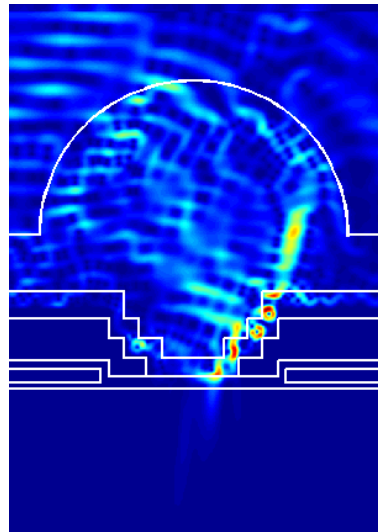

Die Finite-Differenzen-Methode zur Lösung Floquet-transformierter Maxwellgleichungen im Zeitbereich mit Anwendung in der Simulation periodischer optoelektronischer Bauelemente

Diplomarbeit
vorgelegt von
MICHAEL PFEIFFER



Universität Konstanz — Fakultät für Physik
Lehrstuhl Prof. Dr. E. Bucher

25. Mai 1999

Inhaltsverzeichnis

Einführung	1
1 Grundlagen	3
1.1 Maxwellgleichungen und Yee-Algorithmus	3
1.1.1 Maxwellgleichungen	3
1.1.2 Finite-Differenzen-Schema nach Yee	5
1.2 Signaleinkopplung	8
1.2.1 Gesamtfeld-/Streifeld-Formulierung	9
1.2.2 Streifeld-Formulierung	13
1.3 Periodische Randbedingungen	14
1.4 Absorbierende Randbedingungen	15
1.4.1 Enquist-Majda Einweg-Wellengleichung	15
1.4.2 Liao-Extrapolation	19
1.4.3 Impedanzangepaßte Medien	22
2 Schräger Lichteinfall auf periodische Geometrien	29
2.1 Modifizierter Yee-Algorithmus	29
2.1.1 Floquet-Transformation	29
2.1.2 Implementierung für nicht- und schwachleitende Mate- rialien	34
2.1.3 Implementierung für leitfähige Materialien	36
2.2 Modifizierte Gesamtfeld-/Streifeld-Formulierung	38
2.3 Modifizierte Absorbierende Randbedingungen	40

3 Anwendung auf optoelektronische Bauelemente	43
3.1 Metall-Halbleiter-Metal(MSM)-Photodetektor	43
3.2 Charge-Coupled-Device(CCD)-Zelle	49
3.2.1 Optische Simulation	52
3.2.2 Elektronische Simulationen	57
Zusammenfassung und Ausblick	69
A Finite Differenzen	71
B Impedanzanpassung	73
C Steife Differentialgleichungen	75
Literaturverzeichnis	79
Danksagung	81

Einführung

In der Halbleiterindustrie herrscht seit geraumer Zeit ein scharfer Konkurrenzkampf zwischen den verschiedenen Herstellern von Halbleiterbauelementen. Kosten- und Zeitdruck für die Markteinführung neuer Produkte wachsen ständig, während gleichzeitig die Miniaturisierung der Halbleiterbauelemente weiter fortschreitet und eine immer bessere Optimierung des Designs notwendig macht. Um diesen Anforderungen nachkommen zu können und innerhalb kurzer Zeit hochoptimierte Produkte zu entwickeln, ist es unumgänglich, in immer stärkerem Maße Computer einzusetzen. Es geht hierbei nicht nur um klassische CAD-Anwendung, sondern viel mehr auch darum, mit Computerhilfe neue Produkte zu entwerfen und ihre Funktion und den Herstellungsprozeß vollständig zu simulieren, noch bevor ein erster Prototyp gebaut wird. Durch die rasanten Fortschritte in der Computertechnik ist es hierbei möglich, in Bereiche vorzustoßen, die noch vor wenigen Jahren völlig unerreichbar schienen. Hierzu wird aber leistungsfähige Software zur Simulation physikalischer und technologischer Vorgänge benötigt.

In diesen Zusammenhang ordnet sich auch die vorliegende Diplomarbeit ein. Sie befaßt sich, ausgehend von der Maxwell-Theorie der elektromagnetischen Strahlung, mit der Entwicklung und softwaretechnischen Implementierung von numerischen Algorithmen, die zur Simulation physikalischer Vorgänge im Bereich der Elektromagnetik dienen. Ziel der Diplomarbeit war es, ein Programmmodul zu entwickeln, welches die Simulation des Durchgangs elektromagnetischer Strahlung durch Materie erlaubt im Fall schräg einfallender Strahlung und periodischer Geometrien. Ein besonderes Augenmerk wurde hierbei auf periodische optoelektronische Bauelemente gelegt. Erarbeitet wurde die Diplomarbeit an der Eidgenössisch Technischen Hochschule Zürich (ETHZ) in der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Wolfgang Fichtner am Institut für Integrierte Systeme (IIS). Sie steht im Rahmen der Entwicklung von Simulations-Software, die in der Halbleiterindustrie zum Einsatz kommt. Diese Software umfaßt neben der Elektromagnetik-Simulation auch die Simulation verschiedener Aspekte der Herstellung (Prozeß-Simulation) und Funktion (Device-Simulation) von Halbleiterbauelementen. Hierzu gehören die Simulation von Aufwachs-, Dotierungs-, Belichtungs-, Ätzprozessen etc. und die Simula-

tion thermischer, mechanischer und elektronischer Vorgänge beim Betrieb der Bauelemente.

Die Entwicklung wird durchgeführt mit verschiedenen Partnern aus der Industrie, Software- wie auch Halbleiterherstellern.

Im folgenden werden in Abschnitt 1 die Grundlagen eines Finite-Differenzen-Verfahrens zur Berechnung von Lösungen der Maxwellgleichungen vorgestellt. Diese sind Ausgangspunkt für die Elektromagnetik-Simulationen.

In Abschnitt 2 werden zuerst die Änderungen beschrieben, die nötig sind, um das Verfahren für periodische Geometrien und schrägen Lichteinfall verwenden zu können. Der entsprechende Algorithmus, der in der Literatur für nichtleitende Materialien zu finden ist, wurde im Rahmen dieser Diplomarbeit zuerst als solcher implementiert und anschließend modifiziert, um die Simulation leitfähiger Materialien zu ermöglichen. Diese Modifikationen werden ebenfalls in Abschnitt 2 beschrieben.

In Abschnitt 3 werden dann zwei Beispiele für die Anwendung des davor beschriebenen Verfahrens gezeigt, ein Metall-Halbleiter-Metall-Photodetektor (kurz MSM von englisch **M**etal-**S**emiconductor-**M**etal-**P**hotodetector) sowie eine **C**harge-**C**oupled-**D**evice(CCD)-Zelle. Im letztgenannten Beispiel wurden die optischen Simulationen mit elektronischen Simulationen kombiniert, wofür ebenfalls am IIS entwickelte Software benutzt wurde.

1 Grundlagen

1.1 Maxwellgleichungen und Yee-Algorithmus

1.1.1 Maxwellgleichungen

Ausgangspunkt aller folgenden Betrachtungen sind die Maxwellgleichungen in ihrer differentiellen Form. Betrachtet werde ein Raumgebiet, das verschiedene Materialien und keine Quellen elektrischer oder magnetischer Felder enthält. Die Maxwellgleichungen lauten dann im Fall linearer, isotroper, nichtdispersiver Materialien

$$\mu(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial t} \vec{H}(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (1.1)$$

$$\varepsilon(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial t} \vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}, t) - \sigma(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (1.2)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D}(\vec{r}, t) = 0 \quad (1.3)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0 \quad (1.4)$$

\vec{E} bezeichnet die elektrische Feldstärke, \vec{H} die Magnetfeldstärke, \vec{D} die dielektrische Verschiebung, \vec{B} die magnetische Induktion, ε die Dielektrizitätszahl, μ die Permeabilitätszahl und σ die elektrische Leitfähigkeit. Es gelten die Beziehungen

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \mu \vec{H} = \mu_0 \mu_r(\vec{r}) \vec{H}(\vec{r}, t)$$

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \varepsilon \vec{E} = \varepsilon_0 \varepsilon_r(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r}, t)$$

Hierbei ist μ_0 die Induktionskonstante, μ_r die relative Permeabilität, ε_0 die Influenzkonstante und ε_r die relative Dielektrizitätszahl.

Um magnetische Verlustmechanismen, d.h. Umwandlung von Magnetfeldenergie in thermische Energie beschreiben zu können, führt man noch eine

künstliche Größe ein: die magnetische Leitfähigkeit $\bar{\sigma}$. Diese unphysikalische Größe wird einerseits für manche später vorgestellte Simulationsalgorithmen benötigt, etwa für artifizielle absorbierende Materialien (vgl. Berenger Perfectly Matched Layer, Abschnitt 1.4.3). Auch vom Standpunkt der Implementation aus betrachtet bringt es Vorteile, $\bar{\sigma}$ -Terme zuzulassen. Damit werden die Maxwellgleichungen symmetrisch (vgl. die Gleichungen (1.6a) und (1.7a)). Ist ein numerisches Verfahren für eine der Moden TM oder TE (siehe unten) implementiert, so ist ein Übergang zur anderen Mode im wesentlichen durch einfaches Vertauschen von Ableitungen möglich.

Gleichung (1.1) lautet in geänderter Form

$$\mu(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial t} H(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}, t) - \bar{\sigma}(\vec{r}) \vec{H}(\vec{r}, t) \quad (1.5)$$

Im folgenden soll angenommen werden, daß sowohl die Anregung des elektromagnetischen Feldes als auch die betrachtete Geometrie in einer Raumdimension konstant sind, d.h. alle partiellen Ableitungen nach der z-Richtung seien identisch Null und die betrachteten Geometrien seien in z-Richtung unendlich ausgedehnt. In diesem Fall reduzieren sich die Gleichungen (1.2) und (1.5) auf

$$\frac{\partial}{\partial t} H_x = \frac{1}{\mu} \left(-\frac{\partial E_z}{\partial y} - \bar{\sigma} H_x \right) \quad (1.6a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} H_y = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \bar{\sigma} H_y \right) \quad (1.6b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} H_z = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} - \bar{\sigma} H_z \right) \quad (1.6c)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} E_x = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \sigma E_x \right) \quad (1.7a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} E_y = \frac{1}{\varepsilon} \left(-\frac{\partial H_z}{\partial x} - \sigma E_y \right) \quad (1.7b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} E_z = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - \sigma E_z \right) \quad (1.7c)$$

Sortiert man diese Gleichungen entsprechend der enthaltenen Feldkomponenten um, so erhält man zwei ungekoppelte Moden des elektromagnetischen Feldes in zwei Dimensionen: die **Transversal Magnetische (TM) Mode**

$$\frac{\partial}{\partial t} H_x = \frac{1}{\mu} \left(-\frac{\partial E_z}{\partial y} - \bar{\sigma} H_x \right) \quad (1.8a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} H_y = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \bar{\sigma} H_y \right) \quad (1.8b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} E_z = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - \sigma E_z \right) \quad (1.8c)$$

und die Transversal Elektrische (TE) Mode

$$\frac{\partial}{\partial t} E_x = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \sigma E_x \right) \quad (1.9a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} E_y = \frac{1}{\varepsilon} \left(-\frac{\partial H_z}{\partial x} - \sigma E_y \right) \quad (1.9b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} H_z = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} - \bar{\sigma} H_z \right) \quad (1.9c)$$

Diese beiden Moden sind für isotrope Materialien oder anisotrope Materialien, deren Dielektrizitäts- und Permeabilitätstensoren keine Neben-Diagonal-Elemente enthalten, völlig unabhängig, d.h. sie können koexistieren, ohne miteinander zu wechselwirken.

1.1.2 Finite-Differenzen-Schema nach Yee

Zurückgehend auf einen Vorschlag von Yee aus dem Jahre 1966 [1] wird heute oft zur numerischen Lösung von (1.8) und (1.9) ein Finite-Differenzen-Schema auf gegeneinander verschobenen E - und H -Gittern verwendet: Wie in Abb. 1.1 zu sehen, liegen die Gitter für die E - und H -Komponenten um jeweils $\Delta x/2$ bzw. $\Delta y/2$ verschoben. Die Berechnung der E - und H -Feldgrößen erfolgt abwechselnd, d.h. für die TM-Mode werden zu den Zeitpunkten $t = (n + 1/2) \Delta t$, $N \in \mathbb{N}$ die Größen H_x und H_y berechnet, zu den Zeitpunkten n wird E_z berechnet. Entsprechend kann die TE-Mode berechnet werden. Dieses Vorgehen wird in der Literatur als *leapfrog*-Verfahren bezeichnet. Sowohl die räumlichen wie auch die zeitlichen Ableitungen werden durch Zentral-Differenzen-Terme mit einer Genauigkeit zweiter Ordnung angenähert. Diese Methode wird als Finite-Differenzen-Methode im Zeitbereich bezeichnet, auf englisch: *Finite-Difference Time-Domain Method* (FD-TD). Sie steht im Gegensatz zu Methoden, die Lösungen der Maxwellgleichungen im Frequenzbereich suchen und hat verschiedene Vorteile. So können mit FD-TD-Verfahren besonders einfach transiente Vorgänge beschrieben werden, aber auch zeitharmonische Vorgänge.

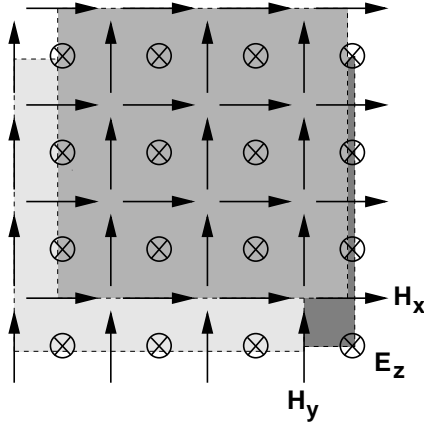


Abbildung 1.1: Um jeweils $\frac{\Delta x}{2}$ bzw. $\frac{\Delta y}{2}$ verschobene Gitter für E_z, H_x und H_y

Desweiteren treten bei Frequenzbereichsverfahren üblicherweise bei n zurechnenden Variablen ($n \times n$)-Matrizen auf, die invertiert werden müssen. Diese Invertierung bedeutet einen überaus großen Speicheraufwand. Für große Probleme mit mehr als etwa 150000 Variablen ist dies nicht mehr ausführbar. Für Probleme wie die in Abschnitt 3.2 beschriebene CCD-Zelle (ca. 10^6 Variablen) sind Frequenzbereichsverfahren somit nicht anwendbar.

Seien die Gitterabstände der einzelnen Gitter in x- und y-Richtung durch Δx und Δy gegeben, sowie die zeitliche Schrittweite der einzelnen Simulationsschritte durch Δt . Eine Feldgröße

$$u(x, y, t) = u(i \cdot \Delta x, j \cdot \Delta y, n \cdot \Delta t), \quad i, j, n \in \mathbb{N} \quad (1.10)$$

werde mit

$$u|_{i,j}^n \quad (1.11)$$

bezeichnet. Dann lautet die erste partielle Ableitung von u nach x (siehe Anhang A)

$$\frac{\partial}{\partial x} u|_{i,j}^n = \frac{u|_{i+1/2,j}^n - u|_{i-1/2,j}^n}{\Delta x} + O(\Delta x^3) \quad (1.12)$$

bzw. die erste partielle Zeitableitung

$$\frac{\partial}{\partial t} u|_{i,j}^n = \frac{u|_{i,j}^{n+1/2} - u|_{i,j}^{n-1/2}}{\Delta t} + O(\Delta t^3) \quad (1.13)$$

Setzt man diese Formulierung ein in die Gleichungen (1.8) und (1.9), so erhält man nach Streichung der Fehlerterme der Ordnung 3 und Umordnung folgende Differenzen-Näherungen zweiter Ordnung für die zu berechnenden Feldgrößen auf einem kubischen Gitter ($\Delta x = \Delta y = \Delta_{xy}$):

$$H_x|_{i,j}^{n+1/2} = D_a|_{i,j} H_x|_{i,j}^{n-1/2} + D_b|_{i,j} (E_z|_{i,j-1/2}^n - E_z|_{i,j+1/2}^n) \quad (1.14a)$$

$$H_y|_{i,j}^{n+1/2} = D_a|_{i,j} H_y|_{i,j}^{n-1/2} + D_b|_{i,j} (E_z|_{i+1/2,j}^n - E_z|_{i-1/2,j}^n) \quad (1.14b)$$

$$E_z|_{i,j}^{n+1} = C_a|_{i,j} E_z|_{i,j}^n + C_b|_{i,j} \left(H_y|_{i+1/2,j}^{n+1/2} - H_y|_{i-1/2,j}^{n+1/2} + H_x|_{i,j-1/2}^{n+1/2} - H_x|_{i,j+1/2}^{n+1/2} \right) \quad (1.14c)$$

$$E_x|_{i,j}^{n+1} = C_a|_{i,j} E_x|_{i,j}^n + C_b|_{i,j} \left(H_z|_{i,j+1/2}^{n+1/2} - H_z|_{i,j-1/2}^{n+1/2} \right) \quad (1.15a)$$

$$E_y|_{i,j}^{n+1} = C_a|_{i,j} E_y|_{i,j}^n + C_b|_{i,j} \left(H_z|_{i-1/2,j}^{n+1/2} - H_z|_{i+1/2,j}^{n+1/2} \right) \quad (1.15b)$$

$$H_z|_{i,j}^{n+1/2} = D_a|_{i,j} H_z|_{i,j}^{n-1/2} + D_b|_{i,j} \left(E_y|_{i-1/2,j}^n - E_y|_{i+1/2,j}^n + E_x|_{i,j+1/2}^n - H_y|_{i,j-1/2}^n \right) \quad (1.15c)$$

Hierbei beschreiben die Gleichungen (1.14) wieder die TM- und (1.15) die TE-Mode. Die Koeffizienten D_a , D_b , C_a und C_b sind gegeben durch

$$C_a|_{i,j} = \frac{\left(1 - \frac{\sigma|_{i,j}\Delta t}{2\varepsilon|_{i,j}}\right)}{\left(1 + \frac{\sigma|_{i,j}\Delta t}{2\varepsilon|_{i,j}}\right)} \quad C_b|_{i,j} = \frac{\left(\frac{\Delta t}{\varepsilon|_{i,j}\Delta_{xy}}\right)}{\left(1 + \frac{\sigma|_{i,j}\Delta t}{2\varepsilon|_{i,j}}\right)}$$

$$D_a|_{i,j} = \frac{\left(1 - \frac{\bar{\sigma}|_{i,j}\Delta t}{2\mu|_{i,j}}\right)}{\left(1 + \frac{\bar{\sigma}|_{i,j}\Delta t}{2\mu|_{i,j}}\right)} \quad D_b|_{i,j} = \frac{\left(\frac{\Delta t}{\mu|_{i,j}\Delta_{xy}}\right)}{\left(1 + \frac{\bar{\sigma}|_{i,j}\Delta t}{2\mu|_{i,j}}\right)}$$

Eine Verallgemeinerung dieses Schemas auf drei Dimensionen ist ohne Probleme möglich [2]. Der Inhalt dieser Diplomarbeit befaßt sich jedoch nur mit dem zweidimensionalen Fall, weshalb hier darauf verzichtet werden soll. Desweiteren wird im folgenden nur die TM-Mode betrachtet, alle Aussagen gelten natürlich in entsprechender Form für die TE-Mode.

Es stellt sich natürlich an dieser Stelle die Frage nach der Stabilität des in (1.14) und (1.15) beschriebene explizite Zeitschrittschemas. Eine Analyse wie

etwa in [10] durchgeführt, zeigt, daß es eine obere Grenze für die Zeitschrittweite bei der iterativen Berechnung der Feldgrößen gibt, oberhalb dessen das Verfahren instabil wird. Zur Bestimmung dieses Zeitschrittes werden die Zeitschrittgleichungen umgeschrieben in ein Matrix-Vektor-Produkt:

$$\begin{pmatrix} \vec{E}^{n+1} \\ \vec{H}^{n+1/2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_1 \cdot \vec{E}^n & + \mathbf{M}_2 \cdot \vec{H}^{n-1/2} \\ \mathbf{M}_3 \cdot \vec{H}^{n-1/2} & + \mathbf{M}_4 \cdot \vec{E}^n \end{pmatrix} := \mathbf{M} \cdot \begin{pmatrix} \vec{E}^n \\ \vec{H}^{n-1/2} \end{pmatrix} \quad (1.16)$$

wobei

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2\mathbf{M}_4 & \mathbf{M}_2\mathbf{M}_3 \\ \mathbf{M}_4 & \mathbf{M}_2 \end{pmatrix}$$

und die Matrizen $\mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2, \mathbf{M}_3$ und \mathbf{M}_4 die Koeffizienten C_a, C_b, D_a und D_b aus (1.14) und (1.15) enthalten. Stabilität des Verfahrens heißt nun, daß die Feldwerte für alle Zeitschritte endlich bleiben müssen. Nach Gleichung (1.16) bedeutet dies aber

$$\|\mathbf{M}\| \leq 1 \quad (1.17)$$

mit einer geeigneten Matrixnorm $\|*\|$, etwa

$$\|\mathbf{M}\| = \sqrt{\sigma(\mathbf{M}^*\mathbf{M})}$$

wie in [10] gewählt. Hierbei ist $\sigma(\mathbf{X}) = \max\{|\lambda| : \lambda \text{ ist Eigenwert von } \mathbf{X}\}$ und \mathbf{M}^* die Transponierte von \mathbf{M} . Eine entsprechende Analyse ergibt eine Bedingung an den Zeitschritt, hier angegeben für ein quadratisches Gitter:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta_{xy} \min_p \{n_p\}}{c_0 \sqrt{2}} \quad (1.18)$$

wobei n_p den Brechungsindex in der Gitterzelle p bezeichnet.

1.2 Signaleinkopplung

Die im letzten Abschnitt aufgeführten Differenzgleichungen beschreiben die Ausbreitung einer elektromagnetischen Störung im betrachteten Simulationsbereich. Sie beschreiben nicht, wie solch eine Störung in den Simulationsbereich eingekoppelt wird, d.h. wie vorgegeben werden kann, wie die einfallenden elektromagnetischen Felder aussehen. Im folgenden sollen verschiedene Formulierungen zur Realisierung von Feldquellen beschrieben werden.

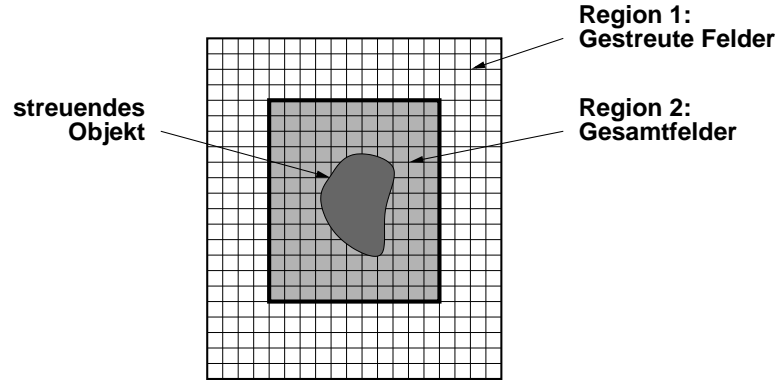


Abbildung 1.2: Gesamtfeld-/Streuungsaufteilung des FD-TD-Gitters. In Region 1 werden nur die gestreuten Felder propagiert, in Region 2 die Gesamtfelder, die eine Superposition von einfallenden und gestreuten Feldern sind. Schwarz eingezeichnet ist die Grenze zwischen den beiden Bereichen.

1.2.1 Gesamtfeld-/Streuungsaufteilung

Eine mögliche Methode, elektromagnetische Felder, deren Raum- und Zeitabhängigkeit bekannt sind, in eine FD-TD-Simulation einzukoppeln, ist die in der Literatur als Gesamtfeld-/Streuungsaufteilung bezeichnete Methode (englisch: Total Field/Scattered Field Formulation). Hierbei wird die Linearität der Maxwellgleichungen ausgenutzt und die Gesamtfelder \vec{E} und \vec{H} werden in jeweils zwei Komponenten zerlegt:

$$\vec{E}_{tot} = \vec{E}_{inc} + \vec{E}_{scat} \quad (1.19)$$

$$\vec{H}_{tot} = \vec{H}_{inc} + \vec{H}_{scat} \quad (1.20)$$

Der Index *inc* bezeichnet die vorgegebenen einfallenden Felder, d.h. das einfallende Signal. Mit *scat* werden die gestreuten Felder bezeichnet, während E_{tot} und H_{tot} die Linearkombinationen aus einfallenden und gestreuten Feldern sind. Wegen der Linearität der Maxwellgleichungen, müssen neben E_{tot} und H_{tot} auch die einzelnen Komponenten E_{inc} und H_{inc} bzw. E_{scat} und H_{scat} für sich alleine die Gleichungen (1.8) erfüllen.

