f(x) + b(x) \forall x \in I$ eine lineare Differentialgleichung. Die lineare Differentialgleichung heißt homogen, falls gilt $b = 0$. Für $b \neq 0$ heißt die Differentialgleichung inhomogen.

Definition 16 (Anfangs- und Randwerte für Differentialgleichungen)

- (i) Ein Anfangswertproblem bezeichnet eine Differentialgleichung mit einer zusätzlichen Bedingung. Die Lösung muss zu einem bestimmten Wert einen bestimmten Funktionswert annehmen.
- (ii) Ein Randwertproblem bezeichnet eine Differentialgleichung mit einer zusätzlichen Bedingung, dass die Lösung einen vorgegebenen Wert am Rand des Definitionsbereiches annehmen muss. Randbedingungen können zum Beispiel sein, dass die Lösung selbst einen bestimmten Wert am Rand annimmt (Dirichlet-RB), dass die erste Ableitung der Lösung einen bestimmten Wert annimmt (Neumann-RB) oder dass sowohl die Lösung der Differentialgleichung als auch die erste Ableitung der Lösung einen bestimmten Wert am Rand annimmt (asymptotischen RB).

Seien $E, B \in \mathcal{V}^l(\mathbb{R}^3)$ Vektorfelder mit $l \geq 2$. Das Vektorfeld E wird im Weiteren als das elektrische Feld bezeichnet und B als das magnetische Feld. Es gelte für E und B , dass sich die Vektorfelder aus jeweils 3 Funktionen $E_i(x, t) : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \forall i = 1, 2, 3$ zusammensetzen. Die Maxwell-Gleichungen bilden ein Differentialgleichungssystem. Um dieses lösen zu können, wären Rand- und Anfangsbedingungen nötig. Da an dieser Stelle nur die Herkunft der Gleichung für die skalare Theorie betrachtet wird, wird auf eine Diskussion der Rand- und Anfangsbedingungen verzichtet.

Mit $\mu_0 \in \mathbb{R}$ wird die Permeabilität und mit $\epsilon_0 \in \mathbb{R}$ die Permeabilität des Vakuums bezeichnet [Gia06, Ers06, SB73]. Die Operatoren sind hier so zu verstehen, dass sie jeweils nur auf die räumlichen Komponenten der Vektorfelder wirken und die zeitliche Komponente weggelassen wird. Dann lauten die Maxwell-Gleichungen in einem Vakuum, mit Abstand¹ zu den Quellen

$$\nabla \cdot E = 0 \quad (3.5a)$$

$$\nabla \cdot B = 0 \quad (3.5b)$$

$$\nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t} \quad (3.5c)$$

$$\nabla \times B = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial E}{\partial t}. \quad (3.5d)$$

Betrachtet man nun die Gleichung (3.5c) und führt eine weitere Rotation aus, dann erhält man

$$\nabla \times \nabla \times E = -\frac{\partial}{\partial t} \nabla \times B. \quad (3.6)$$

Die rechte Seite von (3.6) lässt sich mit (3.5d) umschreiben zu

$$= -\mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial E}{\partial t} = -\mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 E}{\partial t^2}.$$

Die linke Seite der Gleichung (3.6) kann mit der Graßmann Identität (3.4) umgeschrieben werden zu

$$\nabla \times \nabla \times E = \nabla(\nabla \cdot E) - \nabla \cdot \nabla E.$$

Aus (3.5a) ist bekannt, dass $\nabla \cdot E = 0$ gilt. Es folgt $\nabla(\nabla \cdot E) = 0$ und somit ergibt sich

$$-\nabla \cdot \nabla E = -\mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2 E}{\partial t^2}.$$

Zusammenfassend ergibt sich mit $c^2 = 1/\mu_0 \epsilon_0$

$$\nabla_{\mathcal{V}}^2 E - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = 0. \quad (3.7)$$

Für das magnetische Feld B kann mit den gleichen Rechenschritten das gleiche Ergebnis erzielt werden

$$\nabla_{\mathcal{V}}^2 B - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 B}{\partial t^2} = 0. \quad (3.8)$$

Die Gleichungen heißen **homogenen Wellengleichung für Vektorfelder**. Somit ist das System von inhomogenen Differentialgleichungen überführt worden in zwei

¹Die Gleichung (3.5a) ist in Betrachtung mit der Quelle eine inhomogene Differentialgleichung. Diese lautet $\nabla \cdot E = \rho$, wobei $\rho : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ die Ladungsdichte bezeichnet. Die Ladungsdichte ist ortsabhängig und verschwindet mit Abstand zu den Quellen.

homogene Differentialgleichungen.

3.3.2 Skalare Theorie

Es ist nun möglich die elektrischen und magnetische Komponenten einer elektromagnetischen Wellen einzeln zu betrachten. Da nun die Struktur der Gleichung bekannt ist, ist so auch eine Übertragung auf die skalare Theorie möglich.

Definition 17 (Laplace-Operator für Funktionen)

Sei $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ eine Funktion, die mindestens zwei mal stetig differenzierbar ist. Dann heißt

$$\nabla^2 f = \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial x_3^2}$$

der Laplace Operator für Funktionen.

Definition 18 (homogene skalare Wellengleichung)

Sei $u : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{C}$ eine mindestens zweimal stetig differenzierbare Funktion und $c \in \mathbb{R}$, dann ist durch

$$\nabla^2 u(x, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} u(x, t) = 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^3, \forall t \in \mathbb{R} \quad (3.9a)$$

$$u(x, 0) = f(x), \quad x \in \mathbb{R}^3 \quad (3.9b)$$

$$u(x, t) \rightarrow 0, \quad x \rightarrow \pm\infty, t \geq 0 \quad (3.9c)$$

die **homogene Wellengleichung für skalare Funktionen** definiert, mit einer Anfangsbedingung und den Dirichlet-Randbedingungen.

Eine Möglichkeit, Lösungen von partiellen Differentialgleichungen zu bekommen ist, ein Separationsansatz [AHK⁺08, CH37]. Dazu wird angenommen, dass sich die Lösung des Anfangswertproblems als ein Produkt darstellen lässt

$$u(x, t) = v(t)f(x),$$

wobei die Funktion $v : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ und die Funktion $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ abbildet. Die Funktion wird also aufgeteilt in ihre räumlich Komponente f und ihre zeitliche Komponente v . Eingesetzt in die Wellengleichung ergibt sich

$$\nabla^2 f(x)v(t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 v(t)}{\partial t^2} f(x) = 0.$$

Es wird angenommen, dass die gesuchte Lösung sinusoidal in der Zeit variiert [Ers06].

Somit lässt sich die gesuchte Lösung darstellen als

$$u(x, t) = f(x)e^{i\omega t}.$$

Eingesetzt in die Wellengleichung liefert dies

$$\nabla^2 f(x)e^{i\omega t} + \frac{\omega^2}{c^2}f(x)e^{i\omega t} = 0.$$

Da $e^{i\omega t} \neq 0 \forall t$ gilt, folgt mit $k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$

$$\nabla^2 f(x) + k^2 f(x) = 0.$$

Diese homogene partielle Differentialgleichung heißt **Helmholtz-Gleichung** [Ers06]. Es ergibt sich somit das folgende Randwertproblem für die Helmholtz-Gleichung.

Definition 19 (Helmholtz-Gleichung)

Sei $u : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ eine mindestens zweimal stetig differenzierbare Funktion, $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ eine stetig differenzierbare Funktion, $n : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ der Brechungsindex und $k \in \mathbb{R}$ die Wellenzahl wie in Tabelle (3.1) definiert, dann ist durch

$$\nabla^2 u(x) - k^2 n^2(x)u(x) = 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^3 \quad (3.10a)$$

$$u(x_1, x_2, 0) = f(x_1, x_2, 0), \quad (x_1, x_2, 0) \in \mathbb{R}^3 \quad (3.10b)$$

$$u(x) \rightarrow 0, \quad x \rightarrow \pm\infty \quad (3.10c)$$

ein Anfangsrandwertproblem einer inhomogenen partiellen Differentialgleichung mit Dirichlet-Randbedingungen gegeben [CH37]. Ist das Medium, welches die Welle durchläuft ein homogenes Medium, dann wird die inhomogene Gleichung (3.10a) zu einer homogenen partiellen Differentialgleichung. Die Randbedingungen verändern sich nicht [Ers06].

3.4 Rayleigh-Sommerfeld Integral zur Darstellung von Beugung

Wie schon bei der Herleitung der Helmholtz-Gleichung gesehen, ist die skalare Darstellung von Beugung mit das Lösen einer partiellen Differentialgleichung verbunden [Goo96]. Für das Lösen partieller Differentialgleichungen gibt es in der Literatur ganz unterschiedliche Ansätze [AHK⁺08]. Eine davon ist, das Lösen von partiellen Differentialgleichungen mittels der Distributionstheorie, welches auch gleichzeitig die älteste Darstellung von Beugung in der Literatur geprägt hat [Goo96]. Da ein ausführliche Betrachtung aller verschiedenen Beugungsintegrale in dieser Arbeit nicht

möglich ist, beschränkt sich diese auf die Rayleigh-Sommerfeld Darstellung. Für eine ausführliche Betrachtung sei auf [Goo96, BW70, Ers06] verwiesen.

Um die Rayleigh-Sommerfeld Darstellung von Beugung herleiten zu können, werden Greensche Funktionen benötigt. Hinter der Theorie der Greenschen-Funktionen steht die Theorie der Fundamentallösungen, mit Hilfe derer Lösungen von partiellen Differentialgleichungen über die δ -Distribution ermittelt werden können. Für eine Diskussion dieser Theorie genauso wie für eine ausführliche Diskussion der Green-Funktionen sowie deren Konstruktion sei hier auf [KW00] verwiesen. Eine Skizze dieser Theorie erfolgt in dieser Arbeit. Die Ausführungen folgen [Goo96] und sind an einigen Stellen mit [BW70] erweitert worden.

Sei $u \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^3)$ und $w \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^3)$ Funktionen. Es sei eine inhomogene partielle lineare Differentialgleichung 2.Ordnung mit $a_i : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R} \quad i = 0, 1, 2$, ähnlich der inhomogenen Helmholtz-Gleichung mit entsprechenden Randbedingungen, die an dieser Stelle nicht näher diskutiert werden, wie zum Beispiel

$$a_2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + a_1 \frac{\partial u}{\partial x} + a_0 u = w, \quad (3.11)$$

gegeben. Dann kann nach [Goo96] gezeigt werden, dass eine Lösung mit Hilfe der δ -Distribution gefunden werden kann. Dafür sei $g : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ eine Funktion, die auch die Differentialgleichung (3.11) mit den gleichen Randbedingungen erfüllt, wobei die Funktion w durch die δ -Distribution ersetzt worden ist. Dann ist eine allgemeine Lösung der Differentialgleichung (3.11) über das Faltungsintegral

$$u = \int_{\mathbb{R}^n} g(x - x_1) v(x_1) dx_1$$

gegeben. Die Funktion g heißt **Greensche-Funktion**.

Definition 20 (Ableitung in Normalenrichtung)

Sei $U \subset \mathbb{R}^3$ eine offene Menge, $A \subset U$ eine beschränkte und abgeschlossene Menge mit glattem Rand ∂A und

$$v : \partial A \rightarrow \mathbb{R}^3$$

das äußere Einheits-Normalenfeld. Für eine Funktion $f : U \rightarrow \mathbb{C}$ werde die Ableitung in Normalenrichtung in einem Punkt $x \in \partial A$ definiert durch

$$\frac{\partial f}{\partial v} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial f(x)}{\partial x_i} v_i(x).$$

Satz 4 (Greensche-Formel)

Mit den obigen Bezeichnungen seien $f, g : U \rightarrow \mathbb{C}$ zwei Funktionen aus $\mathcal{C}^2(\mathbb{R}^3)$.

Dann gilt

$$\int_A (f\nabla^2 g - g\nabla^2 f)d^3x = \int_{\partial A} f \frac{\partial g}{\partial v} - g \frac{\partial f}{\partial v} d^3x,$$

wobei ∇^2 der Laplace-Operator ist.

Beweis: siehe [For99].

Seien $u : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ eine Funktion, die die Helmholtz-Gleichung erfüllt, V ein Volumen, S eine abgeschlossene Oberfläche und $x \in \mathbb{R}^3$ ein innerer Punkt. Sei weiter g die Green-Funktion, die auch die Helmholtz-Gleichung erfüllt, dann gilt mit Satz 4

$$\int_V (u\nabla^2 g - g\nabla^2 u)d^3x = \int_{\partial V} u \frac{\partial g}{\partial v} - g \frac{\partial u}{\partial v} d^3x = 0 \quad (3.12)$$

für alle Punkte in dem Volumen V , wobei ∂V den Rand des Volumens bezeichnet. Angenommen, dass $g(x; q_1) = \frac{e^{ik\|x-q_1\|}}{\|x-q_1\|}$ ist, also die Gestalt einer Kugelwelle hat, die an $q_1 \in \mathbb{R}^3$ entsteht, dann hat die Funktion g für $x = q_1$ eine Singularität. Diese Singularität muss zunächst aus dem Integrationsbereich ausgeschlossen werden. Man legt nun eine Kugel S_ϵ um q_1 mit dem Radius ϵ . Sei $S' = S \setminus S_\epsilon$ dann gilt nun für (3.12)

$$\int_{S'} u \frac{\partial}{\partial v} \frac{e^{ik\|x-x_1\|}}{\|x-x_1\|} - \frac{e^{ik\|x-x_1\|}}{\|x-x_1\|} \frac{\partial u}{\partial v} d^3x + \int_{S_\epsilon} u \frac{\partial}{\partial v} \frac{e^{ik\|x-x_1\|}}{\|x-x_1\|} - \frac{e^{ik\|x-x_1\|}}{\|x-x_1\|} \frac{\partial u}{\partial v} d^3x = 0. \quad (3.13)$$

Es gilt, dass $\forall x \in S_\epsilon$ der Abstand $\|x - q_1\| < \epsilon$ ist. Da weiter das Integral über S unabhängig von ϵ ist, kann nun das Integral mit dem Grenzwert getauscht werden [BW70]. Der Grenzwert für den zweiten Term in (3.13) ist nun

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} 4\pi\epsilon^2 u \frac{e^{ik\epsilon}}{\epsilon} \left(ik - \frac{1}{\epsilon} \right) - \frac{e^{ik\epsilon}}{\epsilon} \frac{\partial u}{\partial v} = 4\pi u(q_1; q_1).$$

Das Integral über S_ϵ konvergiert also gegen den Ursprung der Kugel. Es kann mit diesem Integral eine Darstellung der Kugel in der Unstetigkeitsstelle angegeben werden.

Es folgt das **Integraltheorem von Helmholtz und Kirchhoff**

$$u(q_1; q_1) = \frac{1}{4\pi} \int_S u \frac{\partial g}{\partial v} - g \frac{\partial u}{\partial v} d^3x, \quad (3.14)$$

welches besagt, dass der Ursprung einer Welle über das obige Integral berechnet werden kann. Nach Huygens-Prinzip gilt, dass jeder Punkt einer Wellenfront ein Ausgangspunkt einer neuen Wellenfront ist. Somit ist die neue Wellenfront mit Hilfe der alten Wellenfront beschreibbar [Goo96].

Die Wahl der Green-Funktion $g(x; q_1) = \frac{e^{ik\|x-q_1\|}}{\|x-q_1\|}$ hat sich als nicht vorteilhaft herausgestellt, weshalb das Integraltheorem von Helmholtz und Kirchhoff mit der Ku-

gelfunktion als Green-Funktion Abweichungen zwischen der Praxis und der Theorie aufgezeigt hat. Die von Rayleigh und Sommerfeld gefundene Green-Funktion schaffte es diese Abweichungen zu beseitigen [Goo96].

