

Interner Bericht
DESY F41-73/10
Dezember 1973

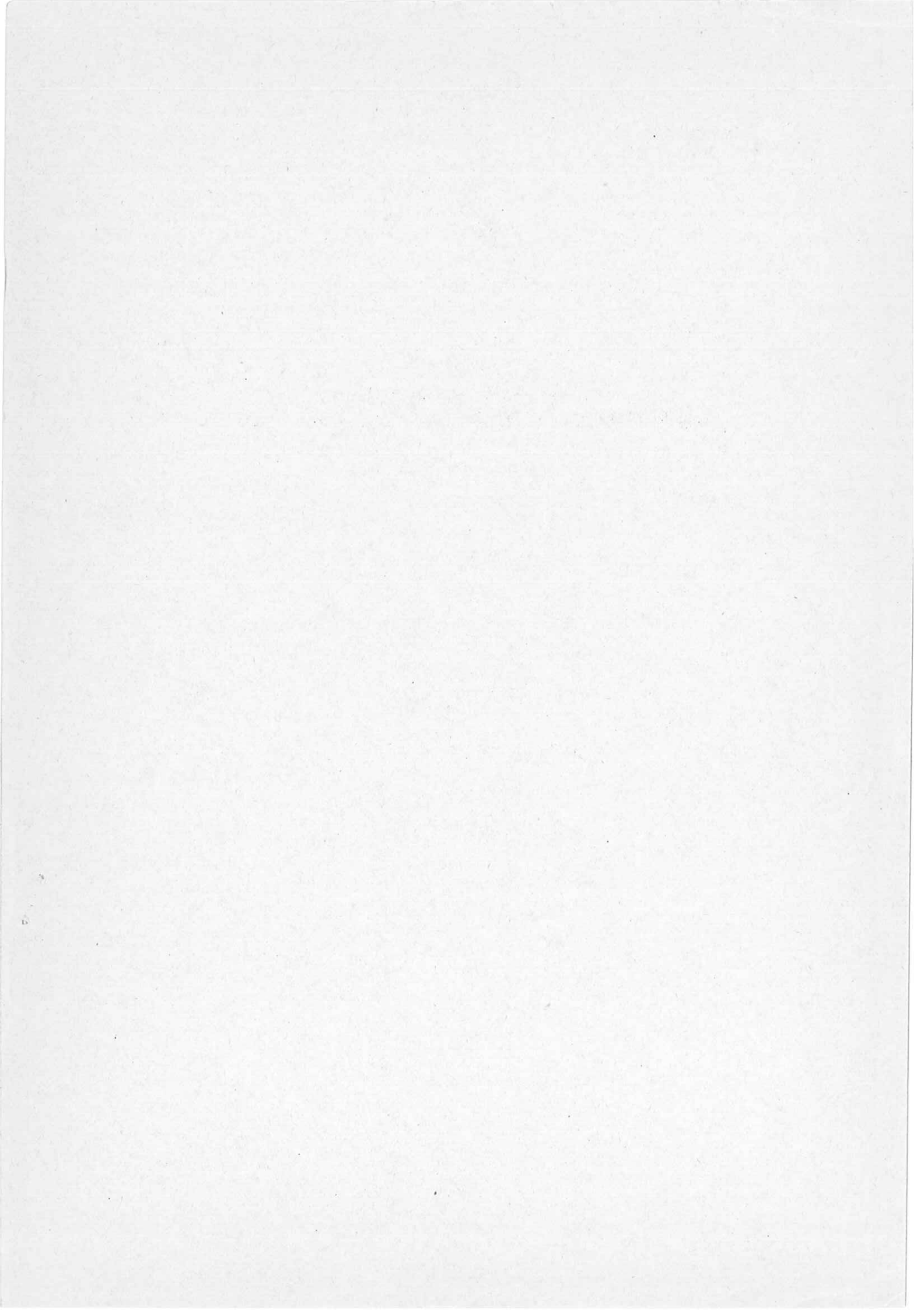
DESY-Bibliothek

15. FEB. 1974

On-line Kramers-Kronig-Analyse
von Reflexions-, Transmissions- und Absorptionsdaten

von

H.-J. Hagemann, R. Klucker und U. Nielsen



On-line Kramers-Kronig-Analyse
von Reflexions-, Transmissions- und Absorptionsdaten

von

Hans-Jürgen Hagemann,
Ralph Klucker und Ulrich Nielsen

Stand: 1. Dezember 1973

Inhaltsverzeichnis

	<u>Seite</u>
1. Einleitung	1
2. Berechnung physikalischer Größen	3
2.1 Vorbemerkung	3
2.2 Dielektrische Funktion	4
2.3 Zusammenhang zwischen den dielektrischen Funktionen	5
2.3.1 Berechnung von $\hat{n}(\omega)$, $\hat{r}(\omega)$, $\hat{\epsilon}^{-1}(\omega)$ aus $\hat{\epsilon}(\omega)$	5
2.3.2 Berechnung von $\hat{\epsilon}(\omega)$ aus $\hat{n}(\omega)$, $\hat{r}(\omega)$, $\hat{\epsilon}^{-1}(\omega)$	6
2.3.3 Berechnung von $\hat{n}(\omega)$ aus $\hat{t}(\omega, d)$	8
2.4 Extrapolation für niedrige Energien	10
2.5 Extrapolation für hohe Energien	11
2.5.1 Übergangsbereich (bei Reflexionsdaten)	11
2.5.2 Extrapolation für sehr hohe Energien	11
3. Kramers-Kronig-Integral	14
3.1 Cauchyscher Integralsatz	14
3.2 Vorüberlegungen zur Berechnung der Dispersionsintegrale	17
3.3 Reihenentwicklung von $h(x)$	20
3.4 Berechnung des Integrals I_{on}	21
3.5 Lineare Näherung der Entwicklung von $h(x)$	25
3.6 Berechnung des Integrals I_{∞}	26
3.6.1 Vorbemerkung	26
3.6.2 Extrapolation $h(x) \sim x^{-2}$	27
3.6.3 Extrapolation $h(x) \sim \ln x$	28
3.6.4 Extrapolation für $h(x) \sim \text{const.}$	30
3.7 Endergebnis	31
3.7.1 Vorbemerkung	31
3.7.2 Ergebnis für $h(x) \sim x^{-2}$	32
3.7.3 Ergebnis für $h(x) \sim \ln x$	33
3.7.4 Ergebnis für $h(x) \sim \text{const.}$	33
3.8 Zusammenfassung der Ergebnisse	34
3.9 Anpassung der Endergebnisse an die Rechnergenauigkeit	36
3.10 Testergebnisse und Fehleranalyse	38

4. On-line Benutzung der Programme	40
4.1 Allgemeine Bemerkung zur on-line Verbindung	40
4.2 Laden des Programms KRAMER	41
4.3 Laden einer Kurve	42
4.4 Hauptanzeigen des Displays	42
4.5 Displaysteuerung	43
4.5.1 Kurvenpositionierung	43
4.5.2 Interne Wahl des Kurvenausschnittes: CTRL+I	44
4.5.3 Interne Wahl des Kurvenausschnittes: CTRL+E	45
4.6 Wechsel des dargestellten Datenbereichs	45
4.7 Magnetbandbenutzung: CTRL+W, CTRL+R	46
4.8 Identifizierungstext und Kenn-Nummer: CTRL+Q, CTRL+N	46
4.9 Integral berechnen: CTRL+O	46
4.10 Berechnung der optischen und dielektrischen Eigenschaften: CTRL+Y	47
4.11 Neuladen einer Kurve: CTRL+X	48
4.12 Weitere Eingriffsmöglichkeiten	48

1. Einleitung

Die optischen und dielektrischen Eigenschaften von Festkörpern sind über die Kramers-Kronig-Beziehungen^{1,2}

$$f_1(\omega_0) = f_1(\infty) + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega f_2(\omega)}{\omega^2 - \omega_0^2} d\omega$$

$$f_2(\omega_0) = -\frac{2\omega_0}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{f_1(\omega)}{\omega^2 - \omega_0^2} d\omega$$

$f(\omega) = f_1(\omega) + if_2(\omega)$ miteinander verknüpft*: z.B. ist $\hat{f}(\omega) = \hat{\epsilon}(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ oder $\hat{f}(\omega) = n(\omega) + ik(\omega)$.^{3,4,5} In manchen Fällen können neben den Integralen noch weitere Terme auftreten.^{4,13}

Daraus folgt, daß man bei Kenntnis von $f_1(\omega)$ die zugehörige Funktion $f_2(\omega)$ berechnen kann bzw. umgekehrt. Im folgenden wird ein Programmsystem beschrieben, daß die Berechnung der optischen Konstanten aus Reflexions-, Transmissions- bzw. Absorptionsdaten erlaubt. Die besonderen Eigenschaften dieses Systems sind a) der geringe Zeitbedarf der Rechnungen, b) der on-line Anschluß, der eine schnelle "Rückkopplung" zwischen Berechnung und Auswertung erlaubt. Das System besteht aus zwei Programmen: a) einem in der IBM des DESY-Rechenzentrums resident gespeicherten Fortranprogramm, das eine erweiterte und für den on-line Verkehr modifizierte Version von KRKRAN ist⁶ und b) einem in PDP-Assembler geschriebenen (aus dem Programm DISPLAY abgeleiteten⁷) Programm (KRAMER) in der PDP 8/e der Gruppe F 41. Das Programm KRAMER steuert die PDP als Terminal, setzt den Display auf, stellt die Daten für die IBM zur Verfügung etc. Die IBM übernimmt die gesamte Rechenarbeit (Vorbereitung der Daten, Integralauswertung, Berechnung der optischen Konstanten).^{8,9,10}

Komplexe Größen werden mit $\hat{}$ bezeichnet

In 2. Berechnung physikalischer Größen wird auf den Zusammenhang zwischen Real- und Imaginärteil der dielektrischen Funktionen (und abgeleiteter Größen) eingegangen.

Das Kapitel 3. Kramers-Kronig-Integral beschreibt die benutzte Mathematik zur Lösung der auftretenden Integrale, das dazu entwickelte Rechenprogramm und Testergebnisse mit dem explizit berechenbaren Oszillatormodell, das eine quantitative Fehleranalyse erlaubt.

Schließlich stellt 4. On-line Benutzung der Programme die Bedienungsanleitung für das gesamte Programmpaket dar.

2. Berechnung physikalischer Größen

2.1 Vorbemerkung

Durch Messungen ist von komplexen physikalischen Funktionen oft entweder nur der Real- oder nur der Imaginärteil bekannt, und zwar nur in einem begrenzten Bereich $0 < x_{\min} \leq x \leq x_{\max} < \infty$ ($x =$ Energie, Frequenz, Weg, ...). Real- und Imaginärteil der komplexen Funktionen sind jedoch durch Kramers-Kronig-Beziehungen miteinander verknüpft, die es gestatten, den einen Teil aus dem anderen zu berechnen.* Zur Berechnung des Realteils aus dem Imaginärteil (oder umgekehrt) ist es aber erforderlich, den Verlauf der betreffenden Funktion für den gesamten Bereich des Arguments zu kennen. Liegen in bestimmten Bereichen keine Daten vor, dann sind die Meßwerte dort durch geeignete physikalisch sinnvolle Extrapolationen zu ersetzen.

Auf diese Weise ist es möglich, etwa aus dem Realteil eine komplexe Funktion komplett zu berechnen und mit deren Hilfe weitere abgeleitete Größen.

Dies wird in den folgenden Abschnitten für die dielektrischen Eigenschaften von Festkörpern verdeutlicht.

Es wird vorausgesetzt, daß die bekannte Funktion punktweise vorliegt.

* Diese Aussage gilt unter der Voraussetzung der Lösbarkeit der dabei auftretenden Integrale. Siehe hierzu die Voraussetzungen unter 3. Kramers-Kronig-Integral.

2.2 Dielektrische Funktionen

Es werden folgende Funktionen betrachtet:

- komplexe Dielektrizitätskonstante : $\hat{\epsilon}(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i \epsilon_2(\omega)$
- komplexer Brechungsindex : $\hat{n}(\omega) = n(\omega) + i k(\omega)$
- komplexe Reflektivität : $\hat{r}(\omega) = \sqrt{R(\omega)} \cdot e^{i\Theta(\omega)}$
 $(\ln \hat{r}(\omega) = \frac{1}{2} \cdot \ln R + i \Theta(\omega))$
- komplexe Transmissivität : $\hat{t}(\omega) = \sqrt{T(\omega)} \cdot e^{i\Theta(\omega)}$
 $(\ln \hat{t}(\omega) = \frac{1}{2} \cdot \ln T(\omega) + i \Theta(\omega))$
- komplexe Energieverlustfunktion : $\hat{\epsilon}(\omega)^{-1} = \text{Re}[\hat{\epsilon}(\omega)^{-1}] + i \text{Im}[\hat{\epsilon}(\omega)^{-1}]$

Ferner als abgeleitete Größen

- Absorptionskoeffizient : $\mu(E) = \frac{2 \cdot k \cdot E [\text{eV}]}{1,9732} \quad [10^5 \text{ cm}^{-1}]$

- Summenregel : $N_{\text{eff}} = \frac{m}{2\pi^2 e^2 \hbar^2} \cdot \int_0^{E[\text{eV}]} E' \cdot \epsilon_2(E') \cdot dE'$
 (Anzahl Elektronen/cm³)

$$N'_{\text{eff}} = \frac{2m}{e^2 \hbar^2} \cdot \frac{A}{L \cdot \rho} \cdot \int_0^{E[\text{eV}]} E' \cdot \epsilon_2(E') \cdot dE'$$

(Anzahl Elektronen/Molekül)

$$= 7,66686 \cdot 10^{-4} \cdot y \cdot \frac{A}{\rho} \quad *)$$

[y = Numerischer Wert von $\int_0^{E[\text{eV}]} E' \cdot \epsilon_2(E') \cdot dE']$

- Summenregel¹¹ : $\epsilon_{\text{oeff}}(E) = 1 + \frac{2}{\pi} \cdot \int_0^{E[\text{eV}]} \epsilon_2(E') \cdot \frac{dE'}{E'}$

*) A : Atom- bzw. Molekulargewicht
 ρ : Dichte [g · cm⁻³]

2.3 Zusammenhang zwischen den dielektrischen Funktionen

2.3.1 Berechnung von $\hat{n}(\omega)$, $\hat{r}(\omega)$, $\hat{\epsilon}^{-1}(\omega)$ aus $\hat{\epsilon}(\omega)$

(1) Brechungsindex: $\hat{n}(\omega)$

$$\hat{n}^2 = \hat{\epsilon} = \epsilon_1 + i\epsilon_2$$
$$\hat{n} = \sqrt[+]{\frac{1}{2}(\sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} + \epsilon_1)} + i \cdot \sqrt[+]{\frac{1}{2}(\sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} - \epsilon_1)}$$

(2) Reflektivität $\hat{r}(\omega)$

- für $\vec{E} \perp$ Einfallsebene (\hat{r}_s)

$$\hat{r}_s = \frac{\sqrt{\hat{\epsilon} - \sin^2 \varphi} - \cos \varphi}{\sqrt{\hat{\epsilon} - \sin^2 \varphi} + \cos \varphi}$$

- für $\vec{E} \parallel$ Einfallsebene (\hat{r}_p)

$$\hat{r}_p = \frac{\hat{\epsilon} \cdot \cos \varphi - \sqrt{\hat{\epsilon} - \sin^2 \varphi}}{\hat{\epsilon} \cdot \cos \varphi + \sqrt{\hat{\epsilon} - \sin^2 \varphi}}$$

(3) Energieverlustfunktion $1/\hat{\epsilon}(\omega)$

$$\hat{\epsilon}^{-1} = \frac{1}{\epsilon_1 + i\epsilon_2}$$

$$\hat{\epsilon}^{-1} = \frac{\epsilon_1}{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} - i \cdot \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2}$$

(4) Absorptionskoeffizient $\mu(E)$

$$\mu = \frac{2 \cdot E[\text{eV}]}{1,9732} \cdot k$$

$$\mu = \frac{2 \cdot E[\text{eV}]}{1,9732} \cdot \sqrt{\frac{1}{2}(\sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} - \epsilon_1)}$$

