

Numerische Simulation
effektiver Medien
mit magnetischen Materialeigenschaften

Diplomarbeit von
Harald Leinders

Vorgelegt im Dezember 1992

Ausgeführt bei
Prof. Dr. G. Nimtz
im
II. Physikalischen Institut
der Universität zu Köln

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Elektromagnetische Wellen in Materie	9
2.1	Wechselwirkung mit dem elektrischen Feld	9
2.1.1	Debyescher Relaxator	9
2.1.2	Resonanzverluste	14
2.2	Magnetische Wechselwirkungen	16
2.2.1	Hysterese-Verluste	17
2.2.2	Relaxationsprozesse	18
2.2.3	Resonanz-Effekte	19
2.2.4	Wirbelstromverluste	21
2.2.5	Vergleich der Effekte	22
3	Theorie der effektiven Medien	25
3.1	Effektive Dielektrische Konstante (DK)	27
3.1.1	Serien- und Parallelschaltung	27
3.1.2	Die Clausius-Mosotti-Gleichung	28
3.1.3	Maxwell-Wagner-Verluste	29
3.1.4	Die allgemeine Effektiv-Medien-Formel (GEM-Equation) nach Polder und van Santen	30
3.1.5	Gleichung von Landau-Lifshitz	31
3.1.6	Formel von Böttcher / sym. Bruggemann-Formel	31
3.1.7	Die Gleichung von Garnett	31
3.1.8	Die asymmetrische Bruggemann-Gleichung	34
3.1.9	Die Gleichung von Looyenga	34
3.2	Effektive Permeabilitätskonstante (PK)	35
3.2.1	Zur Garnett-Formel	36
3.2.2	Die Formeln von Bruggemann und Looyenga für Magnetika	38
3.2.3	Serien- und Parallelschaltung	38
4	Das Computerprogramm COSME II	41
4.1	Das Diskretisierungsverfahren nach WEILAND	41
4.1.1	Transformation der ersten Maxwell-Gleichung	42
4.1.2	Transformation der zweiten Maxwell-Gleichung	46
4.1.3	Die Divergenzgleichungen	47

4.2	Entwicklung der Wellengleichung	48
4.2.1	Ableitung der Eigenwertgleichung	48
4.2.2	Randbedingungen	49
4.3	Berechnung der effektiven Materialparameter	50
4.4	Lösung der Eigenwertgleichung	52
4.4.1	Das Iterationsverfahren	52
4.4.2	Startwerte	55
5	Ergebnisse	57
5.1	Laufzeitverhalten von <i>COSME II</i>	57
5.2	Aufnahme von Füllfaktorkurven $\overline{(\varepsilon\mu)}(f)$	59
5.3	Faktorisierungseigenschaften	63
5.4	Füllfaktorkurven $\overline{\mu}(f)$	71
5.5	Allgemeine Form der Füllfaktorkurven	74
5.5.1	Physikalische Interpretation	76
5.5.2	Auswahl einer geeigneten Fit-Funktion	79
5.5.3	Anpassungsverfahren	81
5.6	Einfluß der Materialparameter auf den Fit	84
5.7	Anwendung der Fit-Funktion auf Dielektrika	89
5.8	Übertragung auf verlustbehaftete Medien	91
5.9	Statistische Schwankungen und numerische Fehler	97
5.10	Vermessung magnetischer Proben	98
6	Absorbersimulationen	101
6.1	Theoretische Grundlagen	102
6.2	Diskretisierung des Absorbers	104
6.2.1	Programmierung des Verfahrens	107
6.3	Ergebnisse	108
7	Zusammenfassung	115
A	Das Programm <i>COSME II</i> : Programmierung	123
A.1	Die Matrix A	123
A.2	Programmablauf	125
A.3	Erweiterungen und Veränderungen	126
B	Blockdiagramm zu <i>COSME II</i>	135
C	Programm zur Anpassung einer Funktion	137
D	Programm zur Absorberoptimierung	143