Die grundlegende Annahme, die zu dieser Green-Funktion geführt hat, ist, dass die Welle an zwei unterschiedlichen Orten entsteht. Damit Beugung auftritt, muss die Welle an einem Objekt abgelenkt werden. Dieses Objekt wird im folgenden als eine Ebene abgenommen, die einen durchlässigen Teil hat, wobei der Rest der Ebene undurchlässig ist. Diese Ebene wird im Weiteren als Blende bezeichnet. Die Welle entsteht nun einmal an dem Punkt $x_0 \in \mathbb{R}^3$ und an einem weiteren Punkt \bar{x}_0 , der an der Blende gespiegelt worden ist. Der Abstand dieser beiden Punkte ist gerade so, dass die Phasendifferenz zwischen der Welle an x_0 und \bar{x}_0 180° beträgt. Aufgrund dieser Überlegungen ergibt sich die folgende Green-Funktion

$$g(x; q_0, \bar{q}_0) = \frac{e^{ik\|x-q_0\|}}{\|x-q_0\|} - \frac{e^{ik\|x-\bar{q}_0\|}}{\|x-\bar{q}_0\|}.$$

Der Einfachheit halber gelte von nun an $g(x) = g(x; q_0, \bar{q}_0) \forall x \in \mathbb{R}^3$. Es werden im Weiteren nur noch die x betrachtet, die im durchlässigen Bereich der Blende liegen, da alle anderen keinen Einfluss auf die Veränderung der Wellenfront u haben. Da diese Punkte in der Mitte von q_0 und \bar{q}_0 liegen, gilt $g(x) = 0$. Somit vereinfacht sich das Integral (3.14) zu

$$u(0; q_0) = \frac{1}{4\pi} \int_{\partial V} u \frac{\partial g}{\partial v} d^3x.$$

Die Ableitung der Green-Funktion in Normalenrichtung ist

$$\frac{\partial g}{\partial v} = \cos(\alpha_1) \left(ik - \frac{1}{\|x-q_0\|} \right) \frac{e^{ik\|x-q_0\|}}{\|x-q_0\|} - \cos(\alpha_2) \left(ik - \frac{1}{\|x-\bar{q}_0\|} \right) \frac{e^{ik\|x-\bar{q}_0\|}}{\|x-\bar{q}_0\|},$$

wobei α_1 den Winkel zwischen $v(x)$ und $r_{01} = x - q_0$ und α_2 den Winkel zwischen $v_i(x)$ und $\bar{r}_{01} = x - \bar{q}_0$ bezeichnet. Unter der Annahme, dass der Punkt x in der Mitte zwischen q_0 und \bar{q}_0 liegt, gilt $r_{01} = \bar{r}_{01}$. Es folgt $\cos(\alpha_1) = -\cos(\alpha_2)$. Somit vereinfacht sich die Ableitung in Normalenrichtung zu

$$\frac{\partial g}{\partial v} = 2 \cos(\alpha_1) \left(ik - \frac{1}{\|x-q_0\|} \right) \frac{e^{ik\|x-q_0\|}}{\|x-q_0\|}.$$

Unter der Annahme, dass der Abstand $r_{01} \gg \lambda$ ist, kann die Ableitung in Normalenrichtung gut approximiert werden mit

$$\frac{\partial g}{\partial v} \approx 2 \cos(\alpha_1) \frac{e^{ik\|x-q_0\|}}{\|x-q_0\|}.$$

Setzt man weiter voraus, dass der Abstand $r_{01} \gg \Sigma$, wobei Σ die Größe der Öffnung

der Blende ist, so ergibt sich mit der obigen Green-Funktion die Darstellung der Wellenfront im Punkt q_0 zu

$$u(q_0; q_0) = \frac{1}{j\lambda} \iint_{\Sigma} u(x) \frac{e^{ik\|x-q_0\|}}{\|x-q_0\|} \cos(\alpha_1) d^3x. \quad (3.15)$$

Dieses Integral heißt **Rayleigh-Sommerfeld Integral** und ist eine mögliche Darstellung von Beugung. Mit anderen Green-Funktionen, die unter anderen Annäherungen gültig sind, lässt sich zum Beispiel das Fresnel-Kirchhoff Integral herleiten. Mit bestimmten Annäherungen lässt sich das Rayleigh-Sommerfeld Integral überführen in die Fraunhofer Darstellung oder in die Fresnel Darstellung. Eine ausführlichere Diskussion dieser anderen Darstellungen sowie eine weitreichende Betrachtung des Rayleigh-Sommerfeld Integrals ist zum Beispiel in [Ers06, Goo96, Dem04] oder in [BW70] zu finden.

In diesem Kapitel ist eine Beschreibung von Wellenausbreitung präsentiert worden. Zunächst ist eine physikalische Beschreibung von Wellen und den Interaktionen von Wellen untereinander und von Wellen mit Objekten oder Medien gemacht worden. Danach ist die Beschreibung der Wellenausbreitung mit Hilfe der Maxwell-Gleichungen herangezogen worden. Diese Betrachtung hat gezeigt, wie eine Formel für die Betrachtung in der skalaren Theorie auszusehen kann. Die Übergang in die skalare Theorie hat dann zur Definition der Wellengleichung mit Anfangs- und Randwerten geführt. Die skalare Wellengleichung ist dann mit einem Separationsansatz und der Annahme, dass die betrachteten Wellen sinusoidal von der Zeit abhängen in die Helmholtz-Gleichung überführt worden. Am Ende des Kapitels ist dann eine Lösung der Helmholtz-Gleichung mit Hilfe von Greenschen-Funktionen vorgestellt worden, das Rayleigh-Sommerfeld-Integral. Im nächsten Kapitel erfolgt eine Betrachtung der Fresnel Zonenplatten, die in der Röntgenmikroskopie als Linsen genutzt werden.

4 Fresnel Zonenplatten

Fresnel Zonenplatten (FZP) werden in der Röntgenmikroskopie als eine Art Linse eingesetzt, um die Röntgenstrahlung auf den CCD-Detektor zu fokussieren [KJH95]. Dazu werden in mehrstufigen Nanostrukturierungsprozessen auf einem Träger unterschiedlich breite, konzentrische Kreisringe aufgetragen, die die Röntgenstrahlung unterschiedlich stark absorbieren [Knö05]. Die Funktionsweise der Fresnel Zonenplatten ist so zu erklären, dass die unterschiedlich stark absorbierenden Kreisringe des Trägers genau den Teil der elektromagnetischen Strahlung absorbieren, der in der Fokusebene zu destruktiver Interferenz führen würde [Dem04]. Die Breite der Kreisringe nimmt mit zunehmender Entfernung zum Mittelpunkt des Trägers ab [Dem04]. Durch den Herstellungsprozess der FZP ist die Breite des äußeren Kreisrings begrenzt. Die Auflösung dieser als Linsen benutzten FZP ist durch die Breite des äußersten Kreisrings beschränkt [Knö05]. Um eine bessere Auflösung zu bekommen sind sogenannte modifizierte Fresnel Zonenplatten entwickelt worden [CJ03].

Im diesem Kapitel wird die Funktionsweise von Fresnel Zonenplatten aufgezeigt. Dazu wird zunächst eine geometrische Beschreibung der Fresnel Zonen getätigt, da sie die Grundlage bilden, auf der die Funktionsweise der FZP beruht. Anschließend werden einige Eigenschaften der FZP betrachtet. Abschließend wird eine zusammenfassende theoretische Beschreibung der MFZP, wie sie in [CJ03] gegeben worden ist, soweit sie für diese Arbeit relevant ist, dargestellt.

4.1 Nicht modifizierte Fresnel Zonenplatten

Die folgenden Ausführungen sind aus [Dem04] entnommen und an dieser Stelle zusammengefasst. Es sind physikalische Ausführungen für die angenommen wird, dass die hier betrachtete stetig differenzierbare Funktionen $f : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ sind, für die die hier gezeigten Integrale existieren.

Es wird die Feldstärke einer sich ausbreitenden Welle betrachtet. Es wird eine Kugelwelle K betrachtet, die in der Quelle $q \in \mathbb{R}^3$ entstanden ist. Der Zeitpunkt wird in der weiteren Betrachtung auf $t = 0$ gesetzt. In einer Ebene um den Punkt $b \in \mathbb{R}^3$,

dem Beobachtungspunkt, soll nun die Feldstärke betrachtet werden, wenn die Kugelwelle K durch ein Hindernis abgelenkt worden ist. Es wird nun gezeigt, welche Auswirkungen das Hindernis auf die Feldstärke im Punkt b hat.

Es wird die Wellenfront, die den Abstand R zur Quelle q hat, betrachtet. Der Abstand zwischen q und b wird nun geschrieben als $R + r_0$. Konstruiert man nun Sphären um den Beobachtungspunkt b mit den Radien $r_m = r_0 + m\frac{\lambda}{2}$ mit $m \in \mathbb{N}$ und $\lambda \in \mathbb{R}$ die Wellenlänge, dann schneiden die Sphären um b die Wellenfront um q , siehe Abbildung 4.1. Die Schnittkreise haben die Entfernung r_m von b . Die Kugeloberflächensegmente zwischen dem Schnittkreis mit Abstand r_m und dem Schnittkreis mit dem Abstand r_{m-1} heißen **Fresnel Zonen**. Alle Punkte der m -ten Fresnel Zone haben einen Abstand zwischen $r_0 + (m-1)\frac{\lambda}{2}$ und $r_0 + m\frac{\lambda}{2}$ zu b .

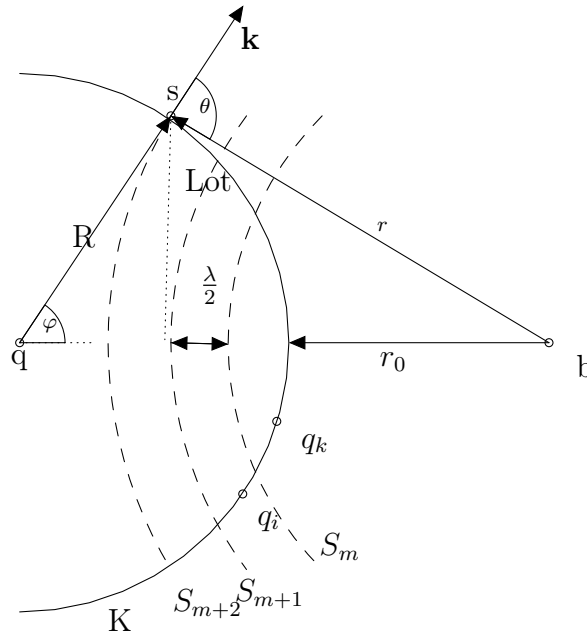


Abbildung 4.1: Abbildung zur Darstellung einer Fresnel Zonenplatte. K ist die Wellenfront der Kugelwelle, die an der Quelle q entstanden ist und den Radius R hat. Die Welle hat die Wellenlänge λ und breitet sich in Richtung des Wellenvektors \mathbf{k} aus. Um den Beobachtungspunkt b werden Sphären S_m mit Radius $r_0 + m\lambda/2$ konstruiert, die K schneiden. Hier gestrichelt dargestellt. Ein Punkt s hat den Abstand r zum Beobachtungspunkt. (Abbildung entnommen aus [Dem04])

Es folgt, dass es zu jedem Punkt $q_i \in \mathbb{R}^3$ in einer Fresnel Zone einen Punkt $q_k \in$

R^3 in der benachbarten Fresnel Zone gibt, dessen Entfernung zu b sich um $\lambda/2$ unterscheidet. Betrachtet man nun einen Punkt $s \in \mathbb{R}^3$, der auf der Wellenfront liegt, dann ist die Amplitude der Feldstärke der Wellenfront in s auf $E_0/R := E_a$ abgesunken. Nach Huygens-Prinzip, geht von diesem Punkt s wieder eine Welle, die Sekundärwelle, aus, die wieder als Kugelwelle approximiert wird.

Nach [Dem04] kann gezeigt werden, dass der Beitrag der Sekundärwelle über die Fläche der m -ten Zone zur Gesamtfeldstärke in der Ebene um b sich berechnen lässt über

$$E_m(R + r_0, t) = (a_m \cos(\theta_m)) E_a \frac{2\pi R}{R + r_0} \int_{r_{m-1}}^{r_m} e^{ik(R+r)-\omega t} dr, \quad (4.1)$$

wobei $a_m \in \mathbb{R}$ ist und die Abhängigkeit der abgestrahlten Amplitude vom Winkel θ zur Flächennormalen angibt. Der Term $a_m \cos(\theta_m)$ drückt die Stärke des Beitrags der m -ten Fresnel Zone zur gesamten Feldstärke aus. Sei $q_m \in \mathbb{R}^3$ ein Punkt aus der m -ten Fresnel Zone und l die Lotstrecke zwischen q_m und der Geraden zwischen qb . Bezeichne $f \in \mathbb{R}^3$ den Lotfußpunkt und θ_m den Winkel im Punkt b zwischen r und r_0 . Der $\cos(\theta_m)$ bringt den Zusammenhang zwischen der Hypotenuse \overline{fb} und Ankathete $\overline{fq_m}$ zum Ausdruck. Der Beitrag der m -ten Fresnel Zone ergibt sich somit nach Auswertung des Integrals in (4.1) zu

$$E_m(R + r_0, t) = (-1)^{m+1} \frac{2\lambda(a_m \cos(\theta_m)) E_a R}{i(R + r_0)} e^{ik(R+r_0)-\omega t}.$$

Dann ergibt sich die Gesamtfeldstärke der Sekundärwellen im Punkt b zu

$$E(R + r_0, t) = \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m+1} |E_m(R + r_0)| = |E_1| - |E_2| + |E_3| - \dots \pm |E_{\infty}|.$$

Weiter können diese unter der Annahme, dass sich die Beträge der einzelnen E_m nur langsam ändern, approximiert werden mit

$$|E_m| \approx \frac{1}{2} (|E_{m-1}| + |E_{m+1}|). \quad (4.2)$$

Der Beitrag der einzelnen Fresnel Zonen nimmt mit steigendem m ab, da der Winkel θ_m mit steigendem m gegen 1 strebt und somit gilt $\cos(\theta_m) \rightarrow 0$ für $\theta_m \rightarrow 1$. Es wird im Weiteren angenommen, dass die Fresnel Zonen ab einem bestimmten N keinen Einfluss mehr auf die Feldstärke im Punkt b haben. Approximiert man nun die einzelnen Beiträge wie in Gleichung (4.2) und betrachtet nur noch die Beiträge,

die einen Einfluss auf die Feldstärke im Punkt b haben, dann ergibt sich

$$\begin{aligned} E(R + r_0) &\approx \frac{1}{2}|E_1| + \left(\frac{1}{2}|E_1| - |E_2| + \frac{1}{2}|E_3|\right) + \dots \\ &\approx \frac{1}{2}(|E_1|) \end{aligned}$$

Die approximierte Gesamtfeldstärke der Sekundärwelle ergibt sich somit zu

$$\begin{aligned} E(R + r_0) &\approx \frac{1}{2}E_1 \\ &= \frac{a_1 \cos(\theta_1) \lambda E_a R}{i(R + r_0)} e^{-ik(R+r_0) - \omega t} \end{aligned}$$

Da sich die Gesamtfeldstärke der Sekundärwelle nicht von der Gesamtfeldstärke der Primärwelle

$$E_P(R + r_0, t) = \frac{E_0}{R + r_0} e^{ik(R+r_0) - \omega t}$$

unterscheiden kann, da die Anwendung des Huygens-Prinzip das Ergebnis nicht verändern darf [Dem04], können nun die fehlenden Ausdrücke über einen Quotientenvergleich gefunden werden. Es ergibt sich $a_1 = i/\lambda$ für die erste Zone.

Stellt man eine Blende zwischen den Ausgangspunkt q der Welle und dem Beobachtungspunkt b mit dem Durchmesser $d = 2\sqrt{r_0\lambda}$ im Abstand r_0 vom Beobachtungspunkt b auf, dann ergibt sich die Gesamtfeldstärke im Beobachtungspunkt b

$$E(b) = \frac{2E_0}{R + r_0} e^{-ik(R+r_0) - \omega t}.$$

Die Feldstärke ist also mit der Blende doppelt so groß wie ohne Blende. Der Grund der Vergrößerung der Feldstärke ist die Unterdrückung der destruktiven Interferenz [Dem04]. Die 1. Fresnel Zone wirkt also wie eine Linse, die divergente Wellen wieder teilweise fokussiert.

Ist der Abstand R von der Quelle bis zur Wellenfront im Verhältnis zum Durchmesser der Blende sehr groß, dann kann die Kugelwelle durch eine ebene Welle approximiert werden. Die Kugel mit den Fresnel Zonen wird dann eine Ebene. Die Abhängigkeit vom Abstand zum Beobachtungspunkt und von der Wellenlänge bleibt aber auch in diesem Fall erhalten. Die Strecke zwischen der Quelle q und dem Beobachtungspunkt b heißt **optische Achse**.

Der Radius der Zonen kann über einen geometrischen Ansatz berechnet werden. Es wird das Dreieck mit dem rechten Winkel zwischen b und einem Punkt w in der m -ten Zone und dem Lotfußpunkt, der auf der Strecke zwischen b und q liegt und das Lot zwischen der Strecke und dem Punkt in w bildet. Es wird die Hypotenuse

mit r bezeichnet und die Kathete mit r_0 . Dann gilt

$$\begin{aligned} r_m &= \sin(\cos^{-1}(r_0/r))r = \sqrt{1 - (r_0/r)^2}r \approx \sqrt{r^2 - r_0^2} \\ &= \sqrt{(r_0 + m\lambda/2)^2 - r_0^2} \approx \sqrt{mr_0\lambda} \end{aligned} \quad (1.4)$$

für $r_0 \gg \lambda$. Der Radius ist also abhängig von der Wellenlänge und vom Abstand zum Beobachtungspunkt.