2.3.2 Berechnung von $\hat{\epsilon}(\omega)$ aus $\hat{n}(\omega)$, $\hat{r}(\omega)$, $\hat{\epsilon}^{-1}(\omega)$

(1) aus $\hat{n}(\omega)$

$$\hat{\epsilon} = \hat{n}^2 = (n^2 - k^2) + i \cdot 2nk$$

(2) aus $\hat{\epsilon}^{-1}(\omega)$

$$\hat{\epsilon} = \frac{1}{\hat{\epsilon}^{-1}} = \frac{\operatorname{Re} \hat{\epsilon}^{-1}}{[\operatorname{Re} \hat{\epsilon}^{-1}]^2 + [\operatorname{Im} \hat{\epsilon}^{-1}]^2} - i \frac{\operatorname{Im} \hat{\epsilon}^{-1}}{[\operatorname{Re} \hat{\epsilon}^{-1}]^2 + [\operatorname{Im} \hat{\epsilon}^{-1}]^2}$$

(3) aus $\hat{r}_s(\omega)$

$$\hat{r}_s = \frac{\sqrt{\hat{\epsilon} - \sin^2 \varphi} - \cos \varphi}{\sqrt{\hat{\epsilon} - \sin^2 \varphi} + \cos \varphi}$$

$$\sqrt{\hat{\epsilon} - \sin^2 \varphi} = a + ib \quad \wedge \quad \begin{aligned} \epsilon_1 &= a^2 - b^2 + \sin^2 \varphi \\ \epsilon_2 &= 2ab \end{aligned}$$

$$\hat{r}_s \cdot (\sqrt{\quad} + \cos \varphi) = \sqrt{\quad} - \cos \varphi$$

$$\cos \varphi \cdot (1 + \hat{r}_s) = \sqrt{\quad} (1 - \hat{r}_s)$$

$$\sqrt{\quad} = \cos \varphi \cdot \frac{1 + \hat{r}_s}{1 - \hat{r}_s}$$

$$= \cos \varphi \cdot \frac{1 + r_s \cos \Theta + i r_s \sin \Theta}{1 - r_s \cos \Theta - i r_s \sin \Theta}$$

$$= \cos \varphi \cdot \frac{1 - r_s^2 + 2i r_s \sin \Theta}{1 - 2r_s \cos \Theta + r_s^2}$$

$$\left| \hat{r}_s = r_s \cdot e^{i\Theta} \right.$$

$a = \frac{\cos \varphi \cdot (1 - r_s^2)}{1 - 2r_s \cos \Theta + r_s^2}$

$b = \frac{2 \cos \varphi \cdot r_s \cdot \sin \Theta}{1 - 2r_s \cos \Theta + r_s^2}$

$\epsilon_1 = a^2 - b^2 + \sin^2 \varphi$

$\epsilon_2 = 2ab$

(4) aus $\hat{r}_p(\omega)$

$$\hat{r}_p = \frac{\hat{E} \cos \varphi - \sqrt{\hat{E}^2 - \sin^2 \varphi}}{\hat{E} \cos \varphi + \sqrt{\hat{E}^2 - \sin^2 \varphi}}$$

$$\hat{r}_p (\hat{E} \cos \varphi + \sqrt{\hat{E}^2 - \sin^2 \varphi}) = \hat{E} \cos \varphi - \sqrt{\hat{E}^2 - \sin^2 \varphi}$$

$$\sqrt{\hat{E}^2 - \sin^2 \varphi} (1 + \hat{r}_p) = \hat{E} \cos \varphi (1 - \hat{r}_p)$$

$$\hat{E} = \frac{1}{\cos \varphi} \cdot \frac{1 + \hat{r}_p}{1 - \hat{r}_p} \cdot \sqrt{\hat{E}^2 - \sin^2 \varphi} = \hat{A}$$

$$\hat{E}^2 - \hat{A}^2 \hat{E} + \hat{A}^2 \sin^2 \varphi = 0$$

$$\hat{E}_{\pm}^2 = \frac{1}{2} (\hat{A}^2 \pm \sqrt{\hat{A}^4 - \hat{A}^2 \sin^2 \varphi})$$

$$\hat{E}_{\pm}^2 = \frac{\hat{A}}{2} \cdot (\hat{A} \pm \sqrt{\hat{A}^2 - \sin^2 \varphi})$$

$$\text{für } \varphi \rightarrow 0 \quad \hat{E}_+ \rightarrow \hat{A}^2 \\ \hat{E}_- \rightarrow 0$$

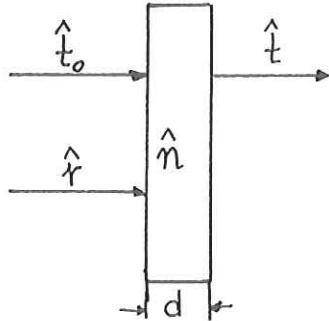
Lösung ist $\hat{E} = \hat{E}_+$

$$\hat{E} = \frac{\hat{A}}{2} \cdot (\hat{A} + \sqrt{\hat{A}^2 - \sin^2 \varphi})$$

$$\hat{A} = \frac{1}{\cos \varphi} \cdot \frac{1 + \hat{r}_p}{1 - \hat{r}_p} = \frac{1}{\cos^2 \varphi} \cdot (a' + ib')$$

a', b' analog zu a, b gemäß (3)

2.3.3 Berechnung von $\hat{n}(\omega)$ aus $\hat{t}(\omega, d)$



Löst man die Maxwell'schen Gleichungen für die durch eine dünne absorbierende Schicht der Dicke d transmittierte Amplitude $\hat{t} = T^{1/2} \exp(i\Theta)$, so erhält man T und Θ in Abhängigkeit von \hat{n} (senkrechter Einfall)¹⁴:

$$T(n, k) = 16 \cdot \frac{n^2 + k^2}{C^2 + D^2} \quad (1)$$

$$\Theta(n, k) = \arctan \left(\frac{kC + nd}{kD - nC} \right)$$

mit

$$C = e^{\mu} \left\{ ((n+1)^2 + k^2) \cos N + 2k(n+1) \sin N \right\}$$

$$- e^{-\mu} \left\{ ((n-1)^2 - k^2) \cos N - 2k(n-1) \sin N \right\}$$

$$D = e^{\mu} \left\{ ((n+1)^2 - k^2) \sin N - 2k(n+1) \cos N \right\}$$

$$+ e^{-\mu} \left\{ ((n-1)^2 - k^2) \sin N + 2k(n-1) \cos N \right\}$$

$$\mu = \frac{\omega}{c} \cdot k \cdot d \quad N = \frac{\omega}{c} \cdot n \cdot d$$

Da (1) nicht explizit nach n und k aufgelöst werden kann, wird ein äquivalentes Gleichungssystem iterativ gelöst¹⁶:

$$(2) \quad T_{\text{EX}} - T(n, k) = 0$$

$$\Theta_{\text{KRKR}} - \Theta(n, k) = 0$$

T_{EX} ist die gemessene transmittierte Intensität und Θ_{KRKR} die daraus mit Hilfe einer Kramers-Kronig-Analyse berechnete Phase.

Mit den Werten von n_i und k_i werden bessere Werte zur Lösung von (2)

$n_{i+1} = n_i + \Delta n_i$ und $k_{i+1} = k_i + \Delta k_i$ bestimmt.

$$\begin{aligned} \Delta_i T &= T_{EX} - T(n_i, k_i) = \left(\frac{\partial T}{\partial n}\right)_i \Delta n_i + \left(\frac{\partial T}{\partial k}\right)_i \Delta k_i \\ \Delta_i \Theta &= \Theta_{KRKR} - \Theta(n_i, k_i) = \left(\frac{\partial \Theta}{\partial n}\right)_i \Delta n_i + \left(\frac{\partial \Theta}{\partial k}\right)_i \Delta k_i \end{aligned} \quad (3)$$

$i = 0, 1, \dots$

Für den ersten Punkt $\hat{n}(\omega_1)$ müssen die Startwerte $n_0(\omega_1)$ und $k_0(\omega_1)$ vorgegeben werden, für alle weiteren Punkte $\hat{n}(\omega_j)$ wird die Lösung von (2) für den vorhergehenden Punkt als Startwert genommen. Das Fortran-Programm zur Lösung von (2) wurde von P.-O. Nilsson^{15,19} zur Verfügung gestellt und für den Fall einer freitragenden Schicht abgeändert.

2.4 Extrapolation für niedrige Energien

Die Extrapolation für niedrige Energien geschieht durch Einführung von physikalisch sinnvollen Funktionswerten:

Extrapolation von $x=0$ bis $x=x_{\min}$:

$$x_0 = 0 < x_1 < x_2 < \dots < x_i = x_{\min}$$

Bei Absorptions- und Transmissionsdaten liegen Meßwerte für niedrigere Energien oft nicht vor. In diesem Fall ist es am günstigsten, ungefähre Werte für die fehlenden Punkte durch Kramers-Kronig-Analyse von Reflexionsdaten zu erzeugen, die dann unter Umständen an die Meßwerte angepaßt werden müssen. Bei Metallen kann die Extrapolation für sehr kleine Energien mit Hilfe der Drude-Parameter des betreffenden Materials durchgeführt werden.

Es schließen sich die Punkte der vorgegebenen Funktion an. Eventuelle Lücken zwischen bekannten Bereichen können durch Einführung von Zwischenpunkten geschlossen werden.

2.5 Extrapolation für hohe Energien

2.5.1 Übergangsbereich (bei Reflexionsdaten)

Gemessene Reflexionswerte bei fast senkrechtem Einfall liegen für Photonenenergien $h\omega$ über ca. 30 eV - 50 eV selten vor. Die Extrapolation mit einer analytischen Funktion nach dem Modell freier Elektronen (s. 2.5.2) ist bei diesen Energien noch sehr problematisch.¹⁷ Die Ergebnisse werden im allgemeinen wesentlich besser, wenn man für einen Übergangsbereich Reflexionswerte mit Hilfe von Absorptionsdaten mit einer vorherigen Kramers-Kronig-Analyse berechnet und die Werte nötigenfalls an die Meßdaten anpaßt.

2.5.2 Extrapolation für sehr hohe Energien

ε̂: Wir gehen aus von der komplexen Dielektrizitätskonstanten.

Als Näherung in Festkörpern und Gasen gilt:

$$\hat{\epsilon}(\omega) = 1 + \omega_p^2 \sum_j \frac{f_j}{(\omega_j^2 - \omega^2) - i\omega\Gamma_j}$$

mit $\omega_p^2 = \frac{4\pi Ne^2}{m}$ Plasmafrequenz

N: Elektronen/cm³

e: Elektronenladung

m: Elektronenmasse

$\hbar\omega_j = E_j - E_0$: Energiedifferenz des Übergangs j

Γ_j : Halbwertsbreite des Übergangs j

$\sum_j f_j = 1$, f_j = Oszillatorstärke des Übergangs j

Für $\omega \gg \omega_j, \Gamma_j$ folgt

$$\hat{\epsilon}(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} + i \frac{\omega_p^2 \Gamma}{\omega^3}$$

$$(\Gamma = \sum_j f_j \Gamma_j)$$

Für $\omega \gg \omega_p$ folgt

$\epsilon_1(\omega) - 1$	\sim	$-\frac{\omega_p^2}{\omega^2}$
$\epsilon_2(\omega)$	\sim	$\frac{\omega_p^2 \Gamma}{\omega^3}$

Für die abgeleiteten Größen gilt folgendes (vgl. Kapitel 2.3.1)

$$\hat{n}: \quad n(\omega) \sim \sqrt{\frac{1}{2} \left[\sqrt{\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)^2 + \left(\frac{\omega_p^2 \Gamma}{\omega^3}\right)^2} + \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right) \right]} \sim \sqrt{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}} \sim 1 - \frac{\omega_p^2}{2\omega^2}$$

$$k(\omega) \sim \sqrt{\frac{1}{2} \left[\sqrt{\text{dto.}} - \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right) \right]} \sim \sqrt{\left(\frac{\omega_p^2 \Gamma}{2\omega^3}\right)^2} = \frac{\omega_p^2 \Gamma}{2\omega^3}$$

$n(\omega) - 1$	$\sim -\frac{\omega_p^2}{2\omega^2}$
$k(\omega)$	$\sim \frac{\omega_p^2 \Gamma}{2\omega^3}$

$$\hat{\epsilon}^{-1}: \quad \text{Re} \hat{\epsilon}^{-1} \sim \frac{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}}{\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)^2 + \left(\frac{\omega_p^2 \Gamma}{\omega^3}\right)^2} \sim \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right) \cdot \left(1 + \frac{2\omega_p^2}{\omega^2}\right) \sim 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

$$\text{Im} \hat{\epsilon}^{-1} \sim \frac{\frac{\omega_p^2 \Gamma}{\omega^3}}{\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)^2 + \left(\frac{\omega_p^2 \Gamma}{\omega^3}\right)^2} \sim \frac{\omega_p^2 \Gamma}{\omega^3}$$

$\text{Re} \hat{\epsilon}^{-1} - 1$	$\sim \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$
$\text{Im} \hat{\epsilon}^{-1}$	$\sim \frac{\omega_p^2 \Gamma}{\omega^3}$

$$\hat{r}_s: \quad \hat{r}_s \sim \frac{\sqrt{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} - \sin^2 \varphi} + i \frac{\omega_p^2 \Gamma}{\omega^3} - \cos \varphi}{\sqrt{\text{dto.}} + \cos \varphi} = \frac{\sqrt{1 - \frac{\omega_p^2}{\cos^2 \varphi \cdot \omega^2} + i \frac{\omega_p^2 \Gamma}{\omega^3 \cdot \cos^2 \varphi}} - 1}{\sqrt{\text{dto.}} + 1}$$

Mit $\omega_p \ll \omega \cdot \cos \varphi$ folgt:

$$\hat{r}_s \sim \frac{-\frac{\omega_p^2}{2\omega^2 \cos^2 \varphi} + i \frac{\omega_p^2 \Gamma}{2\omega^3 \cos^2 \varphi}}{1 + 1} \quad \left[\hat{r} = r \cos \Theta + i r \sin \Theta \right]$$

r_s	$\sim -\frac{\omega_p^2}{4\omega^2 \cos^2 \varphi}$
$\text{tg} \Theta_s$	$\sim -\frac{\Gamma}{\omega}$
Θ_s	$\sim -\frac{\Gamma}{\omega} \quad (\Gamma \ll \omega)$

$$\hat{r}_p: \quad \hat{r}_p \sim \frac{(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}) \cos \varphi - \sqrt{(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} - \sin^2 \varphi) + i \frac{\omega_p^2 \Gamma}{\omega^2}}}{(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}) \cos \varphi + \sqrt{\text{dto}}} = \frac{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} - \sqrt{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 \cos^2 \varphi} + i \frac{\omega_p^2 \Gamma}{\omega^3 \cos^2 \varphi}}}{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} + \sqrt{\text{dto.}}}$$

Mit $\omega_p \ll \omega \cdot \cos \varphi$ folgt:

$$\hat{r}_p \sim \frac{\frac{\omega_p^2}{\omega^2} \left(\frac{1}{2 \cos^2 \varphi} - 1 \right) - i \frac{\omega_p^2 \Gamma}{2 \omega^3 \cos^2 \varphi}}{4}$$

$r_p \sim \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \left(\frac{1}{2 \cos^2 \varphi} - 1 \right)$
$\Theta_p \sim \text{tg} \Theta_p \sim - \frac{\Gamma}{\omega (1 - 2 \cos^2 \varphi)}$

T:

$\mu \sim \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \cdot \frac{\Gamma}{c}$
$T \approx e^{-\mu d} \sim \exp\left(-\frac{\omega_p^2}{\omega^2} \cdot \frac{\Gamma d}{c}\right)$

3. Kramers-Kronig-Integral

3.1 Cauchyscher Integralsatz

Die Kramers-Kronig-Beziehungen leiten sich aus dem Cauchyschen Integralsatz ab:¹²

