

Diplomarbeit

Asymptotische Entwicklung von  
Streulösungen um Resonanzen  
am Beispiel von Röntgen-  
Mehrschicht-Resonatoren

vorgelegt von  
**Felix Schenk**  
aus  
**Lüneburg**

angefertigt am  
**Institut für Numerische und Angewandte Mathematik**  
der Georg-August-Universität Göttingen  
**2007**



# Inhaltsverzeichnis

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| <b>1</b> | <b>Einleitung</b>   | <b>1</b>  |
| <b>2</b> | <b>Herleitung des mathematischen Modells</b>                        | <b>5</b>  |
| 2.1      | Worum geht es? . . . . .  | 5         |
| 2.2      | Die Maxwell-Gleichungen . . . . .                                   | 7         |
| 2.3      | Herleitung der Differentialgleichung für das Problem . . . . .      | 8         |
| 2.4      | Ausstrahlungsbedingung . . . . .                                    | 10        |
| 2.5      | Das Streuproblem . . . . .  | 14        |
| <b>3</b> | <b>Existenz und Eindeutigkeit für das Streuproblem</b>              | <b>17</b> |
| 3.1      | Alternative Problemformulierungen . . . . .                         | 17        |
| 3.2      | Schwache Formulierung . . . . .                                     | 22        |
| <b>4</b> | <b>Resonanzen</b>   | <b>27</b> |
| 4.1      | Zwei Definitionen von Resonanzen . . . . .                          | 27        |
| 4.2      | Eigenschaften der Resolvente . . . . .                              | 28        |
| 4.3      | Äquivalenz der Definitionen . . . . .                               | 30        |
| 4.4      | Anregung und Lage von Resonanzen . . . . .                          | 31        |
| <b>5</b> | <b>Polbedingung und asymptotische Entwicklung von Streulösungen</b> | <b>35</b> |
| 5.1      | Die Polbedingung . . . . .  | 35        |
| 5.2      | Hardyraum-Infinite-Elemente . . . . .                               | 38        |
| 5.2.1    | Theoretische Grundlagen . . . . .                                   | 38        |
| 5.2.2    | Assemblierung . . . . .   | 46        |
| 5.3      | Asymptotische Entwicklung von Streulösungen um Resonanzen .         | 50        |
| 5.4      | Interpretation der komplexen Resonanzen . . . . .                   | 54        |
| <b>6</b> | <b>Numerische Ergebnisse</b>  | <b>59</b> |
| 6.1      | Beispiel . . . . .  | 60        |

---

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| 6.2      | Streulösungen für eine Resonanzfrequenz . . . . .                | 63        |
| 6.3      | Weitergehende physikalische Untersuchung des Beispiels . . . . . | 65        |
| <b>7</b> | <b>Fazit und Ausblick</b>  | <b>69</b> |
| <b>8</b> | <b>Anhang</b>  | <b>73</b> |
| 8.1      | Matrixalgorithmus . . . . .                                      | 73        |
| 8.2      | Mathematische Grundlagen . . . . .                               | 76        |
| 8.2.1    | Funktionalanalysis . . . . .                                     | 77        |
| 8.2.2    | Analytische Riesz-Fredholm-Theorie . . . . .                     | 79        |
| 8.2.3    | Sobolev-Räume und elliptische Differentialgleichungen . . . . .  | 80        |
| 8.2.4    | Gewöhnliche Differentialgleichungen . . . . .                    | 83        |
| 8.2.5    | Laplace-Transformation . . . . .                                 | 85        |
| 8.2.6    | Formeln . . . . .  | 86        |
|          | <b>Literaturverzeichnis</b>                                      | <b>87</b> |

# Vorwort

Meine Diplomarbeit beschäftigt sich mit der „asymptotischen Entwicklung von Streulösungen um Resonanzen am Beispiel von Röntgen-Mehrschicht-Resonatoren“. Dieses Thema gehört zum Bereich der Numerischen Mathematik oder genauer zu einem Teilbereich davon, der numerischen Behandlung von Differentialgleichungen. Durch eine Anstellung als studentische Hilfskraft bei Herrn Professor Thorsten Hohage bekam ich die Aufgabe ein Computerprogramm für ein Problem zu schreiben, das aus einer Kooperation mit Herrn Professor Tim Salditt vom Institut für Röntgenphysik in Göttingen stammt. Diese Arbeit liefert nun die theoretischen Grundlagen für mein Programm.

Da meine Ergebnisse konkret eingesetzt werden, möchte ich die meisten Sätze nicht möglichst allgemein halten, sondern passend für das praktische Problem formulieren. Bei der Problemstellung handelt es sich um eine verallgemeinerte „Helmholtz-Gleichung“. Die meisten Sätze sind daher auch in wesentlich allgemeineren Zusammenhängen („Helmholtz-Gleichung“ im Zwei- oder Dreidimensionalen) gültig, aber dann häufig auch schwieriger oder anders zu beweisen.



# 1 Einleitung

## Motivation

Bei der Entwicklung optischer Geräte (z.B. zur optischen Nahfeld-Mikroskopie) sind immer kleinere Wellenlängen nötig. Normalerweise werden Röntgenstrahlen mit „Spots“ im Mikrometer-Bereich durch Fokussierung (kohärente und inkohärente) erreicht. Allerdings ist hier die Grenze des Machbaren momentan erreicht. Strahlen mit deutlich kleinerem Querschnitt könnten aber neue Anwendungsfelder eröffnen in den Bereichen Streuung, Mikroskopie (z.B. hochauflösende Tomographie) und Spektroskopie.

Eine andere Herangehensweise, die auch die Göttinger Röntgenphysik verfolgt, ist die Nutzung von Mehrschichtsystemen zur eindimensionalen Strahlenkonzentration. Solche Systeme bestehen aus mehreren Schichten, deren Dicken, Brechungsindizes und Oberflächenrauigkeiten variiert werden können. Mit modernster Technik lassen sich solche Systeme herstellen, welche dann von einem einfallenden Feld (Röntgenlaser) unter einem Einfallswinkel  $\alpha$  gestreift werden. Durch geeignete Wahl der Schichten und des Einfallswinkels steht am Ende des Prozesses das veränderte, austretende Feld in der gewünschten Form zur Verfügung und kann genutzt werden. Es soll eine möglichst große Feldüberhöhung bezogen auf das einfallende Feld erreicht werden. Hat man ein vielversprechendes Mehrschichtsystem gefunden (durch Experimente oder Optimieren „von Hand“) und möchte herausfinden, für welche Einfallswinkel  $\alpha$  die größte Feldüberhöhung beobachtet werden kann, müsste man experimentell oder rechnerisch möglichst viele Werte von  $\alpha$  durchprobieren und nach extremen Ausschlägen der Intensität, sogenannten „Peaks“, suchen. Das bringt aber zwei Probleme mit sich. Erstens ist dies sehr aufwändig und zweitens besteht die Gefahr, gerade die besten Werte (schärfsten „Peaks“) zu verfehlen. Warum genau das so ist, wird zu einem späteren Zeitpunkt noch erläutert.

Es wäre nun also wünschenswert, wenn man bei einem vorgegebenen Mehrschichtsystem voraussagen könnte, bei welchen Einfallswinkeln, die „Peaks“ auftreten und wie groß die Feldüberhöhung ist. Hier kommen die Resonanzfrequenzen (Einfallswinkel, für die extreme Feldüberhöhungen beobachtet werden) und die Approximation des Feldes in ihrer Nähe ins Spiel, die genau das leisten werden. Die notwendige Theorie und ein Programm zur Berechnung der Resonanzfrequenzen für ein beliebiges gegebenes Mehrschichtsystem liefert diese Diplomarbeit.

Dies stellt einen ersten wichtigen Schritt auf dem Weg zur Entwicklung eines Optimierungsprogrammes dar, welches unter verschiedenen Schichtsystemen das optimale ermittelt, indem es sich der Resonanzfrequenzen und der Approximationen bedient. Ein solches Programm zur Beantwortung der Frage, wie die Materialien und Schichtdicken zu wählen sind, um möglichst gute Ergebnisse oder eine bestimmte Feldüberhöhung zu erzielen, ist ein Fernziel und nicht Bestandteil dieser Arbeit. Insbesondere ist es dabei von Interesse, obere Grenzen für die maximal erreichbare Feldüberhöhung unter gewissen Nebenbedingungen an die Größe der Brechungsindizes zu finden, worüber bisher wenig bekannt ist. Einige Details zu möglichen nächsten Schritten finden sich im „Ausblick“ am Ende der Arbeit.

## Aufbau der Arbeit

Diese Diplomarbeit beleuchtet zwei unterschiedliche Herangehensweisen an das Thema Resonanzen, die sich als äquivalent erweisen werden. Unter dem Begriff Resonanzen verstehen wir immer auch komplexe Werte, während die Resonanzfrequenzen reellwertig sind, aber mit Hilfe der komplexen Resonanzen approximiert werden können. Das werden wir im Verlauf der Arbeit noch genauer erläutern.

Die beiden Definitionen von Resonanzen werden in Kapitel 4 formuliert und sind genauso wie die Sätze und sonstigen Aussagen an das konkrete Problem angepasst, das in Kapitel 2 beschrieben und mathematisch modelliert wird. Sind wir zu einer Problemformulierung gelangt, wird diese in Kapitel 3 auf Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen untersucht. Ein Großteil der Ausführungen in den Kapiteln 3 und 4 ist an einen Artikel von M. Lenoir, M. Vullierme-Ledard und C. Hazard ([14]) angelehnt. Dieser wurde auf das hier



betrachtete Problem übertragen und konnte dadurch an einigen Stellen sogar vereinfacht werden. Von entscheidender Bedeutung ist die Anwendung der analytischen Riesz-Fredholm-Theorie, deren Grundzüge sich im Anhang der Arbeit finden lassen. Das gilt auch für andere mathematische Grundlagen, sofern sie nicht als bekannt vorausgesetzt werden. Dadurch soll eine bessere Lesbarkeit gewährleistet werden, da die mathematischen Grundlagen in fast allen Kapiteln benötigt werden und nicht die aufeinander aufbauenden Teile unterbrechen sollen. Es wird an den entsprechenden Stellen auf sie verwiesen. Kapitel 5 führt die sogenannte Polbedingung und Hardyraum-Infiniten Elemente ein, die wir auch zur numerischen Berechnung der Resonanzen benutzen werden. Hier weichen wir von der in [14] vorgestellten Methode zur Berechnung der Resonanzen als Pole der Resolvente über ein Newton-Verfahren ab und verfolgen nur die Berechnung der Resonanzen als verallgemeinerte Eigenwerte weiter. Damit werden wir auch eine relativ einfache Methode zur Approximation der Lösung in der Nähe der Resonanzen gewinnen. Erste numerische Ergebnisse finden sich in Kapitel 6, und Kapitel 7 gibt einen kurzen, abschließenden Überblick über das bisher Erreichte und zeigt offene Fragen und nächste Schritte auf.

## Anmerkungen zur Notation

Bevor wir mit der eigentlichen Arbeit beginnen, sollen noch ein paar kurze Anmerkungen zur in dieser Arbeit genutzten Notation gemacht werden. Wir bezeichnen Operatoren immer mit Großbuchstaben und Funktionen/Lösungen immer mit Kleinbuchstaben, außer wenn es sich um vektorwertige Funktionen (Fettdruck) oder verallgemeinerte Funktionen einer komplexen Variable handelt. Letztere sind bei uns meistens operatorwertig und werden deshalb generell mit Großbuchstaben bezeichnet.

In Definitionen und Anmerkungen verwenden wir häufiger  $f$ ,  $g$  und  $v$  für beliebige Funktionen. Aus dem Zusammenhang heraus sind sie nicht mit „rechten Seiten“ von Differentialgleichungen oder Testfunktionen zu verwechseln.

Unter einem Gebiet verstehen wir eine offene und zusammenhängende Teilmenge von  $\mathbb{C}$  oder  $\mathbb{R}$ . Letzteres bezieht sich insbesondere auf Sobolevräume, bei denen wir gelegentlich auch  $H^s([a, b])$  für  $[a, b] \subset \mathbb{R}$  schreiben oder vom Gebiet  $[a, b]$  sprechen. In diesem Fall meinen wir immer nur das Innere von

$[a, b]$ . Für Details zur Notation der Sobolevräume sei auf das entsprechende Kapitel im Anhang verwiesen.

Es sei auch noch angemerkt, dass wir den Raum der beschränkten, linearen Operatoren zwischen zwei Vektorräumen  $X$  und  $Y$  etwas ungewöhnlich mit  $\mathfrak{L}(X, Y)$  bezeichnen.

Wenn wir Wurzeln aus komplexen Zahlen ziehen, meinen wir immer folgende über den komplexen Logarithmus definierte Quadratwurzelfunktion:

$$\sqrt{\nu} = \nu^{\frac{1}{2}} := e^{\frac{1}{2} \ln \nu} \quad (\nu \in \mathbb{C} \setminus i\mathbb{R}_0^-), \quad (1.1)$$

wobei  $i\mathbb{R}_0^- := \{\nu \in \mathbb{C} \mid \nu = w \cdot i \text{ für ein } w \leq 0\}$  (analog ist  $i\mathbb{R}^+$  definiert). Wir verwenden hier nicht den Hauptzweig des Logarithmus, sondern nehmen die negative imaginäre Achse aus, indem wir  $-\frac{\pi}{2} < \text{Im}(\ln(\nu)) \leq \frac{3\pi}{2}$  fordern. Anders ausgedrückt lassen wir bei der Polarkoordinatendarstellung das Argument von  $-\frac{\pi}{2}$  bis  $\frac{3\pi}{2}$  laufen und haben  $\ln(\nu = re^{i\theta}) = \text{Ln}(r) + i\theta$ , wobei  $\text{Ln}$  den reellen Logarithmus bezeichnet. Mit dieser Definition gilt für alle  $\nu > 0$  auch  $\sqrt{\nu} > 0$  und für alle  $\nu < 0$ , dass  $\sqrt{\nu} \in i\mathbb{R}^+$ . Für Details zur Definition der komplexen Logarithmusfunktion sei auf in die Funktionentheorie einführende Werke verwiesen (beispielsweise [6]).

## 2 Herleitung des mathematischen Modells

Wie aus der Einleitung hervorgeht, bezieht sich meine Arbeit auf ein reales Problem aus der Röntgenphysik. Dieses Kapitel behandelt die mathematische Modellierung dieses Problems, die auf eine verallgemeinerte „Helmholtz-Gleichung“ führt. Dabei werden die physikalischen Hintergründe nur sehr kurz erläutert, da sie nicht im Zentrum dieser Arbeit stehen und im Folgenden nicht mehr benötigt werden.

Der hier vorgestellte Ansatz beschreibt die Ausbreitung von Röntgenstrahlen in planaren Mehrschichtsystemen. Die Ausführungen und Grafiken sind an die Diplomarbeit von F.Pfeiffer ([18]) angelehnt, wobei hier allerdings teilweise andere Bezeichnungen genutzt werden und einige Teile neu aufgenommen worden sind, wie zum Beispiel die Herleitung der Differentialgleichung aus den Maxwell-Gleichungen.

### 2.1 Worum geht es?

Wir betrachten ein System von  $m \in \mathbb{N}$  Schichten verschiedener Materialien, wobei die Materialien, Schichtdicken  $d_j$  (Dicke der  $j$ -ten Schicht) und Oberflächenrauigkeit variabel sind. Die unterste Schicht ist ein Substrat, zum Beispiel Silikon oder Glas und kann als unendlich dick angesehen werden. Das verwendete Material in den Schichten schlägt sich nieder im jeweiligen Brechungsindex für Röntgenstrahlen, mit denen das Schichtsystem bestrahlt wird. Den Nullpunkt der  $z$ -Achse legen wir nach geeigneter Festlegung der Schichten in den Anfangspunkt der ersten Schicht (oberhalb dieses Punktes soll die Brechung konstant 1 sein).  $n$  bezeichne die Funktion, die den Brechungsindex an

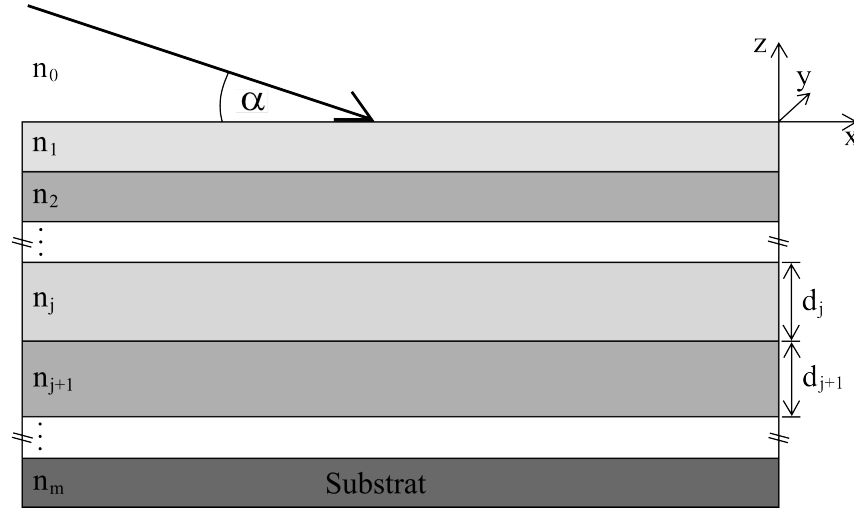


Abbildung 2.1: Beispiel für ein Mehrschichtsystem

einer beliebigen Stelle  $(x, y, z)$  angibt. Wir nehmen an, dass sich  $n$  im  $x$ - $y$ - $z$ -Koordinatensystem nur in  $z$ -Richtung verändert, d.h.  $n(x, y, z) = n(z)$ . Zudem setzen wir  $a := \sum_{k=1}^{m-1} d_k$  und nehmen an, dass  $n \in L^\infty(\mathbb{R})$  und folgende Bedingungen erfüllt:

$$\operatorname{Re}(n) > 0 \quad (2.1a)$$

$$\operatorname{Im}(n) \geq 0 \quad (2.1b)$$

$$n(z) = 1 \text{ für } z \geq 0 \quad (2.1c)$$

$$n(z) = n_{\text{sub}} \in (0, 1] \text{ für } z \leq -a \quad (2.1d)$$

Die Oberfläche des Mehrschichtsystems wird von einem einfallenden Feld (Röntgenstrahl) gestreift unter einem Einfallswinkel  $\alpha$ . Im Verlauf der Arbeit soll untersucht werden, für welche Werte von  $\alpha$  die größte Feldüberhöhung beim austretenden Feld, bezogen auf einfallende Feld, auftritt und wie groß diese ist. Voraussetzung dafür ist natürlich ein geeignetes Mehrschichtsystem.

Das oben beschriebene Mehrschichtsystem stellt einen Röntgenresonator dar und ist für stückweise konstante Brechung in Abbildung 2.1 dargestellt. In den praktischen Anwendungen in Kapitel 6 dieser Arbeit werden wir immer die Vereinfachung annehmen, dass  $n$  stückweise konstant ist mit  $n(z) = 1 - \delta_j + i\beta_j \neq 0$  in der  $j$ -ten Schicht und Brechung 1 in der Luft sowie  $n_{\text{sub}} \in (0, 1]$  im Substrat. Für Röntgenstrahlen lässt sich der Brechungsindex in der angegebenen

Form schreiben mit reellen Konstanten  $0 \leq \delta_j < 1$  und  $\beta_j \geq 0$ , die für das jeweils verwendete Material bekannt sind. Es sei angemerkt, dass die Werte der Brechungsindizes für Röntgenstrahlen im Gegensatz zu sichtbarem Licht sehr nahe bei 1 liegen<sup>1</sup>. Zusätzlich wollen wir in den Anwendungen der Einfachheit halber ein perfekt produziertes System voraussetzen, so dass wir die Oberflächenrauigkeit nicht berücksichtigen müssen. Die Funktion  $n$  ist mit den bisher gemachten Festlegungen für stückweise konstante Brechungsindizes gegeben durch:

$$n(z) := \begin{cases} n_0 = 1, & z > 0 \\ n_j, & -\sum_{k=1}^j d_k < z \leq -\sum_{k=1}^{j-1} d_k, \quad j = 1, \dots, m-1 \\ n_m = n_{\text{sub}}, & z \leq -\sum_{k=1}^{m-1} d_k \end{cases}$$

Die Beschränkung auf stückweise konstante  $n$  ist jedoch nicht notwendig und wir betrachten in den theoretischen Überlegungen immer  $n \in L^\infty(\mathbb{R})$ , auch im Hinblick darauf in späteren numerischen Berechnungen die Oberflächenrauigkeit mitmodellieren zu können. Offenbar genügt es auch, wenn die Brechung ab einem gewissen Wert konstant 1 ist und unter einem gewissen Wert von  $z$  konstant bleibt, denn in diesem Fall kann man es durch geeignete Wahl der Schichten immer so einrichten, dass  $n(z) = 1$  für alle  $z > 0$  und  $n(z) = n_{\text{sub}}$  für alle  $z \leq -\sum_{k=1}^{m-1} d_k$  gilt.

## 2.2 Die Maxwell-Gleichungen

Die Wechselwirkung zwischen magnetischen und elektrischen Feldern sowie die Entstehung der Felder durch Ladungen und Ströme wird durch die Maxwell-Gleichungen beschrieben. In einem inhomogenen, ungeladenen, nicht leitenden und nicht magnetischen Medium (welches wir hier als gegeben annehmen)

<sup>1</sup>Typischerweise liegt der Brechungsindex für Röntgenstrahlen in der Größenordnung  $1 - 10^{-5} + 10^{-6}i$ .

stellen sich die Maxwell-Gleichungen in folgender vereinfachter Form dar:

$$\operatorname{rot}(\mathbf{E}) = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.2a)$$

$$\operatorname{rot}(\mathbf{H}) = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (2.2b)$$

$$\operatorname{div}(\mathbf{D}) = 0 \quad (2.2c)$$

$$\operatorname{div}(\mathbf{B}) = 0 \quad (2.2d)$$

Dabei bezeichnet  $\mathbf{E}$  das elektrische Feld (elektrische Feldstärke),  $\mathbf{D}$  die elektrische Verschiebungsdichte (dielektrische Verschiebung),  $\mathbf{B}$  die magnetische Induktion (magnetische Flussdichte) und  $\mathbf{H}$  das magnetische Feld (magnetische Feldstärke).

Zusätzlich gelten hier noch die folgenden Materialgleichungen:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 n^2 \mathbf{E} \quad (2.3a)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} \quad (2.3b)$$

Hierbei ist  $\mu_0$  die magnetische und  $\epsilon_0$  die elektrische Feldkonstante, was die Werte für magnetische Permeabilität ( $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{Ns}^2/\text{C}^2$ ) und elektrische Permittivität ( $\epsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12} \text{C}^2/(\text{Nm}^2)$ ) im Vakuum sind.

## 2.3 Herleitung der Differentialgleichung für das Problem

Das einfallende Feld sei die ebene Welle  $\mathbf{E}^i = [E_x^i, E_y^i, E_z^i]^\top$  mit  $E_x^i = E_z^i = 0$  und  $E_y^i = \operatorname{Re}(e^{ik_0(\cos \alpha x - \sin \alpha z)} e^{-i\omega t})$  (definiere  $k_0 := \sqrt{\epsilon_0 \mu_0} \omega > 0$  mit  $\omega > 0$ ). Es ist  $y$ -polarisiert und fällt unter dem Winkel  $\alpha$  ein<sup>2</sup>.

Für die Gesamtfelder  $\mathbf{E} = [E_x, E_y, E_z]^\top$  und  $\mathbf{H} = [H_x, H_y, H_z]^\top$  machen wir den Ansatz

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(x, z, t) &= \operatorname{Re}(\boldsymbol{\mathcal{E}}(x, z) \cdot e^{-i\omega t}), \\ \mathbf{H}(x, z, t) &= \operatorname{Re}(\boldsymbol{\mathcal{H}}(x, z) \cdot e^{-i\omega t}), \end{aligned}$$

<sup>2</sup>Die Bewegungsrichtung von Wellen werden wir später in diesem Kapitel noch diskutieren.

wobei  $\mathcal{E} = [\mathcal{E}_x, \mathcal{E}_y, \mathcal{E}_z]^\top$  und  $\mathcal{H} = [\mathcal{H}_x, \mathcal{H}_y, \mathcal{H}_z]^\top$  mit

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_j(x, z) &= U_j(z) \cdot e^{i\gamma x}, \\ \mathcal{H}_j(x, z) &= V_j(z) \cdot e^{i\gamma x}\end{aligned}$$

für  $j = x, y, z$  und  $\gamma := k_0 \cos \alpha$ . Setze weiter  $U_x = U_z = 0$ . Dieser Ansatz ist in Anbetracht des einfallenden Feldes gerechtfertigt. In der weiteren Betrachtung interessieren wir uns nur noch für das elektrische Feld, für das wir jetzt eine Differentialgleichung herleiten. Mit den eben gemachten Annahmen brauchen wir nur eine Differentialgleichung für  $U_y$ .

Um eine Gleichung dafür zu erhalten, werden die Maxwell-Gleichungen auf die obigen Felder angewendet. Gleichung (2.2a) schreibt sich dann unter Benutzung von (2.3b) so:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{i\omega\mu_0} \cdot \text{rot}(\mathcal{E}) \quad (2.4)$$

Eingesetzt in (2.2b) und mit Hilfe von (2.3a) ergibt sich:

$$\frac{1}{i\omega\mu_0} \text{rot}(\text{rot}(\mathcal{E})) = -i\omega\epsilon_0 n^2 \cdot \mathcal{E} \quad (2.5)$$

Definiere  $\mathbf{U} := [U_x, U_y, U_z]^\top$  und  $\mathbf{V} := [V_x, V_y, V_z]^\top$ . Durch Einsetzen des Ansatzes und Ausnutzung der Identität „ $\text{rot}(\text{rot}) = \text{grad}(\text{div}) - \Delta$ “ (genauer: Formel (8.29) aus dem Anhang) folgt

$$\text{grad}(\text{div}(\mathbf{U} \cdot e^{i\gamma x})) - \Delta(\mathbf{U} \cdot e^{i\gamma x}) = \omega^2 \mu_0 \epsilon_0 n^2 \cdot \mathbf{U} \cdot e^{i\gamma x}. \quad (2.6)$$

$\Delta$  ist hierbei als komponentenweise Anwendung von  $\Delta$  zu verstehen.

Nach Gleichung (2.2c) und (2.3a) gilt

$$\frac{\partial}{\partial x} \epsilon_0 n^2(z) \mathcal{E}_x + \frac{\partial}{\partial y} \epsilon_0 n^2(z) \mathcal{E}_y + \frac{\partial}{\partial z} \epsilon_0 n^2(z) \mathcal{E}_z = 0.$$

Wegen  $U_x = U_z = 0$  und der Voraussetzung, dass  $n$  nur von  $z$  abhängt, können wir folgern  $n^2 \epsilon_0 \frac{\partial \mathcal{E}_y}{\partial y} = 0$  und schließlich  $\frac{\partial \mathcal{E}_y}{\partial y} = 0$ , da  $n(z) \neq 0$  für alle  $z \in \mathbb{R}$ . Andererseits ist wegen  $U_x = U_z = 0$  aber auch  $\text{div}(\mathcal{E}) = \frac{\partial \mathcal{E}_y}{\partial y}$  und somit  $\text{div}(\mathbf{U} \cdot e^{i\gamma x}) = 0$ . Damit erhalten wir für die verbleibende  $y$ -Komponente, die hier das Feld bestimmt:

$$-\Delta(U_y(z) \cdot e^{i\gamma x}) - k_0^2 n^2(z) U_y(z) \cdot e^{i\gamma x} = 0$$

Durch Ausführen von  $\Delta$  schreibt sich dies wie folgt:

$$\left( -\frac{\partial^2 U_y(z)}{\partial z^2} + \gamma^2 U_y(z) - k_0^2 n^2(z) U_y(z) \right) \cdot e^{i\gamma x} = 0$$

Wir haben also insgesamt die gewöhnliche Differentialgleichung

$$-u''(z) - (k_0^2 n^2(z) - \gamma^2) u(z) = 0 \quad \text{für alle } z \in \mathbb{R} \quad (2.10)$$

erreicht. Die gesuchte Lösung wird von nun an nur noch mit  $u$  bezeichnet, da alle anderen Funktionen im Folgenden keine Rolle mehr spielen.

Die Differentialgleichung (2.10) ist eine verallgemeinerte „Helmholtz-Gleichung“, denn für konstantes  $n(z) = \tilde{n} \in \mathbb{C}$  für alle  $z$  und geeignete  $k_0$  und  $\gamma$  ist es gerade die „Helmholtz-Gleichung“  $-u''(z) - \tilde{k}^2 u(z) = 0$  mit  $\tilde{k} = \sqrt{k_0^2 \tilde{n}^2 - \gamma^2} > 0$  und allgemeiner Lösung  $C_1 \cdot e^{i\tilde{k}z} + C_2 \cdot e^{-i\tilde{k}z}$ . Zwei weitere passende Bedingungen reichen dann aus, um die Lösung eindeutig festzulegen.

Haben wir eines der zu Beginn des Kapitels beschriebenen Mehrschichtsysteme mit nur noch stückweise konstantem Brechungsindex, ist es nicht mehr so einfach, die Lösung direkt anzugeben. Es gibt aber die Möglichkeit für vorgegebene Parameter  $k_0$ ,  $\alpha$  (bzw.  $\gamma$ ) und  $n(z)$ , die Lösung über ein Gleichungssystem zu berechnen. Dieses Vorgehen ist im „Matrixalgorithmus“ im Anhang erklärt. Dabei werden insbesondere die stückweise konstanten Koeffizienten der Differentialgleichung ausgenutzt. Für kompliziertere Funktionen  $n$  ist auch dieses Vorgehen nicht mehr möglich, so dass man ohnehin auf ein anderes Lösungsverfahren angewiesen ist, wenn man allgemeinere Systeme betrachten will. Die später vorgestellte Methode mit finiten Elementen bleibt für beliebige  $n \in L^\infty(\mathbb{R})$  anwendbar und wird noch weitere Vorteile bei der Berechnung der Resonanzen liefern. Zunächst wollen wir aber zu einer vollständigen Problemformulierung gelangen.

## 2.4 Ausstrahlungsbedingung

Wir haben die gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung  $-u''(z) - (k_0^2 n^2(z) - \gamma^2) u(z) = 0$ . Die gesuchte Lösung  $u$  teilen wir in einen von oben



einfallenden Anteil  $u_i$ , der vorgegeben ist, und einen gestreuten Anteil  $u_s := u - u_i$  auf<sup>3</sup>. Offenbar erfüllt der von  $z$  abhängige Anteil

$$u_i(z) := e^{-ik_0 \sin(\alpha)z} = e^{-ik_0 \sqrt{1-\cos^2(\alpha)}z} = e^{-i\sqrt{k_0^2-\gamma^2}z} \quad (2.11)$$

des einfallenden Feldes die Differentialgleichung (2.10) für  $n(z) = 1$ , was außerhalb des Mehrschichtsystems gegeben ist. Um die Abhängigkeit der einfallenden Welle  $u_i$  von  $\nu$  zu betonen, schreiben wir gelegentlich auch  $u_{i,\nu}$ .

Damit man Eindeutigkeit bei der Lösung einer Differentialgleichung zweiter Ordnung erzielen kann, braucht man auf einem beschränkten Gebiet noch Randbedingungen. Da das Gebiet aber unendlich ist, ist es nicht ohne weiteres möglich, zusätzliche Bedingungen zu stellen. Einen Ausweg stellt eine sogenannte Ausstrahlungsbedingung dar.

