

Mikrostrukturierte Metallschichten auf Glas

Dissertation zur Erlangung des naturwissenschaftlichen Doktorgrades
der bayerischen Julius-Maximilians-Universität Würzburg



vorgelegt von
Martin Meier
geboren in Würzburg

Würzburg, September 2006

Report ZAE2 – 0906 – 06 (2006)

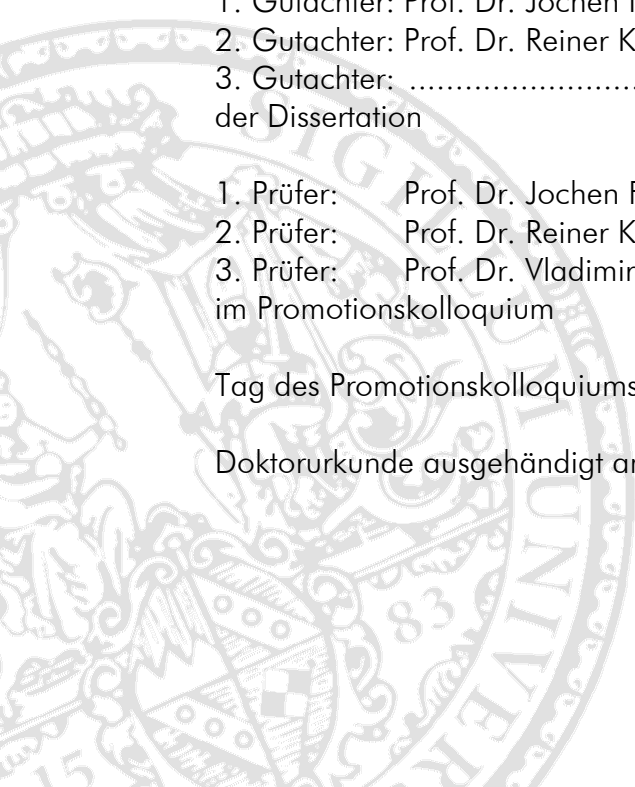
Eingereicht am:
bei der Fakultät für Physik und Astronomie

1. Gutachter: Prof. Dr. Jochen Fricke
2. Gutachter: Prof. Dr. Reiner Kümmel
3. Gutachter:
der Dissertation

1. Prüfer: Prof. Dr. Jochen Fricke
2. Prüfer: Prof. Dr. Reiner Kümmel
3. Prüfer: Prof. Dr. Vladimir Dyakonov
im Promotionskolloquium

Tag des Promotionskolloquiums: 01. Dezember 2006

Doktorurkunde ausgehändigt am:



Zusammenfassung

Moderne Wärmeschutzverglasungen erreichen ihren niedrigen Wärmedurchgangskoeffizienten, den U-Wert, im Wesentlichen durch Low-e-Beschichtungen, also Schichten mit einem Emissionsgrad von unter 0.05 im infraroten Spektralbereich. Verantwortlich für die Low-e-Eigenschaften sind bei diesen Beschichtungen häufig eine oder zwei dünne Silberschichten. Im Schichtsystem kommen dazu etliche Schichten zur Entspiegelung, als Diffusionsblocker und zur Haftvermittlung.

Sichtbare Strahlung wird durch diese Beschichtungen nur wenig beeinflusst. Wegen des niedrigen Emissionsgrades im IR-Bereich wird jedoch Strahlung im nahen Infrarot reflektiert und damit die solare Transmission vermindert. In vielen Einsatzgebieten, so auch bei der Wärmeschutzverglasung oder bei thermischen Solarkollektoren, kommt es allerdings auf den solaren und nicht auf den visuellen Transmissionsgrad an.

Eine ideale „solare Beschichtung“ sollte die solare Einstrahlung weitgehend durchlassen, im Bereich der Wärmestrahlung bei Raumtemperatur dagegen reflektierend wirken. Im Unterschied zu einer solchen Beschichtung verringert eine konventionelle Low-e-Beschichtung den solaren Transmissionsgrad einer Glasscheibe um etwa 20 bis 25 Prozentpunkte. Um diese Verminderung des solaren Transmissionsgrades bei gleichen Isolationseigenschaften zu vermeiden, ist eine stärkere Wellenlängenselektivität der Beschichtung vonnöten.

Eine Möglichkeit zur Erhöhung der Wellenlängenselektivität ist Mikrostrukturierung. An Stelle einer durchgehenden Metallschicht wird im Low-e-Schichtsystem ein Metallgitter verwendet. Ist die Wellenlänge der einfallenden Strahlung groß gegenüber dem Abstand der Gitterstreben (im Falle der Wärmestrahlung bei 300 K), verhält sich die Beschichtung wie das flächige Material und damit wie eine konventionelle Low-e-Schicht. Für Licht aus dem Spektrum der Sonnenstrahlung hingegen ist die Wellenlänge kleiner als der Abstand der Gitterstreben, so dass die Transmission hier nur sehr geringfügig vermindert wird.

Zur genauen Charakterisierung dieses selektiven Verhaltens wurden Computersimulationen durchgeführt, zum einen nach dem Mie-Formalismus und

zum anderen mit der Methode der finiten Differenzen im Zeitregime (FDTD), einer numerischen Lösung der Maxwellgleichungen. Aufgrund von Schwierigkeiten bei der Probenherstellung und der daraus resultierenden fehlenden Möglichkeit, die benötigten Sub- μ -Strukturen geeignet in ihrer Größe zu variieren, wurden zur experimentellen Bestätigung sowohl die Wellenlänge der einfallenden Strahlung als auch die Struktur um einen Faktor von etwa 10^5 erhöht und entsprechende Simulationen anhand von Streuexperimenten mit Mikrowellen an einem makroskopischen Metallgitter verifiziert.

Mit Hilfe der Simulationsergebnisse wurden Voraussagen über das spektrale Transmissionsverhalten eines ideal leitenden Metallgitters auf einem Glassubstrat in Abhängigkeit von Breite, Abstand und Dicke der Gitterstreben getroffen. Anhand von Parametervariationen wurden dann geeignete Werte dieser Größen für den Einsatz des Gitters als strukturierte Low-e-Beschichtung bestimmt.

Durch Übertragung des spektralen Verhaltens eines solchen ideal leitenden Metallgitters auf eine reale Low-e-Schicht wurden die Auswirkungen einer Strukturierung dieser Schicht berechnet. Als Referenz diente dabei das Schichtsystem *iplus E* der Firma Interpane auf Floatglas. Die Rechnung zeigt, dass eine Strukturierung dieses Schichtsystems in ein Gitter mit 260 nm breiten Stäben im Abstand von 1080 nm die solare Transmission um 15 Prozentpunkte auf 0.72 steigen lässt. Die Dicke der Silberschicht im Schichtsystem muss dabei allerdings von 15 nm auf 60 nm angehoben werden. Der Emissionsgrad im IR-Bereich erhöht sich durch die Strukturierung von 0.03 auf 0.048.

Kommt dieses strukturierte Low-e-Schichtsystem bei einer zweischeibigen Wärmeschutzverglasung zum Einsatz, so ließe sich der Gesamtenergiedurchlassgrad auf 0.70 im Vergleich zu 0.58 bei einer Verglasung mit dem konventionellen Low-e-Schichtsystem steigern. 80 Prozent des durch die flächige Low-e-Beschichtung bedingten Rückgangs im Gesamtenergiedurchlassgrad, dem g-Wert, lässt sich somit durch die Strukturierung wieder zurückgewinnen. Erkauft wird dies durch eine geringfügige Erhöhung des U-Werts der Verglasung von $1.06 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$ auf $1.12 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$.

Abstract

Modern solar glazing units make use of low-e coatings, i.e. coatings with emissivities of less than 0.05 in the IR spectral range. Low-e coatings mainly consist of one or two thin metal layers, usually silver, that determine the low-e behavior, and several additional layers for anti-oxidant, anti-reflex and adhesion-improving purposes.

As the main application of these coatings is in architectural glass, the coatings are designed in such a way that visible transmittance is hardly affected. Unfortunately, due to the decrease in transmission above 700 nm, the low-e coatings reduce the solar transmittance of the glazing, which can be a hindrance for passive solar applications.

For solar architecture, transparent insulation (TI) and solar collectors, it is the solar and not the visible transmittance that is the important factor. An ideal “solar low-e coating” for these applications would be extremely wavelength selective: i.e. a coating that reflects 300 K heat radiation, but is perfectly transparent in the range of solar radiation. Calculations show that the solar transmittance can be increased by about 20 to 25 percent compared to a conventional coating using this ideal solar low-e coating.

A way of increasing the wavelength selectivity of a low-e coating is to microstructure the metal layer contained in the film system. Instead of a complete layer, a metal mesh is created on the glass substrate. If the distances between the metal bridges of this mesh are small compared to the IR wavelengths, the coating behaves as a homogeneous metal layer or a conventional low-e IR coating. However, for solar radiation, for which the wavelengths are small compared to the distances between the metal bridges, transmission is only slightly reduced.

Numerical simulations using Mie scattering theory and the method of finite differences in the time domain (FDTD) were carried out to characterize this selective behavior. As there was no possibility for size-variation of sub-micron structured layers, structures as well as wavelengths were up-scaled by a factor of 10^5 . This transfers the problem into the microwave spectral range, in which scattering experiments were performed using a macroscopic metal grating.

Predictions concerning the spectral transmission of a grating made from perfectly conducting metal on a glass substrate can be made using the numerical simulation results, depending on width, distance and height of the bars of the grating. Subsequent to testing various parameters, suitable values were determined for the metal mesh as a structured low-e coating.

The effect of the micro-structuring on a real layer system was calculated by applying the spectral behavior of the perfectly conducting metal grating on an existing low-e coating. The film system *Interpane iplus E* on float glass was used as a reference coating. By structuring this system into bars with a width of 260 nm and distances of 1080 nm, the solar transmission can be increased by 15 percentage points to 0.72. The thickness of the silver layer in the film system has to be enlarged from 15 nm to 60 nm, however. IR emissivity is increased from 0.03 to 0.048 because of the structuring.

If this solar low-e coating is employed in double glazings, the total solar energy transmittance, the g-value, can be increased to 0.70, compared to 0.58 for glazings using the conventional low-e coating. 80 percent of the decrease in g-value caused by the conventional low-e IR coating can be regained by micro-structuring the coating; the slight disadvantage here is a marginal rise in the heat loss coefficient, the U-value, from 1.06 W/(m²·K) to 1.12 W/(m²·K).

Inhaltsverzeichnis

1	Überblick	1
1.1	Motivation.....	2
1.2	Mikrostrukturierte Metallschichten auf Glas	7
1.2.1	Das solare Spektrum	7
1.2.2	Kenngößen für Verglasungen	10
1.2.3	Beschichtungen zur Reduktion der Wärmeabstrahlung	14
1.2.4	Wellenlängenselektivität durch Mikrostrukturierung.....	20
2	Theoretische Grundlagen	23
2.1	Die Maxwellschen Gleichungen.....	24
2.1.1	Bedeutung der einzelnen Gleichungen	25
2.1.2	Elektromagnetische Wellen in zwei Dimensionen	26
2.2	Mie-Streuung.....	28
2.2.1	Streuung an einem unendlich langen Zylinder	29
2.2.2	Randbedingungen	29
2.2.3	Generierende Funktion	30
2.2.4	Zylindergeometrie	30
2.2.5	Polarisationsrichtungen.....	32
2.2.6	Lichteinfall senkrecht zur Zylinderachse.....	36
2.2.7	Umsetzung als 2D-Computersimulation	37
2.3	Finite Differenzen im Zeitregime (FDTD)	38
2.3.1	Betrachtung in zwei Dimensionen.....	39
2.3.2	Yee-Zelle und <i>leapfrog</i> -Algorithmus	40
2.3.3	Finite Differenzen: Reihenentwicklung.....	40
2.3.4	Anwendung auf die Maxwellgleichungen	42
2.3.5	Umsetzung als Computersimulation.....	45
3	Simulationen und Messungen.....	51
3.1	Optische Eigenschaften einer mikrostrukturierten Metallschicht	52

3.1.1 Abschätzung nach Geometrischer Optik für kleine Wellenlängen.....	53
3.1.2 Mie-Streuung an parallelen Zylindern.....	54
3.1.3 Untersuchungen mit der FDTD-Methode	57
3.2 Messungen an Metallgittern auf Glas	61
3.3 Validierung der Simulationen durch Messungen mit Mikrowellen .68	
3.3.1 Verwendete Geräte.....	68
3.3.2 Schwierigkeiten bei der Versuchsdurchführung.....	75
3.3.3 Messergebnisse und Computersimulationen.....	76
3.4 Weiterführende Computersimulationen	81
3.4.1 Variation der Simulationsparameter	81
3.4.2 Ermittlung einer idealen Struktur.....	87
3.5 Anwendungsbeispiel: die solare Verglasung	97
4 Ausblick	99
Literaturverzeichnis	102
Symbole und Abkürzungen	106

1 Überblick

1.1 Motivation

„Jeder redet über das Wetter, aber keiner tut etwas dagegen.“

MARK TWAIN

Die meisten Klimaforscher sind sich heutzutage einig, dass die Menschheit einen Anteil an der durch Messdaten belegten Erderwärmung hat [Oreskes 2004]. Abbildung 1.1 zeigt den Verlauf der jährlichen mittleren Temperatur auf der Erdoberfläche seit Beginn der kontinuierlichen Wetteraufzeichnung. Ausgewertet wurden hierzu Temperaturmessungen auf Land und Ozean [Hansen 2006].

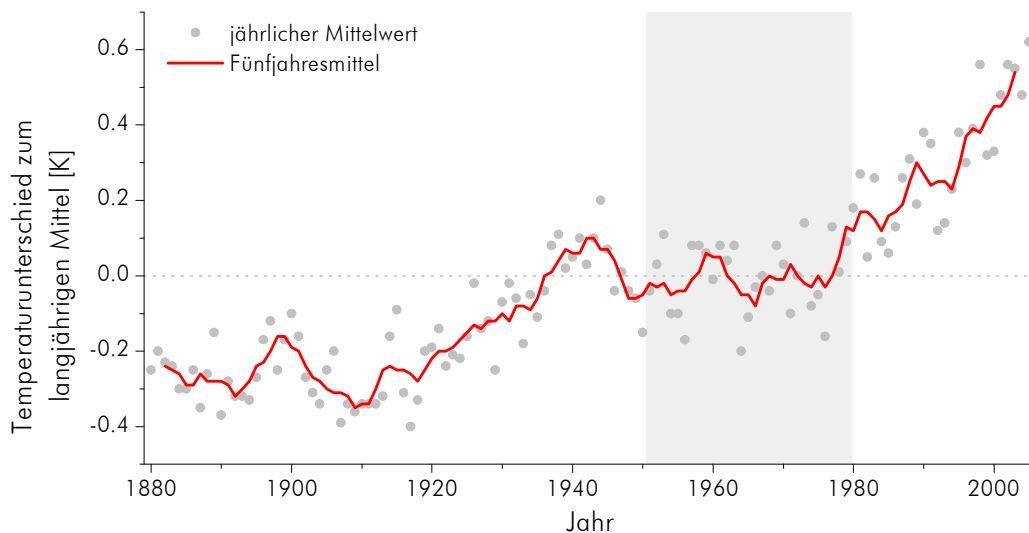


Abbildung 1.1

Abweichung der jährlichen mittleren Temperatur auf der Erdoberfläche vom langjährigen Mittelwert von 1951 bis 1980 (markierter Bereich) [Hansen 2006].

Allein durch natürliche Einflüsse wie Schwankungen der Sonneneinstrahlung oder Vulkanausbrüche lässt sich dieser Temperaturanstieg nicht erklären. Klimamodelle und Simulationen geben den Anstieg nur richtig wieder, wenn man zusätzlich vom Menschen verursachte, also anthropogene, Einflüsse berücksichtigt [IPCC 2001].

Der größte Anteil der Erderwärmung in den letzten hundert Jahren ist nach diesen Modellen bedingt durch die von der Menschheit verursachte Emission von Treibhausgasen wie CO_2 , CH_4 oder N_2O in die Erdatmosphäre [DPG 2005].

Um Voraussagen über die zukünftige Entwicklung der Erdtemperatur treffen zu können, werden in Klimasimulationen verschiedene Emissionsszenarien für diese Treibhausgase durchgespielt. Je nach Szenario sagen die Klimamodelle bis zum Jahr 2100 eine Erderwärmung zwischen 1.4 K und 5.8 K voraus [IPCC 2001].

Eine derartige Erhöhung der globalen Durchschnittstemperatur hat jedoch zahlreiche Folgen: bei einem Temperaturanstieg von über 1.6 K im oben genannten Zeitraum wird mit starken Verlusten in der weltweiten Nahrungsmittelproduktion gerechnet, und die Anzahl der von Wassermangel bedrohten Menschen erhöht sich. Durch das Abschmelzen großer Eismassen kann der Meeresspiegel ansteigen und so viele besiedelte Gebiete bedrohen. Durch den so bedingten hohen Süßwassereintrag in die Ozeane können Meeresströmungen wie beispielsweise der Golfstrom gestört werden, was weit reichende Folgen für das Klima in Europa hätte. Durch Auftauen von Permafrostgebieten kann Methan aus großen Reserven beispielsweise in Sibirien in die Atmosphäre freigesetzt werden [WBGU 2003], das als Treibhausgas mit einem Global Warming Potential (GWP) von 23, also molekülbezogen 23 mal stärker als CO_2 wirkt.

Außer dieser absoluten Temperaturerhöhung ist auch die Änderungsrate der globalen Durchschnittstemperatur von Bedeutung. So können sich oberhalb eines längerfristigen Temperaturanstiegs von etwa 0.2 K pro Jahrzehnt viele Tier- und Pflanzenarten nicht mehr anpassen oder den sich verschiebenden Klimazonen geographisch folgen [Hare 2003].

Es ist also unbedingt notwendig, den globalen Temperaturanstieg durch geringe Emission von Treibhausgasen zu begrenzen.

Der größte Anteil an der anthropogenen Erwärmung der Erdatmosphäre entfällt mit 83.9 Prozent auf CO_2 , das fast gänzlich durch Verbrennung fossiler Brennstoffe entsteht [IPCC 2001]. Durch effizientere Kraftwerkstechniken im Bereich der fossilen aber leider auch der nuklearen Primärenergieträger, durch energetische Altbausanierung, den Einsatz von regenerativen Energien sowie generell durch rationellen Energieeinsatz kann der Verbrauch an diesen fossilen Brennstoffen vermindert und dadurch ein wesentlicher Beitrag zur Begren-

zung des CO₂-Anstiegs geleistet werden. Abbildung 1.2 zeigt den Primärenergieverbrauch in Deutschland im Jahr 2001 aufgeschlüsselt nach Anwendungsgebiet [FfE 2003]. Die Raumheizung hat mit 25.2 Prozent Anteil am Primärenergieverbrauch demnach auch einen großen Anteil an der Emission von Treibhausgasen. Zusätzlich entfallen etwa 5 Prozentpunkte aus dem Bereich Prozesswärme auf die privaten Haushalte, hauptsächlich zur Warmwasserbereitung. Beide Anwendungsgebiete – Raumheizung und Warmwasserbereitung – bedürfen einer drastischen Mengenreduzierung durch energetische Sanierung des Gebäudebestandes sowie einer vermehrten Nutzung der Solarenergie.

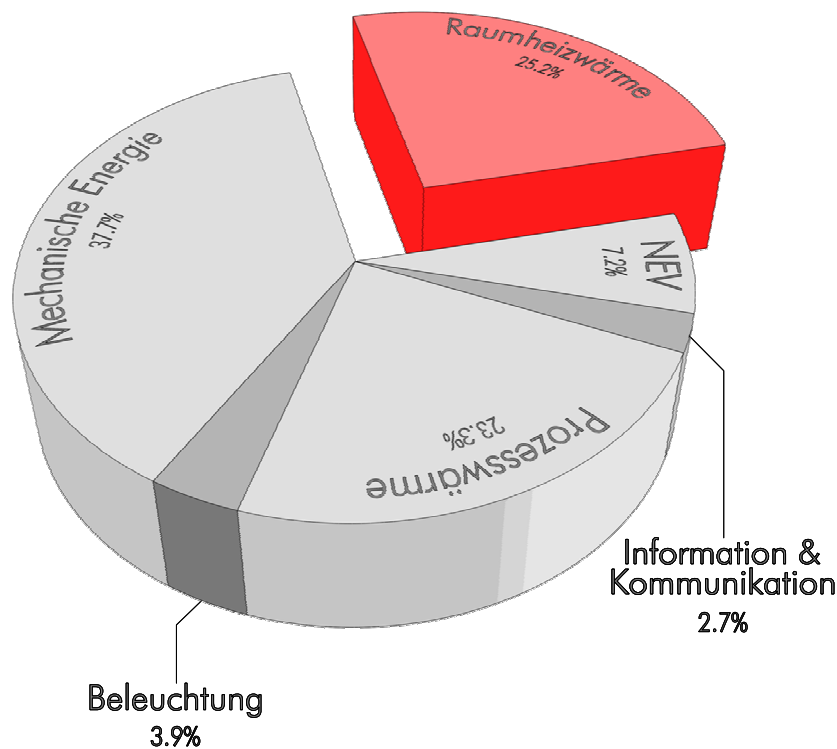


Abbildung 1.2

Primärenergieverbrauch in Deutschland 2001 [FfE 2003]. NEV bezeichnet dabei die nicht-energetische Verwendung eines Brennstoffs, also beispielsweise den Einsatz von Erdöl für die Kunststoffproduktion oder als Schmiermittel.

Die meisten Systeme zur thermischen Verwertung der Sonnenstrahlung nutzen einen dunklen Absorber. Dieser heizt sich auf, und die entstandene Wärme wird zu einem Verbraucher abgeführt. Um Wärmeverluste in die Umgebung

zu vermeiden, sollten die Wärmetransportmechanismen Wärmeleitung, Konvektion und Wärmestrahlung möglichst unterbunden werden. Dies geschieht durch eine geeignete Wärmedämmung (die natürlich durchlässig für die Sonnenstrahlung sein muss) und/oder den Einsatz von wellenlängenselektiven Absorbermaterialien, die die Sonnenenergie möglichst gut absorbieren und nur einen kleinen Anteil der absorbierten Energie als Wärme wieder abstrahlen.

Ein Beispiel einer derartigen Nutzung der Sonnenenergie zur Raumheizung ist die solare Wandheizung mit transparenter Wärmedämmung (TWD) (siehe Abbildung 1.3).

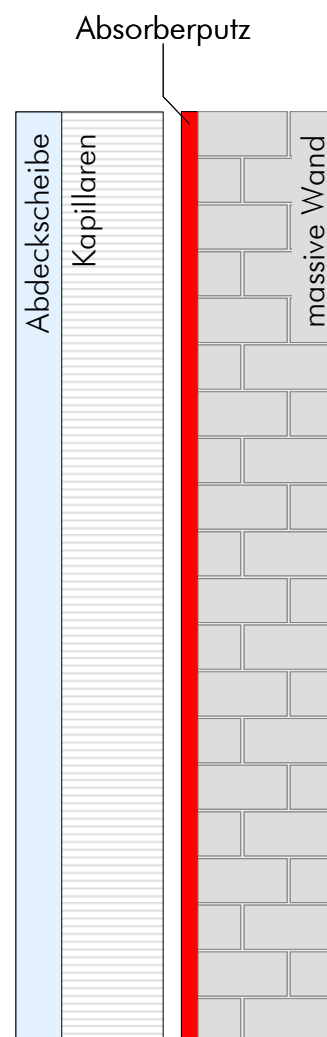


Abbildung 1.3

Aufbau einer solaren Wandheizung mit transparenter Wärmedämmung (TWD). Ein auf eine massive Wand aufgebrachter Absorberputz erwärmt sich durch solare Einstrahlung. Durch die Dämmwirkung der Abdeckscheibe und der Kapillarplatte kann ein erheblicher Anteil der Wärme in den Innenraum abgeführt werden.

Als Solarabsorber dient hier meist ein direkt auf eine massive Wand aufgebrachter dunkler Putz. Konvektion wird durch Kunststoff- oder Glaskapillaren hinter einer Abdeckscheibe vermindert. Da der Wärmewiderstand nach außen

bei dieser Konstruktion größer als durch die Wand ist, wird der größte Teil der absorbierten Energie durch die Mauer in den Innenraum transportiert. Die Wärmewelle kommt dort mit einer Verzögerung von vier bis sechs Stunden an, so dass die Wand in den Abendstunden als „solarer Kachelofen“ wirkt (siehe dazu auch [Groß 2001]).

Bei der solaren Wandheizung beschränkt man sich meist auf die Unterdrückung von Konvektion. Selektive Absorberputze, die kostengünstig direkt auf die Wand aufgebracht werden können, stehen leider noch nicht zur Verfügung.

Eine andere Möglichkeit, die Abstrahlung in die Umgebung zu minimieren, ist eine selektive Beschichtung auf der Abdeckscheibe, eine so genannte *Low-e-Beschichtung*, die im Infrarotbereich eine sehr geringe Emissivität aufweist. Eine solche Beschichtung verbessert die thermische Isolationswirkung der Scheibe. Sie vermindert durch Absorption im nahen Infrarotbereich jedoch auch den solaren Energieeintrag.

Aus diesem Grund wird bei vielen solaren Anwendungen auf eine low-e-beschichtete Scheibe verzichtet. Erforderlich wäre also eine *solare Beschichtung*, eine Beschichtung mit einer ähnlich niedrigen Infrarotemissivität wie bei konventionellen Low-e-Produkten, die jedoch einen deutlich höheren Transmissionsgrad im solaren Spektralbereich aufweist. Dass durch Mikrostrukturierung einer konventionellen Low-e-Schicht eine solche solare Beschichtung erzeugt werden kann, soll im Folgenden gezeigt werden.

1.2 Mikrostrukturierte Metallschichten auf Glas

1.2.1 Das solare Spektrum

Nahezu die gesamten Energiequellen auf der Erde verdanken wir entweder direkt (Photovoltaik und Solarthermie) oder indirekt (Biomasse und fossile Brennstoffe, aber auch Windkraft und Gezeitenenergie) der Sonne. Die heutige Energieversorgung der Menschheit fußt dabei zu ca. 80 Prozent auf fossilen Ressourcen, also über Jahrmillionen in der Erdkruste gespeicherter Sonnenenergie. Quelle der Sonnenstrahlung ist größtenteils die *Photosphäre* der Sonne (siehe Abbildung 1.4).

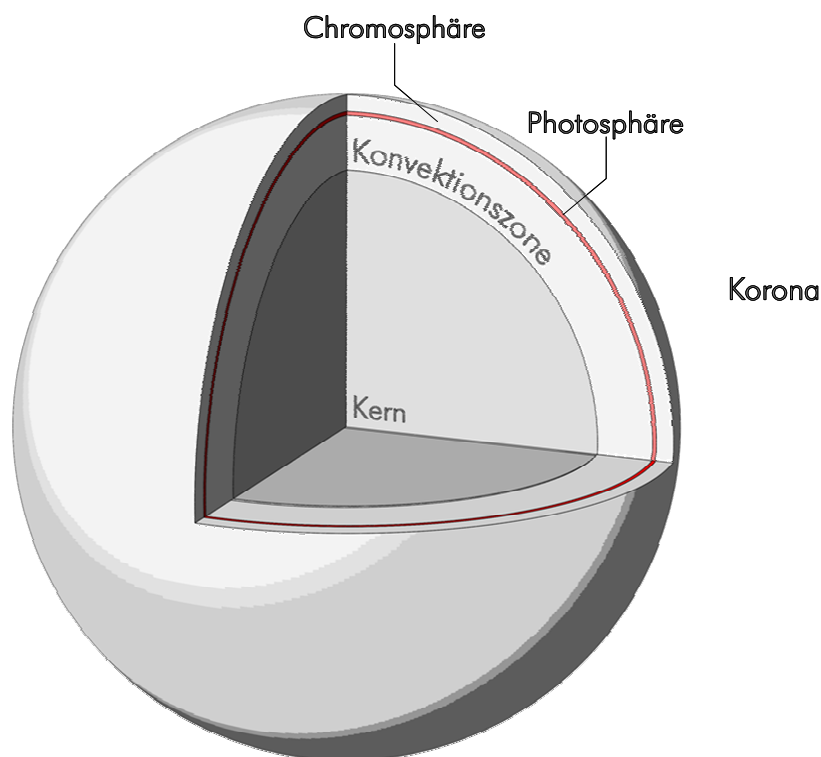


Abbildung 1.4

Aufbau der Sonne. Über dem dichten und heißen Kern und der Konvektionszone liegt die Photosphäre, aus der zum größten Teil die Sonnenstrahlung stammt und die die eigentliche sichtbare Sonnenoberfläche ausmacht. Die Sonnenatmosphäre besteht aus der Chromosphäre und der sehr weit ausgedehnten, nach außen nicht genau begrenzten Korona. [Liou 2002]

Das Spektrum der in der Photosphäre erzeugten Strahlung lässt sich in guter Näherung durch das eines schwarzen Strahlers mit der effektiven Temperatur

5780 K beschreiben [Unsöld 1999]. Sowohl die Photosphäre selbst als auch die weiter außen liegenden Schichten der Sonne, die *Chromosphäre* und die *Korona*, absorbieren einen Teil des in der Photosphäre erzeugten kontinuierlichen Spektrums (hierdurch entstehen die *Fraunhofer-Linien*) und emittieren zusätzliches Licht bei anderen Wellenlängen [Gerthsen 1993]. So kommen Abweichungen vom Spektrum eines schwarzen Strahlers zustande.

Sonnenlicht, das bis zur Erdoberfläche vorgedrungen ist, hat schon einen Weg durch die Erdatmosphäre zurückgelegt. Durch Absorptions- und Streuprozesse an Luftmolekülen, hauptsächlich an Wasser, Sauerstoff, Kohlendioxid und Ozon, wird das Sonnenlicht auf dem Weg durch die Atmosphäre abgeschwächt. Ein Maß für die auf diesem Weg durchquerte Luftmenge ist die *Air Mass (AM)*. Die extraterrestrische Sonnenstrahlung, also das Sonnenlicht außerhalb der Erdatmosphäre, bezeichnet man mit AM 0. Steht die Sonne im Zenit, so durchquert das Sonnenlicht die Atmosphäre auf dem kürzestmöglichen Weg von einer Atmosphärendicke und man spricht von AM 1. Bei anderen Sonnenständen ist die zurückgelegte Strecke des Lichts durch die Atmosphäre größer und dadurch auch die spektrale Verteilung des Sonnenlichts anders. Die Einstrahlung auf die Erdoberfläche in Mitteleuropa beschreibt am besten das Spektrum AM 1.5.

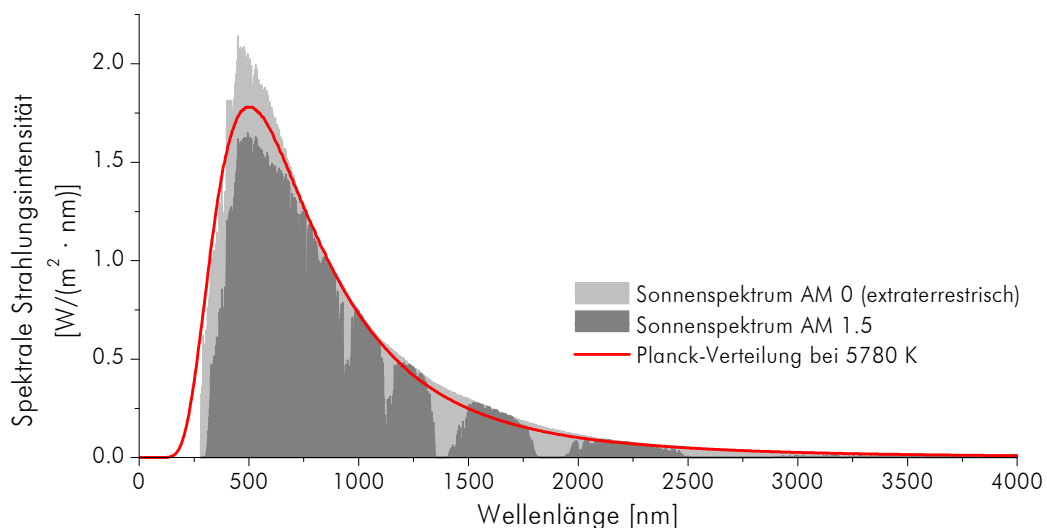


Abbildung 1.5

Spektrale solare Bestrahlungsstärke außerhalb der Erdatmosphäre (AM 0) und am Erdboden (AM 1.5) [AMTS-G-173 2003]. Das Spektrum AM 0 kann durch die Planck-Verteilung eines schwarzen Strahlers der Temperatur 5780 K angenähert werden.

Abbildung 1.5 zeigt die spektrale solare Bestrahlungsstärke außerhalb der Erdatmosphäre (AM 0) und am Erdboden (AM 1.5) [AMTS-G-173], außerdem die Planck-Verteilung eines schwarzen Strahlers der Temperatur 5780 K. Diese Kurve wurde nach der Formel für die spektrale spezifische Ausstrahlung eines schwarzen Körpers

$$\frac{dM_e}{d\lambda} = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1} \quad (1.1)$$

berechnet. Zur Berechnung der Strahlungsintensität am Rand der Erdatmosphäre ist die spezifische Ausstrahlung entsprechend dem quadratischen Verhältnis von Sonnenradius zu Erdbahnradius um den Faktor 1/46200 zu skalieren. λ ist dabei die Wellenlänge, h das Plancksche Wirkungsquantum, c die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum und k die Boltzmannkonstante. Die Skalierung ist nötig, da mit Hilfe von Gleichung (1.1) die spezifische Ausstrahlung an der Oberfläche des schwarzen Strahlers berechnet wird (in diesem Fall also der Photosphäre der Sonne) und nicht in Erdnähe.

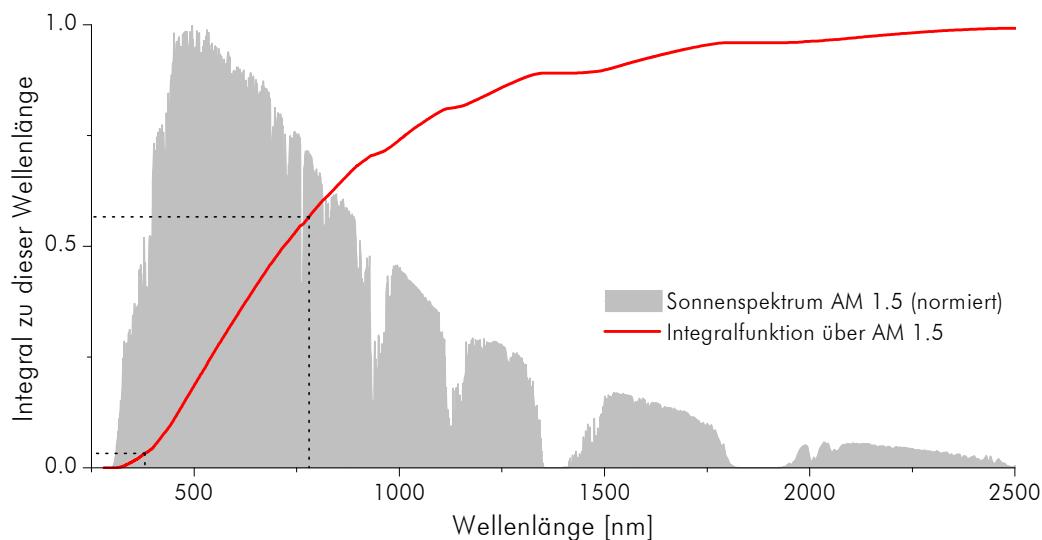


Abbildung 1.6

Integral über das Sonnenspektrum AM 1.5. Auf den sichtbaren Spektralbereich zwischen 380 und 780 nm fallen 54% der eingestrahnten Energie, auf den IR-Bereich 43% und auf den UV-Bereich 3% [AMTS-G-173 2003].

Für viele Anwendungen ist es interessant, welcher Anteil der eingestrahnten Sonnenenergie in einem bestimmten Wellenlängenintervall liegt. Hierzu trägt man das Integral über die Bestrahlungsstärke bis zu einer Wellenlänge λ über die Wellenlänge auf und normiert diese Kurve auf den Maximalwert 1 (siehe Abbildung 1.6). Hierdurch wird ersichtlich, dass etwa 54% der auf die Erdoberfläche eingestrahnten Sonnenenergie im sichtbaren Spektralbereich zwischen 380 und 780 nm liegt. Etwa 3% der Sonnenenergie liegen im UV-Bereich unterhalb von 380 nm, und etwa 43% fallen auf den Infrarotbereich oberhalb von 780 nm. Nicht einmal ein Prozent der Sonnenstrahlung hat eine Wellenlänge größer als 2500 nm.

1.2.2 Kenngrößen für Verglasungen

Glas spielt in der modernen Architektur eine wichtige Rolle – besonders bei repräsentativen Bürogebäuden kann der Verglasungsanteil die 100-Prozent-Marke fast erreichen. Da die Durchsicht durch das Glas erhalten bleiben soll, ist es hier nicht möglich, mit opaken Materialien zu dämmen. Um Wärmeverluste im Winter zu vermeiden, muss also die Verglasung selbst eine gewisse Isolationswirkung aufweisen.

Transmissionsgrade

Zur Charakterisierung von Verglasungen werden verschiedene Parameter verwendet.