Für eine komplexe Funktion \hat{f} mit komplexem Argument \hat{x}

$$\hat{f}(\hat{x}) = f_1(\hat{x}) + i \cdot f_2(\hat{x})$$

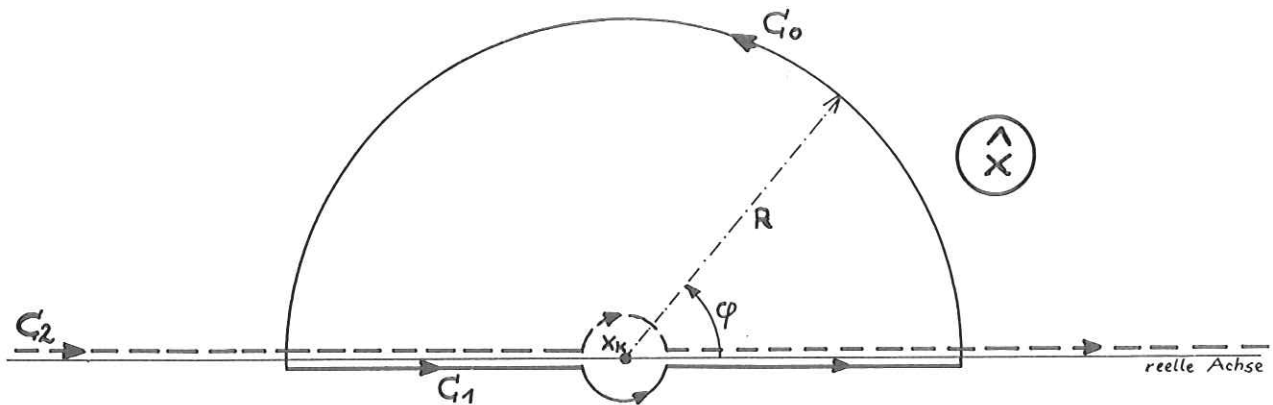
gilt unter den Voraussetzungen

- $\hat{f}(\hat{x})$ sei im oberen \hat{x} -Halbraum holomorph
- $\hat{f}(x)$ sei stetig (auf der reellen Achse)
- $\hat{f}(\infty)$ sei endlich = \hat{f}_∞

der Cauchysche Integralsatz:

$$\hat{f}(x_k) - \hat{f}_\infty = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_0 + C_1} \frac{d\hat{x}}{\hat{x} - x_k} (\hat{f}(\hat{x}) - \hat{f}_\infty) \quad (3.1)$$

mit folgendem Integrationsweg:



Der Pol $\hat{x}=x_k$ auf der reellen Achse wird hierbei in der unteren Halbebene umgangen. Das ist möglich, weil die Singularitäten von $\hat{f}(\hat{x})$ in endlichem Abstand von der reellen Achse liegen müssen (sonst wäre $\hat{f}(\hat{x})$ dort nicht stetig).

Der Weg C_0 besteht aus einem Halbkreis mit Radius R .

Auf diesem Wege gilt

$$\hat{x} - x_k = R \cdot e^{i\varphi} \quad ,$$

Daraus folgt

$$\frac{d\hat{x}}{\hat{x} - x_k} = i d\varphi$$

Damit verschwindet das Integral längs C_0

$$\int_{C_0} \frac{d\hat{x}}{\hat{x} - x_k} (\hat{f}(\hat{x}) - \hat{f}(\infty)) = \int_0^\pi i d\varphi [\hat{f}(x_k + R e^{i\varphi}) - \hat{f}(\infty)]$$

für $R \rightarrow \infty$ in dem Maße, wie sich $\hat{f}(\hat{x})$ dem Wert \hat{f}_∞ nähert.

Ebenfalls verschwindet das Integral längs C_2 , da es durch einen Halbkreis in der oberen Halbebene geschlossen werden kann und keine Singularitäten im Innern enthält.

Die halbe Summe der Integrale über C_1 und C_2 wird als Hauptwert bezeichnet:

$$P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\hat{x}}{\hat{x} - x_k} g(\hat{x}) = \frac{1}{2} \left[\int_{C_1} \frac{d\hat{x}}{\hat{x} - x_k} g(\hat{x}) + \int_{C_2} \frac{d\hat{x}}{\hat{x} - x_k} g(\hat{x}) \right]$$

Damit ergibt sich:

$$\hat{f}(x_k) - \hat{f}_\infty = \frac{1}{\pi i} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hat{f}(\hat{x}) - \hat{f}_\infty}{\hat{x} - x_k} d\hat{x} \quad (3.2)$$

Aus physikalischen Gründen wird nun angenommen, daß \hat{f}_∞ reell ist.

Aufspalten von (3.2) in Real- und Imaginärteil liefert:

$$\begin{aligned} f_1(x_k) - f_\infty &= \frac{1}{\pi} \cdot P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f_2(x)}{x - x_k} dx \\ f_2(x_k) &= -\frac{1}{\pi} \cdot P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f_1(x) - f_\infty}{x - x_k} dx \end{aligned}$$

Durch die Substitution $x \rightarrow -x$ auf dem Integrationsweg von $-\infty$ bis 0 sowie unter den Voraussetzungen

$$f_1(-x) = f_1(x)$$

$$f_2(-x) = -f_2(x) \quad (\text{analytische Fortsetzung von } \hat{f} \text{ f\u00fcr reelle } x \text{ f\u00fcr } x < 0)$$

ergeben sich die Dispersionsrelationen:

$f_1(x_k) - f_\infty = \frac{2}{\pi} \cdot \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{x \cdot f_2(x) \cdot dx}{x^2 - x_k^2}$	(3.3a)
$f_2(x_k) = -\frac{2}{\pi} \cdot \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{x_k (f_1(x) - f_\infty)}{x^2 - x_k^2} dx$	(3.3b)

Bei Reflexions- und Transmissionsmessungen wird nicht der Imagin\u00e4r- oder Realteil einer komplexen Funktion bestimmt, sondern ihr Absolutwert. Die zugeh\u00f6rige Phase ist in diesem Fall nicht eindeutig durch die Kramers-Kronig-Beziehungen gegeben und es sind zus\u00e4tzliche Terme neben dem eigentlichen Dispersionsintegral m\u00f6glich.⁴ Ob und wie diese Terme ber\u00fccksichtigt werden m\u00fcssen, folgt aus physikalischen \u00dcberlegungen.

Bei der Phase der Reflektivit\u00e4t treten zus\u00e4tzliche Terme nicht auf¹⁸, w\u00e4hrend bei der Phase einer durch eine Schicht der Dicke d transmittierten Welle zum Dispersionsintegral ein Summand hinzu kommt, der die Phasen\u00e4nderung auf einem Weg d ohne die Ver\u00e4nderungen durch die Schicht beschreibt.

$f_2^T(x_k) = -\frac{2}{\pi} \cdot \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{x_k (f_1(x) - f_\infty)}{x^2 - x_k^2} dx + \frac{x_k}{c} d$	(3.3c)
--	--------

3.2 Vorüberlegungen zur Berechnung der Dispersionsintegrale

Aus Vereinfachungsgründen wird jetzt die Gleichung

$$g(x_K) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{h(x) \cdot dx}{x^2 - x_K^2} \quad (3.4)$$

betrachtet.

Sie umfaßt (3.3a) und (3.3b), wenn gesetzt wird

$$\begin{array}{l} \text{- für (3.3a):} \\ \left. \begin{array}{l} g(x_K) = f_1(x_K) - f_{\infty} \\ h(x) = x \cdot f_2(x) \end{array} \right\} \end{array}$$

$$\begin{array}{l} \text{- für (3.3b):} \\ \left. \begin{array}{l} g(x_K) = f_2(x_K) \\ h(x) = -x_K (f_1(x) - f_{\infty}) \end{array} \right\} \end{array}$$

Für die in Kapitel 2 betrachteten physikalischen Funktionen zeigt die folgende Tabelle:

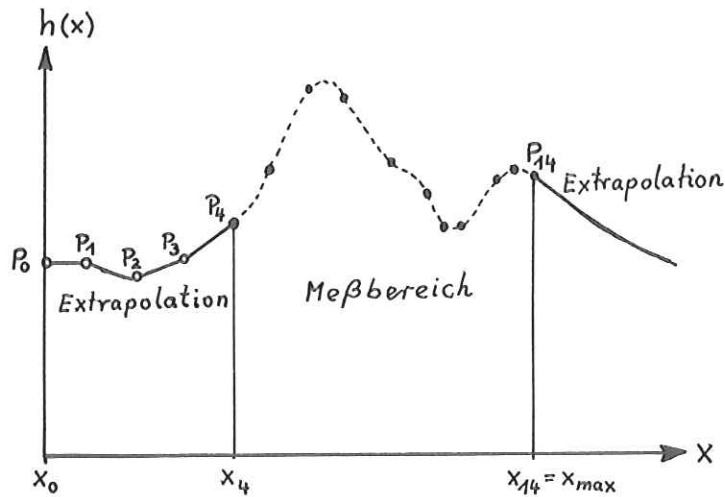
- die Ersetzungen für $g(x_K)$ und $h(x)$, die in (3.4) vorgenommen werden müssen, um die jeweiligen Kramers-Kronig-Beziehungen zu erhalten
- das jeweilige asymptotische Verhalten von $h(x)$ für $x \rightarrow \infty$.

Umrechnung	$g(x_K)$	$h(x)$	$h(x)_{x \rightarrow \infty}$
$\epsilon_2 \rightarrow \epsilon_1$	$\epsilon_1(\omega_K)^{-1}$	$\omega \cdot \epsilon_2(\omega)$	$\sim \omega^{-2}$
$k \rightarrow h$	$n(\omega_K)^{-1}$	$\omega \cdot k(\omega)$	$\sim \omega^{-2}$
$\text{Im}\hat{\epsilon}^{-1} \rightarrow \text{Re}\hat{\epsilon}^{-1}$	$\text{Re}\hat{\epsilon}^{-1}(\omega_K)^{-1}$	$\omega \cdot \text{Im}\hat{\epsilon}^{-1}(\omega)$	$\sim \omega^{-2}$
$\Theta \rightarrow R$	$\frac{1}{2} \ln R(\omega_K)$	$\omega \cdot \Theta(\omega)$	$\sim \text{const.}$
$\epsilon_1 \rightarrow \epsilon_2$	$\epsilon_2(\omega_K)$	$-\omega_K (\epsilon_1(\omega) - 1)$	$\sim \omega^{-2}$
$n \rightarrow k$	$k(\omega_K)$	$-\omega_K (n(\omega) - 1)$	$\sim \omega^{-2}$
$\text{Re}\hat{\epsilon}^{-1} \rightarrow \text{Im}\hat{\epsilon}^{-1}$	$\text{Im}\hat{\epsilon}^{-1}(\omega_K)$	$-\omega_K (\text{Re}\hat{\epsilon}^{-1}(\omega) - 1)$	$\sim \omega^{-2}$
$R \rightarrow \Theta$	$\Theta(\omega_K)$	$-\omega_K \cdot \frac{1}{2} \ln R$	$\sim \ln \omega$
$T \rightarrow \Theta$	$\Theta(\omega_K)$	$\omega_K \cdot \frac{1}{2} \ln T$	$\sim \omega^{-2}$

Tabelle 3.1

Die Funktion $h(x)$ ist für eine begrenzte Anzahl diskreter Werte $P_j(x_j, y_j)$ gegeben, für die

$$0 = x_0 < x_1 < x_2 < x_3 < \dots < x_n = x_{\max} < \infty \text{ gilt.}$$



Dabei wird der Punkt

$$P_0 = (x_0, y_0) = (0, h(x_1)=y_1) \text{ zusätzlich eingeführt.}$$

Im Beispiel (obiges Bild) gehören die Punkte P_1 bis P_3 zur Extrapolation für kleine Werte von x ,

P_4 bis P_{14} sind die bekannten Punkte.

Oberhalb P_{14} setzt die Extrapolation für große Werte von x ein. Es

handelt sich dabei um eine analytische Funktion gemäß Tabelle 3.1 .

Das Integral in (3.4) wird in zwei Teile aufgespalten:

$$I = \int_0^{\infty} \dots = I_{0n} + I_{\infty} = \int_{x_0=0}^{x_n=x_{\max}} \dots + \int_{x_{\max}}^{\infty} \dots \quad (3.5)$$

Dabei bedeutet

- I_{0n} das Integral über die Extrapolationen von $h(x)$ für kleine Werte von x und die Meßkurve (von $x_0 = 0$ bis $x_n = x_{\max}$) und
- I_{∞} das Integral über die Extrapolation von $x = x_{\max}$ bis $x = \infty$.

Das Integral I_{0n} setzt sich seinerseits aus den Integralen über die Intervalle $[x_m, x_{m+1}]$, $m = 0, 1, 2, \dots, n-1$ zusammen:

$$I_{0n} = \sum_{m=0}^{n-1} I_{m,m+1}$$

$$I_{m,m+1} = \int_{x_m}^{x_{m+1}} \dots$$

Wegen der Polstelle des Integranden von (3.4) bei $x = +x_k$ erweist es sich als zweckmäßig, zunächst nicht das Integral (3.4), sondern ein ähnliches zu berechnen:

$$g(x_k) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{h(x) - h(x_k)}{x^2 - x_k^2} dx + \frac{2h(x_k)}{\pi} \cdot \int_0^{\infty} \frac{dx}{x^2 - x_k^2} \quad (3.6)$$

Das zweite Glied der rechten Seite von (3.6) ergibt Null, damit reduziert sich diese Gleichung auf

$$g(x_k) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{h(x) - h(x_k)}{x^2 - x_k^2} dx \quad (3.7)$$

3.3 Reihenentwicklung von $h(x)$

$h(x)$ sei in x_m in eine Potenzreihe entwickelbar.

$$h_m(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_{jm} x^j \quad \text{sei die zugehörige Potenzreihenentwicklung,}$$

a_{jm} die Entwicklungskoeffizienten.

$$h_m(x_k) = \sum_{j=0}^{\infty} a_{jm} x_k^j \quad \text{ist dann die Potenzreihendarstellung des}$$

Funktionswertes an der Stelle x_k .