In unserem einfachen eindimensionalen Fall formulieren wir die Ausstrahlungsbedingung wie folgt.

**DEFINITION 2.1 (AUSSTRAHLUNGSBEDINGUNG).** *a) Eine Lösung  $v$  von (2.10) im oberen Bereich  $\{z \in \mathbb{R} \mid z > 0\}$  bezeichnen wir als ausstrahlend im oberen Bereich, wenn sie von der Form  $v(z) = C \cdot e^{i\sqrt{k_0^2-\gamma^2}z}$  für alle  $z > 0$  ist mit einer Konstanten  $C \in \mathbb{C}$ .*

*b) Eine Lösung  $v$  von (2.10) im unteren Bereich  $\{z \in \mathbb{R} \mid z < -a\}$  bezeichnen wir als ausstrahlend im unteren Bereich, wenn sie von der Form  $v(z) = K \cdot e^{-i\sqrt{k_0^2 n_{\text{sub}}^2 - \gamma^2}z}$  für alle  $z < -a$  ist mit einer Konstanten  $K \in \mathbb{C}$ .*

Wir erläutern diese Definition am Beispiel des oberen Bereiches. Es sind die drei Fälle  $\gamma > k_0$ ,  $\gamma = k_0$  und  $0 \leq \gamma < k_0$  zu unterscheiden. Im ersten Fall ist jede Lösung der Differentialgleichung im oberen Bereich eine Linearkombination einer exponentiell fallenden und einer exponentiell wachsenden Lösung. Es ist naheliegend, dass nur die exponentiell fallende Lösung physikalisch sinnvoll ist. Im zweiten Fall gibt es eine konstante und eine linear wachsende Lösung und wir können ähnlich argumentieren. Um im dritten Fall zu entscheiden, welche der beiden Lösungen  $e^{\pm i\sqrt{k_0^2-\gamma^2}z}$  die physikalisch sinnvolle ist, gibt es zwei Herangehensweisen, die auch die Benutzung des Begriffes „ausstrahlend“

<sup>3</sup>Wir schreiben die Indizes für einfallend und gestreut („i“ und „s“ von Englisch „incident“ und „scattered“) von nun an nach unten, da wir im Gegensatz zu Abschnitt 2.3 nicht mehr verschiedene Komponentenfunktionen zu unterscheiden haben.

in diesem Zusammenhang erklären:

Für die erste betrachten wir die nichttriviale Komponente des elektrischen Gesamtfeldes aus dem vorherigen Abschnitt:  $E_y = \text{Re}(U_y(z) \cdot e^{i\gamma x} \cdot e^{-i\omega t})$ . Die von  $x$  abhängige Exponentialfunktion spielt für die Ausbreitungsrichtung des Feldes in  $z$ -Richtung keine Rolle, da sie sich für festes  $x$  nur wie eine Konstante auswirkt. Haben wir nun  $U_y(z) = e^{-i\kappa z}$ , wobei wir zur Abkürzung  $\kappa := \sqrt{k_0^2 - \gamma^2}$  gesetzt haben, können wir  $E_y$  umformen zu:

$$E_y = \text{Re} \left( e^{-i\kappa(z + \frac{\omega}{\kappa}t)} \cdot e^{i\gamma x} \right) \quad (2.12)$$

Hieran erkennt man, dass sich diese Welle für jedes feste  $x$  in negativer  $z$ -Richtung ausbreitet. Nimmt man nämlich zwei Zeitpunkte  $t_2 > t_1$ , so erhält man zum Zeitpunkt  $t = t_2$  an einer beliebigen Stelle  $z$  den Funktionswert, der für  $t = t_1$  erst bei  $z + \frac{\omega}{\kappa}(t_2 - t_1) > z$  erreicht wird, denn

$$e^{-i\kappa(z + \frac{\omega}{\kappa}t_2)} = e^{-i\kappa((z + \frac{\omega}{\kappa}(t_2 - t_1)) + \frac{\omega}{\kappa}t_1)}. \quad (2.13)$$

Bei unserer Modellierung bedeutet das eine Ausbreitung in negative  $z$ -Richtung (nach unten in Abbildung 2.1). Durch eine analoge Umformung für  $U_y = e^{i\kappa z}$  erhält man eine Ausbreitung in positiver  $z$ -Richtung, also eine Ausbreitung nach oben in Abbildung 2.1.

Eine zweite Möglichkeit zur Motivation der Definition ist es, sich den Energiefluss anzusehen. Der sogenannte Poynting-Vektor (benannt nach seinem Erfinder John Henry Poynting) weist in die Raumrichtung des Energieflusses. Wir bezeichnen ihn hier abweichend von der Standardbezeichnung mit  $\mathbf{P}$  und er ist definiert als Kreuzprodukt aus elektrischer Feldstärke  $\mathbf{E}$  und magnetischer Feldstärke  $\mathbf{H}$ . Wir betrachten jetzt die Gesamtfelder  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{H}$ , wie zu Beginn des Kapitels definiert und erhalten für den Poynting-Vektor die folgende Formel, in der „\*“ die komplexe Konjugation in jeder Komponente bedeuten soll.

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \mathbf{E} \times \mathbf{H} = \text{Re}(\boldsymbol{\mathcal{E}} \cdot e^{-i\omega t}) \times \text{Re}(\boldsymbol{\mathcal{H}} \cdot e^{-i\omega t}) \\ &= \left[ \frac{1}{2} (\boldsymbol{\mathcal{E}} \cdot e^{-i\omega t} + \boldsymbol{\mathcal{E}}^* \cdot e^{i\omega t}) \right] \times \left[ \frac{1}{2} (\boldsymbol{\mathcal{H}} \cdot e^{-i\omega t} + \boldsymbol{\mathcal{H}}^* \cdot e^{i\omega t}) \right] \\ &= \frac{1}{4} [(\boldsymbol{\mathcal{E}} \times \boldsymbol{\mathcal{H}}^*) + (\boldsymbol{\mathcal{E}} \times \boldsymbol{\mathcal{H}}^*)^* + (\boldsymbol{\mathcal{E}} \times \boldsymbol{\mathcal{H}}) \cdot e^{-2i\omega t} + (\boldsymbol{\mathcal{E}}^* \times \boldsymbol{\mathcal{H}}^*) \cdot e^{2i\omega t}] \\ &= \text{Re} \left( \frac{1}{2} \boldsymbol{\mathcal{E}} \times \boldsymbol{\mathcal{H}}^* \right) + \text{Re} \left( \frac{1}{2} \boldsymbol{\mathcal{E}} \times \boldsymbol{\mathcal{H}} \cdot e^{-2i\omega t} \right) \end{aligned} \quad (2.14)$$

Im zeitlichen Mittel ist der hintere Term Null und wir können den zeitlich gemittelten Poynting-Vektor  $\tilde{\mathbf{P}}$  sehr einfach berechnen<sup>4</sup>.

Für  $U_y = e^{i\kappa z}$  haben wir  $\mathcal{E} = [0, e^{i(\kappa z + \gamma x)}, 0]^\top$  und nach (2.4)

$$\mathcal{H} = \frac{1}{i\omega\mu_0} \operatorname{rot}(\mathcal{E}) = \frac{1}{i\omega\mu_0} \begin{pmatrix} -i\kappa e^{i(\kappa z + \gamma x)} \\ 0 \\ i\gamma e^{i(\kappa z + \gamma x)} \end{pmatrix}.$$

Damit erhält man für den zeitlich gemittelten Poynting-Vektor

$$\tilde{\mathbf{P}} = \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left( \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i(\kappa z + \gamma x)} \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -\frac{\kappa}{\omega\mu_0} e^{-i(\kappa z + \gamma x)} \\ 0 \\ \frac{\gamma}{\omega\mu_0} e^{-i(\kappa z + \gamma x)} \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{\gamma}{\omega\mu_0} \\ 0 \\ \frac{\kappa}{\omega\mu_0} \end{pmatrix}.$$

Dieser Vektor weist in der  $x$ - $z$ -Ebene in den ersten Quadranten, da  $\gamma, \kappa, \mu_0$  und  $\omega$  alle positive reelle Größen sind. Es handelt sich also um eine Welle, die Energie vom Schichtsystem wegtransportiert. Setzt man dagegen  $U_y = e^{-i\kappa z}$  ändern sich in einer analogen Rechnung einige Vorzeichen und man erhält

$$\tilde{\mathbf{P}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{\gamma}{\omega\mu_0} \\ 0 \\ \frac{-\kappa}{\omega\mu_0} \end{pmatrix}$$

und somit einen Energietransport ins System hinein, da der zeitlich gemittelte Poynting-Vektor in der  $x$ - $z$ -Ebene in den vierten Quadranten weist.

Das gesamte Feld transportiert aber sowohl im ausstrahlenden als auch im einfallenden Fall Energie nach rechts in Abbildung 2.1, was an der gleichen  $x$ -Komponente von  $\tilde{\mathbf{P}}$  erkennbar ist. Bilden wir das Skalarprodukt des zeitlich gemittelten Poynting-Vektors der einfallenden Welle mit dem Vektor  $e_1 := [1, 0, 0]^\top$  ergibt sich:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\mathbf{P}}, e_1 \rangle &= \frac{\gamma}{2\omega\mu_0} = \frac{k_0 \cos \alpha}{2\omega\mu_0} = \sqrt{(k_0^2 + \gamma^2 - \gamma^2)} \frac{1}{(2\omega\mu_0)^2} \cos \alpha \\ &= \sqrt{\left(\frac{\kappa}{2\omega\mu_0}\right)^2 + \left(\frac{\gamma}{2\omega\mu_0}\right)^2} \cos \alpha = \|\tilde{\mathbf{P}}\| \|e_1\| \cos \alpha. \end{aligned}$$

Hieran erkennt man, dass die einfallende Welle das Mehrschichtsystem unter dem Winkel  $\alpha$  trifft.

<sup>4</sup>Der Vektor  $(\frac{1}{2}\mathcal{E} \times \mathcal{H}^*)$  wird auch als komplexer Poynting-Vektor bezeichnet.

BEMERKUNG 2.2. a) Bei unserer eben gemachten Definition ausstrahlender Wellen im oberen Bereich haben wir gefordert, dass  $v$  für  $z > 0$  von der Form  $v(z) = Ce^{i\sqrt{k_0^2 - \gamma^2}z}$  ist. Dies ist äquivalent dazu, dass  $v$  die Sommerfeldsche Ausstrahlungsbedingung für  $z > 0$  erfüllt. Die Sommerfeldsche Ausstrahlungsbedingung ist zudem im 2- und 3-Dimensionalen zur Charakterisierung auslaufender Wellen verwendbar und schreibt sich mit  $\kappa = \sqrt{k_0^2 - \gamma^2} > 0$  für die Raumdimension  $m \in \{1, 2, 3\}$  mit unseren Konstanten so:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r^{\frac{m-1}{2}} \left( \frac{\partial v}{\partial r} - i\kappa v \right) = 0, \quad r = \|\vec{x}\| \quad (2.17)$$

gleichmäßig für alle Richtungen  $\frac{\vec{x}}{\|\vec{x}\|}$

mit  $\vec{x} \in \mathbb{R}^m$ . Im  $\mathbb{R}^3$  impliziert die Bedingung, dass sich  $v$  asymptotisch wie eine auslaufende Kugelwelle verhält für  $\|\vec{x}\| \rightarrow \infty$  (ein Beweis hierfür findet sich in [19], Theorem 2.5). Um mit unseren bisherigen Bezeichnungen übereinzustimmen, muss man im eindimensionalen Fall  $\vec{x} = z \in \mathbb{R}$  setzen. Dann erfüllt  $e^{i\kappa z}$  offenbar gerade die Bedingung (2.17) und  $e^{-i\kappa z}$  tut es nicht.

b) Man könnte „einfallend“ und „ausstrahlend“ auch genau andersherum definieren, indem man eine andere Zeitabhängigkeit (genauer:  $e^{+i\omega t}$ ) bei der einfallenden Welle und im Lösungsansatz wählt. In diesem Fall muss man auch das Relationszeichen in der Annahme (2.1b) in  $\leq$  ändern. Der Imaginärteil der Brechung bedeutet physikalisch die Absorption und sein Vorzeichen muss passend zur gewählten Zeitabhängigkeit so festgelegt werden, dass er sich auch wirklich absorbierend wirkt.

## 2.5 Das Streuproblem

Mit den bisher eingeführten Bezeichnungen ist klar, dass es genügt, Einfallswinkel  $0 < \alpha \leq \pi/2$  beziehungsweise  $\gamma \in [0, k_0)$  zuzulassen. Außerdem ist es mit der im vorangegangenen Abschnitt eingeführten Ausstrahlungsbedingung und den anschließenden Erläuterungen naheliegend zu fordern, dass der Anteil  $u_s$  ausstrahlend im oberen Bereich sein soll. Vom Gesamtfeld  $u$  werden wir dagegen fordern, dass es ausstrahlend im unteren Bereich ist. Letztere Bedingung sichert ab, dass das Feld im Substrat nur transmittiert wird und nichts

ins System zurückkehrt. Dass die beiden Bedingungen für die eindeutige Lösbarkeit der betrachteten Probleme ausreichen, werden wir später noch zeigen. Wir sind jetzt aber in der Lage, das zu Beginn dieses Kapitels beschriebene Problem der Bestrahlung eines Mehrschichtsystems unter einem Einfallswinkel  $\alpha$  und die Bedingungen an das gesuchte  $u$  als mathematisches Modell zu formulieren. Um Notationschwierigkeiten bei der Definition von Operatoren und der Resolvente in folgenden Kapiteln zu vermeiden, setzen wir  $\nu := \gamma^2$ . (Zur Erinnerung:  $a = \sum_{j=1}^{m-1} d_j > 0$ , wobei  $d_j$  die Dicke der  $j$ -ten Schicht ist und den Nullpunkt haben wir in den Anfangspunkt der ersten Schicht gelegt.) Wir wollen nicht nur im klassischen Sinne differenzierbare Lösungen, sondern auch zweimal schwach differenzierbare Funktionen zulassen. Dazu betrachten wir den Raum  $H_{\text{loc}}^2(\mathbb{R})$  und fassen alles zusammen zum

Streuproblem:

$$\text{Finde } u \in H_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}), \text{ so dass}$$

$$-u''(z) - (k_0^2 n^2(z) - \nu)u(z) = 0 \quad \text{für } z \in \Omega := (-\infty, \infty) \quad (2.18a)$$

$$u = u_i + u_s \quad (2.18b)$$

$$u_i(z) = e^{-i\sqrt{k_0^2 - \nu}z} \quad (2.18c)$$

$$u_s \text{ ist ausstrahlend im oberen Bereich} \quad (2.18d)$$

$$u \text{ ist ausstrahlend im unteren Bereich} \quad (2.18e)$$

Dabei ist  $n \in L^\infty(\mathbb{R})$  und erfüllt die in (2.1) angegebenen Bedingungen. Es können auch andere zur Sommerfeldschen Ausstrahlungsbedingung äquivalente Bedingungen an  $u_s$  gestellt werden für  $z > 0$ . Wir werden später für die praktische Implementierung auf die Polbedingung zurückgreifen.

Um das in diesem Kapitel hergeleitete und definierte noch einmal zu verdeutlichen, zeigt Abbildung 2.2 ein einfaches Beispiel eines Röntgenresonators mit stückweise konstantem Brechungsindex. Man erkennt darauf die Schichten und das unter dem Winkel  $\alpha$  einfallende Feld („Pfeil“). Ein Teil der einfallenden Welle wird reflektiert und der Rest dringt in das System ein. Bei geeigneter Kombination der Parameter des Systems und des Einfallswinkels (diese sollen später bestimmt werden) entsteht eine stehende Welle mit überhöhtem Feld, welche sich in der leitenden Schicht (hier die Schicht mit Brechung  $n_2$ ) in  $x$ -Richtung ausbreitet. Eingezeichnet ist nur der von  $z$  abhängige Teil

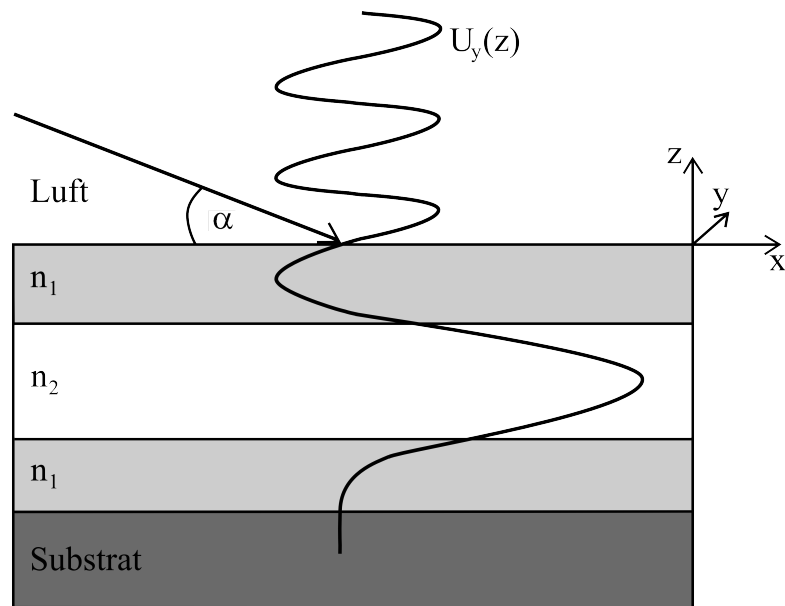


Abbildung 2.2: Skizze eines Röntgenresonators und einer durch das einfallende Feld ausgelösten, in  $z$ -Richtung stehenden Welle mit überhöhtem Feld

$u(z) = U_y(z)$ , welcher die hergeleitete Differentialgleichung und die im Streuproblem formulierten Bedingungen erfüllt. In die Differentialgleichung geht der Einfallswinkel durch das  $\nu$  ein.

# 3 Existenz und Eindeutigkeit für das Streuproblem

Nachdem wir in Kapitel 2 das Streuproblem hergeleitet haben, soll das Problem jetzt so umgeformt werden, dass es numerisch handhabbar wird. Insbesondere wollen wir später eine Diskretisierung mit finiten Elemente durchführen. Sowohl hierfür als auch für unsere Definition der Resolvente wird eine schwache Formulierung benötigt. Außerdem sollen Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen untersucht werden.

## 3.1 Alternative Problemformulierungen

Wir werden das System in Hinblick auf eine spätere Implementierung und die Resonanzen ein wenig umformen, indem wir das Aussehen der einfallenden Welle ausnutzen und  $u_s$  zur gesuchten Lösung machen. Die Umformung mag zunächst umständlich erscheinen, ist aber für unsere weiteren Untersuchungen und insbesondere die später hergeleitete asymptotische Entwicklung der Streulösungen hilfreich.

Durch die Umformulierung wird die rechte Seite der Differentialgleichung keine konstante Funktion mehr sein. Das führt zur folgenden Problemformulierung für  $u_s$ :

$$\text{Finde } u_s \in H_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}), \text{ so dass} \\ -u_s''(z) - (k_0^2 n^2(z) - \nu) u_s(z) = k_0^2 (n^2(z) - 1) u_i(z) \quad \text{für } z \in \Omega \quad (3.1a)$$

$$u_s \text{ ist ausstrahlend im oberen Bereich} \quad (3.1b)$$

$$u_s + u_i \text{ ist ausstrahlend im unteren Bereich} \quad (3.1c)$$

Um später mit finiten Elementen arbeiten zu können und die Resolvente zu definieren, benötigen wir eine schwache Formulierung von (3.1). Mit finiten Elementen lässt sich natürlich zunächst nur auf einem beschränkten Gebiet arbeiten, auf das wir uns aber zurückziehen können, indem wir ganz spezielle Randbedingungen fordern. Man spricht von transparenten Randbedingungen, die an einem künstlichen Rand die Unendlichkeit ersetzen. Sei  $\Omega_a := [-a, 0]$  das künstliche, beschränkte Gebiet. Eine Möglichkeit für transparente Randbedingungen ist die Benutzung eines DtN-Operators (Dirichlet-to-Neumann map), der die Dirichlet-Daten der Lösung am künstlichen Rand auf ihre Neumann-Daten abbildet. Dieses Konzept ist recht allgemein und auch in höheren Raumdimensionen anwendbar (siehe Bemerkung 3.3). In unserem einfachen eindimensionalen Fall ist der DtN-Operator nur eine komplexe Zahl. Er ist das Verhältnis der Neumann- zu den Dirichlet-Daten und bildet beliebige Dirichlet-Daten auf Neumann-Daten ab. Die Randdaten der Lösung auf dem nun beschränkten Gebiet werden aber weiterhin nicht vorgegeben. Wir definieren einzeln für die beiden Randpunkte 0 und  $-a$ :

DEFINITION 3.1.

$$\begin{aligned} DtN_0(\nu) : \mathbb{C} &\rightarrow \mathbb{C} \\ \chi &\mapsto \left( i\sqrt{k_0^2 - \nu} \right) \chi \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} DtN_a(\nu) : \mathbb{C} &\rightarrow \mathbb{C} \\ \zeta &\mapsto \left( -i\sqrt{k_0^2 n_{\text{sub}}^2 - \nu} \right) \zeta \end{aligned}$$

Bei  $DtN_0$  beziehen wir uns auf die Randdaten des  $u_s$  und bei  $DtN_a(\nu)$  auf die des Gesamtfeldes  $u = u_i + u_s$ . Der Grund dafür ist, dass wir am Rand  $z = -a$  sonst keinen linearen Operator bekommen würden.

Es sei außerdem nochmal ausdrücklich darauf hingewiesen, dass die DtN-Operatoren auch von  $\nu$  abhängen. Für jedes feste  $\nu$  ergibt sich ein anderer beschränkter, linearer Operator. Warum leisten die eben definierten Operatoren  $DtN_0(\nu)$  und  $DtN_a(\nu)$  aber das zuvor beschriebene? Dazu machen wir zunächst eine Vorbemerkung:



BEMERKUNG 3.2. Für ein beliebiges beschränktes Gebiet  $\Sigma \subset \mathbb{R}$  gilt  $H^2(\Sigma) \subset C^1(\overline{\Sigma})$  (Satz 8.13, Anhang), weshalb wir ohne weiteres von Punktauswertungen für Funktion und Ableitung sprechen können und Randbedingungen für Funktionen aus  $H^2(\Sigma)$  im gewöhnlichen Sinne verstehen können.

Zur Motivation der Definition 3.1 betrachten wir das Aussehen von  $u_s$  für  $z > 0$  und von  $u$  für  $z < -a$ . Unter Ausnutzung der Stetigkeit von  $u_s$  und  $u'_s$  erhalten wir für  $u_s(0) \neq 0$

$$\frac{u'_s(0)}{u_s(0)} = \frac{Ci\kappa e^{i\kappa 0}}{Ce^{i\kappa 0}} = i\sqrt{k_0^2 - \nu}. \quad (3.2)$$

Für  $u_s(0) = 0$  ergibt sich  $u'_s(0) = 0$ . Daher bildet  $DtN_0(\nu)$  also  $u_s(0)$  auf  $u'_s(0)$  ab.

Analog gehen wir für  $DtN_a(\nu)$  vor. Das Gesamtfeld  $u$  erfüllt die homogene Differentialgleichung  $-u'' - (k_0^2 n_{\text{sub}}^2 - \nu)u = 0$  für  $z < -a$  mit konstanten Koeffizienten. Aufgrund der Bedingung (3.1c) ist das Gesamtfeld von der Form  $Ke^{-i\sqrt{k_0^2 n_{\text{sub}}^2 - \nu}z}$  mit einer Konstanten  $K \in \mathbb{C}$  und damit

$$\frac{u'(-a)}{u(-a)} = -\sqrt{k_0^2 n_{\text{sub}}^2 - \nu}. \quad (3.3)$$

Die Definition der  $DtN$ -Operatoren ist unabhängig von der Wahl des künstlichen Randes. Für jedes feste  $z \geq 0$  bekommt man das gleiche Verhältnis wie in (3.2). Analoges gilt für  $DtN_a(\nu)$ .

BEMERKUNG 3.3. Das Konzept des  $DtN$ -Operators lässt sich auf den zwei- und dreidimensionalen Fall verallgemeinern. Dann bildet der Operator von  $H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega_a)$  nach  $H^{-\frac{1}{2}}(\partial\Omega_a)$  ab und lässt sich nicht mehr so einfach definieren. Man definiert ihn dann über ein sogenanntes Außenraumproblem und muss dabei zusätzlich auf dessen Resonanzen achten.

Bei den Definitionen in Kapitel 2 haben wir bisher nur  $\gamma \in [0, k_0)$  betrachtet. Mit Blick auf folgende Kapitel zur genaueren Untersuchung des Streuproblems wollen wir auch allgemeinere  $\gamma$  zulassen. Wir beziehen uns bei der Verallgemeinerung direkt auf  $\nu$ , was natürlich automatisch auch die Menge der  $\gamma$  erweitert, und definieren

$$\mathfrak{Z} := \{\nu \in \mathbb{C} \mid \text{Re}(\nu) \in [0, k_0^2) \wedge (k_0^2 n_{\text{sub}}^2 - \nu) \notin i\mathbb{R}_0^-\}. \quad (3.4)$$

Für  $\nu \in \mathfrak{J}$  lässt sich unsere Definition von „ausstrahlend im oberen Bereich“ weiterhin sinnvoll interpretieren, denn

$$e^{i\sqrt{k_0^2-\nu}z} = e^{-\operatorname{Im}(\sqrt{k_0^2-\nu})z} e^{i\operatorname{Re}(\sqrt{k_0^2-\nu})z}$$

und somit ändert der Imaginärteil von  $\sqrt{k_0^2-\nu}$  nur den Betrag, aber nicht die Bewegung der Welle. Eine Welle der Form  $e^{i\sqrt{k_0^2-\nu}z}$  bewegt sich also weiterhin vom Schichtsystem weg, weil  $\operatorname{Re}(\sqrt{k_0^2-\nu}) > 0$  für  $\nu \in \mathfrak{J}$  und man kann analog zu den Überlegungen in Kapitel 2 argumentieren.

Offensichtlich sind alle bisher betrachteten  $\nu \in [0, k_0^2)$  in  $\mathfrak{J}$  enthalten. Wenn nicht anders angegeben, lassen wir mit Blick auf folgende Kapitel von nun an also  $\nu \in \mathfrak{J}$  zu.

Nach dieser Erweiterung kehren wir wieder zu  $DtN$ -Operatoren zurück, an deren Definition sich für  $\nu \in \mathfrak{J}$  nichts ändert. Aus der Beziehung  $u(-a) = u_s(-a) + u_i(-a)$  und  $u'(-a) = DtN_a(\nu)u(-a)$  folgern wir

$$u'_s(-a) = DtN_a(\nu)u_s(-a) + DtN_a(\nu)u_i(-a) - u'_i(-a). \quad (3.6)$$

Wir definieren außerdem

$$f_\nu(z) := k_0^2(n^2(z) - 1)u_{i,\nu}(z) \quad (3.7)$$

und suchen jetzt Lösungen in  $\Omega_a$ , die wir mit  $\tilde{u}_s$  bezeichnen. Die Randbedingungen formulieren wir über die  $DtN$ -Operatoren und erhalten folgende Problemformulierung im beschränkten Gebiet  $\Omega_a$ :

Finde  $\tilde{u}_s \in H^2(\Omega_a)$ , so dass

$$-\tilde{u}_s''(z) - (k_0^2 n^2(z) - \nu)\tilde{u}_s(z) = f_\nu(z) \quad \text{für } z \in \Omega_a \quad (3.8a)$$

$$\tilde{u}_s'(0) = DtN_0(\nu)\tilde{u}_s(0) \quad (3.8b)$$

$$\tilde{u}_s'(-a) = DtN_a(\nu)\tilde{u}_s(-a) + DtN_a(\nu)u_i(-a) - u'_i(-a) \quad (3.8c)$$

Für die nun folgenden Sätze und Aussagen dieses Kapitels genügt die Voraussetzung  $f_\nu \in L^2(\Omega_a)$  in (3.8a), was insbesondere für unser spezielles  $f_\nu|_{\Omega_a}$  gilt. Dass wir unsere Lösung durch die Einschränkung auf  $\Omega_a$  nicht geändert haben, sichert folgendes Lemma ab:

LEMMA 3.4. *Hat das Problem (3.1) eine Lösung, so ist die Einschränkung dieser Lösung auf  $\Omega_a$  eine Lösung von (3.8). Besitzt umgekehrt (3.8) eine Lösung, so existiert eine Fortsetzung dieser zu einer Lösung von (3.1).*

BEWEIS. Sei zuerst  $u_s$  eine Lösung von (3.1). Dann erfüllt trivialerweise  $\tilde{u}_s := u_s|_{\Omega_a}$  die Differentialgleichung (3.8a) in  $\Omega_a$ . Die Randbedingungen (3.8b) und (3.8c) sind nach Konstruktion der DtN-Zahlen und der Stetigkeit der Lösung von (3.1) sowie ihrer Ableitung ebenfalls sofort erfüllt. Hierbei ist insbesondere das Aussehen von  $u = u_s + u_i$  für  $z < -a$  zu beachten.  $\tilde{u}_s$  erfüllt also (3.8). Haben wir nun andersherum eine Lösung  $\tilde{u}_s$  von (3.8), dann erfüllt eine Funktion

$$u_s(z) := \begin{cases} (\tilde{u}_s(-a) + u_i(-a)) e^{-i\sqrt{k_0^2 n_{\text{sub}}^2 - \nu}(z+a)} - u_i(z), & z < -a \\ \tilde{u}_s(z), & z \in [-a, 0] \\ \tilde{u}_s(0) e^{i\sqrt{k_0^2 - \nu}z}, & z > 0 \end{cases} \quad (3.9)$$

die Differentialgleichung (3.1a) auf den Teilstücken  $\Omega_a$ ,  $(-\infty, -a)$  und  $(0, \infty)$ . Die „kritischen“ Punkte für die zweifache schwache Differenzierbarkeit sind  $z = -a$  und  $z = 0$ , da hier die „Teillösungen“ zusammengesetzt werden, denn außerhalb davon ist  $u_s$  ohnehin zweimal schwach differenzierbar. Die Stetigkeit bei  $z = 0$  ist sofort klar durch die Definition der Lösung  $u_s$  in (3.9) für  $z > 0$  und die Bedingung (3.8b) sichert ab, dass auch  $u'_s$  dort stetig ist. Am Randpunkt  $z = -a$  folgt analog aus der Definition unseres  $u_s$  für  $z < -a$  mit Hilfe von (3.8c) die Stetigkeit von  $u$  und  $u'$ . Wegen der Stetigkeit der einfallenden Welle  $u_i$  und ihrer Ableitung folgt sofort die Stetigkeit von  $u_s$  und  $u'_s$  bei  $z = -a$ .