Der *spektrale Transmissionsgrad* $\tau(\lambda)$ einer Verglasung gibt an, welcher Anteil der einfallenden Strahlung bei einer bestimmten Wellenlänge die Verglasung passieren kann. Um einen einzelnen aussagekräftigen Parameter zu erhalten, wird der spektrale Transmissionsgrad gemäß Gleichung (1.2) je nach Anwendungsgebiet mit einem geeigneten Spektrum $S(\lambda)$ gewichtet:

$$\tau = \frac{\int \tau(\lambda) \cdot S(\lambda) \cdot d\lambda}{\int_{\lambda} S(\lambda) \cdot d\lambda} \quad (1.2)$$

Interessiert man sich für die Transmission der Verglasung im gesamten solaren Spektralbereich, den *solaren Transmissionsgrad* τ_{sol} , so verwendet man als Gewichtungsfunktion $S(\lambda)$ die spektrale Verteilung der Sonnenstrahlung (siehe Abbildung 1.5).

Ist vielmehr der *visuelle Transmissionsgrad* τ_{vis} einer Verglasung für das sichtbare Licht interessant, wichtet man den spektralen Transmissionsgrad mit dem Produkt aus der Verteilung der einstrahlenden Lichtquelle (also beispielsweise dem Sonnenspektrum oder dem sehr ähnlichen Normlicht D_{65} [DIN EN 410 1998]) und der Empfindlichkeit des menschlichen Auges für das Sehen bei Tag (siehe Abbildung 1.7).

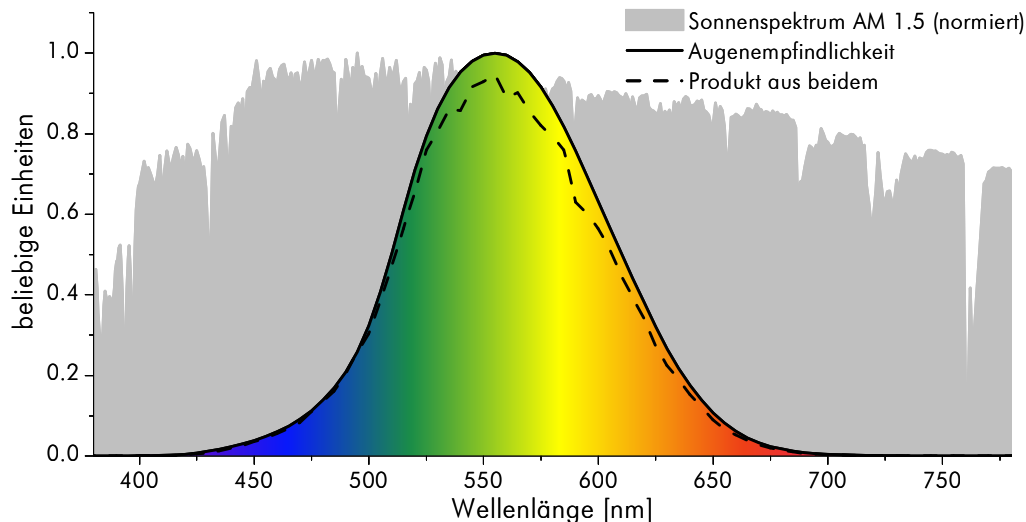


Abbildung 1.7

Empfindlichkeit des menschlichen Auges für das Sehen bei Tag und die solare Einstrahlung bei AM 1.5 im sichtbaren Spektralbereich.

U-Wert

Der *Wärmedurchgangskoeffizient* oder *U-Wert* beschreibt den Wärmedurchgang durch eine Verglasung, wenn zwischen der Innen- und der Außenseite eine Temperaturdifferenz angelegt wird. Betrachtet wird dabei nur der mittlere Bereich der Scheibe bei stationärem Zustand. Randeffekte wie beispielsweise der Randverbund einer Mehrscheibenverglasung werden vernachlässigt.

Die Europäische Norm [DIN EN 673 1999] enthält ein Berechnungsverfahren, mit dem der U-Wert einer Verglasung mit ebenen, parallelen Oberflächen berechnet werden kann. Betrachtet wird in dieser Norm der senkrechte Einbau, und die Wärmeübergangskoeffizienten werden auf $23 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$ für den Übergang von der äußeren Glasscheibe in den Außenraum und $8 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$ für den Übergang von der inneren Glasscheibe in den Innenraum festgelegt. Die Übergangskoeffizienten für den Innen- und den Außenraum sind unterschiedlich, da für die Außenscheibe erzwungene Konvektion mitberücksichtigt wird. Die

Temperaturdifferenz zwischen der äußersten und der innersten Scheibenoberfläche beträgt in dieser Rechenvorschrift 15 K.

g-Wert

Der *solare Gesamtenergiedurchlassgrad* oder *g-Wert* gibt an, wie viel der auf die Verglasung eingestrahlten solaren Energie in den Innenraum gelangt. Da ein Teil der Sonnenenergie von der Verglasung absorbiert wird, erwärmt sich diese und gibt durch die üblichen Mechanismen Wärmeleitung, Konvektion und Wärmestrahlung einen Teil ihrer Energie in den Innenraum ab. Dieser Anteil wird als *sekundärer Wärmeabgabegrad* q_i bezeichnet. Der g-Wert setzt sich nun aus dem direkt transmittierten Anteil der Sonnenenergie und diesem sekundären Wärmeabgabegrad zusammen:

$$g = \tau_{\text{sol}} + q_i \quad (1.3)$$

Bei transparenten oder transluzenten Systemen entfällt der größte Teil des g-Werts auf den direkt transmittierten Strahlungsanteil τ_{sol} .

Verglasungstypen

Die einfachste Möglichkeit, eine Fensteröffnung transparent zu verschließen, ist eine *Einscheibenverglasung*. Mit den oben bereits erwähnten Wärmeübergangskoeffizienten ergibt sich nach [DIN EN 673 1999] für eine Scheibe aus 4 mm dickem Kalk-Natron-Glas ein U-Wert von 5.8 W/(m² K). Der Wärmewiderstand der Scheibe selbst spielt dabei kaum eine Rolle – die Isolationswirkung kommt maßgeblich durch die Wärmewiderstände der Übergänge von der Scheibe in den Außen- bzw. in den Innenraum zustande.



Um die Isolationswirkung zu erhöhen, kommt eine zweite Scheibe zum Einsatz. Bei der *Zweisheibenverglasung* wird durch die ruhende Luftschicht mit einer typischen Dicke von 16 mm zwischen den beiden Scheiben bei sonst gleichen Bedingungen der U-Wert auf 2.6 W/(m² K) gesenkt. Abbildung 1.8 zeigt einen Aufbau der Verglasung und die Wärmetransportmechanismen. Durch einen (schlecht wärmeleitenden) Abstandhalter rund um die beiden Scheiben wird der Scheibenabstand so gering eingestellt, dass die Konvektion im Scheibenzwischenraum minimiert wird. Der Wärmetransport zwischen den beiden Scheiben kommt also hauptsächlich durch Wärmeleitung des Gases im Scheibenzwischen-



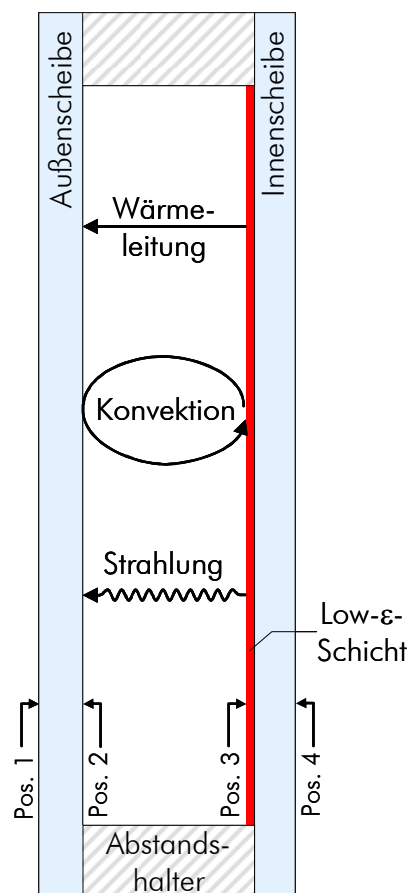
raum und durch Wärmestrahlung zwischen den Scheiben zustande.

Bei der *Wärmeschutzverglasung* schließlich werden auch diese beiden Transportmechanismen verringert. Durch Füllen des Scheibenzwischenraums mit einem schwereren Gas als Luft kann die Wärmeleitung über das Gas verringert werden. Meistens kommen Edelgase zum Einsatz, da diese nicht reaktiv sind. Argon wird am häufigsten verwendet, da die schwereren und damit schlechter wärmeleitenden Edelgase Krypton oder Xenon nur in geringen Mengen verfügbar (und damit auch teuer) sind [Gläser 1999]. Um die Abstrahlung der warmen Innenscheibe in den kalten Außenraum zu senken, verwendet man eine so genannte *Low-e-Beschichtung*, also eine Beschichtung mit sehr geringem Emissionsvermögen im Infrarotbereich. In der Glasindustrie werden die möglichen Positionen für Beschichtungen – also die Glasoberflächen – vom Außenraum zum Innenraum hin durchnummeriert (siehe Abbildung 1.8).



Abbildung 1.8

Wärmetransportmechanismen bei einer Wärmeschutzverglasung aus zwei Scheiben. Energie aus dem Innenraum kann durch Wärmeleitung über das Gas im Scheibenzwischenraum, durch Konvektion dieses Gases, also eine Bewegung von warmen Gasmolekülen von der Innenscheibe zur Außenscheibe, und durch Abstrahlung der warmen Innenscheibe nach Außen transportiert werden. Durch eine Low-e-Beschichtung kann der Strahlungstransport stark reduziert werden.



Da die Low-e-Schichten häufig als *soft coating* ausgeführt werden, also nicht stabil gegen mechanische Belastung und nicht feuchtigkeitsresistent sind, wer-

den die Schichten im geschützten Scheibenzwischenraum, also auf Position 2 oder Position 3, aufgebracht. Für den Wärmedurchlasskoeffizienten macht diese Position keinen Unterschied. Der Gesamtenergiedurchlassgrad jedoch wird sehr wohl durch die Position der Low-e-Schicht beeinflusst, da sich die Schicht bei Einstrahlung erwärmt und ihre Energie durch Wärmeleitung je nach Position dann eher in den Innen- oder in den Außenraum abgibt.

Abbildung 1.9 zeigt den U-Wert einer Wärmeschutzverglasung in Abhängigkeit vom Emissionsgrad der Beschichtung auf einer Oberfläche im Scheibenzwischenraum. Durch Verwenden einer Low-e-Beschichtung mit einem Emissionsgrad von 0.04 im Infraroten und Füllung des Scheibenzwischenraums mit Argon lässt sich der U-Wert der Verglasung auf 1.1 W/(m²·K) senken.

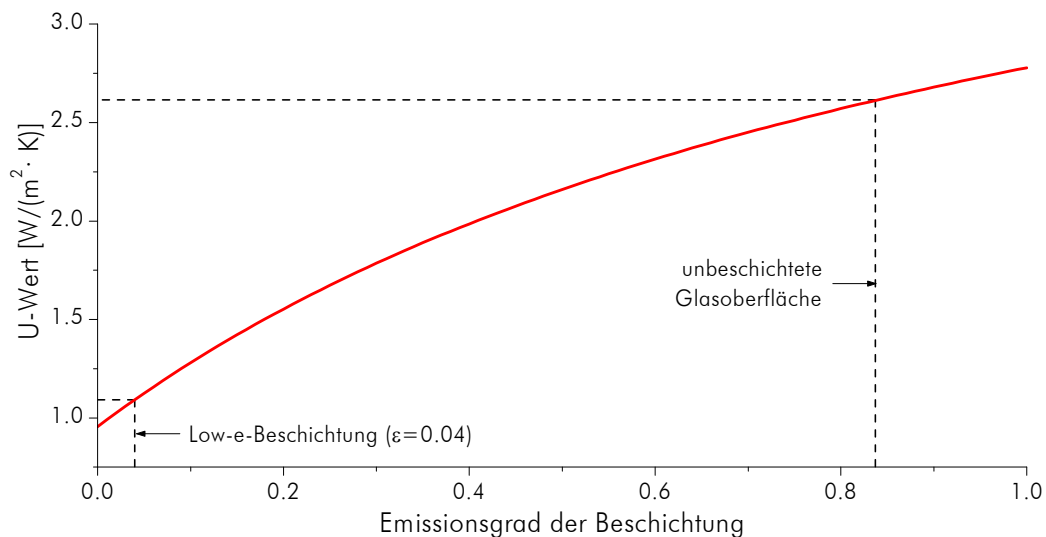


Abbildung 1.9

U-Wert einer Wärmeschutzverglasung in Abhängigkeit vom Emissionsgrad einer Oberflächenbeschichtung im Scheibenzwischenraum. Die beiden Kalk-Natronglas-Scheiben haben dabei eine Dicke von 4 mm, der 15 mm breite Scheibenzwischenraum ist mit Argon gefüllt und die übrigen Oberflächen sind unbeschichtet. Eine unbeschichtete Kalk-Natronglasscheibe hat einen Emissionsgrad von 0.837.

1.2.3 Beschichtungen zur Reduktion der Wärmeabstrahlung

Wie sich Abbildung 1.9 entnehmen lässt, können die Wärmeverluste (der U-Wert) einer Zweischeibenverglasung mit Argonfüllung im Scheibenzwischenraum durch den Einsatz einer Low-e-Beschichtung um fast 58 Prozent von

2.6 W/(m² K) auf 1.1 W/(m² K) gesenkt werden. Diese Beschichtung hat also wesentlichen Einfluss auf die Wärmedämmeigenschaften einer Verglasung.

Niedrige Emissivität und elektrische Leitfähigkeit

Die wichtigste Eigenschaft einer Low-e-Beschichtung ist natürlich die niedrige Emissivität im Infrarotbereich. Niedrige Emissivität im Infraroten entspricht nach dem Kirchhoffschen Gesetz einer niedrigen Absorption in diesem Spektralbereich. Einfallende Strahlung kann von einem Material entweder reflektiert, transmittiert oder absorbiert werden. Für den Reflexionsgrad ρ , den Transmissionsgrad τ und den Absorptionsgrad α muss also gelten

$$\rho + \tau + \alpha = 1 \quad (1.4)$$

Durch einen hohen Reflexionsgrad im Infrarotbereich kann folglich eine niedrige Absorption in diesem Bereich und damit ein geringer Emissionsgrad erreicht werden.

Materialien mit hoher elektrischer Leitfähigkeit, also beispielsweise Metalle oder Halbleiter, weisen einen solchen hohen Reflexionsgrad auf. Fällt langwellige elektromagnetische Strahlung auf ein derartiges Material, werden die mehr oder weniger frei beweglichen Ladungsträger (bei Metallen die Elektronen, bei Halbleitern Elektronen oder Löcher) durch das Strahlungsfeld beschleunigt und schwingen in der Frequenz der einfallenden Strahlung mit. Die von diesen geladenen Teilchen bei Beschleunigung selber ausgestrahlten elektromagnetischen Wellen – das induzierte Feld – überlagern sich mit dem einfallenden Feld kohärent, so dass sich durch Interferenz in der Summe eine Reflexion ergibt. Bei kurzwelligerer Strahlung und dementsprechend größeren Frequenzen ist die Trägheit der durch Coulomb-Wechselwirkung gedämpften Ladungsträger jedoch zu groß: sie können dem einfallenden elektrischen Feld nicht mehr folgen, es baut sich kein induziertes elektrisches Feld auf und das Material wird transparent.

Im Reflexionsspektrum von Metallen oder Halbleitern ist beim Übergang zwischen diesen beiden Bereichen eine deutliche Änderung der Reflexion zu sehen. Der steile Anstieg mit λ im Spektrum wird *Plasmaresonanzkante* genannt. Die *Plasmafrequenz*, also die Frequenz, bei der dieser Übergang stattfindet, ist abhängig von der Ladungsträgerkonzentration im jeweiligen Material. Die

Plasmafrequenz der meisten Metalle liegt noch im sichtbaren Spektralbereich oder im nahen Infrarot.

Mit Hilfe der Maxwellschen Gleichungen (2.1)-(2.4) lässt sich aus den elektrischen und magnetischen Eigenschaften eines Materials der komplexe Brechungsindex $n + ik$ und damit auch der spektrale Emissionsgrad ableiten (siehe dazu auch [Siegel 1988]). Nach der *Hagen-Rubens-Beziehung*

$$\varepsilon(\lambda) = \sqrt{\frac{16\pi}{\lambda \cdot c \cdot \mu_0 \cdot \sigma}} \quad (1.5)$$

ist ersichtlich, dass ein niedriger Emissionsgrad ε durch eine hohe Leitfähigkeit σ erreicht wird. Aufgrund der zur Herleitung dieser Formel verwendeten Näherungen ist Beziehung (1.5) jedoch nur für große Wellenlängen oberhalb von 5000 nm gültig. Für Metalle bestätigen Messdaten diesen Zusammenhang jedoch auch für kleinere Wellenlängen, solange diese deutlich größer als die Plasmawellenlänge sind.

Aufbau eines Low-e-Schichtsystems

Schichten aus Metallen oder Halbleitern sind also geeignete Mittel, um die Emissivität einer Flachglasoberfläche in der geeigneten Weise zu senken. Aus Gründen der Herstellbarkeit und der Haltbarkeit ist jedoch keine einzelne Schicht, sondern ein ganzes Schichtsystem vonnöten.

Als tatsächliche *niedrigemittierende Schicht* kommen in den Low-e-Schichtsystemen die oben schon angesprochenen Halbleiter oder Metalle zum Einsatz. Da mit den metallischen Schichten kleinere Emissionsgrade und damit auch niedrigere U-Werte erreicht werden können, werden für Wärmeschutzverglasungen hauptsächlich diese eingesetzt.

Die Metalle Gold, Silber und Kupfer weisen als dünne Schichten im sichtbaren Spektralbereich nur eine geringe Absorption auf. Kupfer ist sehr korrosionsanfällig und wird deshalb in industriellem Maßstab nicht verwendet. Gold ist zwar inert und einfach als dünne Schicht herzustellen (die ersten industriell gefertigten transparenten Metallschichten waren deshalb auch aus Gold), hat von den drei genannten Metallen jedoch die geringste elektrische Leitfähigkeit, so dass mit Gold nicht die sehr geringen Emissivitäten erreicht werden können. Silber mit der höchsten Leitfähigkeit ist zwar auch korrosionsanfällig, die-

ses Problem bekommt man jedoch durch den Einsatz geeigneter Blockerschichten in den Griff [Gläser 1999].

Da die Metalle Silber und Gold eine Flachglasoberfläche nur schlecht benetzen, ist für die Ausbildung einer dünnen, glatten Metallschicht eine Schicht zur Haftvermittlung notwendig. Diese *Haftschicht* sorgt für ein gleichmäßiges Aufwachsen des Metalls auf der Glasoberfläche.

Bei der Verwendung von Silber als metallische Schicht werden zusätzlich noch eine oder zwei *Blockerschichten* notwendig, um Korrosion der Metallschicht bei Kontakt mit Sauerstoff oder Spuren von Schwefelwasserstoff zu vermeiden. Die Blockerschichten sollten also die Diffusion dieser Moleküle unterbinden. Teilweise kann die Blockerfunktion auch von der Haftschicht übernommen werden.

Der Lichttransmissionsgrad des Schichtsystems kann schließlich durch Interferenzentspiegelung mit einer *Deckschicht* optimiert werden. Berechnungen nach dem Admittanzverfahren (siehe dazu auch die Übersicht in [Groß 2001]) ergeben, dass eine ideale Entspiegelung einer 12 nm dicken Silberschicht durch einen asymmetrischen Schichtaufbau mit einer Deckschicht mit dem Brechungsindex $n_D = 1.8$ und einer Haftschicht mit dem Brechungsindex $n_H = 3.2$ erreicht wird (die Blockerschicht wird dabei vernachlässigt) [Grosse 1997]. Materialien zu finden, die die geforderten Brechungsindizes über weite Spektralbereiche aufweisen, gestaltet sich allerdings als schwierig. Als Haftschicht wird oft teioxidisches Wismut BiO_x mit einem Brechungsindex von 2.3 verwendet, der gewünschte Brechungsindex 1.8 für die Deckschicht kann durch eine Zweifachschicht angenähert werden [Gläser 1999].

Abbildung 1.10 zeigt ein Low-e-Schichtsystem, mit dem eine Emissivität von 0.04 erreicht werden kann. Eine Silberschicht sorgt für die niedrigemittierenden Eigenschaften, als Haft- und Deckschicht wird teioxidisches Wismut verwendet, und die Blockerschicht besteht aus NiCr.

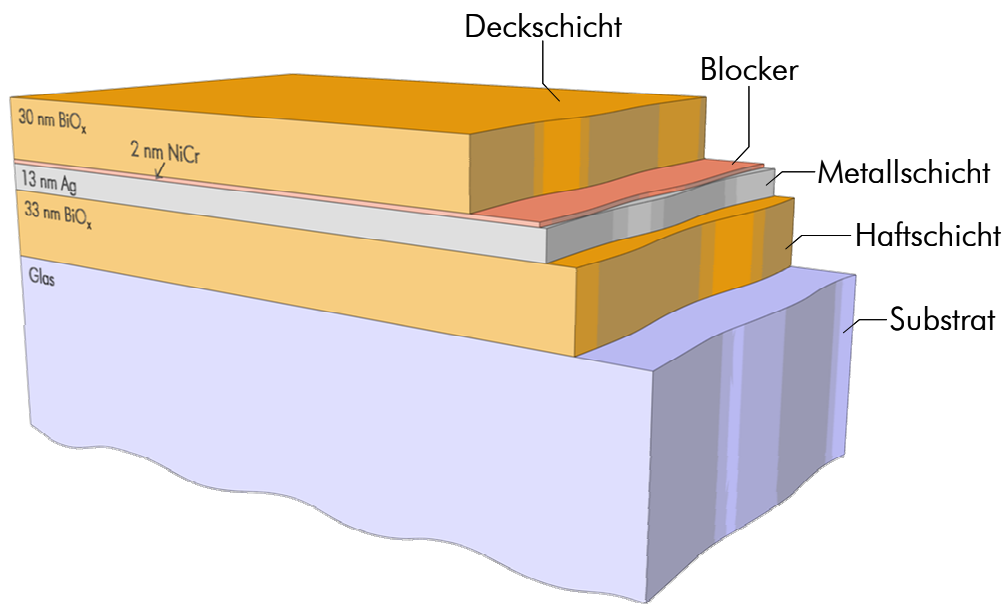


Abbildung 1.10

Beispiel eines Low-e-Schichtsystems mit Silber als niedrigemittierende Schicht. Der Emissionsgrad dieses Schichtsystems beträgt 0.04 [Gläser 1999].

Low-e-Beschichtungen für solare Anwendungen

Die meisten Low-e-Schichtsysteme sind so ausgelegt, dass im sichtbaren Spektralbereich der Transmissionsgrad möglichst wenig verringert wird. Im nahen Infrarot fällt die Transmission durch die Beschichtung jedoch deutlich ab. Für solare Anwendungen, bei denen nicht die Transmission von sichtbarem Licht sondern von Sonnenenergie im Vordergrund steht, wäre eine hohe Transmission über den gesamten Spektralbereich der solaren Einstrahlung, also etwa von einer Wellenlänge von 250 nm bis 2500 nm, wünschenswert. 2500 nm ist auch die Grenze, ab der aufgrund von Absorptionsbanden die Transmission des Glassubstrats sprunghaft abfällt: oberhalb dieser Wellenlänge ist das Glassubstrat opak.

Abbildung 1.11 zeigt den Verlauf des Transmissions- und Reflexionsspektrums für eine solche ideale *solare Beschichtung*. Die gesamte Sonnenenergie soll die Scheibe passieren, über den Bereich der solaren Einstrahlung liegt die Transmission also bei 1. Die Scheibe soll jedoch auch einen niedrigen Emissionsgrad und damit einen hohen Reflexionsgrad im Infrarotbereich aufweisen. Die Reflexion liegt daher im Bereich der Wärmestrahlung bei 1. Der Übergang zwischen diesen beiden Gebieten unterschiedlichen Verhaltens findet bei etwa

2500 nm Wellenlänge statt, also zwischen dem Spektralbereich der Sonnenstrahlung und der Planck-Abstrahlung bei Zimmertemperatur.

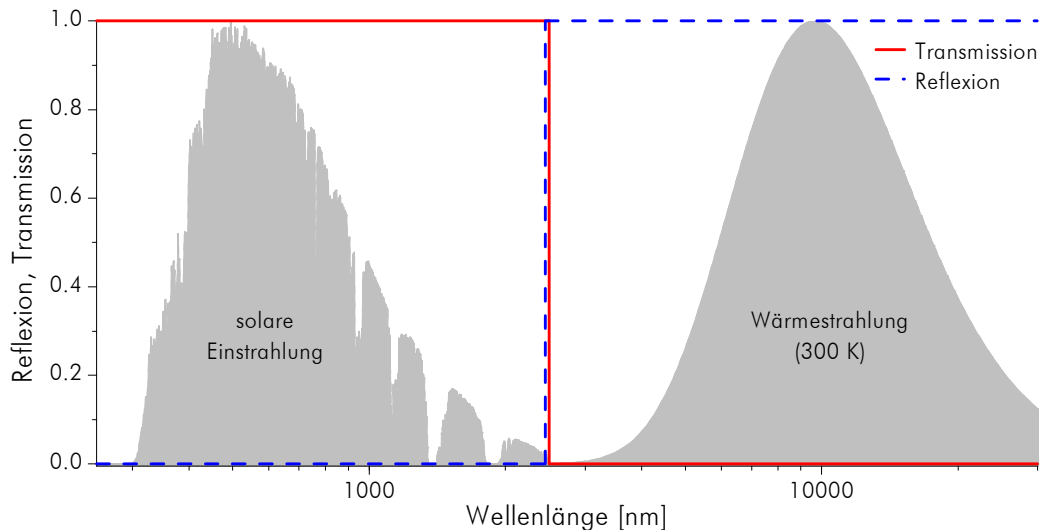


Abbildung 1.11

Transmissions- und Reflexionsverlauf einer idealen solaren Beschichtung. Die eingestrahlte Solarenergie wird komplett transmittiert, die Wärmestrahlung aus dem Innenraum komplett reflektiert.

Eine konventionelle Low-e-Beschichtung weist in der Realität jedoch andere spektrale Eigenschaften auf. Abbildung 1.12 zeigt das Transmissionspektrum der Low-e-Beschichtung *iplus E* der Firma Interpane [Interpane 2006] auf einer 6 mm dicken Floatglasscheibe und die Transmission einer gleich dicken Floatglasscheibe ohne die Beschichtung. Der schraffierte Bereich kennzeichnet die durch die Beschichtung verursachten Transmissionsverluste im solaren Spektralbereich. Gewichtet mit der spektralen Verteilung des Sonnenlichts erhält man dadurch eine Erniedrigung des solaren Transmissionsgrades um 25 Prozentpunkte von 0.82 auf 0.57. Diese Reduzierung der solaren Transmission könnte im Idealfall durch geeignete Mikrostrukturierung wieder wettgemacht werden.

Die Transmission im sichtbaren Spektralbereich verringert sich durch die Beschichtung dabei nur um 2 Prozentpunkte.

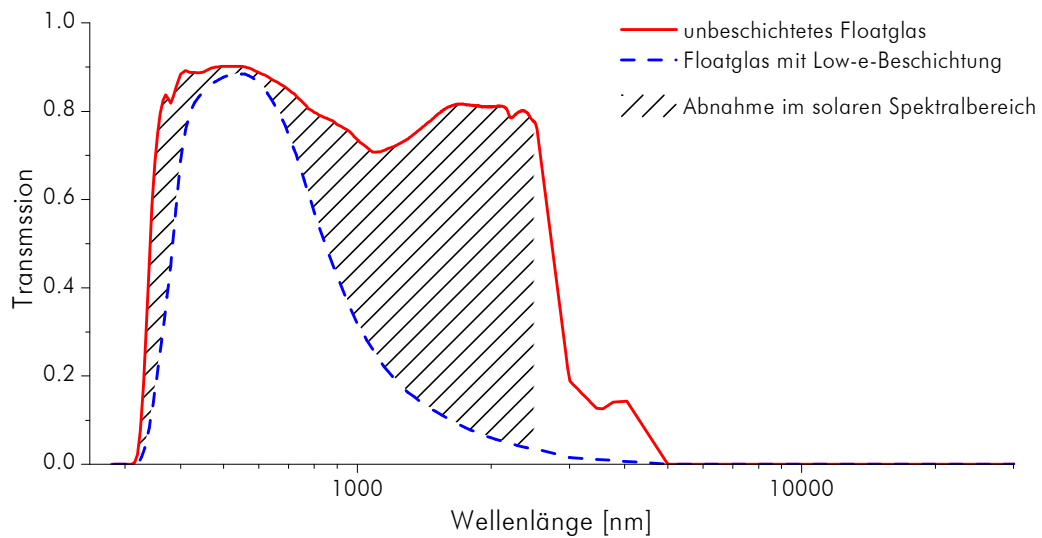


Abbildung 1.12

Transmissionsspektrum einer 6 mm dicken Floatglasscheibe ohne Beschichtung und mit Schichtsystem Interpane iplus E [Interpane 2006]. Der solare Transmissionsgrad sinkt durch die Low-e-Schicht um fast 25 Prozentpunkte (schraffierte Fläche).

1.2.4 Wellenlängenselektivität durch Mikrostrukturierung

Eine Möglichkeit, die Wellenlängenselektivität der Low-e-Beschichtung zu erhöhen, ist die Mikrostrukturierung der Metallschicht. Statt einer flächigen Beschichtung wird dabei nur ein Metallgitter auf der Glasoberfläche aufgebracht (siehe Abbildung 1.13).

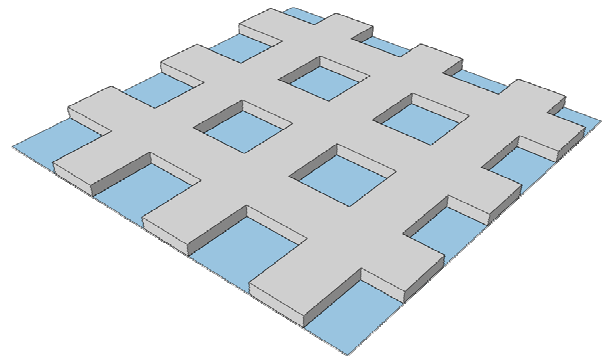


Abbildung 1.13

Mikrostrukturierte Metallschicht auf einer Glasoberfläche.

Für Strahlung mit einer Wellenlänge größer als der Abstand der Gitterstäbe verhält sich diese strukturierte Beschichtung wie eine durchgehende Metallschicht und der Reflexionsgrad ist sehr hoch. Ist die Wellenlänge kleiner als die Gitterkonstante, so wird die Transmission nur geringfügig vermindert. Abbildung 1.14 verdeutlicht dieses Verhalten.

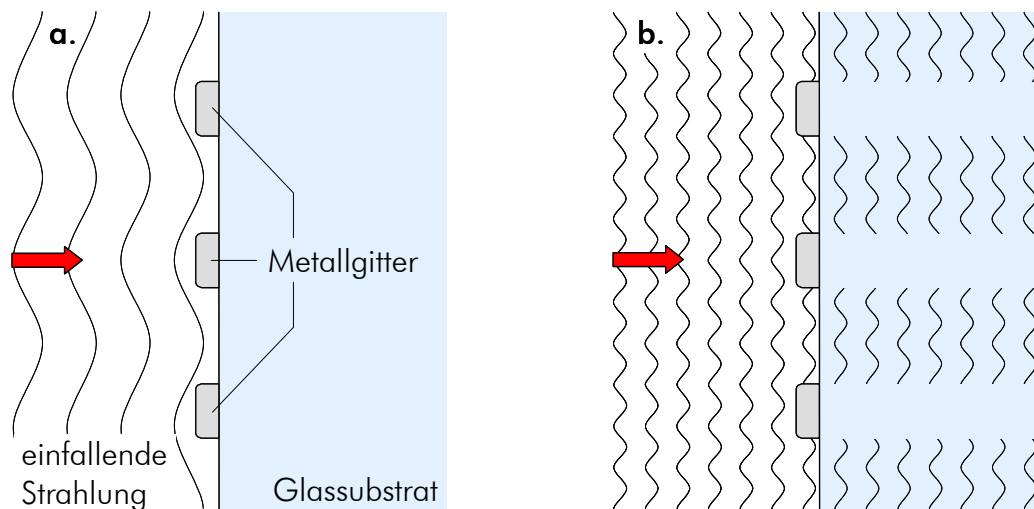


Abbildung 1.14

Wellenlängenselektivität eines Metallgitters. Strahlung mit einer Wellenlänge größer als die Gitterkonstante wird reflektiert (a). Bei Wellenlängen kleiner als der Gitterkonstante wird der größte Teil der Strahlung transmittiert (b).

Diese Idee für eine wellenlängenselektive Beschichtung auf der Basis eines leitenden Gitters wurde bereits in den 1970er Jahren vorgestellt (siehe dazu beispielsweise [Horwitz 1974], [McPhedran 1977] oder [Derrick 1979]). Obwohl bereits damals Computersimulationen mit der Methode der finiten Differenzen durchgeführt wurden [Vincent 1978], waren Berechnungen in größerem Maßstab nicht denkbar. Erst mit dem Fortschritt der Computertechnologie ist es inzwischen möglich, auch das Streuverhalten von komplexen großflächigen Strukturen beispielsweise mit der Methode der Finiten Differenzen im Zeitregime (FDTD) mit vertretbarem Zeitaufwand zu berechnen. Bedingt durch Schwierigkeiten in der Herstellung der Mikrostrukturen verschwand das Thema in späteren Jahren dann aus der Fachliteratur.

Dass Wellenlängenselektivität durch Mikrostrukturierung in der Energietechnik auch heutzutage immer noch interessant ist, zeigt die Tatsache, dass sich eine Patentanmeldung zu „Scheiben mit mikrostrukturierter Low-e-Beschichtung“ von Seiten des ZAE Bayern leider mit einer nahezu zeitgleich eingereichten Anmeldung aus den USA [Tin 2004] überschneidet.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Die Maxwellschen Gleichungen

Bereits in den Jahren 1861 bis 1864 entwickelte James Clerk Maxwell die Theorien über Elektrizität und Magnetismus von Michael Faraday, André-Marie Ampère und anderen zu den gekoppelten Differentialgleichungen der Elektrodynamik weiter. In seinem 1873 erschienenen „*Treatise on Electricity and Magnetism*“ [Maxwell 1873] fasste er seine Ergebnisse zusammen.

Eine wesentliche Rolle spielen in der Elektrodynamik die *Maxwellschen Gleichungen*. Sie beschreiben das Verhalten von elektrischen und magnetischen Feldern. Aus den Maxwellgleichungen lässt sich die Existenz von transversalen elektromagnetischen Wellen ableiten, deren Ausbreitungsgeschwindigkeit mit der Lichtgeschwindigkeit übereinstimmt. Maxwell schloss daraus, dass es sich bei Licht ebenfalls um elektromagnetische Strahlung handelt [Hendry 1986]:

„This velocity is so nearly that of light, that it seems we have strong reason to conclude that light itself (including radiant heat, and other radiations if any) is an electromagnetic disturbance in the form of waves propagated through the electromagnetic field according to electromagnetic laws.“

Erst im Jahre 1888, 9 Jahre nach Maxwells Tod, gelang es Heinrich Hertz, diese elektromagnetischen Wellen experimentell nachzuweisen.

Maxwell selbst notierte seine Gleichungen zusammen mit einigen Hilfsgleichungen komponentenweise für die drei Raumrichtungen. In der heute üblichen vektoriellen Notierung lassen sich die Maxwellschen Gleichungen in der folgenden Form darstellen:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E} \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{H} - \mathbf{J} \quad (2.4)$$

Für lineare Medien gilt für den Zusammenhang der *elektrischen Flussdichte* \mathbf{D} und der *elektrischen Feldstärke* \mathbf{E} beziehungsweise der *magnetischen Flussdichte* \mathbf{B} und der *magnetischen Feldstärke* \mathbf{H}

$$\mathbf{D} = \varepsilon \cdot \mathbf{E} = \varepsilon_r \cdot \varepsilon_0 \cdot \mathbf{E} \quad (2.5a)$$

$$\mathbf{B} = \mu \cdot \mathbf{H} = \mu_r \cdot \mu_0 \cdot \mathbf{H} \quad (2.5b)$$

Den Materialwert ε nennt man dabei die elektrische *Permittivität*, μ die magnetische *Permeabilität*. ε_0 und μ_0 sind Feldkonstante des Vakuums, die relative Permittivität ε_r und die relative Permeabilität μ_r sind dimensionslose Größen. Für sehr hohe Feldstärken ist bei vielen Materialien die optische Linearität, also der lineare Zusammenhang zwischen elektrischer bzw. magnetischer Flussdichte und Feldstärke, nicht mehr gegeben. Man spricht dann von nichtlinearer Optik.