Das vorgestellte Prinzip der Fresnel Zone aus dem vorigen Abschnitt kann dazu genutzt werden, um die Gesamtfeldstärke im Beobachtungspunkt noch weiter zu erhöhen. Dazu werden zwischen 500 – 10000 Fresnel Zonen auf einen Träger aufgebracht. Der Träger wird dann **Fresnel Zonenplatte** bezeichnet. Wie schon erwähnt, werden dazu Nanostrukturierungsprozesse genutzt [Knö05].

Die Breite der m -ten Zone einer FZP lässt sich bestimmen durch,

$$\begin{aligned} \Delta r_m &= r_{m+1} - r_m \\ &= \sqrt{r_0\lambda}(\sqrt{m+1} - \sqrt{m}), \end{aligned}$$

wobei der Radius wie in (1.4) gegeben ist. Wie schon in der Einleitung erwähnt, nimmt die Breite mit zunehmender Entfernung zum Mittelpunkt ab. Die Fläche der m -ten Zone ist

$$A_m = \pi(r_{m+1}^2 - r_m^2) = \pi r_0 \lambda$$

und in etwa für alle Zonen gleich.

Die Brennweite der FZP ist von der Wellenlänge der einfallenden Welle abhängig. Sie wird durch den Radius der 1. Fresnel Zone bestimmt und ist gegeben durch

$$f = \frac{r_1^2}{\lambda}. \quad (4.7)$$

Das liegt daran, dass sich die Wege der offenen Zonen genau um $2\lambda/2 = \lambda$ unterscheiden und somit alle Sekundärwellen in gleicher Phase im Beobachtungspunkt b ankommen. Der Punkt b ist also der Brennpunkt der FZP und die Brennweite ergibt sich wie in (4.7) gezeigt.

In diesem Abschnitt ist konnte gezeigt werden, dass eine auseinanderlaufende Wellenfront mit FZP wieder fokussiert werden kann. Dafür müssen die Ebene, in der die Quelle der Welle liegt, und die Ebene, in der der Brennpunkt liegt, parallel zueinander sein und im rechten Winkel auf der optischen Achse stehen. Die Fresnel Zonen müssen dafür an einer bestimmten Position angebracht werden. Diese Position, an der die undurchlässigen und durchlässigen Kreisringe angebracht werden müssen, ist

abhängig von der Wellenlänge der sich ausbreitenden Welle. Die Breite der Kreisringe nimmt mit Entfernung zum Mittelpunkt der FZP ab. Fresnel Zonenplatten sind radialsymmetrisch, wie in Abbildung 4.2a ersichtlich wird.

4.2 Modifizierte Fresnel Zonenplatten

Der Einsatz von neuartigen, so genannten zusammengesetzten oder auch modifizierten Fresnel Zonenplatten dient dazu die Auflösung der Röntgenmikroskopie zu optimieren. Eine theoretische Beschreibung, wie sich solche modifizierten Zonenplatten für bestimmte Fokusgrößen berechnen lassen und wo die offenen Zonen liegen müssen, ist in [CJ03] gezeigt worden. Die Idee der hier vorgestellten modifizierten Fresnel Zonenplatten ist eine neue Anordnung der durchlässigen und undurchlässigen Zonen. Die neuen Begrenzungen der offenen Zonen werden über das Rayleigh-Sommerfeld Integral berechnet, in dem das Integral mit der Form des gewünschten Fokus gleichgesetzt wird [CJ03]. Die Berechnung wird an dieser Stelle zusammengefasst dargestellt. Dazu wird die Kenntnis der Radialsymmetrie von FZP genutzt. Deshalb erfolgt die Berechnung der Grenzen der offenen Zonen in Polarkoordinaten. Eine schematischer Aufbau modifizierter Fresnel Zonenplatten ist in Abbildung 4.2 b zu sehen.

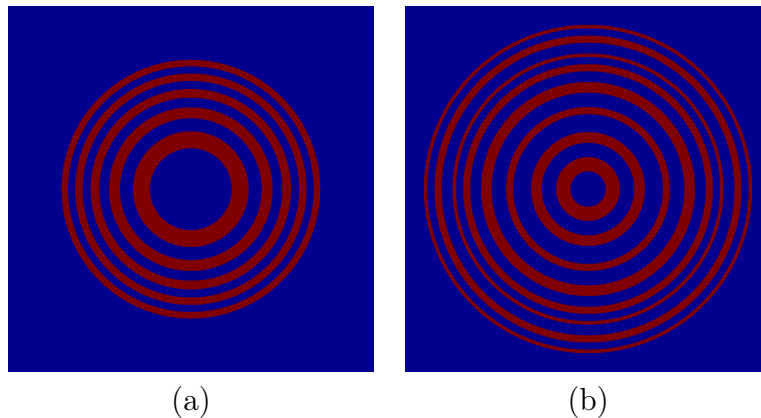


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung (a) Fresnel Zonenplatten und (b) modifizierte Fresnel Zonenplatten, blau bezeichnet die undurchlässigen Zonen und rot die durchlässigen

Seien (r, θ) die Polarkoordinaten in der Ebene der MFZP, (R, φ) die Polarkoordinaten der Fokusebene und f die Brennweite der MFZP. Der Fokus sei mit $R = 0, \varphi = 0$ gegeben. Die Ebene der MFZP und die Ebene des Fokus seien parallel und stehen im rechten Winkel zur optischen Achse. Sei A die Fläche der gesamten modifizierten Zonenplatte. Zerteilt man den Radius A nun in M einzelne Bereiche, so kann die Feldstärke, die die einzelne Zone zur Gesamtfeldstärke in der Ebene um den Fokus R beiträgt, über die Superposition der einzelnen Bereiche dargestellt werden,

$u(R) = \sum_{m=1}^M u_m(R)$. Somit lässt sich der Einfluss der m -ten Zone zur gesamten Wellenfront mit dem Rayleigh-Sommerfeld Integral in radialen Koordinaten berechnen, wobei A_m die Fläche des m -ten Zone angibt

$$u_m(R) = \frac{1}{\lambda} \iint_{A_m} \frac{f}{p^2} e^{jkp} r dr d\theta, \quad (4.7)$$

$$p = \sqrt{f^2 + R^2 + r^2 - 2Rr \cos(\theta - \varphi)}.$$

Sei r_m der Radius der m -ten Zone, d_m der Abstand vom Mittelpunkt der m -ten Zone zum Rand der Zone und $f_m = \sqrt{(f^2 + r_m^2)}$ der Abstand vom Mittelpunkt der m -ten Zone zum Fokus. Dann kann die Formel (4.7) mit entsprechenden Approximationen und Annahmen umgeformt werden zu

$$u_m(R) = \frac{2f}{f_m} e^{jk(f_m + \frac{R^2}{2f_m})} J_0\left(\frac{kr_m}{f_m} R\right) \sin\left(\frac{kd_m}{2f_m}\right),$$

wobei mit J_0 die Besselfunktion der 0-ten Ordnung definiert durch

$$J_0(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(0 - x \sin(\tau)) d\tau, \quad (4.9)$$

bezeichnet [Buz04]. Für die Annahmen und Approximationen sei an dieser Stelle auf [CJ03] verwiesen. Dieser Ausdruck kann sich unter den Annahmen, dass zum einen der Fokus sehr klein ist und zum anderen, dass sich die f_m nur langsam mit m ändern, approximiert werden

$$u_m(R) \approx \frac{2f}{f_m} e^{jk(f_m - f)} \sin\left(\frac{kd_m}{2f_m}\right) J_0\left(\frac{kr_m}{F} R\right),$$

wobei $F = (f_1 + f_M)/2$ ist. Im Fokus $R = 0$ ergibt sich nun

$$u_m(0) = \frac{2f}{f_m} e^{jkf_m - f} \sin\left(\frac{kd_m}{2f_m}\right).$$

Sei nun $s = r^2$ und $s_m = r_m^2$. Die Fokusebene der MFZP soll nun ungefähr $u(R) \approx \alpha \int_0^{A^2} e^{-s/\sigma^2} J_0(kRs^{1/2}/F) ds$ sein. Die Fläche der MFZP wird nun in M Bereiche zerlegt. Jeder der M Bereiche, hier mit D_m bezeichnet, soll eine offene Zone enthalten. Nun wird das Integral, welche die Struktur des Fokus angibt, diskretisiert und hat dann die Struktur $\sum_{m=1}^M \alpha D_m e^{-s_m^{1/2}/\sigma^2} J_0(kRs^{1/2}/F)$. Um nun die Grenzen der offenen Fresnel Zonen zu berechnen, werden das Integral und das diskretisierte Integral gleichgesetzt und löst nach d_m auf. Wählt man $\alpha = 2\beta f e^{s_1/\sigma^2} / f_1 D_1$, dann ergeben sich folgende Grenzen für die offenen Zonen

$$d_m = \frac{2f_m}{k} \left[L\pi - \arcsin\left(\beta \frac{D_m f_m}{D_1 f_1} e^{-\frac{s_m - s_1}{\sigma^2}}\right) \right],$$

wobei $0 < \beta \leq 1$ eine dimensionslose Konstante und $L \in \mathbb{N}_+$ ist. Die Größe der einzelnen Bereiche, die jeweils eine durchlässige und undurchlässige Zone enthalten, kann abgeschätzt werden über $2(L-1)\lambda f_m \leq 2d_m \leq 2L\lambda f_m$. Die Grenzen der einzelnen durchlässigen Zonen in Polarkoordinaten ergeben sich über $s_m = r_m^2$ dann zu $a_m = \sqrt{s_m - d_m}$ und $b_m = \sqrt{s_m + d_m}$.

Durch eine neue Wahl der Positionen, an denen sich die offenen Fresnel Zonen befinden, kann ein Fokus erzeugt werden, der kleiner ist als der Fokus einer Fresnel Zonenplatte mit einer vergleichbaren Breite des äußeren Rings. Bei der Produktion einer modifizierten Zonenplatte werden so viele Kreisringe für ein festes L aufgetragen, bis die Limitation des Nanostrukturierungsprozesses erreicht ist. Dann wird das L um 1 erhöht und der Prozess wird wiederholt. Das L korrespondiert dabei zu den unterschiedlichen Beugungsordnungen, das heißt, dass für $L = 1$ die erste Beugungsordnung angesprochen wird, für $L = 2$ die zweite Beugungsordnung und so weiter.

Es wird nun noch unter der Angabe der entsprechenden Parameter ein Beispiel für die modifizierte Zonenplatte geben, welches aus [CJ03] entnommen worden ist. Um einen direkten Vergleich zwischen FZP und MFZP zu haben wird an dieser Stelle eine FZP mit einer ähnlichen äußeren Strukturbreite angegeben.

Parameter der MFZP Hier werden die Daten angegeben mit Hilfe derer eine modifizierte Fresnel Zonenplatte zusammengesetzt werden kann, deren Zonen mit der obigen Rechnung errechnet worden sind. Diese sind aus [CJ03] entnommen.

Die Parameter der hier gezeigten MFZP sind: Anzahl der Zonen $M = 1015$, $m_n = 4126$, Brennweite $f = 500\mu m$, Wellenlänge $= 2.4nm$, $\sigma = 50\mu m$, Radius der kompletten MFZP $r = 100,032877\mu m$ und $\beta = 0.96$. Die Zonenplatte ist in 3 Bereiche aufgeteilt, wobei der 1. Bereich für $L = 1$: 199, der 2. Bereich für $L = 2$: 175 und der 3. Bereich für $L = 3$: 641 durchlässige Zonen hat. Die äußerere undurchlässige Zone hat eine Breite von $24.66nm$. Die Breite des mit dieser Zonenplatte erzeugtem Fokus nach der obigen Rechnung liegt bei $7.715nm$. Die innere Zone ist undurchlässig.

Region	n	m_n	f_n	L	D_n
1	$1 \leq n \leq 199$	$2n-1$	$f + m_n\lambda$	1	$4 W_n$
2	$200 \leq n \leq 374$	$396 + 3(n-199)$	$f + (m_n + 1/2)\lambda$	2	$6 W_n^1$
3	$375 \leq n \leq 1015$	$921 + 5(n-374)$	$f + m_n\lambda$	3	$10 W_n$

¹ $D_n = 7W_n$ für $n = 374$

Parameter FZP Die hier gezeigte FZP hat 500 Zonen, wobei der Radius der gesamten Zonenplatte $r = 25.4\mu m$ ist. Die äußerste Zone hat eine Größe von $29.3nm$. Die Wellenlänge sei $2.4 nm$ und der Fokus sei $500 \mu m$.

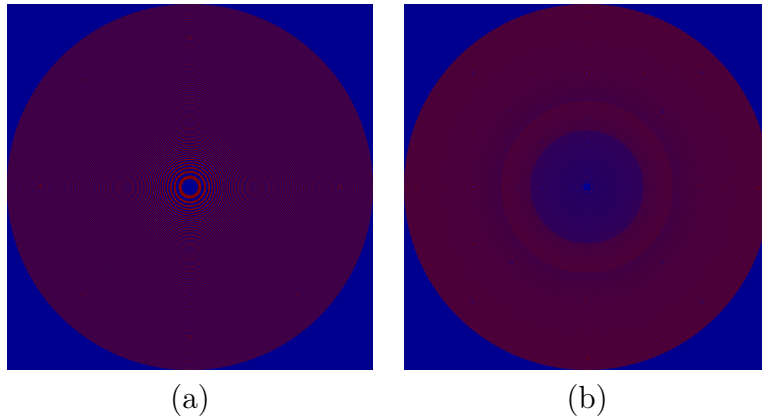


Abbildung 4.3: Die Abbildung (a) zeigt die FZP mit den obigen Parametern und die Abbildung (b) zeigt die MFZP mit den angegebenen Parametern. Blau kennzeichnet die undurchlässigen Zonen und rot die durchlässigen. (In beiden Bildern ist Aliasing zu erkennen, da die Kreisringe zu fein sind.)

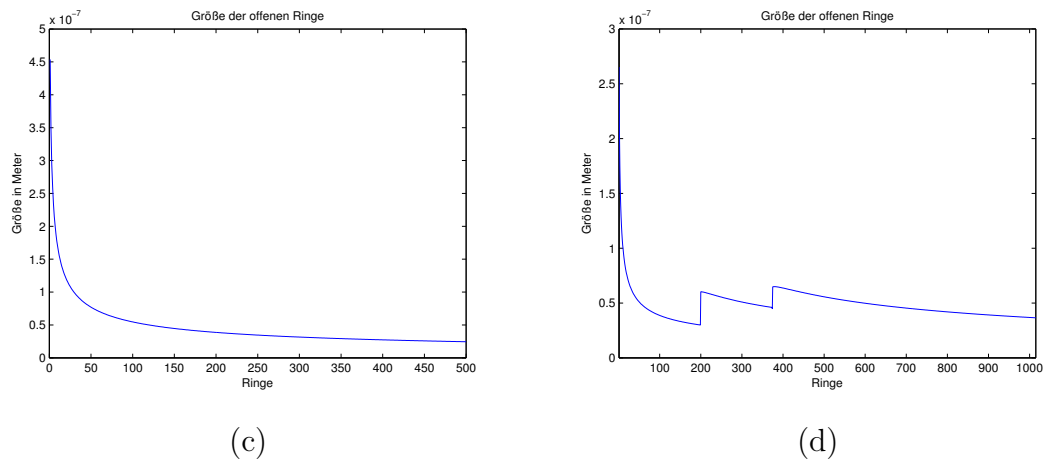


Abbildung 4.4: Die Abbildung (c) zeigt die Breite der offenen Kreisringe mit ansteigendem Abstand zur Mitte des Trägers und die Abbildung (d) zeigt die Breite der offenen Kreisringe für die MFZP mit steigendem Abstand zur Mitte des Trägers, aus [CJ03] entnommen.

In diesem Kapitel sind die in der Röntgenmikroskopie als Linsen eingesetzten Fresnel Zonenplatten beschrieben worden. Dazu ist zunächst das Prinzip von Fresnel Zonen erläutert worden. Im Anschluss ist die Idee, wie eine modifizierte Fresnel Zonenplatte nach [CJ03] entworfen werden könnte zusammenfassend aufgezeigt worden. Es wurde ein Beispiel für die Fresnel Zonenplatte und für die modifizierte Fresnel Zonenplatte gegeben. Im nächsten Kapitel erfolgt zur Illustration eine Beschreibung des Röntgenmikroskops am Helmholtz-Zentrum Berlin.

5 Das Röntgenmikroskop am Speicherring Bessy II

In diesem Kapitel wird der Aufbau des Röntgenmikroskop, wie es am Speicherring Bessy II genutzt wird, dargestellt und erläutert. Im Anschluss wird die Simulation mit den getätigten Annahmen beschrieben. Die Beschreibung des Mikroskops folgt [Sch99, Knö05].