Daher liegt  $u_s$  nach Anwendung des Lemmas 8.16 aus dem Anhang auf die Teilstücke  $(-b, -a)$ ,  $(-a, 0)$  und  $(0, c)$  für beliebige  $b > a$  und  $c > 0$  im Raum  $H_{\text{loc}}^2(\Omega)$ . Außerdem erfüllt die Funktion  $u_s$  offensichtlich (3.1b) und (3.1c) und wir haben eine Lösung von (3.1).  $\square$

DEFINITION 3.5. *Unter einer starken Lösung verstehen wir eine Funktion  $\tilde{u}_s \in H^2(\Omega_a)$ , die (3.8) erfüllt.*

## 3.2 Schwache Formulierung

Wir wollen jetzt schwache Lösungen  $\tilde{u}_s \in H^1(\Omega_a)$  suchen. Für die schwache Formulierung multiplizieren wir wie üblich mit einer Testfunktion  $\bar{v} \in H^1(\Omega_a)$  und integrieren dann über  $\Omega_a = [-a, 0]$ .

$$\int_{-a}^0 \left( -\tilde{u}_s'' - (k_0^2 n^2 - \nu) \tilde{u}_s \right) \bar{v} dz = \int_{-a}^0 f_\nu \bar{v} dz$$

Nun wird die linke Seite partiell integriert.

$$\int_{-a}^0 \tilde{u}_s' \bar{v}' dz - \tilde{u}_s'(-a) \bar{v}(-a) + \tilde{u}_s'(-a) \bar{v}(-a) - \int_{-a}^0 (k_0^2 n^2 - \nu) \tilde{u}_s \bar{v} dz = \int_{-a}^0 f_\nu \bar{v} dz$$

für alle  $v \in H^1(\Omega_a)$ . Wir ersetzen die Ableitungen von  $\tilde{u}_s$  an den Randpunkten durch die DtN-Operatoren und haben folgende Variationsformulierung von (3.8) erreicht:

$$B_\nu(\tilde{u}_s, v) = F_\nu(v) \quad \text{für alle } v \in H^1(\Omega_a) \quad (3.12a)$$

mit der Sesquilinearform  $B_\nu : H^1(\Omega_a) \times H^1(\Omega_a) \rightarrow \mathbb{C}$  sowie dem antilinearen Funktional  $F_\nu : H^1(\Omega_a) \rightarrow \mathbb{C}$  gegeben durch

$$B_\nu(\tilde{u}_s, v) = \int_{-a}^0 \tilde{u}_s' \bar{v}' dz - k_0^2 \int_{-a}^0 n^2 \tilde{u}_s \bar{v} dz + \nu \int_{-a}^0 \tilde{u}_s \bar{v} dz - DtN_0(\nu) \tilde{u}_s(0) \bar{v}(0) + DtN_a(\nu) \tilde{u}_s(-a) \bar{v}(-a), \quad (3.12b)$$

$$F_\nu(v) = \int_{-a}^0 f_\nu \bar{v} dz - \left( DtN_a(\nu) u_i(-a) - u_i'(-a) \right) \bar{v}(-a). \quad (3.12c)$$

Es ist zu beachten, dass  $(DtN_a(\nu) u_i(-a) - u_i'(-a))$  für jedes feste  $\nu$  nur eine feste komplexe Zahl ist, da die einfallende Welle explizit gegeben ist.

Die Variationsformulierung können wir äquivalent mit Operatoren ausdrücken. Dazu definieren wir  $I : H^1(\Omega_a) \rightarrow H^1(\Omega_a)$ ,  $T(\nu) : H^1(\Omega_a) \rightarrow H^1(\Omega_a)$  und

$G(f_\nu) \in H^1(\Omega_a)$  implizit durch:

$$\langle I\tilde{u}_s, v \rangle_{H^1(\Omega_a)} = \int_{-a}^0 \tilde{u}_s \bar{v}' + \tilde{u}_s \bar{v} dz \quad (3.13a)$$

$$\begin{aligned} \langle T(\nu)\tilde{u}_s, v \rangle_{H^1(\Omega_a)} &= -k_0^2 \int_{-a}^0 n^2 \tilde{u}_s \bar{v} dz + (\nu - 1) \int_{-a}^0 \tilde{u}_s \bar{v} dz \\ &\quad - DtN_0(\nu) \tilde{u}_s(0) \bar{v}(0) + DtN_a(\nu) \tilde{u}_s(-a) \bar{v}(-a) \end{aligned} \quad (3.13b)$$

$$\langle G(f_\nu), v \rangle_{H^1(\Omega_a)} = F_\nu(v) \quad (3.13c)$$

Für diese Darstellung wurden die Sätze 8.4 und 8.3 aus dem Anhang verwendet. In Operatorschreibweise ergibt sich:

$$(I + T(\nu))\tilde{u}_s = G(f_\nu) \quad (3.13d)$$

**DEFINITION 3.6.** *Unter einer schwachen Lösung verstehen wir eine Funktion  $\tilde{u}_s$ , die (3.13d) beziehungsweise (3.12a) erfüllt.*

**LEMMA 3.7.** *Jede starke Lösung ist auch eine schwache Lösung.*

**BEWEIS.** Das ist klar, da jede Lösung von (3.8) in  $\Omega_a$  zweimal schwach differenzierbar ist und so folgt die Behauptung durch Anwendung der obigen Schritte zur Herleitung der Variationsformulierung auf die von der starken Lösung erfüllte Gleichung (3.8a) für beliebige Testfunktionen  $\bar{v} \in H^1(\Omega_a)$ . Die Variationsformulierung (3.12a) ist dann unter Einbeziehung der Randbedingungen trivialerweise erfüllt.  $\square$

**SATZ 3.8.** *Jede schwache Lösung ist auch eine starke Lösung.*

**BEWEIS.** Da unserer Differentialoperator offensichtlich gleichmäßig elliptisch ist, der Koeffizient vor dem  $\tilde{u}_s$  in  $L^\infty(\Omega_a)$  liegt und  $f_\nu \in L^2(\Omega_a)$  folgt die Aussage aus Satz 8.17 über globale Regularität elliptischer Differentialgleichungen aus dem Anhang. Eigentlich ist der Satz für Dirichlet-Randbedingungen formuliert, was aber in unserem Fall keinen Unterschied macht, weil der Rand ohnehin nur aus zwei Punkten besteht und bei der Regularität keine Probleme bereitet. Es ist im Wesentlichen nur die Regularität im Inneren zu beweisen.  $\square$

Bisher wurde noch keine Aussage über Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen der betrachteten Probleme gemacht. Das werden wir jetzt für die schwache Formulierung des Problems nachholen. Wir untersuchen hier die Existenz von Lösungen sowie die eindeutige Lösbarkeit zunächst nur für  $\nu$  mit  $\operatorname{Re}(\nu) \in [0, k_0^2]$  und  $\operatorname{Im}(\nu) \leq 0$ , was alle sinnvollen reellen  $\nu$  umfasst (vergleiche Abschnitt 2.3). Im vorbereitenden Lemma betrachten wir aber gleich ganz allgemein  $\nu \in \mathbb{C} \setminus \mathfrak{W}$  mit

$$\mathfrak{W} := \left\{ \nu \in \mathbb{C} \mid (k_0^2 - \nu) \in i\mathbb{R}_0^- \vee (k_0^2 n_{\text{sub}}^2 - \nu) \in i\mathbb{R}_0^- \right\}, \quad (3.14)$$

weil wir dieses Resultat später noch benötigen werden.

LEMMA 3.9.  $T(\nu)$ , definiert durch (3.13b), ist für alle  $\nu \in \mathbb{C} \setminus \mathfrak{W}$  ein kompakter Operator in  $H^1(\Omega_a)$ .

BEWEIS.  $T(\nu)$  lässt sich zerlegen in  $T_1(\nu) + T_2(\nu)$  mit

$$\begin{aligned} \langle T_1(\nu)\varphi, \psi \rangle_{H^1(\Omega_a)} &= -k_0^2 \int_{-a}^0 n^2 \varphi \bar{\psi} dz + (\nu - 1) \int_{-a}^0 \varphi \bar{\psi} dz \\ \langle T_2(\nu)\varphi, \psi \rangle_{H^1(\Omega_a)} &= -DtN_0 \varphi(0) \bar{\psi}(0) + DtN_a \varphi(-a) \bar{\psi}(-a) \end{aligned}$$

für  $\varphi, \psi \in H^1(\Omega_a)$ .

Da  $n \in L^\infty(\mathbb{R})$  und da die Einbettung  $J : H^1(\Omega_a) \rightarrow L^2(\Omega_a)$  kompakt und damit auch  $J^*$  kompakt ist, ergibt sich aus der für alle  $\varphi, \psi \in H^1(\Omega_a)$  gültigen Gleichung

$$\begin{aligned} \langle T_1(\nu)\varphi, \psi \rangle_{H^1(\Omega_a)} &= \left\langle - (k_0^2 n^2 - \nu + 1) J\varphi, J\psi \right\rangle_{L^2(\Omega_a)} \\ &= \left\langle - (k_0^2 n^2 - \nu + 1) J^* J\varphi, \psi \right\rangle_{H^1(\Omega_a)}. \end{aligned}$$

insgesamt, dass  $T_1(\nu) = (k_0^2 n^2 - \nu + 1) J^* J$  kompakt ist für alle  $\nu \in \mathbb{C}$ .

Definiere Spurooperatoren  $Tr_0 : H^1(\Omega_a) \rightarrow \mathbb{C}$  mit  $\varphi \mapsto \varphi(0)$  und  $Tr_a : H^1(\Omega_a) \rightarrow \mathbb{C}$  mit  $\varphi \mapsto \varphi(-a)$ . Da  $H^1(\Omega_a) \subset C^0(\bar{\Omega}_a)$  für  $\Omega_a \subset \mathbb{R}$  (Satz 8.13 aus dem Anhang), sind die Operatoren  $Tr_0$  und  $Tr_a$  wohldefiniert. Außerdem sind sie stetig wegen der Abschätzung  $\|\varphi\|_{L^\infty(\Omega_a)} \leq C_s \|\varphi\|_{H^1(\Omega_a)}$  für alle  $\varphi \in H^1(\Omega_a)$  mit einer Konstanten  $C_s > 0$  (gleicher Satz). Nun kann man schreiben:

$$\begin{aligned} -DtN_0(\nu) \varphi(0) \bar{\psi}(0) &= -DtN_0(\nu) Tr_0 \varphi \overline{Tr_0 \psi} \\ &= \left\langle -DtN_0(\nu) Tr_0 \varphi, Tr_0 \psi \right\rangle_{\mathbb{C}} = \left\langle -Tr_0^* DtN_0(\nu) Tr_0 \varphi, \psi \right\rangle_{H^1(\Omega_a)} \end{aligned}$$

für alle  $\varphi, \psi \in H^1(\Omega_a)$  mit dem adjungierten Operator  $Tr_0^* : \mathbb{C} \rightarrow H^1(\Omega_a)$ . Analoges gilt für den Term mit  $DtN_a(\nu)$  und somit ergibt sich für  $T_2(\nu)$  eine Summe von zwei Operatoren, die jeweils ein Produkt kompakter Operatoren sind, denn  $Tr_0$  und  $Tr_a$  haben ein endlichdimensionales Bild und sind somit kompakt. Die adjungierten Operatoren sind dann ebenfalls kompakt und  $DtN_0$  sowie  $DtN_a$  sind lediglich komplexe Zahlen.

Daher ist  $T_2(\nu)$  als Summe kompakter Operatoren und damit auch  $T(\nu)$  kompakt für alle  $\nu \in \mathbb{C}$ .  $\square$

**SATZ 3.10.** *Die Variationsformulierung  $B_\nu(\tilde{u}_s, v) = F_\nu(v)$  für alle  $v \in H^1(\Omega_a)$  besitzt für jedes  $\nu$  mit  $\operatorname{Re}(\nu) \in [0, k_0^2)$  und  $\operatorname{Im}(\nu) \leq 0$  eine eindeutige Lösung  $\tilde{u}_s \in H^1(\Omega_a)$ .*

**BEWEIS.** Der zu  $B_\nu$  gehörige Operator  $I + T(\nu)$  ist wegen Lemma 3.9 ein Fredholmoperator. Daher können wir den Fredholmschen Satz (Satz 8.5 aus dem Anhang) anwenden, und es genügt zu zeigen, dass  $I + T(\nu)$  für jedes feste  $\nu$  mit  $\operatorname{Re}(\nu) \in [0, k_0^2)$  und  $\operatorname{Im}(\nu) \leq 0$  trivialen Nullraum hat. Wir müssen also zeigen, dass aus

$$B_\nu(\tilde{u}_s, v) = 0 \quad \text{für alle } v \in H^1(\Omega_a) \quad (3.15)$$

stets  $\tilde{u}_s = 0$  folgt.

Setze speziell  $v = \tilde{u}_s$  in (3.15) ein, dann gilt

$$\begin{aligned} \operatorname{Im}(B_\nu(\tilde{u}_s, \tilde{u}_s)) &= \operatorname{Im} \left( \|\tilde{u}_s\|_{H^1(\Omega_a)}^2 - \int_{-a}^0 k_0^2 n^2 |\tilde{u}_s|^2 dz + (\nu - 1) \|\tilde{u}_s\|_{L^2(\Omega_a)}^2 \right) \\ &\quad + \operatorname{Im}(-DtN_0(\nu) |\tilde{u}_s(0)|^2 + DtN_a(\nu) |\tilde{u}_s(-a)|^2) = 0. \end{aligned}$$

Es ergibt sich

$$\begin{aligned} &-k_0^2 \int_{-a}^0 \operatorname{Im}(n^2) |\tilde{u}_s|^2 dz + \operatorname{Im}(\nu) \|\tilde{u}_s\|_{L^2(\Omega_a)}^2 \\ &\quad + \operatorname{Im} \left( -i\sqrt{k_0^2 - \nu} |\tilde{u}_s(0)|^2 - i\sqrt{k_0^2 n_{\text{sub}}^2 - \nu} |\tilde{u}_s(-a)|^2 \right) \\ &= -k_0^2 \int_{-a}^0 \operatorname{Im}(n^2) |\tilde{u}_s|^2 dz + \operatorname{Im}(\nu) \|\tilde{u}_s\|_{L^2(\Omega_a)}^2 \\ &\quad - \operatorname{Re} \left( \sqrt{k_0^2 - \nu} \right) |\tilde{u}_s(0)|^2 - \operatorname{Re} \left( \sqrt{k_0^2 n_{\text{sub}}^2 - \nu} \right) |\tilde{u}_s(-a)|^2 = 0. \quad (3.16) \end{aligned}$$

Wegen  $\operatorname{Re}(\nu) \in [0, k_0^2)$  gilt  $\operatorname{Re}(\sqrt{k_0^2 - \nu}) > 0$  und wegen  $\operatorname{Im}(\nu) \leq 0$  und  $n_{\text{sub}} \in (0, 1]$  (siehe (2.1d)) auch  $\operatorname{Re}(\sqrt{k_0^2 n_{\text{sub}}^2 - \nu}) \geq 0$ . Aufgrund der Voraussetzungen (2.1a) und (2.1b) an die Brechungsfunktion ist  $\operatorname{Im}(n^2(z)) \geq 0$  für alle  $z \in [-a, 0]$ . Daher folgt mit  $\operatorname{Im}(\nu) \leq 0$  aus (3.16), dass

$$\tilde{u}_s(0) = \tilde{u}'_s(0) = 0. \quad (3.17)$$

Nach Satz 3.8 ist  $\tilde{u}_s$  dann also eine Lösung des folgenden Problems:

Finde  $\tilde{u}_s \in H^2(\Omega_a)$ , so dass

$$-\tilde{u}_s''(z) - (k_0^2 n^2(z) - \nu)\tilde{u}_s(z) = 0 \quad \text{für } z \in \Omega_a \quad (3.18)$$

$$\tilde{u}'_s(0) = 0 \quad (3.19)$$

$$\tilde{u}'_s(-a) = DtN_a(\nu)\tilde{u}_s(-a). \quad (3.20)$$

Insbesondere löst  $\tilde{u}_s$  in  $(-a, 0)$  die gewöhnliche Differentialgleichung  $-\tilde{u}_s''(z) - (k_0^2 n^2(z) - \nu)\tilde{u}_s(z) = 0$  mit den Bedingungen (3.17) und kann als Anfangswertproblem aufgefasst werden. Dessen eindeutige Lösbarkeit folgt nach Reduktion auf ein System von zwei Differentialgleichungen erster Ordnung mit Hilfe des Satzes 8.19 aus dem Anhang (Die Voraussetzungen lassen sich durch direktes Nachrechnen überprüfen.). Daher muss  $\tilde{u}_s$  in  $[-a, 0]$  identisch Null sein.  $\square$



## 4 Resonanzen

Jetzt sollen zwei Definitionen von Resonanzen gegeben und dabei die Resolvente eingeführt werden. Wir werden auch komplexe Werte als Resonanzen zulassen. Den Zusammenhang mit den reellen Resonanzfrequenzen werden wir später in der Arbeit erläutern.

Eine Untersuchung der Eigenschaften der Resolvente ist ebenfalls Thema dieses Kapitels. Darüberhinaus wird in diesem Kapitel gezeigt, dass die beiden Definitionen von Resonanzen, als Eigenwerte zu nichttrivialen, eine Ausstrahlungsbedingung erfüllenden Lösungen und als Pole der Resolvente, äquivalent sind und dass die einfallende Welle die Resonanzen anregen kann.

### 4.1 Zwei Definitionen von Resonanzen

Wir werden zuerst die zwei alternativen Definitionen von Resonanzen formulieren.

**DEFINITION 4.1 (1. DEFINITION VON RESONANZEN).** *Eine komplexe Zahl  $\nu_\star \in \mathfrak{I}$  heißt Resonanz, wenn nichttriviale Lösungen  $u_{s\star} \in H^2(\Omega)$  (Resonanzfunktionen) der folgenden Eigenwertgleichung existieren:*

$$-u_{s\star}''(z) - (k_0^2 n^2(z) - \nu_\star) u_{s\star}(z) = 0 \quad \text{für } z \in \Omega \quad \text{und} \quad (4.1a)$$

$$u_{s\star} \text{ ist ausstrahlend im oberen Bereich} \quad (4.1b)$$

$$u_{s\star} \text{ ist ausstrahlend im unteren Bereich} \quad (4.1c)$$

Analog kann man Resonanzen auch für andere Probleme und in höheren Dimensionen definieren. Entscheidend bei dieser ersten Definition ist die Charakterisierung der Resonanzen als Eigenwerte. Dass (4.1a) tatsächlich eine Eigenwertgleichung ist, sieht man ein, wenn man den Operator  $H := -\frac{d^2}{dz^2} - k_0^2 n^2(z)$

definiert. Dann schreibt sich (4.1a) als

$$Hu_{s^*} = -\nu_{s^*}u_{s^*} \quad (4.2)$$

Bei der weiteren Untersuchung der Resonanzen und ihrer numerischen Berechnung werden wir auch mit der DtN-Formulierung des Eigenwertproblems (4.1) arbeiten. Alle Sätze, Definitionen und sonstigen Resultate aus Kapitel 3 bleiben gültig, wenn wir einfach  $u_i = 0$  setzen, was gerade die Benutzung von (4.1) als „Ausgangsproblem“ in Kapitel 3 bedeutet.

Die zweite Definition von Resonanzen nutzt die sogenannte Resolvente. Wie bereits in Kapitel 3 angedeutet, können wir  $I + T(\nu)$  durch (3.13a) und (3.13b) für alle  $\nu \in \mathbb{C} \setminus \mathfrak{W}$  definieren, mit  $\mathfrak{W}$  aus (3.14).

**DEFINITION 4.2 (2. DEFINITION VON RESONANZEN).** *Eine komplexe Zahl  $\nu_{s^*} \in \mathfrak{Z}$  heißt Resonanz, wenn  $\nu_{s^*}$  ein Pol der Resolvente*

$$R(\nu) : H^1(\Omega_a) \rightarrow H^1(\Omega_a) \text{ mit } R(\nu) := (I + T(\nu))^{-1} \text{ ist.} \quad (4.3)$$

Mit der vereinfachenden Ausdrucksweise „Pol der Resolvente“ meinen wir genau genommen einen Pol der Abbildung  $R : \mathbb{C} \setminus \mathfrak{W} \rightarrow \mathbb{C}$  mit  $\nu \mapsto R(\nu)$ . Zunächst stellt sich natürlich die Frage, warum wir eine weitere Definition formulieren. Zwar ist die Eigenwertstruktur des Problems erstmal verloren, aber dafür kann man interessante Erkenntnisse über die Resonanzen gewinnen. Zuerst sehen wir uns daher auch die zweite Definition und somit die Resolvente genauer an.

## 4.2 Eigenschaften der Resolvente

Wir haben die Resolvente für  $\nu \in \mathbb{C} \setminus \mathfrak{W}$  definiert, denn tatsächlich gilt nämlich sogar das folgende Resultat:

**LEMMA 4.3.** *Die Abbildung  $\nu \mapsto T(\nu)$  mit dem in (3.13b) definierten Operator ist eine operatorwertige holomorphe Funktion auf  $\mathbb{C} \setminus \mathfrak{W}$  mit Werten in  $\mathfrak{L}(H^1([a, b]))$ .*

BEWEIS. Der Beweis nutzt Satz 8.9 aus den Grundlagen im Anhang. Da hier  $X = Y = H^1(\Omega_a)$  ein Hilbertraum ist, vereinfacht sich der Satz, denn wir können jedes lineare Funktional  $l$  aus dem Dualraum  $H^1(\Omega_a)^*$  nach dem Rieszschen Darstellungssatz eindeutig mit einem Element  $\check{v} \in H^1(\Omega_a)$  identifizieren und durch  $\langle u, \check{v} \rangle_{H^1(\Omega_a)}$  darstellen. Es reicht also zu zeigen:

$$\begin{aligned} \langle T(\nu)\varphi, \psi \rangle_{H^1(\Omega_a)} &= \int_{-a}^0 -k_0^2 n^2 \varphi \bar{\psi} dz + (\nu - 1) \int_{-a}^0 \varphi \bar{\psi} dz \\ &\quad - DtN_0(\nu) \varphi(0) \bar{\psi}(0) + DtN_a(\nu) \varphi(-a) \bar{\psi}(-a) \end{aligned}$$

ist holomorph für alle  $\varphi, \psi \in H^1(\Omega_a)$ . Das ist aber klar, denn für feste  $\varphi, \psi \in H^1(\Omega_a)$  sind die Integralausdrücke nur komplexe Zahlen und somit konstante Funktionen, wenn man die Abhängigkeit von  $\nu$  betrachtet und daher holomorph. Die Funktion  $\nu \mapsto (\nu - 1)$  ist ebenfalls holomorph. Die DtN-Operatoren wurden in Kapitel 3 explizit angegeben und sind Wurzelfunktionen. Wenn man  $i\mathbb{R}_0^-$  ausnimmt, ist die von uns verwendete komplexe Logarithmusfunktion holomorph und damit die Verkettung von komplexer Exponentialfunktion mit dieser und somit ist schließlich die Wurzelfunktion holomorph auf der gleichen Menge.

Insgesamt ist die rechte Seite also als Produkt und Summe holomorpher Funktionen holomorph auf der angegebenen Menge und mit Hilfe des Satzes 8.9 auch  $T(\nu)$ .  $\square$

Nach Lemma 4.3 ist der Operator  $I + T(\nu)$  also analytisch auf  $\mathbb{C} \setminus \mathfrak{W}$ . Mit den Resultaten von Lemma 3.9 und Lemma 4.3 sind die Voraussetzungen des folgenden allgemeinen Satzes erfüllt, der erstmals 1968 von Stanly Steinberg ([23]) formuliert wurde:

**SATZ 4.4.** *Sei  $X$  ein Banachraum,  $D \subseteq \mathbb{C}$  ein Gebiet und  $T : D \rightarrow \mathfrak{L}(X)$  eine operatorwertige analytische Funktion. Es sei außerdem  $T(\nu)$  kompakt für alle  $\nu \in D$ . Dann gilt entweder (i) oder (ii):*

- (i)  $(I - T(\nu))$  ist für kein  $\nu \in D$  invertierbar.
- (ii)  $(I - T(\nu))$  ist invertierbar bis auf höchstens eine diskrete Teilmenge von  $D$  und  $(I - T(\nu))^{-1}$  ist meromorph in  $D$ .

BEWEIS. Der Beweis soll hier nicht ausgeführt werden, da er zu weit vom eigentlichen Thema wegführen würde. Dennoch sei kurz eine von mehreren Beweismöglichkeiten skizziert: Die Anwendung eines Satzes aus der Fredholm-Theorie (Satz 8.5 im Anhang) auf  $I - T(\nu_0)$  für festes  $\nu_0$  liefert zwei zu unterscheidende Fälle. Im ersten Fall existiert eine beschränkte Inverse von  $I - T(\nu_0)$  und es lässt sich zeigen, dass eine solche dann auch in einer Umgebung von  $\nu_0$  existiert und  $\nu \mapsto (I - T(\nu_0))^{-1}$  hier insbesondere holomorph ist. Im zweiten Fall hat der Operator  $I - T(\nu_0)$  einen nichttrivialen Nullraum und man erreicht durch geschickte Einführung von Operatoren die Reduktion auf ein endlichdimensionales Problem, um die Frage nach der Invertierbarkeit in einer Umgebung von  $\nu_0$  zu klären. Die zugehörige Determinante des endlichdimensionalen Systems ist eine holomorphe Funktion in  $\nu$  und es können Sätze aus der klassischen Funktionentheorie darauf angewendet werden, womit man folgern kann, dass  $I - T(\nu)$  entweder für kein  $\nu$  oder für alle bis auf eine diskrete Menge invertierbar ist in einer Umgebung von  $\nu_0$ . Ein Zusammenhangsargument liefert die Aussage auch für ganz  $D$ . Dann muss noch gezeigt werden, dass  $(I - T(\nu))^{-1}$  auch wirklich meromorph ist, was insbesondere bedeutet, dass die Punkte, an denen  $I - T(\nu)$  nicht invertierbar ist, Pole sind.

Ein etwas anderer Beweis findet sich in [26] (Chapter 9, Proposition 7.4). Die Idee der Transformation in ein endlichdimensionales Problem und die Anwendung von Sätzen aus der klassischen Funktionentheorie wird auch in diesem Beweis benutzt.  $\square$

SATZ 4.5.  $R(\nu)$  ist eine meromorphe Funktion auf  $\mathbb{C} \setminus \mathfrak{W}$ .

BEWEIS. Das Ergebnis ist eine unmittelbare Folge aus den Lemmata 4.3, 3.9 und Satz 4.4. Wegen Satz 3.10 kann der erste Fall aus Satz 4.4 nicht eintreten.  $\square$

Demnach ist die Menge der Pole von  $R(\nu)$  diskret. Sie besteht aus den Resonanzen nach der zweiten Definition und unzulässigen Werten.

### 4.3 Äquivalenz der Definitionen

Nach unserer zweiten Definition haben wir also höchstens eine diskrete Menge von Resonanzen. Dieses und weitere Resultate möchten wir gerne auf die andere Definition von Resonanzen als Eigenwerte übertragen. Wir zeigen daher

die Äquivalenz der Eigenschaft Pol der Resolvente zu sein, dazu, Eigenwert des Problems (4.1) zu sein.

**SATZ 4.6.** *Die beiden Definitionen 4.1 und 4.2 von Resonanzen sind äquivalent.*

**BEWEIS.** Sei  $\nu_*$  zuerst eine Resonanz nach Definition 4.1, das heißt also ein Eigenwert zu einer nichttrivialen, im oberen und unteren Bereich ausstrahlenden Lösung  $u_{s^*} \in H_{\text{loc}}^2(\Omega)$  des Problems (4.1). Damit haben wir nach Lemma 3.4 eine nichttriviale Lösung  $\tilde{u}_{s^*} \in H^2(\Omega_a)$  der folgenden homogenen Form von (3.8).

$$-\tilde{u}_{s^*}''(z) - (k_0^2 n^2(z) - \nu_*)\tilde{u}_{s^*}(z) = 0 \quad \text{für alle } z \in \Omega_a \quad (4.4a)$$

$$\tilde{u}_{s^*}'(0) = DtN_0(\nu)\tilde{u}_{s^*}(0) \quad (4.4b)$$

$$\tilde{u}_{s^*}'(-a) = DtN_a(\nu)\tilde{u}_{s^*}(-a) \quad (4.4c)$$

Nach Lemma 3.7 löst dieses  $\tilde{u}_{s^*}$  dann auch die Variationsformulierung für  $F_\nu(v) = 0$ . Anders ausgedrückt gilt  $(I + T(\nu_*))\tilde{u}_{s^*} = 0$  mit  $\tilde{u}_{s^*} \neq 0$ . Damit ist die Resolvente  $R(\nu)$  an der Stelle  $\nu_*$  nicht invertierbar. Nach Satz 4.10 sind solche Punkte aber gerade Pole, d.h.  $\nu_*$  ist ein Pol von  $R(\nu)$ .

Sei jetzt andersherum  $\nu_*$  eine Resonanz nach Definition 4.2, also ein Pol der Resolvente. Dann ist  $I + T(\nu_*)$  nicht invertierbar, es existiert demnach ein  $\tilde{u}_{s^*} \neq 0$  aus  $H^1(\Omega_a)$  mit  $(I + T(\nu_*))\tilde{u}_{s^*} = 0$ , da nach Satz 8.5 Injektivität und Surjektivität äquivalent sind.  $\tilde{u}_{s^*}$  ist dann auch Lösung von (4.4) und in  $H^2(\Omega_a)$  nach Satz 3.8. Dies ist aber äquivalent dazu eine nichttriviale, im oberen und unteren Bereich ausstrahlende Lösung von (4.1) zu finden (Lemma 3.4) und somit ist  $\nu_*$  eine Resonanz nach Definition 4.1.  $\square$

Aus dieser Äquivalenz folgt mit Satz 4.5, dass auch bei der Berechnung der Resonanzen über das Eigenwertproblem höchstens eine diskrete Menge von Eigenwerten existiert. Wir erhalten zudem mit beiden Definitionen die gleiche diskrete Menge von Resonanzen.

## 4.4 Anregung und Lage von Resonanzen

Sehr einfach können wir außerdem mit Satz 3.10 aus dem vorherigen Kapitel die Lage der Resonanzen eingrenzen.

KOROLLAR 4.7. *Es existieren keine Resonanzen mit  $\text{Im}(\nu) \leq 0$ .*

BEWEIS. Wir haben in Satz 3.10 bewiesen, dass die Resolvente invertierbar ist für alle  $\nu \in \mathfrak{Z}$  mit  $\text{Im}(\nu) \leq 0$ . Somit kann es keine Resonanzen mit  $\text{Im}(\nu) \leq 0$  geben.  $\square$

Nun stellt sich die Frage, ob Resonanzen, wenn sie existieren, durch die einfallende Welle auch angeregt werden können. Mathematisch bedeutet das, ob die Funktion  $\nu \mapsto R(\nu)G(f_\nu)$  die gleichen Pole  $\nu \in \mathfrak{Z}$  besitzt wie die Abbildung  $\nu \mapsto R(\nu)$ .  $R(\nu)G(f)$  muss für spezielle  $f \in L^2(\Omega_a)$  nicht unbedingt einen Pol bei  $\nu = \nu_*$  besitzen, wenn  $R(\nu)$  dort einen besitzt. Wir müssen untersuchen, ob das aus der einfallenden Welle resultierende  $f_\nu = k_0^2(n^2 - 1)u_{i,\nu}$  beziehungsweise  $G(f_\nu)$  den Pol erhält. Die folgenden Resultate helfen uns weiter.