Abbildungsverzeichnis

2.1	Dielektrische Polarisierung durch Relaxation: $P(t) = P_0(1 - e^{-\frac{t}{\tau}})$	12
2.2	Idealer Debyescher Relaxator mit Relaxationszeit τ	13
2.3	Polarisierung bei oszillierenden Systemen: $P(t) = P_0\{1 - e^{-\frac{t}{\tau}} \cos(\omega_0 t + \phi)\}$	15
2.4	Die Dielektrische Funktion bei einer Resonanzabsorption	16
2.5	Relaxation der magnetischen Induktion nach Einschalten eines Feldes H bei $t = 0$	18
2.6	Relative Permeabilität μ als Folge von Wirbelstromverlusten.	22
3.1	Einfache effektive Medien: Serien- und Parallelschaltung.	27
3.2	Zum Clausius-Mosotti-Modell	28
3.3	Zum Vergleich von Bruggemann und Maxwell Garnett	33
3.4	Stromdurchflossener, in Material eingeschlossener Leiter	39
3.5	Zur Parallelschaltung von Magnetika	40
4.1	Zur Näherung einfacher Integrale.	43
4.2	Ringintegral in einer Elementarzelle.	43
4.3	Anordnung der Elementarzellen im Hohlleiterresonator.	44
4.4	Zum dualen Gitter	45
4.5	Feldverteilung im ungestörten Resonator	51
4.6	In der Simulation benutzter Vektor	53
5.1	Simulation von Teilchen mit $\varepsilon_T = 13.5 - i0.1$, $\mu_T = -4 - i6$	59
5.2	Simulation von Teilchen mit $\varepsilon_T = 15 - i4$, $\mu_T = 7 - i3$	60
5.3	Simulation von Teilchen mit $\varepsilon_T = 18 - i25$, $\mu_T = 4 - i3.5$	61
5.4	Simulation von Teilchen mit $\varepsilon_T = 25 - i10$, $\mu_T = 15 - i10$	62
5.5	Faktorisierungskurve 1	66
5.6	Faktorisierungskurve 2	67
5.7	Faktorisierungskurve 3	68
5.8	Relativer und absoluter Fehler der Faktorisierungskurven	69
5.9	Füllfaktorkurve zu $\mu_T = 4 - i3.5$	71
5.10	Füllfaktorkurve zu $\mu_T = 15 - i10$	72
5.11	Füllfaktorkurve zu $\mu_T = 20 - i12$	72
5.12	Füllfaktorkurve zu $\mu_T = 25 - i10$	73
5.13	Füllfaktorkurve zu $\mu_T = 30 - i10$	73
5.14	Vergleich der Simulationsdaten mit klassischen Formeln	75
5.15	Auswirkung statistischer Schwankungen der Verteilung	75

5.16	Effektives Medium jenseits der Perkolationsschwelle	78
5.17	Fit an die Füllfaktorkurve	82
5.18	Relative Fehler des Fit's bei verschiedener Wichtung	84
5.19	Parameterraum der Anpassungsfunktion	85
5.20	Parameterraum bei $\mu_T = 20$	85
5.21	Parameterraum bei $\mu_T = 60$	86
5.22	Parameterraum bei $\mu_T = 100$	86
5.23	Abhängigkeit der Fit-Parameter von der Teilchen-PK	87
5.24	Grenzwert-Fit	88
5.25	Fitparameter bei Anpassung bei Dielektrika	90
5.26	Fit bei verlustbehafteten Medien: $\mu_T = 4 - i3.5$ und $\mu_T = 7 - i3$	93
5.27	Fit bei verlustbehafteten Medien: $\mu_T = 15 - i10$ und $\mu_T = 25 - i10$	94
5.28	Fit bei verlustbehafteten Medien: $\mu_T = 20 - i12$ und $\mu_T = 30 - i10$	95
5.29	Relativer Fehler zu $\mu = 4 - i3.5$	96
5.30	Relativer Fehler zu $\mu = 30 - i10$	97
6.1	Impedanztransformation auf einer Leitung	103
6.2	Diskretisierung einer Absorberpyramide	104
6.3	Klassischer Absorber mit Sockel	106
6.4	Optimierter Absorber	108
6.5	Reflexionsdämpfungskurve von konventionellem und optimiertem Absorber	109
6.6	Auswirkung des Sockels auf die Absorber	110
6.7	Einfluß von ε' auf die Dämpfung	111
6.8	Reine Dämpfungskurve	111
6.9	Auswirkung von ε'' auf die Dämpfungskurve	112
6.10	Reine Interferenzkurve	113
6.11	Verkleinerung der Länge des Absorbers	113
A.1	Verlauf der Eigenwerte bei steigendem Füllfaktor	132