Die Idee der Gesamtfeld-/Streuungsaufteilung besteht nun darin, den Simulationsbereich in zwei Zonen aufzuteilen: eine Total Field-Zone, in der die Gesamtfelder (E_{tot}, H_{tot}) berechnet werden und eine Streufeld-Zone, in der nur die gestreuten Felder (E_{scat}, H_{scat}) propagiert werden. An der Grenze zwischen diesen beiden Zonen geht die vorgegebene Anregung (E_{inc}, H_{inc}) ein.

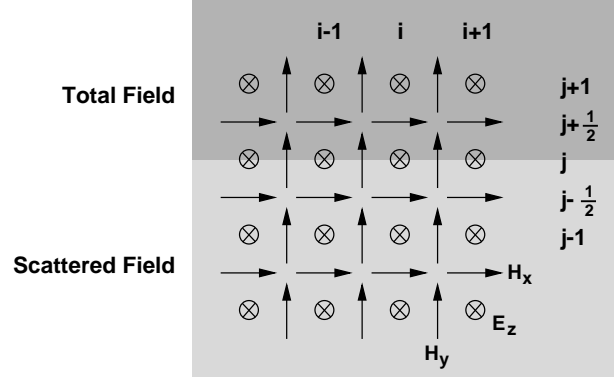


Abbildung 1.3: Gesamtfeld-/Streuungsfeld-Zonengrenze

Korrektur der Zeitschrittgleichungen

Man betrachte beispielsweise die obere Zonengrenze in Abb. 1.2. Unter der Annahme, daß die Grenze zwischen Gesamtfeld- und Scattered Field-Zone genau auf einer Linie des E_z -Gitters verlaufe, ergibt sich Bild 1.3. Für die $E_z|_{i,j}^{n+1}$ -Komponente auf der Grenzfläche, die zur Total Field-Zone gehört, lautet die Zeitschrittgleichung im Schritt $n+1$ entsprechend Gleichung (1.14c):

$$E_{z,tot}|_{i,j}^{n+1} = C_a|_{i,j} E_{z,tot}|_{i,j}^n + C_b|_{i,j} \left(H_{y,tot}|_{i+1/2,j}^{n+1/2} - H_{y,tot}|_{i-1/2,j}^{n+1/2} + H_{x,tot}|_{i,j-1/2}^{n+1/2} - H_{x,tot}|_{i,j+1/2}^{n+1/2} \right) \quad (1.21)$$

Damit die Gleichung (1.21) in sich konsistent ist, dürfen nur Gesamtfeld-Größen vorkommen. Allerdings liegt für $H_{x,tot}|_{i,j+1/2}^{n+1/2}$ aus dem Rechenschritt $n+1/2$ lediglich die Streufeld-Größe $H_{x,scat}|_{i,j+1/2}^{n+1/2}$ vor. Außerdem ist aber auch die Größe $H_{x,inc}|_{i,j+1/2}^{n+1/2}$ bekannt, die als Anregung vorgegeben wird. Damit läßt sich Gleichung (1.21) mit

$$H_{x,tot}|_{i,j+1/2}^{n+1/2} = H_{x,inc}|_{i,j+1/2}^{n+1/2} + H_{x,scat}|_{i,j+1/2}^{n+1/2} \quad (1.22)$$

umschreiben zu

$$E_{z,tot}|_{i,j}^{n+1} = C_a|_{i,j} E_{z,tot}|_{i,j}^n + C_b|_{i,j} \left(H_{y,tot}|_{i+1/2,j}^{n+1/2} - H_{y,tot}|_{i-1/2,j}^{n+1/2} + H_{x,tot}|_{i,j-1/2}^{n+1/2} - H_{x,scat}|_{i,j+1/2}^{n+1/2} \right) - C_b|_{i,j} H_{x,inc}|_{i,j+1/2}^{n+1/2} \quad (1.23)$$

Oder anders formuliert

$$E_{z,tot}|_{i,j}^{n+1} = \{E_z|_{i,j}^{n+1}\}_{(1.14c)} - C_b|_{i,j} H_{x,inc}|_{i,j+1/2}^{n+1/2} \quad (1.24)$$

Diese Schreibweise entspricht auch dem tatsächlichen Vorgehen bei der Feldberechnung im Schritt $n+1$: Zuerst werden alle E_z -Feldwerte gemäß Gleichung (1.14c) berechnet, anschließend werden die Feldgrößen auf der oberen Gesamtfeld-/Streifelfeld-Grenze in einem zusätzlichen Rechenschritt korrigiert gemäß Gleichung (1.24).

Wie in der obigen Abbildung ersichtlich ist, liegen auch H_y -Komponenten auf der Zonengrenze, allerdings wird bei der Berechnung der H_y -Komponente nur auf nebenliegende E_z -Feldwerte zugegriffen, die ebenfalls auf der Grenze liegen. Damit sind die Zeitschrittgleichungen konsistent ohne Korrektur. Anders allerdings für die H_x -Gitterknoten, die gerade einen halben Gitterabstand oberhalb der Zonengrenze und damit in der Streufeld-Zone liegen. Zu ihrer Berechnung werden ober- und unterhalb liegende E_z -Feldwerte benötigt, von denen die unteren in der Gesamtfeld-Zone liegen. Aus diesem Grund muß auch Zeitschrittgleichung (1.14a) korrigiert werden. Entsprechende Überlegungen gelten für alle anderen Zonengrenzen. Letztendlich erhält man einen Satz korrigierter Zeitschrittgleichungen für alle Seiten:

Obere Grenze:

$$E_{z,tot}|_{i,j}^{n+1} = \{E_z|_{i,j}^{n+1}\}_{(1.14c)} - C_b|_{i,j} H_{x,inc}|_{i,j+1/2}^{n+1/2} \quad (1.25a)$$

$$H_{x,scat}|_{i,j+1/2}^{n+1/2} = \{H_x|_{i,j+1/2}^{n+1/2}\}_{(1.14a)} - D|_{i,j+1/2} E_{z,inc}|_{i,j}^n \quad (1.25b)$$

Linke Grenze:

$$E_{z,tot}|_{i,j}^{n+1} = \{E_z|_{i,j}^{n+1}\}_{(1.14c)} - C_b|_{i,j} H_{y,inc}|_{i-1/2,j}^{n+1/2} \quad (1.26a)$$

$$H_{y,scat}|_{i-1/2,j}^{n+1/2} = \{H_y|_{i-1/2,j}^{n+1/2}\}_{(1.14b)} - D|_{i-1/2,j} E_{z,inc}|_{i,j}^n \quad (1.26b)$$

Rechte Grenze:

$$E_{z,tot}|_{i,j}^{n+1} = \{E_z|_{i,j}^{n+1}\}_{(1.14c)} + C_b|_{i,j} H_{y,inc}|_{i+1/2,j}^{n+1/2} \quad (1.27a)$$

$$H_{y,scat}|_{i+1/2,j}^{n+1/2} = \{H_y|_{i+1/2,j}^{n+1/2}\}_{(1.14b)} + D|_{i+1/2,j} E_{z,inc}|_{i,j}^n \quad (1.27b)$$

Untere Grenze:

$$E_{z,tot}|_{i,j}^{n+1} = \{E_z|_{i,j}^{n+1}\}_{(1.14c)} + C_b|_{i,j} H_{y,inc}|_{i,j-1/2}^{n+1/2} \quad (1.28a)$$

$$H_{y,scat}|_{i,j-1/2}^{n+1/2} = \{H_y|_{i,j-1/2}^{n+1/2}\}_{(1.14b)} + D|_{i,j-1/2} E_{z,inc}|_{i,j}^n \quad (1.28b)$$

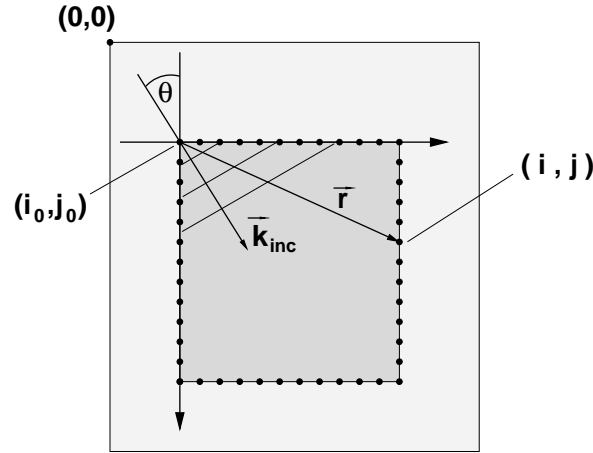


Abbildung 1.4: Ebene Welle mit Wellenvektor \vec{k}_{inc} innerhalb der Gesamtfeld-Zone

Dieses Schema kann auch problemlos auf drei Dimensionen verallgemeinert werden [2].

Berechnung der Anregung

Die Anregungsfelder $E_{z,inc}, H_{x,inc}$ und $H_{y,inc}$ in den einzelnen Punkten der Zonengrenze erhält man aus geometrischen Überlegungen. In Abb.1.4 ist eine ebene Welle mit Wellenvektor \vec{k}_{inc} gezeigt, die unter einem Winkel θ in die Gesamtfeld-Zone einfallen soll. Im Punkt (i_0, j_0) auf der Zonengrenzen ist die Anregung gegeben als

$$E_{z,inc}|_{i_0, j_0}^n = E_{z,0} \sin(-\omega n \Delta_t) \quad (1.29)$$

In einem anderen Punkt (i, j) der Zonengrenze hat die Welle, die sich mit der Phasengeschwindigkeit c bewegt, entsprechend ihrer Laufstrecke eine anderer Phase. Als Feldanregung erhält man

$$E_{z,inc}|_{i, j}^n = E_{z,0} \sin(k_x (i - i_0) \Delta_x + k_y (j - j_0) \Delta_y - \omega n \Delta_t) \quad (1.30)$$

Die Wellenzahlen k_x und k_y ergeben sich aus dem Einfallswinkel

$$k_x = k \cos\left(\frac{\pi}{2} - \theta\right)$$

$$k_y = k \sin\left(\frac{\pi}{2} - \theta\right)$$

wobei die Wellenzahl gegeben ist durch

$$k = \frac{\omega}{c}$$

Entsprechende Überlegungen gelten für die H -Komponenten.

1.2.2 Streufeld-Formulierung

Eine weitere Möglichkeit der Realisierung einer Quelle in einer FD-TD-Simulation ist eine Methode, die ebenfalls die Linearität der Maxwellgleichungen ausnutzt und die Felder in Gesamt- und Streufelder zerlegt. Auf dem FD-TD-Gitter propagiert werden allerdings nur die gestreuten Felder, nicht die Gesamtfelder.

Perfekte Leiter

Man betrachte z.B. ein elektrisch perfekt leitendes Objekt. Auf der Oberfläche des Leiters müssen das tangential elektrische Feld verschwinden. Das bedeutet aber für die Tangentialkomponenten des Streufeldes und des einfallenden Feldes

$$\vec{E}_{scat} \Big|_{tan} = -\vec{E}_{inc} \Big|_{tan} \quad (1.31)$$

Unter Verwendung dieser Bedingung wird auf der Oberfläche des Objekts eine gestreute Welle erzeugt. Die Zeitabhängigkeit der einfallenden Welle in jedem Raumpunkt ist hierbei analytisch bekannt, da angenommen wird, daß sie sich frei im Vakuum fortpflanzt, d.h. als ob das betrachtete Objekt nicht vorhanden wäre.

Nachteil dieser Methode ist allerdings, daß der Aufwand für die Berechnung der gestreuten Welle auf jedem Punkt der Oberfläche für komplexe Objekte einen erheblichen Rechenaufwand bedeuten kann.

Dielektrika

Die Streufeld-Methode kann auch auf Dielektrika angewandt werden. Ausgangspunkt sind hierbei zum einen die Maxwellgleichungen für die Gesamtfelder

$$\mu \frac{\partial}{\partial t} \vec{H}_{tot} = -\vec{\nabla} \times \vec{E}_{tot} - \vec{\sigma} \vec{H}_{tot} \quad (1.32a)$$

$$\varepsilon \frac{\partial}{\partial t} \vec{E}_{tot} = \vec{\nabla} \times \vec{H}_{tot} - \sigma \vec{E}_{tot} \quad (1.32b)$$

zum anderen die Maxwellgleichungen für die einfallenden Felder, die sich im Vakuum fortpflanzen

$$\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \vec{H}_{inc} = -\vec{\nabla} \times \vec{E}_{inc} \quad (1.33a)$$

$$\varepsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \vec{E}_{inc} = \vec{\nabla} \times \vec{H}_{inc} \quad (1.33b)$$

Subtrahiert man (1.33) von (1.32), so erhält man folgende Gleichungen

$$\mu \frac{\partial}{\partial t} \vec{H}_{scat} + \vec{\sigma} \vec{H}_{scat} = -\vec{\nabla} \times \vec{E}_{scat} - \underbrace{\vec{\sigma} \vec{H}_{inc} + (\mu - \mu_0) \frac{\partial}{\partial t} \vec{H}_{inc}} \quad (1.34a)$$

$$\varepsilon \frac{\partial}{\partial t} \vec{E}_{scat} + \sigma \vec{E}_{scat} = \vec{\nabla} \times \vec{H}_{scat} - \underbrace{\sigma \vec{E}_{inc} + (\varepsilon - \varepsilon_0) \frac{\partial}{\partial t} \vec{E}_{inc}} \quad (1.34b)$$

Die Gleichungen (1.34) sind Differentialgleichungen für die gestreuten Feldgrößen \vec{E}_{scat} und \vec{H}_{scat} . Die unterklammerten Terme auf der rechten Seite sind bekannte Funktionen von Ort und Zeit. Diese Gleichungen können nun nach der in Abschnitt 1.1.2 beschriebenen Methode diskretisiert werden und ein leapfrog-Zeitschrittverfahren kann durchgeführt werden. Ergebnis dieser Rechnungen sind die gestreuten Feldgrößen. Für Punkte, an denen die Gesamtfeldgrößen von Interesse sind, müssen in einem zusätzlichen Schritt noch die entsprechenden Werte berechnet werden.

1.3 Periodische Randbedingungen

Ein weiteres Problem neben der Signaleinkopplung bei einer FD-TD-Simulation ist der Abschluß des Simulationsbereiches, die Randbedingungen. Hierbei werden oft periodische Randbedingungen benötigt. D.h. der simulierte Bereich wird an seinen Seiten als unendlich weit periodisch fortgesetzt betrachtet. Diese Art von Randbedingungen stellen in der Praxis kein Problem dar, denn für Feld-Komponenten die seitlich von der zu berechnenden Feldgröße und außerhalb des Simulationsbereiches liegen, werden einfach bekannte Größen von der gegenüberliegenden Seite benutzt (siehe Abb. 1.5).

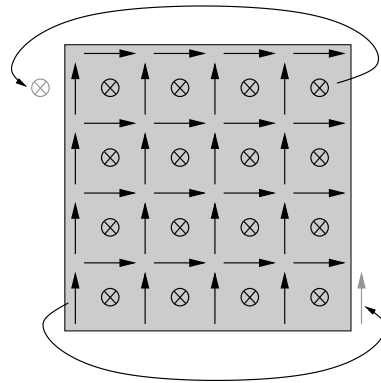


Abbildung 1.5: Periodische Randbedingungen: Ergänzung fehlender Feldwerte am Rand durch vorhandene Feldwerte vom gegenüberliegenden Rand.

1.4 Absorbierende Randbedingungen

Anders verhält es sich mit Rändern, an denen eine von innen auftreffende Welle den Simulationsbereich ungehindert verlassen können soll, als ob sie in den umgebenden (unendlich großen) leeren Raum weiterlaufen würde. Es dürfen idealerweise keine Reflexionen auftreten, da sie das Simulationsergebnis verfälschen würden. Hierzu müssen die Feldwerte in den begrenzenden Randpunkten entsprechend gesetzt werden. Randbedingungen, die dies erfüllen, werden als *Absorbierende Randbedingungen* bezeichnet. Es gibt verschiedene Ansätze, absorbierende Randbedingungen zu realisieren. Im folgenden werden drei davon beschrieben. Sie unterscheiden sich stark im Aufwand für die Implementierung und im Grad der (unerwünschten) Reflexion des auslaufenden Signals.

1.4.1 Enquist-Majda Einweg-Wellengleichung

Analytische Herleitung

Auf kartesischen FD-TD-Gittern häufig die Enquist-Majda Einweg-Wellengleichung [3] verwendet, die auf einer Faktorisierung der partiellen Differentialoperatoren der Wellengleichung beruht. Gegeben sei die skalare Wellengleichung in zwei Dimensionen für eine skalare Größe U bei einer Phasengeschwindigkeit c :

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = 0 \quad (1.35)$$

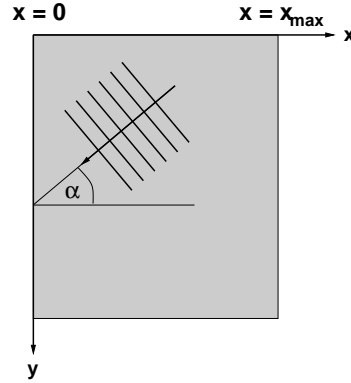


Abbildung 1.6: Eine ebene Welle läuft unter einem Winkel α auf den Rand des Simulationsbereiches zu.

Man kann an dieser Stelle den Differentialoperator L definieren:

$$L \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \equiv D_x^2 + D_y^2 - \frac{1}{c^2} D_t^2 \quad (1.36)$$

Es läßt sich zeigen [3], daß L faktorisiert werden kann und die Wellengleichung sich dann ergibt als

$$LU = L^+ L^- U = 0 \quad (1.37)$$

wobei für L^+ und L^- gilt

$$L^+ \equiv D_x + \frac{D_t}{c} \sqrt{1 - S^2} \quad (1.38a)$$

$$L^- \equiv D_x - \frac{D_t}{c} \sqrt{1 - S^2} \quad (1.38b)$$

$$\text{mit } S \equiv \frac{D_y}{(D_t/c)}$$

Die in (1.38) definierten Operatoren absorbieren *exakt* alle ebenen Wellen, die aus dem Inneren des Simulationsbereiches (s. Abb. 1.6) auf die Seiten $x = 0$ ($L^- U = 0$) bzw. $x = x_{max}$ ($L^+ U = 0$) unter beliebigen Winkeln α zulaufen [3]. Leider sind $L^{+/-}$ Pseudo-Differentialoperatoren, die in Raum und Zeit nichtlokal sind. D. h. um die Feldamplitude in einem Randpunkt für einen Zeitschritt zu berechnen, ist es notwendig, die Amplituden in allen Randpunkten zu allen vorherigen Zeitpunkten zu kennen [3]. Dies erschwert die direkte numerische Implementierung von Gleichung (1.38). Zur Umgehung

dieses Problems führt man formal eine Taylor-Entwicklung des Wurzelterms $\sqrt{1 - S^2}$ für *kleine* S durch. Die resultierenden Operatoren ergeben je nach Ordnung der Entwicklung eine mehr oder weniger gute Approximation der völlig absorbierenden Operatoren L^- und L^+ . Kleine S bedeutet für eine auslaufende Welle in diesem Zusammenhang, daß die partielle Ableitung nach y , d.h. die Änderung in y -Richtung klein ist gegen die Zeitableitung, d.h. die zeitliche Änderung geteilt durch c . Oder anders gesagt: daß die Welle unter einem Winkel auf die Außenseite zuläuft, der nicht viel von der Senkrechten abweicht. Die Taylor-Entwicklung bis zur ersten Ordnung in S^2 lautet

$$\sqrt{1 - S^2} \approx 1 - \frac{1}{2}S^2 \quad (1.39)$$

woraus sich dann L^- und L^+ ergeben als

$$\begin{aligned} L^- &\approx D_x - \frac{D_t}{c} \left[1 - \frac{1}{2}S^2 \right] \\ &\approx D_x - \frac{D_t}{c} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{cD_y}{D_t} \right)^2 \right] \\ &\approx D_x - \frac{D_t}{c} + \frac{cD_y^2}{2D_t} \end{aligned} \quad (1.40)$$

und

$$L^+ \approx D_x + \frac{D_t}{c} - \frac{cD_y^2}{2D_t} \quad (1.41)$$

Einsetzen dieser Terme in die beiden Teil-Wellengleichungen $L^+U = 0$ und $L^-U = 0$ ergibt dann nach Umformung

$$L^-U = \frac{\partial^2 U}{\partial x \partial t} - \frac{1}{c} \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} + \frac{c}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} = 0 \quad (1.42)$$

$$L^+U = \frac{\partial^2 U}{\partial x \partial t} + \frac{1}{c} \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} - \frac{c}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} = 0 \quad (1.43)$$

Man hat also für die beiden Seiten des Simulationsbereiches jeweils eine absorbierende Randbedingung mit einer Genauigkeit zweiter Ordnung erhalten. Ein entsprechendes Vorgehen ist auch für die obere und untere Grenze und für den dreidimensionalen Fall möglich [2].

Numerische Implementierung nach Mur

Die Implementierung der oben hergeleiteten absorbierenden Randbedingungen erfolgt üblicherweise entsprechend eines Finite-Differenzen-Schemas nach Mur [4]. Exemplarisch wird dies hier für die Seite $x = 0$, d.h. die Gleichung $L^-U = 0$ durchgeführt.

Zuerst werden alle in Gleichung (1.42) vorkommenden partiellen Ableitungen als Zentral-Differenzen-Terme geschrieben, d. h.

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x \partial t} U|_{1/2,j}^n &\approx \frac{1}{2 \Delta t} \left(\frac{\partial}{\partial x} U|_{1/2,j}^{n+1} - \frac{\partial}{\partial x} U|_{1/2,j}^{n-1} \right) \\ &\approx \frac{1}{2 \Delta t \Delta_{xy}} [(U|_{1,j}^{n+1} - U|_{0,j}^{n+1}) - (U|_{1,j}^{n-1} - U|_{0,j}^{n-1})] \end{aligned} \quad (1.44)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial t^2} U|_{1/2,j}^n &\approx \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} U|_{0,j}^n + \frac{\partial^2}{\partial t^2} U|_{1,j}^n \right) \\ &\approx \frac{1}{2 \Delta t^2} [(U|_{0,j}^{n+1} - 2U|_{0,j}^n + U|_{0,j}^{n-1}) + (U|_{1,j}^{n+1} - 2U|_{1,j}^n + U|_{1,j}^{n-1})] \end{aligned} \quad (1.45)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial y^2} U|_{1/2,j}^n &\approx \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} U|_{0,j}^n + \frac{\partial^2}{\partial y^2} U|_{1,j}^n \right) \\ &\approx \frac{1}{2 \Delta_{xy}^2} [(U|_{0,j+1}^n - 2U|_{0,j}^n + U|_{0,j-1}^n) + (U|_{1,j+1}^n - 2U|_{1,j}^n + U|_{1,j-1}^n)] \end{aligned} \quad (1.46)$$

Setzt man die Gleichungen (1.44)-(1.46) in Gleichung (1.42) ein und löst auf nach $U|_{0,j}^{n+1}$, so erhält man also eine Gleichung für die Berechnung der Randpunkte bei $x = 0$, die zur Absorption auslaufender Wellen führt:

$$\begin{aligned} U|_{0,j}^{n+1} &= \\ &- U|_{1,j}^{n-1} + \frac{c \Delta t - \Delta_{xy}}{c \Delta t + \Delta_{xy}} (U|_{1,j}^{n+1} + U|_{0,j}^{n-1}) \\ &+ \frac{2 \Delta_{xy}}{c \Delta t + \Delta_{xy}} (U|_{0,j}^n + U|_{1,j}^n) \\ &+ \frac{(c \Delta t)^2}{2 \Delta_{xy} (c \Delta t + \Delta_{xy})} (U|_{0,j+1}^n - 2U|_{0,j}^n + U|_{0,j-1}^n + U|_{1,j+1}^n - 2U|_{1,j}^n + U|_{1,j-1}^n) \end{aligned} \quad (1.47)$$

Ebenso kann für alle anderen Seiten und im Dreidimensionalen verfahren werden. Die Berechnung der Randelemente erfolgt wieder in einem zusätzlichen

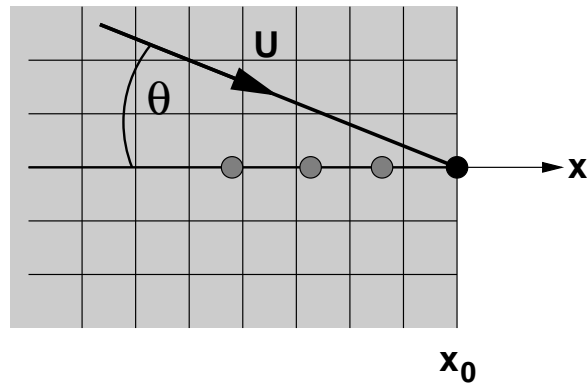


Abbildung 1.7: Ebene Welle U , die auf den Rand bei x_0 zuläuft. Grau eingezeichnet sind die zur Extrapolation herangezogenen Punkte.

Rechenschritt. Zuerst werden alle E_z -Feldwerte im Inneren des Simulationsbereiches berechnet, dann die E_z -Werte am Rand. Anschließend erfolgt die Berechnung der inneren H_x -Werte, der H_x -Randwerte usw.

