Technische Hochschule Darmstadt
Fachbereich Physik

Technische Hochschule
Darmstadt

ZUR NUMERISCHEN AUFBEREITUNG VON RÖNTGENKLEINWINKELAUFNAHMEN

Diplomarbeit von

Michael Soliman

am 4.10.1998

Ich Komme Wieder.
Arnold Schwarzenegger

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung 1

2 Grundlagen 3

2.1 Die Praxis 3

2.2 Die Gleichung 4

2.3 Die Entschmierungskonzepte 9

3 Das neue Lösungsverfahren 13

3.1 Die Verfahrensidee 13

3.1.1 Über die Entstehung von *„Ghosts“* 13

3.1.2 Die Lösung 15

3.2 Die Ausführung 16

3.2.1 Die Fouriertransformation 17

3.2.2 Die Berechnung des singulären Anteils 23

4 Diskussion und ein numerisches Beispiel 32

5 Zusammenfassung 36

6 Anhang 38

6.1 Literaturverzeichnis 38

6.2 Stichwortverzeichnis 39

1 EINFÜHRUNG

Bei polymeren Werkstoffen tritt häufig das Problem auf, daß die Struktur bereits vorhandener Substanzen untersucht werden muß. Oft wird im Deutschen Kunststoff-Institut (DKI) mit solchen Substanzen gearbeitet, deren Molekül- und Kristallstruktur bekannt ist, die aber darüber hinaus zu Überstrukturen von einigen zehn Nanometern Länge angeordnet sind.

Informationen über diese Längen erhält man mit Hilfe von Röntgenaufnahmen aus der Streutheorie für Festkörper. Man züchtet Kristallite dieser Substanzen, erstellt Röntgenbilder derselben und interpretiert diese mittels des Bragg'schen Gesetzes. Dabei wird häufig mit Röntgenquellen gearbeitet, die Cu-K_α-Linien-Röntgenfilter besitzen und Röntgenlicht der Wellenlänge $\lambda = 1{,}54\text{Å}$ erzeugen. Aus dem Bragg'schen Gesetz folgt daher, daß einige zehn Nanometer lange Überstrukturen sich in Röntgenreflexen zu Ablenkwinkeln $\alpha \in [1{,}5]°$ niederschlagen. Da diese Ablenkwinkel in der Praxis als recht klein gelten, bezeichnet man diese Art der Röntgenstrukturanalyse als *Röntgenkleinwinkelstrukturanalyse* (RKWS).

Die Streutheorie ermöglicht die Auswertung solcher Röntgenstreubilder. Eine der Voraussetzungen der Anwendbarkeit dieser Theorie ist die Verwendung kleinquerschnittiger Röntgenstrahlenbündel. Die Theorie selbst nimmt sie als punktförmig an. Im Idealfall wird diese Voraussetzung durch die Verwendung eines punktförmigen Kollimators in der Röntgenstreueinrichtung erfüllt. Da jedoch ein punktförmiger Kollimator kein Licht durchläßt, braucht man Kollimatoren endlicher Ausdehnung. Das Problem hierbei ist, daß die Verwendung endlich ausgedehnter Kollimatoren das entstehende Bild rein geometrisch verschmiert. Die Kollimatorblende so klein zu wählen, daß die Verschmierung vernachlässigbar wird, erforderte die Verwendung sehr starker Röntgenlichtquellen, beispielsweise eines Synchrotons, die in der Praxis zu kostspielig wären. Da also eine Verschmierung unvermeidbar ist, verwendet man häufig kreisförmige Kollimatorblenden, deren Verschmierungseffekt in vielen Fällen hingenommen werden kann. Ist diese Verschmierung jedoch unakzeptabel, so bleibt nur noch übrig, sie durch eine numerische Auswertung zu entfernen. Hierfür müssen jedoch aus Gründen praktisch verfügbarer Rechenzeitressourcen quasi-eindimensionale Kollimatorblenden benutzt werden. Man wählt sie schlitzförmig und so lang, daß hinreichend viel Intensität hindurchtritt. Der Verschmierungseffekt wird dadurch so stark, daß man ohne eine rechnerische *Entschmierung*, wie bei den kreisförmigen Blenden, gar nicht mehr auskommt.

Die Aufgabe der vorliegenden Arbeit ist es, die gewünschte Aufnahme, die durch Punktkollimation entstanden wäre, aus der vorhandenen Schlitzkollimatoraufnahme zu extrahieren und damit die Verschmierungsartefakte zu entfernen. Das Problem hierbei ist, daß der Verschmierungsprozeß stark „singulär“ ist. „Singulär“ heißt der Verschmierungsprozeß deswegen, weil er sich mit Hilfe einer Integralgleichung formulieren läßt, deren Integrand an einer Stelle, über die sich das auftretende Integral erstreckt, unendlich groß wird, mithin also singulär ist. Lösungen von Integralgleichungen dieses Typs sind oft instabil oder schwach stabil: kleine Änderungen der Meßdaten können große Änderungen der Lösung bewirken. Eine Diskretisierung solcher Integrale, die notwendig ist, um das Integral numerisch zu berechnen, führt nicht unbedingt zu einem Lösungsverfahren, das wünschenswerte Konvergenzeigenschaften bei einer Integrationsgitterverfeinerung zeigt. Im vorliegenden Falle bewirkt die Singularität, daß die Integraldiskretisierung *Unterschwinger* erzeugt, Einbrüche der berechneten Röntgenlichtintensität, die als „negative“ Intensitäten erscheinen können. Derartige, z. T. kräftige, Unterschwinger stören häufig die Standardverfahren. Sie erzeugen nicht nur unerwünschte „negative“ Intensitäten in den entschmierten Aufnahmen, sondern in bestimmten Fällen auch „unscharfe“ Bilder und sogar sogenannte „Ghosts“, also Trugbilder (siehe [1]). Ein daraus resultierender, eventuell auch schwacher, aber scharfer Intensitätseinbruch der Aufnahme kann fälschlicherweise als das mangelnde Auftreten eines bestimmten Abstandes der Überordnungsstruktur, also als strukturelle Information, gedeutet werden.

Das hier vorgestellte Verfahren ist nun speziell auf derartige Fälle zugeschnitten, so daß es Unterschwinger vermeidet und gestochen scharfe Aufnahmen liefert. Es verwendet zur Lösung der Integralgleichung ihre Spektralzerlegung, wobei der Einfluß der Singularität auf die Integralgleichung *analytisch* berechnet wird.

2 GRUNDLAGEN

2.1 Die Praxis

Für die praktische Ausführung der oben angeschnittenen Aufgabe wird in der Regel eine Röntgenkleinwinkelkamera vom Typ “Kratky“ verwendet, die, wie in Abbildung 2.1-1 wiedergegeben, aufgebaut ist. Das Licht der Röntgenquelle fällt hier durch einen Schlitzkollimator, welcher senkrecht auf der Achse steht, entlang derer der Detektor die Strahlung registriert. So wird das Problem vermieden, daß die sehr viel schwächere Intensität der gestreuten Strahlung von der des starken Primärstrahles „überdeckt“ wird. Damit der Detektor nicht vom Primärstrahllicht zum Durchbrennen gebracht wird, ist dieser oberhalb der Schlitzschattenlinie S angebracht.

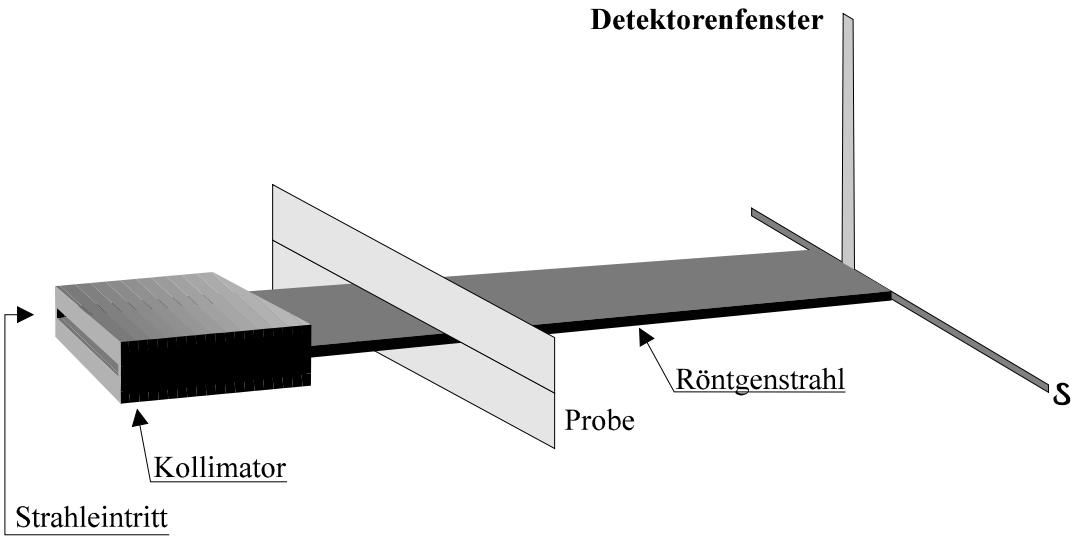

Abbildung 2.1-1: Röntgenkleinwinkelkamera vom Typ “Kratky“ (schematisch).

Das im Detektor registrierte Röntgenbild entsteht nun formal dadurch, daß zunächst jeder durch den Eingangsspalt fallende, punktförmige Röntgenstrahl ein Streubild erzeugt. Alle diese überlagern sich sodann in der Detektorebene (Su-

perpositionsprinzip). Gemessen wird diese Überlagerung selbstverständlich nur da, wo auch der Detektor liegt, d. h., im Detektorenfenster.

Letztlich resultiert aus diesem Superpositionsprinzip auch die Form der Integralgleichung, die nachfolgend beschrieben wird.

2.2 Die Gleichung

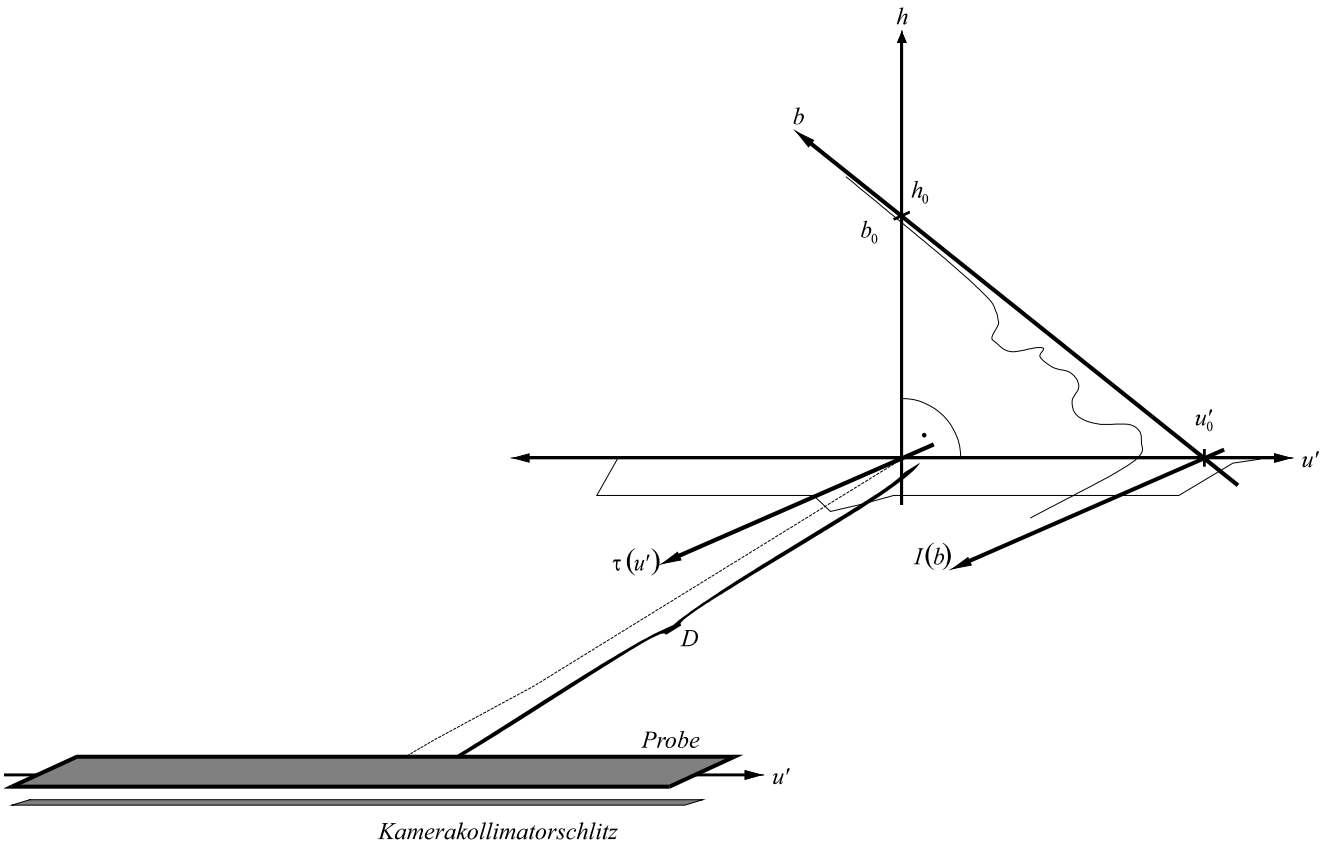

Abbildung 2.2-1: Zur Entstehung der Verschmierung durch die Überlagerung der Streubilder aller Probenpunkte.