LEMMA 4.8.  *$G(f_\nu) : \mathbb{C} \setminus \mathfrak{W} \rightarrow H^1(\Omega_a)$  ist eine holomorphe Funktion von  $\nu$ .*

BEWEIS.  $G(f_\nu)$  ist implizit definiert durch

$$\langle G(f_\nu), v \rangle_{H^1(\Omega_a)} = \int_{-a}^0 f_\nu \bar{v} dz - \left( DtN_a(\nu)u_{i,\nu}(-a) - u'_{i,\nu}(-a) \right) \bar{v}(-a). \quad (4.5)$$

Wir beweisen die schwache Holomorphie von  $G(f_\nu)$ , woraus die Holomorphie folgt (Anhang, Satz 8.7). Es reicht nach dem Riesz'schen Darstellungssatz also wieder zu zeigen, dass (4.5) für jedes feste  $v \in H^1(\Omega_a)$  holomorph ist. Die Holomorphie von  $(DtN_a(\nu)u_{i,\nu}(-a) - u'_{i,\nu}(-a))\bar{v}(-a)$  auf  $\mathbb{C} \setminus \mathfrak{W}$  ist durch die Definitionen von  $DtN_a(\nu)$  und  $u_{i,\nu}$  klar. Schwieriger ist die Holomorphie von

$$l(\nu) := \int_{-a}^0 f_\nu \bar{v} dz = \int_{-a}^0 k_0^2(n^2(z) - 1)e^{-i\sqrt{k_0^2 - \nu}z} \bar{v} dz \quad (4.6)$$

zu zeigen. Da  $[-a, 0]$  ein kompaktes Intervall ist und  $k_0^2(n^2(z) - 1)\bar{v} \in L^1(\Omega_a)$ , kann man für jedes feste  $\nu$  direkt die Definition der Holomorphie über den Grenzwert ausnutzen und erhält mit Hilfe des Satzes von Lebesgue über dominierte Konvergenz (siehe [20], Satz 1.34) die Holomorphie von  $l$  für dieses  $\nu$ . Insgesamt erhalten wir die Holomorphie der rechten Seite von (4.5) für jedes feste  $v \in H^1(\Omega)$ .  $\square$

LEMMA 4.9. Sei  $\nu_*$  eine Resonanz und  $u_{s^*}$  eine zugehörige Resonanzfunktion, also  $u_{s^*} \neq 0$  mit  $(I + T(\nu_*))\tilde{u}_{s^*} = 0$ , wobei  $\tilde{u}_{s^*} = u_{s^*}|_{\Omega_a}$ . Dann gilt:

- a)  $(I + T(\nu_*)^*)\overline{\tilde{u}_{s^*}} = 0$   
 b)  $\left\langle G(f_{\nu_*}), \overline{\tilde{u}_{s^*}} \right\rangle_{H^1(\Omega_a)} = -2i\sqrt{k_0^2 - \nu_*}\tilde{u}_{s^*}(0) \neq 0.$

BEWEIS. a) Für beliebiges  $v \in H^1([-a, 0])$  gilt

$$\begin{aligned} & \left\langle \overline{v}, (I + T(\nu_*)^*)\overline{\tilde{u}_{s^*}} \right\rangle_{H^1(\Omega_a)} = \left\langle (I + T(\nu_*))\overline{v}, \overline{\tilde{u}_{s^*}} \right\rangle_{H^1(\Omega_a)} \\ & = \int_{-a}^0 \overline{v}' \tilde{u}_{s^*} - k_0^2 \int_{-a}^0 n^2 \overline{v} \tilde{u}_{s^*} dz + \nu_* \int_{-a}^0 \overline{v} \tilde{u}_{s^*} dz \\ & \quad - DtN_0(\nu_*)\overline{v}(0)\tilde{u}_{s^*}(0) + DtN_a(\nu_*)\overline{v}(-a)\tilde{u}_{s^*}(-a) \\ & = \langle (I + T(\nu_*))\tilde{u}_{s^*}, v \rangle_{H^1(\Omega_a)} = 0. \end{aligned}$$

Da  $v \in H^1(\Omega_a)$  beliebig war, folgt  $(I + T(\nu_*)^*)\overline{\tilde{u}_{s^*}} = 0$ .

b) Nach Definition ist  $f_\nu = k_0^2(n^2 - 1)u_{i,\nu} = u_{i,\nu}'' + (k_0^2n^2 - \nu)u_{i,\nu}$  mit  $u_{i,\nu} = e^{-i\sqrt{k_0^2 - \nu}z}$  und

$$\begin{aligned} \left\langle G(f_{\nu_*}), \overline{\tilde{u}_{s^*}} \right\rangle_{H^1(\Omega_a)} & = \int_{-a}^0 \left[ u_{i,\nu_*}'' + (k_0^2n^2 - \nu_*)u_{i,\nu_*} \right] \tilde{u}_{s^*} dz \\ & \quad - \left[ DtN_a(\nu_*)u_{i,\nu_*}(-a) - u_{i,\nu_*}'(-a) \right] \tilde{u}_{s^*}(-a). \end{aligned}$$

Mit zweimaliger partieller Integration erhalten wir

$$\begin{aligned} \left\langle G(f_{\nu_*}), \overline{\tilde{u}_{s^*}} \right\rangle_{H^1(\Omega_a)} & = \int_{-a}^0 u_{i,\nu_*} \left[ \tilde{u}_{s^*}'' + (k_0^2n^2 - \nu_*)\tilde{u}_{s^*} \right] dz \\ & \quad + \tilde{u}_{s^*}(0)u_{i,\nu_*}'(0) - \tilde{u}_{s^*}(-a)u_{i,\nu_*}'(-a) - \tilde{u}_{s^*}'(0)u_{i,\nu_*}(0) + \tilde{u}_{s^*}'(-a)u_{i,\nu_*}(-a) \\ & \quad - \left[ DtN_a(\nu_*)u_{i,\nu_*}(-a) - u_{i,\nu_*}'(-a) \right] \tilde{u}_{s^*}(-a). \quad (4.7) \end{aligned}$$

$u_{s^*}$  ist eine Resonanzfunktion zu  $\nu_*$ . Wie wir schon im Beweis von Satz 4.6 gesehen haben, ist  $\tilde{u}_{s^*}$  Lösung des Problems (4.4). Insbesondere gilt  $\tilde{u}_{s^*}'' + (k_0^2n^2 - \nu_*)\tilde{u}_{s^*} = 0$ , und zusammen mit den über die DtN-Operatoren formulierten Randbedingungen vereinfacht sich (4.7) zu

$$\left\langle G(f_{\nu_*}), \overline{\tilde{u}_{s^*}} \right\rangle_{H^1(\Omega_a)} = -2i\sqrt{k_0^2 - \nu_*}\tilde{u}_{s^*}(0). \quad (4.8)$$

Es gilt  $\tilde{u}_{s^*}(0) \neq 0$ , denn wäre  $\tilde{u}_{s^*}(0) = 0$ , würde mit

$$\tilde{u}'_{s^*}(0) = DtN_0(\nu_*)u_{s^*} = 0, \quad (4.9)$$

wie im Beweis von Satz (3.10), sofort der Widerspruch  $\tilde{u}_{s^*} = 0$  für alle  $z \in \Omega_a$  (woraus  $u_{s^*} = 0$  für alle  $z \in \Omega$  folgt) folgen mit dem Satz zur eindeutigen Lösbarkeit von Anfangswertproblemen aus dem Anhang.  $\square$

SATZ 4.10. *Die folgenden zwei Aussagen sind äquivalent:*

- a)  $\nu_*$  ist ein Pol von  $\nu \mapsto R(\nu)$ .
- b)  $\nu_*$  ist ein Pol von  $\nu \mapsto R(\nu)G(f_\nu)$ .

BEWEIS. Sei  $\nu_*$  ein Pol von  $R(\nu)$  und wir beweisen b) durch Widerspruch. Wir nehmen an, dass  $\nu_*$  kein Pol von  $R(\nu)G(f_\nu)$  ist. Ist  $\nu_*$  kein Pol von  $R(\nu)G(f_\nu)$ , so ist  $\varphi(\nu) := R(\nu)G(f_\nu)$  eine analytische Funktion in der Nähe von  $\nu_*$  mit

$$\varphi(\nu_*) := \lim_{\nu \rightarrow \nu_*} R(\nu)G(f_\nu). \quad (4.10)$$

Außerdem erfüllt  $\varphi(\nu)$  die Gleichung

$$(I + T(\nu))\varphi(\nu) = G(f_\nu) \quad (4.11)$$

für  $\nu$  in einer Umgebung von  $\nu_*$  und insbesondere für  $\nu_*$  selbst. Nach Teil a) von Lemma 4.9 gilt für eine Resonanzfunktion  $u_{s^*}$  zu  $\nu_*$ , dass

$$\begin{aligned} 0 &= \left\langle \varphi(\nu_*), (I + T(\nu_*)^*)\overline{\tilde{u}_{s^*}} \right\rangle_{H^1(\Omega_a)} = \left\langle (I + T(\nu_*))\varphi(\nu_*), \overline{\tilde{u}_{s^*}} \right\rangle_{H^1(\Omega_a)} \\ &= \left\langle G(f_{\nu_*}), \overline{\tilde{u}_{s^*}} \right\rangle_{H^1(\Omega_a)}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Das letzte Skalarprodukt ist aber nach Teil b) aus Lemma 4.9 ungleich Null und wir haben einen Widerspruch.

Die Rückrichtung ist klar, denn falls  $\nu_*$  ein Pol von  $R(\nu)G(f_\nu)$ , muss  $\nu$  ein Pol von  $R(\nu)$  sein, da  $G(f_\nu)$  holomorph ist.  $\square$

Wir haben für eine Resonanz  $\nu_*$  also gezeigt, dass durch die einfallende Welle

$$u_{i,\nu_*}(z) = e^{-i\sqrt{k_0^2 - \nu_*}z}$$

die Resonanz „angeregt“ wird, das heißt  $\nu_*$  ist auch ein Pol von  $R(\nu)G(f_\nu)$ .



# 5 Polbedingung und asymptotische Entwicklung von Streulösungen um Resonanzen

Nachdem wir in den vorangegangenen Kapiteln theoretische Erkenntnisse über die Resonanzen gewonnen haben, wollen wir die Resonanzen nun numerisch berechnen. Dazu benötigen wir noch einige Techniken, um unser Problem zu diskretisieren. Wir werden finite Elemente und, wie bereits angedeutet, eine spezielle Ausstrahlungsbedingung einsetzen, die Polbedingung. Ein entscheidender Vorteil dieser ist die Erhaltung der linearen Eigenwertstruktur des Problems, was essentiell für den hier betrachteten Zugang zur Berechnung der Resonanzen ist.

## 5.1 Die Polbedingung

Bei der Problemformulierung in Kapitel 2 haben wir die Sommerfeldsche Ausstrahlungsbedingung eingeführt und das konkrete Aussehen der Lösung für  $z > 0$  zur Charakterisierung auslaufender Wellen verwendet. Wie bereits erwähnt, gibt es auch noch andere Möglichkeiten, eine Ausstrahlungsbedingung zu formulieren. Wir beschränken uns bei der Betrachtung auf „ausstrahlend im oberen Bereich“. Für den unteren Bereich ist ein analoges Vorgehen möglich, das hier aber nicht vorgestellt wird. Bei den alternativen Ausstrahlungsbedingungen konzentrieren wir uns auf die Polbedingung, welche unter geeigneten Voraussetzungen äquivalent zur Sommerfeldschen Ausstrahlungsbedingung ist. Auf solche allgemeinen Äquivalenzaussagen soll hier aber nicht eingegangen

werden, da wir für unser konkretes Problem die Äquivalenz direkt einsehen werden.

In diesem Zusammenhang werden wir auch auf eine Approximation des DtN-Operators  $DtN_0$  eingehen. Der Grund, nicht direkt die explizite Darstellung von  $DtN_0$  zu benutzen, sondern diesen zu approximieren, liegt darin, dass wir bei der Diskretisierung die lineare Eigenwertstruktur des Problems erhalten wollen. Genau das ist bei allen folgenden Überlegungen zu bedenken. Wir werden für jedes feste  $\nu$  die Lösung für  $z > 0$  explizit angeben können, aber um die Resonanzen zu berechnen, werden wir  $\nu$  gerade nicht vorgeben, sondern wollen sie numerisch als verallgemeinerte Eigenwerte des diskretisierten Problems berechnen. In diesem Sinne wird sich das hier vorgestellte aufwändige Verfahren zur Diskretisierung von  $DtN_0$  lohnen, da viele andere Methoden die Linearität des Problems in  $\nu$  zerstören. Auf eine Diskretisierung von  $DtN_a$  gehen wir an dieser Stelle nicht ein, da wir sie in unseren numerischen Berechnungen ohnehin nicht benutzen werden, wie wir noch sehen werden.

Die Polbedingung ist durch den eindimensionalen Fall motiviert und da wir genau diesen vorliegen haben, wollen wir ihn hier detailliert mit den Bezeichnungen unserer Problemstellung diskutieren. Dazu kehren wir zur Differentialgleichung in der Luftschicht zurück, wo wir gefordert haben, dass  $u_s$  ausstrahlend im oberen Bereich ist:

$$-u_s''(z) - (k_0^2 - \nu)u_s(z) = 0, \quad z > 0 \quad (5.1)$$

Wir betrachten jetzt wieder  $\nu \in \mathfrak{I}$ , wie schon in Kapitel 3 (siehe (3.4)). Außerdem setzen wir wieder zur Abkürzung  $\kappa := \sqrt{k_0^2 - \nu}$ .

Die allgemeine Lösung von (5.1) ist gegeben durch

$$u_s(z) = C_1 e^{i\kappa z} + C_2 e^{-i\kappa z}, \quad z > 0 \quad (5.2)$$

mit Konstanten  $C_1, C_2 \in \mathbb{C}$ . Darauf wenden wir die Laplacetransformation<sup>1</sup>  $\mathcal{L}\{f\}(\sigma) = \int_0^\infty e^{-\sigma z} f(z) dz$ ,  $\operatorname{Re}(\sigma) > 0$  an. Die Laplacetransformierte  $\hat{u}_s := \mathcal{L}\{u_s\}$  von  $u_s$  ist dann

$$\hat{u}_s(\sigma) = \frac{C_1}{\sigma - i\kappa} + \frac{C_2}{\sigma + i\kappa}, \quad \operatorname{Re}(\sigma) > 0. \quad (5.3)$$

---

<sup>1</sup>Die Laplacetransformation ist wie die Fouriertransformation eine Integraltransformation, Details zur Definition finden sich im Anhang.

$\hat{u}_s$  hat eine holomorphe Fortsetzung auf  $\mathbb{C} \setminus \{i\kappa, -i\kappa\}$ . Der zur nicht ausstrahlenden Welle korrespondierende Teil der Laplacetransformation hat wegen  $\operatorname{Re}(\kappa) > 0$  offenbar einen Pol bei  $-i\kappa$  in der unteren komplexen Halbebene  $\mathbb{C}^- := \{\sigma \in \mathbb{C} \mid \operatorname{Im}(\sigma) < 0\}$  und der zur ausstrahlenden Welle korrespondierende Teil nicht. Dies rechtfertigt folgende Bedingung einzuführen und für  $u_s$  zu fordern.

**DEFINITION 5.1.** *Eine Funktion  $v$  erfüllt die Polbedingung, falls ihre Laplace-transformierte eine holomorphe Fortsetzung auf  $\mathbb{C}^-$  besitzt.*

Wir können die Ausstrahlungsbedingung jetzt so formulieren, dass  $u_s$  im oberen Bereich die Polbedingung erfüllen soll. Es ist klar, dass dies in unserem Fall äquivalent zu der Forderung ist, dass  $u_s$  ausstrahlend im oberen Bereich nach unserer bisherigen Definition ist, also von der Form  $u_s(z) = Ce^{i\kappa z}$  für alle  $z > 0$  mit einer Konstanten  $C \in \mathbb{C}$ . Stellen wir eine dieser beiden Bedingungen oder auch die Sommerfeldsche Ausstrahlungsbedingung an  $u_s$ , wird jeweils  $C_2 = 0$  in (5.2) und (5.3).

**BEMERKUNG 5.2.** *Die Polbedingung lässt sich auf den zwei- und dreidimensionalen Fall erweitern, gestaltet sich dann aber komplizierter. Man geht zu Polarkoordinaten über und fordert die Bedingung in radialer Richtung. Sie soll dann für alle Winkel erfüllt sein. Genaueres dazu findet man in [25], wo auch unter den dort gegebenen Umständen die Äquivalenz zur Sommerfeldschen Ausstrahlungsbedingung für  $\kappa > 0$  gezeigt wird (Theorem 9.4).*

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, die Polbedingung für die Diskretisierung unseres Problems einzusetzen. In  $\Omega_a = [-a, 0]$  werden wir ein Finite-Elemente-Verfahren verwenden. Ich greife bei der Implementierung auf eine Methode zurück, die auf komplex-symmetrische Matrizen führt. Sie nutzt einen Ansatz mit infiniten Elementen und verbindet Finite-Elemente-Basisfunktionen in  $H^1(\Omega_a)$  mit orthogonalen Basisfunktionen im Hardyraum des Einheitskreises der komplexen Zahlenebene. Diese sogenannten Hardyraum-Infiniten-Elemente sollen im nächsten Abschnitt hergeleitet werden.

## 5.2 Hardyraum-Infinite-Elemente

Die vorgestellte Methode wird ausführlich (auch für den mehrdimensionalen Fall) in [24] dargestellt. Wir verzichten daher an dieser Stelle auf die Ausführung der Beweise, wollen aber erläutern, was sich hinter der Methode verbirgt.

### 5.2.1 Theoretische Grundlagen

Aufgrund der Beobachtungen aus Abschnitt 5.1 betrachten wir für  $\hat{u}_s$  Räume von Funktionen, die Randwerte holomorpher Funktionen sind, genauer:

DEFINITION 5.3. *Der Hardyraum  $H^-(\mathbb{R})$  ist die Menge aller Funktionen  $f \in L^2(\mathbb{R})$ , die Randwerte einer in  $\mathbb{C}^-$  holomorphen Funktion  $g$  sind, was in diesem Zusammenhang so zu verstehen ist, dass  $\lim_{\epsilon \searrow 0} \int_{\mathbb{R}} |g(\sigma - i\epsilon) - f(\sigma)|^2 d\sigma = 0$ .*

$H^-(\mathbb{R})$  wird mit dem  $L^2$ -Skalarprodukt zu einem Hilbertraum<sup>2</sup>.

Erfüllt  $u_s$  aus (5.2) die Polbedingung, so ist  $C_2 = 0$  und die Laplacetransformierte von  $u_s$  aus (5.3) hat eine holomorphe Fortsetzung auf  $\mathbb{C}^-$ . Wie man leicht erkennen kann, liegt ihre Einschränkung auf  $\mathbb{R}$  in  $L^2(\mathbb{R})$ . Wegen der Stetigkeit der holomorphen Fortsetzung von  $\hat{u}_s$  in  $\mathbb{C}^-$  wird automatisch die Bedingung erfüllt, dass  $\hat{u}_s$   $L^2$ -Randwert einer holomorphen Funktion ist und wir können die Ausstrahlungsbedingung jetzt auch wie folgt ausdrücken:

DEFINITION 5.4. *Eine Lösung  $v$  von (5.1) bezeichnen wir als ausstrahlend im oberen Bereich, wenn die holomorphe Fortsetzung von  $v$  auf  $\mathbb{C}^-$  eingeschränkt auf  $\mathbb{R}$  zu  $H^-(\mathbb{R})$  gehört.*

Diese Formulierung ist für Lösungen von (5.1) offenbar äquivalent zur obigen Formulierung der Polbedingung.

Es stellt sich als nützlich heraus, nicht direkt mit dem Raum  $H^-(\mathbb{R})$  zu arbeiten, sondern mit  $H^+(S^1)$ .

---

<sup>2</sup>Für genauere Informationen zur Definition von Hardyräumen und grundlegenden Sätzen verweisen wir auf [5].

DEFINITION 5.5. Der Hardyraum  $H^+(S^1)$  ist die Menge aller Funktionen  $f \in L^2(S^1)$ , die  $L^2$ -Randwerte einer in der Einheitskreis  $D := \{s \in \mathbb{C} \mid |s| < 1\}$  holomorphen Funktion  $g$  sind, das bedeutet  $\lim_{r \nearrow 1} \int_0^{2\pi} |g(re^{i\varphi}) - f(re^{i\varphi})| d\varphi = 0$

Mit dem  $L^2$ -Skalarprodukt wird auch  $H^+(S^1)$  zu einem Hilbertraum. Dieser Raum hat den Vorteil, dass ein vollständiges Orthogonalsystem für ihn durch die Monome  $s^k$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$  gegeben ist, weil die Funktionen  $e^{iks}$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$  ein vollständiges Orthogonalsystem für  $L^2([0, 2\pi])$  bilden. Die Möbius-Transformation

$$\psi(s) := is_0 \frac{s+1}{s-1} \quad \text{mit } s_0 > 0 \quad (5.4)$$

bildet  $D$  auf  $\mathbb{C}^-$  ab.

Das folgende Lemma stellt eine Verbindung zwischen den beiden Hardyräumen  $H^-(\mathbb{R})$  und  $H^+(S^1)$  her.

LEMMA 5.6. Sei  $s_0 > 0$  und  $f \in H^-(\mathbb{R})$ . Dann ist  $\mathcal{M}$ , definiert durch

$$(\mathcal{M}f)(s) := (f \circ \psi)(s) \frac{\sqrt{-2is_0}}{s-1}, \quad (5.5)$$

eine unitäre Abbildung, die Funktionen aus  $H^-(\mathbb{R})$  nach  $H^+(S^1)$  „transformiert“.

BEWEIS. Einen Beweis des Lemmas und genauere Erläuterungen finden sich in [5].  $\square$

BEMERKUNG 5.7. Lässt man in der Möbiustransformation (5.4) allgemeiner  $s_0 \in \mathbb{C}$  mit  $\text{Re}(s_0) > 0$  zu, bildet  $\psi$   $D$  auf die Halbebene ab, die durch die Gerade  $g_{s_0}(w) = s_0 w$ ,  $w \in (-\infty, \infty)$  begrenzt wird. Das Lemma 5.6 bleibt weiterhin gültig mit der Änderung, dass  $\mathcal{M}$  nun eine unitäre Abbildung von  $\check{H}^-(\mathbb{R}) := \{\check{f} := f \circ g_{s_0}^{-1} \mid f \in H^-(\mathbb{R})\}$  nach  $H^+(S^1)$  ist. Wir beschränken uns in der Theorie auf  $H^-(\mathbb{R})$ , also  $s_0 > 0$ , weisen aber darauf hin, dass alles Folgende auch mit allgemeinerem  $s_0$  mit  $\text{Re}(s_0) > 0$  durchführbar ist. Das  $s_0$  wird im Algorithmus als Tuningparameter eingesetzt, worauf wir später nochmal zurückkommen.

Für ein ausstrahlendes  $u_s$  wird die Konstante  $C_2$  in (5.2) gleich 0 und  $C_1$  wird durch den Wert  $u_s(0)$  festgelegt, genauer  $C_1 = u_s(0)$ . Dieser Wert wird zwar nicht vorgeben, sondern ist selbst eine Unbekannte, aber wir führen ihn von nun an anstelle des  $C_1$  mit. Wenden wir für ein ausstrahlendes  $u_s$  die Transformation  $\mathcal{M}$  auf  $\hat{u}_s$  an und definieren  $c_0 := -\frac{1}{\sqrt{-2is_0}}$ , erhalten wir durch eine direkte Rechnung für  $u_s^+ := \mathcal{M}\mathcal{L}\{u(0)e^{i\kappa z}\}$ :

$$u_s^+(s) = (\mathcal{M}\hat{u}_s)(s) = c_0 u_s(0) \frac{2s_0}{(s_0 - \kappa)s + (s_0 + \kappa)}. \quad (5.6)$$

Mit Hilfe der geometrischen Reihe können wir  $u_s^+$  für  $\text{Im}(\kappa)\text{Im}(s_0) \geq 0$  in eine Reihe in der Monombasis entwickeln<sup>3</sup>.

$$u_s^+(s) = \frac{2s_0 c_0 u_s(0)}{s_0 + \kappa} \sum_{k=0}^{\infty} \left( \frac{-s_0 + \kappa}{s_0 + \kappa} \right)^k s^k \quad (5.7)$$

Für  $\text{Im}(\kappa)\text{Im}(s_0) \geq 0$  ist  $u_s^+ \in H^+(S^1)$  und man kann nachrechnen, dass  $\frac{|-s_0 + \kappa|}{|s_0 + \kappa|} < 1$  ist und somit die Reihe (5.7) ebenso wie die Reihe der exponentiell abfallenden Koeffizienten

$$a_k := \frac{2s_0 c_0 u_s(0)}{s_0 + \kappa} \left( \frac{-s_0 + \kappa}{s_0 + \kappa} \right)^k \quad (5.8)$$

konvergiert. Es gilt  $u_s(0) = \frac{1}{c_0} u_s^+(1) = \frac{1}{c_0} \sum_{k=0}^{\infty} a_k$ . Für allgemeine Funktionen  $v^+ \in H^+(S^1) \subset L^2(S^1)$  mit  $v^+(s) = \sum_{k=0}^{\infty} b_k s^k$  braucht  $\sum_{k=0}^{\infty} b_k$  nicht zu konvergieren. Daraus ergeben sich Probleme bei der Darstellung des Randwertes. Aus diesem Grund arbeiten wir mit der Funktion

$$U_s^+(s) := \frac{u_s^+(s) - c_0 u_s(0)}{s - 1}. \quad (5.9)$$

Setzt man  $u_s^+$  konkret in die Definition des  $U_s^+$  ein<sup>4</sup>, erhält man

$$U_s^+(s) = \frac{\kappa - s_0}{(s_0 - \kappa)s + (s_0 + \kappa)}. \quad (5.10)$$

<sup>3</sup>Für  $s_0 > 0$  ist die Bedingung  $\text{Im}(\kappa)\text{Im}(s_0) \geq 0$  trivialerweise immer erfüllt.

<sup>4</sup>Obwohl eigentlich keine Verwechslungsgefahr besteht, weisen wir darauf hin, dass dieses  $U_s^+$  nicht mit  $U_x$ ,  $U_y$  und  $U_z$  aus Kapitel 2 verwechselt werden darf.

Aus dieser Darstellung folgt, dass  $U_s^+$  ebenfalls in  $H^+(S^1)$  liegt (Nenner wird nie Null bei den an  $\kappa$  und  $s_0$  gemachten Voraussetzungen.) und nach dem gleichen Verfahren wie  $u_s^+$  in eine Reihe mit exponentiell abfallenden Koeffizienten entwickelt werden kann bezüglich der Monombasis.

Völlig analog zum Vorgehen in [24] kann man zeigen, dass folgender Satz gilt:

**SATZ 5.8.** *Sei  $s_0 \in \mathbb{C}$  mit  $s_0 > 0$  und  $\arg(\frac{s_0}{\kappa}) \neq \pm \frac{\pi}{2}$ . Ist  $u_s \in H_{\text{loc}}^2([-a, \infty))$  eine Lösung des Problems*

$$-u_s''(z) - (n^2(z)k_0^2 - \nu)u_s(z) = f_\nu(z) \quad \text{für } z \in [-a, \infty) \quad (5.11a)$$

$$u_s'(-a) = DtN_a(\nu)\tilde{u}_s(-a) + DtN_a(\nu)u_i(-a) - u_i'(-a) \quad (5.11b)$$

$$u_s \text{ ist ausstrahlend im oberen Bereich} \quad (5.11c)$$

mit den gleichen Bezeichnungen wie in Kapitel 3. Dann erfüllt  $(\tilde{u}_s, U_s^+) \in H^1(\Omega_a) \times H^+(S^1)$  die Variationsformulierung

$$\begin{aligned} & \int_{-a}^0 \tilde{u}_s' \tilde{v}' - (n^2 k_0^2 - \nu) \tilde{u}_s \tilde{v} dz + DtN_a(\nu) \tilde{u}_s(-a) \tilde{v}(-a) \\ & - \frac{s_0^2}{2\pi} \int_{S_1} [c_0 \tilde{u}_s(0) + (s+1)U_s^+(s)] [c_0 \tilde{v}(0) + (\bar{s}+1)V^+(\bar{s})] |ds| \\ & - \frac{k_0^2 - \nu}{2\pi} \int_{S_1} [c_0 \tilde{u}_s(0) + (s-1)U_s^+(s)] [c_0 \tilde{v}(0) + (\bar{s}-1)V^+(\bar{s})] |ds| \\ & = \int_{-a}^0 f_\nu \tilde{v} dz - \left( DtN_a(\nu)u_i(-a) - u_i'(-a) \right) \tilde{v}(-a) \\ & \quad \text{für alle } (\tilde{v}, V^+) \in H^1(\Omega_a) \times H^+(S^1), \quad (5.12) \end{aligned}$$

wobei  $|dz|$  das Weglängenintegral (siehe [5], Chapter 11) bezeichnet. Ist andersherum  $(\tilde{u}_s, U_s^+) \in H^1(\Omega_a) \times H^+(S^1)$  eine Lösung von (5.12), so gehört  $\tilde{u}_s$  zu  $H^2(\Omega_a)$  und ist die Einschränkung einer Lösung von (5.11) auf  $\Omega_a$ .

Bevor wir kurz auf den Beweis dieses Satzes eingehen, machen wir noch ein paar kurze Anmerkungen und zitieren ein für den Beweis zentrales Lemma, das auch das Auftauchen des Weglängenintegrals erklärt.

BEMERKUNG 5.9. Zunächst sei daran erinnert, dass bei unserer Problemstellung für alle  $z > 0$  sowohl  $n(z) = 1$  als auch  $f_\nu(z) = 0$  gilt und wir mit  $\tilde{u}_s$  die Einschränkung von  $u_s$  auf  $\Omega_a = [-a, 0]$  bezeichnen. In (5.11) ist  $u_s$  analog zu Lemma (3.4) aus Kapitel 3 auf  $[-a, \infty)$  eingeschränkt worden. Wir führen aber für diese Einschränkung des  $u_s$  keine neue Bezeichnung ein und weisen darauf hin, dass sich der Beweis des Lemmas 3.4 überträgt mit dem Unterschied, dass noch kein DtN-Operator bei  $z = 0$  benutzt wird. Dieser wird durch den Satz 5.8 eingeführt.

LEMMA 5.10. Seien  $f, g : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{C}$  zwei Funktionen, die die Ungleichungen  $|f(z)| \leq Ce^{(M-\epsilon_0)z}$  und  $|g(z)| \leq Ce^{(-M-\epsilon_0)z}$  mit  $M, C \geq 0$  und  $\epsilon_0 > 0$  erfüllen, welche  $fg \in L^1([0, \infty))$  und die Existenz der Laplacetransformierten  $\hat{f} := \mathcal{L}f$  und  $\hat{g} := \mathcal{L}g$  implizieren. Haben außerdem  $\hat{f}$  und  $\hat{g}$  holomorphe Fortsetzungen auf die Menge  $\mathfrak{E}_\beta = \{\sigma = re^{i\arg(\sigma)} \in \mathbb{C} \mid \arg(\sigma) \in [\pi - \beta, 2\pi] \vee \operatorname{Re}(\sigma) \geq M\}$  mit  $\beta \geq 0$  und fallen dort mindestens so schnell wie  $\frac{1}{r}$  ab, wenn der Radius  $r$  wächst, dann gilt:

$$\int_0^\infty g(z)f(z) dz = -\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \hat{g}(\sigma)\hat{f}(-\sigma) d\sigma = \frac{1}{2\pi} \int_{S^1} g^+(s)f^+(\bar{s}) |ds| \quad (5.13)$$

mit  $f^+ := \mathcal{M}\mathcal{L}f$  und  $g^+ := \mathcal{M}\mathcal{L}g$  sowie  $\arg(s_0) = 2\pi - \beta$ .

BEWEIS. Einen Beweis dieses Lemma findet man in [24].

BEWEIS (DES SATZES 5.8). Der vollständige Beweis findet sich wie erwähnt in [24] (Theorem 2.4) und soll nur skizziert werden. Ein Teil des Beweises ist jedoch so entscheidend für die Herleitung des Algorithmus, dass wir darauf genauer eingehen. Insbesondere geht es dabei um die entscheidenden Schritte zum Erreichen der Variationsformulierung (5.12).