5.1 Transmissions-Röntgenmikroskop am Bessy II

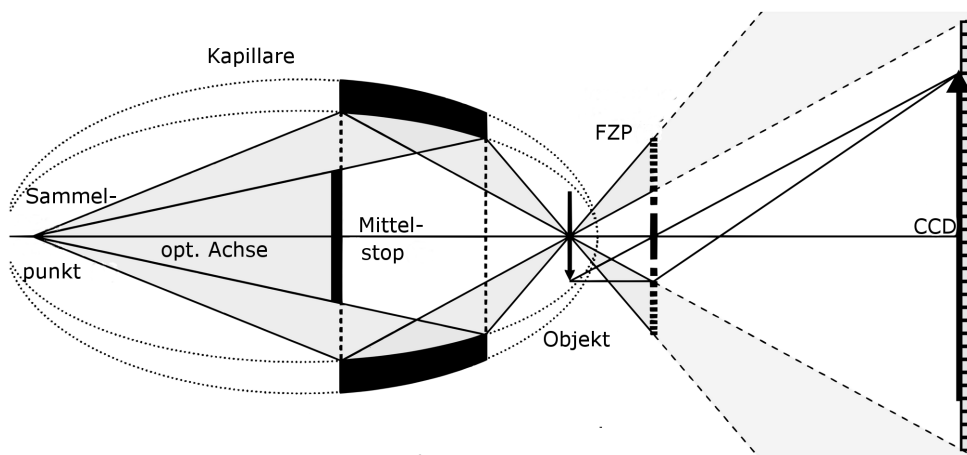


Abbildung 5.1: schematischer Querschnitt durch das Transmissions-Röntgenmikroskop am Bessy II (mit Genehmigung des Helmholtz Zentrum, Berlin)

Als Lichtquelle dient dem Transmissions-Röntgenmikroskop Synchrotron-Strahlung mit einer Wellenlänge um 2.4nm . Zunächst passiert die Strahlung ein Spiegel- und Gittersystem, das die Strahlung auf die optische Achse reflektiert und zudem höherenergetische Strahlung herausfiltert (hier nicht dargestellt). Die Röntgenstrahlung wird zunächst auf einem Sammelpunkt gesammelt. Anschließend durchläuft die Strahlung eine Kapillare, die die nullte Beugungsordnung mit einem Mittelstop herausfiltert und die restliche Strahlung mittels Totalreflektion im Objekt fokussiert. Die Strahlung durchläuft nun das Objekt und wird dabei absorbiert und in seiner Phase geändert. Das Objekt liegt in einem Bereich im Vakuum, der auf bis zum

-160°C abgekühlt werden kann.

Die nach dem Durchlauf des Objekts wieder auseinanderlaufende Röntgenstrahlung wird anschließend mit einer Fresnel Zonenplatte auf einen CCD-Detektor fokussiert. Danach erfolgt eine Weitergabe der aufgenommenen Daten zu einem Computer. Der Computer rekonstruiert dann aus den Daten mit zum Beispiel einem angepassten algebraischen Rekonstruktionsalgorithmus ein Bild [Knö05]. Die rekonstruierten Bilder werden dann auf einem Monitor dargestellt.

5.2 Simulation des Röntgenmikroskops und Annahmen in dieser Arbeit

Die Simulation des Röntgenmikroskops, welches in dieser Arbeit betrachtet wird, beschränkt sich auf hinteren Teil des Röntgenmikroskops. Als Quelle einer kohärenten, monochromatischen Welle wird der Punkt, in dem die Kapillare die Strahlung sammelt, angenommen. Die Welle propagiert im Vakuum bis zu FZP, durchläuft diese und propagiert anschließend wieder im Vakuum in den Fokus der FZP. Der Durchgang der Welle durch das Objekt ist in der Simulation nicht betrachtet worden. Mit Hilfe dieser Simulation kann sowohl die Impulsantwort von FZP und MFZP als auch deren Foki simuliert werden.

6 Lösen der Helmholtz-Gleichung mit der Fourier-Transformation

In der Literatur gibt es viele unterschiedliche Möglichkeiten Differentialgleichungen zu lösen, wie zum Beispiel die Finite-Differenzen Methoden oder ein Ansatz mit der Distributionstheorie, wie in Kapitel 2 beschrieben [AU10, Goo96]. Eine andere Möglichkeit ist zum Beispiel mit der Hilfe von Integraltransformationen gegeben [Dav02, AKV93, AU10]. In diesem Kapitel wird eine Lösung für ein Anfangswertproblem der homogenen Helmholtz-Gleichung mit der Fourier-Transformation errechnet. Das Ergebnis dieses analytischen Ansatzes wird im nächsten Kapitel diskretisiert und modifiziert, um einen Algorithmus zu entwickeln, mit dem die Wellenausbreitung in homogenen und inhomogenen Medien berechnet werden kann [Ers06, Oka06]

6.1 Definitionen und Sätze

Zunächst werden einige Begriffe und Räume definiert, die für die genutzte Fourier-Transformation wichtig sind. Danach wird eine allgemeine Lösungsstrategie für partielle Differentialgleichungen mit der Fourier-Transformation gezeigt. Diese Ausführungen sind [AU10] entnommen. Mit dieser Strategie wird anschließend eine Lösung für ein Anfangswertproblem der homogenen Helmholtz-Gleichung mit asymptotischen Randbedingung errechnet.

Definition 21 (Schwartzraum)

Eine Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ heißt schnell fallend falls gilt

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} |x|^m f(x) = 0 \quad \forall m \in \mathbb{N}_0.$$

Der Raum

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) = \{f \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^n) : D^b f \text{ schnell fallend } \forall b \in \mathbb{N}_0^n\}$$

heißt Schwartzraum, seine Elemente heißen Schwartzfunktionen.

Satz 5

Der Schwartzraum ist ein Vektorraum bezüglich der punktweisen Multiplikation und punktweisen Addition, der den Raum der Grundfunktionen umfasst.

Der Schwartzraum liegt dicht in $\mathcal{L}^p(\mathbb{R}^n)$ für $1 \leq p < \infty$.

Beweis: siehe [Wer07].

Satz 6

Sei $U \subset \mathbb{R}^n$ offen und $1 \leq i \leq n$. Sei weiter $a \in \mathbb{N}$ und $a \leq k$. Dann gilt für alle $f \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^n)^k(U)$

$$\int_U \frac{\partial^a}{\partial x_i^a} f(x) dx = 0 \quad \forall x \in U.$$

Beweis: siehe [For99].

Definition 22 (Lineare Operatoren)

Seien X, Y zwei Vektorräume über dem Körper \mathbb{C}^n . Dann heißt eine Abbildung $T : X \rightarrow Y$ linearer Operator wenn für alle $x, y \in X$ und $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ die folgende Bedingung erfüllt ist

$$T(\alpha x + \beta y) = \alpha T(x) + \beta T(y).$$

Satz 7 (Eigenschaften der Fourier-Transformation)

Sei $f \in \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^n)$ und $\mathcal{F}(f)$ bezeichnet die Fourier-Transformierte von f .

- (i) Für $f \in \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^n)$ ist $\mathcal{F}(f) \in \mathcal{C}_c(\mathbb{R}^n)$. Weiter gilt $\mathcal{F} : \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathcal{C}_c(\mathbb{R}^n)$ ist ein linear stetiger Operator.
- (ii) Sei $f \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^n)^k(\mathbb{R}^n)$, $a \in \mathbb{N}_0$, $a \leq k$, und $1 \leq i \leq n$, dann gilt

$$\mathcal{F}\left(\frac{\partial^a}{\partial x_i^a} f(x)\right) = (i2\pi\omega_i)^a \mathcal{F}(f)(\omega).$$

- (iii) Sei $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ dann ist auch $\mathcal{F}(f) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$.
- (iv) Sei $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, dann ist die Fourier-Transformation eine Bijektion auf dem $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ und es gilt

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\mathcal{F}(f))(x) &= f(-x) \quad \forall x \in \mathbb{R}^n \\ \Leftrightarrow \mathcal{F}^4(f)(x) &= f(x) \quad \forall x \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

wobei \mathcal{F}^4 die 4-fache Hintereinanderausführung der Fourier-Transformation meint.

Für die Beweise der Eigenschaften Eigenschaft (i), Eigenschaft (iii) und Eigenschaft (iv) wird auf [Wer07] verwiesen. Der Beweis der Eigenschaft (ii) wird hier explizit gezeigt, da diese Eigenschaft elementar für die Anwendung der Fourier-Transformation im Bereich partieller Differentialgleichungen ist.

Beweis. Beweis zu Eigenschaft (ii)

Der Beweis erfolgt über partielle Integration. Es gilt

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}\left(\frac{\partial^a}{\partial x_i^a} f(x)\right)(\omega) &= \int_{\mathbb{R}^n} \frac{\partial^a}{\partial x_i^a} [f(x)e^{-i2\pi x\omega}] dx \\
&= \int_{\mathbb{R}^n} \frac{\partial^a}{\partial x_i^a} f(x)e^{-i2\pi x\omega} dx + (-1)^a \int_{\mathbb{R}^n} f(x) \frac{\partial^a}{\partial x_i^a} e^{-i2\pi x\omega} dx \\
&^* = (-1)^a (-i2\pi)^a \omega_i^a \int_{\mathbb{R}^n} f(x)e^{-i2\pi x\omega} dx \\
&= (-1)^a (-i2\pi\omega_i)^a \mathcal{F}(f)(\omega).
\end{aligned}$$

* Das erste Integral verschwindet nach Satz 6. □

Die Fourier-Transformation wandelt Ableitungen in Multiplikationen um. Somit können mit der Fourier-Transformation partielle Differentialgleichungen auf gewöhnliche reduziert werden, die mit den entsprechenden Methoden gelöst werden können [AU10].

Satz 8 (Inverse Fourier-Transformation)

Sei $f \in \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^n)$ eine Funktion derart, dass auch $\mathcal{F}(f) \in \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^n)$ ist. Dann gilt nach evtl. Abänderungen auf einer Nullmenge $f \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^n)_0(\mathbb{R}^n)$ und

$$f(x) = \int_{\mathbb{R}^n} \mathcal{F}(f)(\omega) e^{i2\pi x\omega} d\omega \quad \forall x \in \mathbb{R}^n. \quad (6.3)$$

Die durch das Integral definierte Funktion heißt dann inverse Fourier-Transformation und wird im Verlauf dieser Arbeit mit \mathcal{F}^{-1} bezeichnet.

Beweis: siehe [Wer07].

Die Fourier-Transformation ist erweiterbar auf den Raum der quadrat-integrierbaren Funktionen $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ [Wer07]. Einige wichtige Eigenschaften lassen sich für die Fourier-Transformation im $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ zeigen, die dann insbesondere auch für die Fourier-Transformation im $\mathcal{L}^1(\mathbb{R}^n)$ gelten, wie zum Beispiel der Satz von Plancherel [Wer07].

Satz 9 (Satz von Plancherel)

Es gibt einen eindeutig bestimmten Isomorphismus

$$T : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$$

mit den folgenden Eigenschaften:

- i) $\|Tf\|_{\mathcal{L}^2} = \|f\|_{\mathcal{L}^2}$ für alle $f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$
- ii) $Tf = \mathcal{F}(f)$ für alle $f \in \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^n) \cap \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$
- iii) $T^{-1}g = \mathcal{F}^{-1}$ für alle $g \in \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^n) \cap \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$

Beweis: siehe [For99].

Der Satz von Plancherel sagt aus, dass die Fourier-Transformation eine lineare, stetige Abbildung ist und auch die inverse Fourier-Transformation wieder stetig ist. Durch die Eigenschaft (i) ist sogar gezeigt, dass die Fourier-Transformation die Metrik der Räume erhält, was auch für die Umkehrabbildung gilt, siehe [For99].

6.2 Lösungsstrategie für partielle Differentialgleichungen mittels der Fourier-Transformation

Wie in Satz 3 Eigenschaft (ii) gezeigt, können mittels der Fourier-Transformation die Ableitungen in eine Multiplikation transformiert werden, siehe [Wer07]. Somit ist es mit der Fourier-Transformation möglich partielle Differentialgleichungen auf gewöhnliche zu reduzieren, die dann mit den üblichen Ansätzen gelöst werden können [AU10].

Allerdings können keine allgemein gültigen Aussagen über die Eindeutigkeit oder die stetige Abhängigkeit von den Daten getroffen werden [AU10]. Diese müssen für jeden Einzelfall nachgewiesen werden. Die Methode dient nur dazu eine Formel für eine Lösung einer konkreten Differentialgleichung zu bestimmen[AU10].

Eine Lösungsstrategie kann nach [AU10] wie folgt aussehen:

- I. Transformation der partiellen Differentialgleichung in eine gewöhnliche Differentialgleichung
- II. Transformation der Anfangsbedingungen und Randbedingungen
- III. Lösen des Anfangswertproblems der gewöhnlichen Differentialgleichung mit den aus der Literatur bekannten Ansätzen
- IV. Rücktransformation der Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichung liefert eine Lösung der partiellen Differentialgleichung

6.2.1 Anwendung der Lösungsstrategie auf die Helmholtz-Gleichung

Es wird ein Anfangsrandwertproblem der Helmholtz-Gleichung betrachtet. Sei $u : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ eine Funktion, die mindestens zweimal stetig differenzierbar ist, $a \in \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^2)$ eine Funktion derart, dass $\mathcal{F}(a) \in \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^2)$ ist und $k \in \mathbb{R}$ die Wellenzahl. Sei $x^b = x_1^{b_1} x_2^{b_2} x_3^{b_3}$ für $a \in \mathbb{N}_0^3$. Dann ist das Anfangsrandwertproblem für die Helmholtz-Gleichung mit asymptotischen Randbedingungen definiert durch

$$[\nabla^2 + k^2]u = 0 \quad (6.4a)$$

$$u(y_1, y_2, 0) = a(y_1, y_2, 0) \quad y_1, y_2 \in \mathbb{R} \quad (6.4b)$$

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} x^b u(x) = 0 \quad \forall b \in \mathbb{N}_0^3. \quad (6.4c)$$

Die Bedingung (6.4c) sagt aus, dass die Funktion und all ihre Ableitungen im Unendlichen verschwinden. Es wird also angenommen, dass die Funktion eine Schwartzfunktion ist und damit ist sie insbesondere eine Funktion des Raumes $\mathcal{L}^1(\mathbb{R}^3)$. Es folgt somit, dass die Fourier-Transformation angewendet werden kann. Die Fourier-Transformierte von u werde in weiteren mit U bezeichnet und die Fourier-Transformierte von a werden mit A . Unter der Annahme, dass sich u in x_3 -Richtung ausbreitet, lässt sich die Fourier-Transformation in x_1, x_2 -Richtung anwenden. Die Anwendung der Fourier-Transformation in unterschiedliche Raumrichtungen ist eine Folge aus dem Satz von Fubini [Wer07]. Es gilt

$$U = \mathcal{F}(u) = \int_{\mathbb{R}^2} u(x_1, x_2, x_3) e^{-i2\pi(x_1\omega_1 + x_2\omega_2)} dx_1 dx_2.$$

I. Transformation der Differentialgleichung

Die Helmholtz-Gleichung (6.4a) ergibt sich durch die Anwendung der Fourier-Transformation zu

$$\frac{\partial^2}{\partial x_3^2} U - 4\pi^2 \omega_1^2 U - 4\pi^2 \omega_2^2 U + k^2 U = 0 \quad (6.5)$$

Die Darstellung U von u heißt in der Literatur **angular spectrum** von u [Ers06]. Seien $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}$ dann ist mit der Funktion $d : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ Funktion für die gilt

$$d(x) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} U(\alpha_1, \alpha_2, x) + (k^2 - 4\pi^2(\alpha_1^2 + \alpha_2^2))U(\alpha_1, \alpha_2, x) = 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}. \quad (6.6)$$

eine gewöhnliche homogene Differentialgleichung 2.Ordnung definiert.

II. Transformation der Anfangsbedingungen und Randbedingungen

Mit α_1, α_2 werden die entsprechenden Koordinaten nach der Fourier-Transformation

bezeichnet. Es gilt weiter, dass die Funktion $a \in \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^3)$ ist. Somit kann auch hier die Fourier- Transformation in x_1, x_2 -Richtung angewendet werden. Es ergibt sich

$$U(\alpha_1, \alpha_2, 0) = A(\alpha_1, \alpha_2, 0) \quad (6.7)$$

als Anfangsbedingung.

III. Lösen des Anfangswertproblems

Das Lösen der transformierten Helmholtz-Gleichung erfolgt über einen in der Literatur üblichen Ansatz mit Hilfe von charakteristischen Polynomen, siehe dazu zum Beispiel [Wer06]. Die dafür benötigten Sätze werden an dieser Stelle noch einmal ohne Beweis angeführt. Für die Beweise und eine ausführliche Diskussion gewöhnlicher Differentialgleichungen sei an dieser Stelle auf [Wer06, For08] verwiesen. Die durch die Fourier-Transformation entstandene gewöhnliche Differentialgleichung ist eine lineare homogene Differentialgleichung 2.Ordnung.