Wie in Gleichung (1.47) ersichtlich, werden zur Berechnung von $U_{0,j}^{n+1}$ auch seitlich von $(0, j)$ liegende Feldwerte aus vorherigen Zeitschritten und schräg seitlich liegende Punkte aus demselben Zeitschritt verwendet. Dies ist nicht immer erwünscht, je nach dem, welcher Algorithmus für die Feldberechnung im Inneren verwendet wird (vgl. Abschnitt 2). Aus diesem Grund wird im nächsten Abschnitt ein Verfahren beschrieben, das sich auf Punkte beschränkt, die auf einer Linie senkrecht zum Rand liegen.

1.4.2 Liao-Extrapolation

Analytische Herleitung

Das von Liao [5] vorgeschlagene Verfahren zur Absorption auslaufender Wellen ist ein Extrapolationsverfahren. Hierbei werden die Amplituden der E - und H -Felder zu früheren Zeiten an Punkten, die im Inneren liegen benutzt, um die zur Absorption nötigen Feldwerte auf den Randpunkten berechnet. Auf der x -Achse (s. Abb. 1.7) kann für die Vorwärtsbewegung einer Welle geschrieben werden

$$U(t, x) = \tilde{U}(ct - x \cos \theta) \quad (1.48)$$

und außerdem gilt

$$U(t + \Delta t, x) = U\left(t, x - \frac{c\Delta t}{\cos \theta}\right) \quad (1.49)$$

Die Auslenkung im Punkt Q zur Zeit $t + \Delta t$ (s. Abb. 1.8) kann also für eine ebene Welle ausgedrückt werden durch die Auslenkung im Punkt P zur Zeit t . Dies allerdings nur, wenn der Einfallswinkel der Welle bezüglich des Randes bekannt ist, da sonst die Lage des Punktes P unbekannt ist. Im allgemeinen ist der Einfallswinkel jedoch nicht bekannt. Man umgeht dieses Problem, indem man eine Näherung einführt. Kombiniert man die Gleichungen (1.48) und (1.49), so ergibt sich

$$\begin{aligned} U(t + \Delta t) &= \tilde{U}(ct - x \cos \theta + c\Delta t) \\ &= \tilde{U}(\eta + \varepsilon) \end{aligned} \quad (1.50)$$

mit den Definitionen

$$\begin{aligned} \eta &:= ct - x \cos \theta + \alpha c \Delta t \cos \theta \\ \varepsilon &:= c\Delta t - \alpha c \Delta t \cos \theta \end{aligned}$$

Man definiert sich außerdem rekursiv die Fehlerwelle m -ter Ordnung gemäß

$$\begin{aligned} \Delta^0 \tilde{U}(\cdot) &:= \tilde{U}(\cdot) \\ \Delta^m \tilde{U}(\eta + \varepsilon) &:= \Delta^{m-1} \tilde{U}(\eta + \varepsilon) - \Delta^{m-1} \tilde{U}(\eta), \quad m \geq 1 \end{aligned} \quad (1.51)$$

womit sich \tilde{U} ergibt zu

$$\tilde{U}(\eta + \varepsilon) = \sum_{m=1}^N \Delta^{m-1} \tilde{U}(\eta) + \underbrace{\Delta^N \tilde{U}(\eta + \varepsilon)}_{(*)} \quad (1.52)$$

N wird hierbei als Transmissionsordnung bezeichnet. Die Fehlerwelle $\Delta^m U(\cdot, \cdot)$ ist entsprechend definiert als

$$\Delta^m U(t, x - \alpha c \Delta t) = \Delta^m \tilde{U}(\eta), \quad m \geq 0 \quad (1.53)$$

Wird nun der Term $(*)$ in Gleichung (1.52) vernachlässigt und Gleichung (1.50) in (1.52) eingesetzt, so erhält man

$$U(t + \Delta t, x) \approx \sum_{m=1}^N \Delta^{m-1} \tilde{U}(t, x - \alpha c \Delta t) \quad (1.54)$$

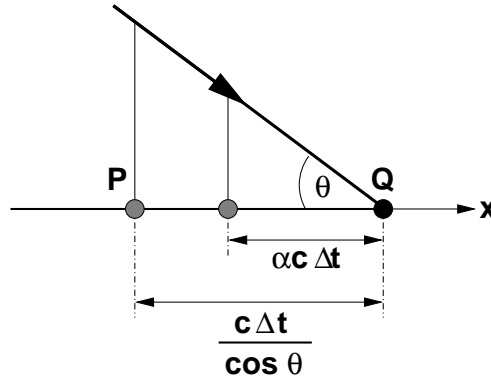


Abbildung 1.8: Schematische Ansicht einer auslaufenden Welle

Der erste Term auf der rechten Seite von Gleichung (1.54), der durch die Auslenkung $U(t, x - \alpha c \Delta t)$ gegeben ist, beschreibt gerade eine ebene Welle, die sich mit einer Geschwindigkeit αc entlang der x-Achse ausbreitet (respektive unter einem Winkel $\arccos(1/\alpha)$ auf die x_0 -Fläche zuläuft). Die weiteren Terme sind Korrekturterme hierzu. Wird die Rekursionsformel (1.51) in (1.54) eingesetzt, so ergibt sich als Ergebnis die approximative Transmissionsformel für eine Ebene Welle:

$$U(t + \Delta t, x) \approx \sum_{m=1}^N (-1)^{m+1} C_m^N U(t - (m-1)\Delta t, x - m\alpha c \Delta t) \quad (1.55)$$

mit dem Binomialkoeffizienten

$$C_m^N = \frac{N!}{(N-m)! m!}$$

Gleichung (1.55) beschreibt die Transmission einer ebenen Welle unabhängig vom Winkel, unter dem sie auf die Berandung trifft. Der Parameter α kann innerhalb eines bestimmten Intervalls frei gewählt werden entsprechend der ungefähren Einfallsrichtung der ebenen Welle und der geforderten Genauigkeit. Man kann zeigen, daß der maximale Fehler, den man in Gleichung (1.55) macht – unabhängig vom Einfallswinkel θ – von der Ordnung $O((c\Delta t)^N)$ ist, wobei N die Transmissionsordnung bezeichnet [5]. Numerische Versuche [6] zeigen, daß oft auch eine Approximation niedrigerer Ordnung verwendet werden kann, wenn die Auftreffwinkel auslaufender Signale ungefähr bekannt sind und dementsprechend für verschiedene Randpunkte verschiedene α -Werte gesetzt werden. Als guter Mittelwert bei unbekanntem Einfallswinkel kann $\alpha = 1.414$ verwendet werden.

Wegen der Linearität der Wellengleichung bleibt (1.55) auch gültig für jedes auslaufende Signal, das sich aus ebenen Wellen superponieren läßt.

Implementierung

Im allgemeinen fallen die in Gleichung (1.55) zur Extrapolation benutzten Punkte $(x - m\alpha c\Delta t)$ nicht zusammen mit den Gitterpunkten des Yee-Gitters. Deshalb muß, um das Liao-Verfahren praktisch anwenden zu können, noch eine Interpolation zwischen den vorliegenden Gitterpunkten des Yee-Gitters durchgeführt werden. Benutzt man beispielsweise eine quadratische Interpolation, so kann Gleichung (1.55) geschrieben werden als

$$U(t + \Delta t) \approx \sum_{m=1}^N (-1)^{m+1} C_m^N (T^m \bar{U}_m) \quad (1.56)$$

wobei

$$\bar{U}_m = [U_{(1,m)}, \dots, U_{(2m+1,m)}]^T$$

$$U_{(i,j)} = U(x - (i - 1)\Delta x, t - (j - 1)\Delta t)$$

$$T^m = T^1 \begin{bmatrix} T^{m-1} & 0 & 0 \\ 0 & T^{m-1} & 0 \\ 0 & 0 & T^{m-1} \end{bmatrix}$$

$$T^1 = \begin{bmatrix} \frac{(2-s)(1-s)}{2} & s(2-s) & \frac{s(s-1)}{2} \end{bmatrix}$$

$$s = \frac{\alpha c \Delta t}{\Delta x}$$

Gleichung (1.56) wird in jedem Zeitschritt auf die E_z -Feldkomponente angewandt und erzeugt so eine Absorption auslaufender Wellen.

1.4.3 Impedanzangepaßte Medien

Die oben beschriebenen Methoden zur Realisierung absorbierender Randbedingungen erlauben es in der Regel, die Reflexion einer auslaufenden Welle an der Grenzfläche auf ungefähr das 10^{-3} -fache der Amplitude der auslaufenden

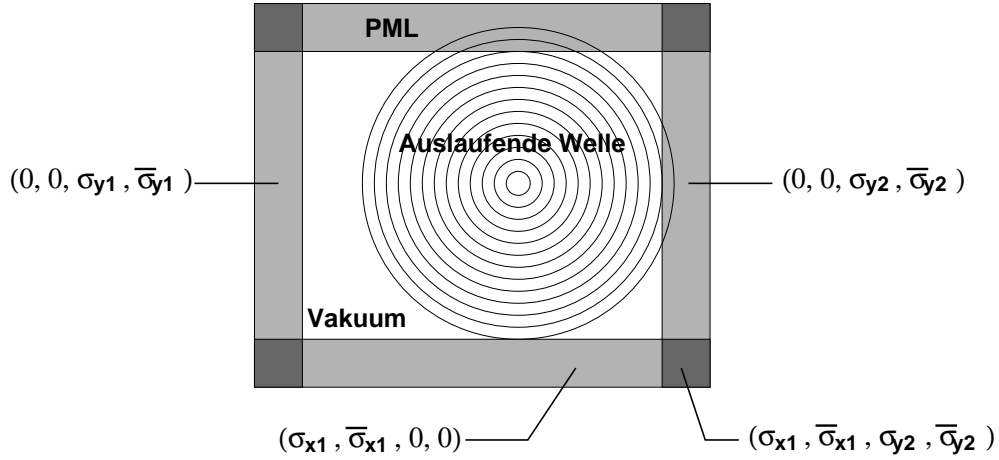


Abbildung 1.9: PML-Randschicht zur Absorption auslaufender Wellen

Welle zu reduzieren [2]. Dies ist für viele Anwendungen in Entwicklung und Design ausreichend. Doch es gibt auch Fälle, in denen eine bessere Absorption wünschenswert ist. Dies ist etwa der Fall, wenn als Resultat der Simulation die fouriertransformierten Feldgrößen gesucht werden. Geringe Reflexionen im Ortsbereich können hierbei zu sehr großen Fehlern im Frequenzraum führen. Eine wesentliche Verbesserung im Reflexionsverhalten erreichte Berenger [7] mit einem Verfahren, das die Reflexionskoeffizienten an den Grenzflächen auf $1/3000$ der Werte anderer absorbierender Randbedingungen reduziert [2]. Diese Methode wird im Englischen als Perfectly Matched Layer-Verfahren, kurz PML-Verfahren bezeichnet. Es beruht auf der zusätzlichen Ummantelung des betrachteten Simulationsbereiches mit einem nichtphysikalischen Material, dessen elektrische und magnetische Eigenschaften zu einer fast vollständigen Absorption aller elektromagnetischen Wellen unabhängig von ihrem Auftreffwinkel führen. Solch eine Schicht wird als PML-Schicht bezeichnet.

Ausgangspunkt für Berengers PML-Verfahren, hier hergeleitet wiederum nur für die TM-Mode, sind die Maxwellgleichungen (1.8) mit $\varepsilon_r = \mu_r = 0$:

$$\frac{\partial}{\partial t} H_x = \frac{1}{\mu_0} \left(-\frac{\partial E_z}{\partial y} - \bar{\sigma} H_x \right) \quad (1.57a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} H_y = \frac{1}{\mu_0} \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} - \bar{\sigma} H_y \right) \quad (1.57b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} E_z = \frac{1}{\varepsilon_0} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - \sigma E_z \right) \quad (1.57c)$$

Beachtet seien die $\bar{\sigma}$ -Terme in Gleichung (1.57a) und (1.57b), die zwar unphysikalisch sind, die aber im folgenden für die Absorption im PML-Medium benötigt werden. Um eine Reflexion an der Nahtstelle zwischen Simulationsbereich (Vakuum) und PML-Schicht zu vermeiden, muß außerdem im PML-Medium die Impedanzbedingung

$$\frac{\sigma}{\varepsilon_0} = \frac{\bar{\sigma}}{\mu_0} \quad (1.58)$$

erfüllt sein, so daß die Impedanz des Mediums gleich der Impedanz des Vakuums ist (siehe Anhang B). Dies führt zu einem reflexionsfreien Übergang von Wellen, die senkrecht auf die Grenzfläche treffen [8]. Für schräg auftreffende Wellen ergibt sich bei einer Bedingung dieser Form eine Reflexion in einer Größenordnung, wie sie bei den oben beschriebenen absorbierenden Randbedingungen auftritt. Berengers Idee war es, einen weiteren Freiheitsgrad für Absorption und Impedanzangleichung einzuführen, indem er die E_z -Komponente aufteilte in zwei Komponenten: E_{zx} und E_{zy} . Damit werden die Gleichungen (1.57) zu

$$\frac{\partial}{\partial t} H_x = \frac{1}{\mu_0} \left(-\frac{\partial(E_{zx} + E_{zy})}{\partial y} - \bar{\sigma}_y H_x \right) \quad (1.59a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} H_y = \frac{1}{\mu_0} \left(\frac{\partial(E_{zx} + E_{zy})}{\partial x} - \bar{\sigma}_x H_y \right) \quad (1.59b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} E_{zx} = \frac{1}{\varepsilon_0} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \sigma_x E_{zx} \right) \quad (1.59c)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} E_{zy} = \frac{1}{\varepsilon_0} \left(-\frac{\partial H_x}{\partial y} - \sigma_y E_{zy} \right) \quad (1.59d)$$

Verschiedene Spezialfälle können die Funktion der einzelnen Terme verdeutlichen: Für $\sigma_x = \sigma_y = \bar{\sigma}_x = \bar{\sigma}_y = 0$ reduzieren sich die Gleichungen (1.59) auf die Maxwellgleichungen des Vakuums. $\sigma_x = \sigma_y$ und $\bar{\sigma}_x = \bar{\sigma}_y = 0$ beschreibt ein elektrisch leitendes Medium, während $\sigma_x = \sigma_y$ und $\bar{\sigma}_x = \bar{\sigma}_y$ für ein impedanzangepaßtes Medium gilt, das senkrecht auslaufende Wellen absorbiert. Allerdings gibt es weitere Möglichkeiten: z.B. absorbiert $\sigma_y = \bar{\sigma}_y = 0$ Wellen, die mit den Komponenten (H_y, E_{zx}) in x-Richtung fortschreiten, aber keine Wellen, die sich mit (H_x, E_{zy}) in y-Richtung fortbewegen. Entsprechendes gilt für $\sigma_x = \bar{\sigma}_x = 0$: (H_y, E_{zx}) wird absorbiert, (H_x, E_{zy}) nicht.

Betrachtet werde nun eine ebene Welle, deren \vec{H} -Vektor mit der y-Achse einen Winkel ϕ einschließen. Die Amplituden seien gegeben durch H_{x0}, H_{y0}, E_{zx0} und E_{zy0} . Erreicht werden soll, daß die einzelnen Komponenten in der PML-Zone

exponentiell abklingen, d.h. gemäß folgenden Gleichungen:

$$\begin{aligned}
 H_x &= -H_{x0} \sin \phi e^{i\omega(t-\alpha x-\beta y)} \\
 H_y &= H_{y0} \cos \phi e^{i\omega(t-\alpha x-\beta y)} \\
 E_{zx} &= E_{zx0} e^{i\omega(t-\alpha x-\beta y)} \\
 E_{zy} &= E_{zy0} e^{i\omega(t-\alpha x-\beta y)}
 \end{aligned} \tag{1.60}$$

mit komplexen Konstanten α und β . Werden die Gleichungen (1.60) in (1.59) eingesetzt, erhält man ein System von Gleichungen, die die vier Unbekannten E_{zx0} , E_{zy0} , α und β miteinander verbinden:

$$\varepsilon_0 E_{zx0} - \frac{i}{\omega} \sigma_x E_{zx0} = -H_0 \cos \phi \tag{1.61a}$$

$$\varepsilon_0 E_{zy0} - \frac{i}{\omega} \sigma_y E_{zy0} = -H_0 \sin \phi \tag{1.61b}$$

$$\mu_0 H_0 \sin \phi - \frac{i}{\omega} \bar{\sigma}_y H_0 \sin \phi = -\beta (E_{zx0} + E_{zy0}) \tag{1.61c}$$

$$\mu_0 H_0 \cos \phi - \frac{i}{\omega} \bar{\sigma}_x H_0 \cos \phi = -\alpha (E_{zx0} + E_{zy0}) \tag{1.61d}$$

Einsetzen von E_{zx0} und E_{zy0} aus (1.61a) und (1.61b) in (1.61c) und (1.61d) ergibt zwei Gleichungen, die α und β miteinander verbinden:

$$\mu_0 \varepsilon_0 = \left(1 - \frac{i}{\omega \mu_0} \bar{\sigma}_y\right) \sin \phi = \beta \left(\frac{\alpha \cos \phi}{1 - \frac{i}{\omega \varepsilon_0} \sigma_x} + \frac{\beta \sin \phi}{1 - \frac{i}{\omega \varepsilon_0} \sigma_y} \right) \tag{1.62a}$$

$$\mu_0 \varepsilon_0 = \left(1 - \frac{i}{\omega \mu_0} \bar{\sigma}_x\right) \sin \phi = \alpha \left(\frac{\alpha \cos \phi}{1 - \frac{i}{\omega \varepsilon_0} \sigma_x} + \frac{\beta \sin \phi}{1 - \frac{i}{\omega \varepsilon_0} \sigma_y} \right) \tag{1.62b}$$

Division von Gleichung (1.62a) durch Gleichung (1.62b) ergibt den Zusammenhang zwischen α und β :

$$\frac{\beta}{\alpha} = \frac{\left(1 - \frac{i}{\omega \mu_0} \bar{\sigma}_y\right) \sin \phi}{\left(1 - \frac{i}{\omega \mu_0} \bar{\sigma}_x\right) \cos \phi} \tag{1.63}$$

Wird dies in Gleichung (1.62a) bzw. (1.62b) eingesetzt, erhält man Ausdrücke für beide Konstanten:

$$\begin{aligned}
 \alpha &= \pm \sqrt{\varepsilon_0 \mu_0} \left(1 - \frac{i}{\omega \mu_0} \bar{\sigma}_x\right) \cos \phi \frac{1}{a} \\
 \beta &= \pm \sqrt{\varepsilon_0 \mu_0} \left(1 - \frac{i}{\omega \mu_0} \bar{\sigma}_y\right) \sin \phi \frac{1}{a}
 \end{aligned} \tag{1.64}$$

wobei

$$\begin{aligned}
 a &= \sqrt{b \cos^2 \phi + c \sin^2 \phi} \\
 b &= \frac{\left(1 - \frac{i}{\omega \mu_0} \bar{\sigma}_x\right)}{\left(1 - \frac{i}{\omega \varepsilon_0} \sigma_x\right)} \\
 c &= \frac{\left(1 - \frac{i}{\omega \mu_0} \bar{\sigma}_y\right)}{\left(1 - \frac{i}{\omega \varepsilon_0} \sigma_y\right)}
 \end{aligned}$$

Die verschiedenen Vorzeichen in den Gleichungen (1.64) stehen für die beiden Bewegungsrichtungen.

Die Unbekannten Größen E_{zx0} und E_{zy0} können durch Einsetzen der Gleichungen (1.64) in (1.61a) und (1.61b) berechnet werden:

$$\begin{aligned}
 E_{zx0} &= -H_0 \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} b \cos^2 \phi \frac{1}{a} \\
 E_{zy0} &= -H_0 \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} c \sin^2 \phi \frac{1}{a}
 \end{aligned} \tag{1.65}$$

Nach Einsetzen von α und β in die Gleichungen (1.60) lassen sich die Feldgrößen schreiben als

$$\begin{aligned}
 U(x, y, t; \phi) &= \\
 U_0 \exp \left(i\omega \left(t - \frac{x \cos \phi + y \sin \phi}{c_{vak} a} \right) - \frac{\bar{\sigma}_x \cos \phi}{\mu_0 c_{vak} a} x - \frac{\bar{\sigma}_y \cos \phi}{\mu_0 c_{vak} a} y \right) & \tag{1.66}
 \end{aligned}$$

c_{vak} bezeichnet hierbei die Vakuum-Lichtgeschwindigkeit.

Für einen reflexionsfreien Übergang elektromagnetischer Wellen aus dem Simulationsbereich in die PML-Zone müssen $(\sigma_x, \bar{\sigma}_x)$ und $(\sigma_y, \bar{\sigma}_y)$ jeweils Bedingung (1.58) erfüllen. Damit gilt $b \equiv 1$, $c \equiv 1$ und deshalb auch $a \equiv 1$ für alle Frequenzen ω . Dann wird Gleichung (1.66) zu

$$\begin{aligned}
 U(x, y, t; \phi) &= \\
 U_0 \exp \left(i\omega \left(t - \frac{x \cos \phi + y \sin \phi}{c_{vak}} \right) - \frac{\bar{\sigma}_x \cos \phi}{\mu_0 c_{vak}} x - \frac{\bar{\sigma}_y \cos \phi}{\mu_0 c_{vak}} y \right) & \tag{1.67}
 \end{aligned}$$

Das heißt aber, daß allein durch das Einhalten der Impedanzbedingung (1.58) für die Leitfähigkeiten im PML-Material das erwünschte exponentielle Abklingen der auslaufenden Wellen erreicht werden kann, und zwar unabhängig

von der Frequenz der Welle. Erfahrungsgemäß reichen schon wenige PML-Zellschichten (4–16 Zellen tief) aus, die um den eigentlich zu simulierenden Bereich gelegt werden.

Anzumerken ist an dieser Stelle, daß das PML-Verfahren eine effiziente Absorption ermöglicht, jedoch eventuell zu einem deutlichen Mehraufwand bei der Simulation führen kann, je nachdem, um wie viel der Simulationsbereich vergrößert werden muß. Dies betrifft speziell voll dreidimensionale Simulationen und gilt sowohl für den Speicheraufwand wie auch für die benötigte Rechenzeit.

2 Schräger Lichteinfall auf periodische Geometrien

Das in Kapitel 1.1.2 beschriebene Differenzen-Verfahren zur Lösung der Maxwellgleichungen ist ohne Probleme anwendbar, wenn nichtperiodische Geometrien betrachtet werden, in die die elektromagnetische Strahlung senkrecht oder schräg einfällt. Ebenso eignet es sich für periodische Geometrien bei senkrechtem Einfall. Sollen jedoch periodische Elemente bei schrägem Lichteinfall simuliert werden, treten Probleme auf. Für E - und H -Felder können in diesem Fall keine periodischen Randbedingungen verwendet werden, die jedoch nötig sind, um den geometrischen Gegebenheiten zu entsprechen. Im folgenden soll nun eine Methode beschrieben werden, die trotzdem die Verwendung periodischer Randbedingungen ermöglicht. Hierbei werden durch eine Phasentransformation die physikalischen Felder E und H in periodische Hilfsfeldgrößen überführt. Für diese Hilfsfeldgrößen werden die Maxwellgleichungen unter Verwendung periodischer Randbedingungen gelöst; anschließend kann wieder auf physikalische Größen zurücktransformiert werden.