Kapitel 1

Einleitung

Thema der vorliegenden Arbeit ist die Beschreibung effektiver Medien. Darunter versteht man ein Gemisch aus zwei oder mehr Komponenten, wobei sich die Größen der Teilchen, aus denen die Komponenten bestehen, auf einer derart kleinen Skala bewegen müssen, daß man makroskopisch von einem homogenen, **effektiven** Medium sprechen kann. Es stellt sich dann natürlich die Frage, ob und wie sich die Materialparameter des Gemisches, also z. B. Leitfähigkeit, Polarisierbarkeit, Magnetisierbarkeit, mechanische Eigenschaften etc., aus der Kenntnis der entsprechenden Daten der Einzelkomponenten bestimmen lassen können. Die elektromagnetischen Eigenschaften des Systems sind deshalb von besonderem Interesse, da man sich in der modernen Technik in zunehmendem Maße die Wechselwirkung elektromagnetischer Felder mit Materie zunutze macht, was ohne genaue Kenntnis der Materialparameter der vorhandenen Werkstoffe undenkbar wäre.

Weiterhin erzwingen neue Anwendungsgebiete ständig die Entwicklung neuer Werkstoffe, die fast ausschließlich aus mehrkomponentigen Systemen bestehen. Dabei müssen für bestimmte Anwendungen gezielte Anforderungen an den Werkstoff berücksichtigt werden (z.B. eine genau definierte Leitfähigkeit), so daß man die Materialparameter nach Möglichkeit maßschneidern will. Man ist also darauf angewiesen, Materialien durch bestimmte Rezepturen so zusammenzustellen, daß ein Werkstoff mit definierten elektromagnetischen Eigenschaften erzeugt wird (man denke nur an Werkstoffe zur Herstellung von Mikroprozessoren, Wellenleiter für die Nachrichtenübermittlung, elektronische Bauelemente, Absorbermaterialien zur Abschirmung empfindlicher Systeme u.s.w.).

Dies kann natürlich insbesondere durch Experimente versucht werden, was in Hinsicht auf die Kosten aber meist vermieden wird. Was man braucht, ist die Möglichkeit, durch Vorgabe der Einzelparameter und der gewünschten Gesamtparameter des Gemisches das Mischungsverhältnis errechnen zu können, mit der die Einzelkomponenten zusammengegeben werden müssen. Ein Ziel dieser Arbeit war es also, eine Beschreibung dieses Problems zu vereinfachen und eine in der Praxis anwendbare Gleichung vorzustellen, welche die effektiven Parameter der Mischung mit den entsprechenden Parametern der Einzelkomponenten und dem Mischungsverhältnis verknüpft (sofern keine Agglomeration entsteht). Mit Hilfe dieser Gleichung ist also eine gezielte **Synthese** von Werkstoffen möglich.

Auf der anderen Seite gibt es immer dann Probleme, wenn die Materialparameter eines Materials einer Messung nicht zugänglich sind, weil das Material z. B. immer nur in

einer Mischung vorliegt. Dies kann dann der Fall sein, wenn man ein Material nur auf einem Träger oder in einer Matrix herstellen kann, die Verfügbarkeit einer Komponente also herstellungsbedingt eingeschränkt ist. Hier soll die mögliche Änderung der Materialeigenschaften von Metallen in Legierungen als Beispiel dienen. Wünschenswert ist in diesem Fall, aus einer Messung der effektiven Materialwerte auf die Parameter der Einzelkomponenten einen Rückschluß ziehen zu können, was durch die o.g. Gleichung ebenfalls geleistet werden kann: Sie ermöglicht die **Analyse** von Werkstoffen.

Der Schwerpunkt der Arbeit liegt bei einer Beschreibung der **Permittivität** ε und der **Permeabilität** μ ¹, welche für die Wechselwirkungen von elektrischem und magnetischem Feld mit Materie verantwortlich sind. Sie haben einen entscheidenden Einfluß auf das Verhalten des Mediums im Rahmen der Leitungstheorie, also die Eigenschaften der Materie als Wellenleiter. Kein Chip in einem Rechner könnte funktionieren, wenn die Schalteigenschaften der miniaturisierten elektronischen Bauelemente nicht genauestens bekannt wären. Auch in Bezug auf die Analyse gibt es Beispiele, bei denen insbesondere die magnetischen Materialeigenschaften eine wichtige Rolle spielen, z. B. bei der Entwicklung von HT_C -Supraleitern.