Satz 10 (Charakteristisches Polynom)

Seien $b_0, b_1 \dots b_{l-1} \in \mathbb{C}$, sei $I \subset \mathbb{R}$ ein Intervall und $y : I \rightarrow \mathbb{C}$ eine l -mal differenzierbare Funktion. Weiter sei mit y^l die l -te Ableitung bezeichnet. Dann ist

$$y^l + b_{l-1}y^{l-1} + \dots + b_0y = 0 \quad (6.8)$$

eine lineare homogene gewöhnliche Differentialordnung l -ter Ordnung. Mit dem Ansatz, dass die Funktion $y(t) = Ce^{\mu t} \forall t \in \mathbb{R}$ ist, kann die gewöhnliche Differentialgleichung in eine algebraische Gleichung überführt werden. Die algebraische Gleichung heißt charakteristisches Polynom $P : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ und ist definiert als

$$P(s) := s^l + b_{l-1}s^{l-1} + \dots + b_0s.$$

Beweis: siehe [Wer06].

Satz 11 (Nullstellen des charakteristischen Polynoms)

Ist μ eine l -fache Nullstelle von P , so sind

$$e^{\mu t}, te^{\mu t}, \dots, t^{l-1}e^{\mu t} \quad (6.9)$$

Lösungen der linearen, homogenen, gewöhnlichen Differentialgleichung (6.8).

Beweis: siehe [Wer06].

Nach Satz 10 folgt, dass der charakteristische Polynom für die gewöhnliche Differentialgleichung (6.6) folgende Gestalt hat

$$P(s) = s^2 + (k^2 - 4\pi^2(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)).$$

Die Nullstellen dieses charakteristischen Polynoms sind

$$\mu_{1,2} = \pm i \sqrt{k^2 - 4\pi^2(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)}.$$

Die Anfangsbedingung liefert, dass $C = A(\alpha_1, \alpha_2, 0)$ ist. Somit ergeben sich folgende Lösungen des Anfangswertproblems

$$\begin{aligned} d_1(x) &= A(\alpha_1, \alpha_2, 0) e^{ix \sqrt{k^2 - 4\pi^2(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)}} \quad \forall x \in \mathbb{R} \\ d_2(x) &= A(\alpha_1, \alpha_2, 0) e^{-ix \sqrt{k^2 - 4\pi^2(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)}} \quad \forall x \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

Nach [Wer06] kann gezeigt werden, dass die Eindeutigkeit des hier gelösten Anfangswertproblems für die gewöhnliche Differentialgleichung im Fourier-Raum gilt. Da die Lösung jedoch noch zurücktransformiert werden muss, um eine Lösung für die partielle Differentialgleichung zu bekommen, ist die Eindeutigkeit im Ortsraum nicht klar und muss explizit gezeigt werden [AU10]. Auf eine Untersuchung der Eindeutigkeit wird in dieser Arbeit verzichtet. Die Lösung d_2 wird im weiteren Verlauf der Arbeit nicht weiter beachtet. Im Weiteren sei $\mu = i \sqrt{k^2 - 4\pi^2(\omega_1^2 + \omega_2^2)}$. Die Lösung d_1 der gewöhnlichen Differentialgleichung (6.6) wird nun umbenannt zu

$$U(\omega_1, \omega_2, x_3) = A(\omega_1, \omega_2, 0) e^{ix_3 \mu} \quad \forall (\omega_1, \omega_2, x_3) \in \mathbb{R}^3. \quad (6.11)$$

IV. Rücktransformation

Die Rücktransformation wird mit der Satz 8 bekannten inverse Fourier- Transformation erfolgen. Dafür muss die Funktion $U \in \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^3)$ sein. Das ist der Fall, weil die Funktion $e^{ix_3 \mu}$ eine Schwartzfunktion ist, denn für $k^2 \leq 4\pi^2(\omega_1^2 + \omega_2^2)$ kann die Funktion umgeschrieben werden zu $e^{-x_3 \mu}$ und es ist erkennbar, dass die Funktion im Unendlichen verschwindet genauso wie all ihre Ableitungen. Damit genügt die Funktion $e^{ix_3 \mu}$ der Bedingung (21). Weiter gilt, dass der Schwartzraum $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ dicht im Raum $\mathcal{L}^1(\mathbb{R}^n)$ liegt, wie in Satz 5 gezeigt. Der Raum $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ ist bezüglich der punkweisen Multiplikation ein Vektorraum und es folgt, dass das Produkt $A(\omega_1, \omega_2) e^{ix_3 \mu}$ auch wieder im Raum $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ liegt. Somit sind die Voraussetzungen aus Satz 8 erfüllt und das Integral existiert.

Die inverse Fourier-Transformation wird in die zur Hintransformation entsprechenden Richtungen angewendet. Die Rücktransformation ergibt sich somit zu

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^{-1}(U) &= \int_{\mathbb{R}^2} U(\omega_1, \omega_2, x_3) e^{i2\pi(x_1 \omega_1 + x_2 \omega_2)} d\omega_1 d\omega_2 \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} A(\omega_1, \omega_2, 0) e^{ix_3 \sqrt{k^2 - 4\pi^2(\omega_1^2 + \omega_2^2)}} e^{i2\pi(x_1 \omega_1 + x_2 \omega_2)} d\omega_1 d\omega_2. \end{aligned} \quad (6.12)$$

6.2.2 Diskussion der Lösung

Die Lösung der Helmholtz-Gleichung ist im Allgemeinen eine Wellenfunktion [Ers06], die sich aus unterschiedlichen Anteilen zusammensetzt. Diese Anteile werden anhand der hier gezeigten Lösung abschließend diskutiert.

Falls $k^2 > 4\pi^2(\omega_1^2 + \omega_2^2)$ ist, ist μ reell und alle Komponenten des angular spectrum werden mit einem Phasenfaktor modifiziert. Komponenten von ebenen Wellen, die dieser Bedingung genügen, heißen **homogene Wellen** [Ers06].

Mit $k^2 < 4\pi^2(\omega_1^2 + \omega_2^2)$ gilt, μ ist imaginär und vereinfacht sich somit zu $\mu = i\sqrt{4\pi^2(\omega_1^2 + \omega_2^2) - k^2}$. Die Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichung wird dann zu $A(\omega_1, \omega_2, 0)e^{-\mu x_3}$. Dieses Ergebnis zeigt, dass die Amplituden ebener Wellen, die dieser Bedingung genügen, sehr stark bei der Ausbreitung in x_3 -Richtung gedämpft werden. Diese Wellen werden **evaneszente Wellen** genannt [Ers06].

Ist die Gleichheit erfüllt, werden die Amplituden nicht verändert. Komponenten, die diese Bedingung erfüllen, gehören zu ebenen Wellen, die sich senkrecht zur x_3 -Achse ausbreiten [Ers06].

Die Funktion $H : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ mit der die Propagation der Welle nach der Fourier-Transformation ausgerechnet wird

$$H(\omega_1, \omega_2, x_3) = e^{ix_3\sqrt{k^2 - 4\pi^2(\omega_1^2 + \omega_2^2)}} \quad \forall \omega_1, \omega_2, x_3 \in \mathbb{R}^3$$

wird im Weiteren Propagator genannt.

In diesem Kapitel wurde gezeigt, wie eine Lösung für partielle Differentialgleichungen mit der Fourier-Transformation gefunden werden kann. Die Strategie wurde im Anschluss auf die homogene Helmholtz-Gleichung angewendet. Das damit erzielte Ergebnis wird im nächsten Kapitel dazu genutzt einen Algorithmus zu entwickeln, mit dem die Wellenausbreitung in homogenen Medien und inhomogenen Medien berechnet werden kann.

7 Herleitung des Algorithmus zur Darstellung von Wellenausbreitung

Im Folgenden wird das Ergebnis aus dem vorigen Kapitel diskretisiert und ein Algorithmus angegeben, mit dem die Propagation von Wellenfronten in unterschiedliche Medien berechnet werden kann. Dieser Algorithmus heißt in der Literatur **Beam Propagation Method** [Ers06]. Zunächst erfolgt eine Diskretisierung in die Ausbreitungsrichtung der Welle. Um die Wellenausbreitung in inhomogenen Medien darstellen zu können, wird der Propagator aufgeteilt. Dieser daraus entstehende Fehler wird mit der Baker-Campbell-Hausdorff Formel für nicht kommutative Operatoren abgeschätzt [Oka06]. Im Anschluss erfolgt die Diskretisierung in die anderen beiden Raumrichtungen mit der diskreten Fourier-Transformation [Ers06].

7.1 Diskretisierung in die Ausbreitungsrichtung

Eine Möglichkeit die Wellenausbreitung für inhomogene Medien zu simulieren, besteht darin die inhomogene Helmholtz-Gleichung zunächst in die Ausbreitungsrichtung der Welle diskretisiert. Es wird angenommen, dass die Welle in die x_3 Richtung propagiert. Die Raumrichtung, in die sich die Welle ausbreitet, wird im Weiteren mit z gekennzeichnet. Von nun an sei X eine kompakte Teilmenge des \mathbb{R}^3 , also eine Teilmenge, die abgeschlossen und beschränkt ist. Alle im Weiteren betrachteten Funktionen seien Funktionen für die gilt $f : X \rightarrow \mathbb{C}$.

Es wird angenommen, dass sich der Brechungsindex auf einem kleinen Stück h in z -Richtung kaum ändert [Ers06]. Somit kann der Brechungsindex n auf dem Stück z bis $z + h$ approximiert werden mit dem durchschnittlichen Brechungsindex n_{x_1, x_2} für die x_1, x_2 Ebene ist. Eingesetzt in die Helmholtz-Gleichung liefert dies für das Stück mit der Breite h

$$\left[\nabla^2 + n_{x_1, x_2}^2 k^2 \right] u(x) = 0,$$

wobei alle Terme mit $\mathcal{O}(h)$ vernachlässigt worden sind. Im weiteren wird kn_{x_1, x_2} mit \bar{k} bezeichnet. Um die Ausbreitung der Welle durch den nun homogenen Anteil des Mediums zu berechnen, wird der durchschnittliche Brechungsindex genutzt. Die inhomogene Helmholtz-Gleichung kann so durch die homogene approximiert werden. Nach [Ers06] wird μ mit 1 erweitert, sodass die schnell variierenden z -Anteile ausgeschlossen werden. Somit ergibt sich μ zu

$$\begin{aligned}\mu &= \sqrt{\bar{k}^2 - 4\pi^2(\omega_1^2 + \omega_2^2)} \frac{\bar{k} + \sqrt{\bar{k}^2 - 4\pi^2(\omega_1^2 + \omega_2^2)}}{\bar{k} + \sqrt{\bar{k}^2 - 4\pi^2(\omega_1^2 + \omega_2^2)}} \\ &= \bar{k} - \frac{4\pi^2(\omega_1^2 + \omega_2^2)}{\bar{k} + \sqrt{\bar{k}^2 - 4\pi^2(\omega_1^2 + \omega_2^2)}}.\end{aligned}$$

Damit ergibt sich die Formel (6.12) zu

$$u(x_1, x_2, z + h) = \mathcal{F}^{-1}\left(\mathcal{F}(u(x_1, x_2, z))e^{-i(z+h)\left[\bar{k} - \frac{4\pi^2(\omega_1^2 + \omega_2^2)}{\bar{k} + \sqrt{\bar{k}^2 - 4\pi^2(\omega_1^2 + \omega_2^2)}}\right]}\right).$$

Der nur noch von \bar{k} abhängige Anteil der Exponentialfunktion ist unabhängig von der Fourier-Transformation in x_1, x_2 Richtung und kann somit aus der Fourier-Transformation herausgezogen werden. Damit kann die Formel (7.1) umgeschrieben werden zu

$$u(x_1, x_2, z + h) = \mathcal{F}^{-1}\left(\mathcal{F}(u(x_1, x_2, z))e^{-i(z+h)\frac{4\pi^2(\omega_1^2 + \omega_2^2)}{\bar{k} + \sqrt{\bar{k}^2 - 4\pi^2(\omega_1^2 + \omega_2^2)}}}\right)e^{i(z+h)\bar{k}}. \quad (7.2)$$

Um den Durchgang durch ein inhomogenes Medium darzustellen, muss eine Phasenkorrektur der komplexen Amplitude von u durchgeführt werden, siehe [Ers06]. Diese Korrektur wird in der Literatur auch **virtueller Linsen-Effekt** genannt [Ers06]. Da die Ausbreitung im homogenen Medium mit dem gemittelten Brechungsindex \bar{k} gerechnet wird, muss dieser wieder subtrahiert werden. Es wird somit nach [Ers06]

$$G(z + h) = e^{i(z+h)kn(x_1, x_2, z) - \bar{k}}$$

als Phasenkorrekturterm gewählt. Die Formel (6.12) mit einer Phasenkorrektur kann nun angegeben werden mit

$$u(x_1, x_2, z + h) = \mathcal{F}^{-1}\left(\mathcal{F}(u(x_1, x_2, z))e^{-i(z+h)\frac{4\pi^2(\omega_1^2 + \omega_2^2)}{\bar{k} + \sqrt{\bar{k}^2 - 4\pi^2(\omega_1^2 + \omega_2^2)}}}\right)e^{i(z+h)(kn(x_1, x_2, z) - \bar{k})}. \quad (7.3)$$

Bei der Berechnung für die Wellenausbreitung im homogenen Medium kann der nur von \bar{k} abhängige Anteil der Exponentialfunktion aus der Fourier-Transformation herausgezogen werden. Dies ist möglich, weil der durchschnittliche Brechungsindex als unabhängig von x_1, x_2 angenommen wird. Dabei wird der Operator, den die Ex-

ponentialfunktion hier verkörpert, aufgeteilt und aus einer additiven Verknüpfung wird eine multiplikative. Dieses Aufteilen eines Operators wird auch Operatoren Splitting genannt [Hal03]. Eine Fehlerabschätzung des Operatoren Splittings kann mit der Baker- Campell- Hausdorff Formel für nicht kommutative Operatoren auf einem Banachraum angegeben werden. Dies ist in [Oka06] für eine andere Beam Propagation Methoden gezeigt worden.

Für diese Abschätzung werden zunächst einige Begriffe nach [Hal03] definiert und anschließend wird gezeigt, dass die beiden hier betrachteten Operatoren lineare stetige Operatoren des Banachraumes $\mathcal{L}^1(\mathbb{R}^3)$ sind.

Definition 23 (Exponential eines Operators)

Seien B, C Banachräume. Sei $X : B \rightarrow C$ ein linearer stetiger Operator, dann ist das Exponential des Operators definiert als Reihe

$$e^X = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} X^k$$

wobei die Multiplikation als eine Hintereinanderausführung und die Addition als eine punktweise Addition zu verstehen ist.

Definition 24 (Kommutator)

Seien X, Y zwei lineare Operatoren auf einem Banachraum. Dann ist der Kommutator definiert als

$$[X, Y] = XY - YX.$$

Satz 12 (Baker-Campell-Hausdorff Formel)

Seien X und Y nichtkommutative Operatoren auf einem Banachraum und $h \in \mathbb{R}$ eine nichtnegative Konstante, dann gilt

$$e^{hX} e^{hY} = e^{hX+hY+\frac{h}{2}[X,Y]+\frac{h^2}{12}[X,[X,Y]]+\frac{h^2}{12}[Y,[X,Y]]+\dots}.$$

Beweis: siehe [Hal03].

Um die Baker-Campell-Hausdorff Formel anwenden zu können, wird ein linearer stetiger Operator definiert.

Satz 13

Sei $g : X \rightarrow \mathbb{C}$ eine beschränkte, stetige Funktion und ist $f \in \mathcal{L}^1(X, \mathbb{C})$. Dann ist $T : \mathcal{L}^1(X, \mathbb{C}) \rightarrow \mathcal{L}^1(X, \mathbb{C})$ ein Operator definiert durch

$$T(f) = gf. \tag{7.4}$$

Der Operator T ist ein linearer stetiger Operator auf dem Raum $\mathcal{L}^1(X, \mathbb{C})$.

Beweis.

Linearität:

Seien $f, l \in \mathcal{L}^1(X, \mathbb{C})$ und $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. Dann gilt

$$\begin{aligned} T(\alpha f + \beta l) &= g(\alpha f + \beta l) \\ &= g\alpha f + h\beta l \\ &= \alpha g f + \beta g l \\ &= \alpha T(f) + \beta T(l). \end{aligned}$$

Stetigkeit:

Sei $f^* \in \mathcal{L}^1(X, \mathbb{C})$ eine Funktion und $f_m \in \mathcal{L}^1(X, \mathbb{C})$ eine Folge, die in der \mathcal{L}^1 -Norm gegen f^* konvergiert, sodass

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \|f_m - f^*\|_{\mathcal{L}^1(X, \mathbb{C})} = 0$$

gilt. Dann gilt weiter

$$\begin{aligned} \lim_{m \rightarrow \infty} \|T(f_m - f^*)\|_{\mathcal{L}^1(X, \mathbb{C})} &= \lim_{m \rightarrow \infty} \int_X |T(f_m(x) - f^*(x))| dx \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} \int_X |g(x)(f_m(x) - f^*(x))| dx \\ &\leq \lim_{m \rightarrow \infty} \int_X |g(x)| |(f_m(x) - f^*(x))| dx \\ &\leq \sup_{x \in X} |g(x)| \lim_{m \rightarrow \infty} \int_X |(f_m(x) - f^*(x))| dx = 0 \end{aligned}$$

□

Die Funktion n , die jedem Punkt einen Brechungsindex zuordnet, ist in diesem Fall stetig, da jedem Punkt eines Medium ein Brechungsindex zugeordnet werden kann. Weiter ist der Brechungsindex beschränkt, weil der Brechungsindex an das Material und die Wellenlänge der Welle, die das Material durchläuft, geknüpft ist [Sch99].