2.1 Modifizierter Yee-Algorithmus

2.1.1 Floquet-Transformation

Betrachtet werde eine in x -Richtung räumlich periodische Struktur, deren räumliche Periode gegeben ist durch Λ (s. Abb. 2.1) und deren elektrische und magnetische Eigenschaften beschrieben werden durch eine ortsabhängige Dielektrizitätszahl $\varepsilon(x, y)$ und eine ebenfalls ortsabhängige Permeabilitätszahl $\mu(x, y)$. Für diese Größen gilt dann

$$\begin{aligned}\varepsilon(x + \Lambda, y) &= \varepsilon(x, y) \\ \mu(x + \Lambda, y) &= \mu(x, y)\end{aligned}\tag{2.1}$$

Um nun zu ebenfalls räumlich periodischen Feldgrößen zu gelangen, wird eine

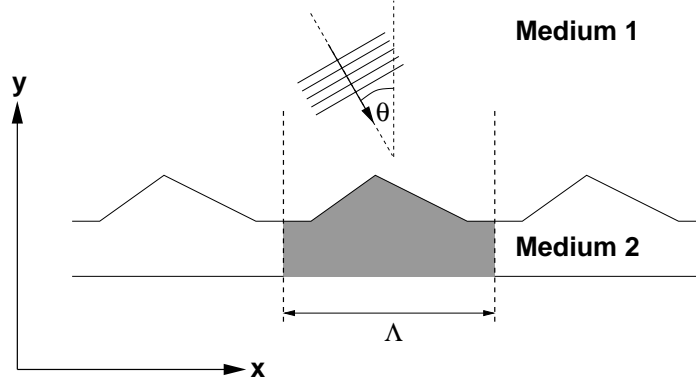


Abbildung 2.1: Schräger Einfall einer ebenen Welle in eine räumlich periodische Struktur der Periode Λ .

sogenannte Floquet-Transformation durchgeführt [9]. Man definiert hierbei komplexe Hilfsfeldgrößen gemäß

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_z &:= \mathcal{E}_z \cdot e^{-ik_x x} \\ \mathcal{Q}_x &:= \mathcal{H}_z \cdot e^{-ik_x x} \\ \mathcal{Q}_y &:= \mathcal{H}_y \cdot e^{-ik_x x}\end{aligned}\tag{2.2}$$

aus den komplexen \mathcal{E} - und \mathcal{H} -Feldern, den örtlichen Fouriertransformierten der Felder E und H . Hierbei ist $k_x = \frac{\omega}{c} \sin \theta$, ω die Kreisfrequenz der einfallenden Strahlung und c die Lichtgeschwindigkeit im EinfallsmEDIUM 1 (s. Abb. 2.1). \mathcal{P}_z , \mathcal{Q}_x und \mathcal{Q}_y sind periodisch entlang der x-Achse mit einer Periode Λ [9]. Auflösen der Gleichungen (2.2) nach \mathcal{E}_z , \mathcal{H}_x bzw. \mathcal{H}_y und Einsetzen in die Maxwellgleichungen im Frequenzbereich

$$-i\omega\varepsilon\mathcal{E}_z = \frac{\partial\mathcal{H}_y}{\partial x} - \frac{\partial\mathcal{H}_x}{\partial y} - \sigma\mathcal{E}_z\tag{2.3a}$$

$$-i\omega\mu\mathcal{H}_y = \frac{\partial\mathcal{E}_z}{\partial x}\tag{2.3b}$$

$$i\omega\mu\mathcal{H}_x = \frac{\partial\mathcal{E}_z}{\partial y}\tag{2.3c}$$

führt zu transformierten Maxwellgleichungen, die das System in den Hilfsfeldgrößen beschreiben:

$$-i\omega\varepsilon\mathcal{P}_z = \frac{\partial\mathcal{Q}_y}{\partial x} - \frac{\partial\mathcal{Q}_x}{\partial y} - \sigma\mathcal{P}_z + \underbrace{i\omega\frac{\sin\theta}{c}\mathcal{Q}_y}_{(*)} \quad (2.4a)$$

$$-i\omega\mu\mathcal{Q}_y = \frac{\partial\mathcal{P}_z}{\partial x} + \underbrace{i\omega\frac{\sin\theta}{c}\mathcal{P}_z}_{(*)} \quad (2.4b)$$

$$i\omega\mu\mathcal{Q}_x = \frac{\partial\mathcal{P}_z}{\partial y} \quad (2.4c)$$

Zu beachten sind die im Vergleich zu (2.3) neu hinzugekommenen unterklammerten Terme (*) in (2.4a) und (2.4b). Diese Terme werden eine Änderung des Zeitschritt-Schemas erforderlich machen, da der Standard-Yee-Algorithmus nicht mehr verwendet werden kann.

Unter der Voraussetzung, daß die einfallenden Felder \mathcal{E}_z , \mathcal{H}_x und \mathcal{H}_y eine harmonische Zeitabhängigkeit der Form $e^{-i\omega t}$ besitzen (d.h. $-i\omega U \hat{=} \frac{\partial U}{\partial t}$), können die Gleichungen (2.4) für die fouriertransformierten Größen E_z , H_x und H_y geschrieben werden als

$$\varepsilon\frac{\partial}{\partial t}P_z = \frac{\partial Q_y}{\partial x} - \frac{\partial Q_x}{\partial y} - \sigma P_z - \underbrace{\frac{\sin\theta}{c}\frac{\partial Q_y}{\partial t}}_{(*)} \quad (2.5a)$$

$$\mu\frac{\partial}{\partial t}Q_y = \frac{\partial P_z}{\partial x} - \underbrace{\frac{\sin\theta}{c}\frac{\partial P_z}{\partial t}}_{(*)} \quad (2.5b)$$

$$-\mu\frac{\partial}{\partial t}Q_x = \frac{\partial P_z}{\partial y} \quad (2.5c)$$

Diese Gleichungen sind mit Anfangsbedingungen und periodischen bzw. absorbierenden Randbedingungen zu lösen. Um anschließend die physikalischen Größen E_z , H_x und H_y zu erhalten, müssen die Gleichungen (2.2) im Zeitbereich geschrieben werden:

$$\begin{aligned} P_z(x, y, t) &= E_z\left(x, y, t + x\frac{\sin\theta}{c}\right) \\ Q_x(x, y, t) &= H_z\left(x, y, t + x\frac{\sin\theta}{c}\right) \\ Q_y(x, y, t) &= H_y\left(x, y, t + x\frac{\sin\theta}{c}\right) \end{aligned} \quad (2.6)$$

bzw. deren Umkehrung

$$\begin{aligned}
 E_z(x, y, t) &= P_z \left(x, y, t - x \frac{\sin \theta}{c} \right) \\
 H_x(x, y, t) &= Q_z \left(x, y, t - x \frac{\sin \theta}{c} \right) \\
 H_y(x, y, t) &= Q_y \left(x, y, t - x \frac{\sin \theta}{c} \right)
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

Somit sind die physikalischen Feldgrößen nach der Lösung des Problems für die Hilfsfelder durch eine einfache Rücktransformation zu berechnen. Eine andere Größe, die für technische Anwendungen oft von Interesse ist, ist die Intensitätsverteilung des Lichtfeldes im Simulationsbereich, d.h. das Poynting-Feld. Um dieses zu berechnen, braucht man gar nicht auf die E - und H -Felder rückzutransformieren. Der zeitgemittelte Poyntingvektor berechnet sich aus den komplexen Feldgrößen gemäß

$$\vec{S} = \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left[\vec{\mathcal{E}} \times \vec{\mathcal{H}}^* \right]$$

wobei * die komplexe Konjugation bezeichnet. Nach den Gleichungen (2.2) gilt aber

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{P}} e^{ik_x x} \quad \text{bzw.} \quad \vec{\mathcal{H}} = \vec{\mathcal{Q}} e^{ik_x x}$$

Somit errechnet sich der Poyntingvektor aus den Hilfsfeldern entsprechend

$$\begin{aligned}
 \vec{S} &= \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left[\vec{\mathcal{E}} \times \vec{\mathcal{H}}^* \right] \\
 &= \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left[\left(\vec{\mathcal{P}} e^{ik_x x} \right) \times \left(\vec{\mathcal{Q}} e^{ik_x x} \right)^* \right] \\
 &= \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left[\vec{\mathcal{P}} \times \vec{\mathcal{Q}}^* \right] e^{ik_x x} e^{-ik_x x} \\
 \iff \vec{S} &= \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left[\vec{\mathcal{P}} \times \vec{\mathcal{Q}}^* \right]
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

Für die TM-Mode, die hier nur betrachtet wird, gilt für die komplexen Hilfsfelder

$$\begin{aligned}
 \vec{\mathcal{P}} &= (P'_z + iP''_z) e^{-i\omega t} \hat{e}_z \\
 \vec{\mathcal{Q}} &= (Q'_x + iQ''_x) e^{-i\omega t} \hat{e}_x + (Q'_y + iQ''_y) e^{-i\omega t} \hat{e}_y
 \end{aligned} \tag{2.9}$$

wobei $\hat{\mathbf{e}}_x$, $\hat{\mathbf{e}}_y$ und $\hat{\mathbf{e}}_z$ die Einheitsvektoren des kartesischen Koordinatensystems bezeichnen. Aus Gleichung (2.8) und Gleichung (2.9) erhält man für den Poyntingvektor

$$\vec{S} = \frac{1}{2} [(P'_z Q'_y + P''_z Q''_y) \hat{\mathbf{e}}_x + (P'_z Q'_x + P''_z Q''_x) \hat{\mathbf{e}}_y] \quad (2.10)$$

Die Real- und Imaginärteile P' , P'' usw. in Gleichung (2.10) lassen sich aus den Feldwerten zu zwei verschiedenen Zeitpunkten berechnen. Diese sind Ergebnis der Simulation.

Zeitpunkt t_1 :

$$\begin{aligned} P_z(t_1) &= \text{Re} [(P'_z + iP''_z) e^{-i\omega t_1}] \\ &= \text{Re} [(P'_z + iP''_z) (\cos \omega t_1 - i \sin \omega t_1)] \\ &= P'_z \cos \omega t_1 + P''_z \sin \omega t_1 \end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow P'_z = \frac{P_z(t_1) - P''_z \sin \omega t_1}{\cos \omega t_1} \quad (2.11)$$

Zeitpunkt t_2 :

$$\begin{aligned} P_z(t_2) &= \text{Re} [(P'_z + iP''_z) e^{-i\omega t_2}] \\ &= P'_z \cos \omega t_2 + P''_z \sin \omega t_2 \end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow P''_z = \left(\frac{P_z(t_2)}{\sin \omega t_2} - \frac{P_z(t_1) \cos \omega t_2}{\sin \omega t_2 \cos \omega t_1} \right) \frac{1}{1 + \frac{\sin \omega t_1 \cos \omega t_2}{\sin \omega t_2 \cos \omega t_1}} \quad (2.12)$$

Aus dem zeitgemittelten Poynting-Feld läßt sich die Leistungsdichte des Lichtfeldes berechnen gemäß

$$W = -\vec{\nabla} \cdot \vec{S} \quad (2.13)$$

und hieraus die optische Ladungsträgergenerationsrate:

$$G_{opt} = \eta \frac{W}{E_{h\nu}} \quad (2.14)$$

wobei η die Quantenausbeute bezeichnet, d.h. die mittlere Anzahl der pro Photon der Energie $E_{h\nu} = h\nu$ erzeugten Ladungsträger.

2.1.2 Implementierung für nicht- und schwachleitende Materialien

Die Gleichungen (2.5) sind nun in Differenzgleichungen zu überführen, um eine Simulation durchführen zu können. Wie im vorigen Abschnitt bereits erwähnt, ist aufgrund der in (2.5a) und (2.5b) mit (*) gekennzeichneten Terme ein Vorgehen wie in Abschnitt 1.1.2 nicht möglich. Ursache dafür ist z.B. die Tatsache, daß zusätzliche Zeitableitungen und daß außerdem zusätzliche, nicht auf den Gittern liegende Punkte auftreten. Ein Ansatz, diese Probleme zu umgehen, ist der sogenannte Split-Field-Ansatz [11], der in dieser Arbeit modifiziert und um einen Term erweitert wird, der die Leitfähigkeit σ enthält. Die Hilfsfelder P_z und Q_y werden folgendermaßen aufgespalten:

$$P_z = P_z^a + P_z^b + P_z^\sigma$$

mit

$$\frac{\partial}{\partial t} P_z^a = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial Q_y}{\partial x} - \frac{\partial Q_x}{\partial y} \right) \quad (2.15)$$

$$P_z^b = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\sin \theta}{c} Q_y \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P_z^\sigma = -\frac{\sigma}{\varepsilon} P_z \quad (2.17)$$

und ebenso

$$Q_y = Q_y^a + Q_y^b$$

mit

$$\frac{\partial}{\partial t} Q_y^a = \frac{1}{\mu} \frac{\partial P_z}{\partial x} \quad (2.18)$$

$$Q_y^b = -\frac{1}{\mu} \frac{\sin \theta}{c} P_y \quad (2.19)$$

Zur Diskretisierung der Gleichungen (2.5) unter Verwendung von (2.15)–(2.19) werden nun verschobene Yee-Gitter verwendet wie in Abschnitt 1.1.2 beschrieben. Allerdings werden beim jetzt beschriebenen Verfahren nicht P - und Q -Komponenten alternierend berechnet, wie es in Abschnitt 1.1.2 der Fall war: P_z zu den Zeitpunkten $n\Delta t$ und Q_x bzw. Q_y zu den Zeitpunkten $(n + 1/2)\Delta t$. Hier werden in jedem Halbzeitschritt $n/2 \Delta t$ alle Feldgrößen berechnet. Es

ergibt sich insgesamt folgende Zeitschritt-Reihenfolge für die Hilfsfeldgrößen:

$$P_z^a|_{i,j}^n = P_z^a|_{i,j}^{n-1} + k_1 \left(Q_y|_{i,j}^{n-1/2} - Q_y|_{i-1,j}^{n-1/2} + Q_x|_{i,j-1}^{n-1/2} - Q_x|_{i,j}^{n-1/2} \right) \quad (2.20a)$$

$$Q_x|_{i,j}^n = Q_x|_{i,j}^{n-1} + k_2 \left(P_z|_{i,j+1}^{n-1/2} - P_z|_{i,j}^{n-1/2} \right) \quad (2.20b)$$

$$Q_y^a|_{i,j}^n = Q_y^a|_{i,j}^{n-1} + k_2 \left(P_z|_{i+1,j}^{n-1/2} - P_z|_{i,j}^{n-1/2} \right) \quad (2.20c)$$

$$P_z|_{i,j}^n = \frac{1}{c_1} P_z^a|_{i,j}^n + \frac{c_2}{c_1} (Q_y^a|_{i,j}^n + Q_y^a|_{i-1,j}^n) + \underbrace{\frac{c_3}{c_1} P_z|_{i,j}^{n-1/2}}_{(*)} \quad (2.20d)$$

$$Q_y^b|_{i,j}^n = c_4 (P_z|_{i+1,j}^n + P_z|_{i,j}^n) \quad (2.20e)$$

Die Koeffizienten in diesen Gleichungen sind gegeben durch

$$\begin{aligned} k_1 &= \frac{\Delta t}{\varepsilon \Delta_{xy}} & k_2 &= -\frac{\Delta t}{\mu \Delta_{xy}} \\ c_1 &= 1 - \frac{\sin^2 \theta}{c^2 \varepsilon \mu} & c_2 &= -\frac{\sin \theta}{2 c \varepsilon} \\ c_3 &= -\frac{\sigma \Delta t}{\varepsilon} & c_4 &= -\frac{\sin \theta}{2 c \mu} \end{aligned}$$

In der Literatur ist dieses Verfahren beschrieben ohne den Leitungs-Term (*) in Gleichung (2.20d) (siehe z.B. [11]). In [11] wird auch eine Stabilitätsanalyse für das System von Gleichungen (2.20) ohne den Leitungs-Term (*) durchgeführt. Dies geschieht wiederum anhand der Eigenwerte des Gleichungssystems (siehe Abschnitt 1.1.2). Daraus ergibt sich als Bedingung an den maximalen Zeitschritt:

$$\Delta t < \frac{1}{c} \frac{\Delta_{xy} \cos^2 \theta}{|\sin \theta| \sin \xi \cos \xi + \sqrt{\sin^2 \theta \sin^2 \xi \cos^2 \xi + (\sin^2 \xi + a) \cos^2 \theta}} \quad (2.21)$$

wobei ξ und a gegeben sind durch

$$\begin{aligned} \xi &= \cos^{-1} \left(\frac{1}{2} \sqrt{2 \frac{1 + \sin^2 \theta (4a + 2) - \sqrt{\sin^2 \theta (a - \sin^2 \theta) + 1}}{\sin^2 \theta (2 + 3a) + a}} \right) \\ a &= \left(\frac{\Delta_x}{\Delta_y} \right)^2 \end{aligned}$$

Wie sich herausstellte, ist der beschriebene Algorithmus (2.20) sehr stabil für nicht- und sehr schwach leitende Medien. Dies bedeutet, daß bei Einfall einer ebenen Welle nach einiger Zeit ein zeitharmonischer Zustand erreicht wurde und die Feldamplituden richtige Werte annahmen. Für stärker leitende Materialien allerdings ist das Verfahren nicht anwendbar, es kommt zur Divergenz der Feldamplituden. Die zu Grunde liegenden Differentialgleichungen werden offensichtlich steif (siehe Anhang C), und das System von Differenzgleichungen (2.20) ist nicht mehr mit vertretbarem Aufwand stabil lösbar. Verantwortlich für die Steifheit ist der mit (*) gekennzeichnete Term in Gleichung (2.20d). Für realistische Werte von σ , die im Bereich $> 10^4$ liegen, müßte Δt sehr klein gewählt werden, damit der Koeffizient c_3 nicht zu einem starken Anwachsen des Terms (*) führt. Unrealistisch lange Rechenzeiten wären die Folge. Eine genaue Analyse der Eigenwerte des Systems geht über den Rahmen dieser Diplomarbeit hinaus. Die Lösung des Problems darin bestehen darin, das Verfahren und speziell den Term (*) in Gleichung (2.20) semiimplizit umzuformulieren und somit ein steifstabiles Zeitschritt-Verfahren zu erhalten. Beim Yee-Verfahren aus Abschnitt (1.1.2) führt die auftretende Steifheit nicht zu Problemen. Dort müssen aufgrund der alternierenden Reihenfolge bei der Berechnung der Feldgrößen verschiedene Terme der Zeitschrittgleichungen von vornherein semiimplizit angesetzt werden, darunter auch der Leitungsterm. Resultat ist ein steifstabiler Algorithmus.

In dieser Arbeit wurde ein gegenüber (2.20) geänderter Algorithmus entwickelt und implementiert, der auf einem modifizierten Split-Field-Ansatz beruht. Es handelt sich um ein semiimplizites und somit steifstabiles Verfahren, das im nächsten Abschnitt beschrieben wird.

2.1.3 Implementierung für leitfähige Materialien

Ausgehend von den Gleichungen (2.6) werden die Q -Komponenten entsprechend des im vorigen Abschnitt vorgestellten Split-Field-Ansatzes aufgespalten. Ihre Zeitschritt-Gleichungen bleiben unverändert. Die rechte Seite von Gleichung (2.5a) besteht aus drei Komponenten:

$$\frac{\partial}{\partial t} P_z = \frac{1}{\varepsilon} \underbrace{\left(\frac{\partial Q_y}{\partial x} - \frac{\partial Q_x}{\partial y} \right)}_{\frac{\partial}{\partial t} P_z^a} - \underbrace{\frac{\sin \theta}{c \varepsilon} \frac{\partial Q_y}{\partial t}}_{\frac{\partial}{\partial t} P_z^b} - \underbrace{\frac{\sigma}{\varepsilon} P_z}_{\frac{\partial}{\partial t} P_z^\sigma} \quad (2.22)$$

Alle Terme in Gleichung (2.22) werden nun direkt als Differenzterme geschrieben. Außerdem wird der letzte Term in Gleichung (2.22) semiimplizit

angesetzt. Man erhält hieraus die diskretisierten Gleichungen

$$\frac{\partial}{\partial t} P_z \approx \frac{P_z|_{i,j}^n - P_z|_{i,j}^{n-1}}{\Delta t} \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P_z^a \approx \frac{1}{\varepsilon \Delta_{xy}} \left(Q_y|_{i,j}^{n-1/2} - Q_y|_{i-1,j}^{n-1/2} - Q_x|_{i,j}^{n-1/2} + Q_x|_{i,j-1}^{n-1/2} \right) \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P_z^b \approx & -\frac{\sin \theta}{c \varepsilon} \left[\frac{1}{\Delta t} \left(\frac{Q_y|_{i,j}^n + Q_y|_{i-1,j}^n}{2} - \frac{Q_y|_{i,j}^{n-1} + Q_y|_{i-1,j}^{n-1}}{2} \right) \right. \\ & \left. - \frac{\sin \theta}{c \mu \Delta t} \frac{1}{2} \left(\frac{P_z|_{i-1,j}^n + P_z|_{i,j}^n}{2} - \frac{P_z|_{i-1,j}^{n-1} + P_z|_{i,j}^{n-1}}{2} \right) \right. \\ & \left. + \frac{P_z|_{i+1,j}^n + P_z|_{i,j}^n}{2} - \frac{P_z|_{i+1,j}^{n-1} + P_z|_{i,j}^{n-1}}{2} \right] \end{aligned} \quad (3.25a)$$

$$\begin{aligned} = & -\frac{\sin \theta}{c \varepsilon} \left[\frac{1}{\Delta t} \left(\frac{Q_y|_{i,j}^n + Q_y|_{i-1,j}^n}{2} - \frac{Q_y|_{i,j}^{n-1} + Q_y|_{i-1,j}^{n-1}}{2} \right) \right. \\ & \left. - \frac{\sin \theta}{c \mu \Delta t} \left(\frac{P_z|_{i-1,j}^n + 2P_z|_{i,j}^n + P_z|_{i+1,j}^n}{4} \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{P_z|_{i-1,j}^{n-1} + 2P_z|_{i,j}^{n-1} + P_z|_{i+1,j}^{n-1}}{4} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.25b)$$

$$\begin{aligned} \approx & -\frac{\sin \theta}{c \varepsilon \Delta t} \left(\frac{Q_y|_{i,j}^n + Q_y|_{i-1,j}^n}{2} - \frac{Q_y|_{i,j}^{n-1} + Q_y|_{i-1,j}^{n-1}}{2} \right) \\ & + \frac{\sin^2 \theta}{c^2 \mu \varepsilon \Delta t} (P_z|_{i,j}^n - P_z|_{i,j}^{n-1}) \end{aligned} \quad (3.25c)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P_z^\sigma \approx \frac{\sigma}{\varepsilon} \frac{P_z|_{i,j}^n + P_z|_{i,j}^{n-1}}{2} \quad (2.27)$$

Um Gleichung (3.25a) zu erhalten, geht hierbei die Gleichungen (2.16)–(2.19) ein. Benutzt man nun die Gleichungen (2.23), (2.24), (3.25c), und (2.27) sowie die Gleichungen (2.20b), (2.20c) und (2.20e) für die Q -Komponenten, so

erhält man folgendes Zeitschritt-Schema:

$$dP_z^a|_{i,j}^n = k_1 \left(Q_y|_{i,j}^{n-1/2} - Q_y|_{i-1,j}^{n-1/2} - Q_x|_{i,j}^{n-1/2} + Q_x|_{i,j-1}^{n-1/2} \right) \quad (2.28)$$

$$Q_x|_{i,j}^n = Q_x|_{i,j}^{n-1} - k_2 \left(P_z|_{i,j+1}^{n-1/2} - P_z|_{i,j}^{n-1/2} \right) \quad (2.29)$$

$$Q_y^a|_{i,j}^n = Q_y|_{i,j}^{n-1} + k_2 \left(P_z|_{i+1,j}^{n-1/2} - P_z|_{i,j}^{n-1/2} \right) \quad (2.30)$$

$$P_z|_{i,j}^n = \frac{c_2}{c_1} P_z|_{i,j}^{n-1} + \frac{1}{c_1} dP_z^a|_{i,j}^n + \frac{c_3}{c_1} \left(Q_y^a|_{i,j}^n + Q_y^a|_{i-1,j}^n - Q_y^a|_{i,j}^{n-1} - Q_y^a|_{i-1,j}^{n-1} \right) \quad (2.31)$$

$$Q_y^b|_{i,j}^n = c_4 \left(P_z|_{i+1,j}^n + P_z|_{i,j}^n \right) \quad (2.32)$$

wobei die Koeffizienten lauten

$$\begin{aligned} k_1 &= \frac{\Delta t}{\varepsilon \Delta_{xy}} & k_2 &= \frac{\Delta t}{\mu \Delta_{xy}} \\ c_1 &= 1 - \frac{\sin^2 \theta}{c^2 \varepsilon \mu} + \frac{\sigma \Delta t}{2 \varepsilon} & c_2 &= 1 - \frac{\sin^2 \theta}{c^2 \varepsilon \mu} - \frac{\sigma \Delta t}{2 \varepsilon} \\ c_3 &= -\frac{\sin \theta}{2 \varepsilon c} & c_4 &= -\frac{\sin \theta}{2 \mu c} \end{aligned}$$

Wie in der oben beschriebenen Implementierung für nichtleitende Medien werden in jedem Zeitschritt alle Feldgrößen berechnet. Zur Steuerung kann die Formel (2.21) verwendet werden. Der Algorithmus (2.28)–(2.32) hat sich als stabil für alle Einfallswinkel zwischen 0° und 90° erwiesen. Um die Richtigkeit der berechneten Feldwerte zu überprüfen, wurden Reflexions- und Transmissionskoeffizienten für den Lichteinfall auf eine Materialgrenze berechnet und mit theoretischen Werten verglichen (s. Abb. 2.2). Hierbei zeigte sich, daß für Winkel unter 50° eine gute Übereinstimmung mit den theoretischen Werten erreicht wird. Über 50° allerdings ergibt sich eine mit zunehmendem Winkel anwachsende Abweichung.