Abbildung 2.2-1 verdeutlicht die geometrischen Verhältnisse. Der Einfachheit halber sind der Kollimator aus Abbildung 2.1-1 nur als Rechteck und der Röntgenstrahl gar nicht eingezeichnet. Wie schon in der Einführung erwähnt, soll der Schlitzkollimator als quasi-eindimensional betrachtet werden. Für die Indizierung seiner Punkte ist daher nur eine Koordinate, die hier **u'** genannt wird, nötig. Die verwendeten Größen sind in Tabelle 2-1 angegeben.

Variable	Bedeutung
u’	Ort auf der Probe
τ(u’)	Transmissionskoeffizient des Kollimatorenschlitzes an der Stelle u’.
D	Abstand Probe zu Detektor
h	Höhe des in den Detektor einfallenden Röntgenstrahls
b	Abstand des Einfallspunktes $(\mathbf{u'} = 0, \mathbf{h}_0)$ eines in den Detektor einfallenden, von der Probe ausgehenden, Röntgenstrahls vom Bildpunkt $\mathbf{u'}_0$ des ungehindert auf die u’-h-Ebene auftreffenden Röntgenstrahles.
I(b)	Der Intensitätsverlauf des eben genannten Röntgenstrahles.
$\tilde{I}(.)$	Der in der Detektorebene gemessene Intensitätsverlauf.
B	Breite einer Detektorenzelle

Tabelle 2-1: Definition der physikalischen Größen der Integralgleichung.

Die auf der Höhe **h** registrierte Röntgenstrahlintensität $\tilde{I}(.)$ ist die Überlagerung der gesamten von den Streubildern aller beleuchteten Probenpunkte deponierten Strahlungsleistung $I(h)$ pro Detektorelementarfläche. Dabei sei die Detektorelementarfläche die größte Fläche, auf der der Detektor eintreffende Strahlen gerade nicht mehr unterscheiden kann. Sie und die Dicke des Primärstrahles bestimmen die Auflösung der Apparatur. Da der Primärstrahl als eindimensional betrachtet wird, darf die Höhe der Detektorenzellen höchstens so groß wie die Dicke des Primärstrahles gewählt werden. Anschließend wird auch die Höhe der Detektorenelementarfläche vernachlässigt. Man betrachtet sie, wie den Primärstrahl, als quasi-eindimensional. Bei der Berechnung der in jedem Punkte einer Detektorenelementarfläche deponierten Strahlungsleistung muß dann die Breite **B** der Detektorenzellen betrachtet werden. Gerechtfertigt wird diese Näherung dadurch, daß die Höhe der Detektorenzellen wie auch die technisch bedingte Schwankung $\delta\mathbf{B}$ der Elementarflächenbreite einzelner Zellen in der Praxis sehr klein sind.

Betrachtet man das Ganze differentiell, so entsteht $\tilde{I}(h)$ aus $I(h)$ durch die Integration des von jedem Probenpunkte **u’** emittierten Streubildes über die gesamte Probe. Zu beachten ist aber, daß alle Streubilder, die von Punkten $\mathbf{u'}_0$ bzw. $\mathbf{u'}_1$ ausgehen und höchstens den Abstand **B** voneinander besitzen, in der derselben

Detektorenelementarfläche auf der Höhe **h** registriert werden. Weil die Strukturaufklärungstheorie voraussetzt, daß die verwendeten Proben homogen und überall gleich dick seien, deponieren die Probenpunkte **u'$_0$** und **u'$_1$** pro Elementarfläche dieselbe Leistung $I\left(\sqrt{u^2+h^2}\right)du$. Dabei stammt die Wurzel über die Summe der Quadrate nach Abbildung 2.2-1 aus der Anwendung des Satzes von Pythagoras. Um sowohl der in praxi unvermeidbaren Ungleichmäßigkeit des Kollimatorschlitzes als auch seiner endlichen Ausdehnung Rechnung zu tragen, wichtet man diese Leistung noch mit dessen Transmissionskoeffizient pro Längeneinheit $\tau(u)$. Es wird also die Intensität $I\left(\sqrt{u^2+h^2}\right)\tau(u)du$ in der Höhe **h** deponiert. Wegen der Homogenität und der uniformen Dicke der Probe ist jedoch die Intensitätsverteilung des Streubildes *jedes* Probenpunktes gar nicht von dessen Lage, sondern nur von der vorhandenen Lichtmenge, also $\tau(u)$, *abhängig*. Integriert man nun den Einfluß aller Probenpunkte, deren Bild von der Detektorenelementarfläche in der Höhe **h** auf der Breite **B** registriert wird, so erhält man für jeden Probenpunkt **u'** die Intensität $\int_{u=u'-\frac{B}{2}}^{u'+\frac{B}{2}} I\left(\sqrt{u'^2+h^2}\right)\tau(u)du$. Man beachte hierbei, daß die auftretende Intensität *nicht* explizit von der Integrationsvariablen **u** abhängt. An dieser Stelle sei folgendes angemerkt: Wäre die Probe nicht homogen und uniform dick, so würde dies nicht nur die Streutheorie komplizieren; es ginge auch die für das angestrebte Lösungsverfahren notwendige Form der Integralgleichung verloren, weil die Intensität **I** dann noch explizit von **u'** abhinge ($I = I\left(\sqrt{u'^2+h^2}, \underline{u'}\right)$).

Integriert man diese Intensität über den gesamten für die Probe zulässigen Bereich in **u'**, also von $-\infty$ bis $+\infty$, auf, so entsteht die folgende Integralgleichung:

$$\tilde{I}(h) = \int_{u' \to (-\infty)}^{\infty} \left[\int_{u=u'-\frac{B}{2}}^{u'+\frac{B}{2}} I\left(\sqrt{u'^2 + h^2}\right) \tau(u)\,du \right] du' \quad .$$

(2.2-1)

Gleichung 2.2-1 läßt sich mittels einer Integralvariablentransformation von **u'** auf **b** mit $u' = \sqrt{b^2 - h^2}$ in die gebräuchliche Faltungsform bringen. Teilt man zusätzlich die Integration von $-\infty$ bis $+\infty$ in zwei Teile von 0 bis ∞ auf, so erhält man nur nichtnegative Koordinatenwerte für **b**, **h** und **u'**. Zur Abkürzung sei die von STROBL [11] definierte Funktion

$$V(u') = \int_{u=u'-\frac{Br}{2}}^{u'+\frac{Br}{2}} \tau(u)\,du$$

(2.2-2)

eingeführt. Damit sieht die Umformung wie folgt aus:

$$\begin{aligned}
\tilde{I}(h) &= \int_{u' \to (-\infty)}^{\infty} \left[\int_{u=u'-\frac{B}{2}}^{u'+\frac{B}{2}} I\left(\sqrt{u'^2 + h^2}\right) \tau(u)\,du \right] du' \\
&= \int_{u'=0}^{\infty} I\left(\sqrt{u'^2 + h^2}\right) \left[\int_{u=u'-\frac{B}{2}}^{u'+\frac{B}{2}} \tau(u)\,du + \int_{u=(-u')-\frac{B}{2}}^{(-u')+\frac{B}{2}} \tau(u)\,du \right] du' \\
&= \int_{u'=0}^{\infty} I\left(\sqrt{u'^2 + h^2}\right) \left(V(u') + V(-u')\right) \frac{d\left(u'^2\right)}{2u'} \quad : \text{mit } u' = \sqrt{b^2 - h^2} \\
&= \int_{b=h}^{\infty} I(b) \left(V\left(\sqrt{b^2 - h^2}\right) + V\left(-\sqrt{b^2 - h^2}\right) \right) \frac{(b)\, d\left(b^2 - h^2\right)}{2\sqrt{b^2 - h^2}} \\
&= \int_{b=h}^{\infty} I(b) \frac{\left(V\left(\sqrt{b^2 - h^2}\right) + V\left(-\sqrt{b^2 - h^2}\right) \right)}{2\sqrt{b^2 - h^2}} db^2
\end{aligned}$$

.

2.2-3

Verwendet man zusätzlich noch die von STROBL [11] eingeführte Abkürzung

$$G(x) = \frac{V(\sqrt{x}) + V(-\sqrt{x})}{2\sqrt{x}}$$

(2.2-4)

für $x > 0$ (für $x \leq 0$ sei $G(x) \equiv 0$) und ersetzt die linear auftretenden, nichtnegativen Variablen **b** und **h** durch die Wurzeln ihrer Quadrate, nehmen die Gleichungen 2.2-3 die folgende Form an:

$$\left(\tilde{I} \circ \sqrt{(.)}\right)(h^2) = \int_{b^2=h^2}^{\infty} \left(I \circ \sqrt{(.)}\right)(b^2) G(b^2 - h^2) db^2 \quad .$$

(2.2-5)

Mit den Ersetzungen $\tilde{I} \circ \sqrt{(.)} = S_q(.)$ und $I \circ \sqrt{(.)} = I_q(.)$ gehen sie in ihre endgültige, d.h. für diese Arbeit gebräuchliche, Form über:

$$S_q(h^2) = \int_{b^2=h^2}^{\infty} G(b^2 - h^2) I_q(b^2) db^2 \quad .$$

(2.2-6)

Die Singularität entsteht also dadurch, daß aus dem Ausdruck $I\left(\sqrt{u'^2 + h^2}\right)$ die explizite ***h***- Abhängigkeit durch die Einführung des euklidischen Radius' $b = \sqrt{u'^2 + h^2}$ als Integrationsvariable entfernt wird. Aus der Anwendung der Integraltransformationsformel resultiert dann der singuläre Wurzelterm im Nenner. Er hebt das Integralgewicht der Stellen zu $u' \approx 0$ in den neuen quadratischen Koordinaten auf den Wert, den diese Stellen vor der Transformation hatten. Man nimmt die singuläre Transformation an dieser Stelle aus zwei Gründen in Kauf:

- Erstens wird die gesuchte Intensität $I(.)$ für die streutheoretische Behandlung in linearen Einheiten benötigt. Sie müßte, wenn nicht an dieser Stelle, später aufgeführt werden.
- Zweitens ist die Gleichung 2.2-6 eine lineare Faltungsgleichung. Die Spektralzerlegung dieses Typs von Gleichung ist ihre Fouriertransformierte. Sie ist nu-

merisch mit Hilfe der „Fast-Fouriertransformation“ ([8] und [9], [10]) einfach und *vor allem stabil* zu berechnen.