2.1.1 Bedeutung der einzelnen Gleichungen

Die Maxwellschen Gleichungen sind essentiell für den gesamten Bereich der Elektrodynamik. Die Bedeutung der einzelnen Gleichungen soll hier kurz dargelegt werden (nach [Jackson 2002]):

- Gleichung (2.1), das *Coulombsche Gesetz*, beschreibt das elektrische Feld als Quellenfeld. Die *elektrische Ladungsdichte* ρ ist dabei die Quelle des elektrischen Feldes.
- Nach Gleichung (2.2) ist das magnetische Feld quellenfrei: es gibt keine magnetischen Monopole.
- Gleichung (2.3) ist auch als *Faradays Induktionsgesetz* bekannt. Eine Änderung der magnetischen Flussdichte \mathbf{B} führt zu einem elektrischen Gegenfeld.
- Bei Gleichung (2.4) handelt es sich um eine erweiterte Form des *Ampèreschen Durchflutungsgesetzes*

$$\oint_s \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} = \mu_0 \cdot I_{\text{enc}} \quad (2.6)$$

in differentieller Darstellung. Dieses Gesetz bezieht das Integral über das magnetische Feld auf einer geschlossenen Kurve um einen stromdurchflossenen Leiter auf die Summe der von der Kurve umschlossenen Ströme I_{enc} . Maxwell fiel auf, dass sich dieses Ampèresche Gesetz auf den Ladevorgang eines Kondensators nicht anwenden lässt und führte die *Verschiebungsstromdichte* $\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$ ein. \mathbf{J} lässt sich in zwei Anteile aufteilen: zum Anteil

$\mathbf{J}_{\text{source}}$ als unabhängige Quelle des E-Felds kommt bei Verwendung von Materialien mit elektrischen Verlusten noch die Dämpfung des elektrischen Feldes:

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_{\text{source}} + \sigma \cdot \mathbf{E} \quad (2.7)$$

σ ist dabei die elektrische Leitfähigkeit. Der Anteil $\mathbf{J}_{\text{source}}$ wird verwendet, um bei Computersimulationen auch stromdurchflossene Strukturen darstellen zu können.

Gleichung (2.4) gibt an, dass ein sich änderndes elektrisches Feld selbst dann ein magnetisches Feld erzeugt, wenn kein Strom fließt und ist sozusagen eine Umkehrung von Faradays Induktionsgesetz.

2.1.2 Elektromagnetische Wellen in zwei Dimensionen

Maxwell sagte mit der Entwicklung seiner Gleichungen die Existenz von elektromagnetischen Wellen voraus. Er entdeckte, dass eine Lösung seines Gleichungssystems zugleich die Wellengleichung

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} f = c^2 \cdot \nabla^2 f \quad (2.8)$$

erfüllt. Bei den elektromagnetischen Wellen handelt es sich um Transversalwellen. Die elektrischen und magnetischen Feldlinien stehen jeweils senkrecht zur Ausbreitungsrichtung und auch senkrecht aufeinander.

Betrachtet man die Ausbreitung von Licht in zwei Dimensionen (die z-Achse zeigt dabei senkrecht zur betrachteten Ebene), beispielsweise bei der Lösung von translationssymmetrischen Problemen, so kann man ohne Beschränkung der Allgemeinheit zwei Basispolarisationen oder *Strahlungsmoden* des Lichts angeben.

Bei der *transversal magnetischen Mode in Bezug auf die z-Achse* (TM_z) liegt die Komponente des elektrischen Felds parallel zur z-Richtung, die Komponenten des magnetischen Felds liegen senkrecht zur z-Achse in der x-y-Ebene. Diese Strahlungsmode lässt sich durch die Komponenten E_z , H_x und H_y beschreiben.

Bei der *transversal elektrischen Mode in Bezug auf die z-Achse* (TE_z) liegen die Komponenten des elektrischen Feldes senkrecht zur z-Achse in der x-y-Ebene, die Komponente des magnetischen Felds zeigt in z-Richtung. Zur Beschreibung dieser Strahlungsmode benötigt man die Komponenten E_x , E_y und H_z .

Da die beiden Strahlungsmoden keine gemeinsamen Feldkomponenten enthalten, können beide Moden gleichzeitig ohne Wechselwirkung existieren – zumindest bei Einsatz von isotropen Materialien. Durch Überlagerung der beiden Basispolarisationen lässt sich eine beliebige Polarisation des Lichts beschreiben.

Das Verhalten der beiden Strahlungsmoden TM_z und TE_z kann sehr unterschiedlich sein. Bei der Wechselwirkung mit einer langen metallischen Faser parallel zur z -Achse beispielsweise wird die TM_z -Mode eine starke Streuung erfahren, da die beweglichen Elektronen in der Faser entlang der Faserrichtung vom parallelen E-Feld beschleunigt werden und in Resonanz geraten können (siehe Abbildung 2.1 links). Da im Fall der TE_z -Mode das elektrische Feld senkrecht zur Faserrichtung verläuft, haben die Elektronen nur eine sehr begrenzte Strecke zur Verfügung, auf der sie beschleunigt werden könnten, und die Streuwirkung ist deutlich geringer (Abbildung 2.1 rechts).

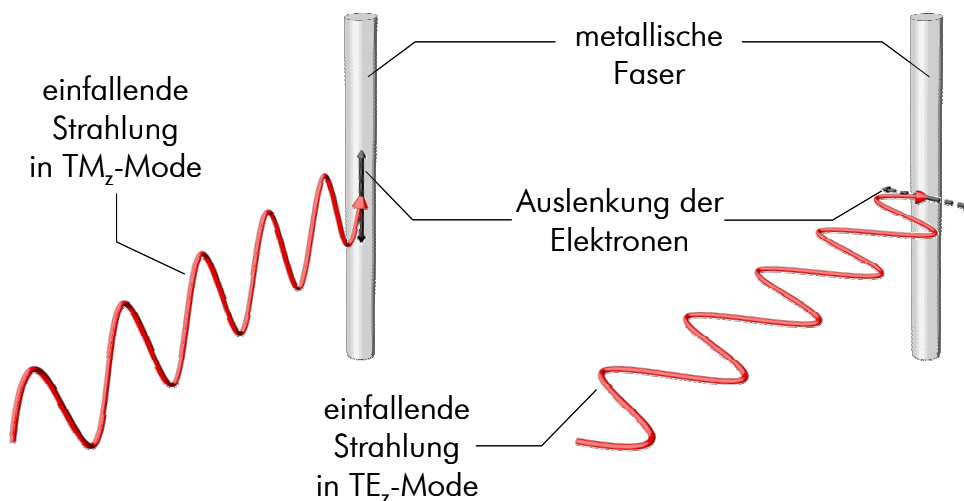


Abbildung 2.1

Bestrahlung einer langen metallischen Faser mit Strahlung der Mode TM_z (links) und TE_z (rechts). Dargestellt ist dabei jeweils das elektrische Feld, das für die Beschleunigung der Faserelektronen verantwortlich ist. Bei der TM_z -Mode verläuft diese parallel zur Faserachse (z -Achse) und es kann sich ein starkes Antwortfeld aufbauen. Bei der TE_z -Mode werden die Elektronen senkrecht zur Faserachse beschleunigt. Da nur eine sehr begrenzte Strecke im Inneren der Faser zur Verfügung steht, ist die Streuwirkung geringer.

2.2 Mie-Streuung

Da die Maxwellgleichungen das Verhalten von elektromagnetischer Strahlung und damit auch von Licht komplett beschreiben, lässt sich mit ihrer Hilfe auch die Streuung und Absorption von Licht an kleinen Partikeln berechnen. Eine analytische Lösung eines solchen Streuproblems ist allerdings nur für bestimmte einfache Partikelgeometrien und Randbedingungen möglich.

Allgemein lässt sich ein Streuproblem wie in Abbildung 2.2 dargestellt beschreiben. Ein einfallendes Feld regt die Elektronen in einem streuenden Teilchen zu Schwingungen an. Diese Schwingungen erzeugen wiederum ein eigenes elektromagnetisches Feld. Innerhalb des Teilchens bildet sich das interne Feld aus, außerhalb des Teilchens das Streufeld. Die resultierende Feldstärke an einem beliebigen Punkt außerhalb des Streuteilchens ergibt sich dann als Überlagerung des einfallenden Felds mit dem Streufeld.

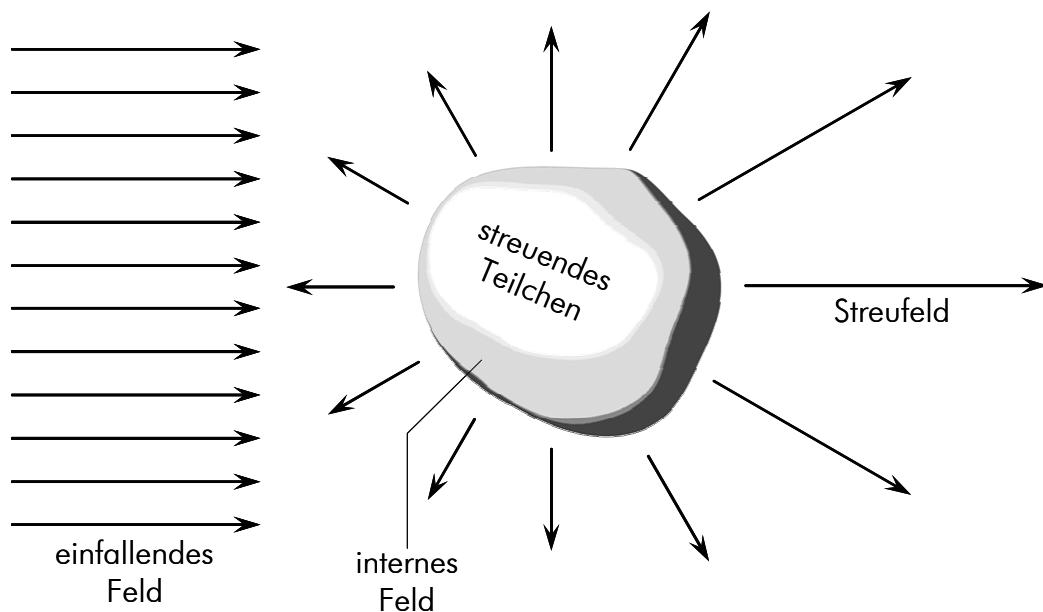


Abbildung 2.2

Schematische Darstellung eines Streuproblems. Ein einfallendes Feld regt Elektronen im streuenden Teilchen an. Im Inneren des Teilchens bildet sich ein internes Feld aus, außerhalb des Teilchens ein Streufeld.

Im Jahr 1908 entwickelte Gustav Mie [Mie 1908] eine Theorie zur exakten Lösung des Streuproblems für ein kugelförmiges Teilchen mit beliebigem Brechungsindex und Radius. Sowohl das Streufeld als auch das interne Feld lassen

sich so berechnen. Durch leichte Abänderungen lässt sich der Mie-Formalismus auch auf zylinderförmige Teilchen anwenden.

Obwohl die analytische Lösung exakt nur für kugel- bzw. zylinderförmige Teilchen gilt, lässt sie sich in guter Näherung auch auf andere Teilchen mit ähnlichem Querschnitt anwenden [Bohren 1983]

2.2.1 Streuung an einem unendlich langen Zylinder

Der Formalismus zur Berechnung der Streuung an einem unendlich langen Zylinder wird im Folgenden hergeleitet. Die Ausführungen halten sich dabei eng an [Bohren 1983].

Ein streuendes Teilchen in Form eines unendlich langen Zylinders wird von einer harmonischen ebenen Welle der Form

$$\mathbf{E}_{\text{ein}} = \mathbf{E}_0 \cdot e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)} \quad (2.9a)$$

$$\mathbf{H}_{\text{ein}} = \mathbf{H}_0 \cdot e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)} \quad (2.9b)$$

bestrahlt, wobei \mathbf{k} den Wellenvektor und \mathbf{x} den Ortsvektor bezeichnet. Durch Einsetzen dieser Felder in die Maxwellgleichungen (2.1) bis (2.4) und einige Umformungen lässt sich dann zeigen, dass die Felder \mathbf{E} und \mathbf{H} die Vektorwellengleichungen

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k^2 \mathbf{E} = 0 \quad (2.10a)$$

$$\nabla^2 \mathbf{H} + k^2 \mathbf{H} = 0 \quad (2.10b)$$

erfüllen müssen, wobei

$$k^2 = \omega^2 \varepsilon \mu \quad (2.11)$$

2.2.2 Randbedingungen

An der Grenzfläche zwischen zwei Medien mit unterschiedlichen Eigenschaften gelten spezielle Randbedingungen für die Felder, die sich aus Energieerhaltungsbetrachtungen herleiten lassen [Jackson 2002]: am Übergang zwischen den beiden Medien müssen die Tangentialkomponenten der Felder \mathbf{E} und \mathbf{H} und die Normalkomponenten der Felder \mathbf{D} und \mathbf{B} stetig sein, falls keine Ober-

flächenladungen oder Oberflächenströme vorhanden sind. Mathematisch lassen sich diese Bedingungen schreiben als

$$(\mathbf{E}_{\text{außen}} - \mathbf{E}_{\text{innen}}) \times \mathbf{n} = 0 \quad (2.12a)$$

$$(\mathbf{H}_{\text{außen}} - \mathbf{H}_{\text{innen}}) \times \mathbf{n} = 0 \quad (2.12b)$$

$$(\mathbf{D}_{\text{außen}} - \mathbf{D}_{\text{innen}}) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (2.12c)$$

$$(\mathbf{B}_{\text{außen}} - \mathbf{B}_{\text{innen}}) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (2.12d)$$

wobei \mathbf{n} der Normalenvektor auf die Zylinderoberfläche ist. Die Indizes „außen“ und „innen“ geben dabei an, ob das Feld außerhalb oder innerhalb des Streuteilchens gemeint ist.

2.2.3 Generierende Funktion

Es lässt sich zeigen, dass zwei Vektorfunktionen \mathbf{M} und \mathbf{N} der Form

$$\mathbf{M} = \nabla \times (\mathbf{c}\psi) \quad (2.13a)$$

$$\mathbf{N} = \frac{\nabla \times \mathbf{M}}{k} \quad (2.13b)$$

die Vektorwellengleichungen (2.10) erfüllen, wenn für die skalare Funktion ψ die skalare Wellengleichung

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0 \quad (2.14)$$

gilt. \mathbf{c} ist dabei ein beliebiger konstanter Vektor. Da \mathbf{M} und \mathbf{N} alle Eigenschaften eines elektromagnetischen Feldes aufweisen, lässt sich die Lösung der Maxwell'schen Gleichungen für die Streuung an einem unendlich langen Zylinder auf die Suche nach einer geeigneten *generierenden Funktion* ψ als Lösung der skalaren Wellengleichung vereinfachen.

2.2.4 Zylindergeometrie

Da sich das zu lösende Streuproblem zylindersymmetrisch beschreiben lässt, ist es am besten, auch die generierende Funktion in dieser Symmetrie anzugeben. Die skalare Wellengleichung (2.14) lautet in Zylinderkoordinaten

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + k^2 \psi = 0 \quad (2.15)$$

Durch Separation erhält man als Lösung dieser Gleichung

$$\psi_n(r, \phi, z) = Z_n(\rho) e^{in\phi} e^{ihz} \quad \text{mit } n \in \mathbb{N}_0 \quad (2.16)$$

ρ ist dabei definiert als

$$\rho = r \cdot \sqrt{k^2 - h^2} \quad (2.17)$$

Bei h handelt es sich um eine Separationskonstante, die durch die Randbedingungen bestimmt werden kann. Z_n schließlich ist eine Lösung der Besselschen Differentialgleichung

$$\rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} Z_n + \rho \frac{d}{d\rho} Z_n + (\rho^2 - n^2) Z_n = 0 \quad (2.18)$$

Die linear unabhängigen Lösungen dieser Differentialgleichung sind die Besselfunktionen erster und zweiter Art vom Grad n J_n und Y_n .

Die aus Gleichung (2.16) erzeugten Vektorfunktionen lauten dann

$$\mathbf{M}_n = \nabla \times (\hat{\mathbf{e}}_z \psi_n) = \left[\hat{\mathbf{e}}_x \frac{\partial}{\partial y} - \hat{\mathbf{e}}_y \frac{\partial}{\partial x} \right] \cdot \psi_n \quad (2.19a)$$

$$\mathbf{N}_n = \frac{\nabla \times \mathbf{M}_n}{k} = \frac{1}{k} \cdot \left[\hat{\mathbf{e}}_x \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} + \hat{\mathbf{e}}_y \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} - \hat{\mathbf{e}}_z \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right] \cdot \psi_n \quad (2.19b)$$

$\hat{\mathbf{e}}_z$ ist dabei der Einheitsvektor in z -Richtung, also parallel zur Zylinderachse. Die beiden Vektorfunktionen \mathbf{M}_n und \mathbf{N}_n sind orthogonal zueinander.

Betrachtet werden soll nun der Einfall einer ebenen Welle der Form

$$\mathbf{E}_{\text{ein}} = \mathbf{E}_0 e^{ik\hat{\mathbf{e}}_{\text{ein}} \cdot \mathbf{x}} \quad (2.20)$$

auf einen unendlich langen Zylinder mit Radius a . Die Einfallrichtung der Strahlung ist dann

$$\hat{\mathbf{e}}_{\text{ein}} = -\sin \zeta \hat{\mathbf{e}}_x - \cos \zeta \hat{\mathbf{e}}_z \quad (2.21)$$

wobei ζ den Winkel zwischen der Einfallsrichtung und der Zylinderachse angibt (siehe Abbildung 2.3).

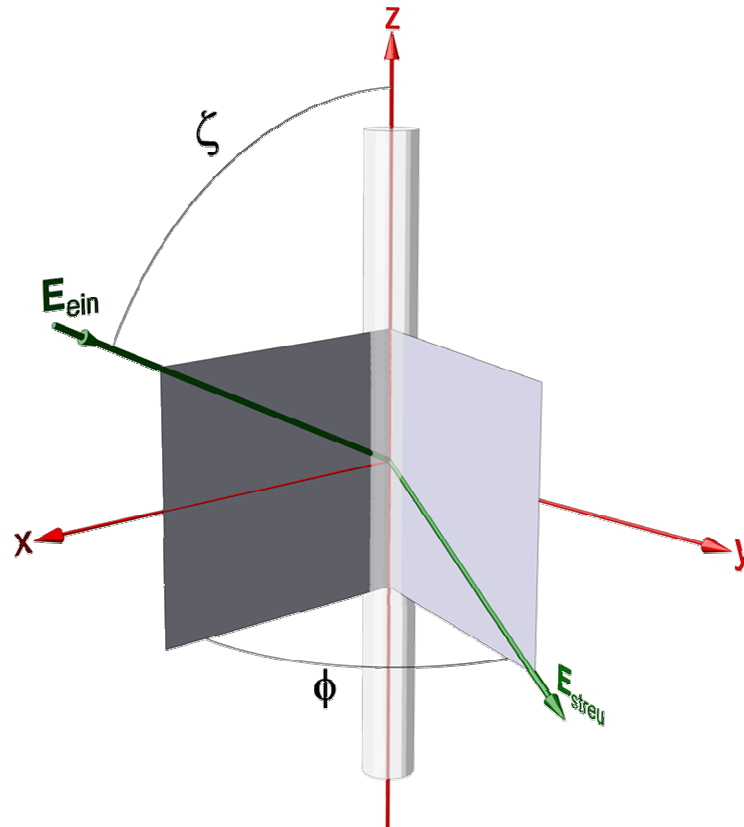


Abbildung 2.3

Schemazeichnung des Einfalls einer ebenen Welle auf einen unendlich langen Zylinder. Dargestellt ist dabei nur das elektrische Feld. ζ bezeichnet den Winkel zwischen der einfallenden Welle und der Zylinderachse, ϕ den Winkel zwischen der von der einfallenden Welle und der Zylinderachse aufgespannten Ebene und der Ebene, die von der gestreuten Welle und der Zylinderachse gebildet wird.

2.2.5 Polarisationsrichtungen

Unterschieden wird auch hier zwischen zwei Polarisationsrichtungen. Im einen Fall ist der Vektor des einfallenden elektrischen Feldes parallel zur x-z-Ebene, im anderen Fall senkrecht zu dieser Ebene.

Einfallendes elektrisches Feld parallel zur x-z-Ebene

Die einfallende Strahlung

$$\mathbf{E}_{\text{ein}} = E_0 (\sin \zeta \hat{\mathbf{e}}_z - \cos \zeta \hat{\mathbf{e}}_x) \cdot e^{-ik(r \sin \zeta \cos \phi z \cos \zeta)} \quad (2.22)$$

muss zunächst in die Vektorfunktionen entwickelt werden. Aus der Form von \mathbf{E}_{ein} lässt sich die Integrationskonstante h in Gleichung (2.16) zu

$$h = -k \cos \zeta \quad (2.23)$$

bestimmen. Da bei $r = 0$ physikalisch keine Singularität vorhanden sein soll, kommt als radiale Funktion nur die Besselfunktion erster Art J_n in Frage.

Damit lässt sich das einfallende Feld schreiben als

$$\mathbf{E}_{\text{ein}} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} [A_n \mathbf{M}_n + B_n \mathbf{N}_n] \quad (2.24)$$

wobei

$$\psi_n = J_n(kr \sin \zeta) e^{in\phi} e^{-ikz \cos \zeta} \quad (2.25)$$

als generierende Funktion für die Vektorfunktionen \mathbf{M}_n und \mathbf{N}_n verwendet wird.

Aus der Orthogonalität dieser Vektorfunktionen können schließlich die Gleichungen

$$A_n = 0 \quad (2.26a)$$

$$B_n = \frac{E_0 (-i)^n}{k \sin \zeta} \quad (2.26b)$$

abgeleitet werden, so dass das einfallende elektromagnetische Feld als

$$\mathbf{E}_{\text{ein}} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_n \mathbf{N}_n = \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_n \cdot \left(\frac{1}{k} \cdot \left[\hat{\mathbf{e}}_x \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} + \hat{\mathbf{e}}_y \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} - \hat{\mathbf{e}}_z \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right] \cdot \psi_n \right) \quad (2.27a)$$

$$\mathbf{H}_{\text{ein}} = \frac{-ik}{\omega \mu} \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_n \mathbf{M}_n = \frac{-ik}{\omega \mu} \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_n \cdot \left(\left[\hat{\mathbf{e}}_x \frac{\partial}{\partial y} - \hat{\mathbf{e}}_y \frac{\partial}{\partial x} \right] \cdot \psi_n \right) \quad (2.27b)$$

mit

$$E_n = \frac{E_0 (-i)^n}{k \sin \zeta} \quad (2.28)$$

geschrieben werden kann.

Für die Felder im Inneren des Zylinders muss aufgrund der Randbedingungen (2.12) am Übergang zwischen Zylinder und dem umgebenden Medium die gleiche Integrationskonstante h verwendet werden wie für das einfallende Feld. Da auch hier bei $r = 0$ keine Singularität vorliegen darf, ist die Funktion, die die radiale Abhängigkeit beschreibt, wiederum die Besselfunktion erster Art J_n . Als generierende Funktion ergibt sich damit

$$\psi_n = J_n \left(kr \sqrt{m^2 - \cos^2 \zeta} \right) e^{in\phi} e^{-ikz \cos \zeta} \quad (2.29)$$

m ist dabei der Brechungsindex des Zylinders relativ zum Brechungsindex des umgebenden Mediums.

Für die Entwicklungen ergibt sich damit

$$\mathbf{E}_{\text{innen}} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_n [g_n \mathbf{M}_n + f_n \mathbf{N}_n] \quad (2.30a)$$

$$\mathbf{H}_{\text{innen}} = \frac{-ik_{\text{innen}}}{\omega \mu_{\text{innen}}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_n [g_n \mathbf{N}_n + f_n \mathbf{M}_n] \quad (2.30b)$$

g_n und f_n sind Entwicklungskoeffizienten, die aus den Randbedingungen noch bestimmt werden müssen.

Zur Beschreibung des Streufeldes verwendet man nicht die Besselfunktion erster Art, sondern die Hankelfunktion erster Art, die als

$$H_n^{(1)} = J_n + iY_n \quad (2.31)$$

definiert ist und auch die Besselsche Differentialgleichung löst. Diese Funktion beschreibt das Verhalten des Streufelds bei großem Abstand zum Zylinder als auslaufende Welle, wie physikalisch erwartet wird.

Die gestreuten Felder können damit entwickelt werden in

$$\mathbf{E}_{\text{streu}} = - \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_n [b_{nI} \mathbf{N}_n + ia_{nI} \mathbf{M}_n] \quad (2.32a)$$

$$\mathbf{H}_{\text{streu}} = \frac{-ik}{\omega\mu} \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_n [b_{nI} \mathbf{M}_n + ia_{nI} \mathbf{N}_n] \quad (2.32b)$$

mit der generierenden Funktion

$$\psi_n = H_n^{(1)}(kr \sin \zeta) e^{in\phi} e^{-ikz \cos \zeta} \quad (2.33)$$

Auch hier müssen die Entwicklungskoeffizienten a_{nI} und b_{nI} mit Hilfe der Randbedingungen bestimmt werden.

Einfallendes elektrisches Feld senkrecht zur x-z-Ebene

Die Betrachtungen bei dieser Polarisationsmode verlaufen analog zum vorherigen Abschnitt. Das einfallende elektrische Feld

$$\mathbf{E}_{\text{ein}} = E_0 \hat{\mathbf{e}}_y \cdot e^{-ik(r \sin \zeta \cos \phi + z \cos \zeta)} \quad (2.34)$$

kann entwickelt werden in

$$\mathbf{E}_{\text{ein}} = -i \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_n \mathbf{M}_n \quad (2.35)$$

Für das Streufeld gilt dann

$$\mathbf{E}_{\text{streu}} = - \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_n [b_{nII} \mathbf{N}_n + ia_{nII} \mathbf{M}_n] \quad (2.36)$$

mit den aus den Randbedingungen bestimmten Entwicklungskoeffizienten a_{nII} und b_{nII} .

Die Amplitudenstrematrix

Da sowohl die Maxwellgleichungen als auch die Randbedingungen linear sind, muss auch die Beziehung zwischen einfallendem Feld und Streufeld linear sein. Das Streufeld lässt sich damit nach der Koordinatentransformation

$$\Theta = \pi - \phi \quad (2.37)$$

in Matrixschreibweise darstellen als

$$\begin{pmatrix} E_{\parallel \text{streu}} \\ E_{\perp \text{streu}} \end{pmatrix} = e^{i3\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} e^{ikr(r \sin \zeta - z \cos \zeta)} \begin{pmatrix} T_1 & T_4 \\ T_3 & T_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\parallel \text{ein}} \\ E_{\perp \text{ein}} \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

mit

$$T_1 = b_{0\text{I}} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} b_{n\text{I}} \cos(n\Theta) \quad (2.39a)$$

$$T_2 = a_{0\text{II}} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} a_{n\text{II}} \cos(n\Theta) \quad (2.39b)$$

$$T_3 = -2i \sum_{n=1}^{\infty} a_{n\text{I}} \sin(n\Theta) \quad (2.39c)$$

$$T_4 = -2i \sum_{n=1}^{\infty} b_{n\text{II}} \sin(n\Theta) = -T_3 \quad (2.39d)$$

Die Indizes $_{\parallel}$ und $_{\perp}$ bezeichnen dabei jeweils die Polarisationsmoden mit elektrischem Feldvektor parallel oder senkrecht zur x - z -Ebene. Die Faktoren vor der Matrix erhält man durch eine Betrachtung des asymptotischen Verhaltens der Hankelfunktion für große Abstände.

Die Tatsache, dass die Matrixelemente T_3 und T_4 nicht gleich Null sind bedeutet, dass im allgemeinen Fall, also bei Lichteinfall in einem Winkel ζ zur Zylinderachse, die beiden Polarisationsmoden nicht getrennt voneinander betrachtet werden können. Fällt Licht in nur einer der beiden Polarisierungen auf den Zylinder, weist das Streulicht trotzdem Komponenten in beiden Polarisationszuständen auf.

2.2.6 Lichteinfall senkrecht zur Zylinderachse

Fällt das Licht senkrecht zur Zylinderachse ein, also für $\zeta = 90^\circ$, vereinfachen sich die oben angegebenen Gleichungen. Die Polarisationsmode mit dem elektrischen Feldvektor senkrecht zur x - z -Ebene entspricht dann der bereits vorgestellten TM_z -Polarisation, die Mode mit dem elektrischen Feldvektor senkrecht zur x - z -Ebene der TE_z -Polarisation.

Für Licht in TM_z -Polarisation verschwindet der Koeffizient $a_{n\text{I}}$ und es gilt

$$b_n = b_{n\text{I}}(\zeta = 90^\circ) = \frac{J_n(mx)J'_n(x) - mJ'_n(mx)J_n(x)}{J_n(mx)H_n^{(1)'}(x) - mJ'_n(mx)H_n^{(1)}(x)} \quad (2.40)$$

Die gestrichenen Größen bedeuten dabei einfache Ableitungen nach dem Ort.

Fällt Licht in TE_z-Polarisation senkrecht zur Zylinderachse ein, verschwindet der Koeffizient $b_{n\text{I}}$. Übrig bleibt dann

$$a_n = a_{n\text{II}}(\zeta = 90^\circ) = \frac{mJ'_n(x)J_n(mx) - J_n(x)J'_n(mx)}{mJ_n(mx)H_n^{(1)'}(x) - J'_n(mx)H_n^{(1)}(x)} \quad (2.41)$$

Für die Beziehung zwischen Streufeld und einfallendem Feld ergibt sich die Formel

$$\begin{pmatrix} E_{\parallel \text{streu}} \\ E_{\perp \text{streu}} \end{pmatrix} = e^{i3\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} e^{ikr} \begin{pmatrix} T_1 & 0 \\ 0 & T_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\parallel \text{ein}} \\ E_{\perp \text{ein}} \end{pmatrix} \quad (2.42)$$

mit

$$T_1 = b_0 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} b_n \cos(n\Theta) \quad (2.43a)$$

$$T_2 = a_0 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(n\Theta) \quad (2.43b)$$

Die beiden Matrixelemente T_3 und T_4 verschwinden, so dass die beiden Polarisationsmoden für die einfallende Strahlung wirklich unabhängig voneinander betrachtet werden können.

2.2.7 Umsetzung als 2D-Computersimulation

Bei der Betrachtung in zwei Dimensionen – die Zylinderachse verläuft hierbei senkrecht zur betrachteten Ebene – fällt die Strahlung auf die Zylinder immer senkrecht zur Achse ein. Mit Hilfe der dann geltenden Formeln (2.40) bis (2.43) lässt sich die Mie-Streuung relativ leicht in einem Computerprogramm implementieren. Die schwierigste Hürde ist dabei die Berechnung der Bessel- und Hankelfunktionen. Hierfür stehen jedoch genügend ausgereifte Algorithmen zur Verfügung, beispielsweise in [Press 2002].

2.3 Finite Differenzen im Zeitregime (FDTD)

Die meisten komplexeren Probleme lassen sich durch analytische Lösungsansätze wie den Mie-Formalismus leider nicht mehr beschreiben. Abhilfe schafft hierbei die numerische Simulation mit der Methode der *Finiten Differenzen im Zeitregime* (englisch: *finite differences in the time domain*), kurz FDTD. Der FDTD-Formalismus wurde 1966 von K. S. Yee [Yee 1966] ursprünglich für militärische Anwendungen entwickelt, beispielsweise die Berechnung des Verhaltens von Radarwellen bei Streuung an metallischen Körpern, etwa Flugzeugen. Erst seit etwa 1990 hat sich diese Methode auch außerhalb des militärischen Bereichs durchgesetzt [Taflove 2000], und zwar mit sehr großem Erfolg.

Bei der FDTD-Methode werden die Maxwell'schen Gleichungen für bestimmte Raumpunkte numerisch gelöst. Dazu wird das Gebiet, in dem diese partiellen Differentialgleichungen berechnet werden sollen, in eine endliche, also finite, Anzahl von Gitterzellen aufgeteilt. Die Ableitungen in den Gitterzellen werden nun durch Differenzen angenähert. Die Ausführungen in diesem Kapitel folgen im wesentlichen dem Standardwerk für die FDTD-Methode, [Taflove 2000].

Falls in dem betrachteten Gebiet keine elektrischen oder magnetischen Quellen vorhanden sind, reichen bei geeigneter Anordnung der Berechnungspunkte für die Felder die beiden zeitabhängigen Maxwell'schen Differentialgleichungen (2.3) und (2.4) zur Beschreibung der elektromagnetischen Phänomene aus. In Komponentenschreibweise und unter Verwendung der Beziehungen (2.5) zur Beschränkung auf die Felder \mathbf{E} und \mathbf{H} lauten die beiden notwendigen Gleichungen:

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} - (J_{\text{source}_x} + \sigma E_x) \right] \quad (2.44a)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} - (J_{\text{source}_y} + \sigma E_y) \right] \quad (2.44b)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - (J_{\text{source}_z} + \sigma E_z) \right] \quad (2.44c)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left[\frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right] \quad (2.45a)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left[\frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right] \quad (2.45b)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left[\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right] \quad (2.45c)$$

2.3.1 Betrachtung in zwei Dimensionen

In dieser Arbeit wurden die FDTD-Simulationen in zwei Dimensionen durchgeführt – die modellierten Strukturen und die einfallende Welle sind translations-symmetrisch in Richtung der z-Achse. Für die Maxwell'schen Gleichungen (2.44) und (2.45) bedeutet dies, dass alle partiellen Ableitungen in Bezug auf z verschwinden.

Teilt man nun die Gleichungssysteme (2.44) und (2.45) in ihre Komponenten entsprechend den Strahlungsmoden TM_z und TE_z auf, so erhält man für die TM_z -Mode die Gleichungen

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left[- \frac{\partial E_z}{\partial y} \right] \quad (2.46a)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left[\frac{\partial E_z}{\partial x} \right] \quad (2.46b)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - (J_{\text{source}_z} + \sigma E_z) \right] \quad (2.46c)$$

und für die TE_z -Mode

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{\partial H_z}{\partial y} - (J_{\text{source}_x} + \sigma E_x) \right] \quad (2.47a)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left[- \frac{\partial H_z}{\partial x} - (J_{\text{source}_y} + \sigma E_y) \right] \quad (2.47b)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left[\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right] \quad (2.47c)$$

Alle weiteren Erläuterungen zur FDTD-Methode in diesem Kapitel beziehen sich auf den zweidimensionalen Fall.

2.3.2 Yee-Zelle und leapfrog-Algorithmus

Im Algorithmus von K. S. Yee werden die Komponenten von \mathbf{E} und \mathbf{H} an verschiedenen Orten berechnet, und zwar so, dass die \mathbf{H} -Komponente immer genau zwischen den \mathbf{E} -Komponenten liegen. Es lässt sich zeigen, dass bei dieser Anordnung die Gültigkeit der Maxwellgleichungen (2.1) und (2.2) in den zur Berechnung verwendeten Gleichungen (2.3) und (2.4) implizit enthalten ist [Taflove 2000]. Eine Elementarzelle des so entstandenen Gitters aus \mathbf{E} - und \mathbf{H} -Komponenten nennt man eine *Yee-Zelle*.

Zusätzlich zu der Verschränkung der beiden Felder im Ort wird auch eine Verschränkung in der Zeit durchgeführt: \mathbf{E} und \mathbf{H} werden iterativ, also abwechselnd, berechnet (sogenanntes *leapfrog time-stepping*).

Abbildung 2.4 verdeutlicht diese Aufteilung in Ort und Zeit am Beispiel der TM_z -Mode, Abbildung 2.5 zeigt die TE_z -Mode.

2.3.3 Finite Differenzen: Reihenentwicklung

Um nun die Ableitungen eines Feldes an einem bestimmten Raumpunkt zu einer bestimmten Zeit zu berechnen, wird auf die Methode der finiten Differenzen zurückgegriffen, die eine Ableitung durch eine Differenz annähert. Dazu benötigt wird die *Taylorische Reihenentwicklung* einer Funktion f in der Nähe des Punktes x_0 :

$$f(x_0 + \Delta x) = \sum_{n=0}^{n=\infty} \frac{(\Delta x)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} f(x_0) \quad (2.48)$$

Entwickelt man die Funktion f für die Punkte $x_0 + \Delta x/2$ und $x_0 - \Delta x/2$, erhält man

$$f(x_0 + \Delta x/2) = f(x_0) + \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial}{\partial x} f(x) \Big|_{x_0} + \frac{(\Delta x)^2}{8} \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) \Big|_{x_0} + O(\Delta x)^3 \quad (2.49)$$

$$f(x_0 - \Delta x/2) = f(x_0) - \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial}{\partial x} f(x) \Big|_{x_0} + \frac{(\Delta x)^2}{8} \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) \Big|_{x_0} - O(\Delta x)^3 \quad (2.50)$$

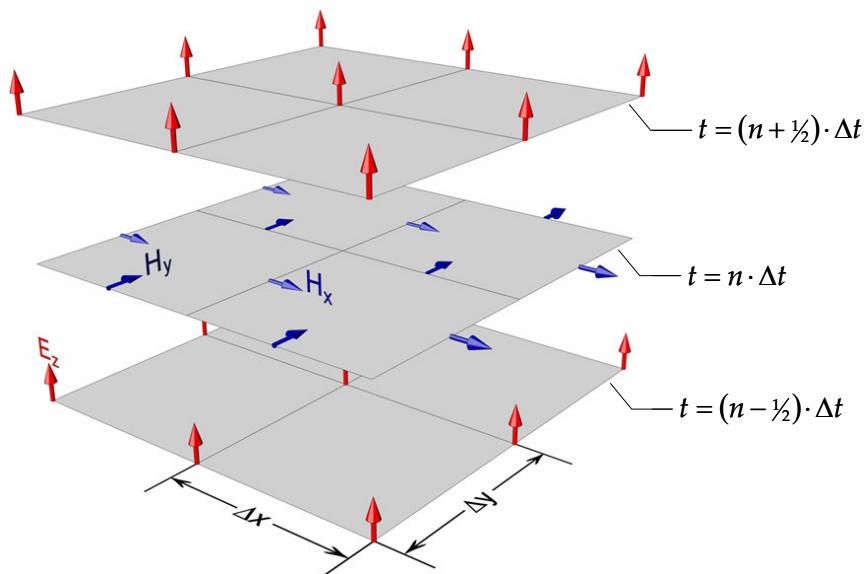


Abbildung 2.4

Visualisierung der Yee-Zellen und des leapfrog time-steppings für die TM_z -Mode. Die E_z -Komponenten werden im Abstand Δx und Δy berechnet, die H -Komponenten jeweils in der Mitte zwischen den E -Komponenten. Eine Elementarzelle dieser Anordnung nennt man Yee-Zelle. Auch zeitlich wird bei der Berechnung von E - und H -Feld unterschieden. In einem Zeitschritt wird das E -Feld generiert, daraus dann das H -Feld. Im nächsten Zeitschritt wird aus diesem H -Feld dann wieder das E -Feld ermittelt (leapfrog time-stepping).