2.2 Modifizierte Gesamtfeld-/Strefeld-Formulierung

Zur Einkopplung der Felder in den Simulationsbereich wurde in dieser Arbeit die in Abschnitt 1.2.1 beschriebene Gesamtfeld-/Strefeld-Methode verwendet. Allerdings sind leichte Modifikationen nötig, um sie auf die Hilfsfelder

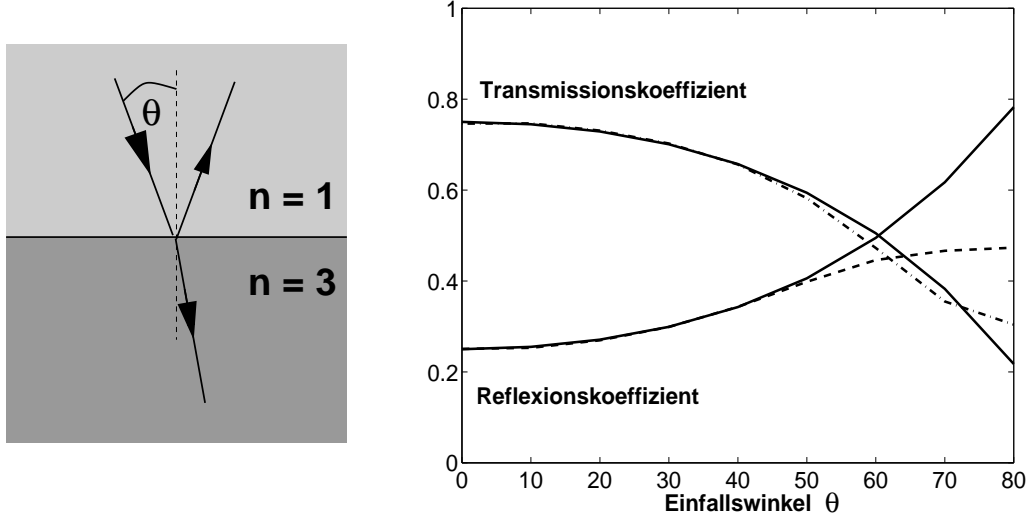


Abbildung 2.2: Reflexions- und Transmissionskoeffizienten an einer Materialgrenzfläche zwischen zwei Dielektrika. Die durchgezogenen Kurven geben die theoretischen Werte wieder, die punktierte und gestrichelte Linie die aus (2.28)–(2.32) resultierenden Werte.

P_z , Q_x und Q_y anwenden zu können. Entsprechend der Definition der Hilfsfelder in Gleichung (2.6) kann für die Anregung von P_z im Punkt (i, j) auf der Zonengrenze geschrieben werden

$$\begin{aligned}
 P_{z,inc}(i\Delta_x, j\Delta_y, n\Delta_t) &= E_{z,inc} \left(i\Delta_x, j\Delta_y, n\Delta_t + \frac{i\Delta_x \sin \theta}{c} \right) \\
 &= E_{z,0} \sin \left(k_x (i - i_0)\Delta_x + k_y (j - j_0)\Delta_y - \omega n\Delta_t - \omega \frac{i\Delta_x \sin \theta}{c} \right)
 \end{aligned} \tag{2.33}$$

Betrachtet man speziell die obere Gesamtfeld-/Streuung-Grenze ($j = j_0$, siehe Abb 1.4) und nimmt an, daß keine rechte und linke Grenze vorhanden sind, d.h. daß sich die Gesamtfeld-Zone links und rechts bis zum Rand des Simulationsgebietes erstreckt ($i_0 = 0$), so vereinfacht sich Gleichung (2.33) zu

$$\begin{aligned}
 P_{z,inc}^{oben}(i\Delta_x, j\Delta_y, n\Delta_t) &= E_{z,0} \sin \left(k_x i\Delta_x - \omega n\Delta_t - \omega \frac{i\Delta_x \sin \theta}{c} \right) \\
 &= E_{z,0} \sin \left(\frac{\omega \sin \theta}{c} i\Delta_x - \omega n\Delta_t - \omega \frac{i\Delta_x \sin \theta}{c} \right) \\
 &= E_{z,0} \sin (-\omega n\Delta_t)
 \end{aligned} \tag{2.34}$$

Dies bedeutet, daß alle Punkte der oberen Grenzlinie mit derselben Phase angeregt werden. Für die untere Grenze ($j = j_{max}$) kommt noch ein konstanter Phasenterm hinzu:

$$\begin{aligned} P_{z,inc}^{unten}(i\Delta_x, j\Delta_y, n\Delta_t) &= E_{z,0} \sin(k_y(j_{max} - j_0)\Delta_y - \omega n\Delta_t) \\ &= E_{z,0} \sin\left(\frac{\omega \cos \theta}{c}(j_{max} - j_0)\Delta_y - \omega n\Delta_t\right) \end{aligned} \quad (2.35)$$

Entsprechende Überlegungen gelten auch hier wieder für die Q -Komponenten.

2.3 Modifizierte Absorbierende Randbedingungen

Um den Simulationsbereich an seinem oberen und unteren Ende reflexionsfrei abzuschneiden, wurde der in Abschnitt 2.1.3 beschriebene Algorithmus mit absorbierenden Randbedingungen nach Liao (vgl. Abschnitt 1.4.2) kombiniert. Diese haben den Vorteil, daß zur Berechnung der Randpunkte nur Punkte auf einer Linie senkrecht zum Rand verwendet werden. D.h. nur Punkte werden verwendet, in denen die Hilfsfelder die gleiche Phase $k_x x$ haben (vgl. (2.2)), und nur Feldamplituden aus dem gleichen Zeitschritt, die bereits berechnet wurden. Die Verwendung absorbierender Randbedingungen nach Mur für die Floquet-transformierten Feldgrößen führt hingegen zu einem Gleichungssystem für die Randwerte, das in jedem Schritt zu lösen wäre. Dies sollte nach Möglichkeit vermieden werden. Die Verwendung von absorbierenden Randbedingungen nach Berenger (vgl. Abschnitt 1.4.3) wäre auch möglich, jedoch ist der Implementierungsaufwand größer als bei Liao-Randbedingungen. Um diesen Aufwand zu vermeiden, wurden Liao-Randbedingungen verwendet. Hierbei zeigte sich in numerischen Versuchen, daß als guter Mittelwert für den Parameter α der Wert $\alpha = 0.45$ eingesetzt werden kann.

Wie in Abb. 2.3 zu sehen ist, tritt bei der Anregung mit einem Gaußpuls für lange Zeiten eine numerische Instabilität auf. Bei Anregung mit periodischen Signalen ist eine solche Instabilität auch für sehr große Zeiten nicht zu beobachten. Es scheint sich hierbei um eine Empfindlichkeit des Verfahrens gegenüber Signalen mit kleiner oder verschwindender Frequenz zu handeln, wie sie in [13] für andere absorbierende Randbedingungen beschrieben wird. Lösung könnte auch hier die Einführung eines künstlichen Dämpfungsterms sein. Eine genaue Analyse der beschriebenen Instabilität sollte Gegenstand weiterer Forschung sein. Im vorliegenden Fall werden nur zeitlich unbegrenzte periodische Signale vergleichsweise hoher Frequenz angeregt, weshalb Instabilitäten im Niederfrequenz-Verhalten nicht relevant sind.

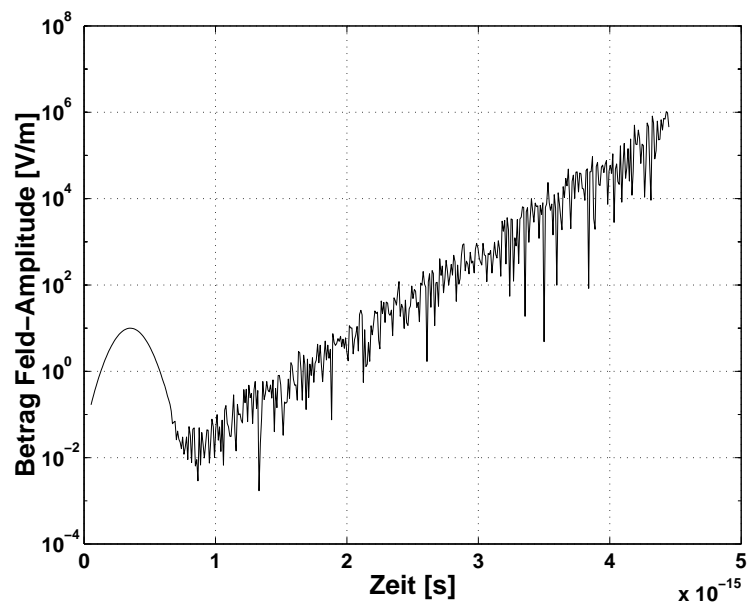


Abbildung 2.3: Instabilität durch Liao-ABC. Aufgetragen ist der zeitliche Verlauf des Amplitudenbetrags des elektrischen Feldes. Für gegen Null gehende Frequenz der Felder (hier: Felder konstant Null nach dem Gaußpuls) tritt ein unbegrenztes Anwachsen der Feldamplituden ein, das durch eine Instabilität der absorbierenden Randbedingungen verursacht wird.

3 Anwendung auf optoelektronische Bauelemente

3.1 Metall-Halbleiter-Metall(MSM)-Photodetektor

MSM-Photodetektoren (von englisch: Metal-Semiconductor-Metal-Photodetector) haben verschiedene Eigenschaften, die sie besonders interessant machen z.B. für die Anwendung in der optischen Telekommunikation. Neben einer sehr kurzen Ansprechzeit sind dies ihre hohe Empfindlichkeit und der geringe Dunkelstrom.

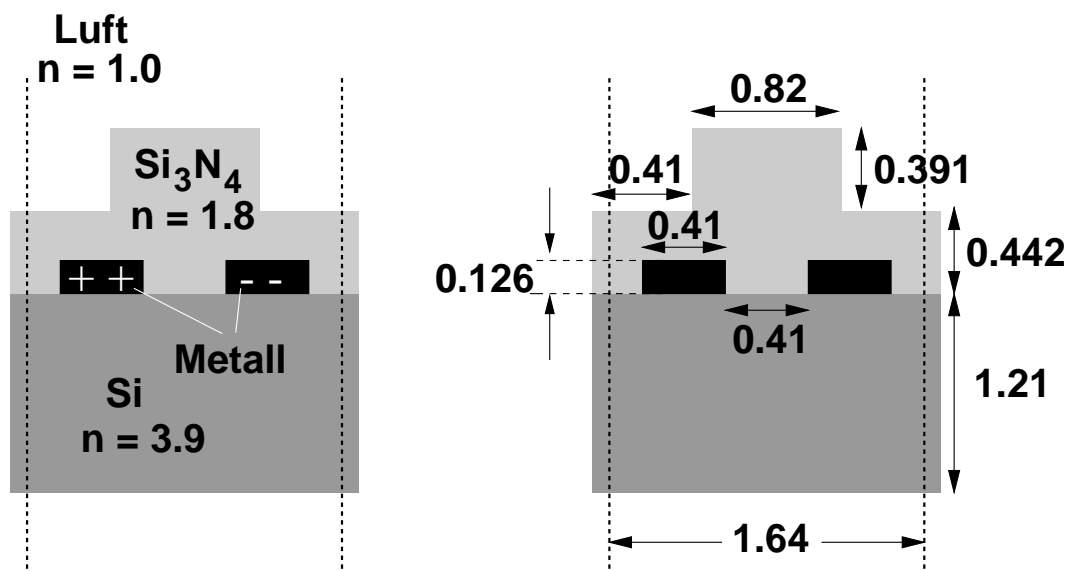


Abbildung 3.1: Schematischer Aufbau einer räumlichen Periode eines MSM-Photodetektors. Alle Maßangaben sind in Mikrometern.

Aufbau und Funktionsweise

Im wesentlichen bestehen MSM-Photodetektoren aus einem Feld stabförmiger Metallelektroden auf einem Halbleitersubstrat (Schottky-Kontakte) und eventuell einer Einkopplungsoptik (s. Abb. 3.1). Lichteinfall in das Halbleitersubstrat führt zur Erzeugung von Ladungsträgerpaaren, die die Leitfähigkeit im Substrat erhöhen und damit einen Stromfluß zwischen den Metallelektroden ermöglichen. Dieser Effekt kann zur Lichtdetektion verwendet werden. Entscheidend für die Ansprechzeit eines MSM-Detektors ist die Laufzeit, die die Ladungsträger benötigen, um im Substrat die Strecke bis zu den Elektroden zurückzulegen. Infolgedessen kann durch Verringerung des Abstandes zwischen den Elektroden die Ansprechzeit verbessert werden. Dabei wird jedoch gleichzeitig durch verstärkte Abschattung die Ausbeute an Ladungsträgerpaaren schlechter und damit die Empfindlichkeit des Detektors geringer. Ein optimales Layout zu erreichen, ist ein Problem, bei dessen Lösung Computersimulationen von großem Nutzen sind. Generell hat auch die genaue Intensitätsverteilung im Substrat Einfluß auf die Ansprechcharakteristik, nicht nur die integrale Intensität [10]. Speziell bei schrägen Einfall von Licht wäre zu erwarten, daß die unterschiedlichen Beweglichkeiten von Elektronen und Löchern im Halbleitersubstrat die Ansprechcharakteristik für verschiedene Winkel verändern. Elektronen sind ungefähr dreimal so beweglich wie Löcher. Eine Optimierung des Ortes, an dem die Ladungsträgerpaare im Substrat erzeugt werden, könnte die Charakteristik verbessern. Vorstellbar wäre zum Beispiel, eine unsymmetrische Einkopplungsoptik zu verwenden, so daß das Licht für verschiedene Winkel auf denselben Punkt fokussiert wird und so der entstehende Strompuls immer nach möglichst kurzer Zeit einen maximalen Wert annimmt, d.h. daß möglichst viele Ladungsträger gleichzeitig die Elektroden erreichen.

Simulationen

Die letztgenannte Problemstellung kann nun mit Hilfe des in dieser Diplomarbeit entwickelten und implementierten Programmmoduls untersucht werden. Für beliebige Einfallswinkel zwischen 0° und 90° kann die Lichtintensität und daraus die Ladungsträgergenerationsrate im Halbleitersubstrat berechnet werden. Ray-Tracing-Methoden eignen sich hierzu nicht, denn üblicherweise sind die Abstände der Elektroden in der Größenordnung des einfallenden Lichts, weshalb Beugungs- und Interferenzeffekte eine Rolle spielen, die mit diesen Methoden nicht erfaßt werden. Aus diesem Grund muß ein Verfahren verwendet werden, das die Lichtausbreitung als Lösung der Maxwellgleichungen rigoros simuliert.

Für die im Rahmen dieser Diplomarbeit durchgeführten optischen Simulationen wurde ein MSM-Layout gemäß Abb. 3.1 angenommen: auf einem Siliziumsubstrat mit einem komplexen Brechungsindex von $n_{Si} = 3.906 + 0.022i$ befinden sich Metallelektroden, darüber ein Einkopplungsgitter aus Si_3N_4 mit einem Brechungsindex von $n_{Si_3N_4} = 1.8$. Oberhalb der MSM-Struktur befindet sich Luft. Die gezeigte Struktur wird als seitlich unendlich periodisch fortgesetzt betrachtet, die Metallkontakte als perfekt leitend. Für einige Winkel ist in Abb. 3.3 die Lichtintensität im zeitharmonischen Zustand gezeigt, wie sie mit der entwickelten Software errechnet wurden. Die Berechnungen erfolgten auf einem quadratischen Yee-Gitter mit 258×519 Gitterpunkten und einem Gitterabstand von 6.34 nm. Dies entspricht ungefähr 25 Zellen pro Wellenlänge im Silizium bei einer Wellenlänge des einfallenden Lichts von 630 nm. Die Rechnungen wurden jeweils abgebrochen nach Erreichen des zeitharmonischen Zustandes, d.h. wenn sich die Feldamplituden in zwei Rechenschritten, die eine Schwingungsperiode des einfallenden Lichtes auseinanderlagen, um nicht mehr als einen Faktor $8 \cdot 10^{-3}$ unterschieden. Dies war nach 5700 bis 12000 Rechenschritten der Fall, je nach Einfallswinkel und damit zusammenhängend der Zeitschrittweite. Anschließend wurden jeweils die Intensitätswerte im gesamten Simulationsbereich gemäß Gleichung (2.10) berechnet. Ausgehend von diesen Werten können Ladungsträgergenerationsraten nach Gleichung (2.14) berechnet und damit elektronische Vorgänge im Siliziumsubstrat simuliert werden. Solche Simulationen können z.B. mit dem Halbleitersimulator `DESSIS-ISE` (aus dem TCAD-Paket der Firma ISE AG, Zürich) durchgeführt werden, der im Rahmen dieser Diplomarbeit zur Simulation einer CCD-Zelle verwendet wurde (siehe Abschnitt 3.2). Im Fall des MSM-Photodetektors wurden keine elektronischen Simulationen durchgeführt.

Ergebnisse

Im folgenden sind einige Ergebnisse der optischen Simulationen aufgeführt, die für den MSM-Photodetektor gemacht wurden. In Abb. 3.3 sind die Intensitätsverteilungen im Detektor für verschiedene Einfallswinkel des Lichtes zu sehen, wie sie sich im zeitharmonischen Zustand ergeben. Wie zu erwarten verschiebt sich das Maximum der Intensität nach rechts für wachsende Winkel. In Abb. 3.2 ist die Intensität auf der in Abb. 3.3(a) eingezeichneten punktierten Linie aufgetragen für vier Winkel. Die stärkste Verschiebung des Intensitätsmaximums ist zwischen 0° und 5° zu beobachten. Außerdem tritt einen leichten Anstieg des Maximalwertes der Intensitätsverteilung auf bei gleichzeitiger Verringerung der Breite der Verteilung. Wie sich die Ausbeute an freigesetzten Ladungsträgern und damit die Empfindlichkeit der Zelle aufgrund dieses Effekts ändert, ist nicht ohne weiteres ersichtlich. Dazu ist der Effekt zu klein. Hier könnte durch eine Simulation der elektronischen Vorgänge

im Halbleitersubstrat Klarheit geschaffen werden. Zwischen 5° und 30° bleibt die Position des Maximums fast unverändert bei abnehmender Höhe. Deutlich zu sehen ist auch das Auftreten eines um die halbe räumliche Periode verschobenen Intensitätsmaximums (linker/rechter Rand in Abb. 3.3(d)) bei einem Einfallswinkel von 15° . Aufgrund der Geometrie von Einkopplungsoptik und Elektroden tritt hier offensichtlich wieder ein konstruktiver Interferenzeffekt auf, was zur Verbesserung der Empfindlichkeit des Detektors bei Einfallswinkeln um 15° führt. Für 30° ist die Intensität des in das Substrat eingekoppelten Lichtes und damit die Empfindlichkeit des Detektors nur noch sehr gering.

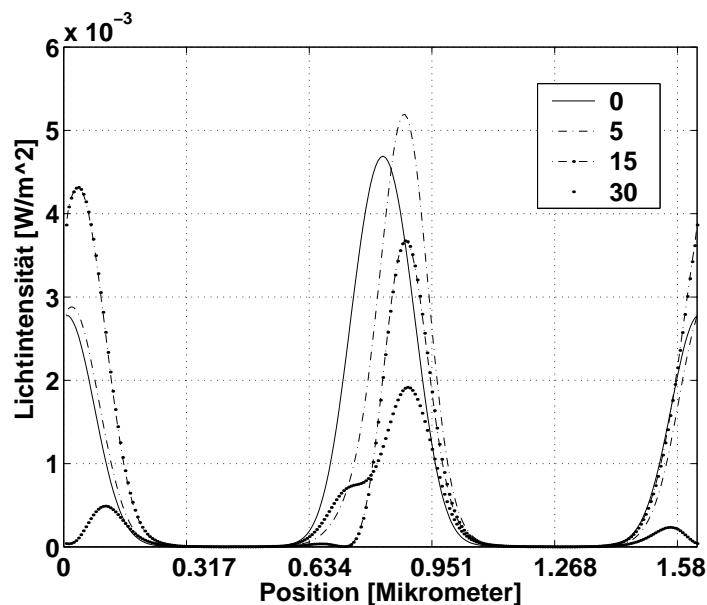


Abbildung 3.2: Lichtintensität auf der in Abb. 3.3(a) punktiert eingezeichneten Linie für Einfallswinkel von 0° , 5° , 15° , 30° .

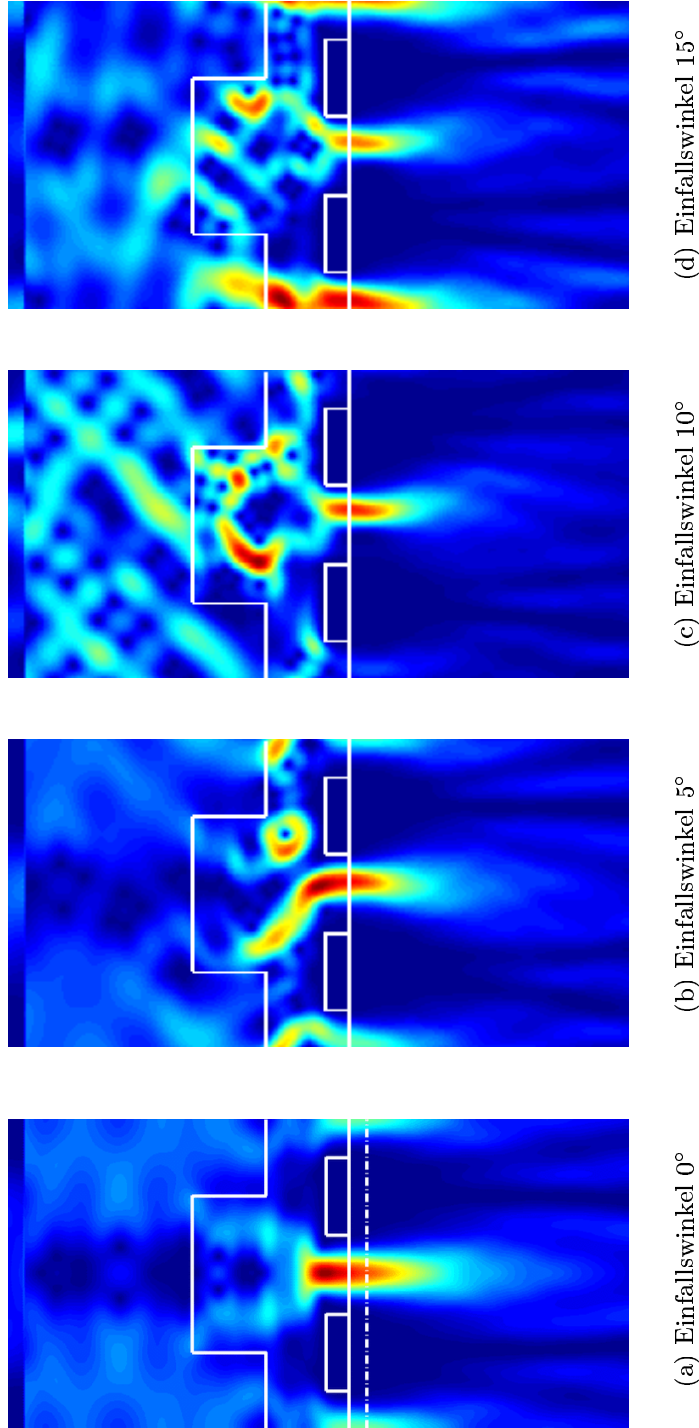


Abbildung 3.3: Lichtintensität in einer MSM-Photodetektorzelle im stationären Zustand für verschiedene Einfallswinkel. Das Licht mit einer Wellenlänge von $\lambda = 630 \text{ nm}$ fällt von links oben ein. Die Einfallswinkel sind angegeben als Abweichung von der Normalen. Die Intensitätsverläufe auf der in Abb. 3.3(a) punktiert eingezeichneten Linie sind für die Winkel 0° , 5° , 15° und 30° in Abb. 3.2 aufgetragen. (Fortsetzung auf der nächsten Seite)

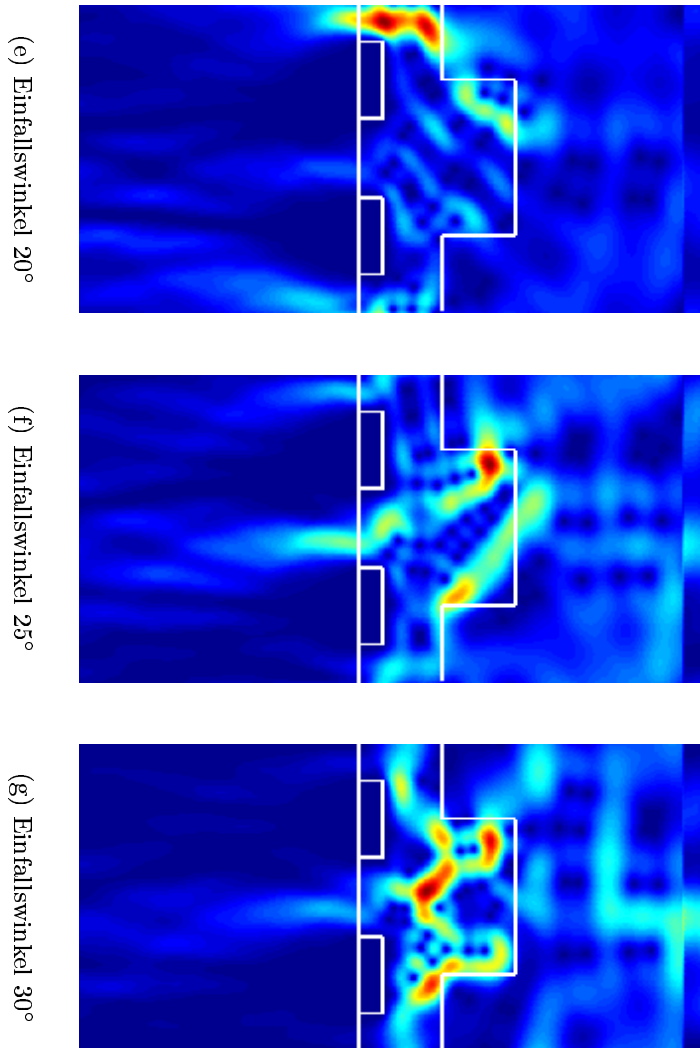


Abbildung 3.3: Fortsetzung.