Hiermit ergibt sich:

$$h_m(x) - h_m(x_k) = \sum_{j=0}^{\infty} a_{jm} (x^j - x_k^j) = \sum_{j=1}^{\infty} a_{jm} (x - x_k) \cdot b_j(x)$$

mit	$b_1(x) = 1$
	$b_2(x) = x_k + x$
	$b_3(x) = x_k^2 + x x_k + x^2$
	$b_4(x) = x_k^3 + x x_k^2 + x^2 x_k + x^3$
	$b_5(x) = x_k^4 + x x_k^3 + x^2 x_k^2 + x^3 x_k + x^4$

Der Integrand von (3.7) ergibt sich damit zu:

$$\frac{h_m(x) - h_m(x_k)}{x^2 - x_k^2} = \frac{1}{x + x_k} \sum_{j=1}^{\infty} a_{jm} b_j(x) \tag{3.8}$$

Umsortieren der Reihenglieder liefert:

$$\begin{aligned} \frac{h_m(x) - h_m(x_k)}{x^2 - x_k^2} = & \left[\frac{1}{x + x_k} \cdot (a_{1m} + a_{3m} x_k^2 + a_{5m} x_k^4 + \dots) \right. \\ & + (a_{2m} + a_{4m} x_k^2 + a_{6m} x_k^4 + \dots) \\ & + x \cdot (a_{3m} + a_{5m} x_k^2 + a_{7m} x_k^4 + \dots) \\ & + x^2 \cdot (a_{4m} + a_{6m} x_k^2 + a_{8m} x_k^4 + \dots) \\ & + \dots \left. \right] \end{aligned} \tag{3.9}$$

Mit

$$\sum_{j=0}^{\infty} a_{2j+l,m} x_k^{2j} \equiv S_{\ell m} \tag{3.10}$$

lautet (3.9) wie folgt:

$$\frac{h_m(x) - h_m(x_k)}{x^2 - x_k^2} = \frac{S_{1m}}{x + x_k} + \sum_{\ell=0}^{\infty} S_{\ell+2,m} x^{\ell} \tag{3.11}$$

3.4 Berechnung des Integrals I_{on}

Integral zwischen x_m und x_{m+1}

Gemäß (3.11) ergibt sich dieses Integral zu:

$$I_{m,m+1} = \int_{x_m}^{x_{m+1}} \dots = S_{1m} \int_{x_m}^{x_{m+1}} \frac{dx}{x+x_k} + \sum_{j=0}^{\infty} \frac{S_{j+2,m}}{j+1} \cdot X^{j+1} \Big|_{x_m}^{x_{m+1}}$$

$$I_{m,m+1} = S_{1m} \ln \frac{x_{m+1} + x_k}{x_m + x_k} + \sum_{j=0}^{\infty} \frac{S_{j+2,m}}{j+1} (x_{m+1}^{j+1} - x_m^{j+1})$$

Integral zwischen x_0 und x_n

$$I_{on} = \sum_{m=0}^{n-1} I_{m,m+1} = \sum_{m=0}^{n-1} \left(S_{1m} \ln \frac{x_{m+1} + x_k}{x_m + x_k} + \sum_{j=0}^{\infty} \frac{S_{j+2,m}}{j+1} (x_{m+1}^{j+1} - x_m^{j+1}) \right) \quad (3.12)$$

Als Abkürzung wird eingeführt

$$R = \sum_{m=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{S_{j+2,m}}{j+1} (x_{m+1}^{j+1} - x_m^{j+1}) \quad (3.13)$$

Damit lautet (3.12)

$$I_{on} = R + \sum_{m=0}^{n-1} S_{1m} \cdot \ln \frac{x_{m+1} + x_k}{x_m + x_k} \quad (3.14)$$

Näherung

Für den Fall, daß die Reihenentwicklungen von $h(x)$ bei den Gliedern x^N abgebrochen werden, liefert (3.14) nicht das richtige Ergebnis. Denn es wurde zunächst davon ausgegangen, daß jede der Potenzreihenentwicklungen von $h(x)$ in den Intervallen $x_m < x < x_{m+1}$ - das sind die Funktionen $h_m(x)$ - für $x=x_k$ den Wert $h_m(x_k)=h(x_k)$ liefert.

Bei einer Näherung ist das jedoch nicht der Fall.

Mit anderen Worten:

berechnet wurde

$$\sum_{m=0}^{n-1} \int_{x_m}^{x_{m+1}} \frac{h_m(x) - h_m(x_k)}{x^2 - x_k^2} dx$$

Es sollte jedoch berechnet werden

$$\sum_{m=0}^{n-1} \int_{x_m}^{x_{m+1}} \frac{h_m(x) - h(x_k)}{x^2 - x_k^2} dx$$

Geht man wieder auf das ursprüngliche Integral (3.4) zurück, ergibt

sich für I_{on} folgender Ausdruck:

$$I_{on} = R + \sum_{m=0}^{n-1} \left(s_{1m} \ln \frac{x_{m+1} + x_k}{x_m + x_k} + \int_{x_m}^{x_{m+1}} \frac{h_m(x_k) dx}{x^2 - x_k^2} \right) \quad (3.15)$$

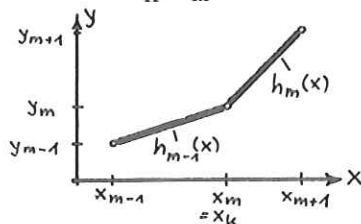
Lösung der Integrale aus (3.15)

Fall I $x_k \notin [x_m, x_{m+1}]$

$$\int_{x_m}^{x_{m+1}} \frac{dx}{x^2 - x_k^2} = \frac{1}{2x_k} \left(\int_{x_m}^{x_{m+1}} \frac{dx}{x - x_k} - \int_{x_m}^{x_{m+1}} \frac{dx}{x + x_k} \right)$$

$$\int_{x_m}^{x_{m+1}} \frac{dx}{x^2 - x_k^2} = \frac{1}{2x_k} \left(\ln \frac{x_{m+1} - x_k}{x_m - x_k} - \ln \frac{x_{m+1} + x_k}{x_m + x_k} \right) \quad (3.16)$$

Fall II $x_k = x_m$



$$h_{k-1}(x_k) = h(x_k) = y_k$$

$$h_k(x_k) = h(x_k) = y_k$$

$$\int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}} \frac{dx}{x - x_k} = \int_{x_{k-1}}^{x_k - x_{k-1}} \frac{dx}{x} + \int_{x_k - x_{k-1}}^{x_{k+1} - x_k} \frac{dx}{x} = \sigma + \ln \frac{x_{k+1} - x_k}{x_k - x_{k-1}}$$

$$\int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}} \frac{dx}{x^2 - x_k^2} = \frac{1}{2x_k} \left(\ln \frac{x_{k+1} - x_k}{x_k - x_{k-1}} - \ln \frac{x_{k+1} + x_k}{x_k + x_{k-1}} \right) \quad (3.17)$$

Endergebnis:

$$I_{on} = R + \frac{1}{2x_k} \cdot \left[\sum_{m=0}^{n-1} (2x_k \cdot s_{1m} - h_m(x_k)) \ln \frac{x_{m+1} + x_k}{x_m + x_k} + h_k(x_k) \ln \frac{x_{k+1} - x_k}{x_k - x_{k-1}} + \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq k-1, k}}^{n-1} h_m(x_k) \ln \frac{x_{m+1} - x_k}{x_m - x_k} \right] \quad (3.18)$$

Mit $h_m(x_k) = s_{0m} + x_k s_{1m} = a_{0m} + a_{1m} x_k + a_{2m} x_k^2 + \dots$

ergibt sich $2x_k s_{1m} - h_m(x_k) = x_k s_{1m} - s_{0m} = -h_m(-x_k)$

$$I_{on} = R + \frac{1}{2x_k} \left[-\sum_{m=0}^{n-1} h_m(-x_k) \ln \frac{x_{m+1} + x_k}{x_m + x_k} + h_k(x_k) \ln |x_{k+1} - x_k| - h_{k-1}(x_k) \ln |x_k - x_{k-1}| + \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq k-1, k}}^{n-1} h_m(x_k) \ln |x_{m+1} - x_k| - \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq k-1, k}}^{n-1} h_m(x_k) \ln |x_m - x_k| \right]$$

$$= R + \frac{1}{2x_k} \left[\sum_{\substack{m=1 \\ m \neq k}}^n h_{m-1}(x_k) \ln |x_m - x_k| - \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq k}}^{n-1} h_m(x_k) \ln |x_m - x_k| - \sum_{m=1}^n h_{m-1}(x_k) \ln (x_m + x_k) + \sum_{m=0}^{n-1} h_m(-x_k) \ln (x_m + x_k) \right]$$

$$I_{on} = R + \frac{1}{2x_k} \left[h_0(-x_k) \ln (x_0 + x_k) + \sum_{m=1}^{n-1} (h_m(-x_k) - h_{m-1}(-x_k)) \ln (x_m + x_k) - h_{n-1}(-x_k) \ln (x_n + x_k) - h_0(x_k) \ln |x_0 - x_k| - \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq k}}^{n-1} (h_m(x_k) - h_{m-1}(x_k)) \ln |x_m - x_k| + h_{n-1}(x_k) \ln |x_n + x_k| \right] \quad (3.19)$$

Unter der Vereinbarung

$$\left. \begin{aligned}
 q_m^+ &= h_m(x_k) - h_{m-1}(x_k) \\
 q_m^- &= h_m(-x_k) - h_{m-1}(-x_k)
 \end{aligned} \right\} m=1,2,\dots,n-1$$

$$\left. \begin{aligned}
 q_0^+ &= h_0(x_0) \\
 q_0^- &= h_0(-x_0) \\
 q_n^+ &= -h_{n-1}(x_k) \\
 q_n^- &= -h_{n-1}(-x_k)
 \end{aligned} \right\}$$

(3.20)

ergibt sich aus (3.19)

$$\boxed{I_{on} = R + \sum_{m=0}^n \frac{q_m^-}{2x_k} \ln(x_m + x_k) - \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq k}}^n \frac{q_m^+}{2x_k} \ln|x_m - x_k|}$$

(3.21)

3.5 Lineare Näherung der Entwicklung von $h(x)$

Es ist nicht sinnvoll bei Meßgenauigkeiten, die in der Größenordnung eines Prozents liegen und bei eng genug liegenden Meßpunkten ($x_{m+1} - x_m < \Delta x$), die Potenzreihenentwicklung mit höheren Gliedern als zweiten Grades zu benutzen.

Aus Gründen der Rechenzeit wird die lineare Näherung gewählt.

Lineare Näherung bedeutet: $a_{jm} \equiv 0$ für alle $j \geq 2$.

Aus (3.10) folgt:

$$s_{0m} = a_{0m}$$

$$s_{1m} = a_{1m}$$

$$s_{jm} = 0 \text{ für alle } j \geq 2$$

Damit folgt aus (3.13)

$$R = 0$$

Gleichung (3.21) reduziert sich damit auf:

$$\boxed{I_{0n} = \sum_{m=0}^n \frac{q_m^-}{2x_k} \cdot \ln(x_m + x_k) - \sum_{\substack{m=0 \\ m \neq k}}^n \frac{q_m^+}{2x_k} \cdot \ln|x_m - x_k|} \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} q_0^+ &= y_0 & ; & \quad q_0^- = y_0 \\ q_m^+ &= (a_{1m} - a_{1,m-1}) \cdot (x_k - x_m) & ; & \quad q_m^- = -(a_{1m} - a_{1,m-1}) \cdot (x_k + x_m) \\ q_n^+ &= -y_n - a_{1,n-1} \cdot (x_k - x_n) & ; & \quad q_n^- = -y_n + a_{1,n-1} \cdot (x_k + x_n) \end{aligned}$$

$$1 \leq m \leq n-1$$

$$a_{1m} = \frac{y_{m+1} - y_m}{x_{m+1} - x_m}$$

3.6 Berechnung des Integrals I_∞

3.6.1 Vorbemerkung

Gemäß Kapitel 3.2 sind drei verschiedene Extrapolationen für $x \rightarrow \infty$ zu unterscheiden:

- (1) $h(x) \sim x^{-2}$
- (2) $h(x) \sim \ln x$
- (3) $h(x) \sim \text{const.}$

Diese Extrapolationen sind an die gegebenen Funktionen anzupassen:

(1) $h(x_n) = y_n = c \cdot x_n^{-2}$

Der Anpassungsfaktor c beträgt demnach: $c = y_n \cdot x_n^2$

Damit lautet die Extrapolationsfunktion $h_e(x)$ für (1):

$$\boxed{h_e(x) = y_n \cdot \left(\frac{x_n}{x}\right)^2} \quad (3.23)$$

(2) $h(x_n) = y_n = \ln(c \cdot x_n^{-\alpha/2})$

Der Exponent α hat nach der Theorie den Wert $\alpha = 4$

$$\ln c = y_n + \ln x_n^{\alpha/2}$$

Die Extrapolationsfunktion $h_e(x)$ für (2) lautet also:

$$\boxed{h_e(x) = y_n + \frac{\alpha}{2} \cdot \ln \frac{x_n}{x}} \quad (3.24)$$

(3) $h(x_n) = y_n = \text{const.}$

Die Extrapolationsfunktion $h_e(x)$ für (3) lautet also:

$$\boxed{h_e(x) = y_n} \quad (3.24A)$$

3.6.2 Extrapolation $h(x) \sim x^{-2}$

Es ist gemäß (3.23) das Integral

$$I_{\infty} = \int_{x_n}^{\infty} y_n \cdot \left(\frac{x_n}{x}\right)^2 \cdot \frac{dx}{x^2 - x_k^2}$$

zu berechnen.

$$\begin{aligned} I_{\infty} &= y_n \cdot x_n^2 \cdot \frac{1}{x_k^2} \cdot \left(\int_{x_n}^{\infty} \frac{dx}{x^2 - x_k^2} - \int_{x_n}^{\infty} \frac{dx}{x^2} \right) \\ &= y_n \cdot \left(\frac{x_n}{x_k}\right)^2 \cdot \left(\lim_{x_p \rightarrow \infty} \frac{1}{2x_k} \left[\ln \frac{x_p - x_k}{x_n - x_k} - \ln \frac{x_p + x_k}{x_n + x_k} \right] + \frac{1}{x} \Big|_{x_n}^{\infty} \right) \\ I_{\infty} &= y_n \cdot \left(\frac{x_n}{x_k}\right)^2 \cdot \left[\frac{1}{2x_k} \cdot \ln \frac{x_n + x_k}{x_n - x_k} - \frac{1}{x_n} \right] \end{aligned}$$

Einführung von

$$p = \frac{x_k}{x_n}$$

liefert

$$\boxed{I_{\infty} = \frac{y_n}{2x_k} \cdot \frac{1}{p^2} \cdot \left(\ln \frac{1+p}{1-p} - 2p \right)} \quad (3.25)$$

3.6.3 Extrapolation $h(x) \sim \ln x$

Es ist gemäß (3.24) das Integral

$$I_\infty = \int_{x_n}^{\infty} \left(y_n + \frac{\alpha}{2} \ln \frac{x_n}{x} \right) \frac{dx}{x^2 - x_k^2}$$

zu berechnen.

$$\begin{aligned} I_\infty &= \left(y_n + \frac{\alpha}{2} \ln \frac{x_n}{x_k} \right) \int_{x_n}^{\infty} \frac{dx}{x^2 - x_k^2} + \frac{\alpha}{2} \int_{x_n}^{\infty} \frac{\ln \frac{x_k}{x}}{x^2 - x_k^2} dx \\ &= \left(y_n + \frac{\alpha}{2} \ln \frac{x_n}{x_k} \right) \frac{1}{2x_k} \lim_{x_p \rightarrow \infty} \left[\ln \frac{x_p - x_k}{x_n - x_k} - \ln \frac{x_p + x_k}{x_n + x_k} \right] - \frac{\alpha}{2} \cdot \frac{1}{x_k} \int_0^{\frac{x_k}{x_n}} \frac{\ln x \cdot dx}{x^2 - 1} \\ &\quad \left| \begin{array}{l} p = \frac{x_k}{x_n} \end{array} \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I_\infty &= \left(y_n - \frac{\alpha}{2} \ln p \right) \cdot \frac{1}{2x_k} \cdot \ln \frac{1+p}{1-p} - \frac{\alpha}{2x_k} \cdot Y \\ &\quad \left| \begin{array}{l} Y = \int_0^p \frac{\ln x}{x^2 - 1} dx \end{array} \right. \end{aligned}$$

Berechnung von Y:

1. Methode: Partielle Integration

$$\begin{aligned} Y &= \frac{1}{2} \ln x \ln \frac{1-x}{1+x} \Big|_0^p - \frac{1}{2} \int_0^p \frac{\ln \frac{1-x}{1+x}}{x} dx \\ Y &= \frac{1}{2} \ln p \ln \frac{1-p}{1+p} - \frac{1}{2} \lim_{x \rightarrow 0} \underbrace{\left(\ln x \ln \frac{1-x}{1+x} \right)}_{=0} + \frac{1}{2} \int_0^p \frac{\ln \frac{1+x}{1-x}}{x} dx \\ \int_0^p \frac{1}{x} \ln \frac{1+x}{1-x} dx &= \int_0^p \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2x^{2n}}{2n+1} dx = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^p \frac{x^{2n} dx}{2n+1} = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)^2} \Big|_0^p = 2 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{p^{2j-1}}{(2j-1)^2} \\ Y &= \frac{1}{2} \ln p \ln \frac{1-p}{1+p} + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{p^{2j-1}}{(2j-1)^2} \end{aligned}$$

2. Methode: Koordinatentransformation

$$x = \frac{1-w}{1+w} \quad \Leftrightarrow \quad w = \frac{1-x}{1+x}$$

$$dx = -\frac{2 dw}{(1+w)^2}$$

$$Y = \int_1^{\frac{1-p}{1+p}} \frac{\ln \frac{1-w}{1+w} \cdot \left(-\frac{2 dw}{(1+w)^2}\right)}{\left(\frac{1-w}{1+w}\right)^2 - 1} = \frac{1}{2} \int_1^{\frac{1-p}{1+p}} \frac{\ln \frac{1-w}{1+w}}{w} dw$$