Die Funktion μ ist ebenfalls stetig. Sie ist auch beschränkt, weil jede stetige Funktion, die aus einem kompakten Intervall eines metrischen Raumes in einen metrischen Raum abbildet, wieder beschränkt ist [AE98].

Es lässt sich nun die Baker-Campell-Hausdorff Formel anwenden, um den Fehler, der durch das Aufteilen der Operatoren entstanden ist, zu berechnen. Wie schon in [Oka06] gezeigt, gilt nun für Satz 12 mit einer Schrittweite h

$$e^{hT+hG} = e^{hT} e^{hG} \mathcal{O}(h^2). \quad (7.7)$$

Durch die Aufteilung der Operatoren entsteht also ein quadratischer Fehler in Abhängigkeit der Schrittlänge h .

7.2 Diskretisierung in die Nichtausbreitungsrichtungen

Um eine Implementierung zu realisieren, werden im Folgenden ausschließlich diskrete Ausschnitte von Wellenfronten u betrachtet, die in Matrixform notiert werden. Das Intervall $I = [x_{min}, x_{max}] \times [y_{min}, y_{max}]$ ist der Bereich, in dem die Wellenfront betrachtet wird. Die Wellenfront wird an $N \in \mathbb{N}$ äquidistanten Punkten $\in I$ in die Richtungen, in die auch die Fourier-Transformation ausgeführt wird, abgetastet. Für das betrachtete Intervall gelte $x_{min} = y_{min}$ und $x_{max} = y_{max}$. Somit kann die Distanz zwischen den Abtastpunkten angegeben werden mit $\Delta x = \frac{x_{max} - x_{min}}{N}$. Weiter seien $a, b, l, m \in \mathbb{N}$ aus der Menge $\{-\lfloor \frac{N}{2} \rfloor, \dots, \lfloor \frac{N-1}{2} \rfloor\}$.

Die diskrete Wellenfront u kann in Matrixform somit angegeben werden mit

$$\begin{bmatrix} u(\lfloor -\frac{N}{2} \rfloor \Delta x, \lfloor -\frac{N}{2} \rfloor \Delta x) & \cdots & u(\lfloor -\frac{N}{2} \rfloor \Delta x, \lfloor \frac{N-1}{2} \rfloor \Delta x) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u(\lfloor \frac{N-1}{2} \rfloor \Delta x, \lfloor -\frac{N}{2} \rfloor \Delta x) & \cdots & u(\lfloor \frac{N-1}{2} \rfloor \Delta x, \lfloor \frac{N-1}{2} \rfloor \Delta x) \end{bmatrix}. \quad (7.8)$$

Die diskrete Fourier-Transformation ordnet dieser diskreten Wellenfront eine diskrete Fourier-Transformierte U zu, welche auch wieder der Größe $N \times N$ ist. Um Faltungen und andere Rechenoperationen für den diskreten Fall berechnen zu können, wird die diskrete Wellenfront periodisch fortgesetzt, sodass gilt

$$u(a, b) = u(a + N, b) = u(a, b + N) = u(a + N, b + N). \quad (7.9)$$

Genauso gilt für die Fourier-Transformierte

$$U(l, m) = U(l + N, m) = U(l, m + N) = U(l + N, m + N). \quad (7.10)$$

Diese Periodizität muss für die Faltung besonders beachtet werden, da es sonst zu fehlenden oder falschen Werten kommt [Neu12, GW02].

Es sei mit $\Delta \omega$ die Abtastrate im Fourier-Raum gegeben, dann gilt folgender Zusammenhang zwischen Orts- und Fourier-Raum

$$\frac{\Delta \omega}{2\pi} = \frac{1}{N \Delta x} \quad (7.11)$$

siehe [Buz04]. Die diskrete Formel der zweidimensionalen Fourier-Transformation kann somit angegeben werden mit

$$U(l, m) = \frac{1}{(\Delta x N)^2} \sum_{a=-\lfloor \frac{N}{2} \rfloor}^{\lfloor \frac{N-1}{2} \rfloor} \sum_{b=-\lfloor \frac{N}{2} \rfloor}^{\lfloor \frac{N-1}{2} \rfloor} u(a\Delta x, b\Delta x) e^{-i2\pi(\Delta x)^2(la/M+mb/N)}$$

wobei U die diskrete Fourier-Transformierte der diskreten Wellenfront u ist [Ers06]. Die diskrete inverse Fourier-Transformation kann angegeben werden mit

$$u(a, b) = \sum_{l=-\lfloor \frac{N}{2} \rfloor}^{\lfloor \frac{N-1}{2} \rfloor} \sum_{m=-\lfloor \frac{N}{2} \rfloor}^{\lfloor \frac{N-1}{2} \rfloor} U(l\Delta\omega, m\Delta\omega) e^{i2\pi(\Delta\omega)^2(la/M+mb/N)}.$$

7.3 Algorithmus zur Darstellung von Wellenausbreitung

Im Folgenden wird ein Algorithmus zur Darstellung von Wellenausbreitung angegeben. Mit diesem Algorithmus kann die Wellenpropagation in homogenen und in inhomogenen Medien simuliert werden. Es wird nur ein Algorithmus zur Wellenausbreitung in inhomogenen Medien angegeben, da bei dem Algorithmus zur Darstellung von Wellenausbreitung in homogenen Medien die Phasenkorrektur entfällt.

- I. Berechne U mit der diskreten Fourier-Transformation in x_1, x_2 -Richtung von der Wellenfront u am Startpunkt z .
- II. Berechne die Propagation der Wellenfront im homogenen Medium mit $U' = UH$, wobei

$$H(a, b, z) = e^{-(iz) \frac{(\Delta\omega a)^2 + (\Delta\omega b)^2}{\bar{k} + \sqrt{\bar{k}^2 - ((\Delta\omega a)^2 + (\Delta\omega b)^2)}}} \quad (7.12)$$

mit

$$\bar{k} = \frac{1}{N^2} \sum_{a=-\lfloor \frac{N}{2} \rfloor}^{\lfloor \frac{N-1}{2} \rfloor} \sum_{b=-\lfloor \frac{N}{2} \rfloor}^{\lfloor \frac{N-1}{2} \rfloor} n(a, b). \quad (7.13)$$

- III. Berechne u' durch die diskrete inverse Fourier-Transformation von U' in die entsprechenden Richtungen.
- IV. Berechne die neue Wellenfront $u(x_1, x_2, z + h) \forall x_1, x_2 \in I$ durch die Phasenkorrektur mit der Formel mit $u = u'G$, mit

$$G(z + h) = e^{i(z+h)kn(x_1, x_2, z) - \bar{k}}. \quad (7.14)$$

Für die Propagation einer Welle im homogenen Medium entfällt der 4. Schritt, da das durchlaufene Medium konstant ist und somit $kn(x_1, x_2, z) - \bar{k} = 0$ ist.

Anmerkungen zum Algorithmus

Für den hier vorgestellten Algorithmus wird angenommen, dass die Funktion n hinreichend glatt ist [Ers06].

Eine physikalische Interpretation liefert, dass die im Fourier-Raum gemachten Berechnungen die Beugung einer Welle und die nachfolgende Multiplikation im Ortsraum die Brechung einer Welle widerspiegeln [Oka06]. Der hier vorgestellte Algorithmus ist einer von vielen in der Literatur. Andere Algorithmen lassen sich zum Beispiel unter anderen Annahmen herleiten oder durch eine andere Formulierung des Anfangsrandwertproblems [Ers06].

Der Algorithmus kann iterativ angewendet werden, da um die Fourier-Transformation ein weiteres Mal anwenden zu können, die inverse Fourier-Transformation von UH wieder in $\mathcal{L}^1(\mathbb{R}^3)$ sein muss. Da eingangs in der Formulierung des Anfangsrandwertproblems der Helmholtz-Gleichung gefordert wurde, dass die Wellenfront u eine Schwartzfunktion sein muss und die Fourier-Transformation eine Bijektion auf dem Schwartzraum ist, kann der Algorithmus mehrfach angewendet werden.

Abtastung

Werden die diskreten Wellenfronten mit einer zu niedrigen Rate abgetastet, kommt es zu sogenannte Aliasing-Effekten oder auch Aliasing. Da die diskreten Wellenfronten hier auf kompakten Intervallen betrachtet werden, sind die diese auch bandbegrenzt. Es muss das Shannon Abtastungstheorem angewendet werden, um sicherzustellen, dass kein Aliasing entsteht. Das Shannon Abtastungstheorem besagt:

Ein Signal lässt sich wieder vollständig reproduzieren, wenn die Funktion mindestens zweimal mit der höchsten Frequenz abgetastet worden ist [GW02].

Zero Padding

Wie in Satz 3 gesehen, entspricht die Faltung im Ortsraum einer Multiplikation im Fourier-Raum und genauso entspricht eine Faltung im Fourier-Raum einer Multiplikation im Ortsraum. Bei der Multiplikation im Fourier-Raum, wie es bei der hier vorgestellten Beam Propagation Method der Fall ist, muss die Periodizität, welche

ein Nebenprodukt der Definition der diskreten Fourier-Transformation ist, besonders behandelt werden [GW02].

Um diese Faltung korrekt ausrechnen zu können, ist das sogenannte Zeros Padding notwendig. Grund hierfür ist, dass diskrete bandbegrenzte Funktionen im Fourier-Raum kontinuierlich fortgesetzt werden, wie in (7.10) gezeigt, und es somit bei Rechenoperationen im Fourier-Raum zu Überschneidungen kommen kann. Um dies zu verhindern, werden die diskreten Funktionen im Fourier-Raum mit Nullen umgeben. Die Größe des zu wählenden Padding ist dabei abhängig von den beiden Funktionen, die miteinander gefaltet werden. Die Faltung kann gesehen werden, wie ein Überschieben der beiden Funktionen. Die diskrete Faltungsformel verdeutlicht dies. Seien $f(a, b) : \mathbb{N}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ eine Funktion und $h(a, b) : \mathbb{N}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ der Faltungskern mit $a, b \in \mathbb{N}$ $0 \leq a, b \leq M$, $0 \leq l, m \leq N$, dann ist die diskrete Faltung definiert mit

$$f(a, b) \star h(a, b) = \frac{1}{MN} \sum_{l=0}^{M-1} \sum_{m=0}^{N-1} f(a, b) h(a-l, b-m). \quad (7.15)$$

Durch die Periodizität kommt es nun zu sogenannten **Wraparound-Fehlern**, da einige Funktionswerte mehrfach mit in das Faltungsergebnis einbezogen werden, sobald die Funktionen nicht mehr exakt aufeinander liegen. Die Funktion f muss also in der Größe des Faltungskerns h mit Nullen umgeben werden und der Faltungskern entsprechend mit der Größe der Funktion.

Da die in dieser Arbeit betrachteten Wellenfronten rechteckig sind und die Faltung als eine Multiplikation im Fourier-Raum implementiert ist, ist das Padding für die Wellenfront und den Faltungskern gleich groß und kann angegeben werden mit

$$f_{pad}(l, m) = \begin{cases} f(a, b) & \text{für } N \leq a, b \leq 2N \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (7.16)$$

mit $0 \leq l, m \leq 3N$.

In diesem Kapitel ist gezeigt worden, wie ein Algorithmus zur Wellenausbreitung in homogenen und inhomogenen Medien aussehen kann. Es ist aufgezeigt worden, welche Fehler gemacht werden können und was gemacht werden muss, um diese zu verhindern. Der hier vorgestellte Algorithmus zur Wellenausbreitung ist von mir im Zuge dieser Arbeit in Matlab (Version 2010b) so wie er hier vorgestellt worden ist, implementiert worden.

Es sei hier an dieser Stelle noch auf den reziproken Zusammenhang von Orts- und Fourier-Raum hingewiesen. Dieser ist besonders wichtig, da der Propagator im Fourier-Raum implementiert worden ist. Der reziproke Zusammenhang ergibt bei einer Vergrößerung des Signal im Ortsbereich eine feinere Abtastung im Fourier-Raum, dabei verändern sich die Grenzen im Fourier-Raum nicht [Buz04]. Im nächs-

ten Kapitel werden einige Ergebnisse vorgestellt, die mit dem von mir implementierten Algorithmus und den hier vorgestellten Fresnel Zonen Platten (Kapitel 4) erzielt worden sind.

8 Numerische Experimente und Diskussion

Der im Kapitel 7 vorgestellte Algorithmus zur Wellenausbreitung wird anhand der in Kapitel 3 beschriebenen Fresnel Zonenplatten getestet. Zunächst wurden einige numerische Experimente durchgeführt, um die Eigenschaften des Algorithmus zu untersuchen. Als erstes ist die Propagation einer Kugelwelle im Vakuum simuliert worden und mit den entsprechenden analytischen Lösungen verglichen worden. Als zweites ist die Propagation einer Welle durch eine Fresnel Zonenplatte simuliert worden. Als drittes wurden die Foki der beiden im Kapitel 3 vorgestellten Fresnel Zonenplatten simuliert. Anschließend wurden als viertes die Abbildungseigenschaften der beiden Fresnel Zonenplatten für kleine Objekte an unterschiedlichen Positionen untersucht. Am Ende des Kapitels erfolgt eine Diskussion der durchgeführten numerischen Experimente.

8.1 Simulation der Wellenausbreitung im Vakuum

Die Propagation einer Kugelwelle ist auf einem Gitter von $x_{min} = y_{min} = -100E - 6$ $x_{max} = y_{max} = 100E - 6$ bei einer Diskretisierung von 2^{10} jeweils in x_1, x_2 Richtung berechnet worden. Die Welle hat eine Wellenlänge von $\lambda = 1E - 4$. Die Feldstärke ist einmal analytisch mit Formel (5) mit $t = 0$ für das Gitter errechnet worden und einmal mit dem in Kapitel 7 vorgestellten Algorithmus. Die Propagationsdistanzen sind unter den Bildern angegeben.

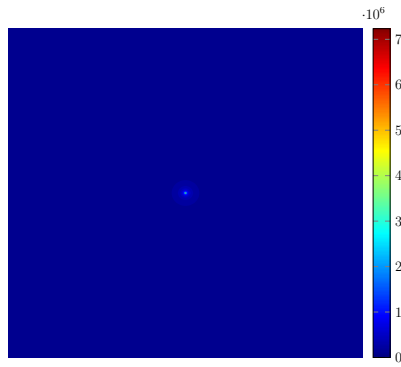


Abbildung 8.1: Ausgangswelle

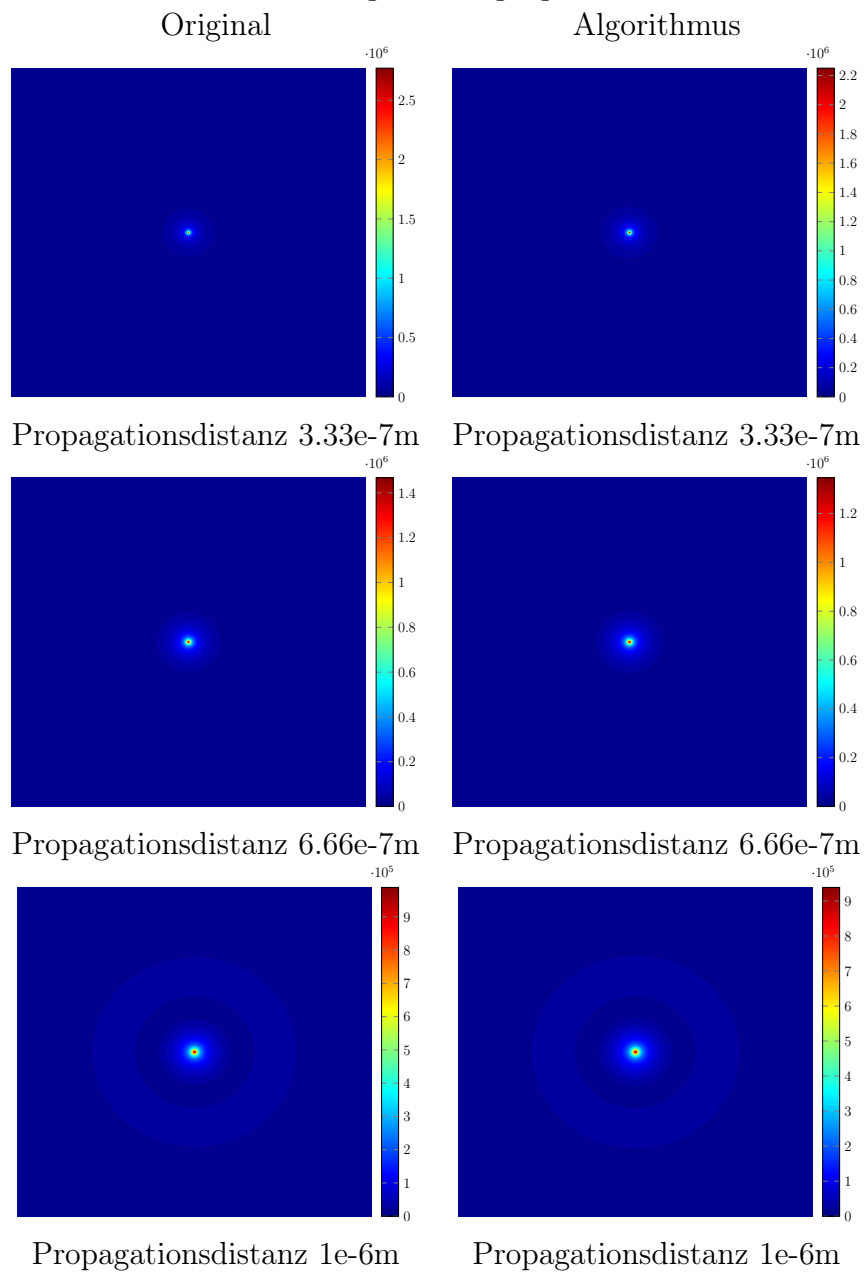


Abbildung 8.2: Betrag des Realteils der Feldstärke einer Kugelwelle links errechnet mit der direkten Formel und rechts mit dem vorgestellten Algorithmus zur Propagation von Wellen in homogenen Medien.