3.2 Charge-Coupled-Device(CCD)-Zelle

Zweites Beispiel für die Anwendung der in dieser Diplomarbeit entwickelten Software sind drei vereinfachte CCD-Zellen, die bezüglich ihrer Effizienz bei verschiedenen Lichteinfallswinkeln verglichen werden sollen.

Aufbau und Funktionsweise

Ein CCD besteht im wesentlichen aus einem Raster von Bildelementen (ca. 500×500). Jedes dieser Elemente verhält sich bei Beleuchtung als Potentialtopf, in dem sich Leitungselektronen sammeln. Die Leitungselektronen bzw. Elektron-Lochpaare werden hierbei durch einfallendes Licht in einem Halbleitersubstrat erzeugt und an einem p-n-Übergang getrennt. In einem Ausleseschritt werden die Potentialtöpfe zeilenweise und nacheinander geleert, was an jedem Zeilenende eine Folge von Strompulsen verursacht. Diese Pulsfolge kann dann zur Rekonstruktion des Bildes weiterverarbeitet werden.

In Abb. 3.4 sind die in dieser Simulation verwendeten Geometrien abgebildet. Gezeigt ist jeweils eine räumliche Periode eines CCD-Rasters. Alle betrachteten Zellen bestehen aus einem Siliziumsubstrat mit unterschiedlich dotierten Regionen, einer Siliziumoxid-Schicht mit darin eingebetteten Gatekontakten aus Poly-Si, einer Siliziumnitridschicht und einer Metallschicht. Die Zellen unterscheiden sich nur in den oben liegenden Einkopplungsoptiken: Mikrolinsen aus Siliziumdioxid, die das einfallende Licht durch die Öffnung des Metallschildes auf die darunterliegenden aktiven Regionen des Siliziumsubstrats bündeln sollen. Die unterschiedlichen Geometrie-Parameter l , r und h der drei Einkopplungsoptiken sowie die daraus resultierenden Brennweiten f sind in Tabelle (4.1) zusammengestellt. Der komplexe Brechungsindex des Silizium wird wie im vorigen Abschnitt mit $n_{Si} = 3.906 + 0.022i$ angenommen, der Brechungsindex des Siliziumdioxids mit $n_{SiO_2} = 1.5$. Die Metallschilde werden wiederum als perfekte Leiter betrachtet.

Das Dotierungsprofil des Siliziumsubstrats ist in Abb. 3.5 gezeigt. Für die p^+ -Region wurde eine Dotierung mit Bor angenommen, für die n^- -Region mit Phosphor. Die p^+ -Region und die n^- -Region unterhalb der Öffnung des Metallschildes stellen eine Diode dar, an deren p-n-Übergang die Trennung von optisch erzeugten Elektronen und Löchern erfolgt. Diese Diode ist verantwortlich für die Lichtdetektion in der CCD-Zelle und wird im weiteren als Sensor-Region bezeichnet. Die abgeschirmte n^- -Region rechts ist für die Charge-Coupled-Vorgänge zuständig. Sie wird als VCCD-Region bezeichnet.

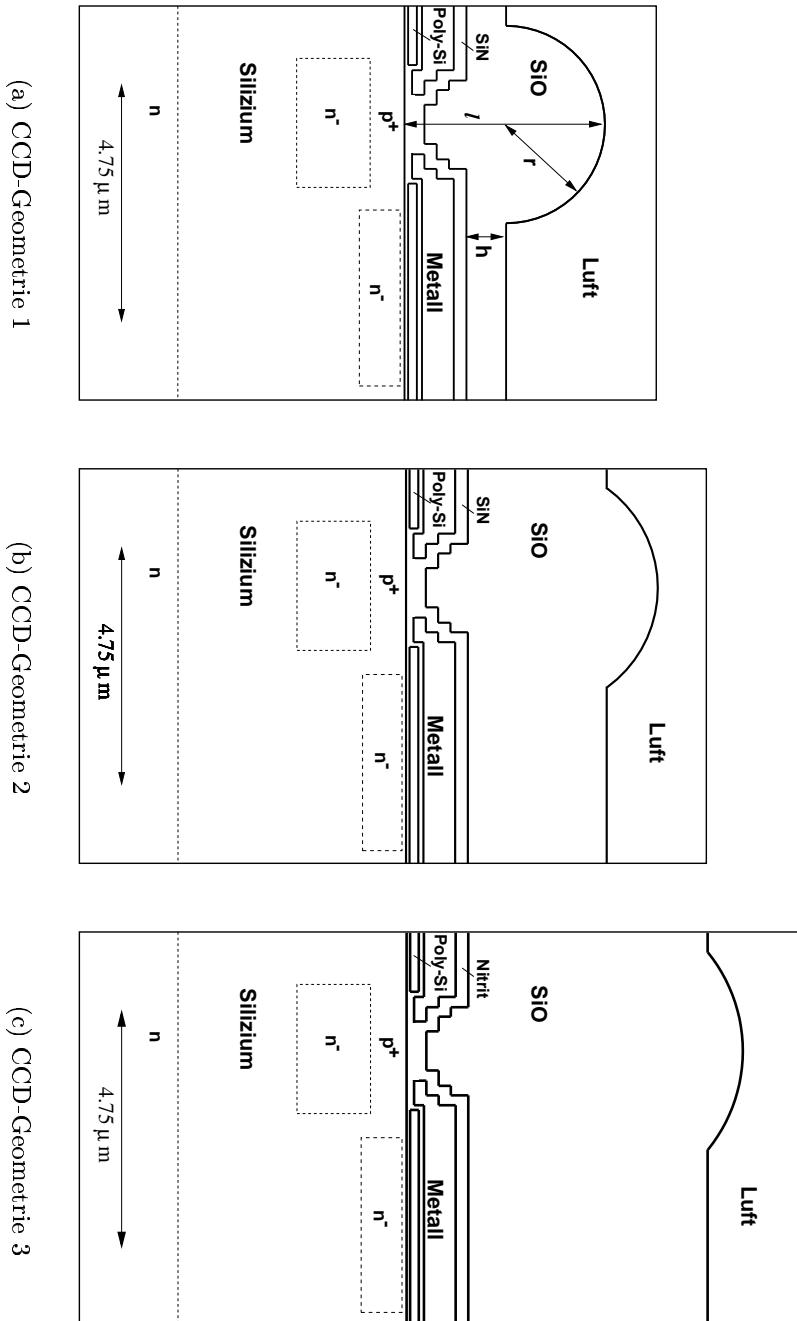


Abbildung 3.4: Unterschiedliche Geometrien für die CCD-Simulation. Die verschiedenen Layouts sind bis auf ihre Einkopplungs-Optiken identisch. Die Parameter r , l und h der drei Geometrien sind in Tabelle 3.2 aufgeführt.

	l	r	h	f
Geometrie 1	4.0 μm	2.0 μm	0.75 μm	6.0 μm
Geometrie 2	5.0 μm	2.5 μm	2.75 μm	7.5 μm
Geometrie 3	6.7 μm	3.2 μm	4.75 μm	9.6 μm

Tabelle 3.1: Geometrie-Parameter für die CCD-Zellen aus Abb. 3.4. *Quelle:* [14]

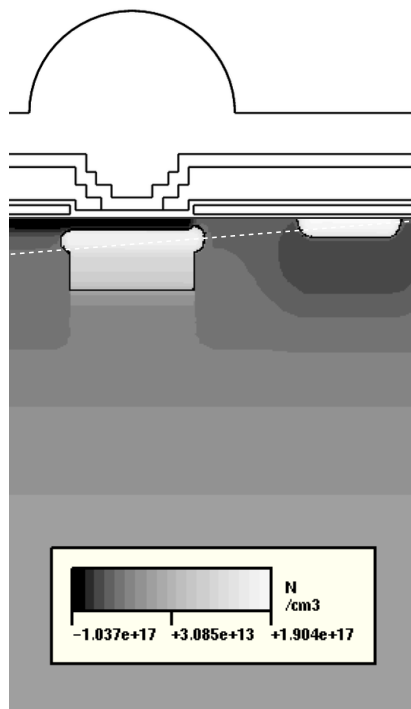


Abbildung 3.5: Dotierungsprofil der CCD-Zellen aus Abb. 3.4. Angegeben ist die Konzentration ionisierter Dotieratome. Negativer Wert: p-Dotierung, positiver Wert: n-Dotierung. Entlang der weiß eingezeichnete Linie werden später Schnitte durch Dichte- und Potentialverteilung gemacht.

Simulationsablauf

Die Simulationen wurden in folgender Weise ausgeführt: Das im Rahmen dieser Diplomarbeit entwickelte Programmmodul wurde mit den oben angegebenen Geometriedaten gestartet und die optische Simulation durchgeführt. Als Ergebnis aus dieser Simulation wurden Intensitätsverteilungen und Ladungsträgergenerationsraten abgespeichert zur weiteren Verwendung in der elektronischen Simulation. Das Halbleitersimulationsprogramm `DESSIS-ISE` wurde mit diesen Daten und dem angegebenen Dotierungsprofil gestartet. Während des Programmdurchlaufes wurden zu verschiedenen Zeitpunkten Größen wie Ladungsträgerdichte- und Potentialverteilung abgespeichert. Die grafische Nachbearbeitung der Ergebnisse erfolgte mit dem Programm `PICASSO-ISE`. Im folgenden werden die Simulationsschritte im einzelnen beschrieben und die Ergebnisse aufgeführt.

3.2.1 Optische Simulation

Die optischen Simulationen wurden auf quadratischen Gittern ausgeführt, mit 996×872 , 996×996 bzw. 996×1208 Gitterpunkten bei einer Gitterkonstanten von jeweils 8.027 nm. Die Wellenlänge des einfallenden Lichts wurde mit 450 nm angenommen bei einer Intensität von $1.62 \frac{\mu\text{W}}{\text{cm}^2}$. Die Lichteinstrahlung erfolgte jeweils von links oben, wobei die im folgenden angegebenen Winkel immer die Abweichung zur Senkrechten angeben. Durchgeführt wurde die optische Simulation im Siliziumsubstrat nur bis zu einer Tiefe von $2 \mu\text{m}$, was ungefähr der in [15] angegebenen Eindringtiefe für diese Wellenlänge in Silizium entspricht. Die Rechnungen wurden jeweils bis zum Erreichen eines zeitharmonischen Zustandes durchgeführt (siehe Abschnitt 3.1). Abgebrochen wurden sie bei einem maximalen relativen Fehler von $8 \cdot 10^{-3}$ zwischen Feldamplituden, die eine Periode auseinanderlagen. Hierzu wurden zwischen 2700 und 4150 Zeitschritten benötigt, je nach Größe des Gitters und Einfallswinkel. Anschließend wurden Intensitätsverteilungen (gemäß Gleichung (2.10)) und Ladungsträgergenerationsraten (gemäß Gleichung (2.14)) im Substrat bestimmt und für die Weiterverwendung in den elektronischen Simulationen abgespeichert. Einige Ergebnisse der optischen Simulationen sind exemplarisch in den Abbildungen 3.6 bis 3.8 gezeigt. In Abb. 3.7 und 3.8 ist deutlich zu sehen, wie sich die Maxima der Ladungsträgergenerationsraten entsprechend größer werdender Einfallswinkel seitlich verschieben. Die Höhe der Maxima nimmt dabei ab. Dieser Effekt ist zu erwarten, da für größere Winkel mehr Licht auf die Metallschilde fokussiert wird und damit verlorenght.

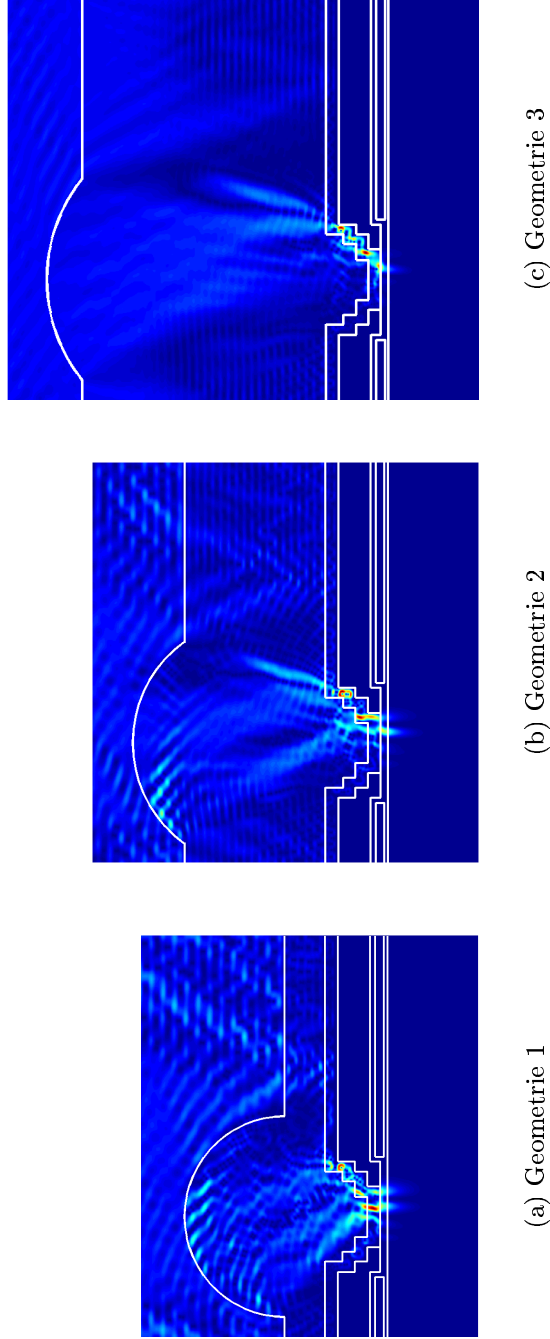


Abbildung 3.6: Ergebnisse der optischen CCD-Simulation für den Einfallswinkel 15° bei einer Wellenlänge des einfallenden Lichts von $\lambda = 450 \text{ nm}$. Gezeigt sind die Intensitätsverteilungen im zeitlichen Zustand.

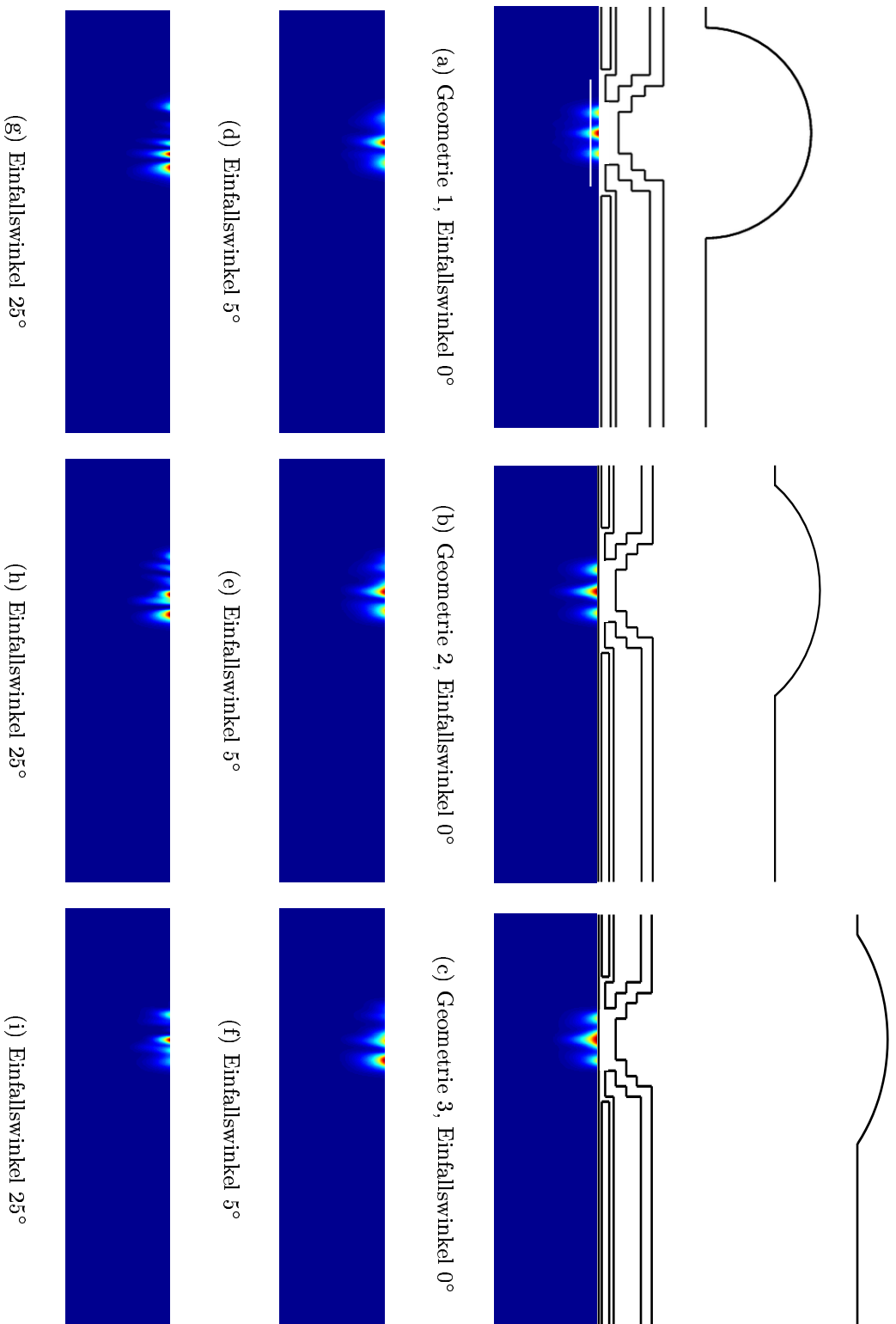
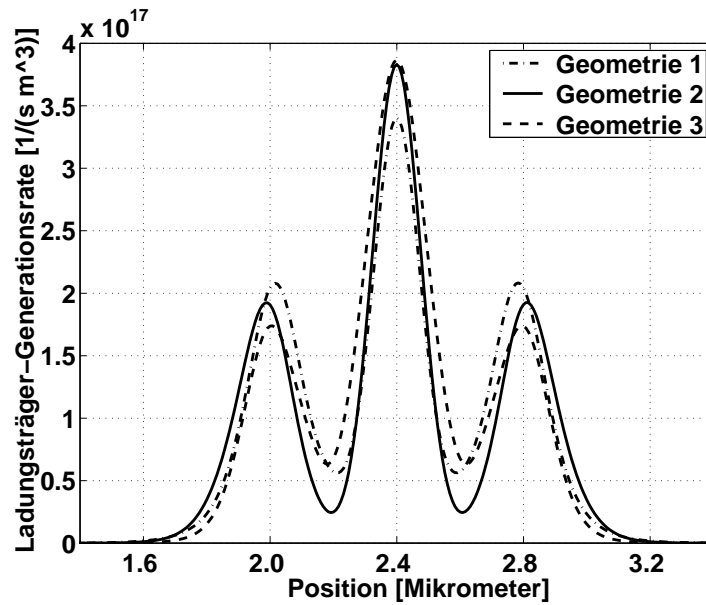
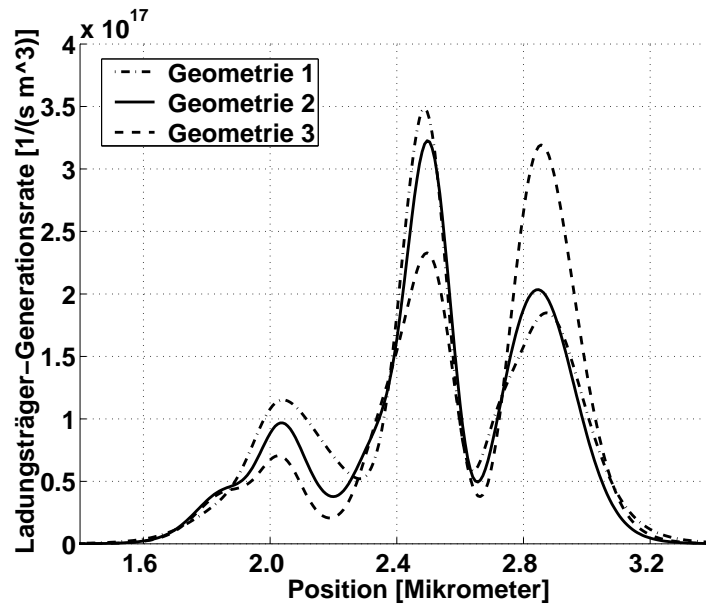


Abbildung 3.7: Ladungsträgergenerationsraten im Siliziumsubstrat im zeitharmonischen Zustand.

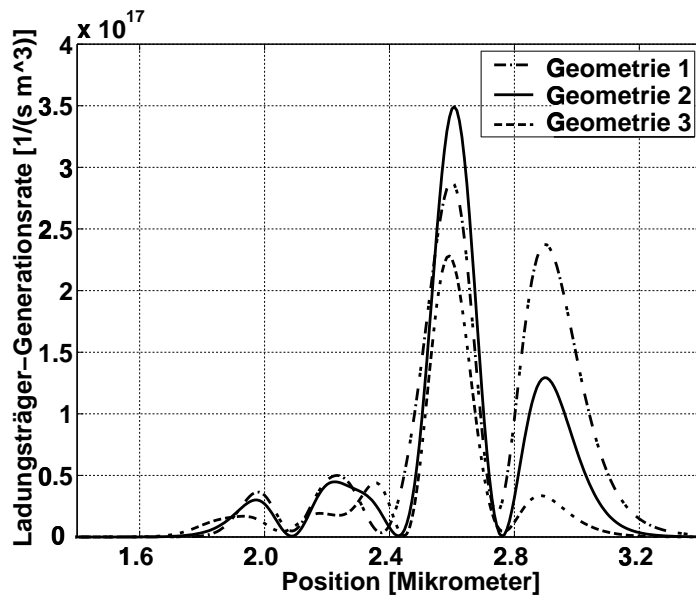


(a) Einfallswinkel 0°

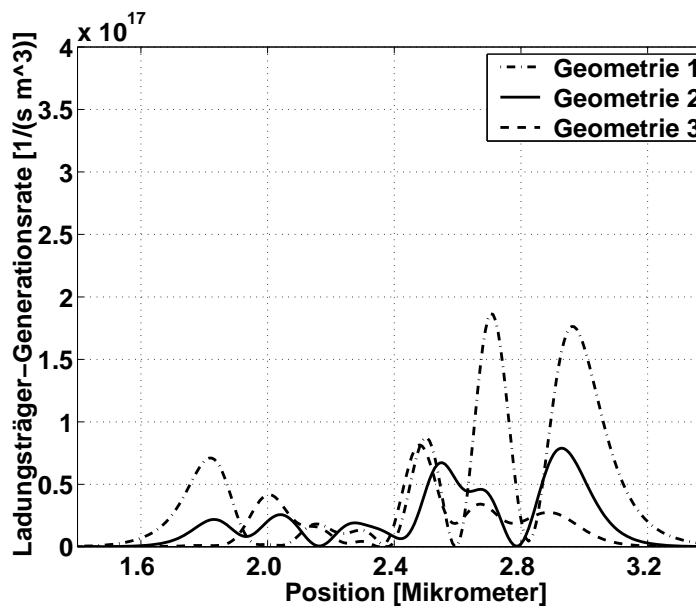


(b) Einfallswinkel 5°

Abbildung 3.8: Vergleich der Ladungsträger-Generationsraten entlang der in Abb. 3.7(a) weiß eingezeichneten Linie für verschiedene Winkel. (Fortsetzung nächste Seite)



(c) Einfallswinkel 15°



(d) Einfallswinkel 25°

Abbildung 3.8: Fortsetzung.