Das zweite Argument ist für die numerische Behandlung des Problems entscheidend, da es erschöpfende Auskunft über das Stabilitätsverhalten des Lösungsverfahrens gibt: Kleine Spektralwerte des Integraloperators werden bei der Lösung der Gleichung zu großen Spektralwerten des inversen Operators und *verstärken* Meß- und Rundungsfehler. Weil diese Spektralwerte und ihre Eigenvektoren bekannt sind, ist es möglich, diejenigen Spektralanteile, deren Vorhandensein schon aus Rundungs- und Diskretisierungsfehlern resultiert, direkt herauszufiltern. Zu Ehren von MOORE und PENROSE wird der Operator, der die Lösung nach dieser Methode berechnet, auch als die MOORE-PENROSE-Pseudoinverse des Problems bezeichnet [5].

2.3 Die Entschmierungskonzepte

Die Röntgenkleinwinkelstrukturanalyse nimmt seit Ende der 40’er Jahre in der modernen Materialkunde eine zentrale Rolle ein. Seitdem sind schon viele verschiedene Lösungsverfahren vorgeschlagen und zum Teile auch realisiert worden.

Speziell MAZUR [14] und andere haben beschrieben, wie man für die Kameraform paralleler Proben- und Detektorenröhrchen eine analytische Lösung findet. Sie begreifen die entstehende Integralgleichung $\tilde{I}(x) = 2\int_{y=x}^{\infty} \frac{yI(y)W\left(\sqrt{y^2-x^2}\right)dy}{\sqrt{y^2-x^2}}$ als eine Dirichletintegralgleichung. Die Singularität glätten sie durch eine zusätzliche Integration, was möglich ist, weil der Kern $(x,y) \mapsto \frac{yW\left(\sqrt{y^2-x^2}\right)}{\sqrt{y^2-x^2}}$ in y an der Singularitätenstelle integrabel ist. Die entstehende implizite Dirichletintegralgleichung lösen sie dann mittels ihrer Green´schen Funktion. Sie erhalten:

$$\tilde{I}(x) = 2\int_{y=x}^{\infty} \frac{yI(y)W\left(\sqrt{y^2-x^2}\right)dy}{\sqrt{y^2-x^2}}$$

$$\int_{n=0}^{\infty} \tilde{I}\left(\sqrt{v^2+u^2}\right)dv = 2\int_{y=x}^{\infty} yI(y)K\left(\sqrt{y^2-u^2}\right)dy \qquad \textbf{(2.3-7)}$$

Berechnet man $F(.)$ als Lösung der Gleichung

$$F(y)+\frac{2y}{\pi}\int_{z=0}^{y} F(y)K\left(\sqrt{y^2-z^2}\right)dz=1 \quad ,$$

(2.3-8)

wobei die Funktion $K(.)$ definiert ist als

$$K(\nu)=2\int_{x=0}^{1}\frac{W(\nu x)dx}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{1}{\nu}\int_{x=0}^{1}\frac{xW'(\nu x)dx}{\sqrt{1-x^2}} \quad ,$$

(2.3-9)

so kann die Ergebnisfunktion $I(.)$ wie folgt berechnet werden:

$$I(u)=2\int_{y=0}^{\infty}\frac{\tilde{I}\left(\sqrt{y^2+u^2}\right)F(y)dy}{\pi\sqrt{y^2+u^2}} \quad .$$

(2.3-10)

Leider hat dieses Vorgehen den Nachteil, daß man die Integralgleichung 2.3-8 zur Bestimmung der Green´schen Funktion $F(.)$ erst einmal lösen muß. Die Idee selbst, die Green´sche Funktion der Integralgleichung zu errechnen, um das Problem zu lösen, ist schon einmal von STROBL [11] realisiert worden. STROBL verwendete im Prinzip ein Galerkinverfahren. Mit Hilfe des ersten Mittelwertssatzes der Integralrechnung und einer Näherung für den Transmissionskoeffizienten des Kollimatorschlitzes, die analytisches Rechnen gestattet, wertete er es rechnerisch aus. Galerkinverfahren sind eine spezielle Art der Diskretisierung von über Funktionenvektorräumen definierten Funktionalgleichungen. Die Idee ist, die Lösungsfunktion durch eine Linearkombination möglichst geschickt gewählter, linear unabhängiger Ansatzfunktionen zu ersetzen. So erhält man mittels eines

Koeffizientenvergleichs ein Gleichungssystem, das anstelle der ursprünglichen Gleichung gelöst wird, z. B. mit dem Gauß- oder dem Newtonverfahren. Sind die Koeffizienten bekannt, so kennt man auch die Lösung, sofern sie sich als eine solche Linearkombination darstellen ließ. Hierbei ist darauf zu achten, daß die gesuchte Lösung mit einer möglichst kleinen Linearkombination gut approximiert wird, d.h. wenige nicht verschwindende Koeffizienten genügen. Das praktisch auftretende Problem ist es, die Ansatzfunktionen passend zu dem gewünschten Approximationsbegriff zu wählen. So war der Erfolg STROBL's [11] eher mäßig, da in der Praxis oft sehr starke Unterschwinger der Lösungsfunktion auftraten, die sich nur durch unpraktikabel feine Diskretisierungen der Integrale beseitigen lassen hätten. Das Problem rührt daher, daß das gewählte Galerkinverfahren in diesem Falle keine L_∞-, sondern nur eine L_2-Approximation zuließ. Dies bedeutet, daß deplazierte „Haare“ oder auch „Ausläufer“ von kleinem Quadratintegralsgewicht deshalb in der Lösung auftreten können und das auch tun. Tatsächlich wird nicht mehr erreicht. Denn einerseits macht die Singularität eine „glatte“ Approximation unmöglich. Andererseits reflektiert sie die Tatsache, daß das Bild wesentlich von den senkrecht auf den Detektor auftreffenden Mittelstrahlen mitbeeinflußt wird. Sie kann deshalb nicht ohne einen wesentlichen Qualitätsverlust am entschmierten Bilde regularisiert werden. Glättet man sie aber nicht und wählt die Ansatzfunktionen ungeeignet, so passiert Folgendes. Die Integralgleichung geht durch das Galerkinverfahren in ein lineares Gleichungssystem über, dessen Koeffizientenmatrix letztlich invertiert werden muß. Da die Koeffizientenmatrix eine diskretisierte Form der Integralkernfunktion ist, ist ihre Inverse eine diskretisierte Form der Green´schen Funktion des Kernes und als solche meist noch schlechter als die Koeffizientenmatrix selbst konditioniert.

Auch die Singularitätenbeseitigung a la MAZUR [14] täuscht nicht über die genannten schlechten Konditionseigenschaften hinweg, da sie durch eine Integration, also, geometrisch betrachtet, eine „Verteilung“ der Singularität auf breiten Raum erkauft wurde: Für die Beseitigung der Singularität muß dann integriert werden. An den schlechten Stabilitätseigenschaften des Problems ändert das letztlich nichts.

Wird die Integralgleichung in ihrer Faltungsform behandelt, so muß die Singularität voll bei der Lösung berücksichtigt werden.

Daneben hat es z.B. Versuche von FEDOROW u. a. [12] gegeben, die darauf hinausliefen, die obige Verschmierungsintegralgleichung mittels geeigneter Operationen, in diesem Falle Differentiationen, in eine Gleichung der Form $\left(\mathbb{d}\text{-}\underline{\underline{A}}\right)\underline{I} = \underline{I}_0$ zu überführen. Dabei enthält $\underline{\underline{A}}$ im wesentlichen neben der Kolli-

matorenschlitztransmissionsfunktion noch eine Ableitung und ist in einer geeigneten Hilbertnorm kleiner Eins. Die Funktionen $\underline{I}$ und $\underline{I}_0$ sind die gesuchte Punktröntgenaufnahme, beziehungsweise ihr verschmiertes, gemessenes Bild. FEDOROW [12] löst diese Gleichung mit Hilfe einer Neumannschen Reihe: $\underline{I} = \sum_{n=0}^{\infty} \underline{\underline{A}}^n \underline{I}_0$. Der numerische Erfolg ist jedoch auch hier eher mäßig, weil vor allem durch die Diskretisierung und durch Rundungsfehler der diskretisierte Operator $\underline{\underline{A}}$ einige Spektralwerte vom Betrage größer oder gleich Eins enthält. Seine Eigenvektoren bringen dann unerwünschte Artefakte, künstliche Maxima und ebenso die leidigen Unterschwinger in die Lösung ein.

3 DAS NEUE LÖSUNGSVERFAHREN

3.1 Die Verfahrensidee

An dieser Stelle soll die Überlegung stehen, welches Verfahren verwendet wird.

Nach den Überlegungen des Kapitels 2.3 („Die Entschmierungskonzepte“) ist die Idee, die Integralgleichung mittels einer Fouriertransformation in ihre Diagonalform zu überführen, prinzipiell gut, weil sie zeigt, wie stabil das Problem ist und wo die Qualität der Lösung gering sein wird.

Es ist grundsätzlich wichtig, Strukturinformationen zu verwenden, die man über die zu lösende Integralgleichung in Erfahrung bringen kann. Folglich wird die Faltungsform hier wesentlich verwendet werden, zumal sie noch plausibel macht, warum die schon in der Einführung erwähnten „Ghosts“ überhaupt auftreten können.

Zunächst soll das Verständnis für das Auftreten von „Ghosts“ geweckt werden.

3.1.1 Über die Entstehung von *„Ghosts“*

Am leichtesten ist die Entstehung von „Ghosts“ anhand des folgenden aus der Meßtechnik stammenden Bildes einzusehen: Man interpretiere die Integration in Gleichung 2.2-6 als den Effekt eines Verstärkers, $I_q(.)$ als sein Eingangs-, $S_q(.)$ als sein Ausgangssignal und $\mathbf{h^2}$ als Zeit.

Der so interpretierte Verstärker zeigt ein ungewöhnliches Verhalten, da er avancierte Signale produziert: die Antwort auf einen Eingangsimpuls breitet sich in die *Vergangenheit*, d.h. zu kleineren Zeiten hin, aus. Physikalische Verstärker arbeiten natürlich umgekehrt. Das Anlegen von Eingangssignalen hat Auswirkungen auf die *Zukunft* der Ausgangssignale.

Zur Erklärung betrachten wir Abbildung 2.2-1. Zu einem beliebig, aber fest gewählten **b** ($b \geq 0$) wird der Detektor nur auf den Höhen von 0 bis **h** beeinflußt, wenn man **u’** den Integrationsbereich durchlaufen läßt. Fängt man bei $u' = 0$ an, so trifft ein „Bildkreis“ um **u’** mit dem Radius **b** den Detektor auf seiner Peripherie in der Höhe $h = \sqrt{b^2 - u'^2}$, die den Detektor entlang nach unten sinkt, wenn **u’** steigt und für $u' \geq b$ den Detektor gar nicht mehr trifft.

Für ein gegebenes **h** wird demnach die Probe an der Stelle $u' \geq b$ die Messung nicht mehr beeinflussen. Das heißt, daß in der Gleichung 2.2-6 Stellen $b^2 < h^2$

das Ergebnis nicht beeinflussen, weshalb auch die Integrationsgrenzen dort enden. Mit anderen Worten: die Wertebelegung der Streubildintensität $I_q(.)$ beeinflußt das gemessene Bild $S_q(.)$ nur für *kleinere* Argumente. Diskretisiert man das Integral mittels der zusammengesetzten Rechteckregel, so folgt hieraus, daß der Integraloperator und seine Inverse die Form einer rechten oberen Dreiecksmatrix annehmen (Cramer'sche Regel). Dasselbe gilt auch umgekehrt: Wenn das Streubild eines Probenpunktes das gemessene Bild nur für kleinere Abstände beeinflußt, kann eine eventuelle Änderung des Bildes auf der Höhe **h** nicht von dem Einfluß eines Probenpunktes mit einem geringeren Abstande **b** herrühren. Dessen Bildkreis zum Abstande **b** hätte die Höhe **h** gar nicht erreicht.