Gemäß (3.27) ergibt sich:

$$Y = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{w^{2n+1}}{(2n+1)^2} \Big|_1^{\frac{1-p}{1+p}} = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\left(\frac{1-p}{1+p}\right)^{2j-1}}{(2j-1)^2} - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{(2j-1)^2}$$

Wegen $\sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{(2j-1)^2} = \frac{\pi^2}{8}$ folgt:

$$Y = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\left(\frac{1-p}{1+p}\right)^{2j-1}}{(2j-1)^2} - \frac{\pi^2}{8} \tag{3.29}$$

Mit (3.28), (3.29) ergibt sich aus (3.26):

Nach Methode 1:

$$I_{\infty} = \left(y_n - \frac{\alpha}{2} \ln p\right) \frac{1}{2x_k} \ln \frac{1+p}{1-p} - \frac{\alpha}{2x_k} \cdot \left(\frac{1}{2} \ln p \ln \frac{1-p}{1+p}\right) - \frac{\alpha}{2x_k} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{p^{2j-1}}{(2j-1)^2}$$

$$I_{\infty} = -\frac{1}{2x_k} \left[+y_n \ln \frac{1-p}{1+p} + \alpha \sum_{j=1}^{\infty} \frac{p^{2j-1}}{(2j-1)^2} \right] \tag{3.30}$$

Nach Methode 2:

$$I_{\infty} = \frac{1}{2x_k} \left[\left(y_n - \frac{\alpha}{2} \ln p\right) \ln \frac{1+p}{1-p} - \alpha \left(\sum_{j=1}^{\infty} \frac{\left(\frac{1-p}{1+p}\right)^{2j-1}}{(2j-1)^2} - \frac{\pi^2}{8} \right) \right]$$

$$I_{\infty} = -\frac{1}{2x_k} \left[y_n \ln \frac{1-p}{1+p} - \alpha \left(\frac{1}{2} \ln p \ln \frac{1-p}{1+p} + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\left(\frac{1-p}{1+p}\right)^{2j-1}}{(2j-1)^2} - \frac{\pi^2}{8} \right) \right] \tag{3.31}$$

Der Extrapolationsterm I_∞ lässt sich schreiben als

$$I_\infty = -\frac{1}{2x_k} \left(y_n \cdot \ln \frac{1-p}{1+p} + \alpha \cdot F(p) \right)$$

$$p = \frac{x_k}{x_n}$$

$$F(p) = \begin{cases} s(p) & (a) \\ \frac{\pi^2}{8} - \frac{1}{2} \ln p \ln \frac{1-p}{1+p} - s\left(\frac{1-p}{1+p}\right) & (b) \end{cases}$$

$$s(x) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{x^{2j-1}}{(2j-1)^2}$$

Im Intervall $p \in (0, \sqrt{2}-1)$ konvergiert (a) besser im
Intervall $p \in (\sqrt{2}-1, 1)$ dagegen (b).

3.6.4 Extrapolation für $h(x) \sim \text{const.}$

Es ist gemäß (3.24A) das Integral

$$I_\infty = \int_{x_n}^{\infty} \frac{y_n dx}{x^2 - x_k^2}$$

zu berechnen:

$$I_\infty = \frac{y_n}{2x_k} \cdot \ln \frac{1+p}{1-p}$$

$$p = \frac{x_k}{x_n}$$

}

3.7 Endergebnis

3.7.1 Vorbemerkung

Unter der Annahme

$$x_0 = 0 < x_1$$

$$y_0 = y_1, \quad (y_i = h(x_i))$$

(vgl. oben) gilt:

$$q_0^- \ln(x_0 + x_k) - q_0^+ \ln|x_0 - x_k| = y_0 (\ln x_k - \ln x_k) = 0$$

$$a_{10} = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} = 0$$

Wird ferner a_{1n} als Null definiert und der Index 1 weggelassen ($a_{1m} = a_m$), dann ergibt sich aus (3.22):

$$I_{0n} = -\frac{1}{2x_k} \left[\sum_{m=1}^n (a_m - a_{m-1}) \cdot (x_k + x_m) \cdot \ln(x_k + x_m) \right. \\ \left. + \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq k}}^n (a_m - a_{m-1}) \cdot (x_k - x_m) \cdot \ln|x_k - x_m| \right. \\ \left. - y_n \cdot \ln \frac{x_n - x_k}{x_n + x_k} \right] \quad (3.33)$$

$$I_{0n} = -\frac{1}{2x_k} \left(T - y_n \ln \frac{x_n - x_k}{x_n + x_k} \right) \quad (3.34)$$

$$T = \sum_{m=1}^n (a_m - a_{m-1}) (x_k + x_m) \ln(x_k + x_m) \\ + \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq k}}^n (a_m - a_{m-1}) (x_k - x_m) \ln|x_k - x_m|$$

$$a_0 = a_n = 0$$

$$a_m = a_{1m} = \frac{y_{m+1} - y_m}{x_{m+1} - x_m} \quad \text{für } 1 \leq m \leq n-1$$

$$y_m = h(x_m)$$

3.7.2 Ergebnis für $h(x) \sim x^{-2}$

Laut (3.4), (3.5), (3.25) und (3.34) gilt

$$\begin{aligned}
 g(x_k) &= \frac{2}{\pi} (I_{0n} + I_{\infty}) \\
 &= -\frac{1}{\pi x_k} \left[T - y_n \ln \frac{1-p}{1+p} + \frac{y_n}{p^2} \left(\ln \frac{1-p}{1+p} + 2p \right) \right] \\
 g(x_k) &= -\frac{1}{\pi x_k} \left[T + y_n \left\{ \left(\frac{1}{p^2} - 1 \right) \ln \frac{1-p}{1+p} + \frac{2}{p} \right\} \right] \\
 &\left. \begin{array}{l} p = \frac{x_k}{x_n} \\ T \text{ laut (3.34)} \end{array} \right\} \quad (3.35)
 \end{aligned}$$

Aus (3.35) wird die Funktion

$$F(x) = \left(\frac{1}{x^2} - 1 \right) \ln \frac{1-x}{1+x} + \frac{2}{x} \quad (3.36)$$

genauer betrachtet

Reihenentwicklung für $x = 0$:

$$\begin{aligned}
 F(x) &= \frac{1}{x^2} \left[-2(1-x^2) \cdot \sum_{j=0}^{\infty} \frac{x^{2j+1}}{2j+1} + 2x \right] \\
 &= \frac{1}{x^2} \left[-2 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{x^{2j+1}}{2j+1} + 2 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{x^{2j+3}}{2j+1} + 2x \right] \\
 &= \frac{1}{x^2} \left[-2 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{x^{2j+1}}{2j+1} + 2 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{x^{2j+1}}{2j-1} + 2x \right] \\
 &= \frac{1}{x^2} \left[4 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{x^{2j+1}}{4j^2-1} - 2x + 2x \right] \\
 F(x) &= 4x \sum_{j=1}^{\infty} \frac{x^{2j-2}}{4j^2-1} \quad (3.37)
 \end{aligned}$$

Für kleine Werte von x vermeidet (3.37) Rundungsfehler.

3.7.3 Ergebnis für $h(x) \sim \ln x$

Laut (3.4), (3.5), (3.32) und (3.34) gilt

$$g(x_k) = -\frac{1}{\pi x_k} \left[T - y_n \ln \frac{1-p}{1+p} + y_n \ln \frac{1-p}{1+p} + \alpha F(p) \right]$$

$$g(x_k) = -\frac{1}{\pi x_k} [T + \alpha F(p)]$$

$$\left. \begin{array}{l} p = \frac{x_k}{x_n} \\ T \text{ laut (3.34)} \\ F(p) \text{ laut (3.32)} \end{array} \right\} \quad (3.38)$$

3.7.4 Ergebnis für $h(x) \sim \text{const.}$

Laut (3.4), (3.5), (3.32A) und (3.34) gilt:

$$g(x_k) = +\frac{2}{\pi} \left(-\frac{1}{2x_k} \cdot T + \frac{y_n}{2x_k} \ln \frac{1-p}{1+p} - \frac{y_n}{2x_k} \ln \frac{1-p}{1+p} \right)$$

$$g(x_k) = -\frac{1}{\pi x_k} \cdot T$$

$$\left. \begin{array}{l} T \text{ laut (3.34)} \end{array} \right\} \quad (3.39)$$

3.8 Zusammenfassung der Ergebnisse

Die Resultate der Kramers-Kronig-Integration lassen sich wie folgt zusammenfassen:

$$g(x_k) = c \cdot [T + d \cdot F(p)]$$

$$\left. \begin{aligned} c &= -\frac{1}{\pi x_k} \\ T &= \sum_{m=1}^n (a_m - a_{m-1})(x_k + x_m) \ln(x_k + x_m) \\ &\quad + \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq k}}^n (a_m - a_{m-1})(x_k - x_m) \ln|x_k - x_m| \\ a_0 = a_n &= 0 \quad ; \quad a_m = \frac{y_{m+1} - y_m}{x_{m+1} - x_m} \quad \text{für } 1 \leq m \leq n-1 ; \\ y_m &= h(x_m) \\ p &= \frac{x_k}{x_n} \\ d, F(p) &\text{ siehe unten} \end{aligned} \right\} \quad (3.40)$$

Für Funktionen $h(x)$ mit $h(x) \sim x^{-2}$ für $x \rightarrow \infty$ gilt:

$$\left. \begin{aligned} d &= y_n = h(x_n) \\ F(p) &= \begin{cases} \left(\frac{1}{p^2} - 1\right) \ln \frac{1-p}{1+p} + \frac{2}{p} & (a) \\ 4p \cdot \sum_{j=1}^{\infty} \frac{p^{2j-2}}{4j^2-1} & (b) \end{cases} \end{aligned} \right\} \quad (3.41)$$

(a) Vermeidet Rundungsfehler für kleine p

Für Funktionen $h(x)$ mit $h(x) \sim \ln x$ für $x \rightarrow \infty$ gilt:

$$\left. \begin{aligned}
 d &= \alpha \text{ (laut Theorie gilt für Reflektivität } R: \alpha = 4) \\
 F(\rho) &= \left\{ \begin{array}{ll}
 s(\rho) & \text{(a)} \\
 \frac{\pi^2}{8} - \frac{1}{2} \ln \rho \ln \frac{1-\rho}{1+\rho} - s\left(\frac{1-\rho}{1+\rho}\right) & \text{(b)}
 \end{array} \right. & (3.42) \\
 s(x) &= \sum_{j=1}^{\infty} \frac{x^{2j-1}}{(2j-1)^2}
 \end{aligned} \right\}$$

(a) konvergiert besser für $\rho \in [0, \sqrt{2}-1[$

(b) konvergiert besser für $\rho \in]\sqrt{2}-1, 1]$

für $\rho = \sqrt{2}-1$ ist die Konvergenz von (a) und (b) gleich gut

Für Funktionen $h(x)$ mit $h(x) \sim \text{const.}$ für $x \rightarrow \infty$ gilt:

$$d = 0 \quad (3.43)$$

Mit Hilfe der Gleichungen (3.40) bis (3.43) lassen sich alle in Tabelle 3.1 aufgeführten Umrechnungen durchführen.

3.9 Anpassung der Endergebnisse an die Rechnergenauigkeit

Hier wird vor allem die Funktion $F(p)$ betrachtet, und zwar speziell deren Reihenentwicklungen in (3.41b) und (3.42).

Die relative Genauigkeit der Größen REAL 4 beträgt bei IBM 360 $6,3 \cdot 10^{-8}$. Daher können die Reihenentwicklungen in (3.41b) und (3.42) abgebrochen werden, wenn die Größe des Restgliedes das $6,3 \cdot 10^{-8}$ -fache des ersten Glieds unterschreitet. Der Einfachheit halber wird die Restgliedabschätzung für die Fälle der langsamsten Konvergenz durchgeführt. Im zugelassenen Wertebereich für p ist das sowohl bei der Entwicklung in (3.41b) als auch in den Entwicklungen von (3.42) für den Wert $p = \sqrt{2}-1$ der Fall.

Entwicklung in (3.41b)

$$4p \cdot \sum_{j=1}^{\infty} \frac{p^{2j-2}}{4j^2-1} \quad ; \quad q_j = \frac{p^{2j-2}}{4j^2-1} \quad ; \quad p = \sqrt{2}-1 = 0,414.$$

j	q_j/q_1	benötigte Genauigkeit von Glied j	Koeffizient $4/(4j^2-1)$ in der benötigten Genauigkeit
1	-1	$6,3 \cdot 10^{-8}$	1,333333
2	$3,42 \cdot 10^{-2}$	$1,8 \cdot 10^{-6}$	0,2666667
3	$2,50 \cdot 10^{-3}$	$2,5 \cdot 10^{-5}$	0,11429
4	$2,38 \cdot 10^{-4}$	$2,6 \cdot 10^{-4}$	0,06349
5	$2,59 \cdot 10^{-5}$	$2,4 \cdot 10^{-3}$	0,0404
6	$3,06 \cdot 10^{-6}$	$2,0 \cdot 10^{-2}$	0,028
7	$3,85 \cdot 10^{-7}$	$1,6 \cdot 10^{-1}$	0,02
8	$5,00 \cdot 10^{-8}$		

Benutzte Summe:

$$F(p) = p(1,333333 + p^2(.2666667 + p^2(.11429 + p^2(.06349 + p^2(.0404 + p^2(.028 + p^2(.02))))))$$

Entwicklung in (3.42)

$$\sum_{j=1}^{\infty} \frac{p^{2j-1}}{(2j-1)^2} \quad ; \quad q_j = \frac{p^{2j-1}}{(2j-1)^2} \quad ; \quad p = \sqrt{2}-1 = 0.414$$

j	q_j/q_1	benötigte Genauigkeit von Glied j	Koeffizient $2/(2j-1)^2$ in der benötigten Genauigkeit
1	1	$6,3 \cdot 10^{-8}$	2.
2	$1,90 \cdot 10^{-2}$	$3,3 \cdot 10^{-6}$.2222222
3	$1,17 \cdot 10^{-3}$	$5,4 \cdot 10^{-5}$.08
4	$1,02 \cdot 10^{-4}$	$6,2 \cdot 10^{-4}$.040816
5	$1,06 \cdot 10^{-5}$	$5,9 \cdot 10^{-3}$.02469
6	$1,20 \cdot 10^{-6}$	$5,2 \cdot 10^{-2}$.0165
7	$1,48 \cdot 10^{-7}$	$4,2 \cdot 10^{-1}$.012
8	$1,90 \cdot 10^{-8}$		

Benutzte Summe:

$$2 \cdot s(p) = p(2. + p^2(.2222222 + p^2(.08 + p^2(.040816 + p^2(.02469 + p^2(.0165 + p^2.012))))))$$

3.10 Testergebnisse und Fehleranalyse

Mit Hilfe des Oszillatormodells wurden Testdaten erzeugt. In diesem Modell gilt für die Dielektrizitätskonstante (vgl. Kap. 2.5.2):

$$\hat{\epsilon}(E) = 1 + E_p^2 \sum_j \frac{f_j}{E_j^2 - E^2 - iE\hbar\Gamma_j} \quad (3.44)$$

Die Ausgangsdaten für die Kramers-Kronig-Analyse - Reflektivität, Transmissivität und Absorption - wurden aus ϵ_1 und ϵ_2 (vgl. Kap. 2.3) berechnet. Die in Fig. 3.1a bis 3.3a dargestellten Daten wurden mit folgenden Parametern gewonnen:

$E_p = 7 \text{ eV} \quad j = 3$					
f_0	0.4	E_0	0 eV	$\hbar\Gamma_0$	0.5 eV
f_1	0.2	E_1	8 eV	$\hbar\Gamma_1$	2.0 eV
f_2	0.1	E_2	10 eV	$\hbar\Gamma_2$	1.0 eV
f_3	0.3	E_3	20 eV	$\hbar\Gamma_3$	3.0 eV