8.2 Simulation der Wellenausbreitung in inhomogenen Medien am Beispiel einer Fresnel Zonenplatte

Um den Algorithmus der Wellenausbreitung in inhomogenen Medien zu testen, ist eine ebene Wellenfront mit einer Amplitude von 1 durch eine Fresnel Zonenplatte propagiert worden. Die Welle der Wellenfront hat eine Wellenlänge von $1\text{E-}8\text{ m}$. Die FZP hat einen Radius von $r=2.236\text{E-}6\text{ m}$, insgesamt 20 Zonen. Die durchlässigen Zonen haben den Wert 1.5 und die undurchlässigen den Wert 0.5, und der Fokus ist bei $2.5\text{E-}5\text{ m}$. Die Wellenfront und die FZP sind beide mit 2^{12} in x_1, x_2 Richtung diskretisiert worden. Durch die FZP ist dann 10 mal propagiert worden. Die Dicke einer der 10 Schichten ist dabei auf $1\text{E-}8\text{ m}$ gesetzt worden. Dann ist eine Propagation in den Fokus erfolgt mit einem Schritt der Länge von $2.5\text{E-}5\text{ m}$.

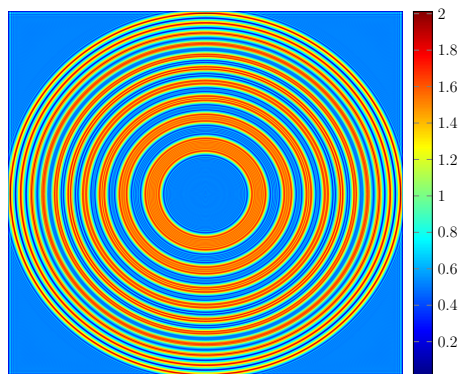


Abbildung 8.3: Feldstärke der Wellenfront nach Durchlauf durch die FZP

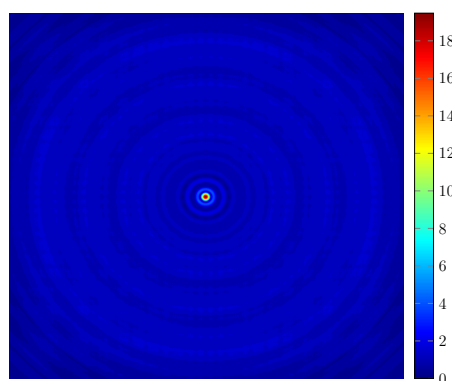


Abbildung 8.4: Feldstärke der Wellenfront in der Ebene des Brennpunkts

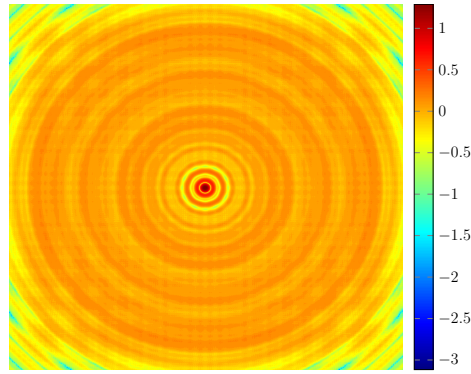


Abbildung 8.5: dekadischer Logarithmus der Feldstärke der Wellenfront in der Ebene des Brennpunkts

8.3 Berechnung der Foki der unterschiedlichen Zonenplatten

Die Foki der beiden im Beispiel in Kapitel 3 gezeigten FZP und MFZP sind berechnet worden. Um die beiden Ergebnisse miteinander vergleichen zu können, sind beide Fresnel Zonenplatten an 2^{12} äquidistanten Stellen in jeweils x_1, x_2 -Richtung abgetastet worden. Der Bereich für die MFZP ist $x_{min} = y_{min} = -1.000032877E - 4$ und $x_{max} = y_{max} = 1.000032877E - 4$. Da die FZP mit einer entsprechenden Breite des äußeren Kreisrings kleiner ist, ist der Bereich für die $x_{min} = y_{min} = -2.5E - 5$ und $x_{max} = y_{max} = 2.5E - 5$

Den Fokus einer Zonenplatte kann berechnet indem eine ebene Welle durch die Zonenplatte propagiert wird. Dies entspricht der Abbildung eines sehr weit entfernten Objekts [ST08]. Dieses Objekt wird dann im Fokus abgebildet. Mit der Annahme, dass die Zonenplatte extrem dünn ist, kann der Durchlauf der Wellenfront durch die Zonenplatte mit einer einfachen Multiplikation simuliert werden, siehe [ST08]. Dies ist eine sehr häufig gemachte Annahme, die zur Simulation von Linsen genutzt wird [ST08]. Die Wellenlänge der ebenen Welle beträgt $2.4E - 9m$. Der Brechungsindex für die undurchlässige Zone wird dabei auf 0 gesetzt und der für die durchlässige auf 1. Die Propagation der Wellenfront in den Fokus erfolgt dann unter der Annahme, dass sich die Welle nach dem Durchlauf durch die Zonenplatte im Vakuum befindet. Der Brechungsindex für das Vakuum ist 1. Die Parameter der MFZP und der FZP sind in Kapitel 4 gezeigt worden.

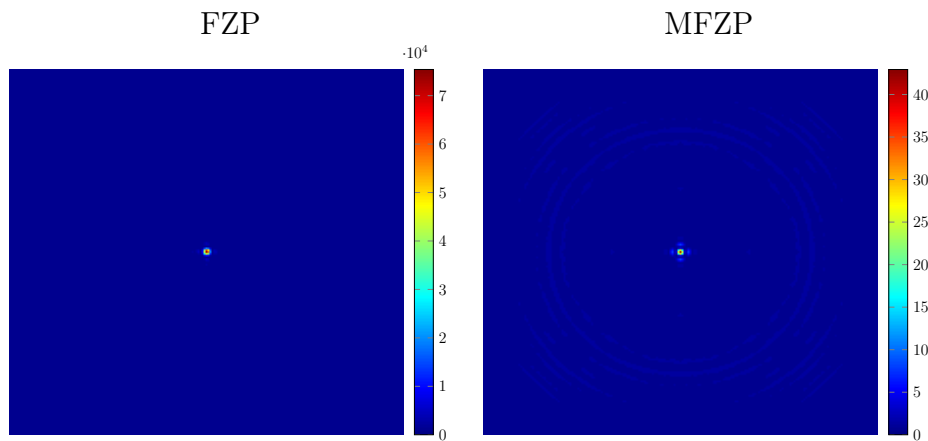


Abbildung 8.6: Intensität I/I_0 in der Ebene des Fokus der hier untersuchten Zonenplatten

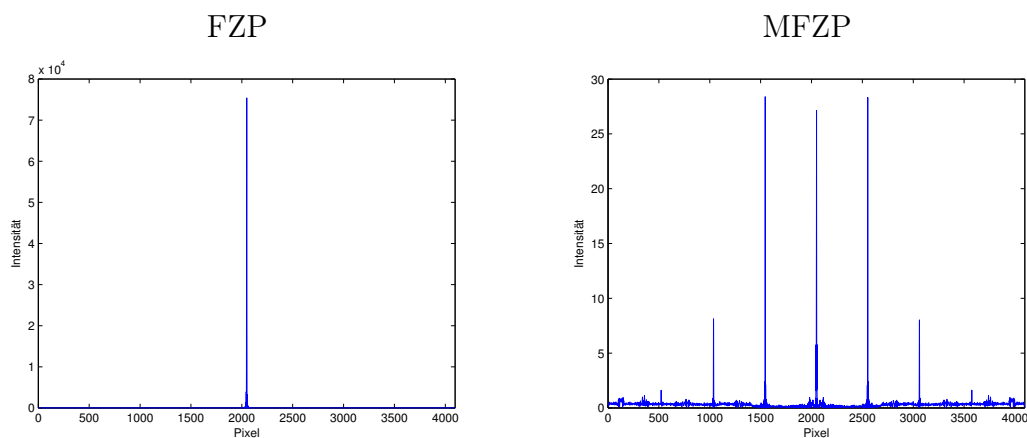


Abbildung 8.7: Intensität I/I_0 über die mittleren Pixel der Fokusebene

8.4 Abbildungseigenschaften der unterschiedlichen Zonenplatten

Um nun die Abbildungseigenschaften der hier vorgestellten Zonenplatten zu untersuchen, wird ein ähnliches Vorgehen genutzt, wie schon zur Untersuchung der Foki. Es wird angenommen, dass von einem kleinen Punkt, dessen Struktur mit der zweidimensionalen Gauß-Verteilung angegeben wird, eine Welle mit der bei der Röntgenmikroskopie üblichen Wellenlänge von 2.4nm durch die Zonenplatte propagiert. Dafür wird zunächst die Propagation der Welle im Vakuum bis kurz vor die Zonenplatte simuliert. Anschließend wird der Durchlauf durch die Zonenplatte wieder unter der Annahme, dass die Zonenplatte extrem dünn ist, mit einer Multiplikation simuliert. Es erfolgt dann eine Propagation im Vakuum der Wellen in den Fokus. Der Brechungsindex für den undurchlässigen Bereich ist 0 und der für den durchlässigen Bereich ist 1. Der Brechungsindex für das Vakuum ist auch 1. Das Objekt ist durch einen Gaußimpuls an unterschiedlichen Stellen modelliert worden. Um die Abbildungseigenschaften der FZP und der MFZP vergleichen zu

können, sind die Bereiche für beide mit $x_{min} = y_{min} = -1.000032877E - 4$ und $x_{max} = y_{max} = 1.000032877E - 4$ gewählt worden und sind an 2^{12} äquidistanten Stellen in jeweils x_1, x_2 -Richtung abgetastet worden. Es sind nur Punkte getestet worden, die sowohl von der MFZP und von der FZP abgebildet werden können. Die Parameter der MFZP und der FZP sind in Kapitel 4 gezeigt worden.

Die Struktur des Objekts wurde mit der Formel

$$p(x, y) = Ae^{-\left(\frac{(x-x_0)^2}{S_x} + \frac{(y-y_0)^2}{S_y}\right)} \quad (8.1)$$

berechnet. Dabei ist $A = 1$ und $S_x = S_y = 2.4E - 14$ gewählt worden. Die Positionen sind variiert worden. Die einzelnen Positionen sind unter den Bilder angegeben worden.

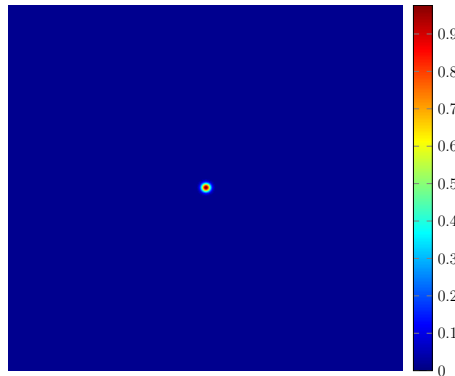


Abbildung 8.8: Struktur des Objekts, welches abgebildet wird, berechnet mit (8.1) ausgewertet im angegebenen Intervall an der Position $x_0 = 0, y_0 = 0$

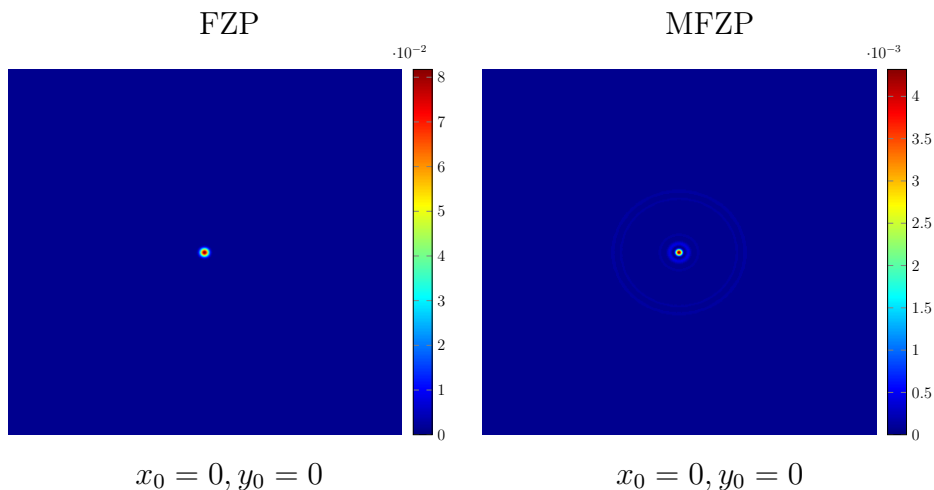


Abbildung 8.9: Intensitäten I/I_0 für Abbildungen eines kleinen Objekts an unterschiedlichen Positionen mit der MFZP und FZP. Die Bildausschnitte sind 400×400 Pixel groß und sind um das Intensitätsmaximum zentriert.

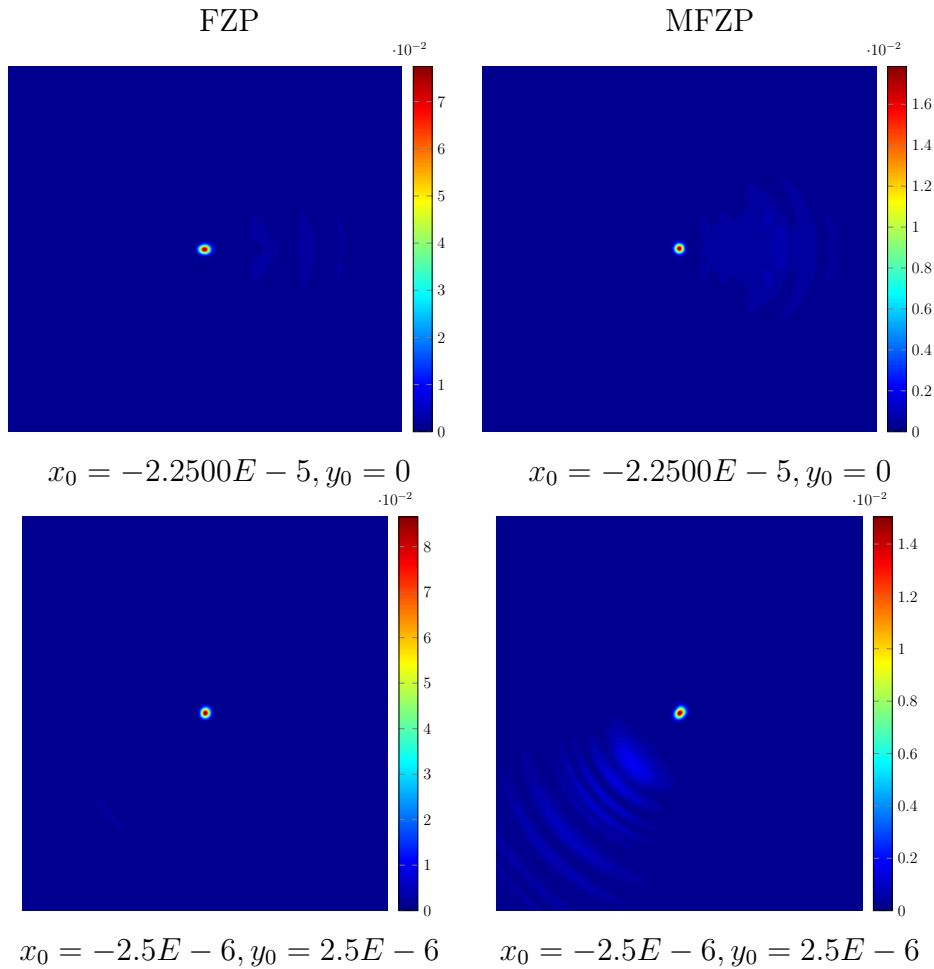


Abbildung 8.10: Intensitäten I/I_0 für Abbildungen eines kleinen Objekts an unterschiedlichen Positionen mit der MFZP und FZP. Die Bildausschnitte sind 400×400 Pixel groß und sind um das Intensitätsmaximum zentriert.