Im übrigen beeinflußt ein Reflex zum Abstande **b** hauptsächlich das Bild auf der Höhe $h = b$, weil die Singularität ein großes Gewicht besitzt. Deshalb bedingt auch ein Peak von $I_q(.)$ an der Stelle **b** einen Peak von $S_q(.)$ an der Stelle $h = b$ und umgekehrt. Dies wird durch folgende Überlegung plausibel. Verhält sich die Funktion $S_q(.)$ an einer Stelle $\mathbf{b_0^2}$ nicht nur nicht monoton fallend, sondern besitzt sie sogar einen Peak, so wird dieser von der Lösungsfunktion $I_q(.)$ einen sprunghaften Anstieg an eben derselben Stelle verlangen. Dieser fällt allerdings schwächer aus, weil die Singularität ihn ja noch verstärkt. In dem Rechtecksregelbilde äußert sich dieser Sachverhalt darin, daß die Diagonalelemente des diskretisierten Integraloperators große, die seiner inversen Matrix aber kleine Werte besitzen (Cramer'sche Regel). Weil nun einerseits die $S_q(.)$-Werte an der Stelle $\mathbf{b_0^2}$ nur $I_q(.)$-Werte an Stellen $b^2 \le b_0^2$ beeinflussen, andererseits aber die Singularität im allgemeinen nicht sofort, sondern nur wie $O\left(\sqrt{b^2 - h^2}\right)$ ausklingt und daher die Werte zu $b^2 < b_0^2$ mitbeeinflußt werden, muß $I_q(.)$ unterhalb von $\mathbf{b_0^2}$ zunächst *abfallen*. Stimmt nun aufgrund von Diskretisierungs- und Regularisierungsfehlern am Integranden das Gewicht der Singularität in der diskretisierten Integralgleichung nicht, so fällt dieser Abfall zu stark oder zu schwach aus. Es entsteht ein Unterschwinger, wenn das Integralgewicht der Diskretisierung der Singularität zu schwach ausfiel. Eine „auffüllende *Fahne*", ein „Oberschwinger", also das Gegenstück zum Unterschwinger, entsteht, wenn das Integralgewicht der Diskretisierung der Singularität zu stark ausfiel. Allerdings ist dieser *nicht* durch den physikalischen Sachverhalt, sondern durch Diskretisierungs- und Rundungsfehler bestimmt: Ein wirklich vorhandener Peak oder ein echter Abfall wird „verwaschen" und das Bild effektiv wieder verschmiert.

3.1.2 Die Lösung

Es muß ein besonderes Augenmerk sowohl auf die analytische Berechnung des Integralgewichtes zur Singularität als auch auf die Fouriermethode gelegt werden: Letztere ist nämlich unempfindlich gegenüber Singularitäten, da diese in periodische, nichtsinguläre Anteile übersetzt werden. Sie erlaubt also eine Bewertung der Gutartigkeit, also der Stabilität des jeweiligen Entschmierungsproblems, sofern die Berechnung der Fourierintegrale vor allem an den singulären Stellen stimmte. Erstere macht daher Letztere überhaupt erst *möglich*.

Im vorliegenden Fall wissen wir aus den vorangehend beschriebenen Verfahren von MAZUR, FEDOROW und STROBL, daß die Singularität in der Integralgleichung störend wirkt. Die Herleitung in Kapitel 2.2 zeigt, daß die Singularität dem Einflusse des Mittelstrahls zu verdanken ist: In dem Term $I\left(\sqrt{h^2+u'^2}\right)d\left(u'^2\right)$ wächst der u'^2-Term für $u' \approx 0$ nur sehr langsam. Würde er vernachlässigt, so würde daher viel weniger von der Mittelstrahlintensität im Bild deponiert werden als nach Gleichung 2.2-1 erforderlich.

Bei der numerischen Singularitätsentschärfung hilft die Struktur der Integralgleichung. Wie man an Gleichung 2.2-6 erkennt, ist sie fast vom Faltungstyp. Wirklich verstehen und beherrschen kann man eine singuläre Integralgleichung nämlich nur dann, wenn man ihre Spektralzerlegung kennt. Diese stimmt hier, nach der Transformation auf quadratische Koordinaten, wegen der Faltungsform mit ihrer Fouriertransformierten überein.

So läßt sich auch das Problem der Singularitätenbehandlung lösen: Spitzen oder Singularitäten werden durch die Fouriertransformation nämlich in breite, aber nicht singuläre Verläufe umgeformt.

Damit wird die Singularität über den ganzen fouriertransformierten Definitionsbereich der Kernfunktion „verteilt“ und mithin entschärft. Voraussetzung dafür ist, daß die Fouriertransformation selbst exakt ausgeführt wurde und die Fourierintegralsdiskretisierungsfehler im Vergleich zum echten Fourierintegralgewicht der Singularität, also im Rahmen der Rechengenauigkeit, vernachlässigbar sind. Folgende Methodik wird daher angewandt: Man lege die Stützstellen der Integraldiskretisierung so, daß die Singularität genau auf einer von ihnen zu liegen kommt, übergebe dem Fouriertransformationsalgorithmus aber nicht den wahren Wert der Kernfunktion an dieser Stelle, der ja auch unendlich groß wäre. Statt dessen wähle man ihn so, daß die Quadraturformel des Fouriertransformationsalgorithmusses den richtigen Wert der Fouriertransformierten zumindest an der Stelle ausrechnet, an der es für die Entschmierung wesentlich ist. In der Praxis

ist das der Fourierspektralwert zur Raumfrequenz Null, da er den von nullter Ordnung gestreuten Lichtstrahl repräsentiert.

3.2 Die Ausführung

Nach dem oben gesagten muß die Kernfunktion über den Bereich integriert werden, über den sie auch die Fouriertransformation integrieren wird. Da eine Integralsstützstelle genau auf der Singularität, $x = b^2 - h^2 = 0$ in Gleichung 2.2-6, liegt, muß der Fouriertransformationsalgorithmus über den Bereich $b^2 - h^2 \in [0, a]$ integrieren. Dabei sei **a** die erste Stützstelle des Fouriertransformierten.

Folgendes sei vorausgesetzt. Um sowohl die Integration über den Bereich $b^2 - h^2 \in [0, a]$ analytisch ausführen zu können als auch den Bedürfnissen des Experimentators nach der praktisch freien Verfügbarkeit des Transmissionskoeffizienten $\tau(.)$ zu genügen, wird dieser als $C_c^{\,0}(]-\infty),\infty[\to \mathbb{R})$-Spline definiert, d.h. als ein auf ganz $\mathbb{R}$ stetiger Polygonzug mit kompaktem Träger. Der Träger einer Funktion ist der Abschluß derjenigen Menge, auf der sie *nicht* verschwindet. Er wird oft als Support $\hat{=}$ Supp bezeichnet. Diese Vorgehensweise ist sinnvoll, weil der Experimentator den Transmissionskoeffizienten $\tau(.)$ i.A. punktweise über den ganzen Schlitzkollimator ausmißt. Hier muß $\tau(.)$ in so engen Abständen vermessen werden, daß die maximale Abweichung des wirklichen Transmissionskoeffizienten von dem ihn interpolierenden Polygonzug als kleiner Meßfehler vernachlässigt werden kann. Daß dieses überhaupt zulässig ist, liegt daran, daß jeder stetige Verlauf von $\tau(.) \in C_c^{\,0}(]-\infty),\infty[\to \mathbb{R})$ sogar in der $\mathcal{T}_{L_\infty}(\mathbb{R} \to \mathbb{R})$-Topologie, also punktweise gleichmäßig, approximiert werden kann [4]. Sogar wenn $\tau(.)$ nur stückweise stetig wäre, könnte man es punktweise so approximieren, allerdings nicht mehr gleichmäßig.

Das gesuchte Integral

$$\int_{b^2=h^2}^{a^2} G\left(b^2 - h^2\right) d\left(b^2\right) \underset{x=b^2-h^2}{=} \int_{x=0}^{a^2} G(x)\,dx$$

(3.2-1)

läßt sich dann berechnen, indem für die implizit vorkommende Funktion $\tau(.)$ der Polygonzug eingesetzt wird.

Jetzt kann die Fouriertransformation ausgeführt werden, da nun alle vorkommenden Größen analytisch berechnet werden können.

Es wird also zunächst die Fouriertransformation ausgeführt (Kapitel 3.2.1 „Die Fouriertransformation“), um dann zu ihrer numerischen Realisierung überzugehen, für die das Integral aus der Gleichung 3.2-1 gebraucht werden wird. Dies wird dann in Kapitel 3.2.2 „Die Berechnung des singulären Anteils“ behandelt.

3.2.1 Die Fouriertransformation

Es seien die Bezeichnungen aus Kapitel 2.2 „Die Gleichung“ beibehalten. Zusätzlich wird, wie in der Meßtechnik üblich, die Fouriertransformation mit einem kleinen Dach („^“) abgekürzt und ihre Inverse mit einem umgekehrten Dach („$\vee$“).

Des weiteren sei festgestellt, daß mit $\tau(.)$ auch $G(.)$ bezüglich *ganz* $\mathbb{R}$ einen kompakten Träger besitzt, wenn man beider Definitionsbereich in kanonischer Art und Weise auf ganz $\mathbb{R}$ erweitert. Dies ist nötig, weil die Fast-Fouriertransformationsalgorithmen allesamt *symmetrisch um Null plazierte Transformandendefinitionsbereiche* verlangen: Für $x \le 0$ verschwindet $G(x)$ per definitionem, und für $\sqrt{x} \ge \sup_{\forall y \in Supp(\tau(.))} |y| + \frac{B}{2}$ verschwindet $G(x)$, weil der Integrand $\tau(.)$ der in $G(.)$ implizit vorkommenden Funktion $V(.)$ identisch verschwindet.

Mit der Abkürzung:

$$\frac{Bq}{2} := \left(\sup_{\forall y \in Supp(\tau(.))} |y| + \frac{B}{2} \right)^2 \qquad \textbf{(3.2-2)}$$

läßt sich also auch in der Gleichung 2.2-6 das Integral auf endliche Integrationsgrenzen umschreiben:

$$S_q\left(h^2\right) = \int_{b^2-h^2=0}^{\frac{Bq}{2}} G\left(b^2 - h^2\right) I_q\left(b^2\right) db^2 \quad .$$

(3.2-3)

Für die praktische Ausführung wird ein Fast-Fouriertransformationsalgorithmus verwendet, der eine periodische Fortsetzung der zu transformierenden Funktion voraussetzt. Da die Kernfunktion $G(.)$ einen kompakten Träger der Breite $\sqrt{\frac{Bq}{2}}$ besitzt, kann die Wertebelegung der Funktion $I_q(.)$ an einer Stelle ${b_0}^2$ auch nur Auswirkungen auf die Meßfunktion $S_q(.)$ im Bereich $\left[{b_0}^2 - \frac{Bq}{2}, {b_0}^2\right]$ haben (siehe Kapitel 3.1.1). Umgekehrt kann (siehe ebenso Kapitel 3.1.1) für die Werte der Funktion $I_q\Big|_{\left[0,\frac{Bq}{2}\right]}(.)$ nur der Funktionenteil $S_q\Big|_{[0,Bq]}(.)$ verantwortlich sein, da der Einfluß eines $I_q(.)$-Wertes an der Stelle $\frac{Bq}{2}$ nur maximal $\frac{Bq}{2}$ Einheiten weit reicht, so daß nur der Bereich $[0, Bq]$ aus den Meßdaten $S_q(.)$, also $S_q\Big|_{[0,Bq]}(.)$, beeinflussend wirkt. In der bezüglich der Rechteckregel diskretisierten Form entspricht die Integration einer Multiplikation mit einer rechten oberen Dreiecksmatrix. Ist diese für $i + j \geq k \in \mathbb{N}$ nur mit Nullen besetzt, wo i und j die Indices der Matrizenelemente seien, so ist ihre Inverse wieder vom selben Typ, also eine rechte obere Dreiecksmatrix, deren Elemente dann allerdings erst für $i + j \geq 2k$ verschwinden (Cramer'sche Regel).