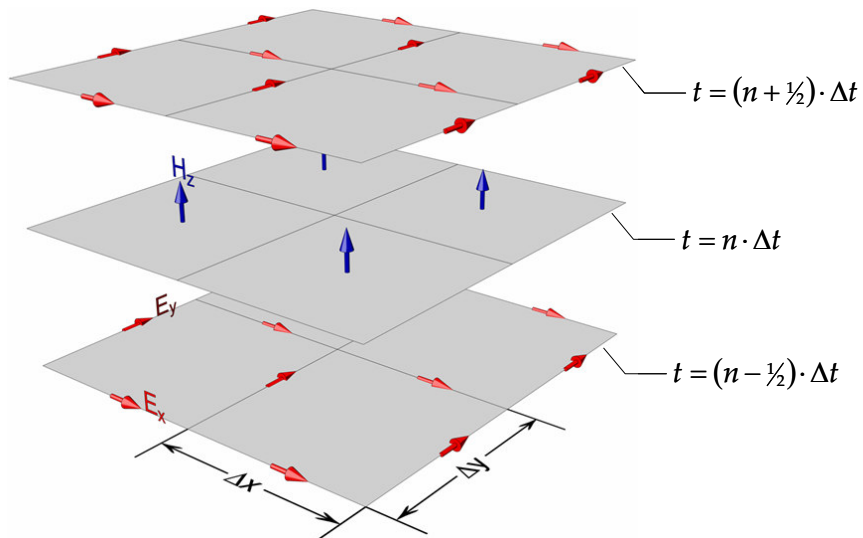


Abbildung 2.5

Yee-Zellen und leapfrog time-stepping für die TE_z -Mode. Einzelheiten siehe bei Abbildung 2.4.

Subtrahiert man nun Gleichung (2.50) von Gleichung (2.49), so kann man die Ableitung der Funktion f an der Stelle x_0 zu

$$\frac{\partial}{\partial x} f(x)|_{x_0} = \frac{f(x_0 + \Delta x/2) - f(x_0 - \Delta x/2)}{\Delta x} + O(\Delta x)^3 \quad (2.51)$$

bestimmen. Dies nennt man eine *Zentrale-Differenzen-Näherung mit Genauigkeit zweiter Ordnung*.

Um bei den Formeln etwas Platz zu sparen, bezeichnet man eine Funktion an der Position $i\Delta x$ und $j\Delta y$ im Finite-Differenzen-Gitter zum Zeitpunkt $n\Delta t$ mit

$$f(i\Delta x, j\Delta y, n\Delta t) = f_{i,j}^n \quad (2.52)$$

Die tiefgestellten Indizes i und j geben also die entsprechende Gitterzelle an, der hochgestellte Index n den Zeitschritt. Die Ableitungen dieser Funktion nach dem Ort mit Genauigkeit zweiter Ordnung lassen sich nun als

$$\frac{\partial}{\partial x} f_{i,j}^n = \frac{f_{i+1/2,j}^n - f_{i-1/2,j}^n}{\Delta x} \quad (2.53a)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} f_{i,j}^n = \frac{f_{i,j+1/2}^n - f_{i,j-1/2}^n}{\Delta y} \quad (2.53b)$$

schreiben. Analog lautet die Ableitung nach der Zeit dann

$$\frac{\partial}{\partial t} f_{i,j}^n = \frac{f_{i,j}^{n+1/2} - f_{i,j}^{n-1/2}}{\Delta t} \quad (2.53c)$$

2.3.4 Anwendung auf die Maxwellgleichungen

Mit Hilfe dieser Gleichungen für die Ableitungen nach Ort und Zeit kann man nun die Maxwellschen Gleichungen so umformen, dass sie sich mit Hilfe des *leapfrog*-Algorithmus lösen lassen. Das Verfahren wird anhand der E_z -Komponente der TM_z -Mode

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - (J_{\text{source}_z} + \sigma E_z) \right] \quad (2.46c)$$

verdeutlicht. Wendet man nun die Gleichungen (2.53) auf die obige Gleichung an, so erhält man

$$\frac{E_z|_{i,j}^{n+1/2} - E_x|_{i,j}^{n-1/2}}{\Delta t} = \frac{1}{\varepsilon_{i,j}} \cdot \left[\begin{array}{c} \frac{H_y|_{i+1/2,j}^n - H_y|_{i-1/2,j}^n}{\Delta x} - \frac{H_x|_{i,j+1/2}^n - H_x|_{i,j-1/2}^n}{\Delta y} \\ -J_{\text{source}_z}|_{i,j}^n - \sigma_{i,j} \cdot E_z|_{i,j}^n \end{array} \right] \quad (2.54)$$

Es fällt auf, dass der Zeitschritt $n+1/2$, für den das elektrische Feld ja berechnet werden soll, nur auf der linken Seite der Gleichung auftaucht. Leider wird zur Berechnung jedoch auch das durch die Leitfähigkeit bedingte elektrische Feld E_z zum Zeitschritt n benötigt, was im *leapfrog*-Verfahren nicht ermittelt wurde.

Abhilfe schafft hierbei die *semi-implizite Näherung*

$$E_z|_{i,j}^n = \frac{E_z|_{i,j}^{n+1/2} + E_z|_{i,j}^{n-1/2}}{2} \quad (2.55)$$

die das Feld zum Zeitschritt n als arithmetisches Mittel aus den Werten zu den Zeitschritten $n+1/2$ und $n-1/2$ abschätzt und numerisch stabile Ergebnisse für alle physikalisch sinnvollen Werte von σ , also zwischen Null und Unendlich, liefert [Taflove 2000]. Hiermit erhält man dann nach einigen Schritten

$$E_z|_{i,j}^{n+1/2} = \left(\frac{1 - \frac{\sigma_{i,j} \cdot \Delta t}{2\varepsilon_{i,j}}}{1 + \frac{\sigma_{i,j} \cdot \Delta t}{2\varepsilon_{i,j}}} \right) E_z|_{i,j}^{n-1/2} + \left(\frac{\frac{\Delta t}{\varepsilon_{i,j}}}{1 + \frac{\sigma_{i,j} \cdot \Delta t}{2\varepsilon_{i,j}}} \right) \cdot \left[\begin{array}{c} \frac{H_y|_{i+1/2,j}^n - H_y|_{i-1/2,j}^n}{\Delta x} - \frac{H_x|_{i,j+1/2}^n - H_x|_{i,j-1/2}^n}{\Delta y} \\ -J_{\text{source}_z}|_{i,j}^n \end{array} \right] \quad (2.56a)$$

Für die anderen Komponenten der TM_z -Mode ergibt sich nach der gleichen Methode

$$H_x \Big|_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} = H_x \Big|_{i,j+\frac{1}{2}}^n + \left(\frac{\Delta t}{\mu_{i,j+\frac{1}{2}}} \right) \cdot \left[\frac{E_z \Big|_{i,j+1}^{n+\frac{1}{2}} - E_z \Big|_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} \right] \quad (2.56b)$$

und

$$H_y \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} = H_y \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^n + \left(\frac{\Delta t}{\mu_{i+\frac{1}{2},j}} \right) \cdot \left[\frac{E_z \Big|_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} - E_z \Big|_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} \right] \quad (2.56c)$$

Analog kann man die Komponenten der TE_z-Mode bestimmen:

$$H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{n+1} = H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n + \left(\frac{\Delta t}{\mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}} \right) \cdot \left[\frac{E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j+1}^{n+\frac{1}{2}} - E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} - \frac{E_y \Big|_{i+1,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - E_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} \right] \quad (2.57a)$$

$$E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n+\frac{1}{2}} = \left(\frac{1 - \frac{\sigma_{i+\frac{1}{2},j} \cdot \Delta t}{2\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j}}}{1 + \frac{\sigma_{i+\frac{1}{2},j} \cdot \Delta t}{2\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j}}} \right) E_x \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n-\frac{1}{2}} + \left(\frac{\frac{\Delta t}{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j}}}{1 + \frac{\sigma_{i+\frac{1}{2},j} \cdot \Delta t}{2\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j}}} \right) \cdot \left[\frac{H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n - H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^n}{\Delta y} - J_{\text{source}_z} \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^n \right] \quad (2.57b)$$

$$\begin{aligned}
 E_y \Big|_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} &= \left(\frac{1 - \frac{\sigma_{i+\frac{1}{2},j} \cdot \Delta t}{2\varepsilon_{i,j+\frac{1}{2}}}}{1 + \frac{\sigma_{i,j+\frac{1}{2}} \cdot \Delta t}{2\varepsilon_{i,j+\frac{1}{2}}}} \right) E_y \Big|_{i+\frac{1}{2},j}^{n-\frac{1}{2}} \\
 &+ \left(\frac{\frac{\Delta t}{\varepsilon_{i,j+\frac{1}{2}}}}{1 + \frac{\sigma_{i,j+\frac{1}{2}} \cdot \Delta t}{2\varepsilon_{i,j+\frac{1}{2}}}} \right) \cdot \left[\frac{H_z \Big|_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n - H_z \Big|_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^n}{\Delta x} - J_{\text{source}_z} \Big|_{i,j+\frac{1}{2}}^n \right]
 \end{aligned} \tag{2.57c}$$

2.3.5 Umsetzung als Computersimulation

Mit Hilfe der oben angegebenen Gleichungen (2.56) und (2.57) lässt sich die FDTD-Methode sehr kompakt in einer beliebigen Programmiersprache implementieren. Hierfür wird das zu betrachtende Gebiet in Gitterzellen der Größe Δx aufgeteilt. Um eine bestimmte Struktur in der Computersimulation abzubilden, müssen die entsprechenden Gitterzellen mit Daten des zu simulierenden Materials für die Leitfähigkeit σ , die elektrische Permittivität ε und die magnetische Permeabilität μ gefüllt werden.

Für jede Gitterzelle müssen die Felder \mathbf{E} und \mathbf{H} mit jeweils drei Raumkomponenten zum aktuellen Zeitschritt im Speicher behalten werden. Daraus können dann in einem iterativen Verfahren aus den Werten in den benachbarten Zellen die Felder zu späteren Zeitschritten berechnet werden.

Die Zellgröße Δx richtet sich nach der Größe der zu untersuchenden Strukturen und der betrachteten Wellenlänge. Δx muss so klein sein, dass alle relevanten Strukturen aus den Gitterzellen gebildet werden können. Um Interferenzeffekte wie Beugung korrekt wiederzugeben, müssen die Zellen außerdem so klein sein, dass der Bereich einer Wellenlänge in typischerweise zehn bis zwanzig Gitterpunkte unterteilt ist [Taflove 2000]. Die Größe des Zeitschritts Δt wird nach Kriterien der numerischen Stabilität aus der Zellgröße Δx berechnet.

Die größte Schwäche des FDTD-Algorithmus liegt in der großen Anzahl benötigter Gitterzellen und somit des großen Arbeitsspeicher- und Rechenzeitbedarfs zur Berechnung der erforderlichen Felder in allen Zellen. Gerade bei

der Untersuchung komplizierter Strukturen und/oder kleiner Wellenlängen ist deshalb meist nur eine Untersuchung des Nahfeldes möglich – eine Ausdehnung des Berechnungsbereichs ins Fernfeld hinein würde Speicherbedarf und Rechenzeit überstrapazieren.

Absorbierende Randbedingungen

Bei der FDTD-Methode werden die elektrischen und magnetischen Felder iterativ aus den Feldkomponenten der benachbarten Zellen berechnet. Am Rand des betrachteten und durch Gitterzellen repräsentierten Bereichs ist dies jedoch nicht möglich: es sind keine benachbarten Zellen und damit auch keine Werte für die Felder vorhanden. Für die Berechnung bedeutet dies, dass sich die Randzellen des betrachteten Bereichs so verhalten, als ob die außerhalb des Berechnungsbereichs liegenden Zellen feldfrei wären. Ein nicht vorhandenes elektrisches Feld ist aber eine Eigenschaft eines idealen Leiters – die Umrandung des betrachteten Bereichs verhält sich also wie ein ideales Metall und wirkt spiegelnd für einfallende elektromagnetische Wellen.

Mit geeigneten Randbedingungen kann dieser Effekt jedoch beseitigt werden. Ähnlich wie in einem schalltoten Raum durch absorbierende Materialien an den Wänden die Reflexionen der Schallwellen unterbunden werden und dadurch die Illusion einer unendlichen Ebene erzeugt wird, kann durch ein in geeigneter Weise absorbierendes Medium am Rand des Berechnungsbereichs die Reflexion von elektromagnetischen Wellen unterbunden werden.

Die am weitesten verbreitete Methode hierzu ist das *Perfectly Matched Layer* (PML) von Berenger [Berenger 1994], das Reflexionen am Rand des betrachteten Bereichs für alle Einfallswinkel und Frequenzen nahezu komplett unterdrückt. Erreicht wird dies durch eine wenige Gitterzellen breite Zone mit einem virtuellen PML-Medium mit geeigneten Eigenschaften um die eigentliche Berechnungsfläche. Näheres dazu findet sich in [Berenger 1994] und auch in [Taflove 2000].

Strahlungsquellen

Zur Vervollständigung der Simulation wird noch eine Strahlungsquelle benötigt – schließlich soll die Antwort eines Systems auf eine bestimmte elektromagnetische Anregung ermittelt werden. Mehrere Möglichkeiten stehen zur Verfügung:

- Über die Stromdichte kann beispielsweise ein stromdurchflossener Leiter simuliert werden, von dem sich dann elektrische Felder ausbreiten.
- Als so genannte *hard sources* können elektrisches und magnetisches Feld an bestimmten Gitterpunkten fest vorgegeben werden. Eine Variation mit der Zeit ist dabei möglich. Diese Art der Strahlungsquelle ist sehr einfach zu implementieren, hat aber den Nachteil, dass sich die Quell-Gitterzellen durch die fest vorgegebenen Felder wie ein Metall verhalten und auf sie zurückgeworfene Strahlung wieder reflektieren.
- Über die *total field/scattered field-Methode (TF/SF)* kann eine einfallende ebene Welle implementiert werden. Ausgegangen wird dabei von der Überlegung, dass das zu berechnende totale Feld aus einer Überlagerung des Streufeldes und des einfallenden Feldes besteht:

$$\mathbf{E}_{\text{total}} = \mathbf{E}_{\text{ein}} + \mathbf{E}_{\text{streu}} \quad (2.58a)$$

$$\mathbf{H}_{\text{total}} = \mathbf{H}_{\text{ein}} + \mathbf{H}_{\text{streu}} \quad (2.58b)$$

Die einfallenden Felder \mathbf{E}_{ein} und \mathbf{H}_{ein} bezeichnen dabei die Felder, wie sie sich im Vakuum ausbreiten würden und sind für alle Gitterzellen des Berechnungsbereichs bekannt. Aufgrund der Linearität der Maxwellgleichungen lässt sich der gesamte FDTD-Algorithmus sowohl getrennt auf das einfallende und das gestreute Feld als auch auf beide zusammen als totales Feld anwenden. Dadurch ist es möglich, an den Randzellen des Berechnungsbereichs aus dem totalen Feld in den Nachbarzellen und dem bekannten einfallenden Feld das gestreute Feld einzeln zu berechnen. Dies hat zwei Vorteile: zum einen trifft nur das gestreute Feld auf die absorbierenden Randbedingungen in der PML-Zone, die dadurch stabiler funktionieren. Zum anderen wird durch die Integration des einfallenden Feldes eine Strahlungsquelle in Form einer ebenen Welle erzeugt, die nicht die Nachteile der *hard sources* aufweist, nämlich dass elektromagnetische Strahlung an der eigentlichen Strahlungsquelle unphysikalisch reflektiert wird.

Abbildung 2.6 zeigt die Gitterzellen, die in der eigentlichen FDTD-Simulation mit Berücksichtigung der PML und der TF/SF-Methode verwendet werden. Den eigentlichen Berechnungsbereich, in dem das totale Feld nach Wechsel-

wirkung eines einfallenden Felds an einer Struktur ermittelt wird, umgibt eine Zone aus mehreren Gitterzellen, die für die absorbierenden Randbedingungen mit dem PML verwendet werden. Zur Erzeugung einer ebenen Welle als Strahlungsquelle wird in den Randzellen des Berechnungsbereichs das einfallende Feld nach der TF/SF-Methode abgezogen, so dass hier nur das gestreute Feld berechnet wird.

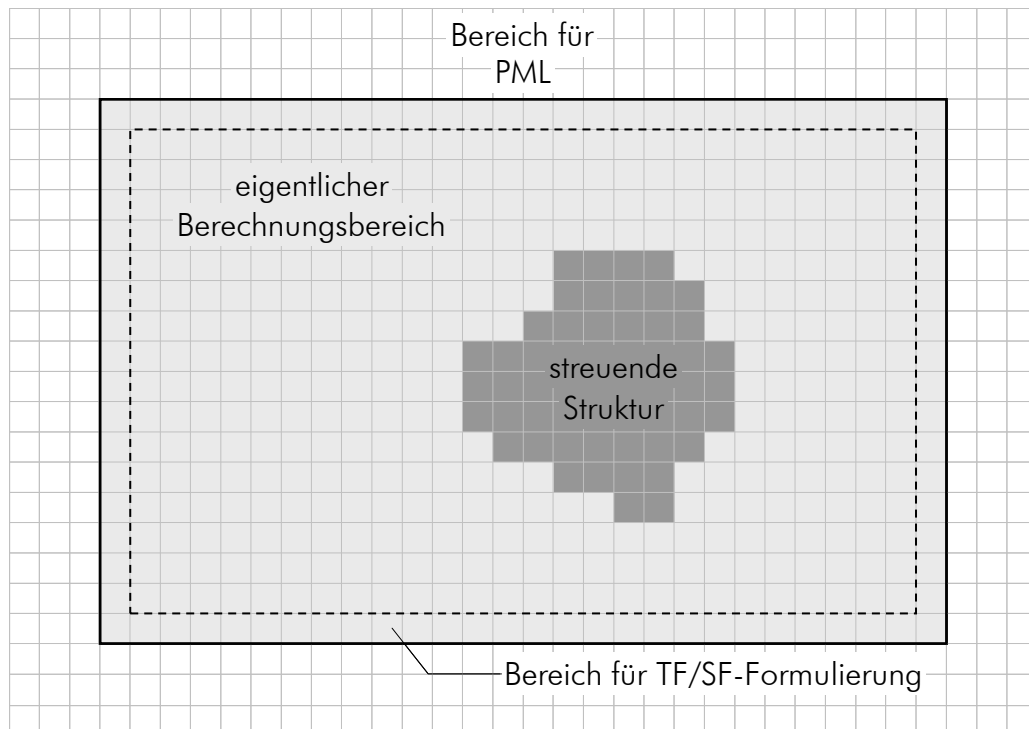


Abbildung 2.6

Aufteilung der Gitterzellen bei der FDTD-Simulation. Der eigentliche Berechnungsbereich ist von einem Bereich für die absorbierenden Randbedingungen, dem Perfectly Matched Layer (PML) umgeben. In den äußersten Gitterzellen des Berechnungsbereichs wird über die TF/SF-Methode eine einfallende ebene Welle erzeugt.

Wellenlängen und Fouriertransformation

Ein großer Vorteil der FDTD-Methode ist die Möglichkeit, die Antwort eines Systems auf Anregungen mit verschiedenen Frequenzen in einer einzigen Simulation zu berechnen. Zurückgegriffen wird hierbei auf die Methode der Fouriertransformation.

Jean Baptiste Fourier entdeckte 1822, dass sich eine beliebige periodische Funktion durch eine Überlagerung von harmonischen Wellen darstellen lässt,

den Fourierkomponenten [Fourier 1822]. Bei der Welle mit der tiefsten Frequenz spricht man von der Grundschiwingung, die anderen Wellen mit Vielfachen dieser Frequenz heißen Oberschiwingungen. Mit Hilfe der Fouriertransformation kann so eine periodische Funktion in ein kontinuierliches Spektrum, also die Anteile von Grund- und Oberschiwingungen, zerlegt werden. Die Fouriertransformation stellt also den Übergang vom Orts- und Zeitraum in den Frequenzraum dar.

Da die Fouriertransformierte eines kurzen Impulses im Orts- und Zeitraum eine konstante Funktion im Frequenzraum ist, kann ein kurzer elektromagnetischer Impuls als eine Überlagerung von harmonischen Wellen aller Frequenzen betrachtet werden. Dies heißt aber auch, dass die Antwort eines Systems auf die Anregung mit einem solchen kurzen Impuls Informationen über das Verhalten des Systems bei Anregung mit harmonischen Wellen mit allen möglichen Wellenlängen enthält.

In der Simulation verwendet man als kurzen Impuls eine gaussförmige Anregung mit sehr geringer Breite. Bei einem Rechteckpuls würden die Unstetigkeiten im einfallenden Feld zu Schwierigkeiten mit dem FDTD-Algorithmus führen.

Ausgesprochen detaillierte Ausführungen zu allen Bereichen der FDTD-Methode finden sich im Standardwerk [Taflove 2000]. Eine sehr kompakte Übersicht mit vielen Beispielen zur Umsetzung in ein Computerprogramm kann man in [Sullivan 2000] nachlesen. Leider finden sich dort viele Druck- und Vorzeichenfehler, vor allem in den abgedruckten Computerprogrammen.

3 Simulationen und Messungen

3.1 Optische Eigenschaften einer mikrostrukturierten Metallschicht

Durch Strukturierung einer durchgehenden Metallschicht zu einem Gitter erwartet man wellenlängenselektives Verhalten dieses Gitters in Bezug auf einfallende Strahlung (siehe Abschnitt 1.2.4). Die genauen Auswirkungen der Mikrostrukturierung können quantitativ durch Computersimulationen berechnet werden.

Eine Wechselwirkung der einfallenden Strahlung mit der mikrostrukturierten Metallschicht findet hauptsächlich dann statt, wenn die beweglichen Elektronen im Metall durch das elektromagnetische Feld beschleunigt werden können. Im Fall von langen, dünnen Strukturen ist dies dann möglich, wenn der elektrische Feldvektor parallel zur Achse der Struktur schwingt. Schwingt das elektrische Feld senkrecht zu dieser Achse, können die Elektronen aufgrund des beschränkten Platzangebots nicht beschleunigt werden und die Wechselwirkung mit der einfallenden Strahlung ist schwach (siehe Abbildung 2.1).

Allgemein kann unpolarisierte Strahlung durch Überlagerung von Strahlung der beiden Schwingungsmoden TE_z und TM_z beschrieben werden. Bei der einen schwingt der elektrische Feldvektor parallel zur z -Achse, bei der anderen senkrecht dazu. Ein Metallgitter mit gekreuzten Gitterstäben wie in Abbildung 1.13 dargestellt wird also mit beiden dieser Moden wechselwirken, da sich für jede Mode Gitterstäbe finden lassen, in denen die Elektronen parallel zum elektrischen Feld beschleunigt werden können. Durch die Kreuzungspunkte der Gitterstäbe verursachte spezielle Effekte werden dabei nicht erwartet. Eine Überprüfung dieser Erwartung ließe sich nur durch extrem zeitaufwändige Computersimulation in drei Dimensionen bewerkstelligen.

Um den Effekt des Metallgitters auf elektromagnetische Strahlung demonstrieren zu können, genügt es allerdings, sich auf polarisiertes Licht in TM_z -Mode und ein Gitter aus parallelen Metallstäben parallel zur z -Achse zu beschränken – der oben genannte allgemeine Fall der Bestrahlung eines gekreuzten Gitters mit unpolarisiertem Licht ergibt sich dann durch Überlagerung mit dem um 90° gedrehten System. Die erwartete Wechselwirkung zwischen Strahlung und Gitter ist dann, wie oben beschrieben, für TM_z -Polarisation deutlich höher als für TE_z -Polarisation. Die Wechselwirkung von unpolarisierter Strahlung mit einem gekreuzten Gitter entspricht also näherungsweise der Wech-

selwirkung von TM_z -polarisierter Strahlung mit unendlich langen Zylindern in z -Richtung.

Um Rechenzeit zu sparen, wurden die Computersimulationen in diesem Kapitel deshalb in einer zweidimensionalen Modellierung durchgeführt. Alle Simulations- und Messergebnisse beziehen sich auf Metallgitter aus langen Metallstäben oder –streifen entlang einer gedachten z -Achse und einfallender Strahlung in TM_z -Polarisation, also mit dem Vektor des elektrischen Felds parallel zu den Gitterstäben.

3.1.1 Abschätzung nach Geometrischer Optik für kleine Wellenlängen

Für kleine Wellenlängen im Vergleich zum Abstand der Gitterstäbe, der *Gitterkonstante*, und deren Breite, lässt sich das Verhalten des Metallgitters nach den Gesetzen der geometrischen Optik berechnen. Betrachtet wurde hier das für die Simulationen nach Mie-Theorie und FDTD-Methode verwendete Gitter aus parallelen, ideal reflektierenden Zylinderstäben.

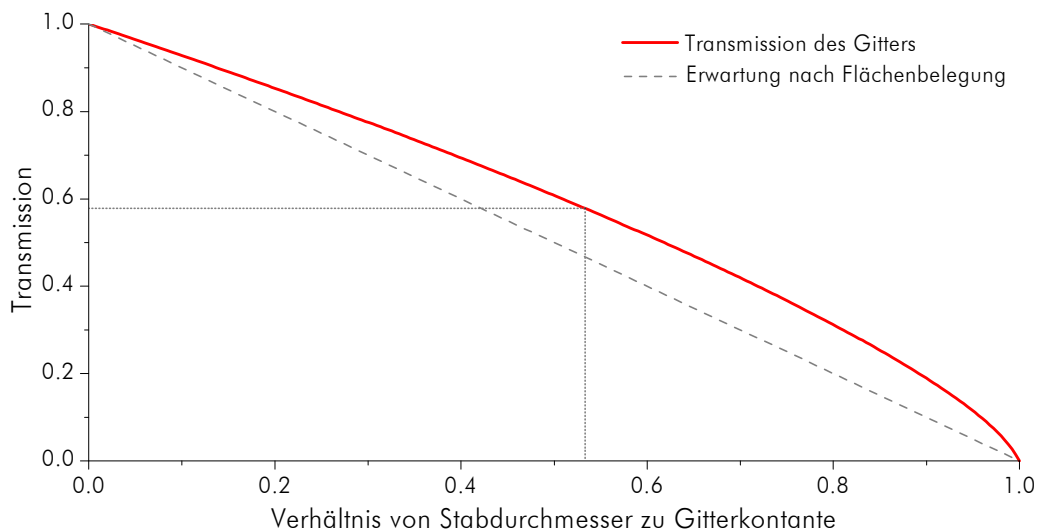


Abbildung 3.1

Transmission eines Gitters aus reflektierenden Metallzylindern in Abhängigkeit des Verhältnisses von Zylinderdurchmesser zu Gitterkonstante bei senkrechtem Einfall. Aufgrund der Zylinderform der Gitterstäbe liegt der Transmissionsgrad immer höher, als nach der Flächenbelegung erwartet würde. Die in den nachfolgenden Simulationen verwendete Gitterkonfiguration mit 1000 nm Stabdurchmesser und 1875 nm Gitterkonstante (Verhältnis 0.53) hat nach diesem Modell einen Transmissionsgrad von 0.58.

Mit Hilfe des Ray-Tracing-Programms ASAP [ASAP 2005] wurde der Transmissionsgrad eines solchen Gitters für den Einfall von parallelem Licht senkrecht zu der durch das Gitter gebildeten Ebene berechnet. Beim Ray-Tracing-Verfahren werden Lichtstrahlen aus einer Lichtquelle nach den Gesetzen der geometrischen Optik durch ein System verfolgt. Berücksichtigt werden dabei an jeder Grenzfläche zwischen unterschiedlichen Medien die Mechanismen Reflexion, Transmission und Absorption. Die einfallende Energie wird dabei entsprechend Reflexions-, Transmissions- und Absorptionsgrad aufgeteilt, die aus Einfallswinkel und Brechungsindizes der Medien nach den *Fresnelschen Formeln* berechnet werden können. Auch andere Materialeigenschaften wie beispielsweise das Streuverhalten einer Oberfläche können mit einbezogen werden. Durch Betrachten einer großen Anzahl an Strahlen lassen sich statistische Aussagen über die Lichtverteilung nach Durchlaufen des betrachteten Systems oder Transmissions- und Reflexionsgrade treffen.

Abbildung 3.1 zeigt den Verlauf des Transmissionsgrads in Abhängigkeit des Verhältnisses von Stabdurchmesser zu Gitterkonstante bei senkrechtem Strahlungseinfall. Bedingt durch die Zylinderform der Gitterstäbe liegt der Transmissionsgrad des gesamten Gitters immer etwas höher, als Betrachtungen der Flächenbelegung des Gitters erwarten lassen würden.

3.1.2 Mie-Streuung an parallelen Zylindern

In einem ersten Simulationsansatz zur Bestimmung des spektralen Verhaltens wurde Streuung an den oben beschriebenen parallelen, ideal reflektierenden Zylindern nach dem Mie-Formalismus (siehe Kapitel 2.2) berechnet. Die Streuung an den Zylindern wurde dabei als unabhängig betrachtet, Wechselwirkungen des an einem Zylinder gestreuten Feldes mit den anderen Zylindern wurden also nicht berücksichtigt.

In der Mie-Theorie wird der komplexe Brechungsindex des streuenden Teilchens verwendet. Nach der *Hagen-Rubens-Beziehung* sind bei Metallen der Real- und der Imaginärteil des Brechungsindex ungefähr gleich groß und proportional zur Leitfähigkeit des Metalls [Siegel 1988]. Um ein ideal leitendes Metall zu simulieren, wurden beide Anteile mit 100 als sehr hoch angenommen.

Abbildung 3.2 zeigt die Intensitätsverteilung der elektromagnetischen Strahlung in der Umgebung eines Gitters aus 15 ideal leitenden Metallzylindern mit Abstand 1875 nm bei Einfall einer ebenen elektromagnetischen Welle. In Bild a hat die einfallende Strahlung eine Wellenlänge von 550 nm, in Bild b eine Wel-

lenlänge von 15000 nm. Sichtbar wird das unterschiedliche Verhalten in den verschiedenen Spektralbereichen: die kurzwelligere Strahlung wird an den Gitterstäben gestreut, kann das Gitter aber zum großen Teil passieren (Bild a). Die langwellige Strahlung wird um das Hindernis herum gebeugt, durch Reflexion bildet sich vor dem Gitter eine stehende Welle aus (Bild b).

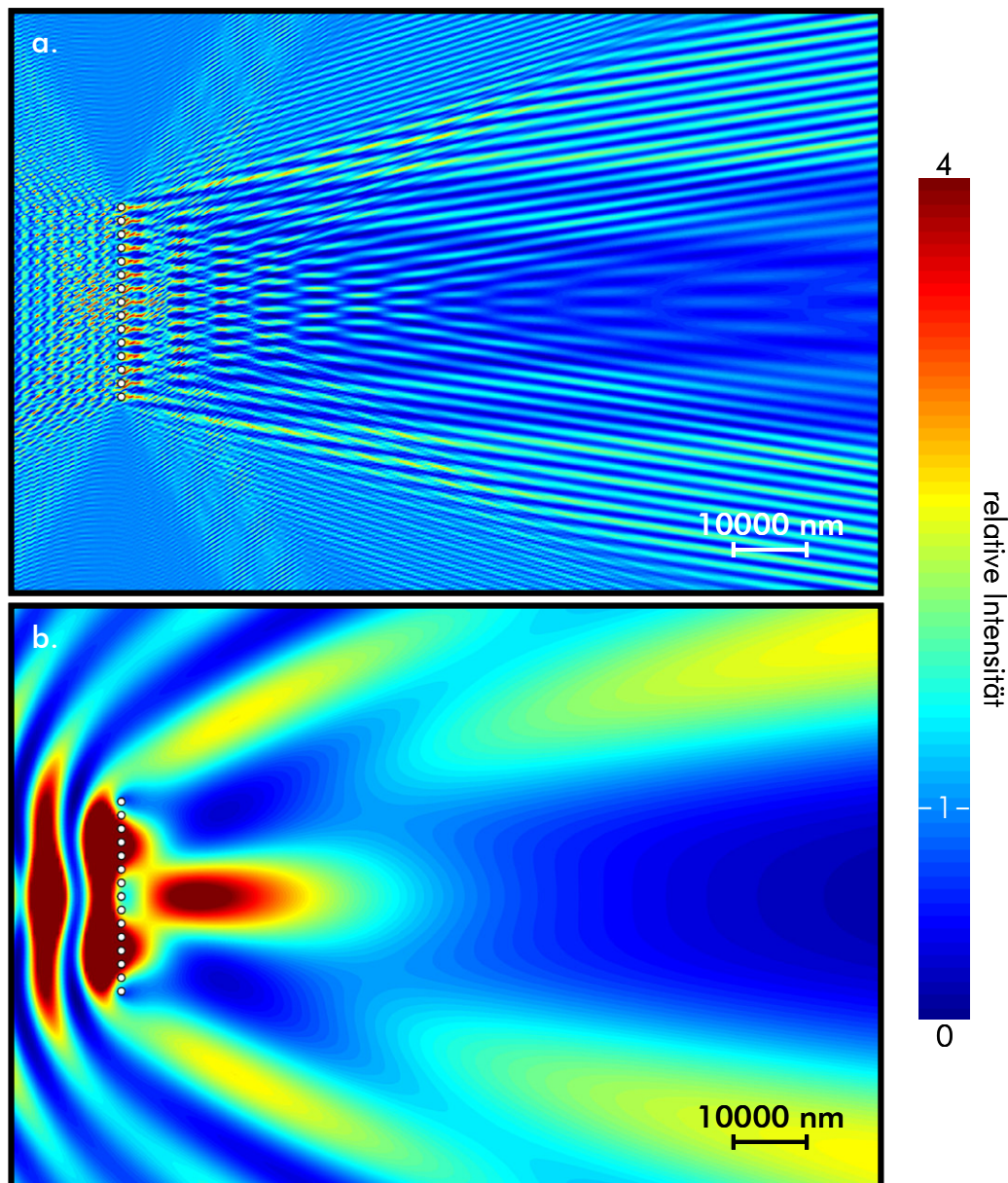


Abbildung 3.2

Mie-Streuung einer einfallenden ebenen Welle an 15 parallelen, ideal leitenden Metallzylindern mit Abstand 1875 nm. Die Wellenlänge der einfallenden Strahlung beträgt in Bild a 550 nm, in Bild b 15000 nm.

Auffällig ist in Bild b der Bereich mit hoher Intensität direkt hinter dem Metallgitter. Auch wenn der Abstand der Gitterstäbe in der Simulation so weit verkleinert wird, dass sie eine durchgehende Wand aus Metall bilden, tritt dieses Phänomen auf. Dieses Verhalten direkt hinter der Metallbarriere wird nicht erwartet.

Fehlerquellen dieser Simulationsmethode

Die hohe Intensität der Strahlung direkt hinter dem Gitter bei großen Wellenlängen deutet auf ein Fehlverhalten dieser Simulationsmethode hin. Um mit Mie-Streuung trotzdem quantitative Aussagen über die optischen Eigenschaften einer mikrostrukturierten Metallschicht treffen zu können, wäre eine Verbesserung der Simulationen notwendig. Die wichtigsten Punkte sind hierbei:

- Aus Gründen der Rechenleistung können die Simulationen nur mit einer begrenzten Anzahl an streuenden Gitterstäben durchgeführt werden. Randeffekte, die sich durch Beugung der einfallenden Welle am Rand des Hindernisses ergeben, haben deshalb einen außerordentlich großen Einfluss. Um Aussagen über das Verhalten einer großflächig aufgetragenen Mikrostruktur treffen zu können, wäre eine große Anzahl an Stäben in der Simulation nötig, um den Einfluss der Randeffekte zu verkleinern.
- Die Annahme der unabhängigen Streuung ist für Gitterstäbe, die nahe beieinander liegen und/oder große Wellenlängen nicht mehr haltbar – eigentlich sollte eine Kopplung zwischen den Zylindern mitberücksichtigt werden. Streustrahlung von einem Zylinder trifft dabei auf die anderen Zylinder auf und wird wiederum von diesen gestreut. Diese *abhängige Streuung* kann durch das Einführen eines Wechselwirkungsterms in den Mie-Gleichungen berechnet werden (siehe [Bever 1992]). Hierzu wird in einem iterativen Prozess eine Kopplungsmatrix aus den Mie-Streukoeffizienten berechnet. Durch Invertierung dieser Matrix können dann die Streukoeffizienten für die abhängige Streuung und damit das Streufeld berechnet werden. Der Einfluss der Vernachlässigung der abhängigen Streuung ist umso größer, je näher die Zylinder zusammen liegen und desto größer die Wellenlänge der einfallenden Strahlung ist.