Wir beginnen also mit einer Lösung  $u_s \in H_{\text{loc}}^2([-a, \infty))$  von (5.11). Ein ausstrahlendes  $u_s$  erfüllt eine der beiden Bedingungen des Lemmas 5.10 (hängt von  $\operatorname{Im}(\kappa)$  ab) und wir können Testfunktionen  $v$  in Abhängigkeit des  $\kappa$  so wählen, dass die Voraussetzungen des obigen Lemmas für  $u_s$  und  $v$  erfüllt sind. Wir multiplizieren die Differentialgleichung (5.11a) mit Testfunktionen

$$v(z) := \begin{cases} \tilde{v}(z), & z \in [-a, 0] \\ \tilde{v}(0)w_q, & z > 0, \end{cases} \quad (5.14)$$



wobei  $\tilde{v} \in H^1(\Omega_a)$ ,  $w_q := e^{iqz}$ ,  $q \in \{q \in \mathbb{C} \mid \text{Im}(q) > -\text{Im}(\kappa) \wedge \text{Re}(q) > 0\}$  und integrieren über  $[-a, \infty)$ .

$$\begin{aligned} \int_{-a}^0 f_\nu \tilde{v} dz &= \int_{-a}^\infty \left( -u_s'' - (n^2 k_0^2 - \nu) u_s \right) v dz \\ &= \int_{-a}^0 \left( -\tilde{u}_s'' - (n^2 k_0^2 - \nu) \tilde{u}_s \right) \tilde{v} dz + \int_0^\infty \left( -u_s'' - (n^2 k_0^2 - \nu) u_s \right) \tilde{v}(0) w_q dz \end{aligned}$$

Da wir jetzt im Gegensatz zu Kapitel 3 auf  $[-a, \infty)$  definierte Testfunktionen  $v$  betrachten, bezeichnen wir analog zu  $u_s$  die Einschränkung auf  $[-a, 0]$  mit  $\tilde{v}$ , was nicht mit der komplexen Konjugation zu verwechseln ist.

Unter Berücksichtigung der Menge, aus der die Testfunktionen gewählt werden dürfen ( $e^{i\kappa z} e^{iqz}$  fällt exponentiell ab für  $z \rightarrow \infty$ ), können wir das hintere Integral partiell integrieren und der obere „Randterm“ verschwindet.

$$\begin{aligned} \int_{-a}^0 f_\nu \tilde{v} dz &= \int_{-a}^0 \tilde{u}_s' \tilde{v}' - (n^2 k_0^2 - \nu) \tilde{u}_s \tilde{v} dz - \tilde{u}_s'(0) \tilde{v}(0) + \tilde{u}_s'(-a) \tilde{v}(-a) \\ &+ \int_0^\infty \left[ u_s' \tilde{v}(0) w_q' - \kappa^2 u_s \tilde{v}(0) w_q \right] dz + u_s'(0) \tilde{v}(0) \end{aligned} \quad (5.15)$$

Ganz entscheidend in diesem Schritt ist, dass sich die Randterme aus der partiellen Integration der beiden Integrale an der Stelle  $z = 0$  aufheben. Es gibt selbstverständlich keinen Unterschied zwischen  $\tilde{u}_s(0)$  und  $u_s(0)$  und ebenso wenig zwischen  $\tilde{u}_s'(0)$  und  $u_s'(0)$ , da  $u_s \in H_{\text{loc}}^2([-a, \infty))$  ist. An dieser Stelle des Beweises kommt uns die Problemformulierung in Abhängigkeit von  $\tilde{u}_s$  zu Gute, denn bei Berechnung des Gesamtfeldes, würden sich die Terme bei  $z = 0$  nicht ohne weiteres aufheben, da wir nur über  $u_s$  wissen, dass es ausstrahlend im oberen Bereich ist. Den letzten verbleibenden Randterm ersetzen wir wieder mit Hilfe von  $DtN_a$ . Unter Benutzung von Lemma 5.10 können wir (5.15) umschreiben zu

$$\begin{aligned} &\int_{-a}^0 \tilde{u}_s' \tilde{v}' - (n^2 k_0^2 - \nu) \tilde{u}_s \tilde{v} dz + \frac{i\kappa^2}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \tilde{v}(0) \hat{w}_q(-\sigma) \hat{u}_s(\sigma) d\sigma \\ &- \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty [-\sigma \tilde{v}(0) \hat{w}_q(-\sigma) - \tilde{v}(0)] [\sigma \hat{u}_s(\sigma) - \tilde{u}_s(0)] d\sigma + DtN_a(\nu) \tilde{u}_s(-a) \tilde{v}(-a) \\ &= \int_{-a}^0 f_\nu \tilde{v} dz - \left( DtN_a(\nu) u_i(-a) - u_i'(-a) \right) \tilde{v}(-a). \end{aligned} \quad (5.16)$$

Dabei wurden außerdem Rechenregeln über die Laplacetransformierten von Ableitungen ausgenutzt (siehe Anhang, Abschnitt 8.2.6). Im Folgenden ist zu beachten, dass sich  $w_q(z)$  und  $u_s(z)$  für  $z > 0$  sehr ähnlich sind und  $w_q$  analog transformiert werden kann.

Wie bereits erwähnt, arbeiten wir nicht mit  $u_s^+$  sondern  $U_s^+$  aus (5.9) und definieren Operatoren  $Q_{\text{mi}} : \mathbb{C} \times H^+(S^1) \rightarrow H^+(S^1)$  und  $Q_{\text{pl}} : \mathbb{C} \times H^+(S^1) \rightarrow H^+(S^1)$  durch

$$\begin{aligned} Q_{\text{mi}}(g(0), G^+)(s) &= c_0 g(0) + (s-1)G^+(s) \quad \text{und} \\ Q_{\text{pl}}(g(0), G^+)(s) &= c_0 g(0) + (s+1)G^+(s). \end{aligned}$$

Es gilt insbesondere  $u_s^+ = Q_{\text{mi}}(\tilde{u}_s(0), U_s^+)$  und  $\tilde{v}(0)w_q^+ = Q_{\text{mi}}(\tilde{v}(0), \tilde{v}(0)W_q^+)$  mit

$$w_q^+ := \mathcal{M}\hat{w}_q \quad \text{und} \quad W_q^+ := \frac{\mathcal{M}\hat{w}_q - c_0}{s-1}. \quad (5.17)$$

Man beachte, dass die Einschränkungen auf  $\mathbb{R}$  der holomorphen Fortsetzungen der Laplacetransformierten von  $\tilde{u}_s'|_{\mathbb{R}^+}$  und  $w_q'$  auf  $\mathbb{C}^-$  auch wieder zu  $H^-(\mathbb{R})$  gehören und dass Funktionen der Form  $\bullet g(\bullet) - g(0)$  aus diesem Raum durch  $\mathcal{M}$  wie folgt transformiert werden:

$$\mathcal{M}(\bullet g(\bullet) - g(0))(s) = is_0 \frac{(s+1)(\mathcal{M}g)(s) - 2c_0 g(0)}{s-1} \quad (5.18)$$

Insbesondere erhalten wir

$$\mathcal{M}(\bullet \hat{u}(\bullet) - \tilde{u}_s(0)) = is_0 Q_{\text{pl}}(\tilde{u}_s(0), U^+) \quad (5.19)$$

und einen analogen Ausdruck für  $w_q$ . Durch Anwendung der zweiten Gleichheit aus Lemma 5.10 (Voraussetzungen bleiben erfüllt) auf die Integrale mit Laplacetransformierten lässt sich (5.16) umformen zu

$$\begin{aligned} & \int_{-a}^0 \tilde{u}_s \tilde{v} - (n^2 k_0^2 - \nu) \tilde{u}_s \tilde{v} dz + Dt N_a(\nu) \tilde{u}_s(-a) \tilde{v}(-a) \\ & - \frac{s_0^2}{2\pi} \int_{S^1} [Q_{\text{pl}}(\tilde{u}_s(0), U_s^+)(s)] \cdot [Q_{\text{pl}}(\tilde{v}(0), \tilde{v}(0)W_q^+)(\bar{s})] |ds| \\ & - \frac{\kappa^2}{2\pi} \int_{S^1} [Q_{\text{mi}}(\tilde{u}_s(0), U_s^+)(s)] \cdot [Q_{\text{mi}}(\tilde{v}(0), \tilde{v}(0)W_q^+)(\bar{s})] |ds| \\ & = \int_{-a}^0 f_\nu \tilde{v} dz - \left( Dt N_a(\nu) u_i(-a) - u_i'(-a) \right) \tilde{v}(-a). \quad (5.20) \end{aligned}$$

□

Beim Ausnutzen des Lemmas wendet man  $\mathcal{M}$  gerade auf  $\hat{u}_s, \hat{w}_q$  sowie die Laplacetransformierten ihrer Ableitungen an. Mit den weiter oben gemachten Berechnungen lassen sich die entstehenden Ausdrücke dann durch die Operatoren umschreiben, wie es in (5.20) geschehen ist. (5.20) entspricht der behaupteten Variationsformulierung (5.12) für unsere speziellen Testfunktionen. Nun zeigt man, dass die speziellen Testfunktionen in  $H^1(\Omega_a) \times H^+(S^1)$  dicht liegen und erhält (5.12) für alle angegebenen Testfunktionen.

Der Beweis der Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen der Variationsformulierung (5.12) ähnelt, nach der Definition geeigneter Normen für die betrachteten Räume, anderen Beweisen für die Existenz und Eindeutigkeit von elliptischen Differentialgleichungen. Es wird eine Gårdingsche Ungleichung bewiesen und die Eindeutigkeit folgt mit Hilfe der Fredholmschen Alternative.

In unserem Algorithmus werden wir im Hardyraum  $H^+(S^1)$  nur einen endlichdimensionalen Unterraum für die Ansatzfunktionen verwenden, was bedeutet, dass wir nur endlich viele Monome aus der Basis benutzen. Wie wir genau vorgehen, werden wir gleich noch in einem Unterabschnitt über die Assemblierung erläutern. Kommen wir aber zuerst nochmal auf die Reihenentwicklungen von  $u_s^+$  und  $U_s^+$  mit den jeweils exponentiell abfallenden Koeffizienten zurück. Das Verhalten der Koeffizienten gibt uns bereits einen Hinweis auf die exponentielle Konvergenz des resultierenden Galerkin-Verfahrens bei der Lösung des Vorwärtsproblems für festes  $\kappa$ . Die Konvergenz der Methode werden wir in dieser Diplomarbeit nicht genauer untersuchen, um uns nicht zu weit vom eigentlichen Thema zu entfernen. Ergebnisse dazu finden sich jedoch in [24] und bestätigen die Vermutung der exponentiellen Konvergenz.

Wir wollen uns überlegen, wie die Rücktransformation einer dieser endlichen Reihen in den  $z$ -Bereich aussieht. Dazu sehen wir uns die Transformation der Monombasis an und müssen  $u_j := \mathcal{L}^{-1}\{\mathcal{M}^{-1}Q_{\text{mi}}(\tilde{u}_s(0), s^j)\}$  berechnen. Die Anwendung von  $Q_{\text{mi}}$  und

$$(\mathcal{M}^{-1}g)(\sigma) = \frac{(g \circ \psi^{-1})(\sigma) \cdot (\psi^{-1}(\sigma) - 1)}{\sqrt{-2is_0}} \quad \text{mit} \quad \psi^{-1}(\sigma) = \frac{\sigma + is_0}{\sigma - is_0} \quad (5.21)$$

( $g \in H^+(S^1)$ ) ergibt

$$\mathcal{M}^{-1}\{Q_{\text{mi}}(\tilde{u}_s(0), s^j)\} = \frac{\tilde{u}_s(0)}{\sigma - is_0} - \sqrt{-2is_0} \sum_{k=0}^j \binom{j}{k} \frac{(2is_0)^{k+1}}{(\sigma - is_0)^{k+2}} \quad (5.22)$$

unter Verwendung des binomischen Lehrsatzes. Wegen  $\mathcal{L}\{z^k e^{is_0 z}\} = \frac{k!}{(\sigma - is_0)^{k+1}}$  für  $k \in \mathbb{N}$  gestaltet sich die Anwendung von  $\mathcal{L}^{-1}$  auf (5.22) sehr einfach. Im  $z$ -Bereich korrespondiert das Monom  $s^j$  demnach zu

$$u_j(z) = e^{is_0 z} \left( \tilde{u}_s(0) - \sqrt{-2is_0} \sum_{k=0}^j \binom{j}{k} \frac{(2is_0 z)^{k+1}}{(k+1)!} \right). \quad (5.23)$$

**BEMERKUNG 5.11.** *Anhand von (5.23) kann man erkennen, dass im eindimensionalen Fall bei der Wahl  $s_0 = \kappa$  die exakte ausstrahlende Lösung  $u_s(z) = \tilde{u}_s(0)e^{i\kappa z}$  der Gleichung (5.11a) für  $z > 0$  und festes  $\kappa$  ohne einen einzigen Freiheitsgrad im Hardyraum errechnet werden kann, indem wir einfach mit  $U_s^+ = 0$  ansetzen. Bei Resonanzproblemen ist diese Wahl des  $s_0$  selbstverständlich nicht mehr möglich, da wir die Resonanzen ja im Vorhinein nicht kennen. Dennoch erscheint es mit dieser Überlegung sinnvoll, den Tuningparameter  $s_0$  in dem Bereich zu wählen, wo man Resonanzen erwartet.*

## 5.2.2 Assemblierung

Auf der anderen Seite des Gebietes (bei  $z = -a$ ) müssen wir eigentlich einen weiteren DtN-Operator, nämlich  $DtN_a$  diskretisieren. Hierzu könnten wir auch wieder auf die Polbedingung zurückgreifen. Aus der Physik ist aber bekannt, dass Resonanzen gerade für sehr kleine Einfallswinkel zu erwarten sind, wenn sich die Energie in den inneren Schichten des Systems „sammeln“ kann. Betrachten wir also  $\nu \in (k_0^2 n_{\text{sub}}^2, k_0^2)$  beziehungsweise für die komplexen Resonanzen sei der Realteil aus diesem Intervall. Für  $\nu$  mit  $\text{Re}(\nu) \in (k_0^2 n_{\text{sub}}^2, k_0^2)$  ist  $\text{Im}(\sqrt{k_0^2 n_{\text{sub}}^2 - \nu}) > 0$ . Somit fällt für die betrachteten  $\nu$  das Gesamtfeld der Form  $u(z) = K \cdot e^{-i\sqrt{k_0^2 n_{\text{sub}}^2 - \nu}z}$  in der Substratschicht ( $z < -a$ ) exponentiell ab. Daher reicht es für die praktische Implementierung aus, den künstlichen Randpunkt  $-a$  genügend weit in die Substratschicht hinein zu verschieben und hier die Dirichletbedingung  $u(-a) = 0$  beziehungsweise  $\tilde{u}_s(-a) = -u_i(-a)$  zu fordern, ohne die Lösung entscheidend zu ändern<sup>5</sup>. Da wir es

<sup>5</sup>Weit genug bedeutet in diesem Zusammenhang, dass sich der tatsächliche Wert von  $u(-a)$  im Rahmen der Rechengenauigkeit eines Computers kaum mehr von 0 unterscheiden lässt.

jetzt mit einer Dirichletbedingung bei  $z = -a$  zu tun haben, definieren wir  $Y_w := \{g \in H^1([-a, 0]) \mid g(-a) = w\}$  und lassen nur noch  $\tilde{u}_s \in Y_{-u_i(-a)}$  bei den Lösungen und  $\tilde{v} \in Y_0$  bei den Testfunktionen zu. Das vereinfacht (5.12), da alle Terme mit  $DtN_a$  und auch  $u'_i(-a)\tilde{v}(-a)$  wegfallen.

Wir wollen nun noch kurz auf den resultierenden Algorithmus zur numerischen Berechnung der Resonanzen und auch zur Lösung von (5.11) für festes  $\nu$  eingehen, was zunächst das gleiche Vorgehen erfordert. Die Grundlagen zur numerischen Behandlung partieller Differentialgleichungen mit finiten Elementen werden als bekannt vorausgesetzt und in dieser Arbeit nicht eingeführt. Wir verweisen auf [17] und ähnliche einführende Werke.

Verwendet werden wir ein Galerkin-Verfahren mit Finite-Elemente-Basisfunktionen im endlichdimensionalen Unterraum  $Y_h \subset Y_{-u_i(-a)}$  und den orthogonalen Basisfunktionen  $s^j$  mit  $j = 0, 1, \dots, N_{\text{har}}$  in einem Unterraum von  $H^+(S^1)$ . In dieser Basis stellen wir unsere numerischen Approximationen an die zu berechnenden Funktionen  $\tilde{u}_s$  und  $U_s^+$  dar:

$$\tilde{u}_s^h(z) := \sum_{k=1}^{N_{\text{fin}}} \tilde{u}_{s,k} \Phi_k(z) \quad \text{und} \quad U_s^{+, \text{di}}(s) := \sum_{k=0}^{N_{\text{har}}} \check{a}_k s^k \quad (5.24)$$

mit  $N_{\text{fin}}, N_{\text{har}} \in \mathbb{N}$ ,  $\tilde{u}_{s,k}, \check{a}_k \in \mathbb{C}$  und gewissen Basisfunktionen  $\Phi_k$  für  $Y_h$ , die nicht unbedingt alle zu Punktauswertungen von  $\tilde{u}_s$  korrespondieren müssen. Tatsächlich werden wir für die numerischen Berechnungen in dieser Diplomarbeit spezielle Ansatzfunktionen verwenden, die auch für hohe Polynomordnungen geeignet sind. Hierauf gehen wir in Kapitel 6 genauer ein. Für das vorgestellte Verfahren spielt das genaue Aussehen der finiten Elemente keine Rolle. Es wird lediglich eine Punktauswertung an der Stelle 0 benötigt, da im eindimensionalen Fall  $\tilde{u}_s(0)$  der entscheidende Freiheitsgrad ist, der die finiten Elemente mit den Hardyraum-Infiniten Elementen verbindet, wie wir gleich noch sehen werden.

Im Vektor  $\underline{u}_s$  sammeln wir die Koeffizienten  $\tilde{u}_{s,k}$  für  $k = 1, \dots, N_{\text{fin}}$  und dahinter  $\check{a}_k$  für  $k = 0, \dots, N_{\text{har}}$ . Die Freiheitsgrade  $\check{a}_k$  korrespondieren zu keinerlei Punktauswertungen der Funktion, sondern sind die Koeffizienten für  $U_s^+$ . Für spezielle Ansatzfunktionen kann dies, wie erwähnt, im Finite-Elemente-Anteil ähnlich sein.

Betrachten wir nochmal die für alle Testfunktionen  $(\tilde{v}, V^+) \in Y_0 \times H^+(S^1)$  gültige Variationsformulierung (5.12). Mit den im Beweis des Satzes 5.8 eingeführten Bezeichnungen schreiben sich die „Hardyraumanteile“ der Variations-

formulierung, wie folgt:

$$\begin{aligned}
& -\frac{s_0^2}{2\pi} \int_{S^1} [Q_{\text{pl}}(\tilde{u}_s(0), U_s^+)(s)] [Q_{\text{pl}}(\tilde{v}(0), V^+)(\bar{s})] |ds| \\
& -\frac{\kappa^2}{2\pi} \int_{S^1} [Q_{\text{mi}}(\tilde{u}_s(0), U_s^+)(s)] [Q_{\text{mi}}(\tilde{v}(0), V^+)(\bar{s})] |ds|. \quad (5.25)
\end{aligned}$$

Für den Rest der Variationsformulierung (mit  $\tilde{u}_s$  und  $\tilde{v}$ ) stellen wir wie üblich in  $[-a, 0]$  elementweise die lokalen Steifigkeits- und Massematrizen auf, die sich durch Einsetzen der Finite-Elemente-Basisfunktionen ergeben. Anschließend werden diese zur globalen Steifigkeits- und Massematrix zusammengesetzt. Damit haben aber noch nicht die gesamte Matrix für unser Problem. Wir müssen noch die zwei lokalen Elementmatrizen, die aus den Hardyraum-basisfunktionen resultieren, errechnen. Diese lokalen Elementmatrizen korrespondieren im  $z$ -Bereich zu  $[0, \infty)$  und werden ebenfalls an passender Stelle der globalen Steifigkeits- und Massematrix hinzugefügt, was den Namen Hardyraum-Infinite Element erklärt. Es bleibt also nur noch die Frage zu klären, wie diese Matrizen aussehen und wo sie einzufügen sind.

Wir zeigen das Vorgehen nur für zweite Integral aus (5.25), das erste wird analog behandelt. Die Testfunktionen  $V^+$  stellen wir ebenfalls in der Basis des  $N_{\text{har}}$ -dimensionalen Unterraumes von  $H^+(S^1)$  dar, also  $V^{+, \text{di}}(s) = \sum_{k=0}^{N_{\text{har}}} \check{b}_k^+ s^k$ . Wir setzen die Reihenentwicklungen von  $U_s^{+, \text{di}}$  und  $V^{+, \text{di}}$  ein und wenden  $Q_{\text{mi}}$  an.

$$-\frac{\kappa^2}{2\pi} \int_{S^1} \left[ c_0 \tilde{u}_s(0) + (s-1) \sum_{k=0}^{N_{\text{har}}} \check{a}_k s^k \right] \left[ c_0 \tilde{u}_s(0) + (\bar{s}-1) \sum_{k=0}^{N_{\text{har}}} \check{b}_k^+ \bar{s}^k \right] |ds| \quad (5.26)$$

Die aus der Anwendung von  $Q_{\text{mi}}$  resultierenden Terme lassen sich zu neuen Reihen

$$\sum_{k=0}^{N_{\text{har}}+1} a_k s^k \quad \text{und} \quad \sum_{k=0}^{N_{\text{har}}+1} b_k \bar{s}^k$$

zusammenfassen, die  $u_s^{+, h}(s)$  bzw.  $v^{+, h}(\bar{s})$  darstellen mit Koeffizienten  $a_0 = c_0 \tilde{u}_s(0) - \check{a}_0$ ,  $a_1 = \check{a}_0 - \check{a}_1$ ,  $a_2 = \check{a}_1 - \check{a}_2$ ,  $\dots$  und analog für  $b_k$ . Bezüglich der Monombasis von  $H^+(S^1)$  lassen sich die Operatoren  $Q_{\text{mi}}, Q_{\text{pl}} : \mathbb{C} \times H^1(S^1) \rightarrow$

$H^1(S^1)$  daher durch die sehr einfachen bidiagonalen Matrizen

$$Q_{\text{mi}} = \begin{pmatrix} c_0 & -1 & & \\ & 1 & -1 & \\ & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad Q_{\text{pl}} = \begin{pmatrix} c_0 & 1 & & \\ & 1 & 1 & \\ & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (5.28)$$

darstellen. Wegen des  $N_{\text{har}}$ -dimensionalen Ansatzraumes für  $U_s^{+, \text{di}}$  und  $V^{+, \text{di}}$ , muss man natürlich auch die Matrizen an entsprechender Stelle abschneiden und erhält Matrizen  $\underline{Q}_{\text{mi}}, \underline{Q}_{\text{pl}} \in \mathbb{C}^{(N_{\text{har}}+1) \times (N_{\text{har}}+1)}$ .

Damit schreibt sich unter Ausnutzung der Orthogonalität der Basisfunktionen  $s^k$ ,  $k = 0, 1, \dots$  und der daraus resultierenden Tatsache

$$-\frac{\kappa^2}{2\pi} \int_{S^1} \begin{bmatrix} \sum_{k=0}^{N_{\text{har}}} a_k s^k \\ \vdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sum_{k=0}^{N_{\text{har}}} b_k \bar{s}^k \\ \vdots \end{bmatrix} |ds| = -\kappa^2 \sum_{k=0}^{N_{\text{har}}} a_k b_k \quad (5.29)$$

die Gleichung (5.26) mit der Matrix  $\underline{Q}_{\text{mi}}$  als

$$[\tilde{u}_s(0), \check{a}_0, \dots, \check{a}_{N_{\text{har}}}] (-\kappa^2 \underline{Q}_{\text{mi}}^\top \underline{Q}_{\text{mi}}) [\tilde{v}(0), \check{b}_0, \dots, \check{b}_{N_{\text{har}}}]^\top. \quad (5.30)$$

Ein analoger Term mit  $\underline{Q}_{\text{pl}}$  anstelle von  $\underline{Q}_{\text{mi}}$  und  $s_0^2$  statt  $\kappa^2$  ergibt sich aus dem ersten Integral. Benutzt man jetzt wie üblich nur die Basisfunktionen als Testfunktionen, so erhält man als lokale Elementmatrizen

$$-\kappa^2 \underline{Q}_{\text{mi}}^\top \underline{Q}_{\text{mi}} \quad \text{und} \quad -s_0^2 \underline{Q}_{\text{pl}}^\top \underline{Q}_{\text{pl}}. \quad (5.31)$$

Diese werden nun als Beitrag des infiniten Elementes zur globalen Steifigkeitsmatrix (gilt für die Matrix mit  $s_0^2$ ) beziehungsweise zur globalen Massematrix (gilt für die Matrix mit  $-\kappa$ ) hinzuaddiert. Der einzige gemeinsame Freiheitsgrad mit den finiten Elementen ist  $\tilde{u}_s(0)$ , der im Finite-Elemente-Teil nur durch die zur Punktauswertung bei 0 korrespondierende Basisfunktion berührt wird. In den lokalen Matrizen vom infiniten Element geht  $\tilde{u}_s(0)$  nur in der ersten Zeile ein. Damit ist klar, an welcher Stelle sie zu den globalen Matrizen hinzuaddiert werden und wie die Freiheitsgrade aus dem Hardyraum über  $\tilde{u}_s(0)$  mit den Finite-Elemente-Freiheitsgraden gekoppelt werden.

Wir machen in diesem Zusammenhang die folgenden Beobachtungen: Da die Teilmatrizen aus der Finite-Elemente-Diskretisierung ohnehin komplex-symmetrisch sind<sup>6</sup>, ergibt sich aus der Symmetrie der Matrizen aus (5.31) ein

<sup>6</sup>Natürlich darf man den Dirichletfreiheitsgrad bei  $z = -a$  nicht ins System mitaufnehmen, sondern muss ihn entsprechend „eliminieren“, um die Symmetrie zu erhalten.

endlichdimensionales Gleichungssystem der Form

$$\underline{H}u_s + \nu \underline{M}u_s = \underline{M}f_\nu \quad (5.32)$$

mit den komplex-symmetrischen Matrizen  $\underline{H}, \underline{M} \in \mathbb{C}^{(N_{\text{fin}}+N_{\text{har}}-1) \times (N_{\text{fin}}+N_{\text{har}}-1)}$  (das bedeutet, dass  $\underline{H}^\top = \underline{H}$  und  $\underline{M}^\top = \underline{M}$ ), die aber nicht selbstadjungiert sind<sup>7</sup>. Hierbei wurden nicht von  $\nu$  abhängige Anteile und die ebenfalls von  $\nu$  unabhängige Steifigkeitsmatrix zusammengefasst zu  $H$ . Das System hängt linear von  $\nu$  ab, was sofort aus der gleichen Eigenschaft des Finite-Elemente-Anteils und (5.31) folgt. Für jedes feste  $\nu$  liefert das Gleichungssystem (5.32) die numerische Lösung der Differentialgleichung. Wir wollen das Problem jetzt aber zur Berechnung der Resonanzen als ein verallgemeinertes lineares Eigenwertproblem auffassen und berechnen die Eigenwerte und Eigenvektoren von

$$\underline{H}u_s = -\nu \underline{M}u_s. \quad (5.33)$$

Die Matrix  $\underline{M}$  ist invertierbar. Dies gilt wegen der Invertierbarkeit der Massmatrix des Finite-Elemente-Anteils (Gramsche Matrix) und des Aussehens von  $Q_{\text{mi}}$ . Man könnte also (5.33) auch mit  $\underline{M}^{-1}$  multiplizieren, um ein gewöhnliches Eigenwertproblem zu erhalten. Da das Invertieren einer großen Matrix aber sehr aufwändig ist und bei großer Konditionszahl zusätzliche Fehlerquellen birgt, sehen wir davon ab.

Mit einer weiteren Polbedingung bei  $z = -a$  würde man ebenfalls zu einem System der Form (5.32) gelangen mit dem Unterschied, dass man zusätzliche Freiheitsgrade und größere Matrizen bekommt.

### 5.3 Asymptotische Entwicklung von Streulösungen um Resonanzen

In diesem Abschnitt wird eine Möglichkeit gezeigt, wie man direkt aus den numerisch berechneten Resonanzen und den zugehörigen Eigenvektoren eine Approximation an die Größe der Amplitude bei der Resonanzfrequenz (Realteil der Resonanz<sup>8</sup>) selbst und in ihrer Umgebung erhalten kann. Dazu wird eine

<sup>7</sup>Selbstadjungiert würde hier  $\underline{H}^* = \underline{H}$  und  $\underline{M}^* = \underline{M}$  bedeuten.

<sup>8</sup>Weshalb die Approximation der reellen Resonanzfrequenzen als Realteil der komplexen Resonanzen sinnvoll ist, werden wir in diesem Zusammenhang auch noch klären.



Approximation erster Ordnung benutzt, die mit Hilfe einer verallgemeinerten Eigenwertzerlegung direkt aus dem diskretisierten Problem gewonnen wird. Bei der Herleitung wird insbesondere die Symmetrie der Matrizen in unserer Diskretisierung ausgenutzt. Wie wir später sehen werden, ist diese Approximation, obwohl nur erster Ordnung, bereits sehr gut und es ist nicht notwendig die Lösung jedes Mal über ein Gleichungssystem zu berechnen.

Wir beginnen also mit dem durch Diskretisierung gewonnenen System (5.32) und schreiben es für allgemeines  $\nu$  so um, dass wir die Abhängigkeit des  $\underline{u}_s$  von  $\nu$  untersuchen können. Da wir in diesem und dem folgenden Abschnitt entweder diskrete Lösungen in Form von Koeffizientenvektoren oder bei den kontinuierlichen Lösungen nicht die Abhängigkeit von  $z$  betrachten, schreiben wir der Übersicht halber jeweils das  $\nu$  als Argument.

$$\underline{u}_s(\nu) = (\underline{H} + \nu \underline{M})^{-1} \underline{M} \underline{f}_\nu \quad (5.34)$$

Wenn eine verallgemeinerte Eigenwertzerlegung der Form  $\underline{H}\underline{V} = \underline{M}\underline{V}\underline{D}$  existiert mit einer regulären Matrix  $\underline{V} = [\underline{v}_1, \underline{v}_2, \dots, \underline{v}_r]$  von verallgemeinerten Eigenvektoren in den Spalten und der Diagonalmatrix von verallgemeinerten Eigenwerten  $\underline{D} = \text{diag}(-\nu_1, -\nu_2, \dots, -\nu_r)$ , können wir (5.34) wie folgt umformen:

$$\underline{u}_s(\nu) = (\underline{M}\underline{V}\underline{D}\underline{V}^{-1} + \nu \underline{M})^{-1} \underline{M} \underline{f}_\nu = \underline{V} (\underline{D} + \nu \underline{I})^{-1} (\underline{M}\underline{V})^{-1} \underline{M} \underline{f}_\nu \quad (5.35)$$

Hierbei soll natürlich  $\nu \neq \nu_l$  für alle  $l = 1, \dots, r$  gelten, denn andernfalls wäre  $\underline{D} + \nu \underline{I}$  nicht invertierbar (bei den Eigenwerten haben wir ja auch gerade keine eindeutige Lösbarkeit). Die Invertierbarkeit von  $\underline{M}\underline{V}$  folgt aus der in Abschnitt 5.2.2 angesprochenen Invertierbarkeit von  $\underline{M}$ .