Damit sind zwei Probleme gelöst:

1. Die Frage der periodischen Fortsetzung der Meßdatenfunktion, sie wird in $\left[\frac{Bq}{2}, Bq\right]$ zu Null und auf $[(-Bq), 0]$ gerade fortgesetzt.

2. Der Abschneidefehler, der durch die Begrenzung der Integrationsgrenzen auf endliche Werte entsteht, er wirkt sich in der Lösungsfunktion $I_q(.)$ nur in dem Teil $I_q\Big|_{\left]\frac{Bq}{2},\infty\right[}(.)$ aus, der ja uninteressant ist, weil hierüber erstens keine Meßinformationen vorliegen und zweitens auch keine Ergebnisse gefragt sind.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß der Fast-Fouriertransformationsalgorithmus nur auf den Bereich $[(-Bq), Bq[$ angewendet zu werden braucht, auf den die in den Algorithmus einfließenden Funktionen in einer völlig natürlichen Art und Weise erweitert werden können.

Mit diesen Prämissen läßt sich jetzt die Lösung der Integralgleichung formulieren. Zunächst seien die lineare Koordinatentransformation α und neue Variablen **t** und **t'** eingeführt

$$\omega = 2\pi / F$$

$$\alpha := \frac{F/2}{Bq}$$

$$t := \alpha\left(h^2\right) := \alpha h^2$$

$$t' := \alpha\left(b^2 - h^2\right) \ ,$$

(3.2-4)

wobei **F** die Anzahl der von dem Fast-Fouriertransformationsalgorithmus verwendeten Stützpunkte ist. Somit liegen die entstehenden Fourierintegrale gleich in einer Form vor, deren Integranden die Fast-Fouriertransformationsalgorithmen direkt verarbeiten können.

Durch die (rein formale) Erweiterung der oberen Integrationsgrenze in der Gleichung 3.2-3 bis **Bq** und die Anwendung der Fouriertransformation lassen sich mit dieser Gleichung die folgenden Transformationschritte ausführen:

$$\begin{aligned} S_q\left(h^2\right) &= \int_{b^2-h^2=0}^{\frac{Bq}{2}} G\left(b^2 - h^2\right) I_q\left(b^2\right) db^2 \\ &= \int_{b^2-h^2=0}^{Bq} G\left(b^2 - h^2\right) I_q\left(b^2\right) db^2 \\ &= \int_{b^2-h^2=(-Bq)}^{Bq} G\left(b^2 - h^2\right) I_q\left(b^2\right) db^2 \end{aligned}$$

Mit Hilfe der linearen Koordinatentransformation α ergibt sich zunächst:

$$S_q\left(\alpha^{-1}(t)\right) = \int_{\alpha^{-1}t'=(-Bq)}^{\alpha^{-1}t'=Bq} G\left(\alpha^{-1}(t')\right) I_q\left(\alpha^{-1}(t+t')\right)\alpha^{-1}\,dt'$$

und nach der Ausführung der Fouriertransformation mit der üblichen Bezeichnung $f(x+"0") := \lim_{a\to 0, a>0} f(x+a)$:

$$\sqrt{F}\int_{t=-\frac{F}{2}}^{\frac{F}{2}-"0"} S_q \circ \alpha^{-1}(t)\, e^{-i n\omega t}\,dt$$

$$= \sqrt{F}\int_{t=-\frac{F}{2}}^{\frac{F}{2}-"0"} \int_{t'=-\frac{F}{2}}^{\frac{F}{2}-"0"} G\circ\alpha^{-1}(t') I_q \circ \alpha^{-1}(t+t') e^{-i n\omega t'} \alpha^{-1} dt' \bullet e^{-i n\omega (t+t')} d_{bez.\,t}(t+t')$$

$$= \frac{\sqrt{F}}{\alpha}\int_{t'=-\frac{F}{2}}^{\frac{F}{2}-"0"} G\circ\alpha^{-1}(t') e^{-i n\omega t'}\,dt' \bullet \int_{t+t'=-\frac{F}{2}}^{\frac{F}{2}-"0"} I_q \circ \alpha^{-1}(t+t') e^{-i n\omega (t+t')} d(t+t')$$

(3.2-5)

Dabei ist der Normierungsfaktor $\sqrt{F}$ aus Bequemlichkeitsgründen eingefügt worden. Weil der verwendete Fast-Fouriertransformationsalgorithmus bei jeder einzelnen Transformation je einen Faktoren $\sqrt{F}$ anbringt, erscheint es nämlich sinnvoll, die Fast-Fouriertransformation wie folgt zu definieren:

$$[.]^{\wedge}(.) = \frac{FFT_{hin}[.](.) + Rest_{hin}}{\sqrt{F}}$$

$$\wedge\ [f(.)]^{\wedge}(n\omega) = \int_{t=\left(-\frac{F}{2}\right)}^{\omega=\frac{F}{2}} f(t)\mathbf{e}^{-i\,n\omega t}\,\frac{dt}{\sqrt{F}} =: F(n\omega)$$

$$\wedge\ FFT_{hin}[f(.)](n\omega) = \sum_{j=\left(-\frac{F}{2}\right)}^{\frac{F}{2}-1} f(j)\mathbf{e}^{-i\,\omega nj} =: F_{FFT}(n\omega)$$

bzw.

$$[.]^{\vee}(.) = \frac{FFT_{rück}[.](.) + Rest_{rück}}{\sqrt{F}}$$

$$\wedge\ [F(.)]^{\vee}(t) = \sum_{n\to(-\infty)}^{\infty} F(n\omega)\mathbf{e}^{i\,n\omega t}F^{-\frac{1}{2}}$$

$$\wedge\ FFT_{rück}[F_{FFT}(.)](n) = \sum_{j=\left(-\frac{F}{2}\right)}^{\frac{F}{2}-1} F_{FFT}(j\omega)\mathbf{e}^{i\,\omega nj}$$

(3.2-6)

Der *Rest* entsteht dabei durch die Anwendung der Quadraturformel des Fast-Fouriertransformationsalgorithmus', bzw. die Beschränkung der Rücktransformationssumme auf **F** Glieder, die quadratisch in F klein werden ([3], bzw. [4] und [5]).

Hiernach nimmt die Integralgleichung die gewünschte Diagonalform an:

$$\left(S_q \circ \alpha^{-1}\right)^{\wedge}(n) = \frac{\sqrt{F}}{\alpha} \cdot \left(G \circ \alpha^{-1}\right)^{\vee}(n) \left(I_q \circ \alpha^{-1}\right)^{\wedge}(n) \quad .$$

(3.2-7)

Beachtenswert ist hierbei die Tatsache, daß nicht die Fourierhintransformierte von $G \circ \alpha^{-1}(.)$, sondern ihre Fourierrücktransformierte berechnet wird. Dies hängt mit der Tatsache zusammen, daß die Integralgleichung avancierte Signale liefert, wenn man die Detektorenhöhe als Zeit interpretiert (siehe Kapitel 3.1.1):

Durch pures Ausrechnen erhält man zunächst:

$$\left(I_q \circ \alpha^{-1}\right)^{\wedge}(n) = \frac{\left(S_q \circ \alpha^{-1}\right)^{\wedge}(n)}{\frac{\sqrt{F}}{\alpha} \cdot \left(G \circ \alpha^{-1}\right)^{\vee}(n)}$$

und nach der Rücktransformation:

$$\begin{aligned} I_q\left(h^2\right) &= I_q \circ \alpha^{-1} \circ \alpha\left(h^2\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{F}} FFT_{rück}\left[\frac{\left(S_q \circ \alpha^{-1}\right)^{\wedge}}{\left(G \circ \alpha^{-1}\right)^{\vee}}(.)\right] \circ \alpha\left(h^2\right)\frac{\alpha}{\sqrt{F}} \\ &= FFT_{rück}\left[\frac{FFT_{hin}\left[S_q \circ \alpha^{-1}\right]}{FFT_{rück}\left[G \circ \alpha^{-1}\right]}(.)\right] \circ \alpha\left(h^2\right)\frac{\alpha}{F} \end{aligned}$$

Das Ergebnis lautet:

$$I_q\left(h^2\right) = FFT_{rück}\left[\frac{FFT_{hin}\left[S_q \circ \alpha^{-1}\right]}{FFT_{rück}\left[G \circ \alpha^{-1}\right]}(.)\right] \circ \alpha\left(h^2\right)\frac{\alpha}{F} \quad .$$

(3.2-8)

3.2.2 Die Berechnung des singulären Anteils

Nun, da klar ist, welche Größen berechnet werden müssen, soll die Singularität betrachtet werden. Aus den Gleichungen 3.2-4 und den Gleichungen 3.2-6 geht hervor, wie die Größen der Gleichung 3.2-8 definiert sind. Was fehlt, ist die schon am Ende des Kapitels 3.1.2 („Die Lösung“) erwähnte Berechnung eines Ersatzwertes von $G \circ \alpha^{-1}(.)$ an der Stelle Null und zwar so, daß die entstehenden Fourierintegralterme richtig berechnet werden. Um das tun zu können, muß bekannt sein, welcher Wert der Fouriertransformationsformel wodurch zu ersetzen ist:

Zunächst entstehen die Fast-Fouriertransformationssummen der Gleichungen 3.2-6 durch die Anwendung der zusammengesetzten Trapezregel auf das Integral:

$$\begin{aligned}
\int_{j=\left(-\frac{F}{2}\right)}^{\frac{F}{2}} G \circ \alpha^{-1}(j)\mathbf{e}^{-i\omega nj}\,dj &= \sum_{j=\left(-\frac{F}{2}\right)}^{\frac{F}{2}-1} \int_{j'=j}^{j+1} G \circ \alpha^{-1}(j')\mathbf{e}^{-i\omega nj'}\,dj' \\
&\approx \sum_{j=\left(-\frac{F}{2}\right)}^{\frac{F}{2}-1} \left(G \circ \alpha^{-1}(j)\mathbf{e}^{-i\omega nj} + G \circ \alpha^{-1}(j+1)\mathbf{e}^{-i\omega n(j+1)}\right)\Big/2 \\
&= \sum_{j=\left(-\frac{F}{2}\right)}^{\frac{F}{2}-1} G \circ \alpha^{-1}(j)\mathbf{e}^{-i\omega nj} \\
&= FFT_{hin}\left[G \circ \alpha^{-1}(.)\right](n\omega)
\end{aligned}$$

(3.2-9)

Dabei resultiert der vorletzte Umformungsschritt aus der Tatsache, daß die Werte von $G \circ \alpha^{-1}(j+1)$ aus einem Summationsschritt und $G \circ \alpha^{-1}(j)$ aus dem nächsten für *alle* Werte von **j** übereinstimmen, auch für $j = \frac{F}{2} - 1$, weil $G \circ \alpha^{-1}(.)$ und $G \circ \alpha^{-1}(.)\mathbf{e}^{-i\omega n\cdot(.)}$ **F** periodisch sind.