Sowohl Rechenzeit als auch Arbeitsspeicherbedarf der Computersimulationen würden durch Berücksichtigung der beiden oben genannten Punkte wesentlich

vergrößert. Um Randeffekte auszuschließen, müsste die Streuung an einer sehr großen Anzahl an Zylindern berechnet werden, und die für die Berücksichtigung der abhängigen Streuung notwendigen Matrixinvertierungen der dadurch entstehenden Matrizen mit mehreren tausend Einträgen erfordert einen sehr hohen numerischen Aufwand.

Bei ähnlichem Rechenaufwand Erfolg versprechender ist hier eine andere numerische Methode: die Berechnung des Streuverhaltens nach dem Verfahren der Finiten Differenzen im Zeitregime, kurz FDTD.

3.1.3 Untersuchungen mit der FDTD-Methode

Simulationen mit dem FDTD-Verfahren greifen eine Ebene tiefer an als die Simulationen mit Mie-Streuung. Statt die Maxwellgleichungen für eine bestimmte Konfiguration, also beispielsweise Streuteilchen in Zylindergeometrie, analytisch zu lösen, wird das System der gekoppelten Differentialgleichungen in einer Folge von Zeitschritten numerisch berechnet (siehe Kapitel 2.3). Dadurch ist es möglich, sehr unterschiedliche Geometrien und Materialien zu betrachten.

Entwickelt wurde ein Computerprogramm, das die in Kapitel 2.3 dargestellten Formeln und Algorithmen verwendet. Zum Vergleich mit den Ergebnissen der Mie-Simulation wurde wiederum ein Gitter aus zylindrischen Metallstäben mit sehr hoher Leitfähigkeit und damit einem Reflexionsgrad von 1 angenommen.

Abbildung 3.3 zeigt die Intensitätsverteilung im Nahfeld des Gitters für Bestrahlung mit einer ebenen Welle der Wellenlänge 550 nm (Bild a) und 15000 nm (Bild b). Das Verhalten des Gitters aus den Simulationen mit Mie-Streuung (siehe Abbildung 3.2) lässt sich auch in den FDTD-Simulationen wieder finden: Strahlung mit einer Wellenlänge in der Größenordnung der Gitterstäbe wird gestreut, langwelligere Strahlung wird am Gitter reflektiert. Das unerwartete Eindringen der langwelligen Strahlung in den Bereich direkt hinter dem Gitter lässt sich hier jedoch nicht beobachten – die Kopplung der Metallzylinder ist in der FDTD-Methode implizit vorhanden.

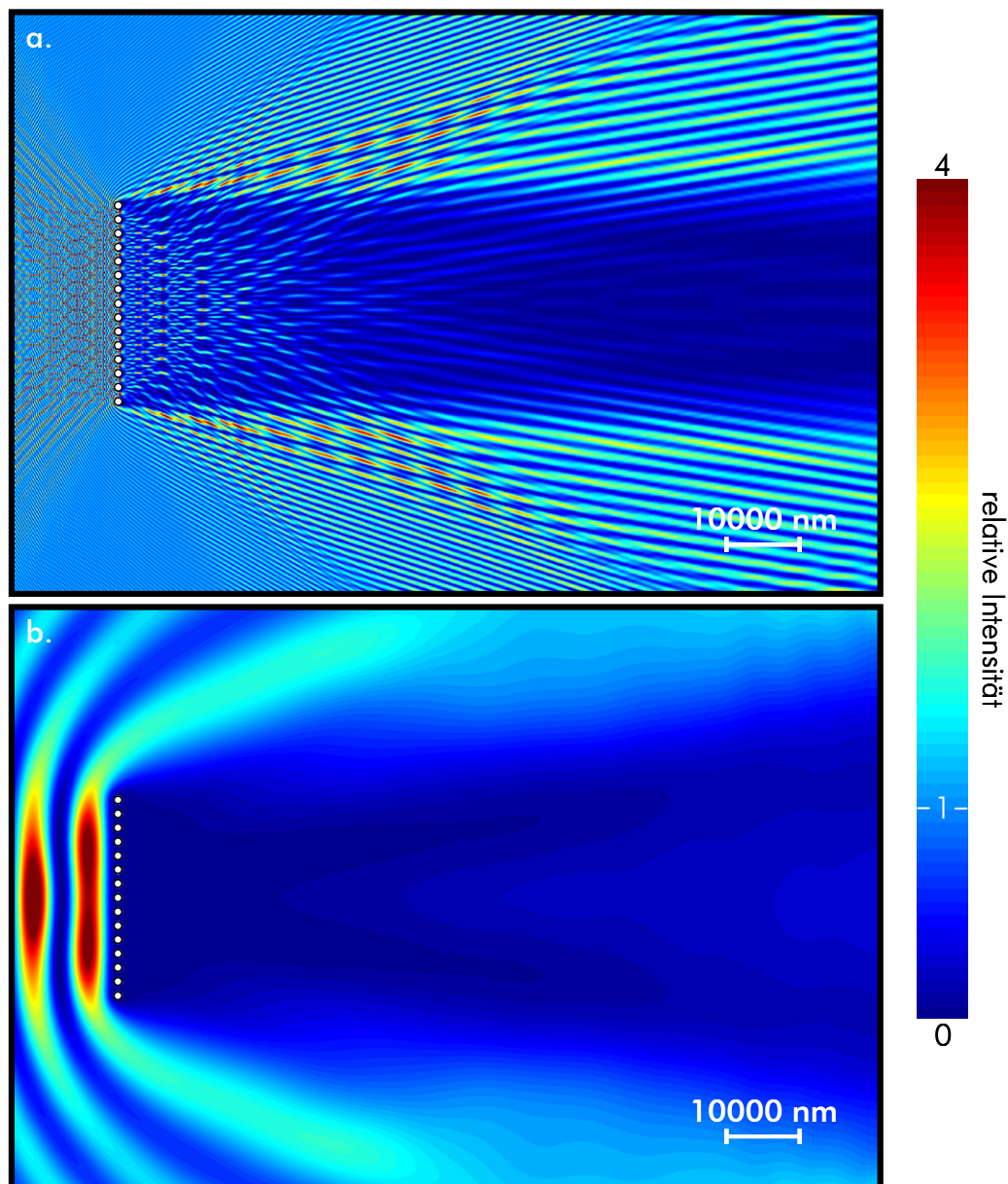


Abbildung 3.3

Simulation des Streuproblems aus Abbildung 3.2 mit der FDTD-Methode. Wieder beträgt der Abstand der Zylinder 1875 nm, die Wellenlänge in Bild a 550 nm und in Bild b 15000 nm.

Bestimmung des Transmissionsgrades

Interessant ist nun der spektrale Transmissionsgrad des Gitters. Durch eine geeignete Transformation aus dem berechneten Nahfeld das Verhalten im Fernfeld zu bestimmen (siehe beispielsweise [Garcia 2000] oder [Taflove 2000]) ist für das betrachtete Problem leider nicht möglich – es wurde nur eine kleine

Anzahl an Zylindern simuliert, und es sollen ja Informationen über das Verhalten einer großen Anzahl von Gitterstäben gewonnen werden. Eine andere Methode ist also nötig, um die Transmission aus dem durch Randeffekte wenig beeinflussten Bereich des Nahfelds zu bestimmen.

Dazu wird die Intensität der elektromagnetischen Strahlung über einen geeigneten Bereich mittig hinter dem Gitter gemittelt. Die Breite dieses Bereichs parallel zum Gitter beträgt dabei genau eine Gitterkonstante: bei einem unendlich ausgedehnten Gitter, also ohne den Einfluss von Randeffekten, würde sich bedingt durch die Symmetrie des Systems das Muster aus lokalen Maxima und Minima mit dieser Periode wiederholen. Die Länge des Bereichs wird so gewählt, dass Randeffekte einen möglichst geringen Einfluss haben.

In Abbildung 3.4 ist die Nahfeldintensität für die oben bereits besprochene Konfiguration mit 15 Zylindern und für ein System mit der doppelten Zylinderanzahl aufgetragen, jeweils für eine Wellenlänge von 550 nm und von 15000 nm. Zu jedem dieser Falschfarbenbilder ist auch die über eine Gitterkonstante parallel zum Gitter gemittelte Intensität über den Abstand zum Gitter aufgetragen - so werden Randeffekte deutlicher. Die Fläche, über den die Intensität gemittelt wird, ist rot markiert.

Durch Vergleich der Simulationsergebnisse für das Gitter mit 15 und mit 30 Zylindern kann der Einfluss der Randeffekte sichtbar gemacht werden. Bei Einstrahlung mit 550 nm Wellenlänge wird der Plateaubereich direkt hinter dem Gitter durch die zusätzlichen Gitterstäbe verlängert, für eine steigende Anzahl an Gitterstäben würde er sich immer weiter ausdehnen. Der Transmissionsgrad des Gitters kann also durch Mittelung der Intensität in diesem Plateaubereich für Strahlung dieser Wellenlänge zu 0.76 bestimmt werden. Vergleicht man dies mit dem Wert für die Betrachtung nach geometrischer Optik in Abbildung 3.1, so fällt auf, dass durch die Beugung an den Gitterstäben sogar mehr Strahlung als die für kleine Wellenlängen erwarteten 58 Prozent transmittiert wird.

Bei Einstrahlung mit Wellenlänge 15000 nm ist die Aussage etwas schwieriger. Bedingt durch die große Wellenlänge haben die Randeffekte einen stärkeren Einfluss, so dass sich die Transmissionswerte bei 15 und bei 30 Stäben noch unterscheiden. Auf jeden Fall jedoch liegt die Transmission hinter dem Gitter unter einem Prozent.

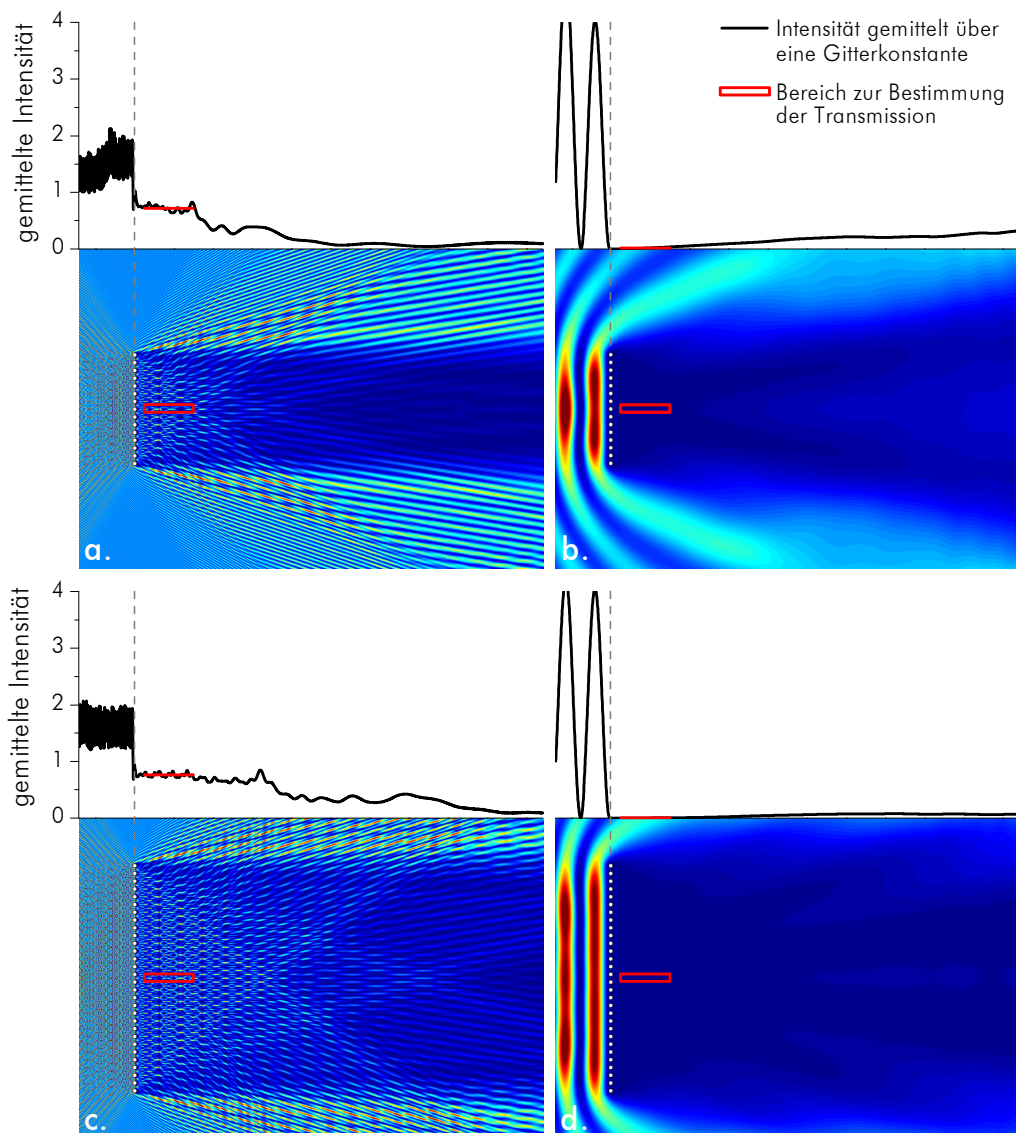


Abbildung 3.4

Berechnung des Transmissionsgrades eines Gitters aus dem simulierten Nahfeld. Die Intensität der elektromagnetischen Strahlung wird dazu über eine geeignete Fläche gemittelt (rote Markierung). Die Ausdehnung dieser Fläche parallel zum Gitter beträgt eine Gitterkonstante. Zusätzlich aufgetragen ist der Mittelwert der Intensität auf dieser Breite über den Abstand zum Gitter. In Bild a beträgt die Wellenlänge 550 nm, in Bild b 15000 nm. Bild c und Bild d zeigen die gleichen Wellenlängen, jedoch für die doppelte Anzahl an Gitterstäben.

3.2 Messungen an Metallgittern auf Glas

Zur Beurteilung der Simulationsergebnisse und der Validierung des Simulationsprogramms wurden Proben mit jeweils einer mikrostrukturierten und einer unstrukturierten Metallschicht auf einem Glassubstrat hergestellt.

Aufgrund der geringen Korrosivität wurde als Metall für die Beschichtung Gold gewählt, so dass zusätzliche Diffusionsblockerschichten nicht nötig sind. Da Gold auf Glas allerdings schlecht haftet, war eine dünne Chromschicht zur Haftvermittlung zwischen Glassubstrat und Goldschicht erforderlich.

Abmessungen

Abbildung 3.5 zeigt eine REM-Aufnahme der hergestellten Proben. Zu sehen sind die dunkleren Goldstege auf dem heller erscheinenden Glassubstrat und auf dem unteren Inset die Oberfläche der Probe mit der unstrukturierten Goldschicht.

Die Breite der Goldstege der strukturierten Probe beträgt 640 nm, der Abstand der Goldstege 2250 nm. Die Schichtdicken liegen wie im oberen Inset dargestellt bei 3 nm für die Chrom- und bei 10 nm für die Goldschicht.

Auffällig ist die leichte Körnung der Goldoberfläche sowohl bei der strukturierten als auch bei der unstrukturierten Probe. Sie entsteht durch Aufwachsen der Goldschicht in Mikrokristallen. Der leicht verschiedene Maßstab der Körnung bei den Proben ist bedingt durch unterschiedliche Parameter beim Aufdampfprozess [Kamp 2006].

Herstellung der Proben

Die Herstellung der Proben übernahm dankenswerterweise das Mikrostrukturlabor des Physikalischen Instituts der Universität Würzburg.

Die Chrom- und die Goldschicht wurden bei der unstrukturierten Probe durch *thermisches Aufdampfen* auf das Glassubstrat aufgebracht. In einer Vakuumkammer wird dabei eine geringe Menge des gewünschten Materials für die Beschichtung in etwa einem halben Meter Abstand zum Substrat erhitzt. Atome dieses Beschichtungsmaterials diffundieren dann zum Glas und bedecken dort gleichmäßig die Oberfläche.

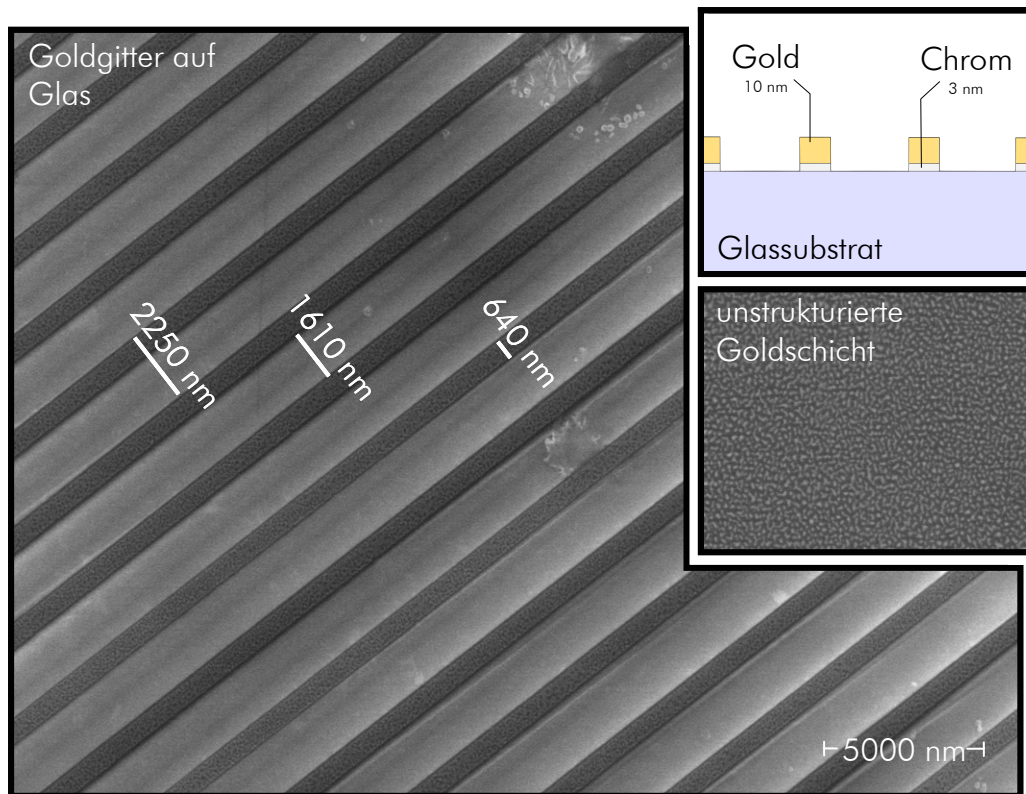


Abbildung 3.5

REM-Aufnahme eines Goldgitters (dunkel) auf einer Glasoberfläche (hell). Eine 10 nm dicke strukturierte Goldschicht wurde dazu auf ein Glassubstrat aufgebracht. Als Haftschicht dient eine 3 nm dicke, ebenfalls strukturierte Chromschicht. Das obere Inset zeigt den Schichtaufbau, das untere die Oberfläche einer durchgehenden Goldbeschichtung mit dem gleichen Schichtaufbau.

Die Strukturierung der anderen Probe erfolgte durch *Elektronenstrahlolithographie* (siehe Abbildung 3.6). Bei diesem Verfahren wird das Glassubstrat (Bild a) zunächst mit einem Lack aus Polymethylmethacrylat (PMMA) und einer etwa 10 nm dicken Goldschicht zum Ableiten der Elektronen versehen (Bild b). Diese Maske wird nun – ähnlich wie bei einem Rasterelektronenmikroskop – mit einem Elektronenstrahl abgerastert. An den Stellen, an denen das PMMA längere Zeit oder mit hoher Intensität vom Elektronenstrahl getroffen wurde, zerfallen die langkettigen PMMA-Moleküle in kürzere Teilstücke, an allen anderen bleiben sie intakt (Bild c). Nach dem Entfernen der Goldschicht kann man die zerstörten Kettenstücke dann chemisch beseitigen. Die intakten PMMA-Moleküle im unbelichteten Bereich werden dabei nicht angegriffen.

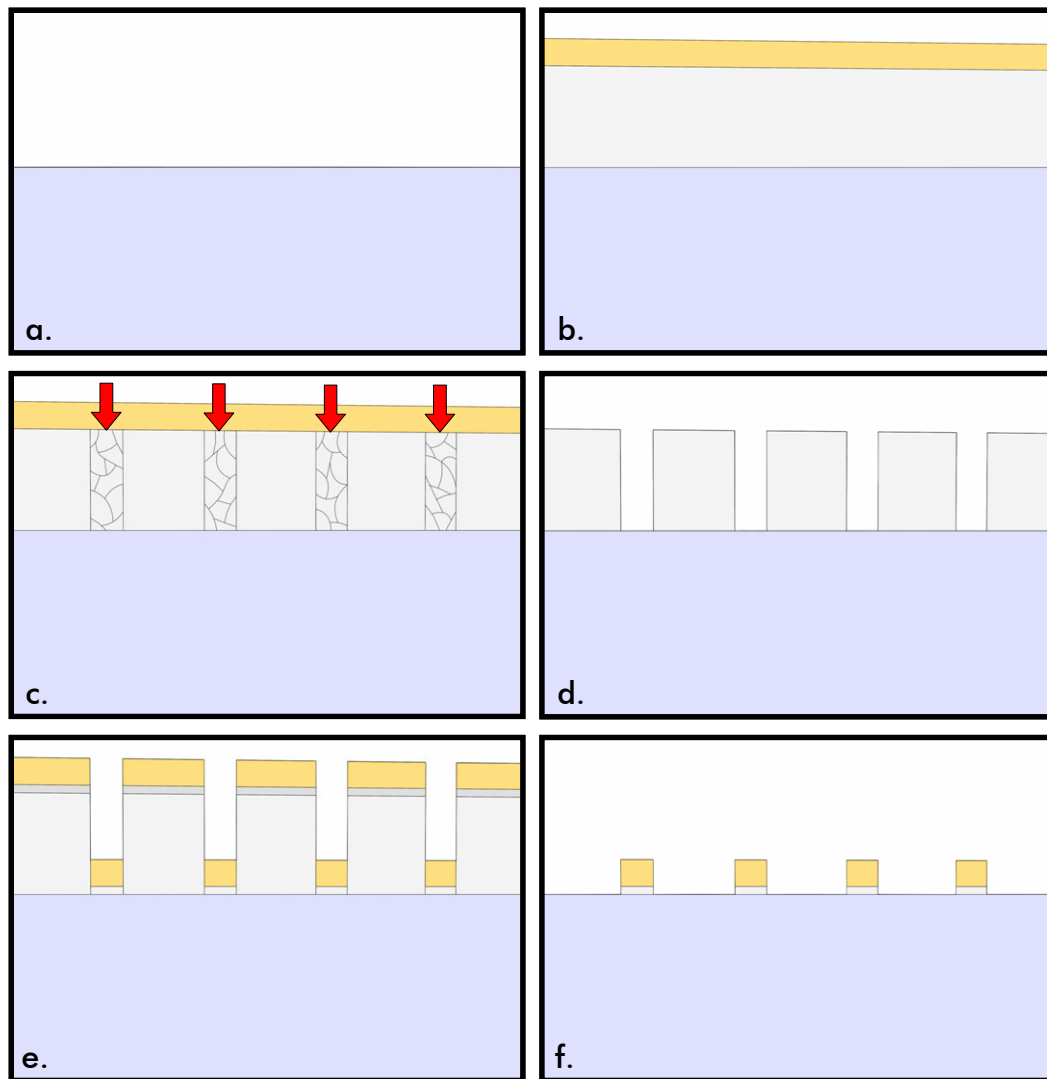


Abbildung 3.6

Schematische Darstellung der Funktionsweise der Elektronenstrahlithographie. Auf einem Substrat (Bild a) wird eine Lackschicht aus PMMA und eine dünne Goldschicht zur Ladungsableitung aufgetragen (Bild b). Durch Belichten mit einem Elektronenstrahl wird der Lack dann an bestimmten Stellen zerstört (Bild c), danach werden Goldschicht und der zerstörte Lack entfernt (Bild d). Durch thermisches Aufdampfen können jetzt die gewünschten Schichten aufgetragen werden (Bild e). Nach Entfernen des restlichen Lackes erhält man dann die gewünschte Struktur.

Übrig bleibt also das Glassubstrat mit einer Maske aus PMMA (Bild d). Auf dieses ganze System werden nun wie bei der unstrukturierten Probe die Chrom- und die Goldschicht thermisch aufgedampft (Bild e). Anschließend

wird der nicht belichtete Rest der Lackschicht mitsamt den darauf liegenden Schichten entfernt (Bild f).

Mit Hilfe der Elektronenstrahlolithographie ist es möglich, Strukturen im Bereich von einigen Nanometern Größe herzustellen. Zur Strukturierung großer Flächen wird dabei allerdings sehr viel Zeit benötigt. Für die spektrometrische Vermessung musste die hergestellte Probe mindestens eine Kantenlänge von 2 cm aufweisen, und schon für diese benötigten 4 cm² war ein enormer Zeitaufwand erforderlich. Zur Strukturierung von Beschichtungen für Fensterglas in industriellem Maßstab, also eingebunden in den Produktionsprozess für Glasscheiben mit Abmessungen von bis zu 3.21 m × 6.00 m [Gläser 1999], ist diese Methode daher nicht geeignet.

Messmethoden

Die gerichtet-hemisphärischen Reflexions- und Transmissionsgrade ρ_{gh} und τ_{gh} der hergestellten Proben für senkrechten Strahlungseinfall wurden über den Spektralbereich von 250 nm bis 30000 nm bestimmt. Zum Einsatz kamen dabei das Zweistrahlenspektrometer *Lambda 950* der Firma Perkin-Elmer für den Bereich bis 2500 nm und die beiden Fourier-Transformations-Infrarotspektrometer *IFS 66v* und *Vector 22* der Firma Bruker für Wellenlängen oberhalb davon bis 18000 nm bzw. bis 30000 nm.

Alle drei Spektrometer verwenden eine integrierende Ulbrichtkugel zur Bestimmung der gerichtet-hemisphärischen Strahlungsgrößen [Ulbricht 1900]. Die Innenseite dieser Kugel ist mit einem diffus hochreflektierenden Material beschichtet. Im sichtbaren und nahen Infrarotbereich wird hier oft Bariumsulfat BaSO₄ oder Spektralon, ein gepresstes PTFE-Pulver, verwendet, für den Infrarotbereich aufgerautes Gold. Durch eine Öffnung in der Kugel eintretende Strahlung wird an der Innenwand gestreut. Nach vielen derartigen Reflexionen bildet sich im Inneren der Kugel ein homogenes und isotropes Strahlungsfeld aus, das durch einen Detektor registriert wird. Diese registrierte Intensität ist proportional zur Gesamtenergie der einfallenden Strahlung und unabhängig von deren Winkelverteilung. Ein Abschatter sorgt dabei dafür, dass auf den Detektor nur Strahlen auftreffen, die mindestens einmal an der Kugeloberfläche reflektiert wurden.

Abbildung 3.7 zeigt die integrierende Kugel für Messungen in Transmission (links) und Reflexion (rechts). Beim oben erwähnten Spektrometer *Perkin-Elmer Lambda 95* kommt zusätzlich ein Zweistrahlverfahren zum Einsatz. Durch Ver-

gleich des Signals des Messstrahls mit dem eines Referenzstrahls, der auf einen Reflexionsstandard auftrifft, kann die Genauigkeit der Messung erhöht werden.

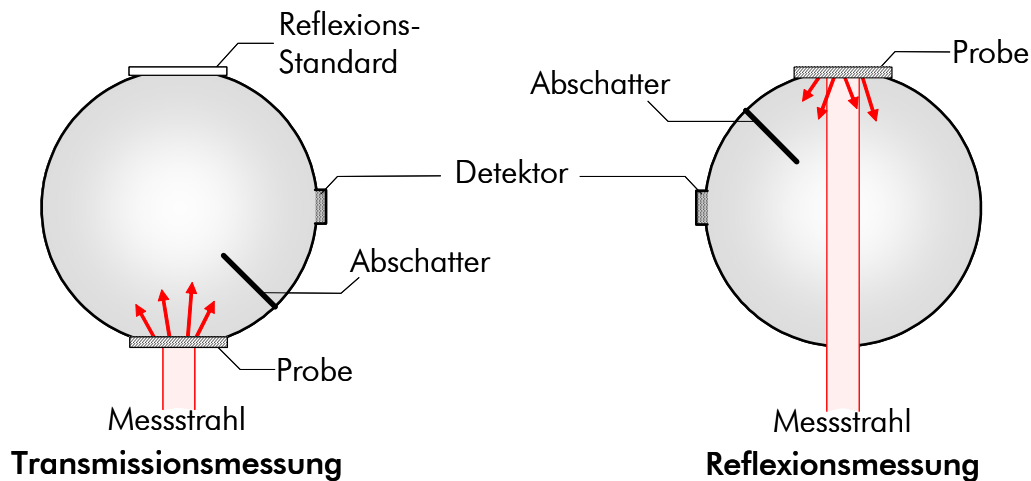


Abbildung 3.7

Messung von Transmissions- (links) und Reflexionsgrad (rechts) einer Probe mit der integrierenden Ulbricht-Kugel. Aufgrund der vielen Reflexionen im Inneren der diffus reflektierenden Kugel bildet sich ein homogenes und isotropes Strahlungsfeld aus, das dann über einen Detektor registriert wird. Der Abschatter sorgt dafür, dass nur Strahlen detektiert werden, die mindestens einmal an der Kugeloberfläche reflektiert wurden.

Messergebnisse

Mit den oben beschriebenen Spektrometern wurden Reflexions- und Transmissionsgrade der strukturierten und der unstrukturierten Probe bestimmt. Die Messungen erfolgten dabei mit unpolarisierter Strahlung. Um die Messergebnisse mit den Computersimulationen für linear polarisierte Strahlung vergleichen zu können, wurden die Messergebnisse wie im Folgenden dargestellt korrigiert.

Auf linear polarisierte Strahlung haben die Metallstäbe nur dann einen großen Einfluss, wenn die mitschwingenden Elektronen im Metall genügend Platz zur Verfügung haben, um dem elektrischen Feldvektor zu folgen. Als obere Grenze für die Strecke, die die beschleunigten Elektronen im Metall zurücklegen, kann bei einem idealen Leiter und damit einer Bewegung der Leitungselektronen mit Lichtgeschwindigkeit die Wellenlänge der einfallenden Strah-

lung angegeben werden. Für Stabdurchmesser, die sehr klein gegenüber der Wellenlänge sind, ist die Auswirkung der Gitterstruktur auf Strahlung mit elektrischem Feldvektor senkrecht zu den Gitterstäben deshalb vernachlässigbar.

Zur Kompensation wurde die Auswirkung der strukturierten Goldschicht im Vergleich zum unbeschichteten Glassubstrat in den Messkurven deshalb verdoppelt, da sich unpolarisiertes Licht ja als Überlagerung von TE_z - und TM_z -polarisiertem Licht darstellen lässt. Für Strahlung mit Wellenlängen, die groß gegenüber dem Durchmesser der Metallstreifen von 640 nm sind, ist diese Näherung sicherlich zutreffend. Da für kürzere Wellenlängen nur ein geringer Einfluss der Beschichtung zu erwarten ist, ist auch der durch diese Verdopplung generierte Fehler sehr gering.

Abbildung 3.8 zeigt die Transmissions- und Reflexionsspektren des Glassubstrats, des Substrats mit flächiger Beschichtung und des Substrats mit mikrostrukturierter Beschichtung.

Leider lassen sich aus diesen Messergebnissen keinerlei Aussagen über die Wellenlängenselektivität als Auswirkung der Strukturierung ziehen. Dies liegt daran, dass die Dicke der strukturierten Goldschicht von nur 10 nm und dadurch die Anzahl der delokalisierten Elektronen aufgrund der endlichen Leitfähigkeit nicht ausreicht, um ein genügend starkes Gegenfeld zur einfallenden Strahlung aufzubauen – eine genügend hohe Leitfähigkeit der Metallschicht muss dafür gegeben sein. Geschickter wäre es gewesen, die Dicke der Goldschicht so zu wählen, dass in den Goldstegen nach der Strukturierung noch genau so viel Material vorhanden ist, wie in einer unstrukturierten Metallschicht mit 10 nm Dicke. Bei den gegebenen Abmessungen hätte die Goldschicht also 35 nm dick sein müssen. Die Herstellung einer Probe mit dickerer Goldschicht scheiterte allerdings, da sich aufgrund von Spannungen im Gold die Schicht immer wieder vom Glassubstrat mit der Chromschicht ablöste.

Eine Validierung des Simulationsprogramms aufgrund der Messungen an den oben vorgestellten Proben konnte also nicht erfolgen. Um die Probenpräparation zu vereinfachen und vor allem zu beschleunigen, wurden deshalb alle entscheidenden Größen um einen Faktor von etwa 10^4 skaliert und Streuversuche mit Mikrowellen an makroskopischen Metallgittern durchgeführt.

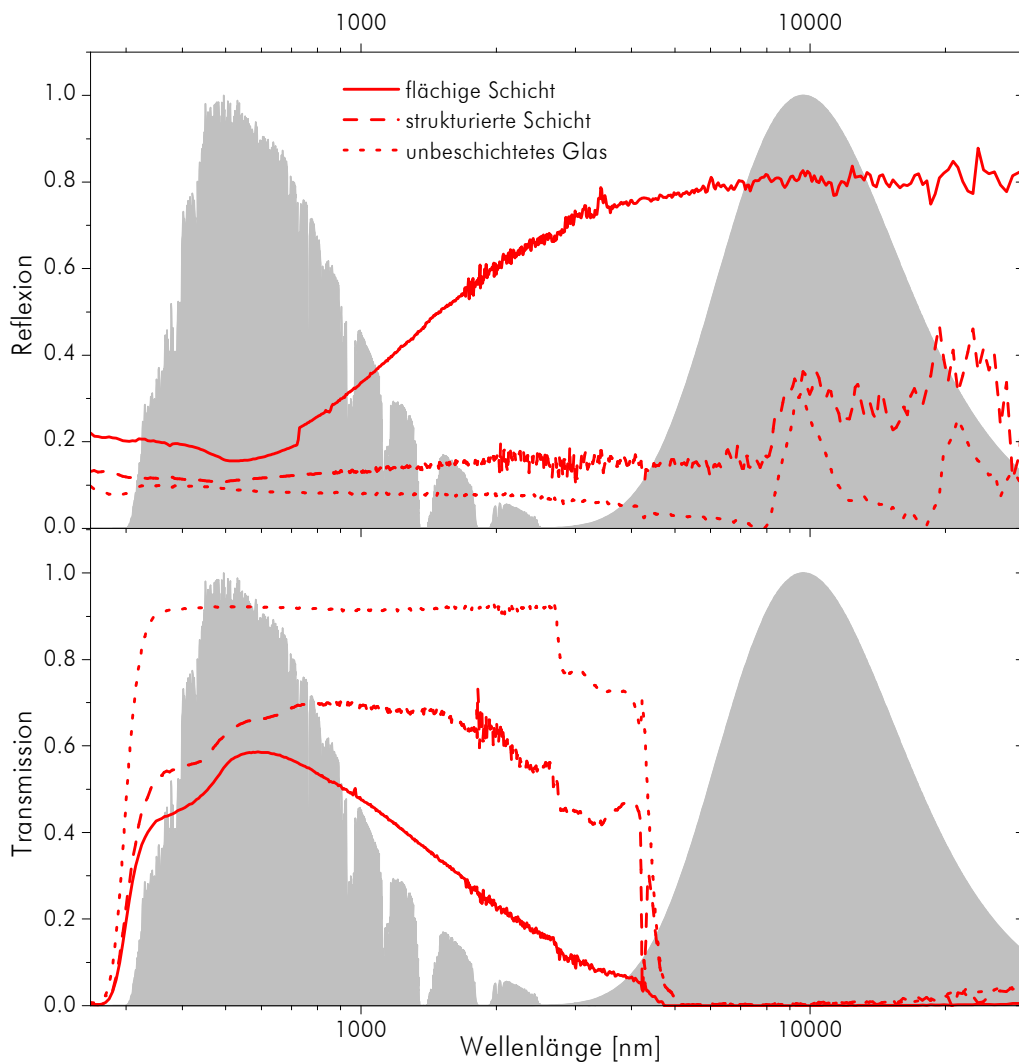


Abbildung 3.8

Reflexions- Transmissions- und Absorptionsspektrum des Glassubstrats, der Probe mit flächiger Beschichtung und der Probe mit strukturierter Beschichtung.

3.3 Validierung der Simulationen durch Messungen mit Mikrowellen

Wichtig für das Streuverhalten eines Teilchens ist neben Materialgrößen wie der Leitfähigkeit, der Dielektrizitäts- und der Permeabilitätszahl vor allem das Verhältnis aus der halben Breite der streuenden Struktur a und der Wellenlänge λ des einfallenden Lichts, also der Größenparameter x

$$x = k \cdot a = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot a \quad (3.1)$$

Das Streuverhalten von mikroskopischen Strukturen bei der Beleuchtung mit sichtbarer und infraroter Strahlung ist deshalb auch bei der Streuung von langwelligerer Strahlung, beispielsweise Mikrowellen, an entsprechend skalierten größeren Strukturen zu erwarten.