Der Einfachheit halber nehmen wir an, dass alle Eigenwerte einfach sind, was bedeutet, dass wir  $r$  verschiedene Eigenwerte haben, womit auch automatisch  $\underline{V}$  regulär ist. Setze  $(\underline{M}\underline{V})^{-1} = [\underline{w}_1, \underline{w}_2, \dots, \underline{w}_r]^\top$  und führe die Matrix-Vektor-Multiplikationen in (5.35) aus.

$$\underline{u}_s(\nu) = \sum_{l=1}^r \frac{1}{-\nu_l + \nu} \underline{v}_l \underline{w}_l^\top \underline{M} \underline{f}_\nu \quad (5.36)$$

Zur weiteren Vereinfachung ist eine Untersuchung der Matrix  $(\underline{M}\underline{V})^{-1}$  notwendig.  $\nu$  ist genau dann ein Eigenwert des verallgemeinerten Eigenwertproblems (5.33), wenn die Determinante  $\det(\underline{H} - \nu \underline{M}) = 0$  ist. Damit ist dann aber auch

$\det(\underline{H}^\top - \nu \underline{M}^\top) = 0$  und das transponierte Eigenwertproblem hat somit die gleichen Eigenwerte. Definieren wir

$$(\underline{MV})^{-\top} := \left( (\underline{MV})^\top \right)^{-1} \quad (5.37)$$

können wir aus der verallgemeinerten Eigenwertzerlegung  $\underline{HV} = \underline{MVD}$  direkt eine verallgemeinerte Eigenwertzerlegung für das transponierte Problem gewinnen. Zuerst transponieren wir die Eigenwertzerlegung und dann führen wir einige Äquivalenzumformungen durch<sup>9</sup>.

$$\underline{H}^\top (\underline{MV})^{-\top} = \underline{V}^{-\top} \underline{D} = \underline{M}^\top \underline{M}^{-\top} \underline{V}^{-\top} \underline{D}.$$

Wir erhalten also  $\underline{H}^\top (\underline{MV})^{-\top} = \underline{M}^\top (\underline{MV})^{-\top} \underline{D}$ . Da bei uns  $\underline{H}^\top = \underline{H}$  und  $\underline{M}^\top = \underline{M}$  gilt, ist das transponierte Problem gleich dem Ausgangsproblem und weil sich in  $\underline{D}$  nichts geändert hat, könnten wir  $(\underline{MV})^{-\top}$  durch  $\underline{V}$  ersetzen, ohne die Gleichheit zu zerstören.

$(\underline{MV})^{-\top}$  enthält in den Spalten also ebenfalls verallgemeinerte Eigenvektoren zu den Eigenwerten von (5.33) und sogar in der gleichen Reihenfolge wie  $\underline{V}$ . Wegen der eindimensionalen Eigenräume kann keine völlig andere Basis von Eigenvektoren existieren, genauer gesagt sind die Eigenvektoren in  $(\underline{MV})^{-\top}$  nur mit Konstanten skaliert bezogen auf die Eigenvektoren in  $\underline{V}$ .

Aufgrund des Zusammenhanges

$$(\underline{MV})^{-\top} = \left( (\underline{MV})^{-1} \right)^\top \quad (5.38)$$

sind auch die Zeilen von  $(\underline{MV})^{-1}$  die Eigenvektoren aus  $\underline{V}$  mit gewissen Skalierungskonstanten, die wir in der Matrix  $\underline{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_r)$  zusammenfassen und erhalten in Matrixschreibweise  $\underline{V} = (\underline{MV})^{-\top} \underline{\Lambda}$  beziehungsweise  $\underline{V}^\top = \underline{\Lambda} (\underline{MV})^{-1}$ . Definieren wir  $\sqrt{\underline{\Lambda}} := \text{diag}(\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_2}, \dots, \sqrt{\lambda_r})$  lässt sich dies umformen zu

$$\underline{I} = \left( \underline{V} \sqrt{\underline{\Lambda}}^{-1} \right)^\top \underline{M} \left( \underline{V} \sqrt{\underline{\Lambda}}^{-1} \right).$$

Da  $\sqrt{\underline{\Lambda}}^{-1}$  eine Diagonalmatrix ist, können wir die Eigenvektoren in  $\underline{V}$  von Anfang an so skalieren, dass  $\underline{V}^\top \underline{MV} = \underline{I}$ , was wir auch tun wollen. Auf diese

<sup>9</sup> „ $^{-\top}$ “ ist für andere Matrizen analog zu  $(\underline{MV})^{-\top}$  definiert.

Weise können wir (5.36) vereinfachen zu:

$$\underline{u}_s(\nu) = \sum_{l=1}^r \frac{1}{\nu - \nu_l} v_l v_l^\top \underline{M} \underline{f}_\nu \quad (5.40)$$

Wir möchten jetzt  $\underline{u}_s(\nu)$  in der Nähe einzelner komplexer Resonanzen approximieren. Sei dazu  $\nu$  nahe genug an einer der komplexen Resonanzen, wobei nahe genug  $|\nu - \nu_j| \ll |\nu - \nu_l|$  für  $l \neq j$  bedeuten soll. In diesem Fall wird das Verhalten von (5.40) entscheidend durch den  $j$ -ten Summanden bestimmt und wir benutzen als Approximation:

$$\underline{u}_s(\nu) \approx \frac{1}{\nu - \nu_j} v_j v_j^\top \underline{M} \underline{f}_\nu \quad (5.41)$$

Diese Approximation ist von erster Ordnung, weil sich

$$\sum_{\substack{l=1 \\ l \neq j}}^r \left\| \frac{1}{\nu - \nu_l} v_l v_l^\top \underline{M} \underline{f}_\nu \right\|_2 \quad (5.42)$$

für  $\nu \rightarrow \nu_j$  durch eine Konstante abschätzen lässt, denn wie wir schon im Kontinuierlichen gesehen haben (Lemma 4.8), hängt die rechte Seite der schwachen Formulierung holomorph von  $\nu$  ab. Dies überträgt sich auf die diskrete Version und somit bleibt  $\underline{M} \underline{f}_\nu$  in einer geeigneten kompakten Umgebung von  $\nu_j$  (darf keine  $\nu \in \mathfrak{W}$  enthalten<sup>10</sup>) beschränkt. Ebenso bleiben die für  $\nu \neq \nu_j$  holomorphen Funktionen  $1/(\nu - \nu_j)$  in geeigneten kompakten Umgebungen von  $\nu_j$  beschränkt und insgesamt (5.42). Damit können wir unsere bisherigen Aussagen konkretisieren zu

$$\underline{u}_s(\nu) = \frac{1}{\nu - \nu_j} v_j v_j^\top \underline{M} \underline{f}_\nu + \mathcal{O}(1) \quad \text{für } \nu \rightarrow \nu_j, \quad (5.43)$$

wobei  $\mathcal{O}$  das Landau-Symbol ist. Hierbei ist es egal, ob wir uns auf die diskrete  $L^2$ -Norm des Koeffizientenvektors beziehen oder auf die  $L^2$ -Norm der Darstellung der Lösung bezüglich der Basisfunktionen im Finite-Elemente-Raum, wofür wir nur die inneren Freiheitsgrade (also die aus  $[-a, 0]$ ) von  $\underline{u}_s$  benutzen. Die Approximationsordnung ist die gleiche.

<sup>10</sup>Zur Erinnerung:  $\mathfrak{W}$  wurde in (3.14) definiert.

BEMERKUNG 5.12. a) Bei der praktischen Implementierung ist es nicht notwendig, das Produkt  $\underline{V}^\top \underline{M}\underline{V}$  für die Skalierung der Eigenvektoren explizit auszurechnen, weil man für jede Approximation von der Form (5.41) nur einen Summanden benutzt und somit nur eine Skalierungskonstante benötigt. Die Approximation wird im Allgemeinen nur für sehr wenige Eigenwerte berechnet, denn viele Resonanzen sind künstlich. Das bedeutet, dass sie keine wirklichen Resonanzen des Problems, sondern durch die Diskretisierung hinzugekommen sind. Sie können aber meistens als solche erkannt werden, worauf wir in Kapitel 6 näher eingehen.

Deshalb ist folgendes Vorgehen wesentlich effizienter als das Ausführen der Matrixmultiplikationen: Wollen wir die Approximation in der Nähe von  $\nu_j$  berechnen, benötigen wir  $\lambda_j$ . Es ist der  $j$ -te Diagonaleintrag der Diagonalmatrix  $\Lambda = \underline{V}^\top \underline{M}\underline{V}$ . Dieser ergibt sich aus  $\underline{v}_j^\top \underline{M}\underline{v}_j$  ( $j$ -te Spalte von  $\underline{M}\underline{V}$  berechnen und diese mit  $j$ -ter Zeile von  $\underline{V}$  multiplizieren). Wie wir schon gesehen haben, müssen wir die Eigenvektoren  $\underline{v}_j$  mit  $1/\sqrt{\lambda_j}$  skalieren. Sind die Eigenvektoren schon richtig skaliert, ist  $\lambda_j = 1$ . Haben wir aber beliebige, noch nicht skalierte Eigenvektoren  $\underline{v}_j$ , müssen wir in (5.41) einfach den Faktor  $1/\lambda_j$  hinzufügen, um die Approximation an  $\underline{u}_s(\nu)$  zu erhalten.

b) Wir hatten angenommen, dass alle Eigenwerte einfach sind. Es ist aber auch ohne diese Annahme möglich, eine Approximation an die Lösung herzuleiten. Das ist dann aber komplizierter und ein möglicher Ansatz kann in [14], 5.2 nachgelesen werden.

## 5.4 Interpretation der komplexen Resonanzen

Bisher wurde noch keine Aussage über den Zusammenhang zwischen den komplexen Resonanzen aus  $\mathfrak{J}$  und den physikalisch relevanten reellen Resonanzfrequenzen gemacht. Dass ein Zusammenhang besteht, lässt den Übergang zu komplexen  $\nu$  erst sinnvoll erscheinen.

Wir betrachten die soeben hergeleitete Approximation (5.41) an das gestreute Feld. Offensichtlich bleibt wegen der Holomorphie von  $\underline{M}f_\nu$  die Ordnung der Approximation erhalten, wenn man  $f_\nu$  in (5.41) durch  $f_{\nu_j}$  ersetzt. Der Einfachheit halber werden wir das für die Überlegungen in diesem Abschnitt tun und untersuchen die  $L^2$ -Norm von  $\tilde{u}_s$  mit Hilfe der diskreten Lösung und der Approximation dieser in Abhängigkeit von  $\nu$ . Mit  $\underline{M}^{\text{int}}$  bezeichnen wir

den Finite-Elemente-Anteil der Massematrix (d.h. ohne die Hardyraumanteile) und mit  $\underline{u}_s^{\text{int}}(\nu)$  die zugehörigen Werte aus  $\underline{u}_s(\nu)$  und erhalten folgende Approximation der  $L^2$ -Norm von  $\tilde{u}_s(\nu)$ :

$$\begin{aligned} \|\tilde{u}_s(\nu)\|_{L^2(\Omega_a)}^2 &\approx \overline{\underline{u}_s^{\text{int}}(\nu)}^\top \underline{M}^{\text{int}} \underline{u}_s^{\text{int}}(\nu) \approx \frac{1}{|\nu - \nu_j|^2} \left| \underline{v}_j^\top \underline{M} \underline{f}_{\nu_j} \right|^2 \overline{\underline{v}_j^{\text{int}}}^\top \underline{M}^{\text{int}} \underline{v}_j^{\text{int}} \\ &\approx \frac{\left| \left\langle G(f_{\nu_j}), \overline{\tilde{u}_s(\nu_j)} \right\rangle_{H^1(\Omega_a)} \right|^2}{|\nu - \nu_j|^2} \|\tilde{u}_s(\nu_j)\|_{L^2(\Omega_a)}^2 = \frac{4|k_0^2 - \nu_j|}{|\nu - \nu_j|^2} |\tilde{u}_s(\nu_j)(0)|^2 \|\tilde{u}_s(\nu_j)\|_{L^2(\Omega_a)}^2 \end{aligned} \quad (5.44)$$

mit Hilfe von b) aus Lemma 4.9. Außerdem ist die Resonanzfunktion  $\tilde{u}_s(\nu_j)$  zur Resonanz  $\nu_j$  natürlich nicht beliebig, sondern ist im Kontinuierlichen passend zur diskreten Resonanzfunktion  $\underline{v}_j$  zu skalieren, die wir durch  $1/\sqrt{\lambda_j}$  mit  $\lambda_j = \underline{v}_j^\top \underline{M} \underline{v}_j$  skaliert hatten. Offenbar wird die Größe der Norm in (5.44) entscheidend davon abhängen. Problematisch bei den letzten Umformungen in (5.44) ist auch, dass wir bei den Approximationen enthaltene Anteile der Hardyraumdiskretisierung bisher nicht genau diskutiert haben (beispielsweise bei  $\underline{v}_j^\top \underline{M} \underline{f}_{\nu_j}$ ). Trotzdem können wir sogar schon an der ersten Zeile von (5.44) einiges ablesen. Die Größe der  $L^2$ -Norm von  $\tilde{u}_s(\nu)$  hängt von zwei Faktoren ab. Einerseits sollte der nicht mehr von  $\nu$  sondern nur von der Resonanz  $\nu_j$  abhängige Anteil möglichst groß sein. Die Frage nach der genauen Diskussion dieser Terme bleibt in dieser Arbeit offen. Andererseits hängt nur der Faktor  $1/(\nu - \nu_j)$  in (5.44) von  $\nu$  ab und gibt Auskunft über das Verhalten der Norm in der Nähe von  $\nu_j$  bei Änderung des  $\nu$ . Es reicht uns daher, mit  $\eta + \tau i := \nu - \nu_j$  ( $\eta, \tau \in \mathbb{R}$ ) für  $\nu \in \mathbb{R}$  die folgende Funktion zu untersuchen:

$$Z(\eta) := \frac{1}{\eta^2 + \tau^2}$$

Differenzieren ergibt

$$Z'(\eta) = \frac{-2\eta}{(\eta^2 + \tau^2)^2} \quad \text{und} \quad Z''(\eta) = \frac{6\eta^2 - 2\tau^2}{(\eta^2 - \tau^2)^3} \quad (5.45)$$

und somit hat die reelle Funktion  $Z$  ihr Maximum bei  $\eta = 0$ . Das bedeutet, dass in den reellen Zahlen für  $\nu = \text{Re}(\nu_j)$  das gestreute Feld betragsmäßig

am größten wird. Diese Aussage gilt selbstverständlich nur in der Nähe der komplexen Resonanz  $\nu_j$ , weil nur dort die Approximation zulässig ist. Für  $\nu = \operatorname{Re}(\nu_j)$  verhält sich die Approximation (5.44) an  $\|\tilde{u}_s(\nu)\|_{L^2(\Omega_a)}$  im Wesentlichen wie  $1/|\operatorname{Im}(\nu_j)|$ , was an  $Z(0) = 1/\tau^2$  zu erkennen ist. Es sollte also der Imaginärteil der Resonanz möglichst klein sein und die restlichen von  $\nu_j$  und nicht von  $\nu$  abhängigen Terme in (5.44) gleichzeitig möglichst groß. Dies ist der Ansatzpunkt für einen Optimierungsprozeß.

Das einfallende Feld haben wir in der obigen Rechnung nicht berücksichtigt. Es hängt zwar auch von  $\nu$  ab, aber sein Betrag ist immer 1, so dass der Betrag des Gesamtfeldes entscheidend nur durch den Betrag des gestreuten Feldes bestimmt wird. Außerdem haben wir für unsere Argumentation nur die Approximation erster Ordnung herangezogen. Daher kann es vorkommen, dass der tatsächlich höchste Ausschlag von  $\|\tilde{u}_s(\nu)\|_{L^2(\Omega_a)}$  für einen reellen Wert minimal neben der als Realteil der komplexen Resonanz approximierten Resonanzfrequenz auftritt. Nichtsdestotrotz lässt sich ein Zusammenhang zwischen komplexen Resonanzen und Resonanzfrequenz über den Realteil auch im nicht-diskreten Fall beweisen. Das ist dann allerdings erheblich komplizierter.

Zunächst erscheint der Aufwand unseres Verfahrens zur Resonanzberechnung sehr hoch, denn wir müssen zuerst eine Diskretisierung mit finiten Elementen und Hardyraum-Infiniten-Elementen durchführen und dann auch noch ein Eigenwertproblem lösen. Daher könnte man auf die Idee kommen, einfach verschiedene reelle Werte für die Einfallswinkel  $\alpha$  und damit reelle Werte von  $\nu$  in dem Bereich durchzuprobieren („sampeln“), in dem man die Resonanzfrequenzen erwartet und nach Maxima der Amplitude suchen. Dies ist aber nicht ohne weiteres möglich, denn man weiß im Vorhinein nicht, wie fein man die Abstände zwischen den getesteten Werten wählen soll. Natürlich könnte man versuchen, zunächst etwas grober zu „sampeln“ und anschließend in den Bereichen, wo man Ausschläge nach oben beobachtet feiner zu suchen, aber dann kann es passieren, dass man einige Resonanzfrequenzen beim groben „Vorsampeln“ gar nicht bemerkt. Insbesondere ist das ein Problem bei den „besten“ Resonanzfrequenzen, also denen mit der größten Feldüberhöhung. Auch das können wir uns anhand der Approximation von  $\|\tilde{u}_s(\nu)\|_{L^2(\Omega_a)}$  klarmachen. Sei dazu  $p \in \mathbb{N}$  und wir untersuchen in der Funktion  $Z$  von oben, für welches  $\eta$  nur noch  $1/p$  vom maximalen Funktionswert übrig ist, welcher bei  $\eta = 0$  erreicht

wird. Wir berechnen, dass

$$Z(\eta) = \frac{1}{p} Z(0) \quad \text{für } \eta = \pm \sqrt{(p-1)\tau^2}. \quad (5.46)$$

Da  $\eta = \text{Re}(\nu - \nu_j)$  ist, erhält man für Resonanzen mit kleinen Imaginärteilen bei viel geringeren Abständen zwischen den reellen Testwerten von  $\nu$  und der Resonanzfrequenz nur noch  $1/p$  vom Maximum (für reelle  $\nu$  nahe  $\nu_j$ ) von  $\|\tilde{u}_s(\nu)\|_{L^2(\Omega_a)}^2$ . Somit kann es beim „Sampeln“ leicht passieren, dass man die interessantesten Werte überläuft, beziehungsweise nur sehr kleine Ausschläge bemerkt wegen des schnelleren Abfallverhaltens. Natürlich kann man mit der Suche immer feiner werden, aber dann wird auch die Anzahl der zu berechnenden Vorwärtslösungen und damit der Rechenaufwand extrem hoch.





## 6 Numerische Ergebnisse

In diesem Kapitel werden ausgehend von den theoretischen Erkenntnissen dieser Arbeit erste numerische Ergebnisse gezeigt. Im Rahmen meiner Diplomarbeit habe ich ein Matlab-Programm zur Berechnung der Resonanzen für ein vorgegebenes Mehrschichtsystem geschrieben. Außerdem berechnet das Programm in der Nähe der reellen Resonanzfrequenzen auch die in Abschnitt 5.3 hergeleitete Approximation an die Streulösung.

Verwendet wurde die Definition der Resonanzen als Eigenwerte und mit Hilfe der Polbedingung kann die lineare Eigenwertstruktur des Problems bei der Diskretisierung erhalten werden (siehe Kapitel 5). Im künstlich beschränkten Gebiet  $[-a, 0]$  sind dabei spezielle finite Elemente basierend auf den in [22] von Schwab präsentierten Methoden implementiert worden. Diese bieten den Vorteil, dass sie auch für hohe Polynomordnungen bei den Ansatzfunktionen stabil bleiben und daher beispielsweise für die „Helmholtz-Gleichung“  $u'' + w^2u = 0$  mit betragsmäßig großem  $w \in \mathbb{C}$  gut funktionieren. Auf eine Konvergenzanalyse für die Resonanzberechnung wurde in dieser Arbeit zwar ohnehin verzichtet (siehe Abschnitt 5.2, Kapitel 5), aber die Konvergenz hängt natürlich auch von der Genauigkeit der finiten Elemente ab. Bereits bei der Lösung der „Helmholtz-Gleichung“ auf einem beschränkten Gebiet mit Dirichletrandbedingungen ( $w$  natürlich kein Eigenwert) zeigen sich bei Lagrange-Elementen mit äquidistanten Knoten und hoher Ordnung (das bedeutet etwa ab Ordnung 10) deutliche Instabilitäten, die eng zusammenhängen mit gleichen Beobachtungen für die Lagrange-Interpolation höherer Ordnung zu äquidistanten Stützstellen. Bei betragsmäßig großen  $w$  (etwa  $\geq 20$ ) sind jedoch höhere Ordnungen notwendig, um noch gute Ergebnisse zu erzielen. Es wird sich zwar herausstellen, dass bei den hier betrachteten Systemen die Lösungen im Verhältnis zur Größe des Rechengebietes nur sehr wenig schwingen ( $\sqrt{k_0^2 n_j^2 - \nu}$  ist für alle  $j = 1, \dots, m$  sehr nahe bei Null für die in Frage kommenden  $\nu$ ), so dass das Gitter nicht sehr fein gewählt werden muss und die Systeme relativ klein bleiben. Trotzdem

bleibt es vorteilhaft, die Ordnung zu erhöhen anstatt das Gitter sehr fein zu wählen, um eine große Genauigkeit zu erhalten. Wir wollen uns das an einem Beispiel veranschaulichen und zeigen, wie die Ergebnisse konkret aussehen.

## 6.1 Beispiel

Bisher wurden Resonanzen numerisch nur für Mehrschichtsysteme mit stückweise konstanter Brechungsfunktion  $n$  berechnet. Für des Programms auf beliebige Systeme dieser Form kann das implementierte Programm Resonanzen berechnen, sofern sie existieren. Eine Erweiterung auf kompliziertere Brechungs-funktionen ist, wie bereits erwähnt, geplant.

An dieser Stelle soll die Resonanzberechnung beispielhaft an dem in [18] (Chapter 2.2) angeführten Röntgenresonators gezeigt werden. Wir betrachten ein System von vier Schichten, welches aus einer Kohlenstoffschicht (C) mit einer Dicke von 335 Å und zwei sie umgebenden Nickelschichten (Ni) besteht, wobei die obere 50 Å und die untere 200 Å dick ist<sup>1</sup>. Als Substrat in der untersten Schicht wird Silizium (Si) verwendet. Das bedeutend zusammenfassend mit den in Kapitel 2 eingeführten Bezeichnungen für Mehrschichtsysteme mit stückweise konstanter Brechung bei Vernachlässigung der Absorption und einer Wellenlänge  $\lambda = 0.62\text{Å}$  ( $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda} \approx 10.1342$ ):

| Schicht | Dicke (in Å)     | Brechung                         |
|---------|------------------|----------------------------------|
| 1       | $d_1 = 50$       | $n_1 = 1 - (4.46 \cdot 10^{-6})$ |
| 2       | $d_2 = 335$      | $n_2 = 1 - (1.14 \cdot 10^{-6})$ |
| 3       | $d_3 = 200$      | $n_3 = 1 - (4.46 \cdot 10^{-6})$ |
| 4       | <i>unendlich</i> | $n_4 = 1 - (1.03 \cdot 10^{-4})$ |

Insbesondere haben wir also ein System, wie das in Abbildung 2.2 in Kapitel 2 als Einführungsbeispiel gezeigte. Für unseren Plot bilden wir auch einen Teil (100 Å) der Luft mit Brechung  $n_0 = 1$  sowie einen Teil der Substratschicht (200Å) mit ab. Wir bedienen uns neben dem für diese Diplomarbeit erstellten

<sup>1</sup>Å=Angström ist eine Maßeinheit für Länge,  $1\text{Å} = 10^{-10}m$ .

Programm auch des sogenannten Matrixalgorithmus (siehe Anhang), der ebenfalls implementiert wurde. Bei letzterem wird die Substratschicht immer als unendlich angesehen, aber die Lösung wird in unserem Bild nach  $200 \text{ \AA}$  in der Substratschicht abgeschnitten. Die Dicke der Luftschicht verursacht lediglich eine Phasenverschiebung, was auf den Betrag der Lösung keinen Einfluß hat. Genaueres zur Phasenverschiebung findet sich im entsprechenden Abschnitt über den Matrixalgorithmus im Anhang.

Bei unserem Resonanzberechnungsprogramm fügen wir ebenfalls die endliche Luftschicht mit ein, so dass wir die gleiche Phase bei den Lösungen erreichen, wie im Matrixalgorithmus. Die Substratschicht wird hier bereits bei der Berechnung nach  $200 \text{ \AA}$  abgeschnitten und eine homogene Dirichletbedingung für das Gesamtfeld gefordert (siehe Kapitel 5).

Mit dem Matrixalgorithmus berechnen wir für verschiedene Einfallswinkel  $\alpha$  das resultierende Feld  $u(z)$ , welches die Amplitude des elektrischen Feldes bestimmt. Mit dem auf finiten Elementen und Hardyraum-Infiniten-Elementen aufbauenden Programm berechnen wir die Resonanzen und die Approximationen an die Lösungen in ihrer Umgebung. Im Gegensatz zur theoretischen Untersuchung wollen wir jetzt nicht  $\gamma$  oder  $\nu$  betrachten, sondern den resultierenden Einfallswinkel, da dieser den in der Praxis relevanten Parameter darstellt für ein festes Mehrschichtsystem. Wir sprechen in diesem Zusammenhang dann von Resonanzfrequenz, wenn das korrespondierende  $\nu$  eine Resonanzfrequenz ist.

Die obere Hälfte von Abbildung 6.1 zeigt für verschiedene Einfallswinkel die Intensität des elektrischen Feldes  $|u(z)|^2$  entlang der  $z$ -Achse. Für gewisse Werte von  $\alpha$  und ihre nähere Umgebung sind große Feldüberhöhungen bezogen auf das einfallende Feld  $u_i$  (mit  $|u_i(z)|^2 = 1$  für alle  $z \in \mathbb{R}$ ) zu erkennen, während für die anderen  $\alpha$  keinerlei Überhöhung zu beobachten ist. Die Werte von  $\alpha$ , für die die extremsten Überhöhungen entstehen, sind die gesuchten Resonanzfrequenzen.

In der unteren Hälfte der Abbildung ist das Maximum der Intensität des elektrischen Feldes gegen die gleichen Einfallswinkel wie oben aufgetragen. Diese Werte sind wie die in der oberen Hälfte mit Hilfe des Matrixalgorithmus berechnet worden. Wir hätten sie natürlich auch mit dem Finite-Elemente-Löser berechnen können, aber im Fall von stückweise konstantem Brechungsindex ist der Matrixalgorithmus erstens effizienter und zweitens haben wir eine zusätzliche Verifikation der Ergebnisse unseres Programmes. Die Berechnungen mit unserem Programm wurden mit einer durchschnittlichen Länge von 15

Å je finitem Element, einer Polynomordnung von 10 und 50 Freiheitsgraden im Hardyraum durchgeführt. Die Ergebnisse finden sich ebenfalls in der unteren Hälfte der Abbildung. Einerseits sind die Resonanzfrequenzen durch blaue Kreuze markiert und andererseits die Amplituden der approximierten Lösungen geplottet. Diese erhält man, indem man für einzelne  $\alpha$  in der Nähe der Resonanzen das Maximum von  $|(u_i + u_s)(z)|^2$  bildet, wobei man für  $u_s$  die in Kapitel 5.1 hergeleitete Approximation einsetzt.

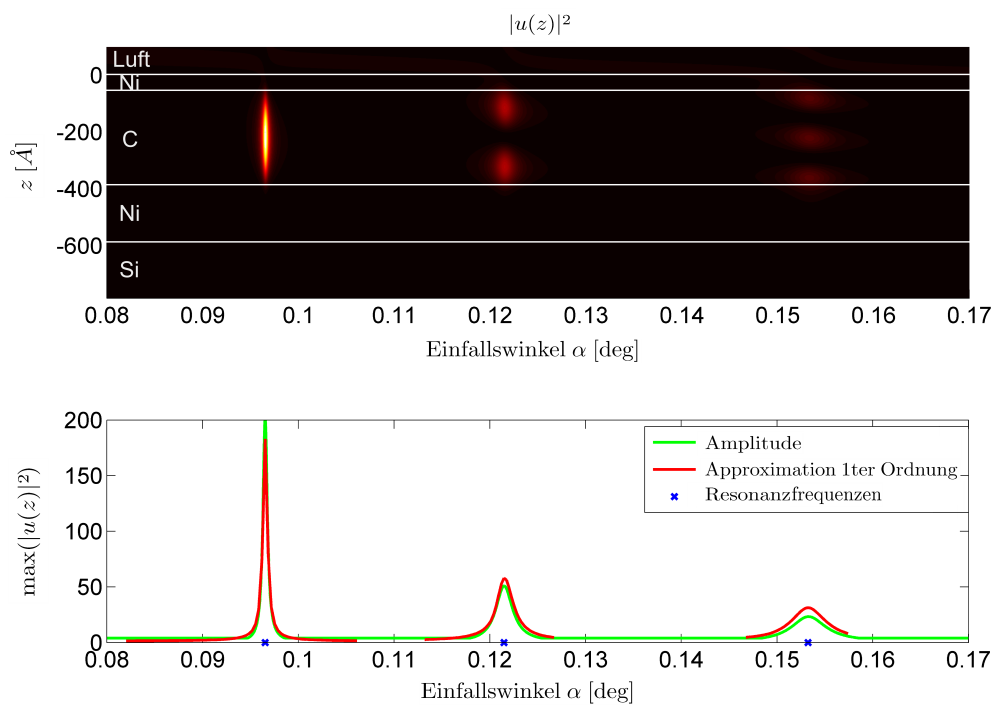


Abbildung 6.1: Oben: Plot der elektrischen Feldintensität des direkten Streuproblems, unten: Amplituden, Resonanzfrequenzen und Approximation der Amplitude mit Hilfe der Resonanzen

Es lässt sich klar erkennen, dass die numerisch berechneten Resonanzfrequenzen sehr gut mit den Positionen der Maxima der Amplitude übereinstimmen und die Approximation erster Ordnung die tatsächlichen Werte in der Nähe

der Resonanzfrequenzen gut annähert. Die Größe der Amplitude ist neben der Lage der Resonanzen der zweite entscheidende Parameter, der Auskunft über die erreichte Feldüberhöhung gibt und genau das werden wir in einem späteren Optimierungsprogramm (siehe Ausblick am Ende der Arbeit) benötigen. In dieser Hinsicht können wir sehr zufrieden sein mit unserer Approximation der Streulösungen in der Nähe der Resonanzen, denn sie gibt auf sehr schnelle Art und Weise Auskunft über Höhe und Breite der „Peaks“ (Ausschläge) in der Amplitudenkurve. Man erkennt in der unteren Hälfte auch deutlich das in Abschnitt 5.4 beschriebene Phänomen, dass die Breite der „Peaks“ mit der Höhe der Ausschläge schmaler wird.