Betrachten wir nun noch die beiden an die Null angrenzenden Integralteilstücke:

$$\int_{j'=(-1)}^{1} G\circ\alpha^{-1}(j)\mathbf{e}^{-i\omega nj}dj = \underbrace{\int_{j'=(-1)}^{-"0"} G\circ\alpha^{-1}(j')\mathbf{e}^{-i\omega nj'}dj'}_{(.)\equiv 0} + \int_{j'=+"0"}^{1} G\circ\alpha^{-1}(j')\mathbf{e}^{-i\omega nj'}dj'$$

$$\forall n\in\left[\left(-\tfrac{F}{2}\right),\tfrac{F}{2}\right[\cap\mathbf{N}$$

$$\approx \frac{G\circ\alpha^{-1}(-1)\mathbf{e}^{-i\omega n\cdot(-1)} + G\circ\alpha^{-1}(-"0")\mathbf{e}^{0}}{2} + \frac{G\circ\alpha^{-1}(+"0")\mathbf{e}^{0} + G\circ\alpha^{-1}(1)\mathbf{e}^{-i\omega n\cdot 1}}{2}$$

$$\equiv \frac{G\circ\alpha^{-1}(+"0")\mathbf{e}^{0} + G\circ\alpha^{-1}(1)\mathbf{e}^{-i\omega n\cdot 1}}{2}$$

Der $G\circ\alpha^{-1}(.)$-Term tritt an der Stelle 0 also nur $\frac{1}{2}$ mal in Erscheinung, wegen $G\circ\alpha^{-1}\big|_{\left[\left(-\frac{F}{2}\right),0\right]}(.) = 0(.)$, während dagegen alle anderen $G\circ\alpha^{-1}(.)$-Terme zweimal mit einem Faktoren $\frac{1}{2}$, also voll, in die Fast-Fouriertransformierte eingehen. Aus diesem Grunde wird in der Gleichung 3.2-10 auch der mittlere Summand zu halbieren sein. Die Summanden für $j<0$ werden dabei nur aus formalen Gründen mitgeführt, weil $G\circ\alpha^{-1}(.)$ zwar dort verschwindet, aber der maschinelle Algorithmus für alle Transformationen Transformandengrößen von ein- und demselben Typ verlangt:

$$FFT_{rück}\left[G\circ\alpha^{-1}(.)\right](n\omega) = \sum_{j=\left(-\frac{F}{2}\right)}^{(-1)} G\circ\alpha^{-1}(j)\mathbf{e}^{i\omega nj} + \frac{G\circ\alpha^{-1}(0)}{2} + \sum_{j=1}^{\frac{F}{2}-1} G\circ\alpha^{-1}(j)\mathbf{e}^{i\omega nj}$$

(3.2-10)

Da die Funktion $G\circ\alpha^{-1}(.)$ sich an der Stelle Null wie $O\left(\frac{1}{\sqrt{.}}\right)$ und ihre Fouriertransformierte analog verhält, wird die Frequenz $\omega n = 0$ also mit dem höchsten

Integralgewicht in den Algorithmus eingehen. Deshalb soll das Fourierintegral zur Frequenz $\omega n = 0$ exakt approximiert werden:

$$\frac{G\circ\alpha^{-1}(0)}{2}+\frac{G\circ\alpha^{-1}(1)}{2}:=\int_{j=0}^{1} G\circ\alpha^{-1}(j)dj \ .$$

Division dieser Gleichung durch α erspart bei der Berechnung des Integrals die Mitführung der Koordinatentransformation mit α für den Polygonzug des Transmissionskoeffizienten $\tau(.)$. An dem Zielwert $G\circ\alpha^{-1}(0)$ ändert sich dabei nichts, da $G\circ\alpha^{-1}(0)=G(0)$.

Letztlich ergibt sich dadurch:

$$G(0)=2\alpha\int_{x^2=0}^{\frac{1}{\alpha}} G(x^2)d(x^2)-G(\alpha^{-1}) \ .$$

(3.2-11)

Lediglich die Berechnung des Integrals aus der Gleichung 3.2-11 fehlt, um durch Rückeinsetzung aller berechneten Größen den Algorithmus vollständig zu bestimmen. Um dies zu leisten, sollen hier einige Hilfsgrößen definiert werden. Zuerst wird eine Darstellung des interpolierenden Splines für den Transmissionskoeffizient $\tau(.)$ gegeben. Dafür seien seine M+1 Stützpunkte wie folgt bezeichnet:

$$\left((y_\ell, I_\ell)\right)_{\forall\ell=0}^{M} \wedge y_{\ell+1}-y_\ell :> 0 \ \forall\, 0\le\ell\le M \ .$$

Es sei weiterhin die Indikatorfunktion χ verwendet:

$$\chi_B(x):=\begin{Bmatrix} 0 \ \textit{für}\ x\notin B \\ 1 \ \textit{für}\ x\in B \end{Bmatrix},$$

womit $\tau(.)$ die folgende Form annimmt:

$$\tau(k) = \sum_{\ell=0}^{M-1} \left[I_\ell + \frac{(k - y_\ell)\Delta I_\ell}{\Delta y_\ell} \right] \cdot \chi_{[y_\ell, y_{\ell+1}[}(k) \quad .$$

(3.2-12)

Soll ein derart unübersichtlicher Ausdruck analytisch integriert werden, so bleibt nichts anderes übrig, als von *Knickstelle* zu Knickstelle der Funktion $\tau(.)$ zu integrieren. Dazu definiert man am besten eine Funktion, die hier „Spline_Intervall“, abgekürzt „Spl_I“, genannt wird. Sie soll die Nummer des Definitionsteilintervalls der Funktion $\tau(.)$, in dem man sich gerade befindet, zurückliefern. Dazu soll sie so definiert werden, daß sie die Nummer ℓ.ten des linksabgeschlossenen und rechtsoffenen Teilintervalls $[y_\ell, y_{\ell+1}[$ liefert, in dem der Wert x liege. Zusätzlich soll sie noch eine Hilfsvariable

$$T := \left\{ \begin{array}{ll} (-1) & \textit{für } x < y_0 \\ 0 & \textit{für } x \in [y_0, y_M[\\ 1 & \textit{für } x \geq y_M \end{array} \right\}$$

liefern, an der man erkennen kann, ob man sich überhaupt noch im Träger von $\tau(.)$ befindet.

Damit ist es möglich, bei jedem Schritt der Rechnung einfache analytische Integrationen auszuführen: Immer dann, wenn die Integrationsgrenzen der in der Definition der Funktion $G(.)$ (siehe Gleichung 2.2-4) vorkommenden Integrale eine der Stützstellen y_ℓ überschreiten, wird ein neuer Integrationseinzelschritt gestartet. Diese Einzelschritte seien im Folgenden mit dem Index **n** durchnumeriert. Außerdem kann durch eine kleine Rechnung dafür gesorgt werden, daß die Summe der Funktionen $V(.)$ in der $G(.)$-Definition verschwindet, was den Programmierarbeitsaufwand halbiert. Eigentlich müßte nämlich das Integral:

$$\int_{x^2=0}^{\frac{1}{\alpha}} G(x^2)\,d(x^2) = \int_{x^2=0}^{\frac{1}{\alpha}} \frac{V\left(\sqrt{x^2}\right) + V\left(-\sqrt{x^2}\right)}{2\sqrt{x^2}}\,d(x^2)$$

berechnet werden, aber mit der Ersetzung $z = \sqrt{x^2}$ ergibt sich nun die folgende Vereinfachung:

$$\int_{x^2=0}^{\frac{1}{\alpha}} G\left(x^2\right)d\left(x^2\right) = \int_{z=0}^{\sqrt{\frac{1}{\alpha}}} \frac{V(z)+V(-z)}{2z} 2z\,dz$$

$$= \int_{z=0}^{\sqrt{\frac{1}{\alpha}}} \left(V(z)+V(-z)\right)dz$$

$$= \int_{z=0}^{\sqrt{\frac{1}{\alpha}}} V(z)dz + \int_{(-z)=0}^{(-z)=\left(-\sqrt{\frac{1}{\alpha}}\right)} V(-z)(-1)d(-z)$$

$$= \int_{z=0}^{\sqrt{\frac{1}{\alpha}}} V(z)dz + \int_{z=\left(-\sqrt{\frac{1}{\alpha}}\right)}^{z=0} V(z)dz$$

$$= \int_{z=\left(-\sqrt{\frac{1}{\alpha}}\right)}^{\sqrt{\frac{1}{\alpha}}} V(z)dz$$

(3.2-13)

Der untere Ausdruck in der Gleichung 3.2-13 enthält weniger Terme als der obere, weshalb er programmtechnisch einfacher zu implementieren ist.

Damit können die nachstehenden Hilfsgrößen definiert und die Rechnung vollendet werden:

$$\alpha := \frac{F/2}{Bq}$$

$$a^2 := \frac{1}{\alpha}$$

$$x_0 := \max\left\{(-a), \min\left\{y_t - \frac{Br}{2}, y_0\right\}\right\}$$

$$j := Spl_I\left(x_n\right)$$

$$j - m := \mathrm{Spl_I}\left(x_n - \tfrac{Br}{2}\right)$$

$$j + m_1 := \mathrm{Spl_I}\left(x_n + \tfrac{Br}{2}\right)$$

$$\Delta y_l := y_{l+1} - y_l$$

$$\Delta I_l := I_{l+1} - I_l$$

$$\mu I_l := \frac{I_{l+1} + I_l}{2}$$

$$T_1 := \begin{cases} 0 \ \textit{für} \ x_n - \tfrac{Br}{2} \in [y_0, y_M[\\ 1 \ \textit{für} \ x_n - \tfrac{Br}{2} \geq y_M \end{cases}$$

$$T_2 := \begin{cases} 0 \ \textit{für} \ x_n + \tfrac{Br}{2} \in [y_0, y_M[\\ 1 \ \textit{für} \ x_n + \tfrac{Br}{2} \geq y_M \end{cases}$$

$$x_{n+1} := x_n + \Delta x_n : \begin{array}{l} \text{Wandert von Knickstelle} \\ \text{zu Knickstelle.} \end{array}$$

$$\wedge \ \Delta x_n := \min\left\{y_{j-m+1} - x_n + \tfrac{Br}{2}, y_{j+1} - x_n, y_{j+m_1+1} - x_n - \tfrac{Br}{2}\right\}$$

$$I := \int_{x^2=0}^{\frac{1}{\alpha}} G\left(x^2\right) d\left(x^2\right)$$

(3.2-14)

Die in den Gleichungen 3.2-14 vorkommenden Größen x_0 , j, m, m_1 , Treffer_1 und Treffer_2 sind eigentlich allesamt von **n** abhängig, was aber der Übersichtlichkeit halber nicht explicite aufgeschrieben wurde. x_0 ist so gewählt, daß die Ober-

grenze des ersten Teilintervallintegrals höchstens bis zu der ersten Knickstelle der Funktion $\tau(.)$ reicht. Die Größen x_n sind einfach die Mitten der Integrationsintervalle, die in der Definition der in $G(.)$ vorkommenden $V(.)$-Funktionen auftreten. Die $j_{'s}$ sind die Nummern ihrer linksabgeschlossenen, rechtsoffenen Teilintervalle $[y_l, y_{l+1}[$. Die Größen $j-m$ und $j+m_1$ sind so gewählt, daß in dem in der Funktion $V(.)$ vorkommenden Integral über die Intervalle $j-m$ bis $j+m_1-1$ vollständig integriert wird. Es tritt also keine explizite Abhängigkeit von x_n , d.h. von den unteren bzw. den oberen Integrationsgrenzen, mehr auf:

$j-m$ ist also die Nummer der ersten Knickstelle von $\tau(.)$ oberhalb der Untergrenze des Teilintervallintegrales und

$j+m_1$ ist die Nummer der ersten Knickstelle von $\tau(.)$ unterhalb der Obergrenze des Teilintervallintegrals.