3.3.1 Verwendete Geräte

Für die Mikrowellenversuche standen Geräte der Firma *PASCO scientific* [Pasco 1991], Modell-Nummer WA-9314B, zur Verfügung, die auch im physikalischen Grundpraktikum der Universität Würzburg zum Einsatz kommen.

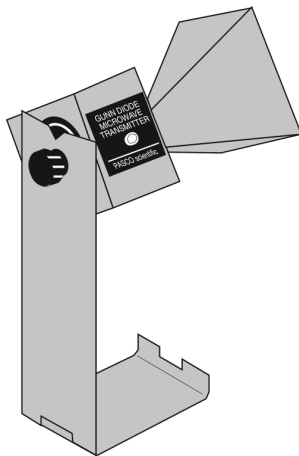


Abbildung 3.9
Mikrowellen-Sender

Sender

Im Sender wird über eine Gunn-Diode Mikrowellenstrahlung generiert. Bei bestimmten n-dotierten Halbleitern haben Elektronen in höheren Energiebändern eine geringere Beweglichkeit. Werden sie durch eine angelegte Spannung in diese Bänder transportiert, wird der Stromfluss trotz höherer angelegter Spannung geringer und das Material weist eine fallende $I(U)$ -Kennlinie, also einen negativen differentiellen Widerstand auf. Da bei einem Schwingkreis die Dämpfung durch den Widerstand bedingt ist, kann durch einen negativen differentiellen Widerstand eine stabile Schwingung oder sogar eine Verstärkung erzeugt werden [Gerthsen 1993]. Eine Gunn-Diode besteht aus mehreren hintereinander angeordneten, n-dotierten Halbleiterbereichen. Legt man eine relativ hohe elektrische Spannung an, so entstehen statistische Stromschwankungen. Bei sehr kur-

zen Halbleiterkristallen von ca. 25 μm Länge gehen diese Stromschwankungen in eine stabile Schwingung über. Die Frequenz dieser Schwingung wird durch die Länge des Halbleiters bestimmt.

Der verwendete Sender emittiert linear polarisierte Mikrowellenstrahlung mit einer Wellenlänge von 3 cm. Die Sendeleistung beträgt 10 mW, die Polarisationsrichtung lässt sich durch Drehen des Senders einstellen.

Empfänger

Als Empfänger für die Mikrowellen dient eine Schottky-Diode in einem auf die Sendefrequenz abgestimmten Resonator.

Bei einer Schottky-Diode kommt eine Verbindung aus einem Halbleitermaterial und einem Metall zum Einsatz. Da die Austrittsarbeit des Metalls höher ist als die des Halbleiters, können Elektronen leichter vom Halbleiter in das Metall diffundieren als in die andere Richtung. Hierdurch wird eine negative Raumladung im Metall und eine positive Raumladung im Halbleiter aufgebaut, die so genannte Schottky-Sperrschicht. Wird eine Spannung mit dem negativen Pol am Halbleiter angelegt, so wird die Potentialbarriere kleiner und Elektronen fließen vom Halbleiter in das Metall. Wird die Spannung mit dem negativen Pol am Metall angelegt, werden Elektronen in Richtung Halbleiter bewegt. Da die Austrittsarbeit des Metalls jedoch zu hoch ist, können sie das Metall unterhalb einer bestimmten Durchschlagsspannung nicht verlassen.

Da bei der Schottky-Diode der Ladungstransport ausschließlich über Elektronen vollzogen wird und die gespeicherte Ladung sehr klein ist, ist das Element als schneller Schalter oder Mikrowellen-Gleichrichter geeignet [Tietze 1993].

Eigenschaften von Sender und Empfänger

Sowohl Sender als auch Empfänger sind mit einem trichterförmigen Horn ausgestattet (siehe Abbildung 3.11), das für eine engere Abstrahl- bzw. Aufnahmecharakteristik verantwortlich ist. Der effektive Sende- bzw. Empfangspunkt liegt dabei ca. 5 cm im Inneren des Horns.

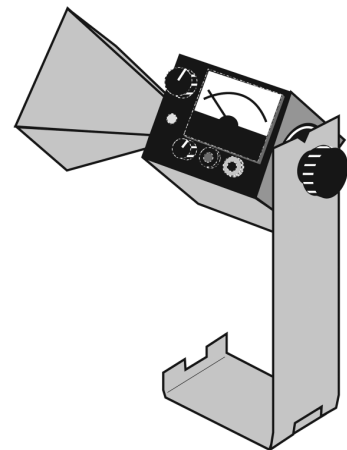


Abbildung 3.10
Mikrowellen-Empfänger

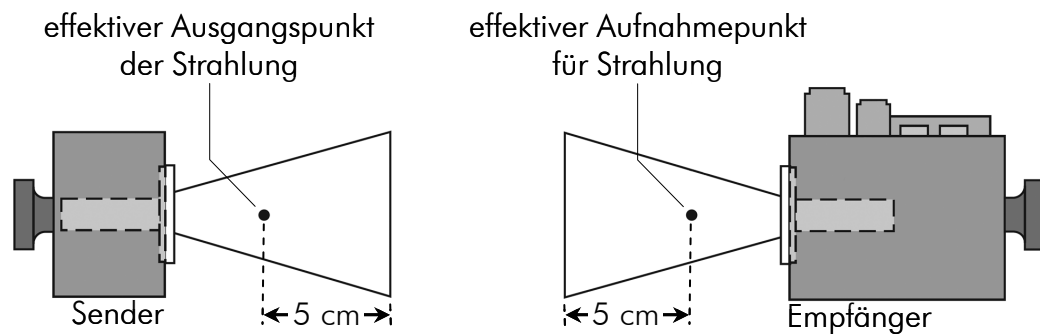


Abbildung 3.11

Mikrowellensender und -empfänger mit Hornantennen. Der effektive Ausgangspunkt bzw. effektive Aufnahmepunkt liegt 5 cm vom Ende der Hornantenne entfernt im Inneren.

Leider reflektieren die metallischen Hornantennen einfallende Strahlung teilweise, statt sie komplett ins Innere zu leiten. So können sich auch ohne zusätzliche Effekte zwischen Sender und Empfänger stehende Wellen ausbilden [Pasco 1991].

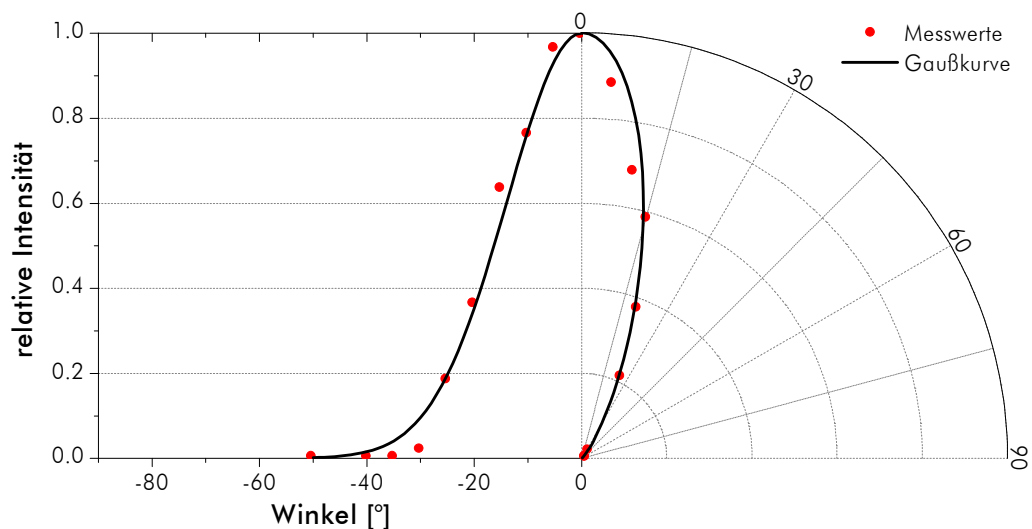


Abbildung 3.12

Austrittswinkelverteilung des Mikrowellensenders. Die Abstrahlung kann gut durch eine Gaußfunktion mit einer Breite von etwa 14° beschrieben werden. Die symmetrische Abstrahlcharakteristik ist in der linken Hälfte des Diagramms in kartesischer und in der rechten Hälfte in polarer Darstellung aufgetragen. Konkrete Werte können besser in der kartesischen Darstellung abgelesen werden, die polare Darstellung gibt einen besseren Überblick über die Abstrahlungsrichtung.

Die Austrittswinkelverteilung der durch das Horn gebündelten Strahlung des Mikrowellensenders lässt sich durch eine Gauß-Funktion gut annähern. Die Breite der Verteilung (Standardabweichung) beträgt dabei etwa 14° (siehe Abbildung 3.12).

Wachslinse für parallele Strahlung

Für Versuche zur Streuung von Mikrowellen an einem Gitter ist parallele Strahlung wünschenswert. Um die Mikrowellenstrahlung des *PASCO scientific*-Senders zu parallelisieren, wurde eine sphärische Wachslinse verwendet. Diese Wachslinse hat für die verwendete Mikrowellenstrahlung eine Brennweite von 50 cm. Sie befindet sich in einem quadratischen Holzrahmen mit 40 cm Kantenlänge. Der Mikrowellensender wurde im Brennpunkt der Wachslinse betrieben, so dass die Strahlung durch die Linse weitgehend parallelisiert wurde (siehe Abbildung 3.13).

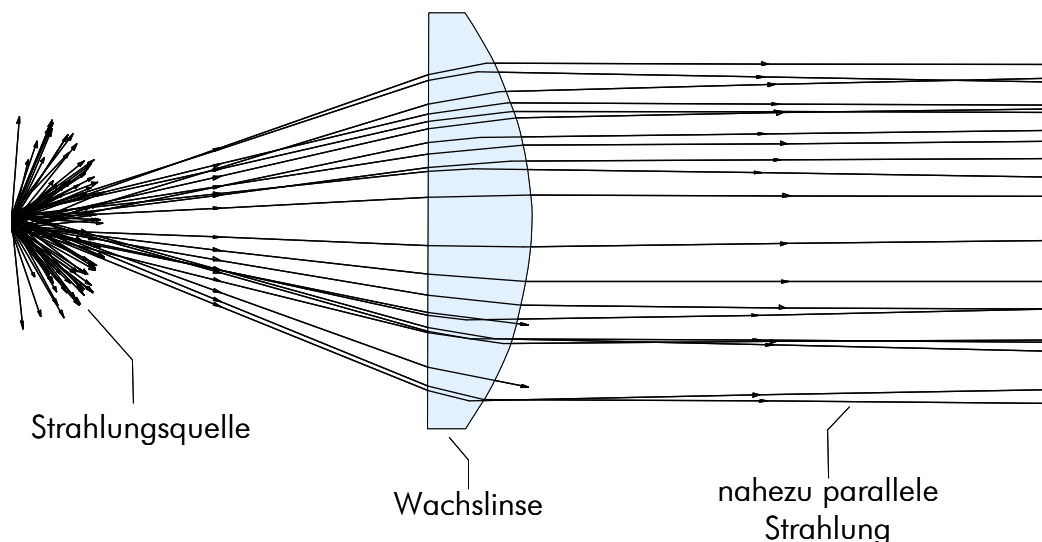


Abbildung 3.13

Erzeugung von nahezu paralleler Strahlung durch eine Wachslinse (Ray-Tracing-Simulation). Der Mikrowellensender befindet sich dabei im Brennpunkt der Linse. Ein Teil der emittierten Strahlung trifft überhaupt nicht auf die Wachslinse (kurze Pfeile links).

Bedingt durch die Austrittswinkelverteilung des Mikrowellensenders trifft ein Teil der Strahlung gar nicht auf die Wachslinse, sondern geht an ihr vorbei. Aufgrund von Reflexionen an der Tischoberfläche, der Wand oder auch dem Experimentator kann dieser Strahlungsanteil dann weiter hinten zu unvorher-

gesehenen Verfälschungen der Messung führen. Die nicht vollkommene Parallelität der Mikrowellenstrahlung hinter der Linse ist durch die Ausdehnung der Strahlungsquelle und Abbildungsfehler der Linse, vor allem die sphärische Aberration, bedingt.

Abbildung 3.14 zeigt die Verteilung der Mikrowellenstrahlung hinter der Wachslinse. Diese Verteilung wurde mit dem Ray-Tracing-Programm [ASAP 2005] berechnet. Berücksichtigt wurden dabei die Austrittswinkelverteilung des Mikrowellensenders und die Ausdehnung der Strahlungsquelle. Die Strahlung hinter der Wachslinse ist im Vergleich zu Abbildung 3.12 deutlich gebündelt, wenn auch nicht vollständig parallelisiert.

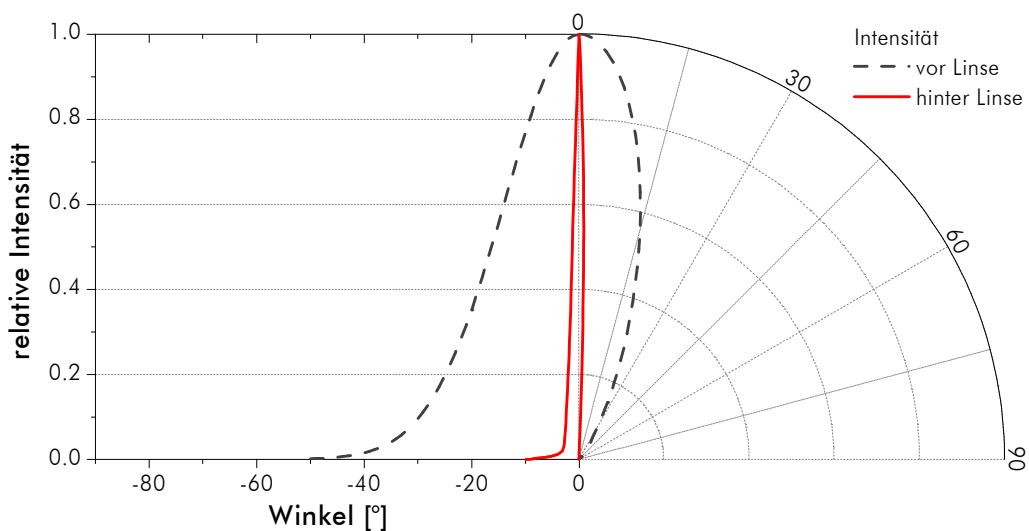


Abbildung 3.14

Verteilung der Mikrowellenstrahlung hinter der Wachslinse, berechnet mit dem Ray-Tracing-Programm ASAP [ASAP 2005]. Im Vergleich zur Austrittsverteilung des Mikrowellensenders ist die Strahlung deutlich gebündelt, wenn auch nicht vollständig parallel.

Gitter mit parallelen Metallstäben

Obwohl die Wellenlänge der vom Sender emittierten Mikrowellenstrahlung nicht verändert werden kann, lässt sich die Wellenlängenselektivität mit Hilfe von Metallgittern mit verschiedenen Gitterabständen nachweisen.

Wichtig für die Streueigenschaften ist neben den Materialparametern das Verhältnis aus der Größe der streuenden Struktur und der Wellenlänge. Den gleichen Effekt, den bei konstanten Materialparametern eine Vergrößerung der Wellenlänge ergibt, kann man auch durch eine Verkleinerung der streuenden

Struktur erreichen. Für die Mikrowellenversuche wurde dies durch eine Veränderung der Gitterkonstante erreicht. Zu beachten ist dabei, dass sich das Verhältnis von Stabdurchmesser zu Wellenlänge hier nicht ändert. Bei der Übertragung der Ergebnisse auf die Bestrahlung eines Gitters mit fester Gitterkonstante bei variabler Wellenlänge muss dies durch eine Korrektur der Stabdurchmesser berücksichtigt werden.

Das Metallgitter wurde aus Aluminiumstäben aufgebaut. Zur Verfügung standen 60 Stäbe mit Durchmesser 4 mm, 30 Stäbe mit Durchmesser 8 mm und 15 Stäbe mit Durchmesser 16 mm (siehe Abbildung 3.15). Aluminium hat im Mikrowellenbereich einen extrem hohen komplexen Brechungsindex ($n \approx 6.6 \cdot 10^7 + 8200i$) [Möllman 2004], so dass sein Reflexionsgrad für Mikrowellenstrahlung bei nahezu 1 liegt. Die Länge der Stäbe von 300 mm ist deutlich größer als die Wellenlänge von 30 mm, so dass die Stäbe als unendlich lang betrachtet werden können.

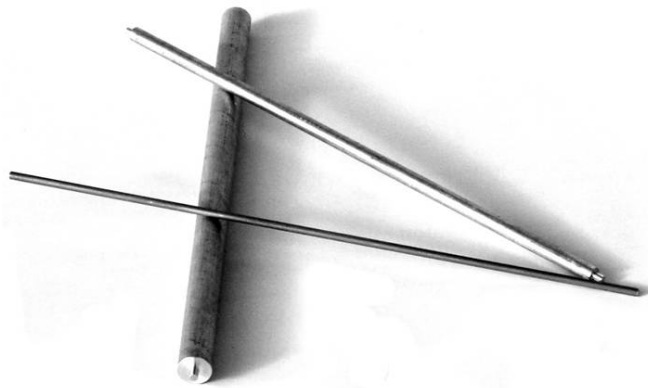


Abbildung 3.15

Aluminiumstäbe für die Mikrowellenexperimente. Es standen Stäbe mit den Durchmessern 4 mm, 8 mm oder 16 mm und einer Länge von 300 mm zur Verfügung.

Um die Stäbe parallel auszurichten, wurden sie in einen Rahmen eingebaut (siehe Abbildung 3.16). Der Abstand zwischen den Gitterstäben konnte dabei variiert werden.

Aus Gründen der Verfügbarkeit und der leichten Handhabung wurde ein erster Rahmen für die Aluminiumstäbe aus *Polyvinylchlorid (PVC)* gefertigt. Es zeigte sich jedoch schon in ersten Versuchen, dass dieses Material einen großen Störeinfluss auf die Mikrowellenstrahlung aufweist.

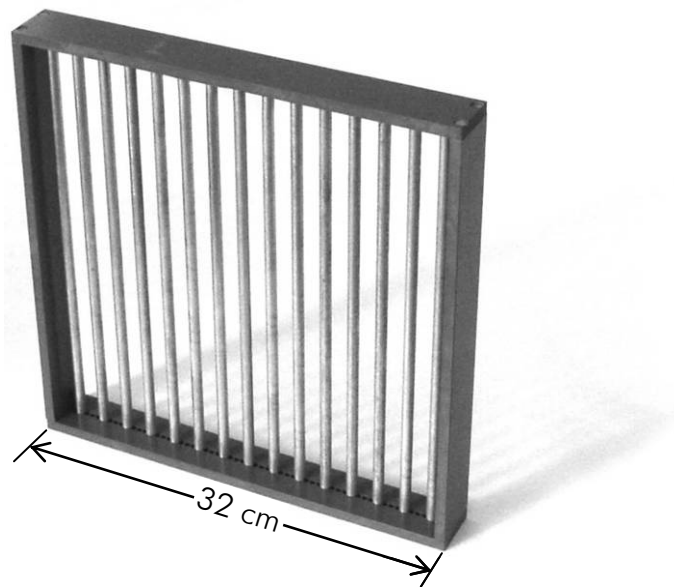


Abbildung 3.16

Rahmen mit Aluminiumstäben. Stäbe unterschiedlicher Dicke können in verschiedenen Abständen eingesetzt werden.

Wechselwirkung von Materie mit Mikrowellen, also elektromagnetischer Strahlung im Wellenlängenbereich von 1 mm bis 1 m, kommt durch die Beschleunigung von delokalisierten Elektronen oder polaren Molekülen durch das elektrische Feld zustande. Bei Metallen können die Elektronen leicht beschleunigt werden, diese reflektieren Mikrowellen daher sehr gut. In Festkörpern mit polaren Molekülen werden hauptsächlich Biegeschwingungen und Drehungen angeregt [Möllman 2004].

Abbildung 3.17 zeigt die Strukturformeln von *Polyvinylchlorid (PVC)* und *Polystyrol (PS)*. Beide Polymere bestehen aus einer Kohlenwasserstoffkette und davon abzweigenden Substituenten.

Die Chloridsubstituenten des PVC haben mit 3.0 auf der Pauling-Skala eine etwas höhere Elektronegativität als die Kohlenstoffatome mit 2.5. Die Bindung der Chloridionen an die Kohlenwasserstoffkette ist also nur leicht polar, eine merkliche Beeinträchtigung der Mikrowellenstrahlung ist daher nicht zu erwarten.

Reines PVC ist jedoch sehr hart und für nahezu keine Anwendung geeignet. Für den Einsatz werden deshalb zahlreiche andere Stoffe beigemischt, die teils als Füllstoffe, als Weichmacher, als Stabilisatoren und als Pigmente fungieren und deren Anteil am PVC-Produkt bis zu 50 Prozent betragen kann. Viele die-

ser Zusatzstoffe weisen selber polare Eigenschaften auf, beispielsweise die in Deutschland als Weichmacher verwendeten Ester der Phthalsäure mit kurz- bis mittelkettigen Alkoholen [Carlowitz 1995]. Die Wechselwirkung mit der Mikrowellenstrahlung fällt deshalb deutlich stärker aus, als es für reines PVC zu erwarten wäre.

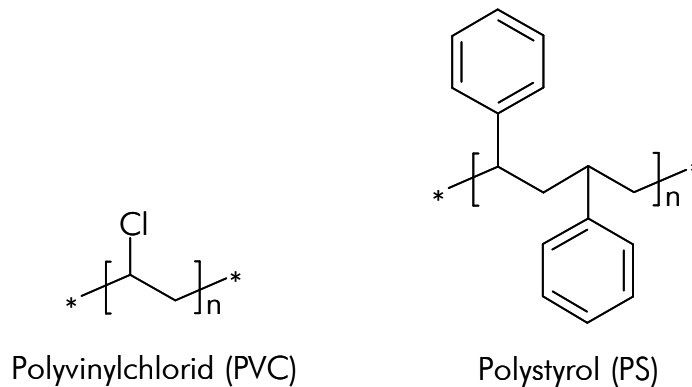


Abbildung 3.17

Strukturformeln von Polyvinylchlorid (PVC) und Polystyrol (PS). Aufgrund der elektronenziehenden Wirkung des Chlors sind die PVC-Ketten leicht polar. Da die Phenylringe des Polystyrols symmetrisch angeordnet sind und keinen elektronenziehenden Effekt aufweisen, ist Polystyrol unpolar.

Die beim Polystyrol von der Kohlenwasserstoffkette abzweigenden ringförmigen Phenylsubstituenten sind über eine unpolare Kohlenstoff-Kohlenstoff-Bindung gebunden und noch dazu symmetrisch zur Kettenachse angeordnet. Polystyrol ist daher unpolar und für die Mikrowellenstrahlung transparent.

Ein weiterer Rahmen für die Aluminiumstäbe wurde deshalb für die Mikrowellenversuche aus *extrudiertem Polystyrol (EPS)* gefertigt, das außerdem noch eine wesentlich geringere Dichte als das PVC aufweist. Mit diesem Material ließ sich nahezu kein Einfluss des Rahmens auf das Strahlungsfeld nachweisen.

3.3.2 Schwierigkeiten bei der Versuchsdurchführung

Leider führen bei den Messungen mit Mikrowellen zahlreiche Effekte zu einer Verfälschung des Ergebnisses:

- Aufgrund der relativ breiten Abstrahlung des Mikrowellensenders wird nicht nur das Experiment bestrahlt, sondern auch Teile der Umgebung. Reflexionen an Tischplatte, Wänden oder auch dem Experimentator kön-

nen die Messung verfälschen. Bei Versuchsaufbauten für Strahlungsquellen im optischen Bereich kommen deshalb schwarze Stoffabschirmungen zur Absorption von ungewünschter Streustrahlung zum Einsatz. Materialien, die Mikrowellen nahezu komplett absorbieren, standen für die Experimente nicht zur Verfügung. Versuche mit abschirmenden Wassertanks brachten leider nicht den gewünschten Erfolg.

- Bedingt durch die sphärische Aberration der Wachslinse und die Ausdehnung der Strahlungsquelle war eine Parallelisierung der Mikrowellenstrahlung nur begrenzt möglich. Ein Vergleich mit den auf einer einfallenden ebenen Welle basierenden FDTD-Simulationen ist deshalb immer fehlerbehaftet. Die genaue Verteilung der Mikrowellenstrahlung in die Simulationen zu integrieren ist leider extrem aufwändig.
- Durch Reflexionen an den metallischen Hornantennen von Mikrowellensender und -empfänger bilden sich Störungen im Strahlungsfeld aus.
- Das größte Problem bei den Messungen war jedoch das nichtlineare Verhalten des Mikrowellendetektors. Das ausgegebene Signal der Schottky-Diode, also des Empfängers, ist leider weder direkt proportional zur elektrischen Feldstärke E , noch zur Intensität der Strahlung, also dem Quadrat der elektrischen Feldstärke [Pasco 1991].

Aufgrund dieser Einflüsse sind die Messergebnisse aus den Mikrowellenversuchen mit einem hohen Fehler behaftet, der aufgrund der zahlreichen unbekanntenen Einflussgrößen leider nicht angegeben werden kann. Eine qualitative Validierung der Computersimulationen ist mit den Messergebnissen trotzdem möglich, eine quantitativ exakte Reproduktion der Simulationsergebnisse wird eher nicht erwartet.

3.3.3 Messergebnisse und Computersimulationen

Für die Messungen wurde der in Abbildung 3.18 dargestellte Messaufbau verwendet. Die durch die Wachslinse näherungsweise parallelisierte Mikrowellenstrahlung wird dabei am Metallgitter gestreut. Die Streustrahlung kann in einer festgelegten Entfernung d vom Gitter winkelaufgelöst aufgenommen werden. Bei den Messungen betrug dieser Abstand 40 cm, der Abstand zwischen Wachslinse und Metallgitter betrug 12 cm. Die Polarisationssebene des Mikrowellensenders wurde so eingestellt, dass der elektrische Feldvektor der Mikrowellenstrahlung parallel zu den Gitterstäben schwang.

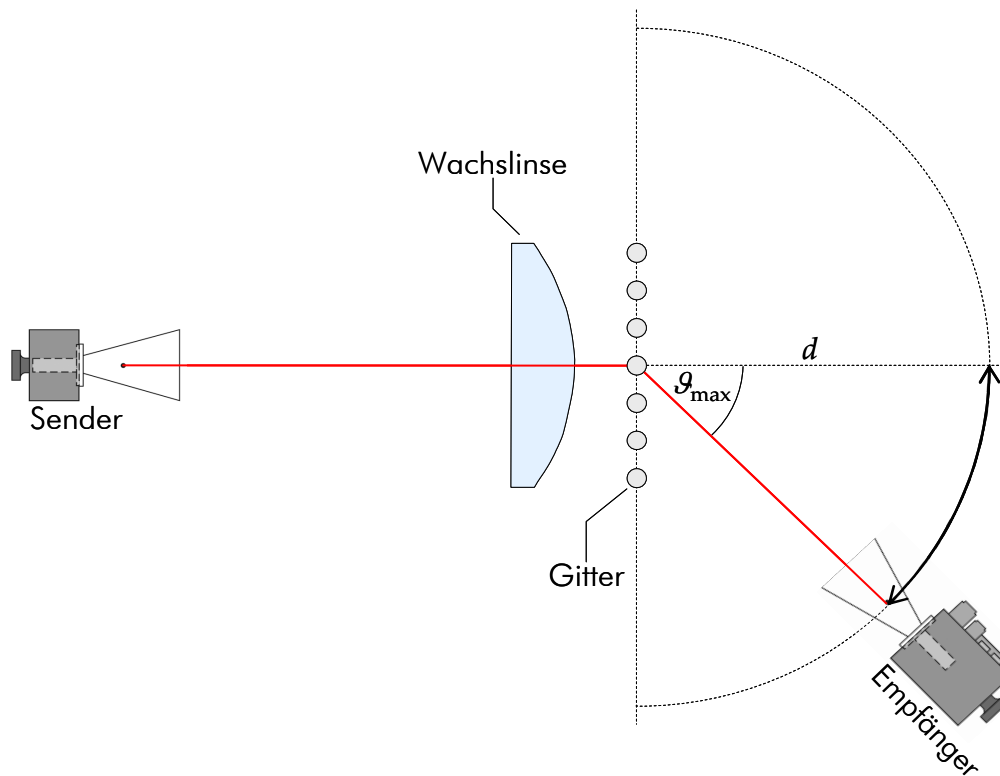


Abbildung 3.18

Messaufbau für die Mikrowellenexperimente. Die Strahlung aus dem Mikrowellensender wird durch die Wachslinse näherungsweise parallelisiert und am Metallgitter gestreut. Die Streustrahlung kann in einer festen Entfernung d vom Gitter winkelaufgelöst mit dem Empfänger aufgenommen werden.

Da für die Messungen nur begrenzter Platz zur Verfügung stand, wurden alle Messungen mit 40 cm Abstand im Verhältnis zur Wellenlänge 3 cm relativ nah am Gitter durchgeführt. Um aus diesen Nahfeldmessungen eine Art abgeschätzten Transmissionsgrad des Gitters zu bestimmen, wurde das Signal des Mikrowellenempfängers in Abhängigkeit des Winkels zwischen dem Detektor und der Verbindungslinie vom Mikrowellensender zum Metallgitter gemessen. Die Messwerte werden dann jeweils über den Winkelbereich $-\vartheta_{\max}$ bis ϑ_{\max} integriert. Das Verhältnis des Integrals bei der Messung mit streuendem Gitter zum Integral bei der Messung ohne das Gitter ergibt dann den Transmissionsgrad.

Der optimale Wert für den Integrationswinkel ϑ_{\max} muss dabei abgeschätzt werden. Für diese Abschätzung wurden die Messungen in FDTD-Computer-

simulationen nachvollzogen. Abbildung 3.19 zeigt die Amplituden des elektrischen Feldes in dieser Computersimulation für ein Gitter aus Stäben mit Durchmesser 8 mm und dem Gitterkonstante 12 mm. Das Gitter wird dabei von einer ebenen Welle mit 3 cm Wellenlänge bestrahlt. Bei diesem Stababstand dringen die Mikrowellen so gut wie gar nicht durch das Gitter. Durch Reflexion an den Aluminiumstäben bildet sich vor dem Gitter eine stehende Welle, hinter dem Gitter liegt der Schattenbereich. Durch Beugungseffekte am Rand des Gitters ist dieser Bereich nicht scharf begrenzt.

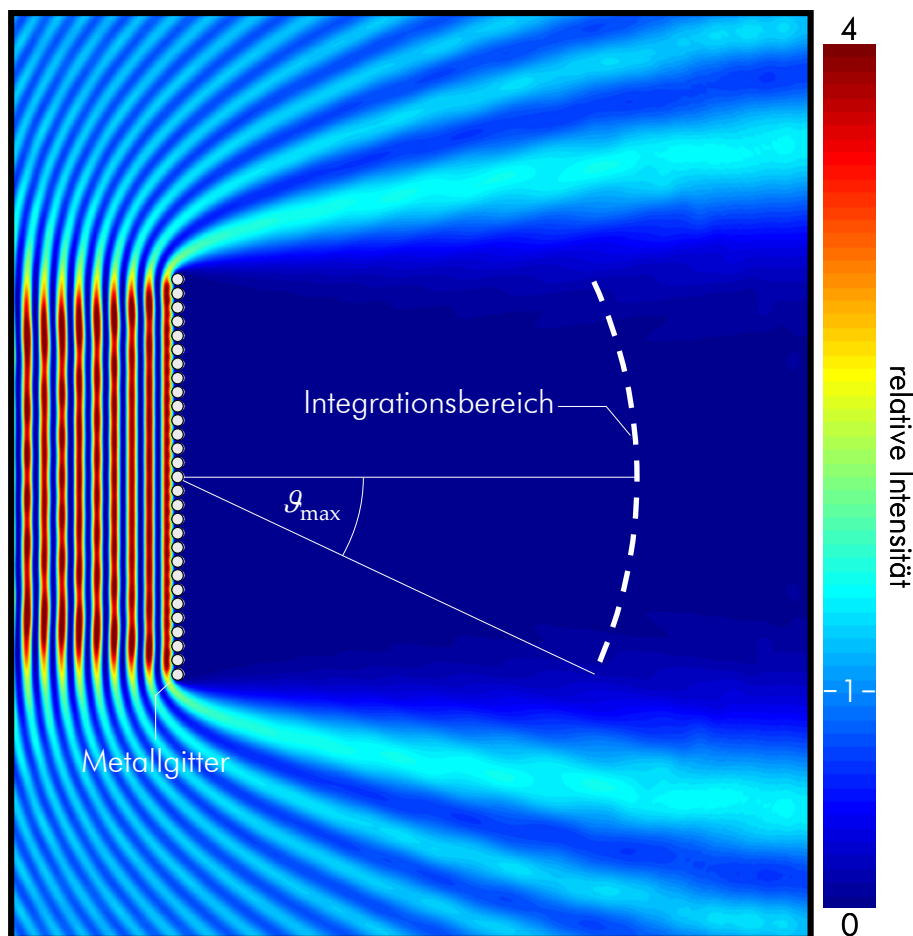


Abbildung 3.19

Intensitätsverteilung der Mikrowellenstrahlung bei Bestrahlung eines Metallgitters aus Stäben mit 8 mm Durchmesser und 12 mm Abstand (Computersimulation). Eine ungestörte Welle hätte überall die Intensität 1.

Der größte Unterschied zwischen Simulation und Messung liegt in der Lichtquelle. Während die in der Simulation verwendete ebene Welle unendlich ausgedehnt ist und exakt paralleles Licht liefert, ist die Mikrowellenstrahlung bei der Messung nur annähernd parallel und außerdem durch die Ausdehnung der Wachslinse in ihrer Größe begrenzt. Da die Breite der Wachslinse in etwa der des Gitters entspricht, ist parallele Strahlung auch nur über die Breite des Gitters vorhanden. Gerade in den Randbereichen der Schattenzone und außerhalb davon werden die Computersimulation und die Messung deshalb voneinander abweichen.

In Anbetracht dieser Überlegungen muss der Integrationsbereich für die Ermittlung des Transmissionsgrades so gewählt werden, dass die benötigten Messpunkte komplett im Schattenbereich des Gitters liegen. Da die Messungen mit einer hohen Ungenauigkeit behaftet sind, verringert eine Mittelung über viele Messwerte, also ein großer Integrationswinkel, den statistischen Fehler. Die kleinste quadratische Abweichung zwischen Messwerten und Simulationsdaten wurde für einen Integrationswinkel ϑ_{\max} von 25° ermittelt (siehe Abbildung 3.19).

Abbildung 3.20 zeigt einen Vergleich von Messwerten und Ergebnissen der FDTD-Simulationen für Stäbe mit Durchmessern von 4 mm (oben) und 8 mm (unten). Die typischen Charakteristika der Messkurven werden durch die Simulationen gut wiedergegeben.

Der Anstieg des Transmissionsgrades bis zu einer Gitterkonstante, die der Wellenlänge von 3 cm entspricht, ist gut zu erkennen. Bei den dickeren Stäben mit Durchmesser 8 mm ist dieser Anstieg steiler als bei den dünneren 4 mm-Stäben. Bei Gitterabständen, die ganzzahligen Vielfachen der Wellenlänge entsprechen, treten Transmissionsmaxima auf. Diese können sowohl durch das Verfahren zur Bestimmung des Transmissionsgrades aus der Nahfeldmessung als auch durch Randeffekte bedingt sein.

Aufgrund der schon in Abschnitt 3.3.2 genannten Fehlerquellen bei den Messungen lassen sich die Simulationsergebnisse quantitativ durch die Messung nicht exakt wiedergeben. In Anbetracht dieser Messunsicherheiten liegen die Daten jedoch erstaunlich dicht beieinander.

Die Ergebnisse des FDTD-Simulationsprogramms konnten durch die Mikrowellenmessungen also bestätigt werden.