Ziel der Arbeit ist also, einen Zusammenhang der Parameter (ε , μ) der Einzelkomponenten und der effektiven Parameter ($\bar{\varepsilon}$, $\bar{\mu}$) des Gemisches als Funktion des Mischungsverhältnisses, beschrieben durch den **Volumenfüllfaktor** f , aufzustellen und zu diskutieren. Dabei soll besonderer Wert auf eine Beschreibung der effektiven Permeabilität gelegt werden, da diese im Rahmen der klassischen Effektiv-Medien-Theorien bisher bis auf wenige Ausnahmen vernachlässigt wurde. Es gibt dagegen eine große Zahl von klassischen Theorien zur Beschreibung der effektiven Dielektrizitätskonstanten, was nicht zuletzt dadurch begründet werden kann, daß es fast keinen Stoff mit $\varepsilon = 1$ gibt, dafür aber eine sehr große Zahl nichtmagnetischer Stoffe ($\mu \equiv 1$). Sind aber beide Materialparameter von 1 verschieden, gehen beide Materialwerte gleichberechtigt² in die Theorien ein, z. B. als Produkt beim Wellenvektor in Materie. Auch unterliegen die klassischen Theorien einer Reihe von Einschränkungen, was die Anordnungen von Partikeln in einer umgebenden Matrix und die erzeugbaren maximalen Füllfaktoren angeht. Gleichzeitig müssen starke Annahmen über die Form der Teilchen gemacht werden, so daß ein Vergleich der analytischen Theorien mit dem Experiment oft problematisch ist.

Leider ist eine Untersuchung der effektiven Medien durch Experimente nicht immer möglich, da die Präparation entsprechender Proben schwierig ist und die Meßverfahren höchst empfindlich auf Ungenauigkeiten der Geometrien reagieren. Auch können bei echten Experimenten die Füllfaktoren nicht beliebig eingestellt werden, zudem ist die innere Topologie der Probenkörper nicht exakt zu bestimmen. Ein weiterer, wesentlicher Punkt ist, daß eine Durchführung von sehr vielen Messungen zur Erlangung ausreichenden Datenmaterials überaus aufwendig und kostenintensiv ist, so daß man nach Alternativen suchen muß.

¹Falls bei den Größen ε , μ keine Indizes auftreten, sind grundsätzlich die relativen Größen gemeint, wie sie im cgs-System verwendet werden. Da in der Arbeit durchgehend das SI-System benutzt wird, werden diese Größen nur im Konfliktfall mit dem Index r versehen; wo keine Unklarheit entstehen kann, werden die Indizes fortgelassen.

²Ob beide Parameter auch quantitativ den gleichen Einfluß besitzen, hängt u. a. von den Amplituden von elektrischem und magnetischem Feld ab.

Eine dieser Alternativen, wenn nicht sogar die einzige, ist eine Untersuchung der effektiven Medien mit modernen Rechensystemen. Diese Vorgehensweise hat einige bestehende Vorteile: Ein bequemes Variieren der Mischungsverhältnisse, eine freie Wahl der Parameter der Einzelkomponenten ohne Rücksicht auf Verfügbarkeit der Materialien und eine „a priori“-Kenntnis der Topologie des Gemisches, welche ohne Toleranzen, die eine echte Fertigung von Proben immer mit sich bringt, reproduzierbar ist.

Dazu wurde von Stölzle [17] ein Computerprogramm **COSME** entwickelt, daß mit Hilfe einer Diskretisierungsmethode von WEILAND ([1] — [6]) eine Berechnung der effektiven Dielektrizitätskonstante leisten kann, wobei die entstehende verallgemeinerte Eigenwertgleichung mit einem neuartigen und sehr gutem Verfahren gelöst wird, welches hierzu ebenfalls von Stölzle in [17] vorgestellt wurde. Dieses Programm mußte weiterentwickelt werden, um eine Untersuchung der magnetischen Eigenschaften effektiver Medien zu ermöglichen und somit einen ersten Ansatz zur Beschreibung eines effektiven Mediums auszuarbeiten.

Anschließend wurde im Hinblick auf den praktischen Nutzen der effektiven Medien eine Anwendung simuliert, nämlich der Einsatz in Absorbern. Dazu wurde, um einen ersten Einblick in das Verhalten von Absorberkörpern zu erhalten, ein Programm zur Beschreibung eines Absorbers durch eine Impedanztransformation entwickelt und die Einwirkung geometrischer Aspekte auf die Absorptionseigenschaften untersucht. Dies ist als Überleitung auf eine spätere, tiefergehende Untersuchung der Absorberstrukturen mit Programmen ähnlich **COSME** zu sehen. Die Entwicklung dieser Absorber kann mit numerischen Betrachtungen sehr wahrscheinlich noch ein großes Stück weitergebracht werden.