## 6.2 Streulösungen für eine Resonanzfrequenz

Nachdem wir für das Beispiel die Resonanzfrequenzen berechnet haben, sehen wir uns jetzt die Lösung des direkten Problems Streuproblems für die Resonanzfrequenz mit der größten Amplitude genauer an. Diese Resonanzfrequenz liegt bei einem Einfallswinkel  $\alpha \approx 0.0965^\circ$ . Abbildung 6.2 zeigt für diesen

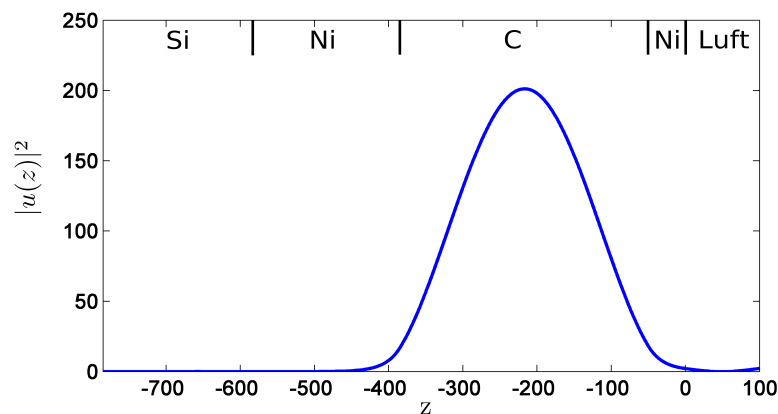


Abbildung 6.2: Intensität des elektrischen Feldes für die erste Resonanzfrequenz  $\alpha = 0.0965^\circ$

Einfallswinkel die Feldintensität  $|u(z)|^2$  der Lösung des Streuproblems (2.18) aus Kapitel 2, welche auch schon im oberen Teil von Abbildung 6.1 zu sehen

war für viele verschiedene Einfallswinkel. Der Übersicht halber, haben wir in Abbildung 6.2 die  $z$ -Achse gedreht und von links nach rechts abgetragen statt von unten nach oben. Man erkennt deutlich den exponentiellen Abfall in der Substratschicht und den extremen Ausschlag in der Kohlenstoffschicht. Auf dem scheinbar relativ großen Rechengebiet für die finiten Elemente mit  $800 \text{ \AA}$  hat die Lösung nur einen einzigen „Wellenbauch“. Betrachtet man nochmals den oberen Teil von Abbildung 6.1, stellt man fest, dass die Intensität des elektrischen Feldes der Lösungen zu den beiden anderen Resonanzfrequenzen zwei beziehungsweise drei „Wellenbäuche“ besitzt. Für die Einfallswinkel zwischen den Resonanzfrequenzen haben die Lösungen ein ähnliches Aussehen, allerdings ohne den hohen Ausschlag. Die Schwingung hängt von der Größe der Ausdrücke  $\sqrt{k_0^2 n_j^2 - \nu}$  für  $j = 1, \dots, m$  ab, die durch den Einfallswinkel mitbestimmt werden. Insofern sind durch die sehr kleinen Einfallswinkel und die damit verbundenen sehr kleinen „projizierten Wellenlängen“ im Verhältnis zur Gebietsgröße, keine sehr hohen Polynomordnungen und feinen Gitter im Finite-Elemente-Teil nötig, weil die Lösungen nur sehr wenig schwingen. Mit „projizierten Wellenlängen“ meinen wir die Wellenlängen der Lösung  $u$ , die durch die Ausdrücke  $\sqrt{k_0^2 n_j^2 - \nu}$  bestimmt werden und nicht die Wellenlänge  $\lambda$ , die in  $k_0$  eingeht.

Es stellt sich schließlich noch die Frage, welches Aussehen die nichttriviale Komponente  $E_y(x, z, t) = u(z)e^{i(\gamma x - \omega t)}$  des gesamten elektrischen Feldes aus der Problembeschreibung in Kapitel 2 hat. Sie wurde für drei verschiedene Zeitpunkte in Abbildung 6.3 geplottet, wobei der oberste Plot den frühesten und der unterste den spätesten der Zeitpunkte zeigt<sup>2</sup>. Die Abbildung illustriert das im Einführungsbeispiel am Ende des 2-ten Kapitels beschriebene Verhalten des Feldes. Wir haben in unserem numerischen Beispiel genau die Situation des Einführungsbeispiels vorliegen mit einer Schicht, die von zwei Schichten mit gleichem Brechungsindex umgeben wird. Es treten in  $z$ -Richtung stehende Wellen auf, und das gesamte elektrische Feld breitet sich im Zeitablauf in  $x$ -Richtung nach rechts aus.

---

<sup>2</sup>Zu beachten ist, dass das Mehrschichtsystem wegen der im Plot benötigten drei Dimensionen, erneut „gedreht“ eingezeichnet wurde.

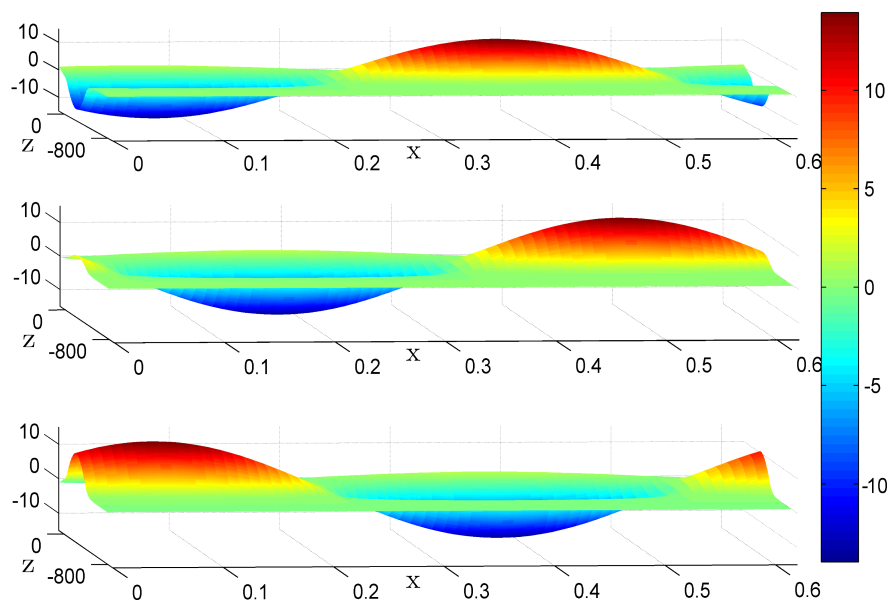


Abbildung 6.3:  $y$ -Komponente  $E_y$  des elektrischen Gesamtfeldes zu drei verschiedenen Zeitpunkten

## 6.3 Weitergehende physikalische Untersuchung des Beispiels

Aufgrund der häufig sehr großen Systeme zur Berechnung der Resonanzen mit dem in dieser Arbeit entwickelten Programm sind viele der daraus berechneten Eigenwerte keine „echten“ Resonanzen, sondern Eigenwerte, die künstlich durch die Diskretisierung mit finiten Elementen und der Polbedingung hinzukommen. Eine Möglichkeit, diese auszuschließen, ist das Variieren der Diskretisierungsparameter, wodurch sich ihre Lage im Gegensatz zu der der echten Resonanzen verändert. Das ist jedoch recht aufwändig und deshalb wäre es wünschenswert, wenn man den Bereich, wo Resonanzen zu erwarten sind, eingrenzen kann. Zudem bekommen wir einen Hinweis darauf, in welchem Bereich wir den Tuningparameter  $s_0$  für die Hardyraum-Infiniten-Elemente wählen sollen (siehe Bemerkung 5.11 in Abschnitt 5.2), und wir bekommen durch das Beispiel eine

Idee davon, warum Resonanzfrequenzen gerade für  $\nu \in (k_0^2 n_m^2, k_0^2)$  zu erwarten sind. Bei den hier betrachteten Systemen ist diese Eingrenzung oft auf einfache Weise möglich. Wir wollen uns das an unserem Beispiel klar machen und die physikalischen Phänomene näher erläutern.

Ist die Wellenlänge im Vergleich zur Geometrie sehr klein, so bedient man sich in der Wellenoptik als Approximation der Strahlenoptik. Aus der Strahlenoptik ist bekannt, dass es beim Übergang von einem Medium mit kleinerem Brechungsindex in ein Medium mit größerem Brechungsindex keine Totalreflexion geben kann.

Beim Übergang einer Welle von einem Medium mit größerem Brechungsindex ( $n_{gr}$ ) in ein Medium mit kleinerem Brechungsindex ( $n_{kl}$ ) gibt der kritische Winkel  $\alpha_{krit}$  den Winkel an, ab dem Totalreflexion stattfindet. Das bedeutet, dass die einfallende Welle für Einfallswinkel kleiner

$$\alpha_{krit} = \arccos\left(\frac{n_{kl}}{n_{gr}}\right) \quad (6.1)$$

vollständig reflektiert wird. Nach dem Snelliusschen Brechungsgesetz gilt mit dem Brechungswinkel  $\zeta$  der transmittierten Welle (genau wie bei  $\alpha$  ist dies der Winkel mit der Trennlinie zwischen den beiden Schichten) die folgende Beziehung:

$$\frac{\cos(\alpha)}{\cos(\zeta)} = \frac{\sin(\frac{\pi}{2} - \alpha)}{\sin(\frac{\pi}{2} - \zeta)} = \frac{\operatorname{Re}(n_{kl})}{\operatorname{Re}(n_{gr})} \quad (6.2)$$

Für Einfallswinkel  $\alpha < \alpha_{krit}$  erhält man  $\cos(\zeta) = \frac{\operatorname{Re}(n_{gr})}{\operatorname{Re}(n_{kl})} \cos(\alpha) > 1$ , was mathematisch nicht sinnvoll ist und physikalisch bedeutet, dass die Welle vollständig reflektiert wird. Das stimmt aber eigentlich nicht so ganz. Es treten sogenannte evaneszente Wellen in der Schicht mit kleinerem Brechungsindex auf, in der nach obiger Betrachtung kein Feld mehr existieren sollte. Man findet ein exponentiell abfallendes Feld vor, das sich zwar nicht mehr senkrecht zur Grenzfläche ausbreitet, aber zeitlich mit dem einfallenden Feld oszilliert. Die kritischen Winkel für den Übergang von Luft zu Nickel und Luft zu Kohlenstoff betragen bei unserem System im Gradmaß  $\alpha_{krit, Ni} = 0.171^\circ$  und  $\alpha_{krit, C} = 0.087^\circ$ . Haben wir einen Einfallswinkel  $\alpha > \alpha_{krit, Ni}$  dringt ein großer Teil des elektrischen Feldes in das System ein und das Feld oszilliert in jeder Schicht. Bei Vernachlässigung der Absorption, wie in Abschnitt 6.1, sind die Ausdrücke  $\sqrt{k_0^2 n_j^2 - \nu}$  für  $j = 0, 1, 2, 3$  alle positive reelle Zahlen. Falls  $\alpha < \alpha_{krit, C}$  ist, haben wir eine schnell abfallende evaneszente Welle im System.



Interessant ist also der Bereich

$$\alpha_{krit,C} \leq \alpha \leq \alpha_{krit,Ni}, \quad (6.3)$$

in dem wir die interessanten Resonanzfrequenzen erwarten können. Wegen der Monotonie der Cosinusfunktion im Bereich  $0 \leq \alpha \leq \frac{\pi}{2}$  folgt aus (6.3) für  $\nu = \gamma^2$  als interessanter Bereich

$$n_1^2 k_0^2 \leq \nu \leq n_2^2 k_0^2. \quad (6.4)$$

Wir haben dann in der Nickelschicht eine evaneszente Welle (man beachte, dass jetzt  $\sqrt{n_1^2 k_0^2 - \nu} \in i\mathbb{R}^+$ ), die wegen der geringen Dicke der Nickelschicht die Kohlenstoffschicht erreicht. An dieser Stelle ist wie oben erläutert der kritische Winkel kleiner und wir beobachten in der Kohlenstoffschicht die große Feldüberhöhung.

Analog lässt sich der Suchbereich auch für größere Mehrschichtsysteme deutlich einschränken. Solche Regeln sind bisher allerdings noch nicht allgemein implementiert worden.



## 7 Fazit und Ausblick

Dieses abschließende Kapitel soll noch einmal kurz zusammenfassen, was mit dieser Arbeit bereits erreicht ist und was die nächsten Schritte sind. Außerdem soll herausgestellt werden, was die Vorteile der in dieser Diplomarbeit vorgestellten Methode sind.

### Was ist schon getan?

Die vorliegende Diplomarbeit liefert ein Programm und die theoretischen Grundlagen zur Berechnung von Resonanzfrequenzen für das in Kapitel 2 vorgestellte Problem mit Mehrschichtsystemen. Dabei ergeben sich für ein vorgegebenes Mehrschichtsystem als Resonanzfrequenzen die Einfallswinkel (beziehungsweise die korrespondierenden  $\nu$ ), für die große Feldüberhöhungen bezüglich des einfallenden Feldes zu erwarten sind. Zuerst haben wir wie üblich Existenz und Eindeutigkeit für das spezielle Streuproblem untersucht, welches sich durch die mathematische Modellierung des physikalischen Problems ergibt.

Dann haben wir gezeigt, dass es nur eine diskrete Menge von Resonanzen gibt, wobei wir auch komplexe Werte von  $\nu$  zugelassen haben und haben anschließend bewiesen, dass diese Resonanzen durch die einfallende Welle angeregt werden können. Dabei haben wir zwei auf den ersten Blick verschiedene Definitionen von Resonanzen mitgeführt und ihre Äquivalenz bewiesen. Für die theoretischen Resultate in Kapitel 4 ist häufig die Definition der Resonanzen über die Resolvente zum Einsatz gekommen, während wir bei der numerischen Berechnung der Resonanzen und der Approximation der Streulösung in ihrer Nähe die Definition als Eigenwerte genutzt haben. Genauer gesagt, haben wir eine Hardyraum-Methode basierend auf der Polbedingung benutzt, welche bei der Diskretisierung das kontinuierliche Problem in ein verallgemeinertes lineares Eigenwertproblem überführt. Es sei noch erwähnt, dass es auch andere

Methoden zur Berechnung von Resonanzen gibt, beispielsweise die in [14] vorgestellte Methode mit Hilfe eines Newton-Verfahrens und Verfahren, die auf der Perfectly Matched Layer Methode ([13], [2]) aufbauen und zum Beispiel in [21] Anwendung gefunden haben.

## Warum wurde die vorgestellte Methode gewählt?

Man könnte sich nun fragen, warum nicht eine der anderen Methoden gewählt wurde oder man nicht gar versucht, über den Matrixalgorithmus zu den Resonanzfrequenzen zu gelangen.

Einerseits führt die Methode mit der Polbedingung im Gegensatz zu den anderen auf ein verallgemeinertes lineares Eigenwertproblem, was sich erheblich einfacher lösen lässt als ein nichtlineares und andererseits können wir auf sehr einfache Weise aus der Eigenwertzerlegung eine Approximation an die Lösung gewinnen.

Im Fall von stückweise konstantem Brechungsindex steht jedoch der Matrixalgorithmus zur Verfügung, der sehr schnell eine Vorwärtslösung liefern kann. Man hat aber immer noch keinen Anhaltspunkt, wie fein man beim Ausprobieren verschiedener  $\nu$  werden muss, und vor allem erhält man keinerlei Information darüber, wie die Höhe der Ausschläge der Amplitude von den Resonanzfrequenzen und damit vom Mehrschichtsystem abhängen. Bei der Berechnung der komplexen Resonanzen hingegen kennt man die Abhängigkeit des Ausschlages der Lösung bei der Resonanzfrequenz von der Größe des Absolutbetrags des Imaginärteils der Resonanz und anderen von ihr abhängigen Ausdrücken (siehe Abschnitt 5.4 in Kapitel 5). Also kann man versuchen, diese Werte zu optimieren.

Beim Matrixalgorithmus kann man aber auch zu komplexen Werten übergehen und versuchen herauszufinden, für welche Werte keine eindeutige Lösung existiert, was dann gerade den komplexen Resonanzen entspräche. Fasst man die Teilmatrizen des Matrixalgorithmus aus dem Anhang in einem System zusammen, aus dem man alle Koeffizienten errechnen kann, so müsste man für ein festes Mehrschichtsystem nach Werten von  $\nu$  suchen, für die die Determinante dieser Matrix 0 ist. Dies stellt ein nichtlineares Problem dar, was ebenfalls

nicht ganz einfach zu lösen ist. Man könnte zum Beispiel ein Newton-Verfahren anwenden, muss sich dann aber Gedanken über Startwerte und Konvergenz machen.

Das gewichtigste Argument gegen dieses Vorgehen ist allerdings, dass sich der Matrixalgorithmus nicht auf beliebige Brechungsfunktionen  $n \in L^\infty(\mathbb{R})$  und mehrere Dimensionen erweitern lässt.

## Was ist noch zu tun?

Eine Erweiterung auf den zwei- oder dreidimensionalen Fall ist für dieses konkrete Problem zwar nicht vorgesehen, aber für andere Wellenleiter von Interesse. Diese können in ähnlicher, allerdings komplizierterer Form, behandelt werden, da sich die Polbedingung und die resultierende Hardyraum-Methode im mehrdimensionalen Fall ebenfalls nutzen lassen und auch auf ein lineares Eigenwertproblem führen. Die Theorie dazu findet sich genau wie der eindimensionale Fall in [24].

Für unserer Problem mit den Mehrschichtsystemen sollen als erstes die numerischen Ergebnisse erweitert werden, was die Untersuchung und Verifikation der Ergebnisse für weitere Systeme und allgemeinere Brechungsfunktionen einschließt. Wie schon zu Beginn der Arbeit angedeutet, sind in diesem Zusammenhang insbesondere Brechungsfunktionen interessant, die Oberflächenrauigkeit modellieren. Solche Funktionen sind durch die Theorie in dieser Arbeit mitabgedeckt, da allgemein  $n \in L^\infty(\mathbb{R})$  zugelassen wurde.

Eine Abschätzung über den kleinsten erreichbaren Imaginärteil einer Resonanz unter Einbeziehung anderer die Größe der Feldüberhöhung beeinflussender Terme (siehe Abschnitt 5.4) ist ebenfalls wünschenswert, um obere Schranken für die größtmögliche Feldüberhöhung unter gewissen Nebenbedingungen an den Brechungsindex zu erhalten. Über dieses Thema ist bisher noch wenig bekannt und es stellt sich auch die Frage, ob Resonanzen mit Vielfachheiten größer als 1 möglich sind. Diese wären besonders interessant, da sie zu deutlich größeren Feldüberhöhungen führen.

Fernziel der Zusammenarbeit mit der Röntgenphysik in Göttingen ist die Optimierung der Parameter der Mehrschichtsysteme. Hierbei gehen wir erstmal davon aus, dass das System nur durch die Schichtanzahl  $m$ , die Schichtdicken  $d_j$  und die verwendeten Materialien mit Brechung  $n_j$  verändert wird. Ob und

wie die Oberflächenrauigkeit auch in den Optimierungsprozeß eingehen soll, ist noch zu überlegen. Da nichtlineare Optimierungsprobleme oft nur sehr schwierig oder mit herkömmlichen Methoden gar nicht zu lösen sind, werden wir möglicherweise auf genetische Algorithmen zurückgreifen.

# 8 Anhang

Im vorliegenden Anhang finden sich Erläuterungen zur Arbeit, die entweder Grundlagen darstellen oder nicht direkt in den Kontext der Arbeit passen, aber dennoch Erwähnung oder Verwendung gefunden haben. Insbesondere wird auch der Matrixalgorithmus zur Lösung des Streuproblems aus Kapitel 2 zur Berechnung einer exakten Lösung bei stückweise konstantem Brechungsindex angegeben.

## 8.1 Matrixalgorithmus

Der vorgestellte Algorithmus geht auf Shenon, Thyagarajan und Ghatak zurück ([16]) und hat nichts mit finiten Elementen zu tun, sondern soll direkt eine Lösung des in Kapitel 2 formulierten Streuproblems liefern. Er ist jedoch nur für den Spezialfall eines allgemeinen Mehrschichtsystems mit stückweise konstantem Brechungsindex  $n$  anwendbar. Ein solches wurde in Abschnitt 2.1 detailliert eingeführt. Der Algorithmus errechnet durch Aufstellen und Lösen eines Gleichungssystems das Gesamtfeld  $u$  und wird im Folgenden hergeleitet. Wir suchen auf ganz  $\mathbb{R}$  definierte Lösungen des Streuproblems, die zweimal schwach differenzierbar sind, also auch mindestens einmal stetig differenzierbar im klassischen Sinne. Da  $n$  stückweise konstant ist, können wir die  $z$ -Achse in  $(m + 1)$  Teilstücke ( $m$  Schichten und eine Luftschicht, welche wir mit 0 indizieren) aufteilen, so dass  $n$  auf den Teilstücken jeweils konstant ist. Damit haben wir für  $j = 0, \dots, m$  in jeder Schicht eine gewöhnliche Differentialgleichung  $-u''(z) - \kappa_j^2 u(z) = 0$  mit konstanten Koeffizienten, wobei

$$\kappa_j := \sqrt{k_0^2 n_j^2 - \nu} \neq 0, \quad j = 1, \dots, m$$

und  $\kappa_0 := \sqrt{k_0^2 - \nu} > 0$  in der Luftschicht vorausgesetzt seien. Auf dem  $j$ -ten Teilstück ist eine Lösung also gegeben durch  $C_j e^{-i\kappa_j z} + D_j e^{i\kappa_j z}$  mit Konstanten  $C_j, D_j \in \mathbb{C}$  für  $j = 0, \dots, m$ . Auf den Teilstücken ist die Lösung damit trivialerweise zweimal schwach differenzierbar, weil sie sogar zweimal im klassischen Sinne differenzierbar ist. Es kommt also auf die Übergangspunkte zwischen den Schichten an, an denen wir die Stetigkeit von Funktion und Ableitung ausnutzen wollen, um eine Lösung zu finden. Dass diese Bedingungen wirklich ausreichen, werden wir in einem anschließenden Lemma sehen. Da das Aussehen der Lösung aufgrund der Ausstrahlungsbedingung und der einfallenden Welle in der Luftschicht bekannt ist ( $1e^{-i\kappa_0 z} + C_0 e^{i\kappa_0 z}$ ) und es nur auf die Schichtübergänge ankommen wird, können wir die Luftschicht als endliche „0-te Schicht“ zum Schichtsystem hinzufügen und ihr die beliebig gewählte Dicke  $d_0$  zuordnen. Dadurch legen wir den Nullpunkt in den Anfangspunkt der endlichen Luftschicht und hätten nach Umnummerierung wieder die Ausgangssituation, nun aber mit  $n_1 = 1$ . Die Lösung in der endlichen Luftschicht hat wegen der zwei Stetigkeitsbedingungen und dem identischen Aussehen die gleichen Koeffizienten wie in der unendlichen Luftschicht, die wir nun nicht weiter zu beachten brauchen. Wir haben also nur noch den Bereich  $[-\infty, 0]$  zu betrachten.

Durch die endliche Luftschicht wird die Notation wesentlich einfacher und einheitlich für alle Schichten. Mit  $\Theta_j$  bezeichnen wir die Position der  $j$ -ten Schicht im System, genauer  $\Theta_j := \sum_{k=0}^{j-1} d_k$  und die Anfangspunkte der Schichten des Mehrschichtsystems (ergänzt um die Luftschicht) auf der  $z$ -Achse sind gegeben durch  $-\Theta_j$ . Damit können wir die Lösung auch wie folgt ausdrücken:

$$u(z) = A_j e^{-i\kappa_j(z+\Theta_j)} + B_j e^{i\kappa_j(z+\Theta_j)} \quad \text{für } -\Theta_{j+1} < z \leq -\Theta_j \quad (8.2)$$

und  $j = 0, \dots, m-1$ , sowie

$$u(z) = A_m e^{-i\kappa_m(z+\Theta_m)} + B_m e^{i\kappa_m(z+\Theta_m)} \quad \text{für } -\infty < z \leq -\Theta_m. \quad (8.3)$$

Dabei haben sich lediglich die zu berechnenden Konstanten geändert, deren Berechnung in dieser Form übersichtlicher wird, da viele Terme wegfallen.

Betrachtet man den Übergang von der  $j$ -ten zur  $(j+1)$ -ten Schicht ( $z = -\Theta_{j+1}$ ), erhält man unter Ausnutzung der Stetigkeitsbedingungen von Funktion und Ableitung folgendes System für die Koeffizienten  $A_j, B_j, A_{j+1}$  und  $B_{j+1}$ .



$$\begin{pmatrix} e^{-i\kappa_j(-d_j)} & e^{i\kappa_j(-d_j)} \\ -i\kappa_j e^{-i\kappa_j(-d_j)} & i\kappa_j e^{i\kappa_j(-d_j)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i\kappa_{j+1} & i\kappa_{j+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} \quad (8.4)$$

Die Matrix auf der linken Seite ist invertierbar (Determinante ist  $2i\kappa_j \neq 0$ ) und durch Invertieren der Matrix erhalten wir:

$$\begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\kappa_{j+1}}{\kappa_j}\right) e^{-i\kappa_j d_j} & \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\kappa_{j+1}}{\kappa_j}\right) e^{-i\kappa_j d_j} \\ \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\kappa_{j+1}}{\kappa_j}\right) e^{i\kappa_j d_j} & \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\kappa_{j+1}}{\kappa_j}\right) e^{i\kappa_j d_j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} \quad (8.5)$$

für  $j = 0, \dots, m-1$ .

Wir bezeichnen diese Übergangsmatrizen mit  $\underline{R}_j$  und erhalten durch sukzessives Einsetzen von (8.5) einen Zusammenhang zwischen den Koeffizienten in der Luftschicht und denen in der Substratschicht.

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \underline{R}_0 \underline{R}_1 \dots \underline{R}_{m-1} \begin{pmatrix} A_m \\ B_m \end{pmatrix} \quad (8.6)$$

Wie in Kapitel 2 erläutert, soll  $B_m = 0$  sein. Außerdem wissen wir wegen des Aussehens der Lösung in der Luftschicht, dass  $A_0 = 1$  gilt. Wir erhalten also aus (8.6) den Koeffizienten  $A_m$  und können nun schichtweise die Koeffizienten von der letzten bis zur ersten Schicht ausrechnen. Insgesamt haben wir damit die gesuchte Lösung gefunden. Also ergibt sich die Durchführbarkeit des Matrixalgorithmus aus der Lösbarkeit von (8.6). Wann diese gegeben ist, klärt das folgende Lemma.

LEMMA 8.1. *Gleichung (8.6) besitzt genau dann eine Lösung mit  $A_0 = 1$  und  $B_m = 0$ , wenn das zugehörige kontinuierliche Problem (2.18) eine Lösung besitzt.*

BEWEIS. Sei zuerst  $u$  eine Lösung von (2.18). Betrachte eine beliebige endliche Schicht, das bedeutet  $-\theta_{j+1} < z < -\theta_j$  mit den obigen Bezeichnungen. Es gilt in dieser Schicht wegen der Differentialgleichung (2.18a) die Gleichung  $-u'' - \kappa_j^2 u = 0$  mit konstanten Koeffizienten. Ein Fundamentalsystem von Lösungen dieser Differentialgleichung mit  $\kappa_j \neq 0$  in  $C^2((\theta_{j+1}, \theta_j))$  ist gegeben durch  $e^{i\kappa_j z}$  und  $e^{-i\kappa_j z}$ . Da die „Helmholtz-Gleichung“ für Dirichletsche Randbedingungen auch in  $H^1((\theta_{j+1}, \theta_j))$  eindeutig lösbar ist, sofern es keine nichttrivialen Lösungen des homogenen Problems gibt (siehe beispielsweise [7], Chapter 6.2), und jede Lösung in  $H^1((\theta_{j+1}, \theta_j))$  auch in  $H^2((\theta_{j+1}, \theta_j))$  liegt wegen

der bekannten Regularitätssätze, bleiben  $e^{i\kappa_j z}$  und  $e^{-i\kappa_j z}$  ein Fundamentalsystem des zweiparametrischen Lösungsraumes in  $H^2((\theta_{j+1}, \theta_j))$ . Analog kann man stückweise für die unendlichen Schichten argumentieren. Wegen der Bedingung (2.18d) und der Differentialgleichung (2.18a) hat  $u$  also das in (8.2) und (8.3) beschriebene Aussehen in den einzelnen Schichten. Weil zudem  $u \in H_{\text{loc}}^2(\Omega)$  und  $u$  somit einmal stetig differenzierbar ist, folgt, dass die Koeffizienten von  $u$  die Gleichungssysteme (8.4) des Matrixalgorithmus erfüllen. Insbesondere ist durch Rückwärtseinsetzen auch (8.6) erfüllt mit  $A_0 = 1$  wegen der einfallenden Welle und Bedingung (2.18d) sowie  $B_m = 0$  wegen der Bedingung (2.18e).

Ist andersherum Gleichung (8.6) lösbar für  $A_0 = 1$  und  $B_m = 0$ , erhalten wir daraus den Koeffizienten  $A_m$ . Mit Hilfe von (8.5) können wir rekursiv die Koeffizienten  $A_j, B_j$  über ihre jeweiligen „Nachfolger“  $A_{j+1}, B_{j+1}$  definieren. Nun können wir  $u$  auf  $[-\infty, 0]$  durch (8.2) und (8.3) definieren und durch  $u(z) = e^{-i\kappa_0 z} + B_0 e^{i\kappa_0 z}$  für  $z \in (0, \infty)$ . Es ist klar, dass die Differentialgleichung (2.18a) auf den Teilstücken erfüllt wird. Auf den Teilstücken ist die Lösung des Matrixalgorithmus trivialerweise zweimal schwach differenzierbar, da sie zweimal stark differenzierbar ist. Wegen der Stetigkeitsbedingungen für Funktion und Ableitung folgt mit Lemma 8.16 aus dem Grundlagenabschnitt, dass  $u$  in  $H_{\text{loc}}^2(\Omega)$  liegt. Wegen  $A_0 = 1$  und  $B_m = 0$  werden auch die Bedingungen (2.18d) und (2.18e) von  $u$  erfüllt.  $\square$

*BEMERKUNG 8.2. Zur Vergleichbarkeit von Lösungen aus dem Matrixalgorithmus mit Lösungen aus dem Programm mit finiten Elementen und Hardyraum-Infiniten-Elementen kann man letzteres ebenfalls mit einer endlichen Luftschicht als erster Schicht des Systems arbeiten lassen. Dadurch ändert man die Lösung nicht, da nur der künstliche Rand verschoben wird. Man kann die einfallende Welle nämlich einfach so verschieben, dass sie im Anfangspunkt der künstlichen Luftschicht den Wert 1 hat. Nimmt man diese Verschiebung nicht vor, bekommt man zwar auch mit beiden Algorithmen die richtige Lösung, allerdings sind sie im Allgemeinen zueinander phasenverschoben.*

## 8.2 Mathematische Grundlagen

Jetzt sollen noch einige Grundbegriffe und Sätze aufgeführt werden, die in der Arbeit immer wieder benötigt werden. Die Erläuterungen werden möglichst

kurz gehalten und es wird auf entsprechende Quellen verwiesen, in denen sich Details zu den einzelnen Sätzen und Definitionen finden lassen, vor allem aber zu den Beweisen, die hier nicht ausgeführt werden, da sie als bekannt vorausgesetzt werden und zu weit vom eigentlichen Thema der Diplomarbeit wegführen würden. Verzichtet wird auf eine ausführliche Einführung in die Funktionalanalysis genauso wie in das Gebiet der Sobolevräume und die schwache Lösungstheorie, da wir voraussetzen, dass der Leser damit vertraut ist. Bei den dennoch aufgeführten Sätzen und Definitionen wird kein Wert auf Vollständigkeit gelegt. Stattdessen werden die Aspekte aufgegriffen, die für die Untersuchung elliptischer Differentialoperatoren wichtig sind, denn ein solcher liegt in dieser Arbeit vor.