Bezeichnet nun N die Anzahl der für die gesamte Integration notwendigen Einzelschritte, so sieht die Rechnung wie folgt aus:

$$
\begin{aligned}
I &= \int_{z=(-a)}^{a} V(z)\,dz \\
&= \sum_{n=0}^{N} \int_{z=x_n}^{x_{n+1}} V(z)\,dz \\
&= \sum_{n=0}^{N} \int_{z=x_n}^{x_{n+1}} \int_{k=z-\frac{B}{2}}^{z+\frac{B}{2}} \tau(k)\,dk\,dz \\
&= \sum_{n=0}^{N} \int_{z=x_n}^{x_{n+1}} \left[\int_{k=z-\frac{B}{2}}^{y_{j-m+1}} \tau(k)\,dk + \int_{k=y_{j-m+1}}^{y_{j+m_1}} \tau(k)\,dk + \int_{k=y_{j+m_1}}^{z+\frac{B}{2}} \tau(k)\,dk \right] dz
\end{aligned}
$$

$$= \sum_{n=0}^{N} \int_{z=x_n}^{x_{n+1}} \left[\begin{array}{c} \int_{k=z-\frac{B}{2}}^{y_{j-m+1}} \left(\frac{\left(k-y_{j-m}\right)\Delta I_{j-m}}{\Delta y_{j-m}} + I_{j-m} \right) dk \\ + \sum_{l=j-m+1}^{j+m_1+1} \Delta y_l \cdot \mu I_l \\ + \int_{k=y_{j+m_1}}^{z+\frac{B}{2}} \left(\frac{\left(k-y_{j+m_1}\right)\Delta I_{j+m_1}}{\Delta y_{j+m_1}} + I_{j+m_1} \right) dk \end{array} \right] dz$$

Weil die in der Summe über ***n*** in den Gleichungen 3.2-15 vorkommenden Zahlen Integrale über meist kurze Intervalle sind, sind sie ziemlich klein, d. h. im Vergleich zum Endergebnis nicht wesentlich größer als die Maschinengenauigkeit. In der Praxis ist es aber leider nicht möglich, brauchbare, aber lange Summen von Differenzen fast gleich großer Zahlen zu bilden: Tut man dieses, so bleiben bei jeder Differenzenbildung fast nur Rundungsfehler übrig, die sich in der Summe über ***n*** praktisch immer *drastisch* anhäufen. Das liegt daran, daß die Differenzenbildung aufrauhend wirkt, weshalb auch numerische Differentiationen immer so heikel sind. Man *muß* also unbedingt die negativen und die positiven Glieder getrennt sammeln, d.h., auf je eine Puffervariable aufaddieren und erst am *Schluß* voneinander subtrahieren. Damit der Programmierer entscheiden kann, welche Größen denn jetzt welches Vorzeichen haben, wurden die Vorzeichen der Terme markiert. Da die $\Delta y_{(.)}$-Größen per definitionem alle positiv sind, muß das Vorzeichen der $\Delta I_{(.)}$-Größen in jedem Falle einzeln abgefragt werden.

$$I = \sum_{n=0}^{N} \int_{z=x_n}^{x_{n+1}} \left[\begin{array}{c} \mu I_{j-m} \Delta y_{j-m} \cdot \left(1-T_1\right) + \sum_{l=j-m+1}^{j+m_1-1} \Delta y_l \cdot \mu I_l \\ - \left(z + \frac{Br}{2} + y_{j-m}\right) \left[\frac{\Delta I_{j-m}\left(z+\frac{Br}{2}+y_{j-m}\right)}{2\Delta y_{j-m}} - I_{j-m} \right] \left(1-T_1\right) \\ + \left(\frac{Br}{2} - z - y_{j+m_1}\right) \left[\frac{\Delta I_{j+m_1}\left(\frac{Br}{2}-z-y_{j+m_1}\right)}{2\Delta y_{j+m_1}} + I_{j+m_1} \right] \left(1-T_2\right) \end{array} \right] dz$$

$$= \left[\sum_{n=0}^{N} \Delta x_n \sum_{\ell=j-m}^{j+m_1-1} \Delta y_\ell \cdot \mu I_\ell - \left[\begin{array}{l} \left(z + \frac{Br}{2} + y_{j-m}\right)^2 \left[\frac{\Delta I_{j-m} \overbrace{\left(z+\frac{Br}{2}+y_{j-m}\right)\cdot(-1)}^{(.)>0}}{(-6)\Delta y_{j-m}} - \frac{I_{j-m}}{2} \right] \cdot \left(1 - T_1\right) \\ + \left(\frac{Br}{2} - z - y_{j+m_1}\right)^2 \left[\frac{\Delta I_{j+m_1} \overbrace{\left(\frac{Br}{2}-z-y_{j+m_1}\right)}^{(.)>0}}{6\Delta y_{j+m_1}} + \frac{I_{j+m_1}}{2} \right] \cdot \left(1 - T_2\right) \end{array} \right]_{z=x_n}^{x_{n+1}} \right]$$

(3.2-15)

Mit den Gleichungen 3.2-15 ist das Problem endgültig gelöst. Sie brauchen im Prinzip nur noch programmtechnisch implementiert zu werden, was im Rahmen dieser Diplomarbeit geschehen ist. Über Beispielsrechnungen wird nachfolgend berichtet.

4 DISKUSSION UND EIN NUMERISCHES BEISPIEL

An dieser Stelle werden die Auswirkungen des Wechsels von einem der üblichen Verfahren, wie z.B. dem von STROBL [11], auf das in Kapitel 2.1 vorgestellte betrachtet.

In Kapitel 3.1.1 wurde gezeigt, daß ein Verfahren *Unterschwinger* und *Fahnen* in den entschmierten Bildern erzeugt, wenn es:

- die Singularität nicht angemessen berücksichtigt
- oder in Koordinaten rechnet, die stark von den Eigenvektorkoordinaten des Integraloperators, den harmonischen Funktionen der Fouriertransformation, abweichen.

Betrachten wir nun den Effekt der in Kapitel 2.1 erläuterten Maßnahmen exemplarisch an einer am DKI untersuchten Probe. Für die folgende Aufnahme wurde in das in Abbildung 2.1-1 eingezeichnete Detektorenfenster ein ortsempfindliches Zählrohr eingesetzt. Alle genannten Intensitäten sind daher in Einheiten von Zählereignissen zu verstehen. Anstelle der Höhenkoordinate einer Detektorenzelle wurde der Streuvektor $s = 2\lambda^{-1}\sin(\vartheta_{Bragg})$ (in μm^{-1}) mit $\vartheta_{Bragg} = \frac{1}{2}\arctan(h/D)$ verwendet. Dabei ist $\lambda = 1{,}54\text{Å}$ die Wellenlänge des verwendeten Röntgenlichtes mit **h**, **D** wie in Tabelle 2-1 beschrieben. Der Übersicht halber wurde in allen Diagrammen die Intensität logarithmisch aufgetragen.

Betrachten wir nun den bei $s = 5{,}43\mu m^{-1}$ auftretenden „Reflex“ in der Intensität $I_{Messung}$ (Abbildung 4-1), unter der Annahme, daß er nicht durch Rauschen vorgetäuscht wurde. Wir erkennen, daß er aus einer Landschaft fast konstanter Intensitäten deutlich herausragt. An dieser Stelle befindet sich (siehe Abbildung 4-2) dafür in der nach STROBL [11] entschmierten Intensitätskurve ein *Minimum*, das physikalisch natürlich nicht „dahingehört“ [2]. Das Maximum des Reflexes wurde etwas weiter nach $s = 5{,}65\mu m^{-1}$ verschoben, was natürlich nicht passieren dürfte: in Kapitel 3.1.1 wurde nämlich gezeigt, daß die entschmierte Intensitätsfunktion, also auch I_{STROBL}, ihr Maximum genau da besitzen muß, wo auch $I_{Messung}$ ihres besitzt. Der *Versatz* ist in Abbildung 4-4, wo $I_{Messung}$ direkt neben

I_{STROBL} aufgetragen ist, deutlich zu sehen. Am deutlichsten sieht man den Effekt, wenn man in Abbildung 4-4 alle drei Intensitäten zusammen aufgetragen hat.

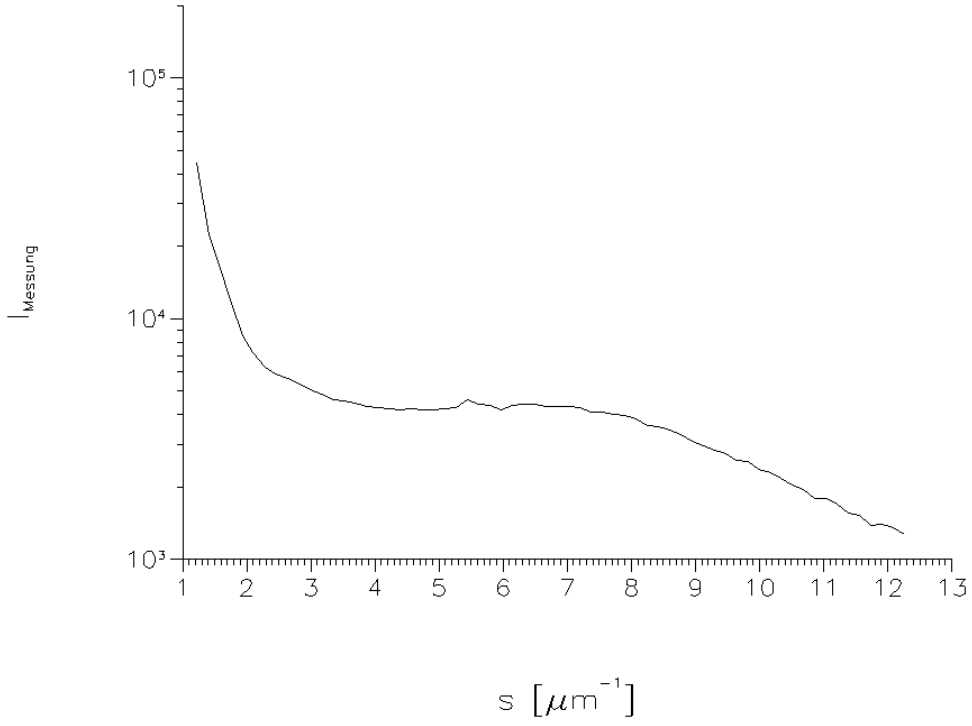

Abbildung 4-1: Die gemessene Streukurve.

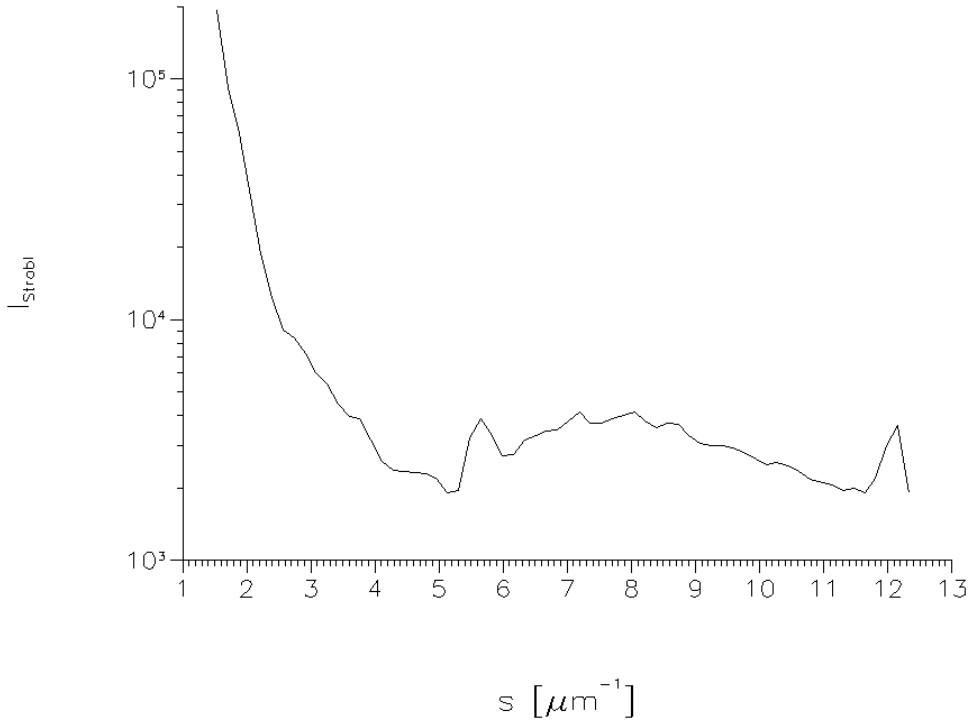

Abbildung 4-2: Die nach STROBL [11] entschmierte Streukurve.