Die mit Kramers-Kronig-Analyse bestimmten optischen Konstanten wurden mit den direkt aus (3.44) berechneten Spektren verglichen. Das ist in Fig. 3.1b bis 3.3b am Beispiel von n , dem Realteil des Brechungsindex, dargestellt. Der Fehler bei der Berechnung von n (Kramers-Kronig) gegenüber dem exakt richtigen $n(\text{Th})$ gemäß (3.44) ist in den Fig. 2.1a bis 2.3a eingezeichnet:

$$\text{Fehler \%} = \frac{n(\text{Th}) - n(\text{KK})}{n(\text{Th})} * 100$$

Die größten Fehler treten bei Transmissions- und Reflexionsausgangsdaten auf, und zwar im Bereich zwischen dem Beitrag der "freien Metallelektronen" ($E_0 = 0 \text{ eV}$) und dem Einsatz des ersten Übergangs bei E_1 , in dem die Ausgangsdaten sich um 3 bis 4 Zehnerpotenzen ändern. So drastische Änderungen wie in dieser Modellrechnung werden bei gemessenen Spektren an realen Substanzen selten auftreten. Über den gesamten Bereich sind die Fehler bei Absorptionsausgangsdaten am

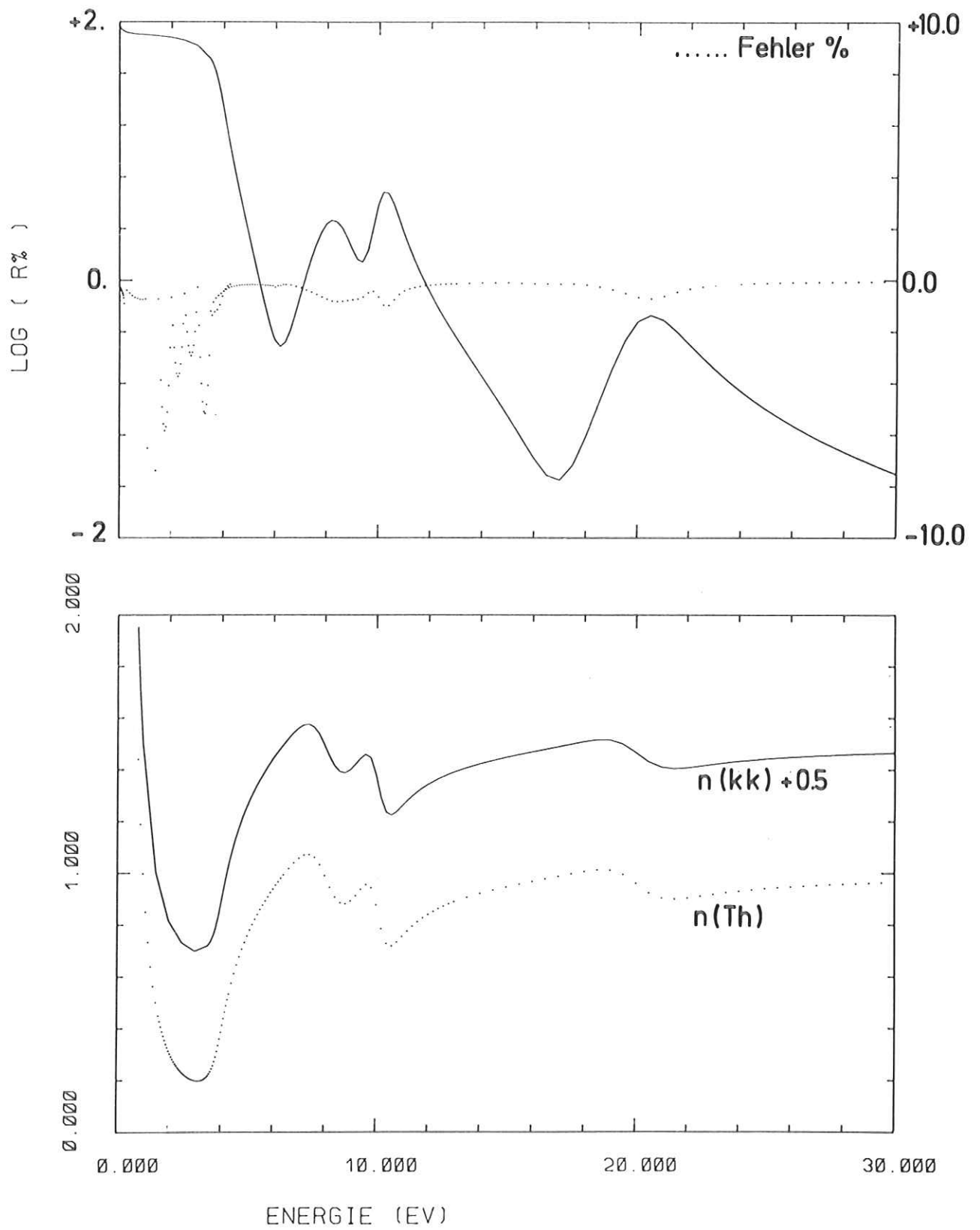


Fig. 3.1: Testergebnisse (Reflexionsausgangsdaten)

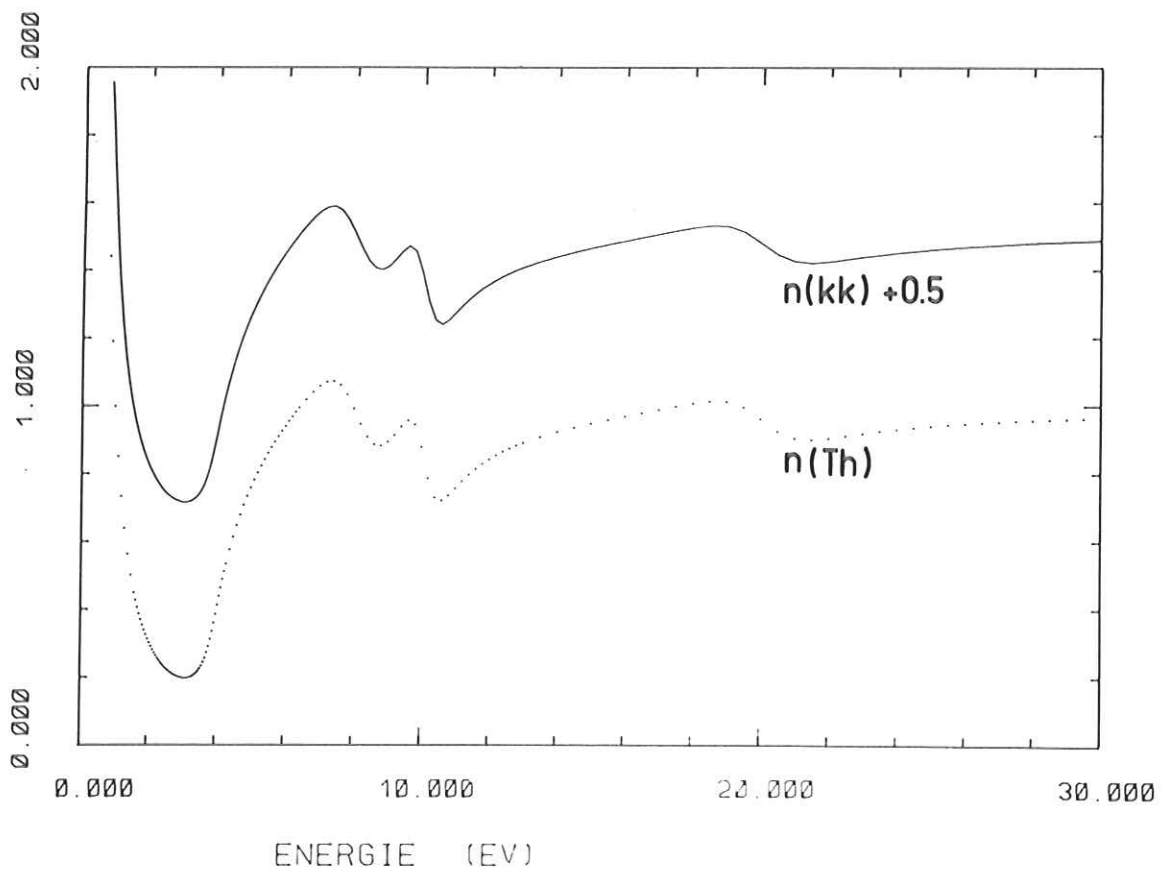
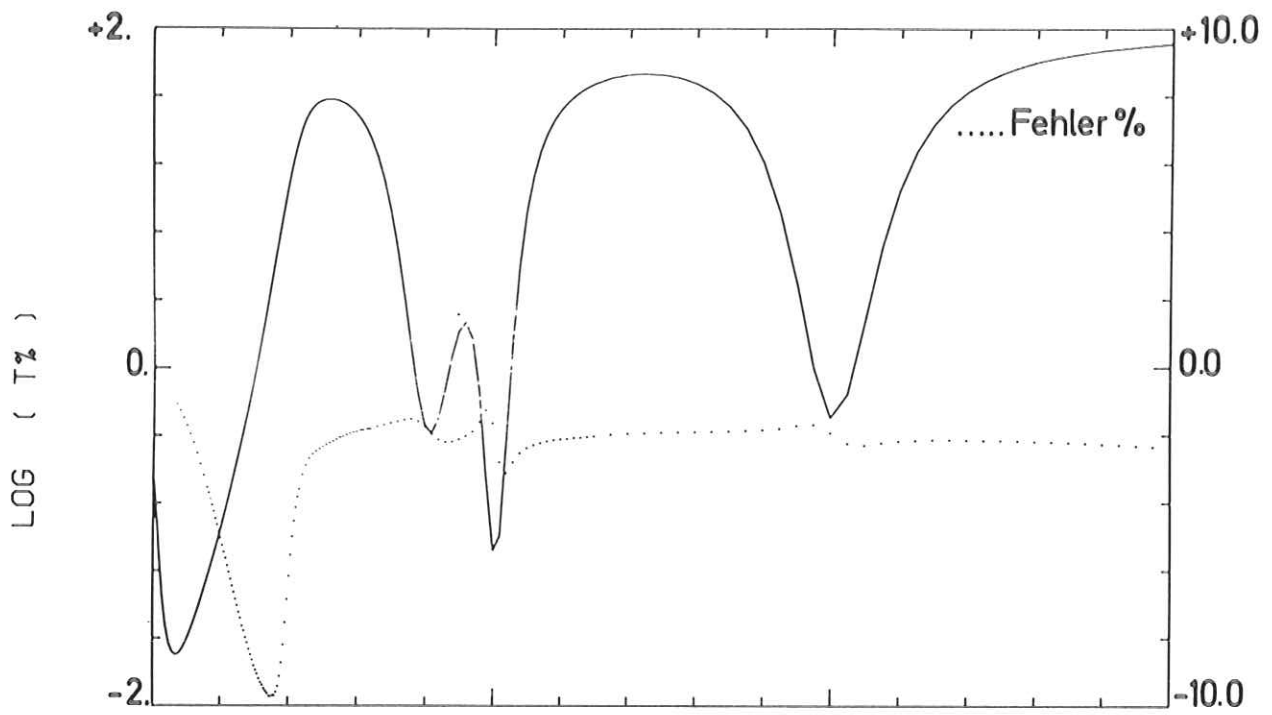
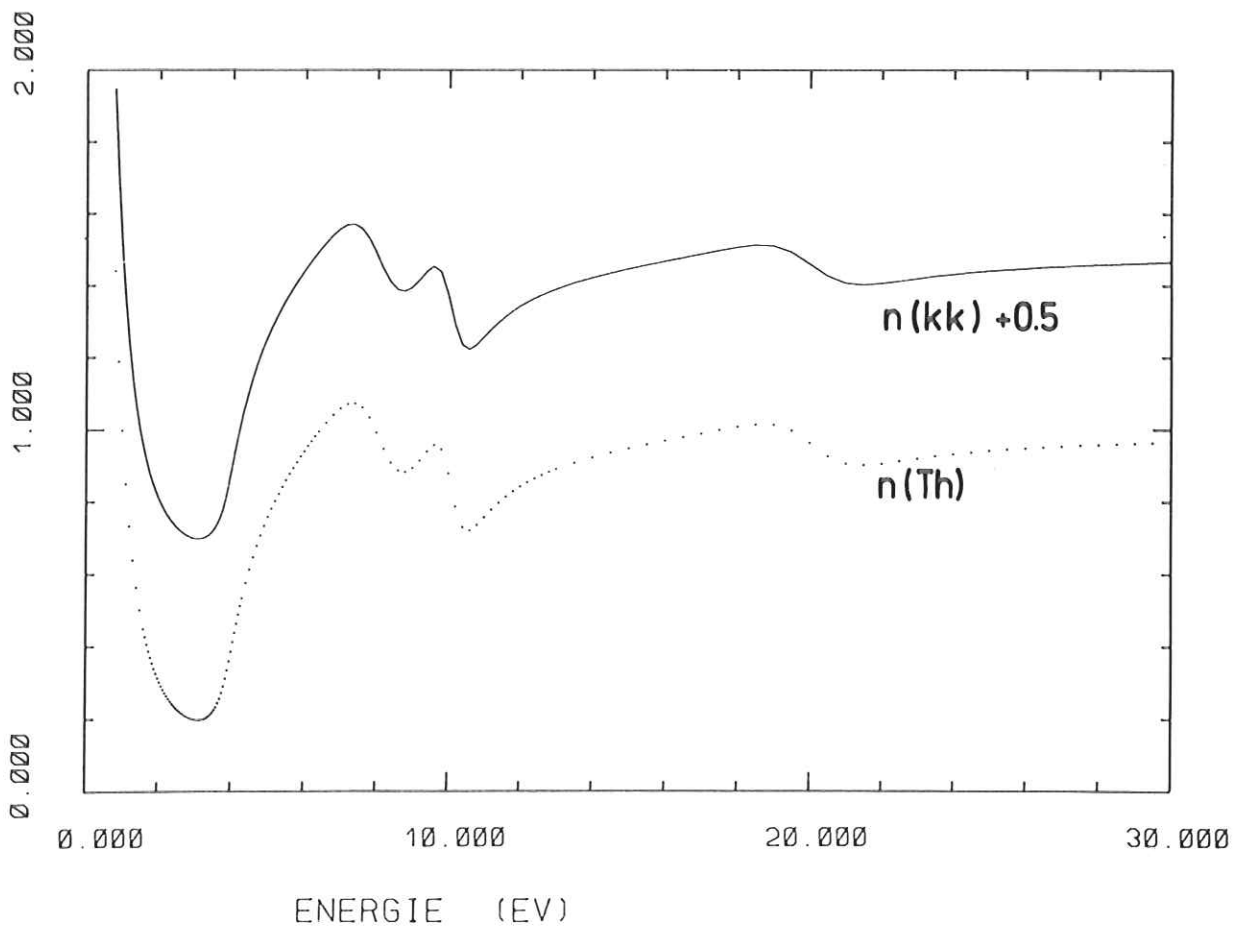
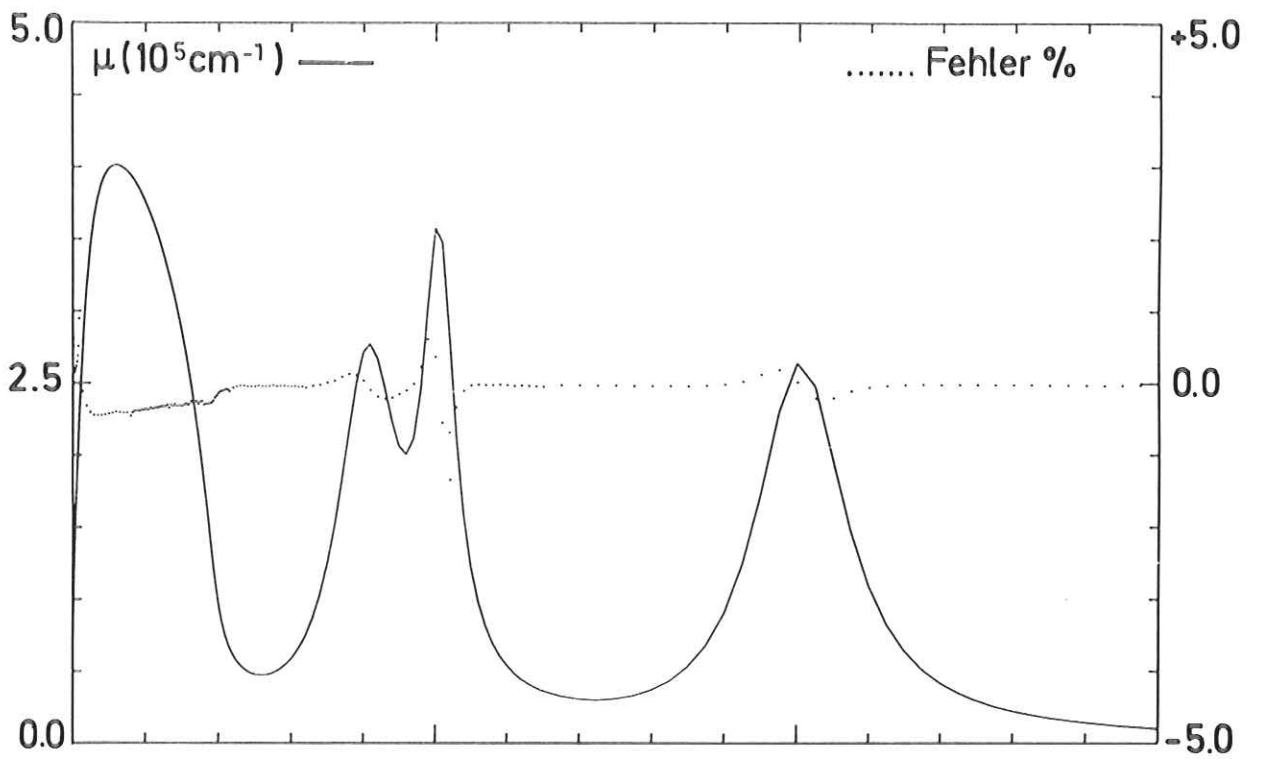


Fig. 3.2: Testergebnisse (Transmissionsausgangsdaten)



geringsten (+ 3% bei 0 eV, $\pm 0,5$ % im Bereich von 7 eV bis 11 eV und $\pm 0,2$ % im Bereich des dritten Oszillators bei 20 eV).