Detaillierter werden wir die Grundbegriffe der analytischen Riesz-Fredholm-Theorie einführen, die auf einer Verallgemeinerung der klassischen Funktionentheorie auf Funktionen mit Werten in Banachräumen aufbaut.

### 8.2.1 Funktionalanalysis

Die Funktionalanalysis ist eine wichtige Grundlage für die Behandlung partieller Differentialgleichungen. Es sollen drei Sätze aufgeführt werden, die von zentraler Bedeutung sind und immer wieder benutzt werden in dieser Diplomarbeit. Die Grundbegriffe (wie Hilbertraum, beschränkter Operator, kompakter Operator und so weiter) werden als bekannt vorausgesetzt. Für eine Einführung in die Funktionalanalysis sei auf die Bücher [10] und [1] verwiesen. Zur äquivalenten Darstellung unserer schwachen Formulierung in Operator-schreibweise in Kapitel 3 benötigen wir im Wesentlichen zwei Sätze.

**SATZ 8.3 (RIESZSCHER DARSTELLUNGSSATZ).** *Sei  $H$  ein Hilbertraum. Zu jedem antilinearen, beschränkten Funktional  $F : H \rightarrow \mathbb{C}$  gibt es ein eindeutig bestimmtes  $f \in H$  mit*

$$F(u) = \langle f, u \rangle_H \quad \text{für alle } u \in H. \quad (8.7)$$

*Außerdem gilt  $\|F\| = \|f\|$ .*

**BEWEIS.** Ein Beweis des Satzes findet sich in [10], Satz 26.1. □

Mit  $\mathfrak{L}(X, Y)$  (für  $X = Y$  einfach nur  $\mathfrak{L}(X)$ ) bezeichnen wir den Raum aller linearen beschränkten Operatoren von  $X$  nach  $Y$ , der mit der Norm

$$\sup_{\|x\|_X=1} \|Tx\|_Y \quad \text{für } T \in \mathfrak{L}(X, Y) \quad (8.8)$$

selbst ein Banachraum ist, falls  $Y$  ein Banachraum ist.

Für einen komplexen Hilbertraum  $V$  bezeichnen wir mit  $\text{Ses}(V)$  die Menge aller bezüglich der Norm

$$\|B\| := \sup_{u, v \in V \setminus \{0\}} \frac{|B(u, v)|}{\|u\| \|v\|} \quad (8.9)$$

beschränkten Sesquilinearformen  $B$ .

**SATZ 8.4.** *Sei  $H$  ein komplexer Hilbertraum. Dann ist die Abbildung  $\mathfrak{L}(H) \rightarrow \text{Ses}(H)$ , die einem Operator  $A \in \mathfrak{L}(H)$  die durch*

$$B(u, v) = \langle Au, v \rangle_H, \quad u, v \in H \quad (8.10)$$

*definierte Sesquilinearform  $B \in \text{Ses}(H)$  zuordnet, bijektiv und bezüglich der Norm (8.9) isometrisch.*

**BEWEIS.** Die Isometrie ist leicht zu überprüfen und der Rest des Satzes folgt aus dem in [3] bewiesenen Satz (Theorem 2.2).  $\square$

Der folgende Satz ist ein wichtiges Resultat aus der Funktionalanalysis und hat eine breite Anwendbarkeit.

**SATZ 8.5.** *Sei  $K : X \rightarrow X$  ein kompakter linearer Operator in einem normierten Raum  $X$ ,  $I$  bezeichne den Identitätsoperator auf  $X$ . Dann ist der Operator  $I - K$  injektiv genau dann wenn er surjektiv ist. Ist  $I - K$  injektiv (bzw. bijektiv), so ist der inverse Operator  $(I - A)^{-1} : X \rightarrow X$  beschränkt.*

**BEWEIS.** Einen Beweis hierzu findet man in [12], Theorem 3.4.  $\square$

### 8.2.2 Analytische Riesz-Fredholm-Theorie

Ein zentraler Bestandteil dieser Diplomarbeit ist die Anwendung der analytischen Riesz-Fredholm-Theorie auf die konkrete Problemstellung. Hierzu sind ein paar grundlegende Definitionen und Sätze notwendig, die eine Verallgemeinerung der klassischen Funktionentheorie auf Funktionen von einer komplexen Variable mit Werten in komplexen Banachräumen darstellen.

DEFINITION 8.6. Sei  $D \subseteq \mathbb{C}$  ein Gebiet und  $S : D \rightarrow X$  eine Funktion von  $D$  in den komplexen Banachraum  $X$ .

a)  $S$  heißt holomorph in  $D$ , wenn für jedes  $\nu \in D$  der Grenzwert

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{S(\nu + h) - S(\nu)}{h} \quad (8.11)$$

bezüglich der Norm in  $X$  existiert.

b)  $S$  heißt schwach holomorph in  $D$ , wenn für jedes beschränkte lineare Funktional  $l$  aus dem Dualraum  $X^*$  gilt: Die Funktion  $D \rightarrow \mathbb{C}$  mit  $\nu \mapsto l(S(\nu))$  ist holomorph.

c)  $S$  heißt analytisch in  $D$ , wenn für jedes  $\nu_0 \in D$  eine Potenzreihendarstellung

$$S(\nu) = \sum_{k=0}^{\infty} S_k(\nu - \nu_0)^k \quad (8.12)$$

mit  $S_k \in X$  existiert und diese Reihe in der Norm auf  $X$  für alle  $\nu$  aus einer Umgebung von  $\nu_0$  gleichmäßig konvergiert.

d)  $S$  heißt meromorph in  $D$ , wenn eine diskrete Menge  $E \subset D$  existiert, so dass  $S$  in  $D \setminus E$  analytisch ist und für jedes  $\nu_0 \in E$  eine Reihendarstellung

$$S(\nu) = \sum_{k=-K}^{\infty} S_k(\nu - \nu_0)^k \quad (8.13)$$

mit  $S_k \in X$  und  $K \geq 0$  existiert, welche in der Norm auf  $X$  in einer gelochten Umgebung von  $\nu_0$  gleichmäßig konvergiert. Ist einer der Operatoren  $S_{-1}, \dots, S_{-K}$  ungleich Null, nennt man  $\nu_0$  einen Pol von  $S$ .

Die Eigenschaft „schwach holomorph“, scheint zunächst schwächer zu sein und es ist unter Ausnutzung der Stetigkeit der betrachteten linearen Funktionale sofort klar, dass jede holomorphe Funktion auch schwach holomorph ist. Wie sich herausstellt, gilt aber auch die Umkehrung.

SATZ 8.7. *Eine Funktion  $S : D \rightarrow X$  (mit den Bezeichnungen aus Definition 8.6) ist genau dann holomorph in  $D$ , wenn sie schwach holomorph ist.*

BEWEIS. Ein Beweis dafür, dass jede schwach holomorphe Funktion holomorph ist, findet sich in [11], Theorem 1.37.  $\square$

Wie in der klassischen Funktionentheorie kann man auch hier die Äquivalenz von analytisch und holomorph beweisen.

SATZ 8.8. *Jede analytische Funktion ist holomorph und umgekehrt.*

BEWEIS. Sei  $S : D \rightarrow X$  analytisch. Dann ist für jedes  $l \in X^*$  die Funktion  $\nu \mapsto l(S(\nu))$  komplexwertig und analytisch. Aus der klassischen Funktionentheorie folgt die Holomorphie dieser Funktion und somit ist  $S$  schwach holomorph und nach Satz 8.7 auch stark holomorph.

Der Beweis der Rückrichtung ist schwieriger und wird in allgemeinerem Zusammenhang in [8], Chapter III, Sec. 2 ausgeführt.  $\square$

Im dieser Arbeit haben wir es mit operatorwertigen Funktionen zu tun, die wir auf Holomorphie untersuchen, wobei der nächste Satz sehr hilfreich ist.

SATZ 8.9. *Sei  $D \subseteq \mathbb{C}$  ein Gebiet und  $X, Y$  seien komplexe Banachräume. Die operatorwertige Funktion  $S(\nu) : D \rightarrow \mathfrak{L}(X, Y)$  ist holomorph, wenn für jedes  $\nu \in D$  gilt:  $l(S(\nu)u)$  ist holomorph für jedes  $u \in X$  und jedes  $l \in Y^*$ .*

BEWEIS. Einen Beweis dafür findet man in [11], III-§ 3.1, Theorem 3.12.  $\square$

### 8.2.3 Sobolev-Räume und elliptische Differentialgleichungen

Grundlage der in dieser Diplomarbeit durchgeführten Untersuchung des eindimensionalen Problem aus der Röntgenphysik ist die Theorie der Sobolev-Räume und ihre Anwendung auf elliptische Differentialgleichungen. Auf eine ausführliche Motivation und Herleitung dieser Theorie werden wir an dieser Stelle verzichten. Es sei nur gesagt, dass Sobolev-Räume Hilberträume von in einem verallgemeinerten Sinne differenzierbaren Funktionen sind.

Wir werden im Folgenden die für diese Arbeit wichtigen Definitionen und Sätze angeben. Dabei orientieren wir uns im Wesentlichen an [7]. Das gilt auch für die Notation, und wir beschränken uns auch hier wieder auf den eindimensionalen Fall. Die Sätze und Definitionen aus [7] und anderen zitierten Werken sind alle allgemeiner formuliert.

DEFINITION 8.10. Sei  $\Omega \subset \mathbb{R}$  offen,  $b \in \mathbb{N}$  und seien  $u, v$  aus der Menge  $L^1_{\text{loc}} := \{u : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid \int_K |u(z)| dz < \infty \text{ für alle kompakten Teilmengen } K \subset \Omega\}$ . Dann heißt  $\phi$  die  $b$ -te schwache Ableitung von  $u$ , falls

$$\int_{\Omega} uv^{(b)} dz = (-1)^{|b|} \int_{\Omega} \phi v dz \quad (8.14)$$

für alle Testfunktion  $v \in C_c^\infty(\Omega)$ , wobei  $C_c^\infty(\Omega)$  die Menge aller unendlich oft stetig differenzierbaren Funktionen mit kompaktem Träger in  $\Omega$  ist. In diesem Fall schreiben wir auch  $u^{(b)} = \phi$ .

DEFINITION 8.11. Für  $k \in \mathbb{N}_0$ ,  $p < \infty$  und  $\Omega \subset \mathbb{R}$  bezeichnen wir mit  $W^{k,p}(\Omega)$  den Sobolevraum aller Funktion  $u \in L^p(\Omega)$ , die für alle  $b \leq k$  eine schwache Ableitung  $u^{(b)} \in L^p(\Omega)$  besitzen.

Speziell für  $p = 2$  werden die Räume  $W^{k,2}(\Omega)$  mit dem Skalarprodukt

$$\langle u, v \rangle_{W^{k,2}(\Omega)} := \sum_{b \leq k} \int_{\Omega} u^{(b)} v^{(b)} dz. \quad (8.15)$$

und der davon erzeugten Norm zu Hilberträumen ([7], Chapter 5.2, Theorem 2).

In dieser Arbeit haben wir stets den Fall  $p = 2$  und werden die Bezeichnung  $W^{k,2}(\Omega)$  im Hauptteil der Arbeit vermeiden. Wir schreiben stattdessen

$$H^k(\Omega) := W^{k,2}(\Omega), \quad k = 0, 1, \dots \quad (8.16)$$

Weiterhin führen wir folgende Bezeichnungen ein:

DEFINITION 8.12. Mit  $H_0^k(\Omega)$  bezeichnen wir den Abschluß von  $C_c^\infty(\Omega)$  unter der  $H^k$ -Norm und mit  $H_{\text{loc}}^k(\Omega)$  den Raum aller  $u$ , so dass  $u \in H^k(\Sigma)$  für jede offene, präkompakte Menge mit  $\bar{\Sigma} \subset \Omega$ .

Eine alternative Charakterisierung der  $H^k$ -Räume mit Hilfe der Fouriertransformation ([7], Chapter 5.9, Theorem 7), die auch für nicht ganzzahlige  $k$  sinnvoll ist, lassen wir an dieser Stelle weg, da wir in dieser Arbeit nur  $k \in \mathbb{N}_0$  benötigen.

Nach diesen grundlegenden Definitionen zitieren wir nun noch die wichtigsten in der Arbeit verwendeten Sätze aus diesem Bereich.

SATZ 8.13. *Sei  $s \geq 0$ . Für beliebige offene Teilmengen von  $\mathbb{R}$  und  $l \in \mathbb{N}_0$  gilt*

$$H^k(\Omega) \subset C^l(\overline{\Omega}) \quad k > \frac{m}{2} + l \quad (8.17)$$

und zu jedem  $b \in \mathbb{N}_0$  mit  $|b| \leq l$  gibt es eine Konstante  $C_b$ , so dass

$$\|u^{(b)}\|_{L^\infty(\Omega)} \leq C_b \|u\|_{H^k(\Omega)} \quad (8.18)$$

für alle  $u \in H^k(\Omega)$ .

BEWEIS. Ein Beweis des Satzes findet sich in [15], Corollary 6.92. □

SATZ 8.14. *Sei  $\Omega \subset \mathbb{R}$  offen und beschränkt. Dann ist die Einbettung  $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^2(\Omega)$  kompakt.*

BEWEIS. Ein Beweis des Satzes ergibt sich aus [7], Chapter 5.7, Theorem 1 und der darauf folgenden Bemerkung. □

BEMERKUNG 8.15. *Ist  $\Omega \subset \mathbb{R}$  ein offenes Intervall, dann liegt  $u$  genau dann in  $H^1(\Omega)$ , wenn  $u$  stetig ist und die gewöhnliche Ableitung von  $u$  (die fast überall existiert) zu  $L^2(\Omega)$  gehört (siehe [7], Abschnitt 5.2.2). Solch eine einfache Charakterisierung ist aber auch nur im eindimensionalen Fall möglich.*

LEMMA 8.16. *Seien  $\Omega_1 := (a, b)$ ,  $\Omega_2 := (b, c)$  mit  $a < b < c \in \mathbb{R}$ ,  $u_1 : [a, b] \rightarrow \mathbb{C}$  und  $u_2 : [b, c] \rightarrow \mathbb{C}$ . Außerdem sei  $u_1 \in H^2(\Omega_1)$ ,  $u_2 \in H^2(\Omega_2)$  und es gelte  $u_1(b) = u_2(b)$  sowie  $u_1'(b) = u_2'(b)$ . Dann liegt die Funktion*

$$u(z) := \begin{cases} u_1(z), & a \leq z \leq b \\ u_2(z), & b < z \leq c \end{cases} \quad (8.19)$$

in  $H^2((a, c))$ .



BEWEIS. Wegen der Stetigkeit der Ableitung von  $u$  bei  $z = b$  und Satz 8.13 ist  $u$  offenbar einmal differenzierbar im starken Sinne. Definieren wir

$$u''(z) := \begin{cases} u_1''(z), & a \leq z \leq b \\ u_2''(z), & b < z \leq c \end{cases} \quad (8.20)$$

mit den zweiten schwachen Ableitungen von  $u_1$  und  $u_2$ , erhalten wir für alle  $v \in C_c^\infty$  durch zweimalige partielle Integration

$$\int_a^c uv'' dz = \int_a^b uv'' dz + \int_b^c uv'' dz = \int_a^c u''v dz, \quad (8.21)$$

weil sich wegen der beiden Stetigkeitsbedingungen die „inneren“ Randterme bei  $z = b$  aufheben.  $\square$

SATZ 8.17. Sei  $\Omega \in \mathbb{R}$  offen und beschränkt und  $L$  ein gleichmäßig elliptischer Differentialoperator zweiter Ordnung der Form

$$(Lu)(z) := -a(z)u''(z) + b(z)u'(z) + c(z)u(z)$$

mit zugehöriger Sesquilinearform, so dass  $a \in W^{1,\infty}(\Omega)$  mit  $a(z) > 0$  für  $z \in \Omega$ ,  $b, c \in L^\infty(\Omega)$  und  $f \in L^2(\Omega)$ . Sei  $u \in H_0^1(\Omega)$  eine schwache Lösung des Dirichletproblems  $(Lu)(x) = f$ . Dann gilt  $u \in H^2(\Omega)$  und

$$\|u\|_{H^2(\Omega)} \leq C \left( \|u\|_{L^2(\Omega)} + \|f\|_{L^2(\Omega)} \right).$$

BEWEIS. Der sehr aufwändige Beweis dieses Satzes für wesentlich allgemeinere Gebiete und höhere Dimensionen findet sich beispielsweise bei [15], Theorem 8.53.  $\square$

## 8.2.4 Gewöhnliche Differentialgleichungen

Zwar behandeln wir die in dieser Arbeit auftretende Differentialgleichung mit Methoden für partielle Differentialgleichungen, aber weil es sich eigentlich um eine gewöhnliche Differentialgleichung handelt, greifen wir an einigen Stellen

(insbesondere im Matrixalgorithmus) auf Ergebnisse über gewöhnliche Differentialgleichungen zurück. Das Problem generell mit Methoden für gewöhnliche Differentialgleichungen zu behandeln ist nicht sinnvoll, da wir es mit einem unendlichen Gebiet zu tun haben und viele Ergebnisse dieser Arbeit aus der Operatorenschreibweise des Problems gefolgert werden.

$\mathbb{C}[X]$  bezeichne die Menge aller Polynome  $p(X) = a_0 + a_1X + \dots + a_nX^n$  mit komplexen Koeffizienten  $a_k$  in der Unbestimmten  $X$ . Setzen wir  $X = \frac{d}{dx}$  ein, so erhalten wir einen Differentialoperator auf der Menge der  $n$ -mal differenzierbaren Funktionen und es gilt der folgende Satz:

**SATZ 8.18.** *Sei  $p(X) = X^n + a_{n-1}X^{n-1} + \dots + a_1X + a_0 \in \mathbb{C}[X]$ . Das Polynom  $p$  habe  $n$  paarweise verschiedene Nullstellen  $X_1, \dots, X_n \in \mathbb{C}$ . Dann bilden die Funktionen  $\phi_k : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$  mit*

$$\phi_k(z) := e^{x_k z}, \quad k = 1, \dots, n$$

*ein Fundamentalsystem von Lösungen (eine Basis des Vektorraums von Lösungen) der zum Differentialoperator  $p\left(\frac{d}{dx}\right)$  gehörigen Differentialgleichung*

$$u^{(n)}(z) + a_{n-1}u^{(n-1)}(z) + \dots + a_0u(z) = 0. \quad (8.24)$$

**BEWEIS.** Ein Beweis und Erläuterungen finden sich in [9], §13, Satz 1. □

Für den nächsten Satz greifen wir die für gewöhnliche Differentialgleichungen übliche Schreibweise aus [27] auf, ohne sie genauer zu erläutern. Die Aussagen über Stetigkeit sowie Ableitungen und ähnliches sind komponentenweise zu verstehen und der Lösungsbegriff auch hier auf „fast überall“ zu erweitern.

**SATZ 8.19.** *Sei  $D := I \times K \subset \mathbb{R} \times \mathbb{C}^2$  offen und  $\mathbf{f} : D \rightarrow \mathbb{C}^2$  mit  $\mathbf{f}(z, \mathbf{u}) := [\mathbf{f}_1(z, \mathbf{u}), \mathbf{f}_2(z, \mathbf{u})]^\top$  eine Funktion. Weiterhin sei  $(\xi, \eta_1, \eta_2) \in D$  und*

$$\mathbf{u}' = \mathbf{f}(z, \mathbf{u}), \quad (8.25)$$

*ein System von zwei Differentialgleichungen. Wir nennen eine in  $I$  definierte, differenzierbare Funktion  $\mathbf{u} : I \rightarrow \mathbb{C}^2$  mit  $\mathbf{u}(z) := [u_1(z), u_2(z)]^\top$  eine Lösung des Anfangswertproblems, wenn der Graph  $\Gamma_{\mathbf{u}} := \{(z, \mathbf{r}) \in I \times \mathbb{C}^2 \mid \mathbf{r} = \mathbf{u}(z)\}$  von  $\mathbf{u}$  in  $D$  enthalten ist,  $\mathbf{u}$  für fast alle  $z \in I$  das System (8.25) und die Anfangsbedingung  $\mathbf{u}(\xi) = (\eta_1, \eta_2)$  erfüllt.*

Für jede in  $D$  gelegene Menge  $W \times M$ , wobei  $W \subset \mathbb{R}$  ein abgeschlossenes Intervall und  $M \subset \mathbb{C}^2$  eine abgeschlossene Kugel ist, mögen die folgenden Voraussetzungen gelten:

- 1.) Die Funktion  $\mathbf{f}(z, \mathbf{u}) : (W \times M) \rightarrow \mathbb{C}^2$  sei stetig in  $\mathbf{u} \in M$  für festes  $z \in W$ .
- 2.)  $\mathbf{f}(z, \mathbf{u}) \in L^1(W)$  für festes  $\mathbf{u} \in M$ .
- 3.) Es existiert ein  $l(z) \in L^1(W)$  mit

$$|\mathbf{f}(z, \mathbf{u}_I) - \mathbf{f}(z, \mathbf{u}_{II})| \leq l(z)|\mathbf{u}_I - \mathbf{u}_{II}| \quad \text{in } W. \quad (8.26)$$

Dann hat das Anfangswertproblem eine eindeutige Lösung in  $D$ , die sich nach links und rechts bis zum Rand von  $D$  fortsetzen lässt.

BEWEIS. Der Beweis ergibt sich aus den Sätzen und Bemerkungen in [27], §10. Insbesondere sind hier die Sätze XII und XIV von Bedeutung.  $\square$

### 8.2.5 Laplacetransformation

Die Laplacetransformation wird in Kapitel 5 im Zusammenhang mit der Polbedingung benötigt. Da sie nicht so gebräuchlich wie die Fouriertransformation ist, soll sie an dieser Stelle kurz definiert werden. Für Details sei auf [4] verwiesen.

DEFINITION 8.20 (LAPLACETRANSFORMATION). Sei  $f : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{C}$  und das Integral  $\int_0^\infty e^{-\sigma t} f(t) dt$  konvergiere für alle  $\sigma$  mit  $\operatorname{Re}(\sigma) > \rho$ , dann definiert man

$$\hat{f}(\sigma) := \int_0^\infty e^{-\sigma t} f(t) dt, \quad \operatorname{Re} \sigma > \rho \quad (8.27)$$

als Laplace-Transformierte von  $f$ . Wir schreiben auch  $\hat{f}(\sigma) = \mathcal{L}\{f\}(\sigma)$ .

In unserer Anwendung in Kapitel 5 ist  $\rho = 0$ .

Es ist klar, dass zu jedem  $f$  nur eine Laplacetransformierte  $\hat{f}$  nach Definition 8.20 gehört. Sieht man Originalfunktionen  $f$ , die sich nur auf Nullmengen unterscheiden, (wie üblich) als identisch an, so ist auch die inverse Laplacetransformation eindeutig ([4], Seite 34). Ist unter den Originalfunktionen eine stetige, benutzen wir diese als Repräsentanten. Bei unseren Anwendungen können wir uns auf stetige  $f$  beschränken, da wir die Laplacetransformation

nur auf Funktionen anwenden, die in  $H^1(\Omega)$  ( $\Omega \subset \mathbb{R}$  offen) liegen oder sogar höheren Regularitätsanforderungen genügen. Für stetige  $f$  ist die inverse Laplace-Transformation, die wir entsprechend mit  $\mathcal{L}^{-1}$  bezeichnen, definiert durch:

DEFINITION 8.21 (INVERSE LAPLACETRANSFORMATION).

$$f(t) = \mathcal{L}^{-1}\{\hat{f}\}(t) := \frac{1}{2\pi i} \int_{M-i\infty}^{M+i\infty} e^{t\sigma} \hat{f}(\sigma) d\sigma \quad \text{für } t > 0. \quad (8.28)$$

Details zur Definition und zur Wahl des Integrationsweges finden sich in [4], Satz 17.3.

## 8.2.6 Formeln

1.) Sei  $\mathfrak{U} \subset \mathbb{R}^3$  offen,  $v : \mathfrak{U} \rightarrow \mathbb{R}^3$  ein zweimal stetig partiell differenzierbares Vektorfeld ( $v := [v_x(x, y, z), v_y(x, y, z), v_z(x, y, z)]$ ). Dann gilt:

$$\text{rot}(\text{rot}(v)) = \text{grad}(\text{div}(v)) - [\Delta v_x, \Delta v_y, \Delta v_z]^\top \quad (8.29)$$

Man kann die Formel durch Einsetzen der Definitionen direkt nachrechnen.

2.) Sei  $f : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{C}$  eine stetige Funktion, deren Ableitung  $f'$  eine Laplace-transformierte im obigen Sinne besitzt. Dann besitzt  $f$  eine Laplacetransformierte und es gilt

$$\mathcal{L}\{f'\}(\sigma) = \sigma \mathcal{L}\{f\}(\sigma) - f(0). \quad (8.30)$$

Diese und Regeln für höhere Ableitungen finden sich in [4], Seite 48-51 und können durch partielle Integration gewonnen werden.

# Literaturverzeichnis

- [1] ALT, H. W.: *Funktionalanalysis: Eine anwendungsorientierte Einführung, 2. Aufl.* Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1992.
- [2] BÉRENGER, J.: *A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves.* J. Comput. Phys., 114:185–200, 1994.
- [3] CONWAY, J.R.: *A Course in Functional Analysis, Sec. Ed.* Springer-Verlag New York Inc., 1990.
- [4] DOETSCH, R.: *Einführung in Theorie und Anwendung der Laplace-Transformation.* Birkhäuser Verlag, 1958.
- [5] DUREN, P. L.: *Theory of  $H^p$  spaces.* Academic Press, New York, 1970.
- [6] E. FREITAG, R. BUSAM: *Funktionentheorie, 3., neu bearb. und erw. Auflage.* Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 2000.
- [7] EVANS, L. C.: *Partial Differential Equations.* American Mathematical Society Providence, Rhode Island, 1998.
- [8] F. HILLE, R. S. PHILLIPS: *Functional Analysis and Semi Groups.* American Mathematical Society, Rhode Island, 1957.
- [9] FORSTER, O.: *Analysis 2, 5. durchges. Auflage.* Friedr. Vieweg und Sohn Verlagsgesellschaft mbH, Braunschweig/Wiesbaden, 1999.
- [10] HEUSER, H.: *Funktionalanalysis: Theorie und Anwendung, 3. durchges. und erw. Aufl.* Teubner, Stuttgart, 1992.
- [11] KATO, T.: *Perturbation Theory for Linear Operators.* Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1995. Reprint of the 1980 Edition.
- [12] KRESS, R.: *Linear Integral Equations, Second Edition.* Springer Verlag New York, Inc., 1999.
- [13] M. LASSAS, E. SOMERSALO: *On the existence and convergence of the solution of PML equations.* AMS35J05, 1997.

- 
- [14] M. LENOIR, M. VULLIERME-LEDARD, C. HAZARD: *Variational formulations for the determination of resonant states in scattering problems*. SIAM J. Math. Anal., 23(3):579–608, May 1992.
- [15] M. RENARDY, R. C. ROGERS: *An Introduction to partial differential equations*. Springer-Verlag New York, Inc., 1994.
- [16] M.R. SHENON, K. THYAGARAJAN und A.K. GATAH. *J. Lightwave Tech.*, LT-6:1285, 1988.
- [17] P. KNABNER, L. ANGERMANN: *Numerik partieller Differentialgleichungen. Eine anwendungsorientierte Einführung*. Springer-Verlag, Berlin, 2000.
- [18] PFEIFFER, F.: *X-ray Waveguides*. Diploma Thesis, Ludwig Maximilians - Universität München, Juli 1999.
- [19] R. KRESS, D. COLTON: *Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory*. Springer Verlag, Heidelberg (1992), 1998. 2nd Edition.
- [20] RUDIN, W.: *Reelle und komplexe Analysis*. Oldenbourg Wissenschaftsverlag, München, 1999.
- [21] S. HEIN, T. HOHAGE, W. KOCH: *On resonances in open systems*. J. Fluid Mech., 506:255–284, 2004.
- [22] SCHWAB, C.: *p- and hp-Finite Element Methods (Theory and Applications in Solid and Fluid Mechanics)*. Oxford University Press Inc., New York, 1998.
- [23] STEINBERG, S.: *Meromorphic Families of Compact Operators*. Arch. Rational Mech. Anal., 31:372–380, 1968.
- [24] T. HOHAGE, L. NANNEN: *Hardy Space infinite elements for scattering and resonance problems*. in Vorbereitung, 2007.
- [25] T. HOHAGE, F. SCHMIDT, LIN ZSCHIEDRICH: *Solving time-harmonic scattering problems based on the pole condition I: Theory*. SIAM J. Math. Anal., 35(1):183–210, 2003.
- [26] TAYLOR, M. E.: *Partial differential equations II*. Springer-Verlag New York, Inc., 1996.
- [27] WALTER, W.: *Gewöhnliche Differentialgleichungen, Eine Einführung, 3. korr. Aufl.* Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York Tokyo, 1986.

# Abbildungsverzeichnis

|     |   |    |
|-----|---|----|
| 2.1 | Beispiel für ein Mehrschichtsystem . . . . .  | 6  |
| 2.2 | Skizze eines Röntgenresonators und einer durch das einfallende Feld ausgelösten, in $z$ -Richtung stehenden Welle mit überhöhtem Feld . . . . .                                 | 16 |
| 6.1 | Oben: Plot der elektrischen Feldintensität des direkten Streuproblems, unten: Amplituden, Resonanzfrequenzen und Approximation der Amplitude mit Hilfe der Resonanzen . . . . . | 62 |
| 6.2 | Intensität des elektrischen Feldes für die erste Resonanzfrequenz $\alpha = 0.0965^\circ$ . . . . .   | 63 |
| 6.3 | $y$ -Komponente $E_y$ des elektrischen Gesamtfeldes zu drei verschiedenen Zeitpunkten . . . . .   | 65 |





# Danksagung

Zum Abschluß möchte ich mich bei allen bedanken, die mich während meines Studiums und bei der Anfertigung meiner Diplomarbeit unterstützt haben.

Herrn Professor Thorsten Hohage danke ich dafür, dass er mir im Rahmen einer Anstellung als studentische Hilfskraft die Möglichkeit gegeben hat, in den Themenbereich vorzudringen, in dem die vorliegende Diplomarbeit angesiedelt ist. Die Themenstellung fand ich hochinteressant und möchte außerdem die sehr gute Betreuung hervorheben. Herr Hohage nahm sich immer Zeit für mich und die Besprechungen mit ihm sowie seine nützlichen Anregungen haben entscheidend zum Gelingen meiner Arbeit beigetragen.

Besonders motivierend empfand ich auch die konkrete Anwendung meiner Ergebnisse in der Röntgenphysik. Für die Erläuterungen der physikalischen Seite des Problems danke ich dem sehr engagierten Professor Tim Salditt.

Ich danke meinen Eltern Hans-Dieter und Christa, die mich bei allem unterstützen. Ganz besonders möchte ich Ihnen an dieser Stelle für die Ermöglichung meines Studiums danken, aber auch für alles andere. Natürlich danke ich auch meinem Bruder Sebastian und wünsche ihm ein genauso schönes Studium.

Außerdem danke ich Lothar Nannen für die zahlreichen Diskussionen und guten Erklärungen, besonders im Bereich seiner Doktorarbeit.

Bei Martin Wannert bedanke ich mich für Korrekturhinweise und die hilfreichen Tipps zum Umgang mit LaTeX.

Schließlich danke ich meinen vielen sehr guten Freunden und allen anderen, die mich während meines gesamten Studiums begleitet haben und hier nicht namentlich erwähnt worden sind.