8.5 Diskussion

Die in diesem Kapitel vorgestellten numerischen Experimente werden an dieser Stelle noch einmal diskutiert.

Der Test des Algorithmus für die Wellenausbreitung im homogenen Medium ist durch die Ausbreitung einer Kugelwelle im Vakuum erfolgt. Der Test hat ergeben, dass der Algorithmus zwar die exakte Form wiedergibt, aber die Feldstärke im Vergleich zu der exakten Lösung nicht die Gleiche ist. Grund hierfür könnte sein, dass die hier betrachteten Wellenfronten an den Rändern abgeschnitten werden und somit keine Schwartz-Funktionen mehr sind. Eine genauere Untersuchung dieser Unterschiede müsste aber noch erfolgen.

Der Test des Algorithmus für die Wellenausbreitung im inhomogenen Medium ist durch eine Ausbreitung einer ebenen Welle durch eine Zonenplatte mit 10 nicht durchlässigen und 10 durchlässigen Zonen erfolgt. Die undurchlässigen Zonen haben dabei den Brechungsindex von 0.5 und die durchlässigen Zonen einen Brechungsindex

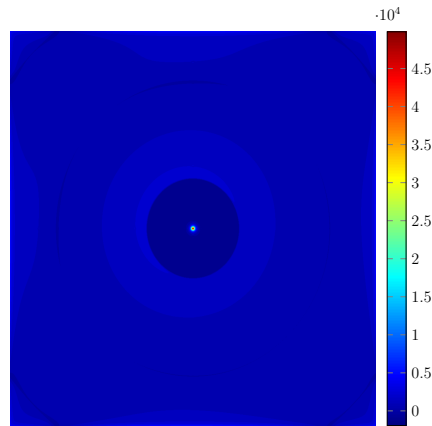


Abbildung 8.11: Differenzbild der Beträge einer Kugelwelle und einer mit dem Algorithmus propagierten Kugelwelle

von 1.5. Die Zonenplatte ist in die Ausbreitungsrichtung der Welle in 10 Schichten aufgeteilt worden, die jeweils eine Dicke von $2.4E - 9m$ haben. Die anschließende Propagation der Welle in den Fokus der Zonenplatte hat funktioniert und die ebene Welle ist gebündelt worden.

Jedoch sind hier Aliasing-Effekte zu erkennen, siehe Abbildung 8.12. Das Aliasing

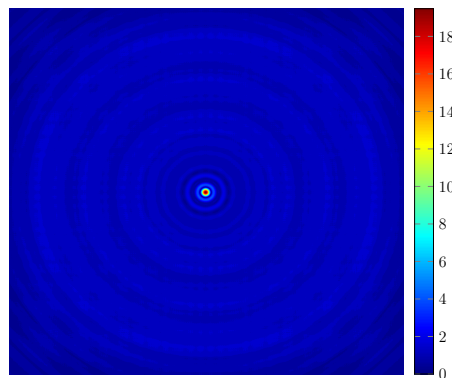


Abbildung 8.12: Aliasing-Effekte bei der Propagation einer ebenen Welle durch eine FZP mit 20 Zonen

ist durch eine höhere Abtastung der Wellenfront und der FZP zu vermeiden und eventuell durch eine andere Wahl der Brechungsindizes. Die Indizes sind für dieses Experiment so gewählt worden, um zu überprüfen, ob der Algorithmus für das vorgestellte Problem anzuwenden ist. Da eine FZP mit nur 20 Zonen simuliert wurde und bereits bei einer geringen Anzahl an Kreisringen Aliasing-Effekte erkennbar sind, muss für die Simulation einer FZP mit 500 – 10000 Kreisringen eine sehr feine Abtastung gewählt werden, die größer ist als die hier gewählte Auflösung von 2^{12} .

Die Daten aus [CJ03] für eine modifizierte Fresnel Zonenplatte sind reproduziert worden und anschließend mit dem vorgestellten Algorithmus simuliert worden. Es wurde zum Vergleich die Simulation einer entsprechenden FZP durchgeführt. Die hier vorgestellten Daten sind nicht aussagekräftig, da sie durch ein zu geringes Ab-

tasten Aliasing aufweisen. Dies lässt trotzdem den Schluss zu, dass die in [CJ03] modifizierte Fresnel Zonenplatte einen kleineren Brennpunkt produziert und somit eine bessere Ortsauflösung ermöglicht. In wie weit die anderen erkennbaren Peaks Aliasing-Effekte sind, ist nicht festzustellen. Deshalb muss, um das Ergebnis zu verifizieren, die Rechnung erneut mit einer höheren Auflösung wiederholt werden.

Es ist weiter getestet worden, wie sich die Fresnel Zonenplatte und die hier vorgestellte modifizierte Fresnel Zonenplatte kleine Objekte abbilden, die sich an unterschiedlichen Orten befinden. Auch diese Daten sind nur bedingt aussagekräftig, da auch hier eine zu geringe Abtastung zu Aliasing-Effekten geführt hat.

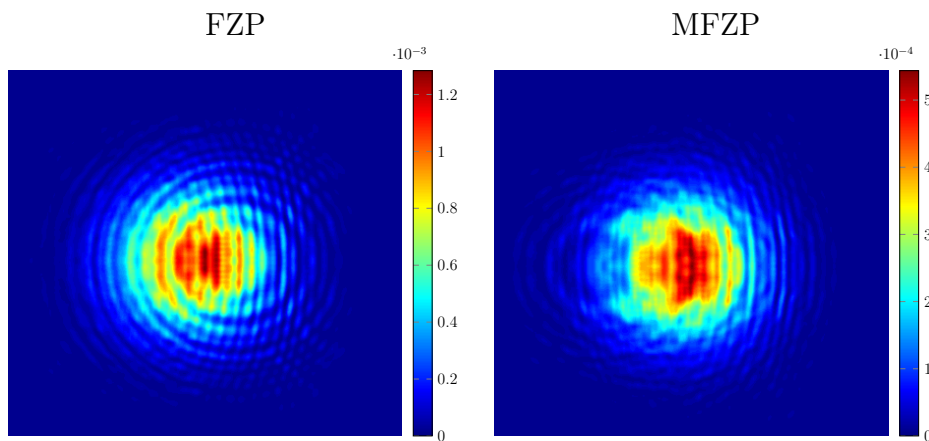


Abbildung 8.13: Aliasing Effekte für die Intensitäten I/I_0 für Abbildungen eines kleinen Objekts an der Positionen $x_0 = -1.7500E - 5, y_0 = 0$ mit der MFZP und FZP. Die Bildausschnitte sind 400×400 Pixel groß und sind um des Intensitätsmaximum zentriert.

Auch diese Aliasing-Effekte lassen sich mit mehr Abtastpunkten beseitigen. Um bessere Aussagen über die Abbildungseigenschaften zu bekommen ist eine Verifikation mit einer höheren Auflösung notwendig. Eine Verifikation des Algorithmus mit einer höheren Auflösung ist nicht erfolgt, da zu dem Zeitpunkt der Arbeit kein Computer zu Verfügung stand, mit dem die Rechnung hätte getätigt werden können.

9 Fazit und Ausblick

In dieser Arbeit ist ein mathematisches skalares Modell zur Ausbreitung von Wellen entwickelt worden. Die Grundlage dafür ist das Differentialgleichungssystem der Maxwell-Gleichungen aus denen eine vektorielle Wellengleichung entwickelt wurde. Diese Wellengleichung wurde im Anschluss in die skalare Theorie übertragen und mit einem Separationsansatz in die Helmholtz-Gleichung überführt. Ein allgemeines Vorgehen zum Lösen partieller Differentialgleichungen mit der Fourier-Transformation wurde präsentiert und auf die homogene skalare Helmholtz-Gleichung angewendet. Für die, durch dieses Vorgehen berechnete Lösung, ist die Eindeutigkeit und die stetige Abhängigkeit von den Daten noch zu zeigen. Durch eine Diskretisierung der Lösung in alle Raumrichtungen wurde ein Algorithmus vorgestellt, mit dem die Wellenausbreitung in sowohl inhomogenen als auch in homogenen Medien berechnet werden kann. Dieser Algorithmus wurde für die unterschiedlichen Medien getestet. Weiter sind die Foki und Abbildungseigenschaften einer modifizierten Fresnel Zonenplatte und einer vergleichbaren Fresnel Zonenplatte simuliert worden.

Es konnte gezeigt werden, dass sich der vorgestellte Algorithmus für die Simulation im Kontext der Röntgenmikroskopie eignet. Mit diesem Algorithmus ist es möglich asymmetrische Fehler, die bei dem Herstellungsprozess passieren können, zu untersuchen. Somit kann auch eine sich im Volumen ändernde Struktur einer Fresnel Zonenplatte untersucht werden.

Die Simulation der Abbildungseigenschaften der MFZP lassen die Annahme zu, dass die Bildgebung in der Röntgenmikroskopie mit modifizierten Fresnel Zonenplatten nicht linear ist. Auch die Simulation einer FZP mit einer ähnlichen Breite des äußeren Kreisrings, die zum Vergleich herangezogen wurde, lassen die Annahme zu, dass die Bildgebung in der Röntgenmikroskopie mit Fresnel Zonenplatten ebenfalls nicht linear ist.

Eine Simulation eines teil- oder inkohärenten Beleuchtungsmodells kann mit dem Algorithmus durchgeführt werden. Dies kann geschehen, indem mehrfach Wellen, die an unterschiedlichen Quellen entstanden sind, durch das Objekt propagiert werden. Im Anschluss werden die dadurch entstehenden Abbildungen aufaddiert und gemittelt.

Durch eine zu geringe Abtastung treten bei der Simulation der MFZP und FZP Aliasing-Effekte auf. Dadurch ist die Aussagekraft der Ergebnisse beschränkt. Eine Verifizierung der Annahmen wäre wünschenswert, da die modifizierte Zonenplatte eine Alternative zu der Fresnel Zonenplatte darzustellen scheint.

Weiter wäre eine Simulation der Abbildung von kleineren dreidimensionalen Objekten, wie sie üblicherweise in der Röntgenmikroskopie untersucht werden, interessant. Mit der vorgestellten Modellierung und dem Algorithmus können die Aufnahme von dreidimensionalen Daten simuliert werden, wodurch die in der Röntgenmikroskopie auftretenden Schwierigkeiten weiter untersucht werden können. Eventuell kann dadurch eine Idee entwickelt werden, wie eine dreidimensionale Impulsantwort aussehen könnte.

Auch eine Untersuchung von sogenannten Volumen Fresnel Zonenplatten, wie zum Beispiel in [YJA⁺07] betrachtet, deren Zusammensetzung sich im Volumen verändert, wäre interessant. So könnten Erkenntnisse gewonnen werden, in wie weit sich diese Zonenplatten für die Röntgenmikroskopie eignen.

Eine Erweiterung des Modells auf die anderen Bauteile wäre ebenfalls wünschenswert, um mit einer Simulation dieser Bauteile ihren Einfluss auf den Bildentstehungsprozess zu untersuchen.

Für die Berechnung der Foki kann die Radialsymmetrie sowohl der Fresnel Zonenplatten als auch der modifizierten Fresnel Zonenplatten genutzt werden. So kann die Berechnung der Foki effizienter und schneller erfolgen.

Literaturverzeichnis

- [AE98] AMANN, Herbert ; ESCHER, Joachim: *Analysis 1*. Birkhäuser Verlag, Scheiz, 1998
- [AHK⁺08] ARENS, T. ; HETTLICH, F. ; KARPFINGER, Ch. ; KOCKELKORN, U. ; LICHTENBERGER, K. ; STACHEL, H.: *Mathematik*. 1. Spektrum Akademischer Verlag Heidelberg, 2008
- [AKV93] ANTIMIROV, M. Y. ; KOLYSHKIN, A. A. ; VAILLANCOURT, Remi: *Applied Integral Transforms*. 2. American Mathematics Society, 1993
- [AU10] ARENDT, Wolfgang ; URBAN, Karsten: *Partielle Differenzialgleichungen*. Spektrum Akademischer Verlag Heidelberg, 2010
- [Buz04] BUZUG, Thorsten: *Einführung in die Computertomographie*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2004
- [BW70] BORN, Max ; WOLF, Emil: *Principles of Optics*. Bd. 4. Pergamon Press, 1970
- [CH37] COURANT, R. ; HILBERT, D.: *Methoden der mathematischen Physik 2. Band*. Verlag von Julius Springer, 1937
- [CJ03] CAO, Qing ; JAHNS, Jürgen: Modified Fresnel zone plates that produce sharp Gaussian focal spots. In: *J. Opt. Soc. Am. A* 20 (2003), Aug, Nr. 8, 1576–1581. <http://dx.doi.org/10.1364/JOSAA.20.001576>. – DOI 10.1364/JOSAA.20.001576
- [Dav02] DAVIES, Brian: *Integral Transforms and Their Applications*. 3. Springer London, Limited, 2002
- [Dem04] DEMTRÖDER, Wolfgang: *Experimentalphysik 2*. 3. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2004
- [Ers06] ERSOY, Okan K.: *Diffraction, Fourier Optics and Imaging*. Hoboken, NJ : Wiley, 2006
- [For99] FORSTER, Otto: *Analysis3*. Vielweg Verlagsgesellschaft mbH, Braunschweig/Wiesbaden, 1999

- [For08] FORSTER, Otto: *Analysis 2*. Vieweg Tübner, 2008
- [Gia06] GIANCOLI, Douglas C.: *Physik*. Bd. 3. Pearson Studium, 2006
- [Goo96] GOODMAN, Joseph W.: *Introduction to Fourier Optics*. 2. McGraw-Hill, 1996
- [GW02] GONZALEZ, Rafael C. ; WOODS, Richard E.: *Digital Image Processing*. Pearson Education Ltd, 2002
- [Hal03] HALL, Brian C.: *Lie Groups, Lie Algebras, and Representations: An Elementary Introduction*. 2. Springer London, Limited, 2003
- [KJH95] KIRZ, Jonas ; JACOBSEN, Chris ; HOWELLS, Malcolm: Soft X-ray microscopes and their biological application. In: *Quarterly Reviews of Biophysics* 28 (1995)
- [Knö05] KNÖCHEL, Christian: *Anwendung und Anpassung von tomographischer Verfahren in der Röntgenmikroskopie*, Uni Göttingen, Diss., 2005
- [KW00] KERNER, Hans ; WAHL, Wolf von: *Mathematik für Physiker*. Spektrum Akademischer Verlag Heidelberg, 2000
- [Neu12] NEUBAURER, André: *DFT – Diskrete Fourier-Transformation*. Springer Vieweg, 2012
- [Oka06] OKAMATO, Katsunari: *Funamentals of Optical Waveguides*. 2. Elsevier, 2006
- [SB73] SAUER, F. ; BERCKER, H.: *Theorie der Elektrizität*. B. G. Teubner Stuttgart, 1973
- [Sch99] SCHNEIDER, Gerd: *High-Resolution X-Ray Microscopy of Radiation Sensitive Material*. Georg-August-Universität Göttingen, 1999
- [Sch06] SCHRÖER, Christian: Focusing hard x rays to nanometer dimensions using Fresnel zone plates. In: *Physical Review B* 74 (2006), Nr. 3. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.74.033405>. – DOI 10.1103/PhysRevB.74.033405
- [ST08] SALEH, B.E.A. ; TEICH, M.C.: *Grundlagen der Photonik*. Wiley-VCH, 2008 (Lehrbuch Physik). – ISBN 9783527406777
- [Wer06] WERNER, Dirk: *Einführung in die höhere Analysis*. 1. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006
- [Wer07] WERNER, D.: *Funktionalanalysis*. Springer London, Limited, 2007 (Springer-Lehrbuch). – ISBN 9783540725367

[YJA⁺07] YAN, Hanfei ; JORG, Maser ; ALBERT, Macrander ; QUN, Shen ; STEFEN, Vogt ; BRIAN, Stephenson ; CHOL, Kang H.: Takagi-Taupin description of x-ray dynamical diffraction from diffractive optics with large numerical aperture. In: *Physical Review B* 76 (2007), Nr. 11. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.76.115438>. – DOI 10.1103/PhysRevB.76.115438