3.2.2 Elektronische Simulationen

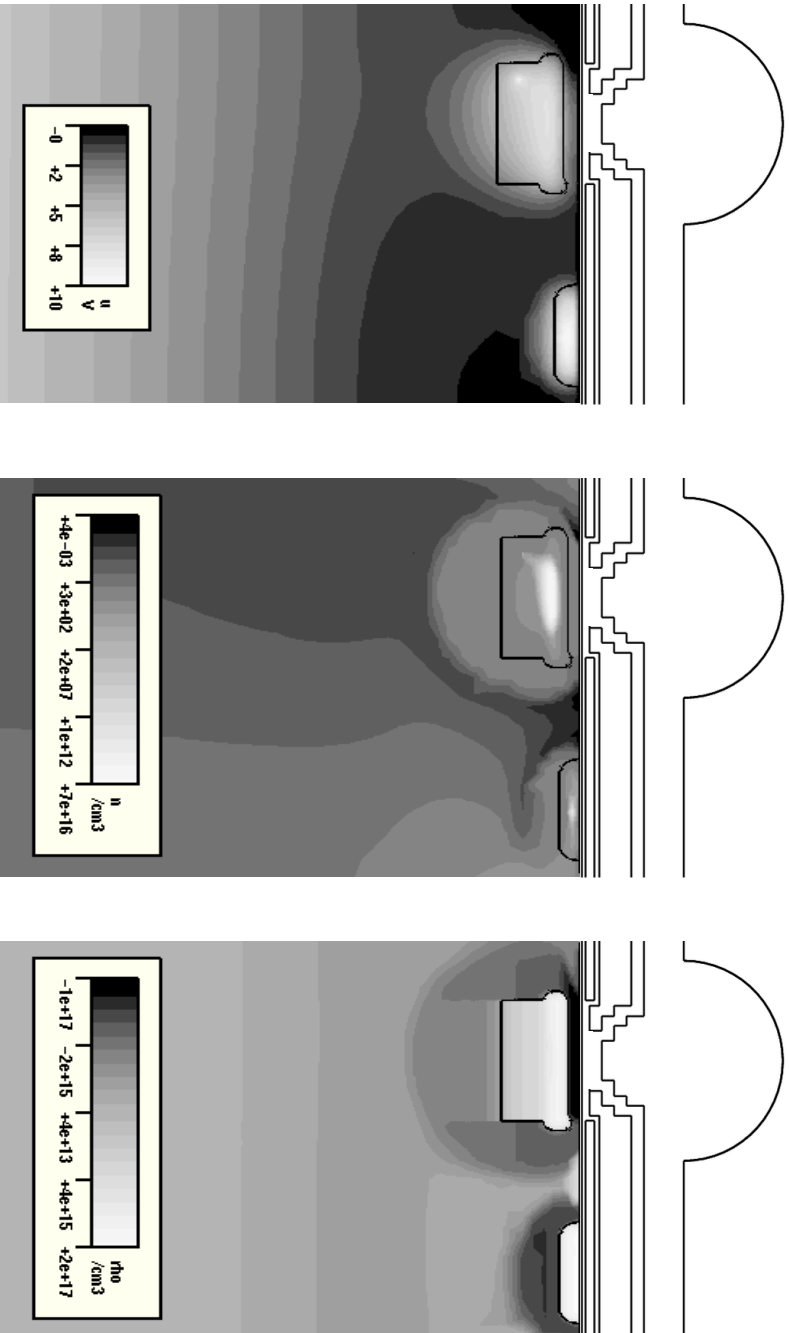
Die elektronischen Simulationen des Siliziumsubstrats wurden mit dem Programm DESSIS-ISE in drei Schritten durchgeführt. Hierbei wurden in jedem Schritt simultan die Poissongleichung sowie die Elektronen- und Löcher-Kontinuitätsgleichung iterativ mit einem Newtonverfahren gelöst. Erster Simulationsschritt war die Erzeugung der Anfangsbedingungen, d.h. der Ladungsträgerdichte- und Potentialverteilung im Siliziumsubstrat zu Beginn der tatsächlichen Simulation. Zweiter Schritt war die Beleuchtungsphase, während derer die Ladungsträgerpaare erzeugt und Elektronen in der Sensorregion angesammelt wurden. Als dritter Simulationsschritt schloß sich eine Phase des Auslesens der angesammelten Ladung an.

1. Erzeugung der Anfangsbedingungen

Im ersten Simulationsschritt wurden zur Erzeugung der Anfangsbedingungen die Elektronen aus den n^- -Regionen entfernt. Hierzu wurden in die VCCD-Region und den n^- -Bereich der Sensor-Region Hilfskontakte eingebracht, die nur zur Erzeugung der Ausgangsbedingungen benutzt und vor der eigentlichen Simulation wieder entfernt wurden. Diese Hilfskontakte wurden auf ein Potential von 10V gelegt, während die Poly-Si-Gates und der p^+ -Bereich der Sensor-Region auf 0V gelegt wurden. Der Boden des Siliziumsubstrats wurde ebenfalls auf ein Potential von 10V gebracht. Nach Erreichen des stationären Zustandes ergaben sich elektrostatisches Potential und Elektronendichteverteilung sowie Raumladung wie in Abb. 3.9 gezeigt.

2. Ladungsträgererzeugung

Ausgehend vom im ersten Schritt erzeugten Anfangszustand wurde im zweiten Simulationsschritt die Ansammlung von Elektronen in der Sensorregion während der Beleuchtung simuliert. Hierzu wurden die in der optischen Simulation berechneten Ladungsträgergenerationsraten verwendet. Angenommen wurde eine Beleuchtung über einen Zeitraum von 17 ms. Wie bereits oben beschrieben, wurden hierbei die in der p-n-Übergangsschicht der Sensor-Region erzeugten Ladungsträgerpaare aufgrund der Potentialverhältnisse getrennt. Die Elektronen sammelten sich im n^- -Bereich der Sensor-Region. Dies ist in den Abbildungen 3.10 und 3.11 zu sehen für die Geometrien 1 und 3 jeweils bei einem Einfallswinkel von 0° und 15° . Aufgetragen sind jeweils Schnitte durch die Elektronendichteverteilungen zu den Zeiten 0 ms und 17 ms sowie die Differenzwerte, d.h. die durch die Beleuchtung verursachten Änderungen



(a) Mit -1 multipliziertes Elektrostatistisches Potential

(b) Elektronendichte

(c) Raumladung

Abbildung 3.9: Elektrostatistisches Potential, Elektronendichte und Raumladung zu Beginn der CCD-Simulation.

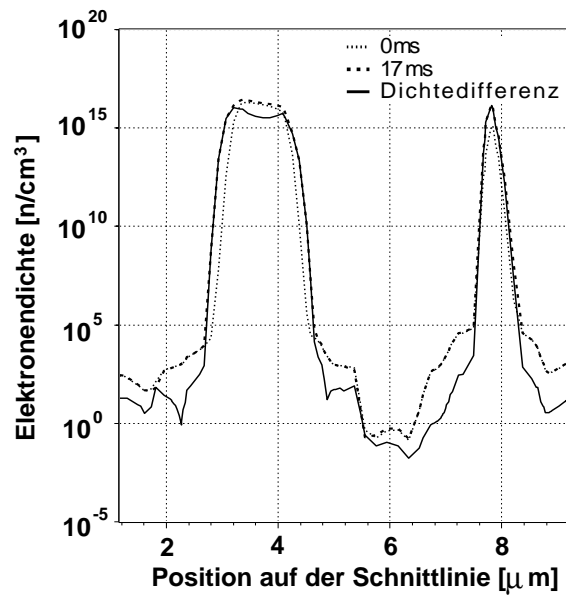
in den Elektronendichten. Man sieht in den Abbildungen, daß für die Lichtwellenlänge von 450 nm, die für die durchgeführten Simulationen gewählt wurde, die Effekte klein sind, die sich aus den Unterschieden in den Geometrien ergeben. Zwischen den Differenzkurven in Abb. 3.10(a) und 3.10(b) besteht nur ein geringer Unterschied. Um zu sehen, welche Wirkung dieser Unterschied in den Elektronendichten auf die Gesamtausbeute an Leitungselektronen hat, müssen die Dichten aufintegriert werden. Abb. 3.15 zeigt den Vergleich aller drei Geometrien bei Einfallswinkeln von 0° bis 25° . Jeweils in der linken Hälfte jeder Teilgrafik ist die aufintegrierte Elektronendichte in Sensor- und VCCD-Region während des Beleuchtungsvorgangs aufgetragen. In der rechten Hälfte ist jeweils dasselbe für den Auslesevorgang zu sehen. Letztere Ergebnisse werden im nächsten Teil erläutert.

Die Unterschiede zwischen den Geometrien 1 und 3 in der Gesamtelektronenausbeute zeigen sich in Abb. 3.15(d). Die Anzahl der gesammelten Elektronen wächst für Geometrie 1 deutlich stärker als für Geometrie 3. Am Ende der Beleuchtungszeit ist somit die Ausbeute bei Geometrie 1 höher. Der gleiche Effekt tritt bei allen Winkeln über 5°

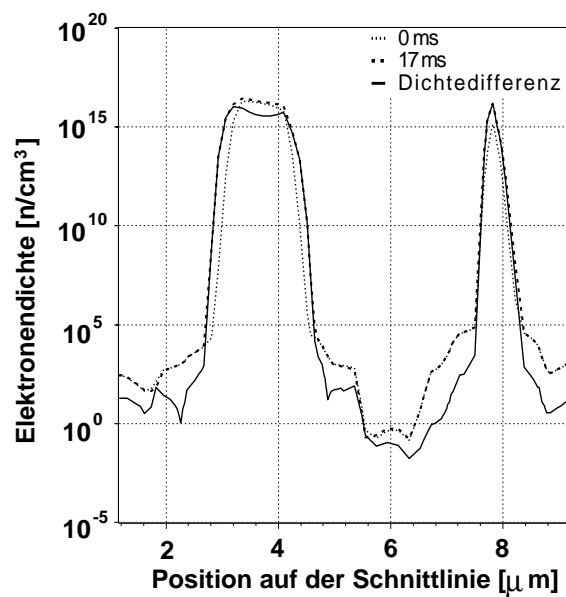
3. Auslesevorgang

Im dritten Schritt wurden die Elektronen, die sich im n^- -Bereich der Sensor-Region angesammelt hatten, ausgelesen. Anders als im tatsächlichen Betrieb, wurde hierbei angenommen, daß die Zelle während des Auslesevorgangs (17 ms bis 30 ms) nicht mehr beleuchtet wird. Zum Auslesen wurde die Spannung, die an den Poly-Si-Gates anlag, innerhalb einer Mikrosekunde in mehreren Schritten von 0V auf 15V erhöht und dann konstant gehalten. Nach einem Ausleseprozeß von 30 ms wurde die Simulation jeweils beendet. Der n^- -Bereich der Sensor-Region und die VCCD-Region bilden zusammen mit der p^+ -Region dazwischen einen MOSFET-Transistor mit unkontaktiertem Kollektor und Emitter. Was während des Auslesevorgangs geschieht, ist in Abb. 3.12 exemplarisch für Geometrie 1 zu sehen. Die Elektronen aus dem Sensor-Bereich werden aufgrund des niedrigeren Potentials verglichen mit der VCCD-Region und der positiven Spannung am Poly-Si Gate in Richtung der VCCD-Region transportiert. Der Transport hört auf, sobald ein Ausgleich der Potentiale erreicht ist. In einer realen CCD-Zelle können dann die Elektronen in der dritten Dimension weitertransportiert werden. Abb. 3.13 und 3.14 zeigen einen Vergleich der Vorgänge in Geometrie 1 und Geometrie 3 für 0° und 15° . Deutlich zu sehen ist, wie die Elektronen in Richtung VCCD transportiert werden. Allerdings erhält man – was die Elektronendichte in der VCCD-Region am Simulationsende angeht – wiederum nur einen sehr kleinen Unterschied zwischen Geometrie 1 und Geometrie 3. Die aufintegrierte Elektronendichte ist in Abb. 3.15(d) gezeigt. Dort ist zu sehen, daß sich die Geometrien in der Auslesephase (rechte

Hälfte der Grafiken) trotz der Unterschiede in der Beleuchtungsphase (linke Hälfte der Grafiken) praktisch nicht unterschieden. D.h. effektiv liefern alle Geometrien gleich gute oder hier wohl eher: schlechte Ergebnisse bei schrägem Lichteinfall. Grund dafür ist die geringe Intensität des einfallenden Lichts. Bei höherer Intensität sollten deutlichere Unterschiede zwischen den Geometrien auftreten.

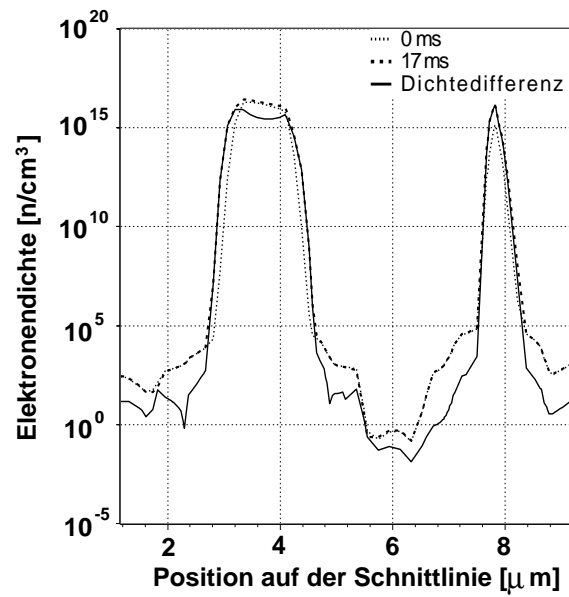


(a) Geometrie 1

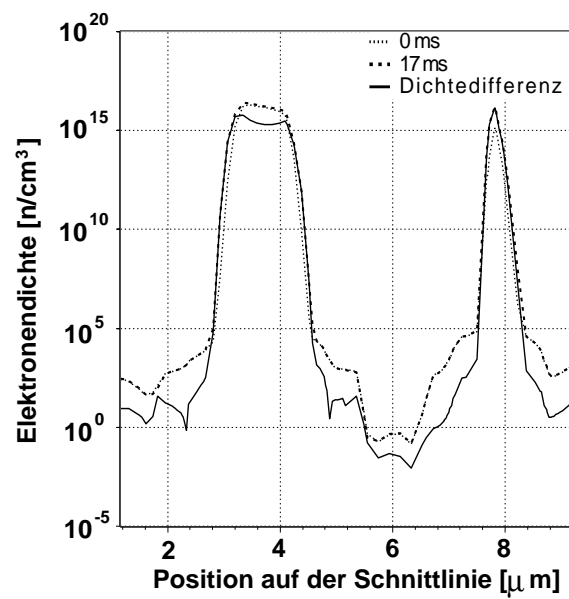


(b) Geometrie 3

Abbildung 3.10: Elektronendichte entlang der in Abb. 3.5 eingezeichneten Linie für verschiedene Geometrien bei einem **Einfalls-
winkel von 0°** . Aufgetragen sind Schnitte zu Beginn der Beleuchtungsphase (bei 0 ms) und am Ende (bei 17 ms), sowie die Differenz beider Kurven.



(a) Geometrie 1



(b) Geometrie 3

Abbildung 3.11: Elektronendichte entlang der in Abb. 3.5 eingezeichneten Linie für verschiedene Geometrien bei einem **Einfallswinkel** von 15° . Aufgetragen sind Schnitte bei zu Beginn der Beleuchtungsphase (0 ms) und am Ende (bei 17 ms), sowie die Differenz beider Kurven.

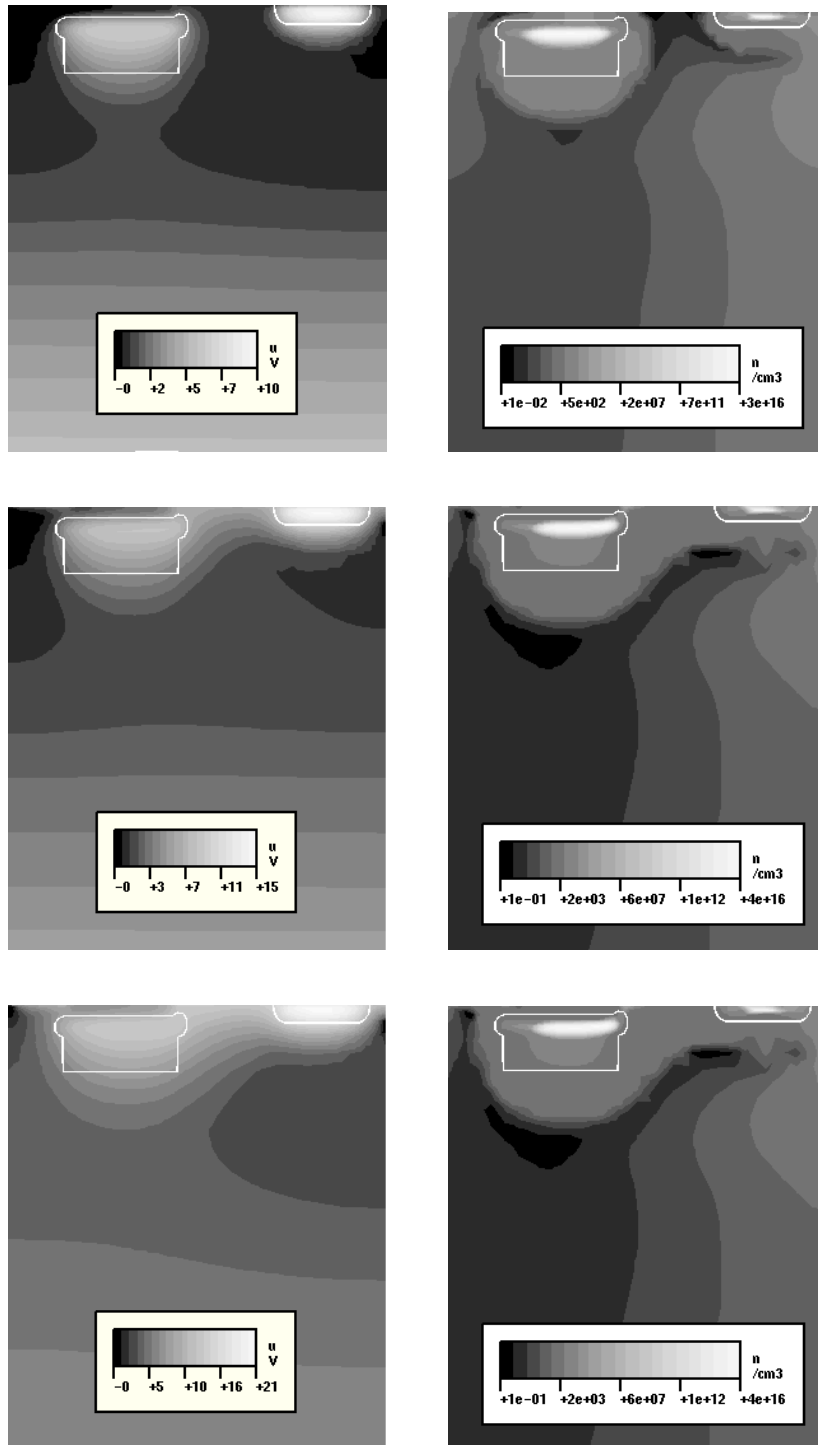
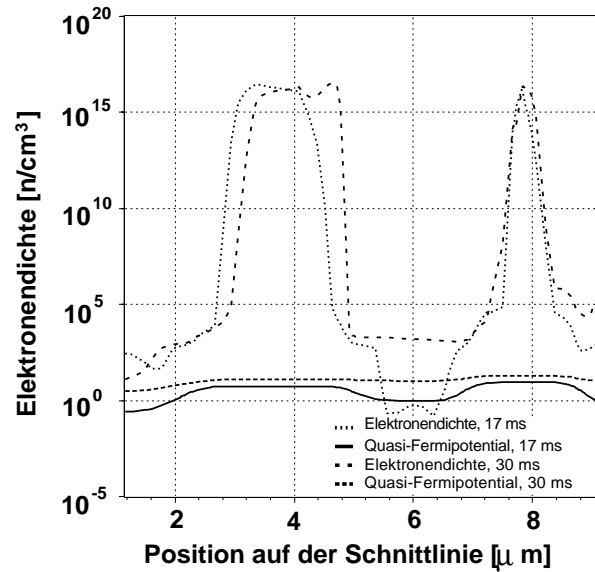
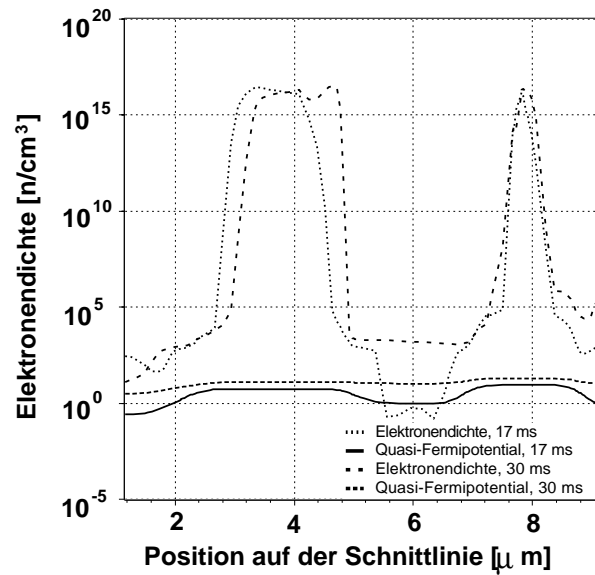


Abbildung 3.12: Mit -1 multipliziertes Elektrostatisches Potential (links) und Elektronendichte (rechts) während des Ausleseprozesses in Geometrie 1, bei einem vorherigen Einfallswinkel von 15° . Gezeigt sind die Werte zu den Zeiten 17 ms, 17.0005 ms und 17.001 ms.

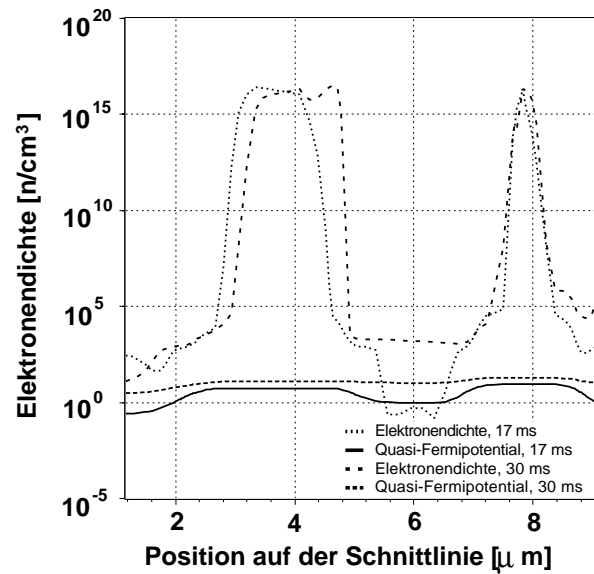


(a) Geometrie 1

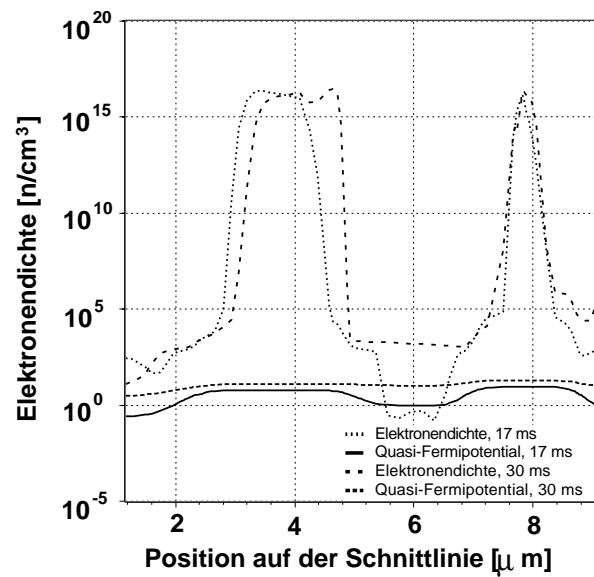


(b) Geometrie 3

Abbildung 3.13: Verschiebung der Elektronendichte während des Auslesevorgangs. Eingezeichnet ist die Elektronendichte (obere Kurven) sowie das (mit -1 multiplizierte) elektrostatische Potential der Elektronen (untere Kurven). Einfallswinkel 0° .

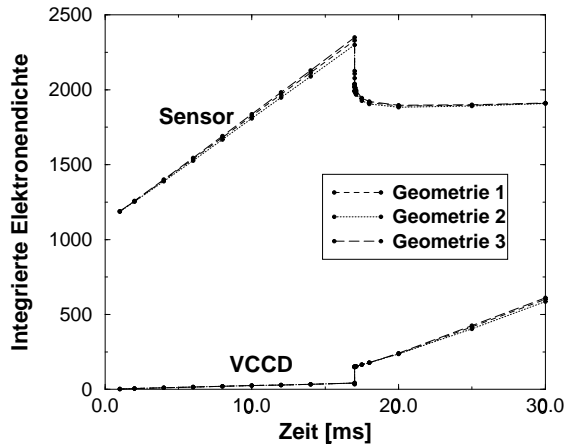


(a) Geometrie 1

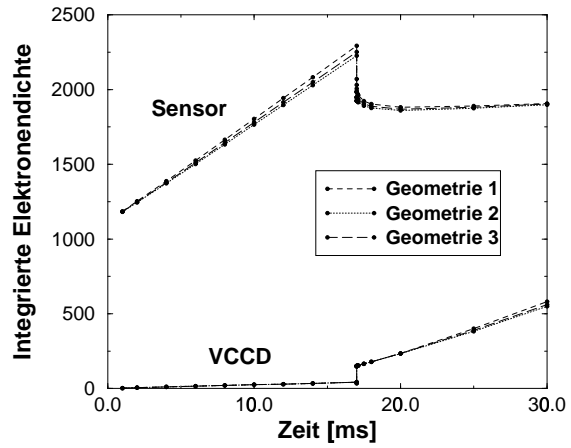


(b) Geometrie 3

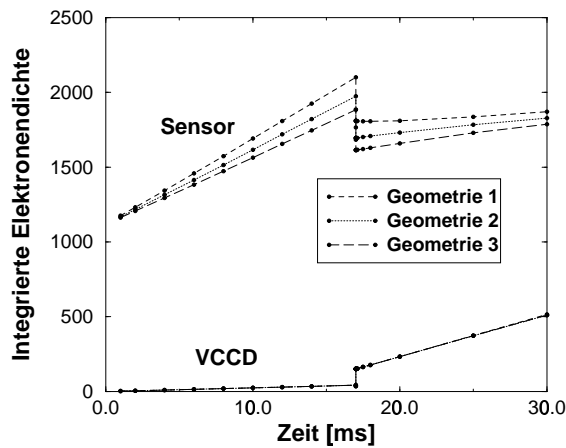
Abbildung 3.14: Verschiebung der Elektronendichte während des Auslesevorgangs. Eingezeichnet ist die Elektronendichte (obere Kurven) sowie das (mit -1 multiplizierte) elektrostatische Potential der Elektronen (untere Kurven). Einfallswinkel 15° .