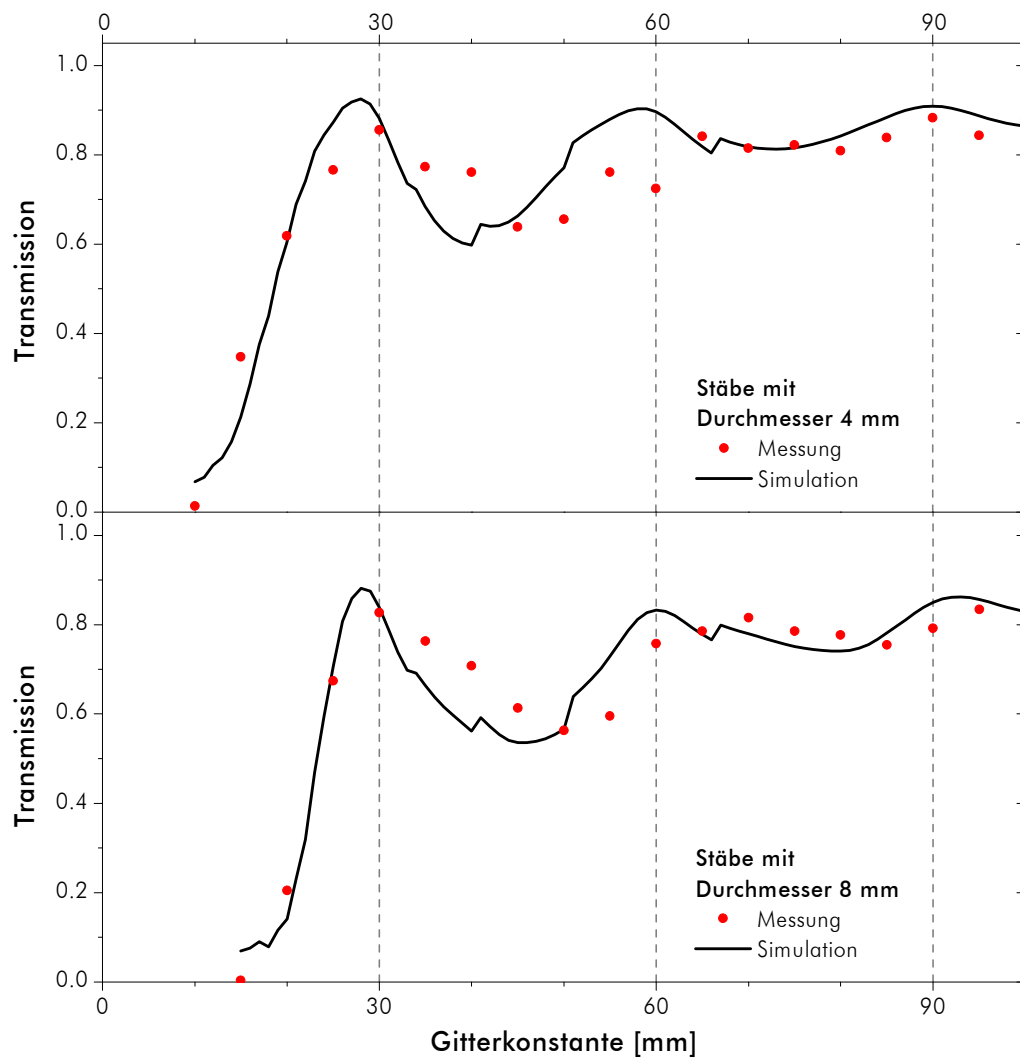


Abbildung 3.20

Transmissionsgrad des Metallgitters für Mikrowellenstrahlung in Abhängigkeit von der Gitterkonstante. Oben sind Simulationsergebnisse und Messwerte für Stäbe mit 4 mm Durchmesser gezeigt, unten für Stäbe mit 8 mm Durchmesser. Die Messwerte geben die Ergebnisse aus der Computersimulation qualitativ gut wieder.

3.4 Weiterführende Computersimulationen

Nach der Validierung des Simulationsprogramms durch die Mikrowellenmessungen wurden weitere Computersimulationen zur Charakterisierung und Optimierung der mikrostrukturierten Low-e-Schichten durchgeführt.

Hierbei kamen zwei Stärken der FDTD-Methode zum Einsatz. Zum einen lässt sich wie in Abschnitt 2.3.5 erklärt Rechenzeit einsparen, indem die Antwort des betrachteten Systems auf einen kurzen Strahlungsimpuls untersucht wird. Durch Fouriertransformation der ermittelten gestreuten Felder lässt sich so Information über das Verhalten bei Bestrahlung mit ebenen Wellen unterschiedlicher Frequenzen gewinnen. Eine einzelne Computersimulation liefert also Aussagen über die Bestrahlung mit vielen verschiedenen Frequenzen.

Zum anderen ist es einfach, periodische Randbedingungen im FDTD-Programm zu implementieren. Die elektrischen und magnetischen Felder werden im leapfrog time-stepping aus den Werten der umgebenden Gitterzellen bestimmt. Am Rand des Berechnungsbereichs können so die Zellen auf der gegenüberliegenden Seite des Berechnungsbereichs als Nachbarzellen angegeben werden, so dass eine unendliche Anzahl an Gitterstäben simuliert werden kann. Die in Kapitel 3.1.3 erwähnten Randeffekte fallen also hier nicht mehr ins Gewicht.

Die Zeitaufwand für die Simulationen ist trotz der oben beschriebenen Kniffe leider dennoch nicht zu vernachlässigen: auf den verwendeten Simulationsrechnern mit je zwei 3 GHz-Prozessoren und 2 GB RAM werden für jede Simulation ca. 24 Stunden Rechenzeit benötigt.

3.4.1 Variation der Simulationsparameter

Verschiedene Gitterkonfigurationen wurden in Computersimulationen untersucht. Neben Abstand und Breite der Gitterstäbe wurde auch die Form der einzelnen Stäbe variiert, und die Auswirkung eines Glassubstrats, auf das die Stäbe aufgebracht sind, wurde betrachtet.

Auf eine wellenlängenabhängige Modellierung der Materialeigenschaften von Metallgitter und Glas wurde in den Simulationen verzichtet. Das Metall des Gitters wurde als ideal leitfähig angenommen, der Brechungsindex des simulierten Glassubstrats lag für alle Wellenlängen bei 1.5, die Leitfähigkeit bei Null.

Zylindrische Gitterstäbe

Für ein Gitter aus zylindrischen Metallstäben (wie auch für die Mikrowellenexperimente verwendet), wurde der Einfluss des Stabdurchmessers bei konstantem Stababstand untersucht. Abbildung 3.21 zeigt den Verlauf des spektralen Transmissionsgrades des Gitters für Stäbe mit den Durchmessern 250 nm, 500 nm und 1000 nm. Die Gitterkonstante betrug dabei 1875 nm.

Wie erwünscht ist ein Abfall der Transmission ab einer Wellenlänge zu beobachten, die in der Nähe des Abstandes der Zylinder liegt. Je größer dabei der Durchmesser der Zylinder ist, desto steiler fällt dieser Abfall aus. Je kleiner der Durchmesser gewählt wird, desto größer ist der Transmissionsgrad im Plateaubereich für Wellenlängen unterhalb des Abstandes der Gitterstäbe. Die Transmission bei Wellenlängen kleiner als die Gitterkonstante liegt bei den untersuchten Stabdurchmessern etwas höher als durch die Ray-Tracing-Simulationen ermittelt (eingezeichnet als gepunktete graue Linien, siehe Abbildung 3.1).

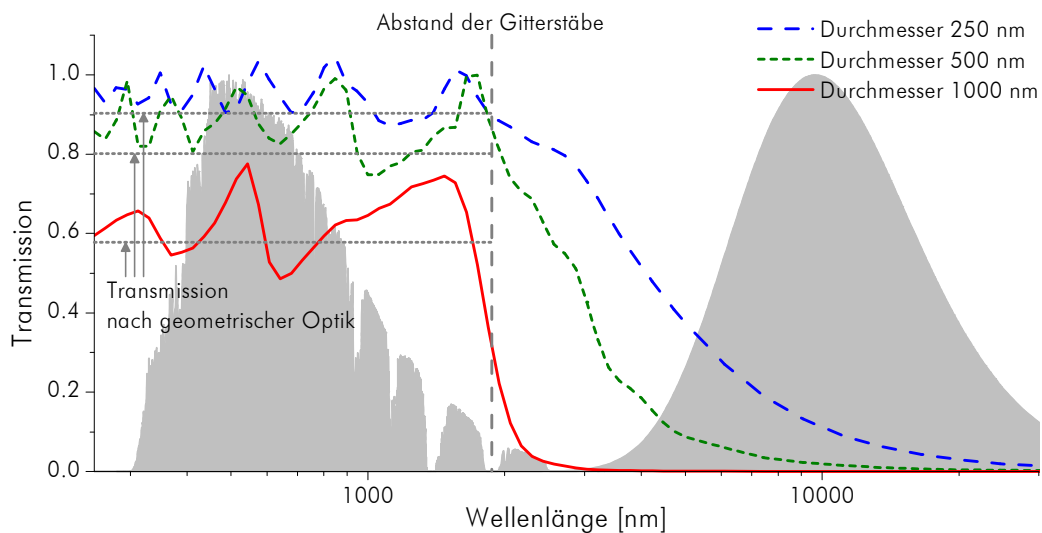


Abbildung 3.21

Auswirkung des Stabdurchmessers auf die spektrale Transmission eines Gitters aus Zylinderstäben. Der Abstand der Gitterstäbe betrug 1875 nm.

Rechteckige Gitterstäbe

In der Anwendung als Low-e-Schicht, also als Metallgitter auf Glas, lassen sich zylindrische Gitterstäbe schlecht realisieren. Die folgenden Simulationen wurden deshalb für Gitterstäbe mit rechteckigem Querschnitt durchgeführt. Vari-

iert wurden dabei die Gitterkonstante, die Breite und die Dicke der Gitterstäbe (siehe Abbildung 3.22).

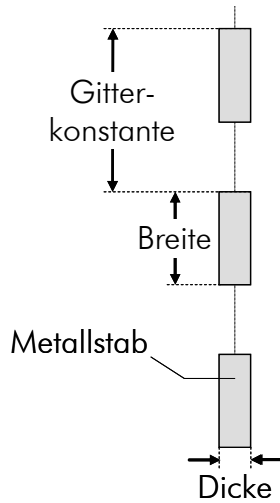


Abbildung 3.22

Gitter aus rechteckigen Metallstäben. Variiert wurden in den Simulationen die Gitterkonstante, die Breite und die Dicke der Stäbe.

Abbildung 3.23 zeigt das Transmissionsverhalten eines Gitters mit zylindrischen Stäben mit 1000 nm Durchmesser und eines Gitters mit quadratischen Stäben mit Kantenlänge 1000 nm. Bei beiden Gittern beträgt die Gitterkonstante 1875 nm.

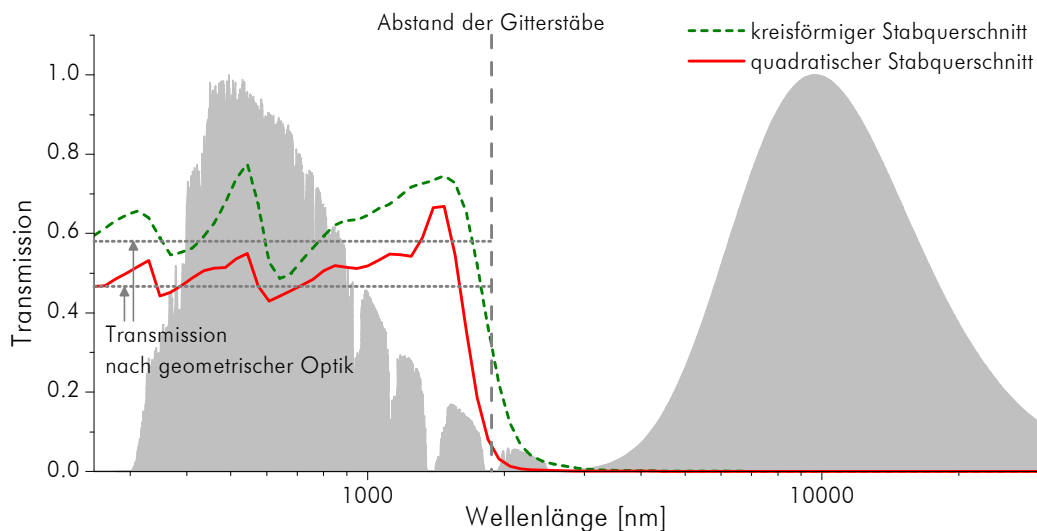


Abbildung 3.23

Auswirkung der Stabgeometrie auf den Transmissionsgrad. Aufgetragen sind die spektralen Transmissionsgrade eines Gitters aus Zylinderstäben mit 1000 nm Durchmesser und eines Gitters aus quadratischen Stäben mit 1000 nm Kantenlänge. Auch hier betrug der Abstand der Gitterstäbe 1875 nm.

Der höhere Transmissionsgrad für zylindrischen im Vergleich zu rechteckigem Querschnitt für den Spektralbereich bis etwa zur Gitterkonstanten lässt sich durch die höhere Transmission für Zylinderstäbe nach den Gesetzen der geometrischen Optik erklären (siehe Abschnitt 3.1.1): aufgrund der Krümmung der zylindrischen Stäbe können manche Strahlen, die auf einen Gitterstab auf treffen, durch Reflexionen das Gitter durchdringen. Bei senkrechtem Einfall kann dies bei Gitterstäben mit rechteckigem Querschnitt nicht vorkommen.

In weiteren Simulationen wurde nun die Dicke der Gitterstäbe verändert. Abbildung 3.24 zeigt die Transmissionsgrade von Metallgittern mit einer Gitterkonstante von 1875 nm und einer Breite der Gitterstäbe von 1000 nm. Die Dicke der Gitterstäbe variierte dabei von 15 nm bis 1000 nm.

Wie aus den Simulationsergebnissen ersichtlich wird, hat die Dicke der Gitterstäbe bei fester Breite im Spektralbereich der Wellenlängen unterhalb der Gitterkonstanten kaum einen Einfluss auf die Transmission. Der Abfall der Transmission bei Wellenlängen oberhalb fällt jedoch umso flacher aus, je dünner die Gitterstäbe sind.

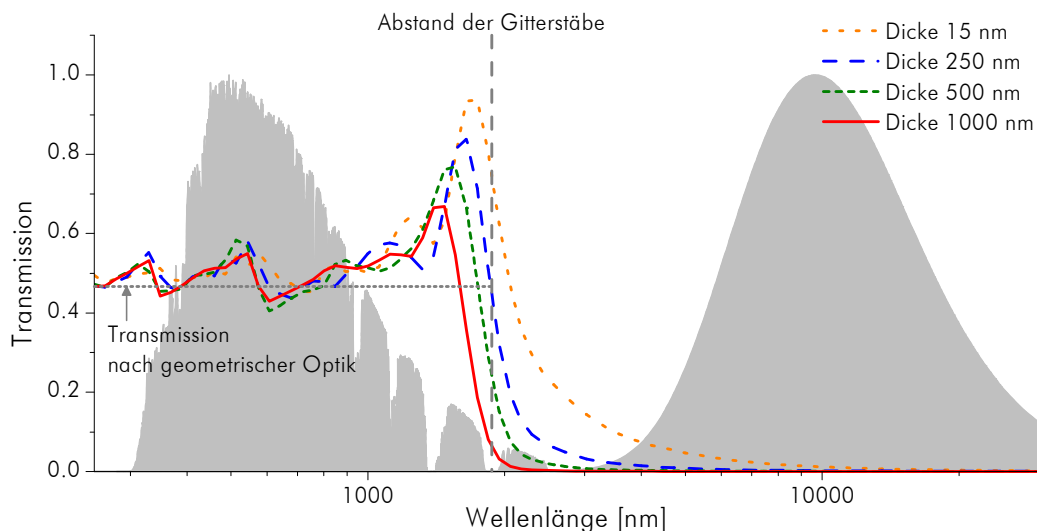


Abbildung 3.24

Auswirkungen der Dicke der 1000 nm breiten rechteckigen Gitterstäbe auf den Transmissionsgrad des Gitters. Der Abstand der Gitterstäbe betrug 1875 nm.

Das stark ausgeprägte Transmissionsmaximum bei Wellenlängen knapp unterhalb der Gitterkonstante ist auf die Methode zur Bestimmung des Transmissionsgrades zurückzuführen (siehe Abschnitt 3.1.3). Nur bei diesen Wellenlängen-

gen ist dicht hinter dem Metallgitter im Nahfeld eine hohe Intensität der elektromagnetischen Strahlung zu finden, die zu größeren Abständen hin schnell abfällt. Da aufgrund der begrenzten Ausdehnung des FDTD-Berechnungsbereichs zur Bestimmung des Transmissionsgrades auch über diesen Bereich gemittelt wurde, liegt der errechnete Transmissionsgrad hier zu hoch. Es handelt sich bei dem beobachteten Peak also um ein durch die Auswertemethode bedingtes Artefakt, das jedoch nur geringe Auswirkungen auf den solaren Transmissionsgrad hat.

Schließlich wurde in den Simulationen noch die Breite der Gitterstäbe variiert (siehe Abbildung 3.25). Der Gitterkonstante betrug wiederum 1875 nm, die Dicke der Gitterstäbe 15 nm. Die Höhe des Transmissionsgrades für Wellenlängen unterhalb der Gitterkonstante wird wesentlich durch die Breite der Gitterstäbe beeinflusst. Sie korreliert gut mit den nach geometrischer Optik erwarteten Werten. Auch der Abfall der Transmission bei Wellenlängen oberhalb der Gitterkonstanten wird durch die Breite der Gitterstäbe beeinflusst. Je schmaler die Stäbe sind, desto flacher fällt auch dieser Abfall aus.

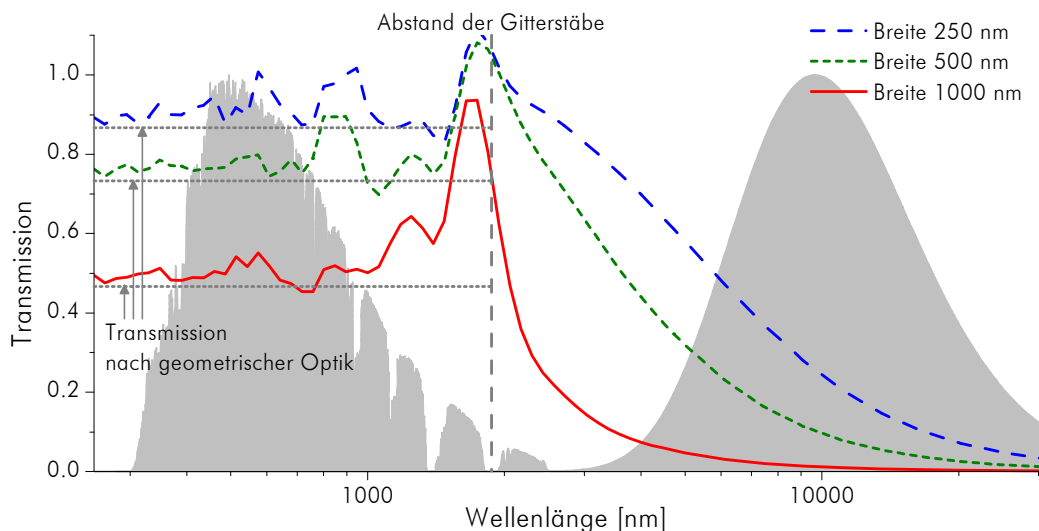


Abbildung 3.25

Auswirkungen der Breite der rechteckigen 15 nm dicken Gitterstäbe auf den Transmissionsgrad des Gitters. Der Abstand der Gitterstäbe betrug 1875 nm.

Glasoberfläche

Um zu untersuchen, welchen Einfluss das Glassubstrat auf die Transmission hat, wurde in den Computersimulationen nun der Bereich hinter dem Metallgitter als Glas mit dem Brechungsindex 1.5 modelliert (siehe Abbildung 3.26).

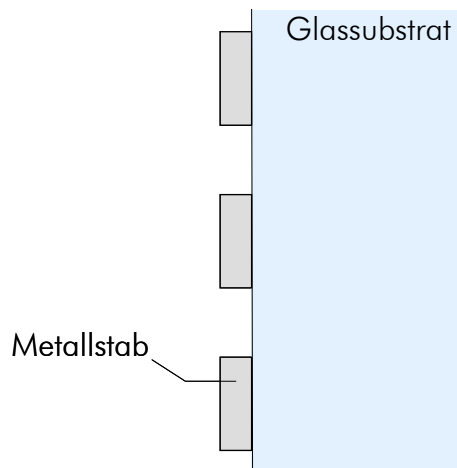


Abbildung 3.26

Metallgitter auf Glassubstrat.

Die Auswirkungen des Glassubstrats sind in Abbildung 3.27 gezeigt. Simuliert wurde ein Gitter aus Stäben mit 1000 nm Breite und 15 nm Dicke bei einer Gitterkonstanten von 1875 nm.

Durch das Glas wird der Abfall der Transmissionskurve etwas zu längeren Wellenlängen in den Spektralbereich oberhalb der Gitterkonstante verschoben. Hier kann der Verlauf der Transmission gut durch eine Verschiebung der Kurve aus der Simulation ohne Glassubstrat wiedergegeben werden. Im Spektralbereich unterhalb der Gitterkonstante liegt der Transmissionsgrad aufgrund der Reflexionen auf der Glasoberfläche bei der Simulation mit Glassubstrat etwas niedriger als bei der Simulation ohne Glassubstrat. Dies ist in guter Übereinstimmung mit den Erwartungen aus der geometrischen Optik.

Aus Simulationen mit verschiedenen Gittergeometrien wurde der Faktor, um den die Transmissionskurve aus der Simulation ohne Glassubstrat verschoben werden muss, um den Transmissionsabfall im Fall mit Glassubstrat wiederzugeben, zu 1.3 bestimmt.

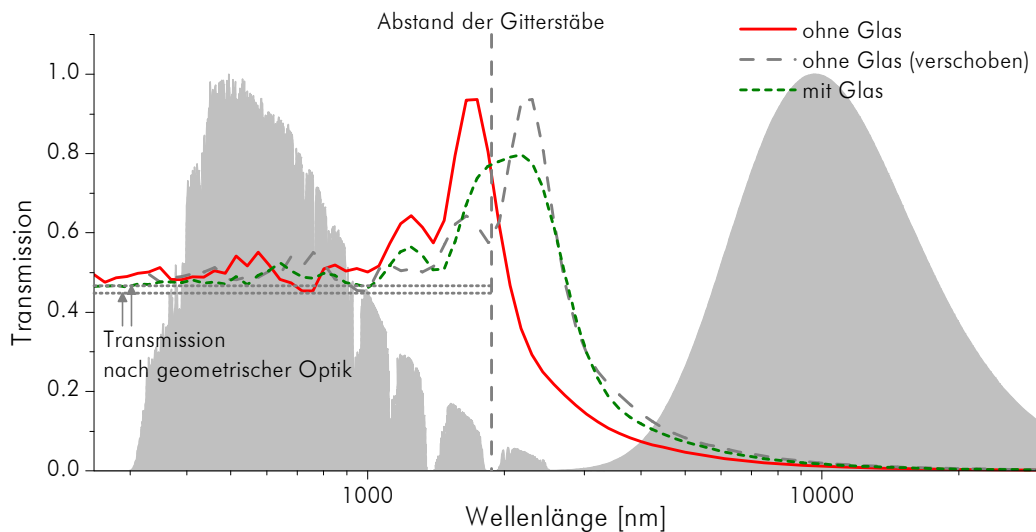


Abbildung 3.27

Auswirkungen des Glassubstrats auf die Transmission der strukturierten Metallschicht. Die Breite der Gitterstäbe betrug 1000 nm, die Dicke 15 nm. Die Gitterkonstante lag wiederum bei 1875 nm. Der Abfall der Kurve für die Simulation mit Glassubstrat kann gut durch eine Verschiebung der Kurve ohne Glassubstrat beschrieben werden. Im Spektralbereich unterhalb der Gitterkonstante liegt die Transmission aufgrund der Reflexionen an der Glasoberfläche etwas niedriger.

3.4.2 Ermittlung einer idealen Struktur

Durch Gewichtung der spektralen Transmissionsgrade aus den Simulationen mit dem Sonnenspektrum und der Planckverteilung für 300 K können nun die solaren und die IR-Transmissionsgrade der simulierten Gitter berechnet werden. Für den Einsatz als mikrostrukturierte Low-e-Schicht soll der solare Transmissionsgrad möglichst groß sein und der IR-Transmissionsgrad in der Nähe von Null liegen.

Wie muss die Strukturierung der Low-e-Schicht nun aussehen, um dies zu erreichen? Durch Variation der Parameter Gitterkonstante, Breite der Gitterstäbe und Dicke der Gitterstäbe in den Computersimulationen können die solaren und IR-Transmissionsgrade für die verschiedenen Konfigurationen berechnet werden. Da die Simulation einer einzigen Gittergeometrie jedoch etwa 24 Stunden Rechenzeit benötigt, gestaltet sich die Suche nach dem optimalen Parameterbereich mit dieser Methode sehr zeitaufwändig.

Abschätzung durch Fitfunktion

Um einen schnelleren Überblick über die Auswirkungen von Parametervariationen zu erhalten, wurde der spektrale Transmissionsgrad der Gitterstrukturen aus den Computersimulationen durch die zusammengesetzte Funktion

$$\tau = \begin{cases} \tau_0 & \text{für } \lambda < \lambda_0 \\ \tau_0 \cdot e^{-a \cdot (\lambda - \lambda_0)} & \text{für } \lambda \geq \lambda_0 \end{cases} \quad (3.2)$$

angenähert. Der Plateaubereich für Wellenlängen kleiner als die Gitterkonstante, also bis zur Wellenlänge λ_0 , wird hier durch den konstanten Wert τ_0 beschrieben. Oberhalb dieser Wellenlänge fällt der Transmissionsgrad exponentiell ab. Dieser Abfall ist durch die Form der Kurven und nicht durch physikalische Gesetzmäßigkeiten motiviert.

Die drei Parameter λ_0 , τ_0 und a wurden für die verschiedenen in Abbildung 3.24 und Abbildung 3.25 dargestellten Geometrieconfigurationen jeweils durch Minimierung der quadratischen Abweichungen zwischen den spektralen Transmissionswerten aus den Computersimulationen und den nach Gleichung (3.2) berechneten Werten bestimmt. Für die durchgeführten Computersimulationen sind also jeweils passende Parameter λ_0 , τ_0 und a bekannt, mit denen der spektrale Transmissionsverlauf nach Gleichung (3.2) gut wiedergegeben werden kann.

Um nun das Transmissionsverhalten für Gittergeometrien voraussagen zu können, die noch nicht in Computersimulationen untersucht wurden, müssen diese Parameter jetzt in Abhängigkeit von Breite und Dicke der Gitterstäbe ermittelt werden können. Es zeigte sich, dass quadratische Funktionen gut geeignet sind, für die durchgeführten Computersimulationen die Abhängigkeit der jeweiligen Fitparameter λ_0 , τ_0 und a von den geometrischen Größen Breite und Dicke der Gitterstäbe zu beschreiben. Durch einen weiteren nichtlinearen Fit wurden nun die Konstanten in diesen quadratischen Funktionen ermittelt.

Durch diese doppelte Anfittung kann also für die in den zu Grunde liegenden Simulationen verwendete Gitterkonstante von 1875 nm für nahezu beliebige Breiten und Dicken der Gitterstäbe der ungefähre Verlauf des spektralen Transmissionsgrades schnell bestimmt werden. Die Stabdicke darf dabei nicht wesentlich größer als 1000 nm sein, und mit einem geringen Verhältnis von Stabbreite zu Gitterkonstante wird die Übereinstimmung zwischen der Trans-

missionskurve aus den Computersimulationen und der Fitfunktion zunehmend schlechter.

Auch eine Variation der Gitterkonstante ist mit der Fitfunktion durchführbar. Da sich am Streuverhalten nichts ändert, wenn die Geometrie des Gitters gleichzeitig mit der Wellenlänge skaliert wird (siehe Kapitel 3.3), kann durch geeignete Wahl von Breite und Dicke der Gitterstäbe und Verschiebung der Fitkurve zu anderen Wellenlängen auch das Verhalten von Gittern mit anderen Gitterkonstanten ermittelt werden.

Abbildung 3.28 zeigt Transmissionskurven aus den Computersimulationen und den Verlauf der nach dem oben beschriebenen Verfahren ermittelten Fitkurven für ausgewählte Gitterkonfigurationen. Der Verlauf des spektralen Transmissionsgrades aus den Computersimulationen kann wiedergegeben werden, Abweichungen sind jedoch erkennbar. Die aus den Fitkurven gewonnen Erkenntnisse sind also eher zur qualitativen Abschätzung zu gebrauchen als zur quantitativen Auswertung.

Die Abweichung zwischen Computersimulation und Fitkurve lag sowohl beim solaren Transmissionsgrad als auch beim Transmissionsgrad im Infrarotbereich bei maximal 5 Prozentpunkten. Für Gitterkonfigurationen außerhalb des bereits in Computersimulationen ermittelten Parameterbereichs kann diese Abweichung jedoch auch höher liegen.

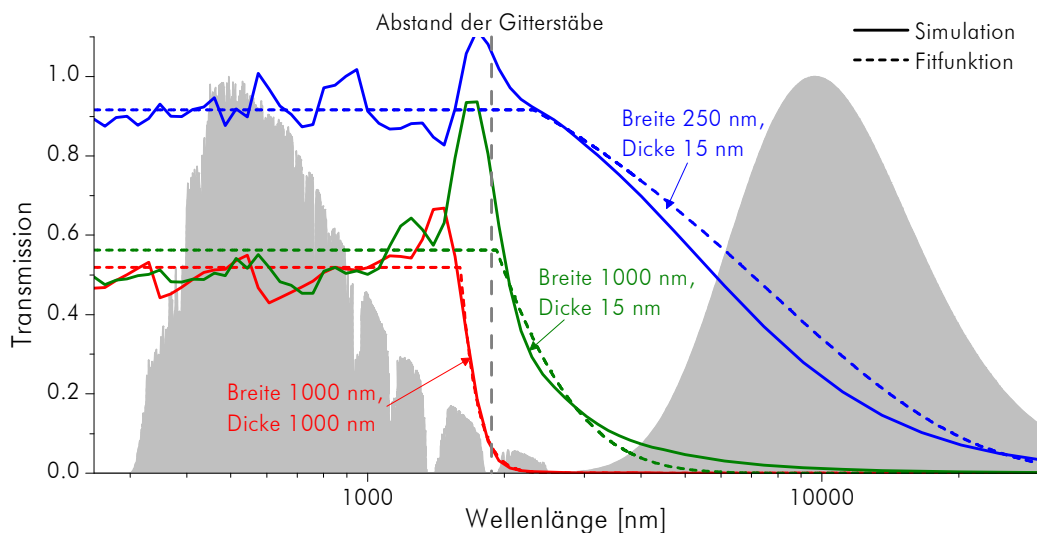


Abbildung 3.28

Auswertung verschiedener Computersimulationen und die dazu passenden Fitfunktionen nach Gleichung (3.2). Die Gitterstäbe hatten einen Abstand von 1875 nm.

Variationen über großen Parameterbereich

Mit Hilfe der Fitfunktion ist es nun möglich, einen großen Parameterbereich für Gitterkonstante, Breite und Dicke der Gitterstäbe abzudecken. Abbildung 3.29 zeigt die Transmission im Bereich der solaren Strahlung und im Bereich der Wärmestrahlung bei 300 K eines Gitters für verschiedene Gitterkonstanten und Verhältnisse von Stabbreite zu Gitterkonstante. Die Verschiebung der Transmissionsgrenze zu längeren Wellenlängen durch die Oberfläche des Glassubstrats wurde hier mitberücksichtigt. Die Dicke der Gitterstäbe wurde so gewählt, dass die gleiche Menge Metall im Gitter vorhanden ist wie in einer durchgehenden Schicht mit 15 nm Dicke, die Dicke der Schicht also mit dem Verhältnis von Breite der Gitterstäbe zu Gitterkonstante skaliert.

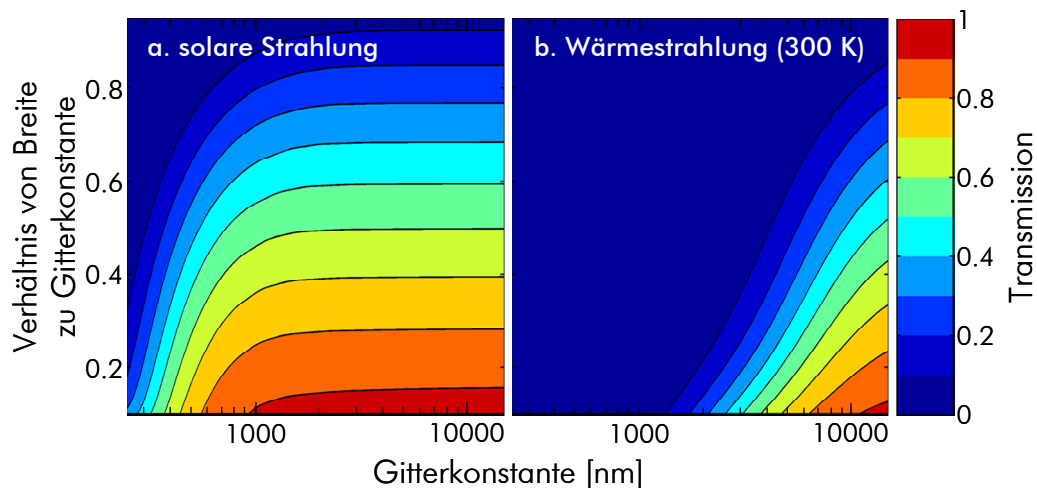


Abbildung 3.29

Transmission des Gitters für verschiedene Gitterkonfigurationen im solaren Spektralbereich (links) und im Bereich der Wärmestrahlung (rechts).

Wie erwartet ist die solare Transmission umso höher, je kleiner das Verhältnis von Stabbreite zu Gitterkonstante ist. Da durch die Strukturierung der Low-e-Schicht eine hohe solare Transmission erreicht werden soll, sollte das Verhältnis von Stabbreite zu Gitterkonstante also möglichst klein gewählt werden.

Die Transmission des Gitters im Infrarotbereich und damit die Emissivität der strukturierten Low-e-Schicht sollte jedoch auch so klein wie möglich sein. Eine Steigerung der Emissivität um ca. 2,5 Prozentpunkte wäre bei einer Verglasung mit hoher solarer Transmission im Infrarotbereich hinnehmbar.

Abbildung 3.30 zeigt eine Kombination der Darstellungen der solaren und IR-Transmission aus Abbildung 3.29. Der Bereich, in dem die IR-Transmission

größer als 0.01 ist, ist durch Schraffur ausgeblendet. Dieser Wert liegt niedriger als die oben erwähnten 2.5 Prozent, um der Unsicherheit in der Fitfunktion Rechnung zu tragen.

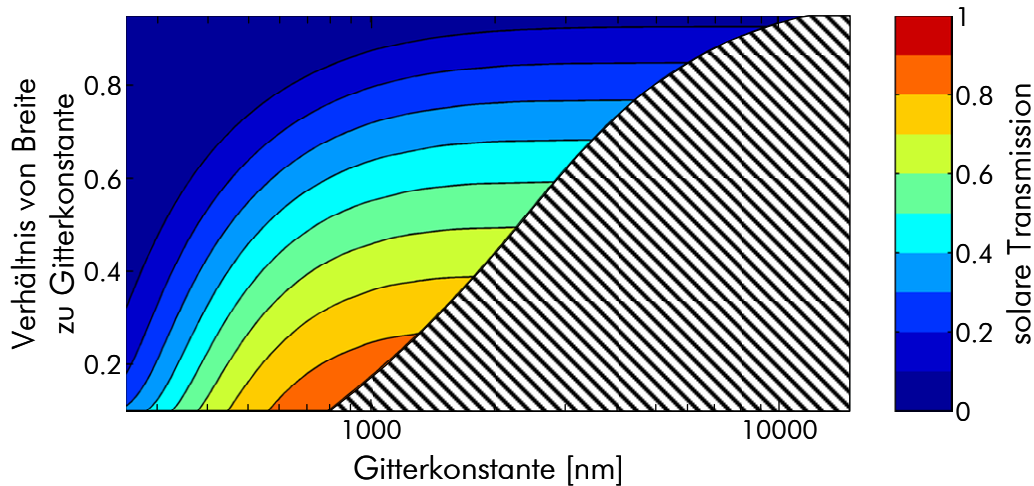


Abbildung 3.30

Auswirkungen der Gittergeometrie. Dargestellt ist der solare Transmissionsgrad des Gitters, der Parameterbereich mit einer IR-Transmission über 0.01 ist durch Schraffur ausgeblendet.

Zur Bestimmung der idealen Strukturierungsparameter ist diese Auftragung jedoch noch nicht geeignet – es ist lediglich der Transmissionsgrad eines Gitters aus ideal leitenden Metallstäben dargestellt. Das Verhalten einer realen Scheibe mit strukturierter Low-e-Beschichtung kann jedoch aus diesen Daten ermittelt werden.

Anwendung auf reale Low-e-Schichtsysteme

Der spektrale Transmissionsgrad einer Glasscheibe mit strukturierter Low-e-Schicht liegt zwischen dem Transmissionsgrad τ_{glas} einer unbeschichteten Glasscheibe und dem Transmissionsgrad $\tau_{\text{low-e}}$ einer Scheibe mit konventioneller Low-e-Beschichtung. Wo genau, ist abhängig vom Transmissionsgrad τ_{Gitter} eines entsprechenden Gitters aus ideal leitenden Metallstäben mit den gleichen Dimensionen wie bei den Metallstegen der strukturieren Low-e-Schicht. Liegt τ_{Gitter} einer Gitterkonfiguration für eine Wellenlänge bei Null, so wird die gesamte Strahlung dieser Wellenlänge durch die ideal leitenden Metallstäbe reflektiert. Eine mit einer strukturierten Low-e-Schicht mit den entsprechenden Strukturparametern versehene Glasscheibe verhält sich dann wie eine flächige

Low-e-Schicht. Liegt τ_{Gitter} für eine Gitterkonfiguration für eine Wellenlänge bei Eins, so wird die gesamte einfallende Strahlung dieser Wellenlänge transmittiert: die Gitterstäbe haben keinen Einfluss auf die Transmission. Eine mit einer strukturierten Low-e-Schicht mit den entsprechenden Strukturparametern versehene Glasscheibe verhält sich dann wie eine unbeschichtete Glasscheibe. Allgemein ergibt sich damit für den Transmissionsgrad:

$$\tau_{\text{strukt}}(\lambda) = \tau_{\text{low-e}}(\lambda) + \tau_{\text{Gitter}}(\lambda) \cdot [\tau_{\text{Glas}}(\lambda) - \tau_{\text{low-e}}(\lambda)] \quad (3.3)$$

Die spektralen Transmissionsgrade der unbeschichteten Scheibe und der Scheibe mit konventioneller Low-e-Schicht sind aus Messungen bekannt. Der Transmissionsgrad des Gitters kann durch FDTD-Simulationen oder die Fitfunktion ermittelt werden. Zusätzlich zu berücksichtigen ist jedoch die Variation in der Dicke der Silberschicht des Low-e-Schichtsystems. Für Abbildung 3.30 wurde die Dicke der Metallstäbe immer so gewählt, dass in den Gitterstäben genau so viel Metall vorhanden ist wie in einer flächigen Schicht mit 15 nm Dicke. Durch eine dickere Silberschicht verringert sich aber die Transmission des Schichtsystems im solaren Spektralbereich.