Die hier an einem willkürlichen Beispiel durchgeführte Fehleranalyse kann auch mit Ergebnissen durchgeführt werden, die von echten Meßergebnissen stammen, weil man das gemessene Spektrum bei geeigneter Wahl der Parameter in (3.44) beliebig genau mit dem Oszillatormodell simulieren kann.

4. On-line Benutzung der Programme

4.1 Allgemeine Bemerkung zur on-line Verbindung

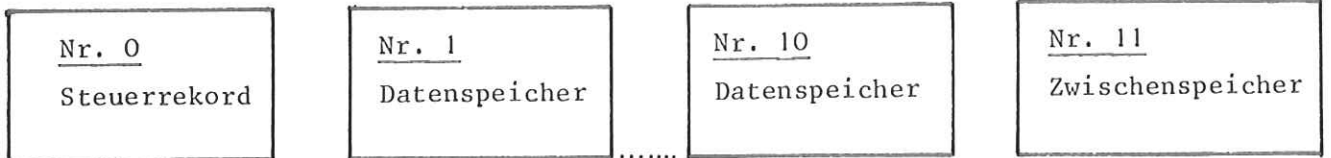
Das Programm KRAMER ist für den Dialogverkehr ausgelegt, d.h. der Benutzer wird von dem Programm aufgefordert, aus einer Reihe von Möglichkeiten eine auszuwählen und die dazu angeforderten Aktivitäten zu ergreifen. Alle Anweisungen werden deshalb selbst erklärend auf dem Bildschirm dargestellt. Die Befehle werden über das keyboard des Fernschreibers (Teletype) eingegeben.

Grundsätzlich ist folgendes zu beachten:

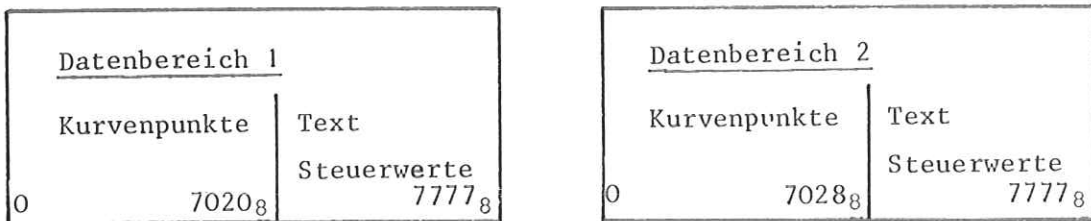
- a) Die IBM sollte nicht unnötig belastet werden. Bislang gibt es dort keine Prioritätsabarbeitung nach Haupt- und Nebenbenutzern, sondern durch interne Vereinbarung wird die Zentraleinheit der Rechenmaschine nach 1 sec. geräumt, um anderen Benutzern den Zugriff zu ermöglichen (bei der Integralauswertung wird sich dann automatisch in die Warteschlange wieder eingereiht).
- b) Die Mächtigkeit in der Zahlendarstellung ist unterschiedlich in der IBM und PDP ($\sim 10^{-7}$ bis 10^{10} bzw. 10^{-3} bis 10^3), dies sollte bei der Auswertung berücksichtigt werden.
- c) Es existiert folgende Speicherhierarchie IBM-PDP (Fig. 4.1), je Speichereinheit ist 1 Kurve zu speichern (max. 900 Punkte). Auf der IBM-Seite steht permanent ein schneller Massenspeicher (Platte, 12x7200 byte groß, PDA.F41.SPECTRA) zur Verfügung. Dieser ist unterteilt in 10 Arbeitsspeicher (genannte Rekords, durchnumeriert von 1 bis 10), einen Steuerrekord (Nr. \emptyset) und 1 Zwischenspeicherrekord (Nr. 11). Zu diesen Speichern haben alle F41-Programme Zugriff, mit dem Neuschreiben werden die alten Werte gelöscht.

Zwei "Bänke" der PDP mit 4096 Worten à 12 bit dienen als Speicher für Kurven (einschließlich Displaysteuerwerten und Texten). Diese Speicher heißen Datenbereich 1 bzw. 2. Kurven, die hier abgespeichert sind, können auf dem Bildschirm dargestellt werden. Massenspeicher auf Dec-tape: Je Magnetband können 40 Kurven gespeichert werden, einschließlich Text und Displaysteuerwerten.

IBM: direct access file



PDP: Bank 2 und 3



PDP: DEC-tape

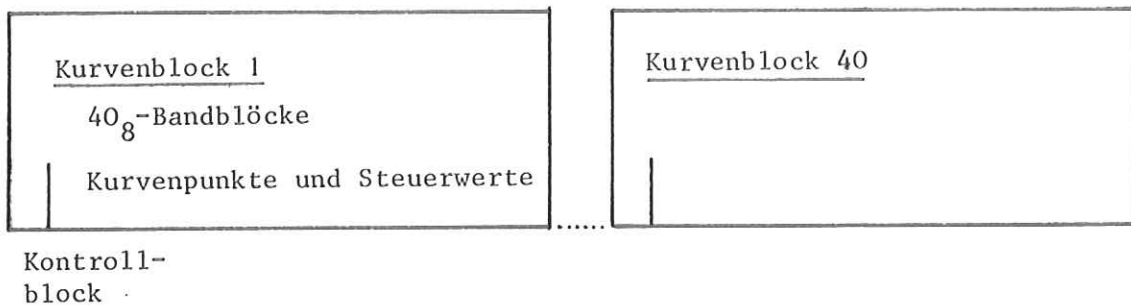


Fig. 4.1 Speicherorganisation

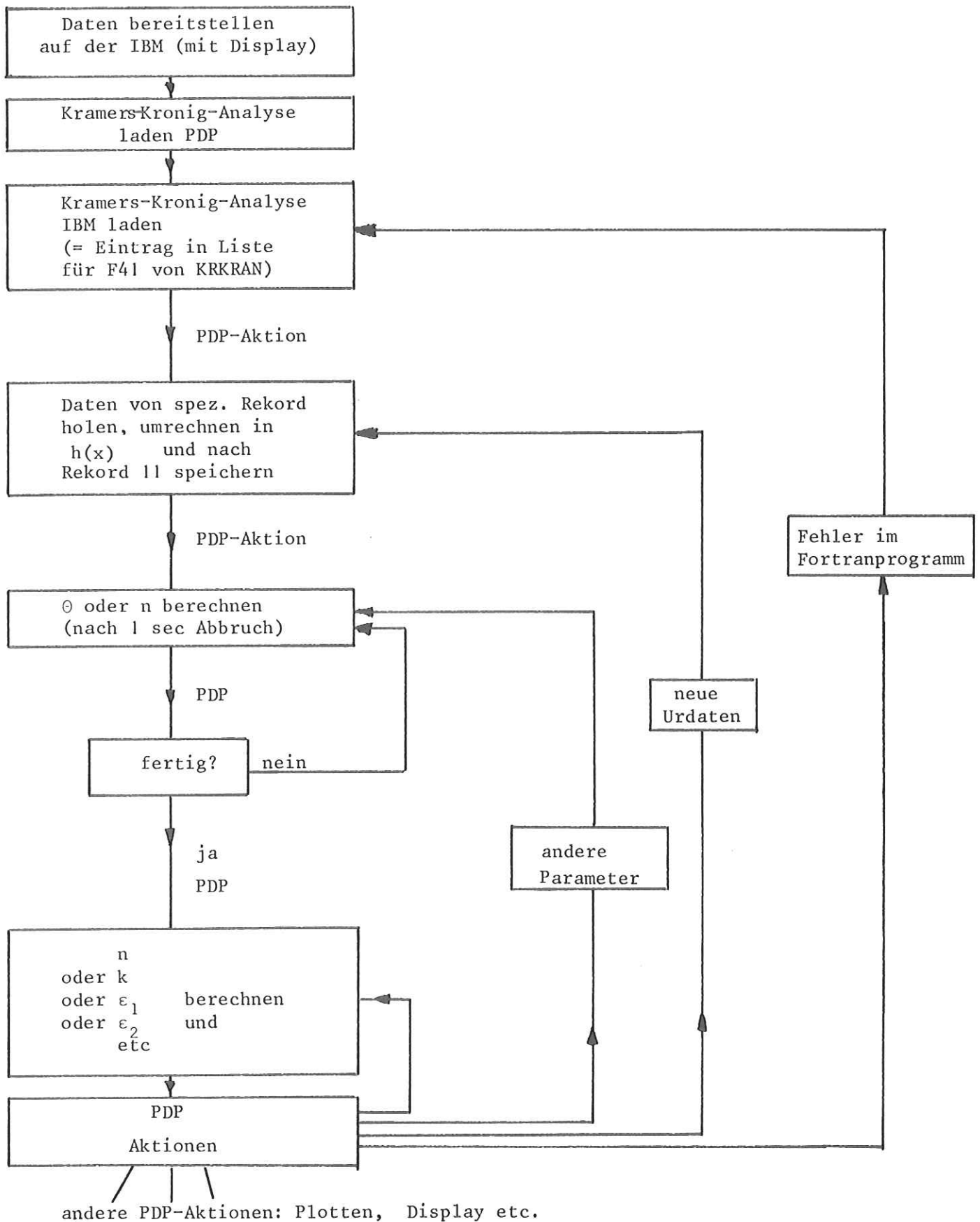


Fig. 4.2 Prinzipieller Ablauf einer Kramers-Kronig-Analyse

Der prinzipielle Ablauf einer Kramers-Kronig-Analyse ist in Fig. 4.2 dargestellt: Nach dem Laden des Programms KRAMER in die PDP vom DEC-tape F41/SYSTEM, wird für F41 fest das Fortranprogramm zugeordnet, d.h. der Name des Programms wird in eine Liste eingetragen; beim 1. Rechenaufruf wird das Programm in den Kernspeicher geladen und bleibt dort so lange, bis der nächste Benutzer im on-line Verkehr es überschreibt. Der Name des Programms bleibt aber während der ganzen Benutzung von Kramer in der Liste, es sei denn, durch einen Fortranfehler wird das Fortranfehlerpaket für F41 geladen. Dann werden die Eingabedaten von dem gewählten IBM-Rekord geholt, in Koeffizienten für die Integralrechnung umgerechnet (Kap. 3.9). Diese Werte werden dann in Rekord 11 (vgl. Fig. 4.1) gespeichert und von dort bei der folgenden Berechnung des Dispersionsintegrals benutzt. Die Ergebnisse des Dispersionsintegrals werden ebenfalls in Rekord 11 gespeichert und von dort zur Berechnung der optischen bzw. dielektrischen Größen geladen.

4.2 Laden des Programms KRAMER

Zum Laden des Programms KRAMER muß

- a) das Band F41/System auf einer Bandeinheit montiert sein
- b) diese Bandeinheit die Nummer 0 haben
- c) die entsprechenden Schalter an der Bandeinheit auf "write-lock" und "remote" gestellt sein.

Das Programm wird dann geladen:

- a) entweder durch Aufruf von DSPLAY, PLOTTR oder TELTYP oder
- b) wenn SUPEDT geladen war: CTRL+A drücken (Band läuft auf Anfang)
KRAMER und Return drücken oder
- c) Maschine war aus bzw. kein Programm geladen: Teletype auf "line" schalten
Schlüssel an der PDP nach rechts drehen (Power), Schalter SW am Keyboard der PDP hoch runter schalten.

Nach allen Aktionen wird auf dem Systemband das Programm KRAMER gesucht, in den Kernspeicher geladen und gestartet. Hat man dann die Frage, ob man das Programm wirklich benutzen will, mit ja beantwortet, wird auf der IBM das zugeordnete Fortranprogramm aktiviert.

4.3 Laden einer Kurve

Vor der Berechnung z.B. der Phase Θ oder des Brechungsindex n werden die Intensitätswerte (Reflektivitäten R , Transmissivitäten T oder Absorptionskoeffizienten μ) umgerechnet und in Rekord 11 der IBM gespeichert. Gleichzeitig werden die Ausgangswerte zur PDP zurücktransformiert, um dem Benutzer die Möglichkeit der Datenkontrolle zu geben. Dazu müssen die drei folgenden Fragen beantwortet werden:

b) von welchem Typ die Daten sind:

Reflexionsdaten	(Intensitätswerte in abs. Einheiten)	(R)
Reflexionsdaten	(Intensitätswerte in Prozent)	(P)
Absorptionsdaten	(Intensitätswerte in 10^5 cm^{-1})	(A)
Transmissionsdaten	(Intensitätswerte in abs. Einheiten)	(T)
Transmissionsdaten	(Intensitätswerte in Prozent)	(U)

(die eingeklammerten Buchstaben geben die Teletype-Taste an, die gedrückt werden muß)

c) in welchen Datenbereich (1 oder 2) der PDP die IBM-Werte transferiert werden sollen.

Nach der Beantwortung dieser Fragen wird die IBM-Verbindung hergestellt und die Umrechnung vorgenommen. Anschließend werden die Urdaten zur PDP transferiert und nach automatischer Berechnung der Minimal- und Maximalwerte als Kurve im Hauptbild 1 gezeigt.