(a) Einfallswinkel 0°

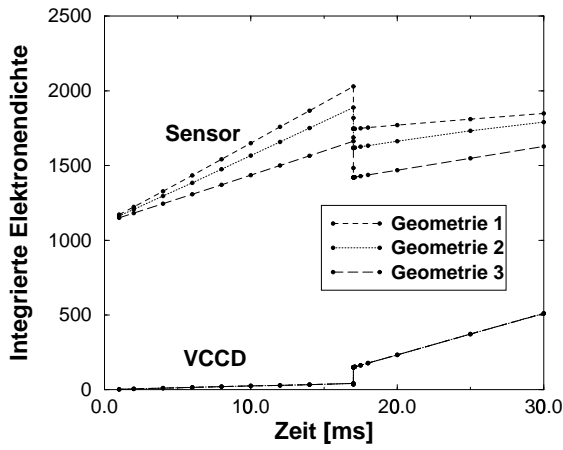


(b) Einfallswinkel 5°

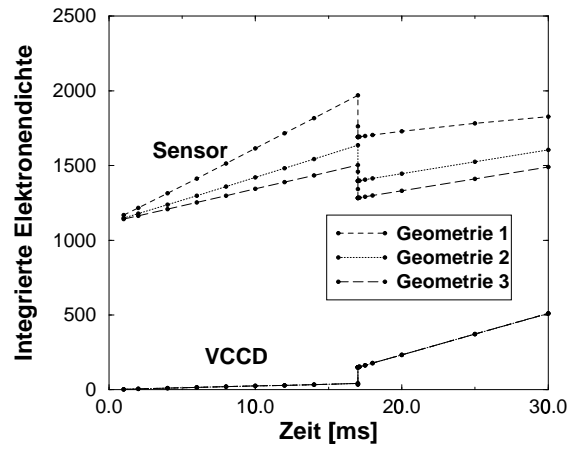


(c) Einfallswinkel 10°

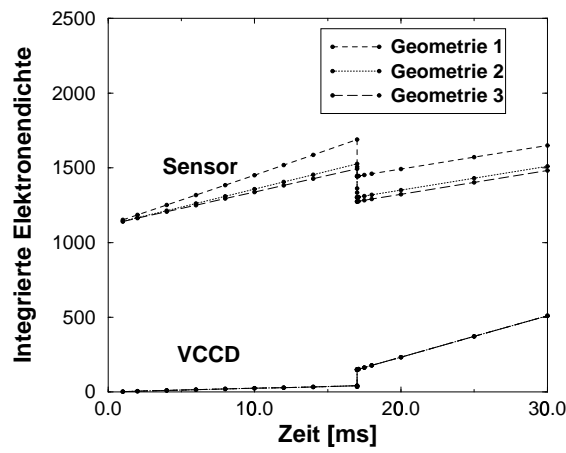
Abbildung 3.15: Integrierte Elektronendichten im Sensor- bzw. VCCD-Bereich für die drei verschiedenen CCD-Layouts bei einer Wellenlänge von $\lambda = 450 \text{ nm}$ und einer Intensität des einfallenden Lichts von $I = 1.62 \mu\text{W}/\text{cm}^2$. Das Licht fällt jeweils von oben links mit dem angegebenen Winkel bezüglich der Normalen ein. (Fortsetzung nächste Seite)



(d) Einfallswinkel 15°



(e) Einfallswinkel 20°



(f) Einfallswinkel 25°

Abbildung 3.15: Fortsetzung.

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde ein numerischer Algorithmus zur Lösung der Maxwellgleichungen entwickelt und als Programmmodul implementiert. Es handelt sich um eine Finite-Differenzen-Methode im Zeitbereich, die die Simulation des Lichtdurchgangs durch räumlich periodische zweidimensionale Strukturen bei schrägem Lichteinfall ermöglicht. Desweiteren wurden mit dem entwickelten Algorithmus Simulationen eines Metall-Halbleiter-Metall-Photodetektors und einer CCD-Zelle durchgeführt.

Bei der mehrdimensionalen Simulation des Durchgangs elektromagnetischer Strahlung durch optisch aktive Halbleiterbauelemente müssen in der Regel Beugungs- und Interferenzeffekte in die Rechnungen miteinbezogen werden, wenn die Abmessungen der betrachteten Bauelemente im Bereich der Wellenlänge des Lichtes liegen. Hier stoßen Raytracing-Methoden schnell an ihre Grenzen, da sie im Bereich der geometrischen Optik arbeiten. Es müssen in solchen Fällen rigorose Methoden zur Lösung der Maxwellgleichungen verwendet werden, die alle Welleneffekte in der Lichtausbreitung miteinbeziehen. Eine rigorose Methode, die häufig angewandt wird, ist die Finite-Differenzen-Methode im Zeitbereich, kurz: FD-TD-Methode (von englisch: **F**inite-**D**ifference **T**ime-**D**omain Method).

Bei Verwendung der FD-TD-Methode stellt die optische Simulation räumlich periodischer Strukturen im Gegensatz zu nichtperiodischen Strukturen ein großes Problem dar, sobald angenommen wird, daß elektromagnetische Strahlung schräg auftrifft. Der Grund hierfür ist, daß bei der Simulation einer Periode einer solchen Struktur die Beugungs- und Interferenzeffekte in Betracht gezogen werden müssen, die von anderen Perioden verursacht werden, auf die das schräg einfallende Licht früher auftrifft. Eine Verwendung klassischer periodischer Randbedingungen ist dann nicht mehr möglich und damit auch nicht die Beschränkung der Simulation auf eine einzige Periode der Struktur. Ein unerwünschter Mehraufwand bei der Simulation ist die Folge, da größere Abschnitte der Struktur simuliert werden müssen.

Abhilfe schafft hier ein vor einigen Jahren entwickeltes Verfahren, das nicht mit den realen elektrischen und magnetischen Feldern arbeitet, sondern mit

phasentransformierten Feldgrößen. Die Feldtransformation (eine sog. Floquet-Transformation) wird hierbei so gewählt, daß in der Simulation wieder periodische Randbedingungen verwendet werden können. D. h. die Simulation kann auf eine Periode der Struktur beschränkt werden. Dieses Verfahren ist jedoch nur für die Simulation nichtleitender Materialien anwendbar.

Erster Schritt dieser Diplomarbeit war die Implementierung des beschriebenen Verfahrens als Programmmodul.

Im Zweiten Schritt wurde das gegebene Verfahren erweitert, so daß schwach leitende Materialien simuliert werden können. Im wesentlichen wurde hierzu ein Leitungsterm in den Maxwellgleichungen zugelassen und die Diskretisierung des gegebenen Verfahrens entsprechend erweitert.

Das Zulassen des Leitungsterms führt für hohe Leitfähigkeiten zu problematischen numerischen Eigenschaften (Steifheit) der Maxwellgleichungen. Aus diesem Grund wurde in einem dritten Schritt eine andere Diskretisierung der Maxwellgleichungen entwickelt, die unempfindlich ist gegenüber der Steifheit der Gleichungen. Dieser Algorithmus wurde dann implementiert.

Schließlich wurden als Beispiele für Anwendungsgebiete des entwickelten Verfahrens ein Metall-Halbleiter-Metall-Photodetektor und eine CCD-Zelle für verschiedene Einfallswinkel des Lichts simuliert und die Ergebnisse jeweils verglichen. Im Fall der CCD-Zelle wurden mit den Ergebnissen aus der optischen Simulation die elektronischen Vorgänge im Halbleitersubstrat berechnet. Hierzu wurde ein ebenfalls an der ETH Zürich entwickelter Halbleitersimulator benutzt. Die Ergebnisse wurden wiederum miteinander verglichen.

Wie die Beispielrechnungen im letzten Teil dieser Diplomarbeit zeigen, ist es möglich, mit der entwickelten Software räumlich periodische passive optoelektronische Bauelemente bei Beleuchtung unter beliebigem Einfallswinkel zu simulieren. Die Optimierung solcher Bauelemente vereinfacht sich dadurch deutlich.

Der in dieser Diplomarbeit vorgestellte zweidimensionale Algorithmus kann außerdem als Ausgangspunkt für eine Verallgemeinerung auf drei Dimensionen benutzt werden, womit sich weitere Einsatzgebiete erschließen.

In naher Zukunft ist geplant, die in dieser Diplomarbeit entwickelte Software in das kommerzielle Elektromagnetik-Simulationsprogramm EMLAB-ISE der Firma ISE Integrated Systems Engineering AG (Zürich) zu integrieren und es so für die industrielle Forschung verfügbar zu machen.

A Finite Differenzen

Man betrachte eine skalare Funktion $u(x, t)$ und eine diskrete Menge von Punkten x_n mit $n = 0, \dots, N$. Die Taylorentwicklung von u um einen Punkt $x_0 \in]x_{n-1}, x_n]$ bei festgehaltenem t lautet

$$u(x, t) = u(x_0, t) + (x - x_0) \left. \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right|_{x_0, t} + \frac{(x - x_0)^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \right|_{x_0, t} + \frac{(x - x_0)^3}{3!} \left. \frac{\partial^3 u(x, t)}{\partial x^3} \right|_{\xi, t}$$

wobei ξ im Intervall $[x_0, x]$ liegt. Für $x = x_n$ erhält man also

$$u_n(t) := u(x_n, t) = u(x_0, t) + (x_n - x_0) \left. \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right|_{x_0, t} + \frac{(x_n - x_0)^2}{2} \left. \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \right|_{x_0, t} + O[(x_n - x_0)^3]$$

Wird der entsprechende Ausdruck für x_{n-1} gebildet und von obiger Gleichung subtrahiert, ergibt sich nach Umordnung

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial x} = \frac{u_n(t) - u_{n-1}(t)}{x_n - x_{n-1}} - \frac{(x_{n-1} - x)^2 - (x_n - x)^2}{2} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + O[(x_n - x_{n-1})^3]$$

Da diese Gleichung für alle $x_0 \in]x_{n-1}, x_n]$ gilt, wurde $|_{x_0, t}$ weggelassen. Falls $(x - x_n) = (x_{n-1} - x)$, d.h. falls ein Zentral-Differenzen-Ausdruck vorliegt, vereinfacht sich dieser Ausdruck zu

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial x} = \frac{u_n(t) - u_{n-1}(t)}{x_n - x_{n-1}} + O[(x_n - x_{n-1})^3]$$

In diesem Fall ist durch den Differenzenterm eine Näherung der partiellen Ableitung $\frac{\partial u(x, t)}{\partial x}$ mit einer Genauigkeit zweiter Ordnung gegeben.

B Impedanzanpassung

Als Impedanz oder Wellenwiderstand eines Mediums wird das Verhältnis η der Amplituden des elektrischen und des magnetischen Feldes bezeichnet [8]. Speziell für ebene Wellen ergibt sich daraus $\eta = \sqrt{\mu/\epsilon}$. Der Wellenwiderstand des Vakuums beträgt $\eta_0 = \sqrt{\mu_0/\epsilon_0} \approx 376.73 \Omega$. Der Reflexionskoeffizient für die Grenzfläche zweier Medien ist bei senkrechtem Lichteinfall gegeben durch

$$R = \frac{\eta_2 - \eta_1}{\eta_2 + \eta_1}$$

wobei η_1 der Wellenwiderstand Medium 1 ist und η_2 der Wellenwiderstand Medium 2. Es tritt offensichtlich keine Reflexion auf für Medien, deren Wellenwiderstände gleich sind. Für leitende Medien, gilt

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \times \vec{H} &= i\omega\epsilon' \vec{E} = i\omega\left(\epsilon - i\frac{\sigma}{\omega}\right) \\ \vec{\nabla} \times \vec{E} &= -i\omega\mu' \vec{H} = -i\omega\left(\mu - i\frac{\bar{\sigma}}{\omega}\right)\end{aligned}$$

Magnetische Verlustmechanismen wurden ebenfalls zugelassen. Der Wellenwiderstand eines solchen Mediums ergibt sich dann zu

$$\eta = \sqrt{\frac{\mu - i\frac{\bar{\sigma}}{\omega}}{\epsilon - i\frac{\sigma}{\omega}}}$$

Falls das Medium stark leitfähig ist, d.h.

$$\frac{\sigma}{\omega} \gg \epsilon \quad \text{und} \quad \frac{\bar{\sigma}}{\omega} \gg \mu$$

gilt

$$\eta \approx \sqrt{\frac{-i\frac{\sigma}{\omega}}{-i\frac{\bar{\sigma}}{\omega}}} = \sqrt{\frac{\sigma}{\bar{\sigma}}}$$

B Impedanzanpassung

Um einen reflexionsfreien Übergang vom Vakuum ins Mediums zu erreichen, muß also die Impedanzbedingung

$$\eta_{\text{Medium}} = \sqrt{\frac{\bar{\sigma}}{\sigma}} \stackrel{!}{=} \sqrt{\frac{\mu_0}{\eta_0}} = \eta_{\text{Vakuum}}$$

$$\iff \frac{\sigma}{\epsilon_0} = \frac{\bar{\sigma}}{\mu_0}$$

erfüllt sein.

C Steife Differentialgleichungen

Bei der numerischen Lösung mancher gewöhnlicher und partieller Differentialgleichungen tritt das Problem der Steifheit auf. Im folgenden soll kurz beschrieben werden, was unter dem Begriff der Steifheit einer Differentialgleichung zu verstehen ist, und welche Implikationen sich daraus für die angewandten numerischen Verfahren ergeben.

Betrachtet werde ein System von Differentialgleichungen der Form

$$\dot{y}(t) = \mathbf{A}y(t) \quad (\text{C.1})$$

wobei $y \in \mathbb{R}^N$ und $\mathbf{A} \in L[\mathbb{R}^N]$. Es kann sich bei dem System um ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen handeln oder um ein System partieller Differentialgleichungen, bei denen die räumlichen Ableitungen bereits durch Differenzterme approximiert wurden. Im letzteren Fall ist $\mathbf{A}(h)$ eine Funktion der Schrittweite h der räumlichen Diskretisierung

Viele numerische Algorithmen zur Lösung von (C.1) führen auf Rekursionsformeln der Form

$$y(t + \Delta t) = g(\Delta t \mathbf{A}(h)) y(t) \quad (\text{C.2})$$

Hierbei hängt die Funktion $g : L[\mathbb{R}^N] \rightarrow L[\mathbb{R}^N]$ vom verwendeten Verfahren ab und kann polynomial oder gebrochenrational sein. Sei $\mathbf{A}(h)$ diagonalisierbar und seien die Eigenwerte von $\mathbf{A}(h)$ durch $\lambda_i(h) \in \mathbb{C}$, $i = 1, \dots, r$ und die Eigenvektoren durch $v_i(h)$ gegeben. Dann läßt sich die Lösung von (C.1) schreiben als

$$\bar{y}(t) = \sum_{i=1}^r e^{\lambda_i(h)t} v_i(h) \quad (\text{C.3})$$

Bem.: Man beschränkt sich hier außerdem auf $\mathbf{A}(h)$, deren Eigenwerte negativen Realteil haben. Dies macht Sinn, da in physikalischen Systemen selten exponentiell wachsende Größen auftreten, die ja durch positive Realteile beschrieben werden.

Außerdem existiert eine Matrix \mathbf{S} mit $\mathbf{S}\mathbf{A}\mathbf{S}^{-1} = \text{diag}(\lambda_1(h), \dots, \lambda_r(h))$. Hieraus folgt nach kurzer Rechnung, daß die Rekursionsformel (C.2) sich auch schreiben läßt als

$$z(t + n\Delta t) = \text{diag}\left(\tilde{g}^n(\Delta t \lambda_1(h)), \dots, \tilde{g}^n(\Delta t \lambda_r(h))\right) z(t) \quad (\text{C.4})$$

wobei $z(t) = \mathbf{S}y(t)$ ist und $\tilde{g} : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ die gleiche funktionale Form hat wie g . Um exponentiell überschießende Terme zu vermeiden, die durch die Rekursion erzeugt werden, muß

$$|\tilde{g}(\Delta t \lambda_i)| \leq 1 \quad i = 1, \dots, r \quad (\text{C.5})$$

erfüllt sein. Die Eigenwerte von $\mathbf{A}(h)$ bestimmen somit die für das angewandte Verfahren maximal mögliche Zeitschrittweite.

Beispiel: Die FD-TD-Methode ist ein Verfahren vom Euler-Cauchy-Typ und führt bei expliziter Formulierung auf eine Funktion \tilde{g} der Form

$$\tilde{g}(z) = 1 + z.$$

Bedingung (C.5) ergibt bei Einsetzen von \tilde{g}

$$|1 + \Delta t \lambda_i| \leq 1$$

Diese Bedingung muß für alle Eigenwerte von $\mathbf{A}(h)$ erfüllt sein. Kurze Rechnung führt unter der Annahme, daß $\text{Re}(\lambda_i)^2 > \text{Im}(\lambda_i)^2$ gilt, auf

$$\Delta t \leq -\frac{2 \frac{1}{\text{Re}(\lambda_i)}}{1 - \frac{\text{Im}(\lambda_i)^2}{\text{Re}(\lambda_i)^2}}$$

Man sieht hier: je größer $\text{Re}(\lambda_i)$ ist, desto kleiner muß Δt sein.

Steifheit bedeutet nun, daß das Verhältnis des Realteils des größten Eigenwertes zum Realteil des kleinsten sehr groß ist. Z. B. wenn der Realteil des größten Eigenwerts sehr groß ist. Bei Verfahren wie dem Euler-Cauchy-Verfahren muß dann die Zeitschrittweite stark verkürzt werden. Dies führt oft dazu, daß das Problem nicht mehr numerisch lösbar ist wegen zu vieler benötigter Rechenschritte. Verfahren, bei denen dies der Fall ist, werden als nicht-steifstabil bezeichnet. Im Gegensatz hierzu stehen steifstabile Verfahren, die auf gebrochenrationale Rekursionsfunktionen g führen, die die Bedingung (C.5) trivialerweise erfüllen unabhängig von der Wahl von Δt . In

solchen Fällen kann die Zeitschrittweite beliebig groß gewählt werden, ohne daß Instabilitäten auftreten, die auf die Steifheit zurückzuführen sind (andere Instabilitäten können natürlich trotzdem auftreten). Beispiel für ein solches steifstabilen Verfahren ist das implizite Euler-Cauchy-Verfahren, für das $g(z) = \frac{1}{1-z}$ gilt und das Runge-Kutta-Verfahren in Gauß-Form mit $g(z) = \frac{12+6z+z^2}{12-6z+z^2}$. Nicht steifstabil ist etwa das oben beschriebene explizite Euler-Cauchy-Verfahren mit $g(z) = 1+z$ oder das Runge-Kutta-Verfahren in Radau-Form, das auf $g(z) = \frac{124+8z+6z^2+z^3}{24-6z}$ führt.

Literaturverzeichnis

- [1] K. S. Yee. *Numerical Solution of Initial Boundary Problems Involving Maxwell's Equations in Isotropic Media*. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, Vol. 36, 1988, p. 302
- [2] Allen Taflove. *Computational Electrodynamics*. Artech House Publishers Inc., Norwood, 1. ed., 1995
- [3] B. Enquist et al. *Absorbing Boundary Conditions for the Numerical Simulation of Waves*. Mathematics of Computations, Vol. 31, 1977, p. 629
- [4] G. Mur. *Absorbing Boundary Conditions for the Numerical Simulation of Waves*. IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility, Vol. 23, 1981, p. 377
- [5] H. L. Liao et al. *A transmitting Boundary for Transient Wave Analysis*. Scientica Sinica, Vol. XXVII, October 1984, p. 1063
- [6] T. S. Yeo et al. *A Performance Assessment of Liao's Absorbing Boundary Conditions for FD-DT Method*. Microwave and Optical Technology Letters, Vol. 16, no. 3, 20. October 1997, p. 186
- [7] J.-P. Berenger. *A Perfectly Matched Layer for the Absorption of Electromagnetic Waves*. Journal Of Computational Physics, Vol. 114, 1994, p. 185
- [8] S. Ramo. *Fields and Waves in Communication Electronics*. John Wiley & Sons Inc., New York, Zweite Auflage, 1994
- [9] D. Maystre. *Rigorous vector theories of diffraction gratings*. Progress in Optics, vol. 21, 1984, p. 1
- [10] T. O. Körner. *Rigorous Simulation of Light Propagation in Semiconductor Devices*. Series in Microelectronics, Vol. 81, Verlag Hartung-Gorre, Konstanz, 1999

- [11] J. A. Roden et al. *Time-Domain Analysis of Periodic Structures at Oblique Incidence: Orthogonal and Nonorthogonal FD-TD Implementations*. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, Vol. 46, No. 4, April 1998, p. 420
- [12] M. E. Veysoglu et al. *A Finite-Difference Time-Domain Analysis of Wave Scattering from Periodic Surfaces: Oblique Incidence Case*. Journal of Electromagnetic Waves and Applications, Vol. 7, No. 12, 1993, p. 1595
- [13] M. Huynh. *Absorbing Boundary Conditions for the FDTD-Method in Electromagnetics: The Higdon Operator*. Technical Report No. 97/2, Integrated Systems Laboratory, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich
- [14] H. Mutho. *Simulation for 3-D optical and electrical analysis of CCD*. IEEE Transactions on Electron Devices, Vol. 44, Oct. 1997, p. 1604
- [15] D. E. Aspnes. *Optical Functions in Properties of Silicon*. emis Datareview Series, Inspec, 1988, p. 59
- [16] W. Nolting. *Grundkurs: Theoretische Physik, Band 3: Elektrodynamik*. Verlag Zimmermann-Neufang, Ulmen, 3. Auflage, 1993
- [17] E. Hecht. *Optics*. Addison-Wesley Publishing Company Inc., Reading, 1987
- [18] C. Gerthsen, H. Kneser, H. O. Vogel. *Physik*. Springer-Verlag, Berlin, 16. Auflage, 1989
- [19] ISE Integrated Systems Engineering AG, Zürich. *ISE TCAD Manuals*, Release 5, 1998

Danksagung

Am Ende meiner Diplomarbeit möchte ich allen danken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Mein besonderer Dank gilt:

Prof. Dr. E. Bucher und Prof. Dr. P. Wyder an der Universität Konstanz dafür, daß sie es mir ermöglicht haben, meinen Interessen zu folgen und diese Diplomarbeit extern an der Eidgenössisch Technischen Hochschule Zürich durchzuführen.

Prof. Dr. W. Fichtner für die Möglichkeit, am Institut für Integrierte Systeme (IIS) der Eidgenössisch Technischen Hochschule Zürich ein überaus interessantes Thema unter besten Arbeitsbedingungen zu bearbeiten. Der einjährige Aufenthalt am IIS hatt mir entscheidende Impulse für meine weitere berufliche Entwicklung gegeben.

Dr. Thomas Körner und Bernd Witzigmann für ihre allzeit vorbildliche Betreuung meiner Arbeit. Sie ließen mir den Freiraum, meinen eigenen Ideen zu folgen und gaben mir dabei immer wieder wichtige Tips für den Fortgang meiner Arbeit. Von ihrem umfangreichen Fachwissen habe ich sehr profitiert.

Andreas Witzig, Christian Schuster und Götz Leonhardt für das ausgesprochen gute Arbeitsklima in der Gruppe, ihr sorgfältiges Korrekturlesen meiner Arbeit und ihre vielfältige Unterstützung sowohl in softwaretechnischen als auch in inhaltlichen Fragen.

Dr. Dölf Aemmer und Dr. Norbert Felber für ihre stets freundliche und kompetente Unterstützung in administratorischen Dingen.

Dr. Peter Regli für seine unkomplizierte und schnelle Hilfe bei allen Softwareproblemen, sowie den anderen Mitarbeitern der Firma ISE AG (Zürich).

Christoph Wicki und Dr. Andreas Karrer für die Wartung von Soft- und Hardware am IIS. Die Arbeit auf dem tadellos gepflegten Rechnercluster war ein wirkliches Vergnügen.

Volker Mornhinweg, der parallel zu mir seine Diplomarbeit am IIS schrieb, für seine Freundschaft und Unterstützung. Ungezählt sind die Fahrten von Konstanz nach Zürich und zurück, auf denen er mein Chauffeur war.

Meinen Eltern und Geschwistern, ohne deren vielfältige Unterstützung mein Studium und diese Diplomarbeit nicht möglich gewesen wären.