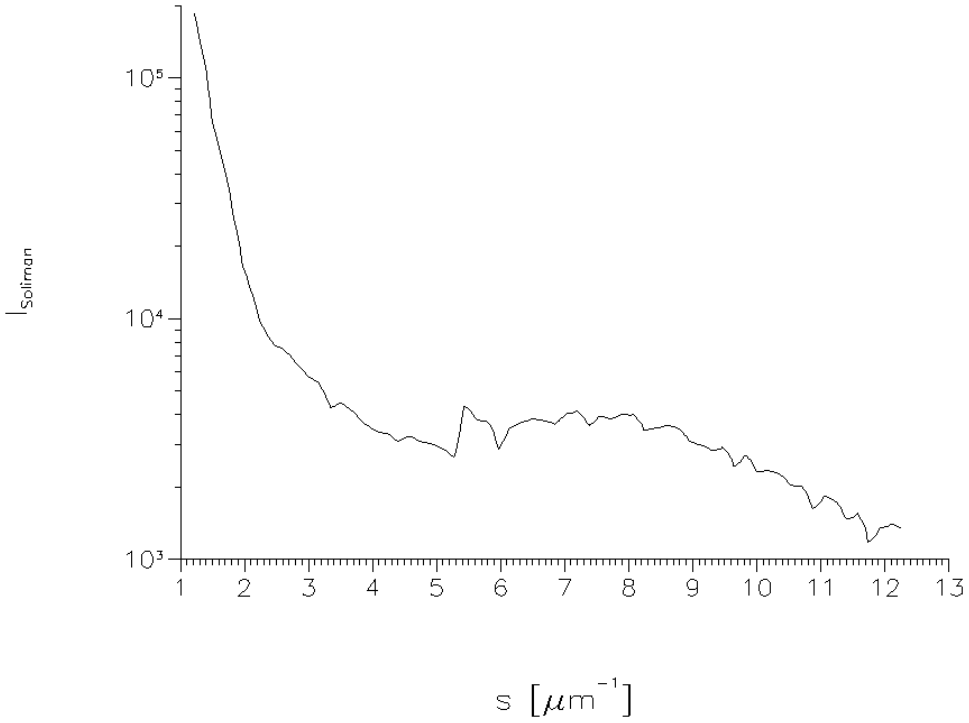

Abbildung 4-3: Die nach dem hier entwickelten Verfahren entschmierte Aufnahme.

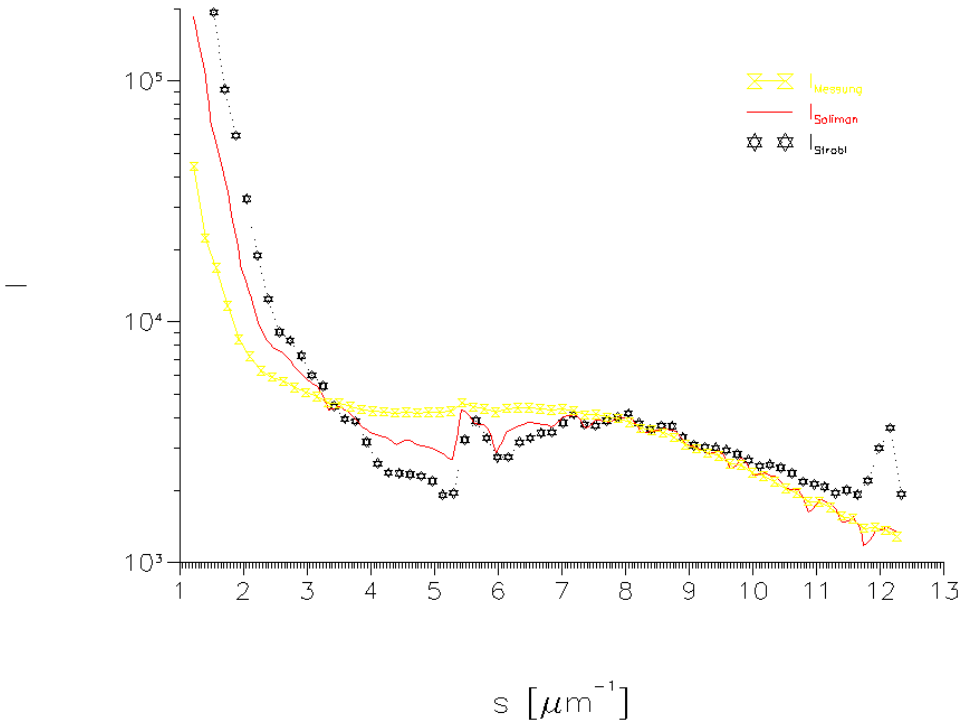

Abbildung 4-4: Alle drei Intensitätsverläufe übereinander aufgetragen.

Darüber hinaus ist an dieser Stelle als Folge des Peakversatzes ein, wenn auch schwacher, Ghost zu sehen. Denn dadurch, daß der Peak nach rechts gewandert ist, ist I_{STROBL} eine Wendestelle an seine Stelle getreten. Des sich direkt links anschließende Minimum ist ein *Unterschwinger* und erscheint insbesondere durch seine Lage als ein „Schatten“ direkt neben einem Reflex. Eventuell in diesem Bereiche vorhandene strukturelle Feinheiten des „wahren“ Intensitätsverlaufes, der durch Punktkollimation enstanden wäre, werden dadurch überdeckt und verwischt.

5 ZUSAMMENFASSUNG

Das Hauptziel der Beseitigung von „Ghosts“ ist also erreicht worden, was speziell für die Untersuchung der Morphologie von Polymeren wichtig ist:

- Einerseits treten dort oft die in der Einführung erwähnten Überstrukturen auf.
- Andererseits treten oft gerade bei Polymeren hohe Anzahlen an Molekülgruppen auf, die in vielfältiger Weise inter- und intramolekular wechselwirken können (van der Waals-Kräfte, Volumensausschlußkräfte, spezifische Wechselwirkungen). Die topologischen Effekte dieser Wechselwirkungen sind wegen oft komplizierter sterischer „Verwicklungen“ derselben selten zu durchschauen. Man kann sich wegen der Komplexität solcher Systeme oft auch kaum eine Plausibilitätsvorstellung machen, welche charakteristischen Überordnungabstände in einer Probe auftreten können.

Steht in einer solchen Situation keine verläßliche Entschmierungsmethode zur Verfügung und erscheint eine gemessene, also noch verschmierte, Röntgenaufnahme auch noch reliefarm, so können sich durchaus Fehler in die Schlußfolgerung einschleichen[1].

Auch in der Medizin wären Röntgenaufnahmen, die frei von „Ghosts“ sind, sehr erwünscht. Zwar werden dort keine Kleinwinkelaufnahmen gemacht, aber in der Computertomographie und bei Ultraschalluntersuchungen sind „Ghosts“ durchaus bekannt.

Soviel sei zu dem praktischen Nutzen gesagt. Eine kleine Warnung soll jedoch hier noch ausgesprochen werden. Bei der gesamten Überlegung, welches Verfahren zu verwenden sei und wie die Integralgleichung überhaupt zustande kommt, wurde die Voraussetzung der Homogenität der Probe gemacht (Kapitel 2.2 bzw. Kapitel 2.3). Ist diese entscheidende Voraussetzung verletzt, so ist das in dieser Arbeit entwickelte Verfahren nicht angezeigt. Sinnvoll verwendbar ist dann nur

[1] Am Beispiel des in der Biochemie wichtigen Patchouli-Alkohols sieht man deutlich, wie leicht so etwas passiert (auch, wenn er jetzt nicht unbedingt etwas mit der Röntgenkleinwinkelstrukturanalyse zu tun haben mag). Jahrelang (jahrzehntelang ?) dachte man, die Strukturformel des Patchouli-Alkohols zu kennen, bis irgendwann jemand, von der vermeintlichen Kenntnis einer seiner Struktureigenschaften Gebrauch machte, ein unschlüssiges Ergebnis erhielt, in seiner Not schließlich die Struktur des Patchouli-Alkohols selber überprüfte und etwas ganz anderes herausbekam. Zu Beginn meiner eigenen Studienzeit, im Jahre 1988, schlug diese Nachricht in den einschlägigen und den Fachschaftszeitschriften gerade, wie es in einem ungewöhnlich spektakulären Ton hieß, „wie eine Bombe“ ein.

noch die, dann allerdings durch den Gebrauch ortsabhängiger Transmissionskoeffizienten (wegen der variablen Probendicken und Probendichten) verkomplizierte, analytische Berechnung des Integrales über die Singularität. Die Faltungsform geht dann aber wegen der expliziten **u'**-Abhängigkeit der Funktion $I_q(.)$ in der Gleichung 2.2-6 *verloren* und damit auch die explizite Kenntnis über die Spektralzerlegung der Integralgleichung.

Bei aller Vorsicht kann dieses Verfahren jedoch auch noch weiterverwendet werden, wenn ein in eigentlichen Sinne zweidimensionaler Kollimator verwendet wird, um beispielsweise der Tatsache Rechnung zu tragen, daß der Kollimatorenschlitz in Wirklichkeit kein eindimensionales, sondern ein zweidimensionales Gebilde ist.

6 ANHANG

6.1 Literaturverzeichnis

[1] Persönliche Referenz nach einem Gespräche mit Herrn MEISTER, Prof. Dr. E. (Technische Hochschule Darmstadt, Fachbereich Mathematik).

[2] Persönliche Referenz nach einem Gespräche mit Herrn JUNKER, Michael (Deutsches Kunststoff-Institut, Darmstadt).

[3] Scriptum zu Analysis I - III, © 1988-1990.

[4] Scriptum zur Numerischen Mathematik Teil I Analysis, © SPELLUCCI 1989.

[5] Scriptum zur Numerischen Mathematik Teil II Lineare Algebra, © SPELLUCCI 1989.

[6] KOPP, Michael; Diplomarbeit: „Morphologie und Grenzflächen; Röntgenstreuexperimente an Polyätherketonlegierungen, (Deutsches Kunststoff-Institut, Darmstadt).

[7] LAUGWITZ, Detlef; „Zahlen und Kontinuum“, „Einführung in die Infinitesimalmathematik“ – Mannheim; Wien; Zürich: Bibliographisches Institut, 1986, ISBN 3-411-03128-X.

[8] BABOVSKY et. al.; Mathematische Methoden in der Systemtheorie – Stuttgart: Teubner, 1987, ISBN 3-519-02618-X.

[9] BRONSTEIN, I. N.; Taschenbuch der Mathematik, 23. Auflage; Leipzig: BSG Teubner, 1987. ISBN 3-322-00259-4.

[10] BRONSTEIN, I. N.; Taschenbuch der Mathematik, Ergänzende Kapitel, 23. Auflage; Frankfurt: Thun, 1987. ISBN 3-8714-493-6.

[11] STROBL, G. R.; „A new method for evaluating slit-smeared small angle x-ray scattering data“, aus Acta crystallographica, Vol. A26 Part 3 May 1970.

[12] FEDOROW, B. A., Alexandrewa, N. A., Wolokowa, L.A., Woronin, L. A.; „Calculation of collimation distortion in small angle x-Ray scattering“, soviet physics – crystallography (1968).

[13] STOKES, A. R. (1948), „A numerical Fourieranalysis method for the correction of widths and shapes of lines on x-Ray power photographs“, Proc. Phys. Soc. London 61,38 (1968).

[14] MAZUR, J., WIMS, A. M., J. Research of the National Bureau of Standards- A. Physics and Chemistry, Vol. 70A, No. 6, November - December 1966.

[15] PRÖSSDORF, S., SILBERMANN, B., Numerical Analysis for Integral- and related Equations, Reihe: „Operator Theory: Advances and Applications“, Band 52, Birkhäuser Basel, 1991.