4.4 Hauptanzeigen des Displays

Es gibt eine Wartestelle im Programm, von der alle Aktionen gestartet werden können. Wenn sich das Programm in diesem Zustand befindet, wird auf dem Display entweder die in Bild 4.3 oder 4.4 gezeigte Information dargestellt (im folgenden Hauptbild 1 bzw. 2 genannt). Das Hauptbild 1 gibt neben der gezeigten Kurve mit

2 CTRL+U KLARTEXT
KNR: 5
THETA AR REFLEKTION TEST

NULL BEI: .465

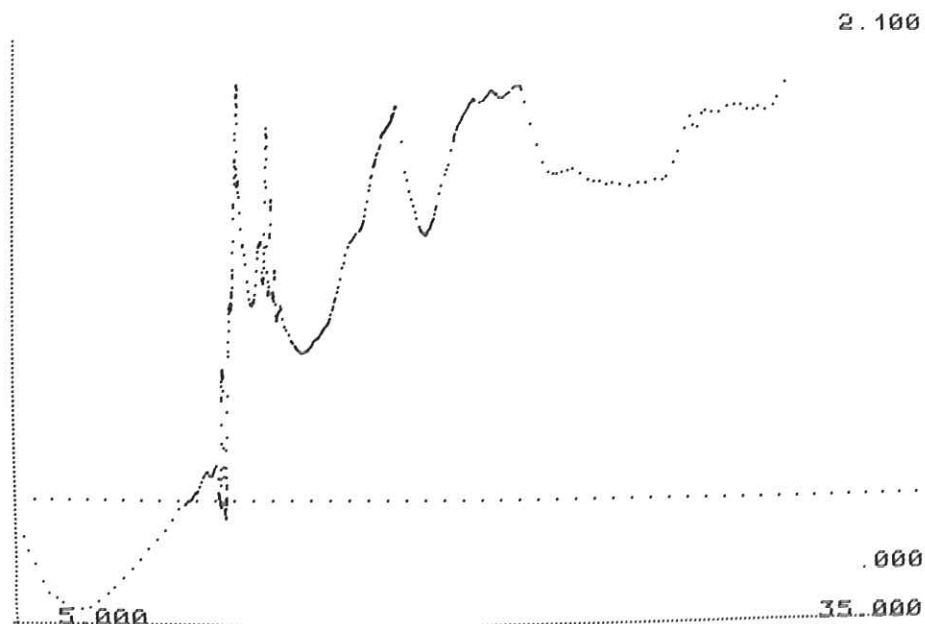


Fig. 4.3 (Hauptbild 1)

CTRL+

A: PROGRAMMANFANG
C: BIDWECHSEL
D: DISPLAY LADEN
E: EXTERNE ACHSEN
L: NEULADEN VON KRKRAN
M: BILD ZEIGEN
N: KENNNR. ANGEBEN
O: THETA BERECHNEN
P: PLOTTR LADEN
Q: IDENT.TEXT EIN
R: MT-LESEN
S: SUPEDT LADEN
T: DATENBER. AUSTAUSCHEN
U: BEIDE DATENBEREICHE
W: MT-SCHREIBEN
X: NEULADEN EINER KURVE
Y: OPT. KONST. BERECHNEN

Fig. 4.4 (Hauptbild 2)

den Extremwerten der Achsen noch folgende Information:

- die Y-Null-Linie im Kurvenbild als gestrichelte Linie
- einen Y-Wert, der von den angezeigten Funktionswerten abzuziehen ist
- der PDP-Datenbereich (1 oder 2) als Zahl in der linken oberen Ecke des Bildschirms
- die Kenn-Nummer der Kurve
- den Identifizierungstext.

Es ist möglich, aus dieser Anzeige in das Hauptbild 2 überzugehen, indem gleichzeitig die Tasten CTRL und U an der Teletypetastatur gedrückt werden. Das Hauptbild 2 gibt als Klartext die verschiedenen Aktionen auf verschiedene Keyboardkommandos an. Alle übrigen Teletypeeingaben werden ignoriert. Diese Kommandos können immer dann gegeben werden, wenn eines der beiden Hauptbilder gezeigt wird.

4.5 Displaysteuerung

4.5.1 Kurvenpositionierung

Jede Kurve kann auf dem Bildschirm (als Fläche mit fester Größe, festem Achsenverhältnis und Punktraster) "positioniert" werden. Dabei werden grundsätzlich die in Bank 2 oder 3 gespeicherten Datenwerte nicht geändert bzw. gelöscht. Z.B. könne eine Kurve, die als Punktmenge von 3.85 bis 69.12 eV mit Y-Werten von 0.799 bis 300.001 vorgegeben worden ist, von 0 bis 60 eV mit Y-Werten von 0.1 bis 400 dargestellt werden (erst über CTRL+E den Teil über 60 eV "entfernen"), dann unmittelbar folgenden mit der Minimaxsuche den Rest durch Vorgabe der entsprechenden Werte positionieren).

Minimalwert eingeben

Um den Minimalwert des Displays für X und Y anzugeben, hat man folgende Wahlmöglichkeiten:

N: sowohl für X wie für Y wird der untere linke Achsenpunkt auf absoluten Wert 0 gesetzt

M: aus der Punkteschar, die die Kurve repräsentiert, wird der Minimalwert von X und Y genommen. Es wird dann der relative Abstand aller Punkte zu diesen Werten dargestellt

E: es können Werte eingegeben werden, die zwischen 0 und den Minimalwerten liegen müssen

Zum Akzeptieren der Zahlen muß M gedrückt werden.

Maximalwert eingeben

Um den Maximalwert des Displays für X und Y anzugeben, hat man folgende Wahlmöglichkeiten:

M: Displaygrenze: größte Koordinatenwerte der angegebenen Punkteschar

E: externe Eingabe (der Wert muß größer als der größte aus der angegebenen Punkteschar sein).

4.5.2 Interne Wahl des Kurvenausschnittes: CTRL+I

Mit CTRL+I ist eine weitere Aussprungmöglichkeit aus dem Hauptdisplay gegeben. Es erscheint dann auf dem Bildschirm das Hauptbild 1 in leicht modifizierter Form. Die Zahlen auf dem oberen Rand geben den Datenbereich und die X-Koordinatenwerte der Pfeile an. Die Buchstaben erinnern daran, daß folgende Eingriffsmöglichkeiten (über den Teletype) gegeben sind:

CTRL+A:Rücksprung zum Hauptbild **1** (alle Kurvenpunkte werden gezeigt)

C:Der gerade gezeigte Punkt wird gelöscht (indem er die Werte des folgenden Punktes erhält)

S:Pfeil läuft schneller

L:Pfeil läuft langsamer

H:Pfeil wird angehalten

R:Letztes H wird rückgängig gemacht

E:Aussprung

Das zwischen den Pfeilen stehende Kurvenstück wird als neue Kurve definiert.

Es kann dann entsprechend Kap. 4.5.1 positioniert werden. Dieses Verfahren kann rekursiv benutzt werden.

4.5.3 Externe Wahl des Kurvenausschnittes: CTRL+E

Eine Aussprungmöglichkeit aus dem Hauptdisplay ist mit CTRL+E gegeben. Es kann danach der Ausschnitt aus der Kurve, der angezeigt werden soll, vorgegeben werden. Dabei müssen die vorgegebenen Werte in der Punktmenge des Kurvenzuges enthalten sein. Man kann also z.B. bei einer von 9.37 bis 65.37 eV gespeicherten Kurve sich den Ausschnitt von z.B. 10.00 eV bis 30.00 eV wählen. Es wird aus der gesamten Punktmenge der erste Punkt gesucht, dessen X-Wert größer bzw. kleiner als der vorgegebene Wert ist. Will man in dem angegebenen Beispiel aber die Kurve von 9 bis 30 eV darstellen, muß man bei der Frage nach der unteren Displaygrenze den alten Wert (der ja gleichzeitig mit gezeigt wird) wieder eingeben, hier also 937, und dann bei der Minimalwerteeingabe (4.5.1) 9.0 vorgeben. Die so erhaltene kleinere Punktmenge kann dann mit der normalen Minimaxsuche auf dem Display positioniert werden.

4.6 Wechsel des dargestellten Datenbereichs

Es gibt folgende Möglichkeiten, den Datenbereich zu vertauschen:

Wechsel des Datenbereichs auf dem Display: CTRL+T

Nach Drücken dieser Tasten wechselt der Display von Datenbereich 1 nach Datenbereich 2 bzw. von 2 nach 1. Es wird zur Displaysteuerung die zuletzt benutzten Minimal- und Maximalwerte genommen. Die Datenwerte bleiben aber an ihren ursprünglichen Positionen.

Austauschen der Datenbereiche: CTRL+T

Mit "CTRL+T" werden die X-Y-Werte in den beiden Datenbereichen der Rechenmaschine miteinander ausgetauscht (einschließlich der Kennnummer und des Identifizierungstextes).

Simultanes Zeigen beider Datenbereiche: CTRL+V

Der Aussprung aus diesem Programmsegment ist mit der Angabe des einzeln zu zeigenden Datenbereichs möglich.

4.7 Magnetbandbenutzung: CTRL+W, CTRL+R

CTRL+W bewirkt das Schreiben einer Kurve auf das Magnetband. Durch Eingabe von CTRL+R kann eine Kurve vom Magnetband in den Datenbereich 1 oder 2 gelesen werden. Die zum Datenspeichern benutzten Magnetbänder (F41/nn) sind in 2700 Bandblöcke zu je 200 Worte (oct) eingeteilt. Je 40 (octal) Bandblöcke (= 1 Kurvenblock) werden zum Speichern einer Kurve benötigt. In dem ersten Block ist vermerkt, ob der folgende Kurvenblock schon beschrieben ist, die dann vorhandene Schreibsperre kann mit "CTRL+S" aufgehoben werden. Zum Lesen oder Schreiben muß das Band auf eine Einheit mit der Einheitennummer 2 montiert sein. Es muß dann die Kurvenblocknummer (zwischen 0 und 40) und der Datenbereich (1 oder 2) angegeben werden. Nach dem Lesen und Schreiben wird das Hauptbild 1 angezeigt.

4.8 Identifizierungstext und Kenn-Nummer: CTRL+Q, CTRL+N

Zur leichteren "Buchhaltung" auf den DEC-tapex gibt es zwei Hilfen: Zu jeder Kurve kann ein Text eingegeben werden, der aus maximal 50 Zeichen bestehen darf, dieser Text wird auf den Bändern mitgespeichert. Zusätzlich kann noch eine Kenn-Nummer eingegeben werden (Zahl zwischen 0 und 4095).

4.9 Integral berechnen: CTRL+0

Nach Drücken der Tasten CTRL+0 muß bei Reflexionsdaten vor der Berechnung des Integrals der Exponent für die hochenergetische Extrapolation von R angegeben werden. Bei Transmissionsdaten muß die Schichtdicke angegeben werden. Dann wird die Rechnung auf der IBM initiiert, auf dem Display erscheint der in Bild 4.5 gezeigte Text.

```
***** R. KLUCKER'S KKA *****  
NUMBER OF POINTS CALCULATED TIL NOW:  203  
TOTAL NUMBER OF POINTS:  449  
  
TIME ( IN SECONDS) USED ON IBM TIL NOW:  20. 30
```

Fig. 4.5: Displaybild bei der Berechnung der Phasenwerte

Ein Abbruch der Rechnung - wie überhaupt des Lösens der IBM-Verbindung - ist über das Drücken der Tasten CTRL+K möglich. Nach maximal 1 sec Verweilzeit des Programms in der IBM-Rechenmaschine wird dort die Rechnung gestoppt und als Code die Zahl der bisher berechneten Punkte zur PDP zurückgegeben. Ist diese Zahl kleiner als die Gesamtzahl der Punkte, wird die IBM-Verbindung automatisch wieder hergestellt und das Fortran-Programm in die Warteschlange eingereiht. Durch Drücken der Tasten CTRL+H wird das Neuaufsetzen der Rechnung in der IBM gestoppt, man hat damit also die Möglichkeit, die Frequenz der IBM-Benutzung zu erniedrigen. Es bleibt dabei jedoch der gezeigte Text auf dem Bildschirm stehen. Durch das Drücken irgendeiner Taste wird die Verbindung zur IBM wieder aktiviert und die Rechnung fortgesetzt. Nach der Berechnung sämtlicher Phasenwerte wird das Hauptbild 1 angezeigt. Die Berechnung der optischen und dielektrischen Funktionen ist dann möglich.

4.10 Berechnung der optischen und dielektrischen Eigenschaften: CTRL+Y

Aus dem Reflexions- oder Transmissionsvermögen und der Phase bzw. dem Absorptionskoeffizienten und Brechungsindex lassen sich die übrigen optischen und dielektrischen Eigenschaften berechnen. Je nach Art der Eingabedaten gelten folgende Steuerzahlenzuordnungen:

Reflexionsdaten		Transmissionsdaten		Absorptionsdaten	
1	Phase θ	1	Phase θ	1	ϵ_1
2	ϵ_1	2	ϵ_1	2	ϵ_2
3	ϵ_2	3	ϵ_2	3	-Imaginärteil $1/\hat{\epsilon}$
4	-Imaginärteil $1/\hat{\epsilon}$	4	n	4	Brechungsindex n
5	Brechungsindex n	5	k	5	Absorptionsindex k
6	Absorptionsindex k	6	μ	6	Reflektivität R
7	Absorptionskoeff μ	7	R	7	ϵ_o eff
8	ϵ_o eff	8	$-Im1/\epsilon$	8	N_{eff} (Eingabe von Atomgewicht u. Dichte notwendig)
9	N_{eff} (Eingabe von Atomgewicht und -dichte notwendig)	9	ϵ_o eff		
		10	N_{eff}		

Zusätzlich muß für die Reflexionsdatenauswertung der Winkel gegen die Normale (in Grad), unter dem die Reflexion stattgefunden hat, und die Polarisationsrichtung angegeben werden.

Bei Transmissionsdaten muß zuerst die Berechnung von n und k durchgeführt werden. Dazu wird die Eingabe von Startwerten für n und k verlangt. Das Ergebnis wird in den Records 3 und 4 gespeichert.

Die berechneten Werte werden zur PDP transferiert, sie können zusätzlich in einem Rekord der IBM gespeichert werden. Nach dem Ende der Transfers werden die Werte als Kurve mit Hauptbild 1 gezeigt.

4.11 Neuladen einer Kurve: CTRL+X

Da bei "Neuladen" einer Eingabekurve zur Berechnung von θ bzw. $\text{const.}(n-1)$ die Daten modifiziert werden, ist dieser Schritt nötig, um anschließend eine Kramers-Kronig-Analyse durchführen zu können.

4.12 Weitere Eingriffsmöglichkeiten:

CTRL+P	bewirkt das Laden von PLOTTR
CTRL+D	bewirkt das Laden von DISPLAY
CTRL+A	führt ganz auf den Anfang des Programms zurück und bewirkt damit das <u>Neuladen</u> des Fortranprogramms auf der IBM

Danksagung

Den Herren V. Saile und N. Schwentner sind wir für das Ar-Spektrum zu Demonstrationszwecken zu Dank verpflichtet.

Literatur

1. H.A. Kramers, Atti. Congr. Intern. Fis. Como 2, 545 (1927)
2. R. Kronig, J.Opt.Soc.Am. 12, 547 (1926)
3. F. Stern, in Solid State Physics, herausgegeben von F. Seitz und D. Turnbull (Academic Press, New York, 1963) Sec. III
4. J.S. Toll, Phys.Rev. 104, 1760 (1956)
5. M. Sharnoff, Am.J.Phys. 32, 40 (1964)
6. R. Klucker und U. Nielsen, DESY SR-73/5 (1973), Comp.Phys.Comm., im Druck
7. U. Nielsen, Int.Bericht DESY F41-73/4 (1973)
8. F. Alkok et al., Comp.Phys.Comm. 4, 275 (1972)
9. U. Nielsen (in Vorbereitung)
10. U. Nielsen, Proc. of Symp. for Synchrotron Radiation Users, Daresbury 4-7.1.73 p. 13 (1973)
11. M. Altarelli, D.L. Dexter und H.M. Nussenzveig, Phys. Rev. B6, 4502 (1972)
12. W.I. Smirnow, Lehrgang der höheren Mathematik, (VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1964) Teil III/2
13. A. Ebina und T. Takahashi, J.Opt.Soc.Am. 62, 639 (1972)
14. O.S. Heavens, in Physics of Thin Films, G. Hass and R.E. Thun Eds., Acad.Press Inc. (1964) Vol. 2, p. 217
15. P.-O. Nilsson, Appl.Opt. 7, 435 (1968)
16. F. Abelés und M.L. Thèye, Surf.Sci. 5, 325 (1966)
17. B.R. Cooper und H. Ehrenreich, Phys.Rev. 138, A494 (1965)
18. S. Maeda, G. Thyagarajan und P.N. Schatz, J.Chem.Phys. 39, 3473 (1963)
19. P.-O. Nilsson, private Mitteilung