Da Daten über Low-e-Schichtsysteme mit unterschiedlichen Silberschichtdicken nicht zur Verfügung standen, wurde der Effekt der Dickenänderung aus Literaturwerten abgeschätzt. Spektrale Daten über den komplexen Brechungsindex

$$\tilde{n} = n + ik \quad (3.4)$$

von Silber als massives Material finden sich in [Palik 1985]. Aus dessen imaginärem Anteil k kann nach

$$\alpha = \frac{4\pi \cdot k}{\lambda} \quad (3.5)$$

spektral die Absorptionskonstante α bestimmt werden. λ ist dabei die Wellenlänge. Mit Hilfe des *Lambert-Beerschen Gesetzes*

$$I = I_0 \cdot e^{-\alpha \cdot d} \quad (3.6)$$

kann dann daraus die Absorption in einer Schicht der Dicke d berechnet werden.

Da sich jedoch die optischen Eigenschaften von dünnen Schichten von denen des massiven Materials unterscheiden können, wurde die Absorptionskonstante α aus Gleichung (3.5) so skaliert, dass mit Gleichung (3.6) der Verlauf des Absorptionsgrades für eine Silberschicht der Dicke 15 nm aus [Gläser 1999] wiedergegeben werden konnte.

Variiert man in einem Low-e-Schichtsystem nur die Dicke der Silberschicht, so ist eine Änderung in der Transmission nur durch die Absorption in dieser Schicht bedingt – alle anderen Effekte, beispielsweise Reflexionen an den einzelnen Schichtoberflächen, bleiben unverändert. Mit Hilfe der oben erwähnten skalierten Absorptionskonstante und dem Lambert-Beerschen Gesetz ist es also möglich, die durch die Dickenänderung der Silberschicht bedingte Zunahme im Absorptionsgrad eines Low-e-Schichtsystems zu berechnen. Abbildung 3.31 zeigt diese Zunahme, gewichtet mit dem solaren Spektrum, in Abhängigkeit von der Dicke der Silberschicht im Vergleich zur Dicke 15 nm.

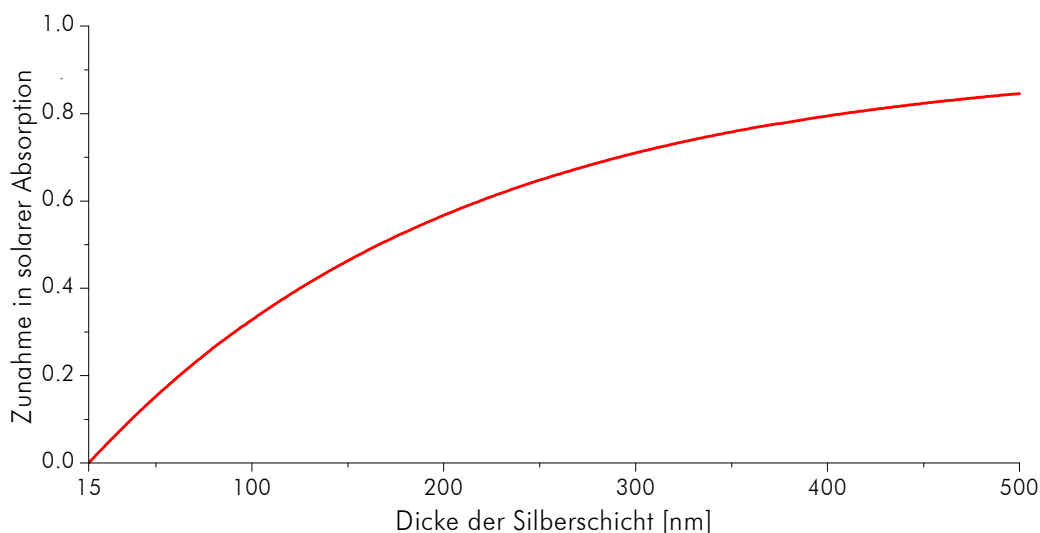


Abbildung 3.31

Zunahme der solaren Absorption eines Low-e-Schichtsystems für verschiedene Dicken der Silberschicht im Vergleich zur Schichtdicke 15 nm.

Da eine Zunahme der Absorption des Schichtsystems eine Abnahme in der Transmission bedeutet, ist es mit Hilfe der Daten aus Abbildung 3.31 und Gleichung (3.3) möglich, Abbildung 3.30 für die Anwendung auf ein reales Low-e-Schichtsystem zu modifizieren. Betrachtet wird eine Floatglasscheibe mit 6 mm Dicke und dem Schichtsystem *iplus E* der Firma Interpane [Interpane 2006]. Der solare Transmissionsgrad dieser Scheibe beträgt 0.57, die Emissivität im

Infrarotbereich 0.03. Abbildung 3.32 zeigt den so berechneten Unterschied zum solaren Transmissionsgrad dieser Scheibe, der durch Strukturierung der Low-e-Schicht erreicht werden kann. Die Dicke der Silberschicht wird hier wiederum mit dem Verhältnis von Gitterkonstante zu Stabbreite skaliert, so dass die gleiche Menge Silber in der Beschichtung vorhanden ist wie in der flächigen Schicht. Rote Farbe bedeutet eine Erniedrigung des solaren Transmissionsgrades, bedingt durch die größere Dicke der Silberschicht und die niedrige solare Transmission des Gitters. Grüne Farbe bedeutet eine Erhöhung des solaren Transmissionsgrades. Gitterkonfigurationen, bei denen die Transmission im IR-Bereich über 0.01 liegt, wurden wiederum durch Schraffur ausgeblendet.

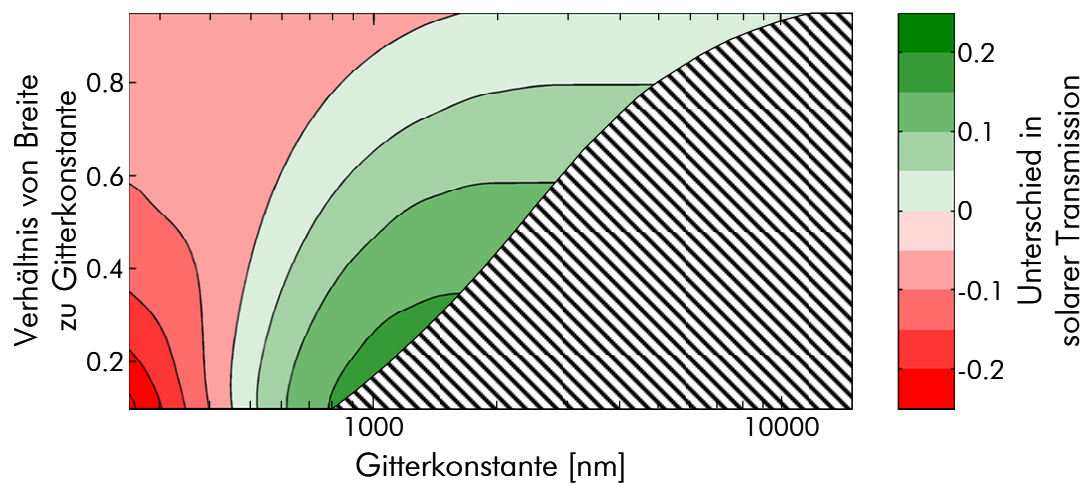


Abbildung 3.32

Unterschied in solarer Transmission einer Scheibe mit strukturierter Low-e-Beschichtung im Vergleich zum flächigen Schichtsystem Interpane iplus E. Rote Bereiche bedeuten eine Verschlechterung des solaren Transmissionsgrades durch die Strukturierung, grüne Bereiche eine Verbesserung. Schraffiert ist der Parameterbereich, in dem die Transmission des Gitters im IR-Bereich über 0.01 liegt.

Aus Abbildung 3.32 wird ersichtlich, dass sich beim untersuchten Schichtsystem durch die Strukturierung ein Gewinn in solarer Transmission von über 15 Prozentpunkten erreichen lässt. Die Gitterkonstante sollte dazu knapp über 1000 nm liegen und die Breite der Gitterstäbe ein Viertel davon betragen. Die Dicke der Silberschicht müsste von den ursprünglichen 15 nm auf 60 nm erhöht werden.

Da die zur Erstellung der Abbildung 3.32 verwendete Fitfunktion aufgrund des hohen Fehlers nur als Richtlinie geeignet ist, muss die hohe solare Transmission an diesem Punkt noch durch eine FDTD-Simulation nachgewiesen werden. Eine solche Simulation mit einer Gitterkonstante von 1040 nm, einer Stabbreite von 260 nm und einer Dicke von 60 nm ergab eine solare Transmission dieses Gitters von 0.77 und eine IR-Transmission von 0.023. Die Auswertung der Fitfunktion liefert im Vergleich dazu eine solare Transmission von 0.80 und eine IR-Transmission von 0.0033.

Angewandt auf das Schichtsystem Interpane iplus E kann mit Gleichung (3.3) nun die spektrale Transmission des so strukturierten Low-e-Schichtsystems berechnet werden. Abbildung 3.33 zeigt die so erreichbare Steigerung der solaren Transmission als schraffierten Bereich. Im Vergleich zur unstrukturierten Low-e-Beschichtung wird der solare Transmissionsgrad damit um 15 Prozentpunkte auf 0.72 gesteigert.

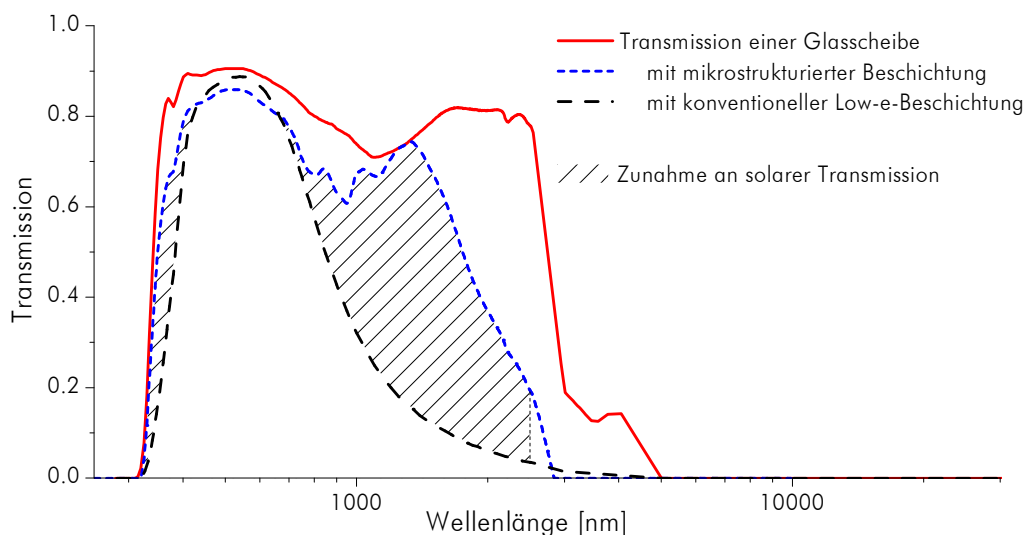


Abbildung 3.33

Zunahme an solarer Transmission durch Strukturierung des Low-e-Schichtsystems Interpane iplus E (schraffierter Bereich).

Auch die Berechnung der Emissivität im Infrarotbereich ist möglich. Da spektrale Daten über die Emissivität nicht zur Verfügung standen, werden hier die Eingangsgrößen bereits vor der Verrechnung mit dem Planck-Spektrum bei 300 K gewichtet:

$$\varepsilon_{\text{strukt,IR}} = \varepsilon_{\text{low-e,IR}} + \tau_{\text{Gitter,IR}} \cdot [\varepsilon_{\text{Glas,IR}} - \varepsilon_{\text{low-e,IR}}] \quad (3.7)$$

Da sich bei Silberschichtdicken über 15 nm im Low-e-Schichtsystem der IR-Emissionsgrad nicht mehr ändert [Gläser 1999], ist hier eine Korrektur mit der Schichtdicke nicht nötig.

Bei dem betrachteten Schichtsystem *Interpane iplus E* steigt der IR-Emissionsgrad durch die Strukturierung von 0.03 auf 0.048.

3.5 Anwendungsbeispiel: die solare Verglasung

Eingesetzt werden kann die strukturierte Low-e-Schicht überall dort, wo die Energiegewinne durch die solare Einstrahlung eine Rolle spielen und gleichzeitig eine gute Wärmedämmung erwünscht ist. Für eine solche Anwendung als *solare Verglasung* wurden die U-Werte und g-Werte, die sich mit Hilfe der strukturierten Low-e-Schicht erreichen lassen, berechnet. Betrachtet wurde der Einsatz als Einscheibenverglasung und als Doppelverglasungssystem.

Als Einscheibensystem wurde eine 4 mm dicke Kalk-Natron-Glasscheibe betrachtet, deren Innenseite mit der strukturierten Low-e-Schicht gemäß Abbildung 3.33 beschichtet ist.

Für das Zweischeibensystem wurden zwei 4 mm dicke Kalk-Natron-Glasscheiben im Abstand 15 mm angenommen. Der Scheibenzwischenraum ist dabei mit Argon gefüllt, die strukturierte Low-e-Beschichtung ist auf Position 3 aufgebracht, also im Scheibenzwischenraum auf der inneren Scheibe. Alle anderen Glasoberflächen sind unbeschichtet.

U-Werte und g-Werte der Verglasungssysteme wurden nach den Normen [DIN EN 673 1999] und [DIN EN 13362-2 2005] aus den spektralen Transmissionsgraden und den Emissivitäten berechnet. Abbildung 3.34 zeigt diese Größen für das Einscheiben- und das Zweischeibensystem.

Bei beiden Systemen wird durch die Beschichtung mit dem konventionellen Low-e-System eine starke Verringerung des U-Werts der Verglasung erreicht. Dies geht jedoch mit einer deutlichen Reduzierung des g-Werts einher. Durch eine geeignete Strukturierung des Schichtsystems kann ein großer Anteil dieses g-Wert-Verlusts zurück gewonnen werden, der U-Wert verschlechtert sich dabei jedoch nur unerheblich.

Gerade bei der Doppelverglasung liegt der g-Wert bei Verwendung der strukturierten Low-e-Schicht mit 0.70 nur wenig unter dem g-Wert des Systems mit unbeschichteten Scheiben (g-Wert 0.73). Aufgrund des Wärmewiderstands des Scheibenzwischenraums wird hier die von der Low-e-Beschichtung absorbierte Energie hauptsächlich in den Innenraum abgegeben und liefert so als sekundärer Wärmestrom einen größeren Beitrag zum g-Wert.

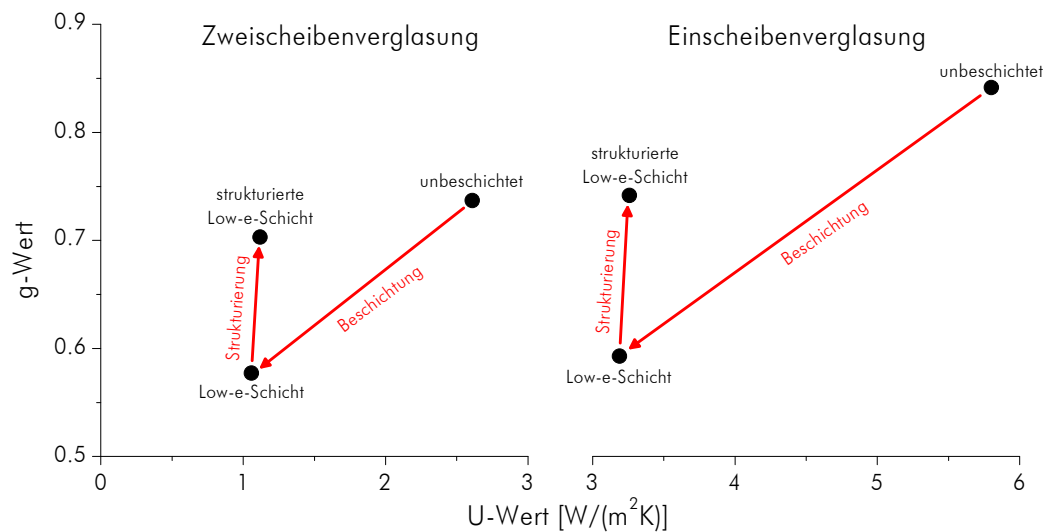


Abbildung 3.34

Anwendung der mikrostrukturierten Low-e-Schicht bei der Einscheiben- und der Zweiseibenverglasung. Durch die Strukturierung kann ein großer Teil der durch die Low-e-Beschichtung verursachten Reduktion des g-Werts wieder wettgemacht werden, der U-Wert wird dabei kaum beeinflusst. Bei der Einscheibenverglasung befand sich die Beschichtung auf Position 2, bei der Zweiseibenverglasung auf Position 3.

Durch die Strukturierung der Low-e-Schicht lassen sich also Verglasungssysteme herstellen, deren Gesamtenergiedurchlassgrad deutlich höher liegt, als das bei Verglasungen mit konventioneller Low-e-Schicht der Fall ist. Bei der Einfachverglasung können 60 Prozent des durch die Low-e-Beschichtung bedingten g-Wert-Rückgangs zurück gewonnen werden, bei der Doppelverglasung sogar fast 80 Prozent. Die Isolationswirkung wird dabei kaum beeinträchtigt: im Fall der Einscheibenverglasung steigt der U-Wert von 3,19 W/(m²·K) auf 3,27 W/(m²·K), im Fall der Zweiseibenverglasung von 1,06 W/(m²·K) auf 1,12 W/(m²·K).

4 Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde gezeigt, dass durch eine geeignet strukturierte Low-e-Schicht Verglasungen realisiert werden können, die bei geringem U-Wert, also hoher thermischer Isolationswirkung, eine hohe solare Transmission und damit einen hohen g-Wert aufweisen.

In den durchgeführten FDTD-Simulationen wurde zur Verringerung der Rechenzeit eine Reihe von Vereinfachungen getroffen. So wurde mit einem idealen Leiter als metallische Schicht gerechnet und frequenzabhängiges Verhalten von Glas und Metall wurde nicht in die Berechnungen mit einbezogen. Mit größerem Aufwand ist es allerdings möglich, auch frequenzabhängige Materialeigenschaften in die FDTD-Simulationen mit einzubeziehen [Taflove 2000]. Zusammen mit geeigneten Materialdaten über Brechungsindex und Leitfähigkeit von dünnen Schichten aus Silber und den anderen in den Schichtsystemen verwendeten Materialien könnte man damit auch ein komplettes Low-e-Schichtsystem statt einer einzelnen Metallschicht in den Simulationen erfassen.

Außerdem wurde in den durchgeführten FDTD-Simulationen nur senkrechter Einfall der elektromagnetischen Strahlung untersucht. Um den g-Wert einer solaren Verglasung auch winkelabhängig angeben zu können, sollte in den Simulationen auch schräger Einfall berücksichtigt werden können. Zusammen mit Einstrahlungsdaten über den Jahresverlauf, beispielsweise aus den Testreferenzjahrdaten des Deutschen Wetterdienstes [DWD 2004] könnten damit dann auch quantitative Aussagen für die solare Effizienz über den Jahresverlauf bei einer vorgegebenen Einbausituation gemacht werden.

Damit solare Verglasungen mit mikrostrukturierten Low-e-Schichten auf größeren Flächen eingesetzt werden können, müssen geeignete Verfahren zur Strukturierung der Low-e-Schichten zur Verfügung stehen. Wünschenswert ist hier die Möglichkeit zur Beschichtung von großflächigen Glassubstraten, am Besten bis hin zum Produktionsmaß von Floatglas von $3,21 \text{ m} \times 6,00 \text{ m}$ [Gläser 1999], idealerweise direkt in den Glasherstellungsprozess integriert.

Die zur Herstellung der vermessenen Proben verwendete Elektronenstrahlithographie ist für diese Anforderungen nicht geeignet. Mit Lithographieprozessen, die auf andere Belichtungsmethoden wie beispielsweise die Holographie zurückgreifen [Gombert 1998], können zwar größere Flächen beschichtet werden, die geforderten Abmessungen zum Einsatz in der Architektur werden jedoch auch hier noch nicht erreicht.

Ein lohnender Ansatz wäre die Entwicklung einer Beschichtungsmethode, bei der die Silberatome durch Selbstorganisation beispielsweise beim Sputterprozess geeignete Strukturen ausbilden. Da für die wellenlängenselektive Funktion der strukturierten Low-e-Schicht regelmäßige Strukturen eigentlich nicht notwendig sind, wäre es hier vielleicht möglich, Umgebungsbedingungen zu finden, bei denen das Silber in einer perkolierenden Struktur mit geeigneter Flächenbelegung aufwächst.

Eine andere Möglichkeit, strukturierte Low-e-Schichten zu erzeugen, wären Druckprozesse. Dass es möglich ist, flächige Schichten auf einem Glassubstrat aufzubringen, beispielsweise im Sol-Gel-Verfahren, wurde bereits gezeigt [Endres 2001]. Mit dem Offsetdruckverfahren ist es möglich, Strukturen mit den gewünschten lateralen Abmessungen herzustellen. Problematisch ist hier eher die geringe Dicke der Schicht, da die beim Druck verwendeten Pigmente Durchmesser von etwa 20 nm bis 1000 nm aufweisen sollten [Schaschek 2001].

Weitere Methoden zur Herstellung der strukturierten Low-e-Schichten werden bei [Tin 2004] genannt.

Literaturverzeichnis

- [AMTS-G-173 2003] American Society for Testing and Materials: *Standard Tables for Reference Solar Spectral Irradiances: Direct Normal and Hemispherical on 37° Tilted Surface*. AMTS-G-173 (2003)
- [ASAP 2005] Breault Research Organization: *ASAP 2005 Features*. Tucson (2005)
- [Berenger 1994] J. P. BERENGER: *A Perfectly Matched Layer for the Absorption of Electromagnetic Waves*. *Journal of Computational Physics* **114**(2), pp. 185-200 (1994)
- [Bever 1992] S. J. BEVER und J. P. ALLEBACH: *Multiple-scattering by a planar array of parallel dielectric cylinders*. *Applied Optics* **31**(18), pp. 3524-3532 (1992)
- [Bohren 1983] C. F. BOHREN und D. R. HUFFMAN: *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. Wiley, New York (1983)
- [Carlowitz 1995] B. CARLOWITZ: *Kunststoff-Tabellen*. 4. Auflage, Hanser, München (1995)
- [Derrick 1979] G. H. DERRICK, R. C. MCPHEDRAN et al.: *Crossed Gratings - Theory and Its Applications*. *Applied Physics* **18**(1), pp. 39-52 (1979)
- [DIN EN 410 1998] DIN Deutsches Institut für Normung e.V.: *Bestimmung der lichttechnischen und strahlungsphysikalischen Kenngrößen von Verglasungen*. DIN EN 410 1998-12 (1998)
- [DIN EN 673 1999] DIN Deutsches Institut für Normung e.V.: *Bestimmung des Wärmedurchgangskoeffizienten (U-Wert)*. DIN EN 673 1999-01 (1999)
- [DIN EN 13362-2 2005] DIN Deutsches Institut für Normung e.V.: *Sonnenschutzeinrichtungen in Kombination mit Verglasungen - Berechnung der Solarstrahlung und des Lichttransmissionsgrades. Teil 2: Detailliertes Berechnungsverfahren*. DIN EN 13362-2 2005-06 (2005)
- [DPG 2005] ARBEITSKREIS ENERGIE DER DEUTSCHEN PHYSIKALISCHEN GESELLSCHAFT (Hrsg.): *Klimaschutz und Energieversorgung in Deutschland*

- 1990-2020. Deutsche Physikalische Gesellschaft e.V., Bad Honnef (2005)
- [DWD 2004] Deutscher Wetterdienst: *Testreferenzjahre von Deutschland für mittlere und extreme Witterungsverhältnisse*. Offenbach (2004)
- [Endres 2001] K. ENDRES, M. MENNIG et al.: *Zur Herstellung optischer Beschichtungen auf Glas über den Flexodruck*. 75. Glastechnische Tagung, 21.-23.05.2001, Wernigerode (2001)
- [FfE 2003] FORSCHUNGSSTELLE FÜR ENERGIEWIRTSCHAFT (Hrsg.): *Informationen über den Energieverbrauch in Deutschland 2001*. Korrektur eines Tippfehlers durch den Autor, München (2003)
- [Fourier 1822] J. B. FOURIER: *Théorie analytiques de la chaleur*. Paris (1822)
- [Garcia 2000] S. G. GARCIA, B. G. OLMEDO et al.: *A time-domain near- to far-field transformation for FDTD in two dimensions*. *Microwave and Optical Technology Letters* **27**(6), pp. 427-432 (2000)
- [Gerthsen 1993] C. GERTHSEN: *Physik*. 17. Auflage, Springer, Berlin (1993)
- [Gläser 1999] H. J. GLÄSER: *Dünnschichttechnologie auf Flachglas*. Hofmann, Schorn-dorf (1999)
- [Gombert 1998] A. GOMBERT, W. GLAUBITT et al.: *Glazing with very high solar transmittance*. *Solar Energy* **62**(3), pp. 177-188 (1998)
- [Groß 2001] O. GROß: *Winkelselektiver Strahlungstransport in strukturierten Vielschichtsystemen*. Doktorarbeit, Bayerische Julius-Maximilians-Universität Würzburg (2001)
- [Grosse 1997] P. GROSSE, R. HERTLING et al.: *Design of low emissivity systems based on a three-layer coating*. *Journal of Non-Crystalline Solids* **218**, pp. 38-43 (1997)
- [Hansen 2006] NASA Goddard Institute for Space Studies: *GISS Surface Temperature Analysis*. Stand 17.05.2006, <http://data.giss.nasa.gov/gistemp> (2006)
- [Hare 2003] W. HARE (Hrsg.): *Assessment of Knowledge on Impacts of Climate Change*. Wissenschaftlicher Beirat der Bundesregierung Globale Umweltveränderungen, Berlin (2003)

- [Hendry 1986] J. HENDRY: *James Clerk Maxwell and the Theory of the Electromagnetic Field*. Adam Hilger Ltd., Bristol (1986)
- [Horwitz 1974] C. M. HORWITZ: *A New Solar Selective Surface*. Optics Communications **11**(2), pp. 210-212 (1974)
- [Interpane 2006] M. ELSTNER (Hrsg.): *Labordatenblatt iplus E 6*. 07.06.2006, Interpane Glasbeschichtung, Plattling (2006)
- [IPCC 2001] J. T. HOUGHTON, Y. DING et al. (Hrsg.): *Climate Change 2001: The Scientific Basis*. Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC), Cambridge Press, Cambridge (2001)
- [Jackson 2002] J. D. JACKSON: *Klassische Elektrodynamik*. 3. überarbeitete Auflage, de Gruyter, Berlin (2002)
- [Kamp 2006] M. KAMP, Mikrostrukturlabor der Universität Würzburg: Persönliche Mitteilung vom 07.07.06 (2006)
- [Liou 2002] K.-N. LIOU: *An Introduction to Atmospheric Radiation*. 2nd Edition, Academic Press, Amsterdam (2002)
- [Maxwell 1873] J. C. MAXWELL: *A Treatise on Electricity and Magnetism*. Clarendon Press, Oxford (1873)
- [McPhedran 1977] R. C. MCPHEDRAN und D. MAYSTRE: *On the Theory and Solar Application of Inductive Grids*. Applied Physics **14**(1), pp. 1-20 (1977)
- [Mie 1908] G. MIE: *Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen*. Annalen der Physik **25**(3), pp. 378-445 (1908)
- [Möllman 2004] K.-P. MÖLLMAN und M. VOLLMER: *Kochen mit Zentimeterwellen: Die Physik der Haushaltsmikrowelle*. Physik in unserer Zeit **35**(1), pp. 38-44 (2004)
- [Oreskes 2004] N. ORESKES: *Beyond the ivory tower - The scientific consensus on climate change*. Science **306**(5702), pp. 1686-1686 (2004)
- [Palik 1985] E. D. PALIK: *Handbook of Optical Constants of Solids*. Academic Press, Inc., Boston (1985)
- [Pasco 1991] PASCO scientific: *Instruction Manual and Experiment Guide for the PASCO scientific Model WA-9314B*. Roseville (1991)

- [Press 2002] W. H. PRESS: *Numerical Recipes in C : the Art of Scientific Computing*. 2nd Edition, Cambridge University Press, Cambridge (2002)
- [Schaschek 2001] K. SCHASCHEK, Koenig und Bauer AG: Persönliche Mitteilung vom 07.06.2001 (2001)
- [Siegel 1988] R. SIEGEL, J. R. HOWELL et al.: *Wärmeübertragung durch Strahlung. Teil 1: Grundlagen und Materialeigenschaften*. Springer-Verlag, Berlin (1988)
- [Sullivan 2000] D. M. SULLIVAN: *Electromagnetic Simulation using the FDTD Method*. IEEE Press, New York (2000)
- [Taflove 2000] A. TAFLOVE und S. C. HAGNESS: *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*. 2nd Edition, Artech House, Boston (2000)
- [Tietze 1993] U. TIETZE und C. SCHENK: *Halbleiter-Schaltungstechnik*. 9. Auflage, Springer, Berlin (1993)
- [Tin 2004] H. N. TIN: *Transparent Heat Mirror for Solar and Heat Gain and Methods of Making*. Patentanmeldung, US 2004/0036993 A1 (2004)
- [Ulbricht 1900] R. ULBRICHT: *Die Bestimmung der mittleren räumlichen Lichtintensität durch nur eine Messung*. Elektrotechnische Zeitschrift (29), pp. 595-597 (1900)
- [Unsöld 1999] A. UNSÖLD und B. BASCHEK: *Der neue Kosmos*. 6. Auflage, Springer, Berlin (1999)
- [Vincent 1978] P. VINCENT: *Finite-Difference Method for Dielectric and Conducting Crossed Gratings*. Optics Communications **26**(3), pp. 293-296 (1978)
- [WBGU 2003] WISSENSCHAFTLICHER BEIRAT DER BUNDESREGIERUNG GLOBALE UMWELTVERÄNDERUNGEN (Hrsg.): *Über Kyoto hinaus denken - Klimaschutzstrategien für das 21. Jahrhundert*. Berlin (2003)
- [Yee 1966] K. S. YEE: *Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwells Equations in Isotropic Media*. IEEE Transactions on Antennas and Propagation **14**(3), pp. 302-307 (1966)

Symbole und Abkürzungen

Indizes

D	Deckschicht
enc	eingeschlossen
gh	gerichtet-hemisphärisch
H	Haftschicht
low-e	mit Low-e-Beschichtung
sol	solar
source	Quelle
strukt	strukturiert
vis	sichtbar
x,y,z	Raumrichtungen

Abkürzungen

AM	Air Mass
EPS	Extrudiertes Polystyrol
FDTD	Finite Difference in the Time Domain
IR	Infrarot
PML	Perfectly Matched Layer
PS	Polystyrol
PVC	Polyvinylchlorid
TE _z	transversal elektrische Mode mit Bezug auf die z-Achse
TF/SF	Total Field/Scattered Field
TM _z	transversal magnetische Mode mit Bezug auf die z-Achse
TWD	transparente Wärmedämmung

Griechische Symbole

α	Absorptionsgrad, Absorptionskonstante
ε	Emissionsgrad, elektrische Permittivität
ε_0	elektrische Permittivität des Vakuums
ζ	Höhenwinkel
ϑ	Messwinkel zum Metallgitter
λ	Wellenlänge
λ_0	Fitparameter für die Wellenlänge des Knicks
μ	magnetische Permeabilität
μ_0	magnetische Permeabilität des Vakuums
ρ	Reflexionsgrad, elektrische Ladungsdichte
σ	elektrische Leitfähigkeit
τ	Transmissionsgrad
τ_0	Fitparameter für Transmission im Plateaubereich
ϕ	Azimutwinkel
ψ	skalare Funktion
ω	Kreisfrequenz

Lateinische Symbole

a	Fitparameter für exponentiellen Abfall, Größe der streuenden Struktur (Radius oder halbe Breite)	k	Imaginärteil des Brechungsindex, Boltzmann-Konstante
a_n	Entwicklungskoeffizienten	\mathbf{k}	Wellenvektor
\mathbf{B}	magnetische Flussdichte	\mathbf{M}	Vektorfunktion
b_n	Entwicklungskoeffizienten	m	Brechungsindex des Zylinders relativ zum umgebenden Medium
\mathbf{c}	konstanter Vektor	M_e	spezifische Ausstrahlung
c	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum	\tilde{n}	komplexer Brechungsindex
d	Schichtdicke, Messabstand	n	Realteil des Brechungsindex
\mathbf{D}	elektrische Flussdichte	\mathbf{n}	Normalenvektor
D_{65}	Normlichtspektrum	\mathbf{N}	Vektorfunktion
$\hat{\mathbf{e}}$	Einheitsvektor	q_i	sekundärer Wärmeabgabegrad
\mathbf{E}	elektrische Feldstärke	\mathbf{r}	Radialvektor
E	Bestrahlungsstärke	S	Gewichtungsspektrum
f	beliebige Funktion	t	Zeit
f_n	Entwicklungskoeffizienten	T	Temperatur
g	solarer Gesamtenergiedurchlassgrad	U	Wärmedurchgangskoeffizient Spannung
g_n	Entwicklungskoeffizienten	\mathbf{x}	Ortsvektor
\mathbf{H}	magnetische Feldstärke	Y_n	Besselfunktion zweiter Art vom Grad n
h	Plancksches Wirkungsquantum		
$H_n^{(1)}$	Hankelfunktion erster Art vom Grad n		
I	Intensität, Stromstärke		
\mathbf{J}	Verschiebungsstromdichte		
J_n	Besselfunktion erster Art vom Grad n		

Danksagung

Ohne Hilfe von verschiedenen Seiten wäre die Durchführung dieser Arbeit in der vorliegenden Form kaum möglich gewesen. Vielen Dank also an alle, die mich in den letzten Jahren auf irgendeine Art und Weise unterstützt haben. Mein ganz besonderer Dank gilt:

- Prof. Dr. Jochen Fricke für die Möglichkeit, die vorliegende Arbeit am ZAE Bayern in Würzburg anzufertigen, den notwendigen wissenschaftlichen Freiraum und das in mich gesetzte Vertrauen. Ohne sein langjähriges Engagement für die Energieforschung wäre auf diesem Gebiet sicher vieles anders.
- Prof. Dr. Andreas Beck für die Idee zu dieser Arbeit und die vielen motivierenden Gespräche. Super!
- Dr. Werner Körner fürs Mitdenken, viele gute Ideen, Hilfestellungen bei Computersimulationen, Messtechnik und Anderem. Hoffentlich wissen alle hier am ZAE, was wir an dir haben.
- Matthias Geisler für viel Engagement, Geduld und die nötige Kreativität bei der Durchführung der Mikrowellenmessungen.
- Dr. Martin Kamp vom Mikrostrukturlabor der Universität Würzburg für die Herstellung der – für ihre Verhältnisse – riesigen mikrostrukturierten Proben. Vielen Dank für die entspannte Zusammenarbeit, frei von jeglicher Hektik.
- Dr. Modest Graf von Korff und Dr. Thomas Wriedt für die entscheidenden Tipps zu den Computersimulationen.
- meinen Bürokollegen Dr. Martin Hauck, Detlev Kranl, Dr. René Neusinger und Stephan Vidi für das ausgezeichnete Büroklima, viele nette Gespräche und die immer gut gefüllte Schublade.
- meinen Korrekturlesern für die kritische Durchsicht und die Beseitigung des einen oder anderen Dreckfuhlers.
- und natürlich allen weiteren Mitarbeitern der Abteilung 2 des ZAE Bayern für die schöne Zeit: die gute Zusammenarbeit, das phantastische Arbeitsklima, Arbeitsgruppenfrühstücke, Mobbing-Bildchen, Kuchen und Eis, Sommerfeste, Weihnachtsfeiern, die Elevator Kings, ...

Handwritten signature in cursive script.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name	Martin Sebastian Meier
Geburtsdatum	14. Oktober 1975
Geburtsort	Würzburg
Familienstand	verheiratet

Schulbildung

Sep 1981 – Jul 1985	Seinsheimschule Rottendorf
Sep 1985 – Jul 1994	Friedrich-Koenig-Gymnasium Würzburg
Jul 1994	Allgemeine Hochschulreife

Studium

Nov 1994 – Sep 2000	Studium der Physik an der Bayerischen Julius-Maximilians-Universität Würzburg
	Diplomarbeit zum Thema „Tageslichtnutzung mit Hohllichtleitern“
Sep 2000	Physik-Diplom

Berufliche Tätigkeit

seit Nov 2000	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Bayerischen Zentrum für angewandte Energieforschung (ZAE Bayern) in Würzburg
	Optische Simulation von Tageslichtelementen und Beleuchtungssystemen
Jan 2002 - Dez 2003	Projektleitung des Vorhabens „Transparenter Sonnenschutz auf Basis prismatisch strukturierter Verbundelemente“