Zur Struktur dieser Arbeit

Zunächst wird relativ ausführlich auf die Mechanismen eingegangen, mit denen die elektromagnetischen Felder mit Materie wechselwirken. Dies ist zum Verständnis der Wirkung der Materialparameter und deren Abhängigkeit von Frequenz oder Wellenlänge gedacht.

Danach wird auf die vorhandenen Theorien über effektive Medien in Bezug auf die Permittivität eingegangen, zum einen, um die Denkmodelle vorzustellen, die zur Aufstellung von Effektiv-Medien-Formeln führen, zum anderen, weil auch in der Literatur keine echten Entwicklungen von entsprechenden Theorien für die Permeabilität vorliegen, sondern solche Theorien oft durch Analogiebetrachtungen aus den Gleichungen für die effektive Permittivität abgeleitet werden. Auch hier ist eine Kenntnis der Wechselwirkungsmechanismen notwendig, um die Grenzen der Analogiebetrachtungen abschätzen zu können.

Daraus abgeleitet, folgt eine Zusammenfassung der Effektiv-Medien-Formeln, soweit sie für die Permeabilität existieren und die Herleitung zweier Gleichungen, die die Grenzen darstellen, zwischen denen die effektiven Materialparameter grundsätzlich liegen müssen (Serien- und Parallelschaltung).

Anschließend wird dann das Programm in seiner aktuellen Version vorgestellt und seine Wirkungsweise erläutert, wobei auf die Änderungen gegenüber des in [17] vorgestellten Programmes explizit eingegangen wird.

Der größte Abschnitt der Arbeit befaßt sich dann mit den erhaltenen Ergebnissen und deren Diskussion, wobei einige neue Ansätze zur Beschreibung effektiver Medien vorgeschlagen und besprochen werden.

Als letzten Punkt werden danach die Simulationen von Absorbergeometrien vorgestellt, welche den Übergang zu Forschungsarbeiten über diese Diplomarbeit hinaus darstellen. Die hieraus erhaltenen Ergebnisse werden im Anschluß daran präsentiert und insbesondere die Aspekte der praktischen Anwendung erläutert.

Kapitel 2

Elektromagnetische Wellen in Materie

Elektromagnetische Felder erzeugen in einem mit Materie gefüllten Raumgebiet eine Reihe von Wechselwirkungen. Diese sind quantitativ von der Amplitude, der Frequenz und auch von der Polarisationsrichtung der Felder \vec{E} und \vec{H} abhängig.

Ausgangspunkt der hier vorliegenden Untersuchungen sind die Maxwellgleichungen. Alle vorkommenden Größen werden in dieser Arbeit durchgehend im SI-System angegeben.

Die Wechselwirkung der Felder \vec{E} und \vec{H} mit einem Medium werden durch die MAXWELL-Gleichungen, ergänzt durch die Materiegleichungen

$$\vec{D}(\omega) = \varepsilon(\omega)\varepsilon_0\vec{E}(\omega) \quad (2.1)$$

$$\vec{B}(\omega) = \mu(\omega)\mu_0\vec{H}(\omega) \quad (2.2)$$

beschrieben, wobei sich in SI-Einheiten die Konstanten durch die Vakuum-Felder zu $\varepsilon_0 = 8.814 \cdot 10^{-12} \frac{F}{m}$ und $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \frac{Vs}{Am}$ ergeben. Im allgemeinsten Fall sind die Materialparameter ε und μ durch Matrizen zu beschreiben, welche eventuellen Anisotropien des Materials Rechnung tragen. In der vorliegenden Arbeit möchte ich mich auf homogene und isotrope Materialien beschränken, so daß die o.g. Matrizen zu Skalaren werden. Da eine Welle beim Durchlaufen eines Mediums stets Energie dissipiert, müssen diese Verluste in geeigneter Weise zu erfassen sein. Dies geschieht ebenfalls durch die Materialparameter ε und μ , die als Folge davon zu komplexen Größen werden und eine Beschreibung der Dispersion erlauben.

2.1 Wechselwirkung mit dem elektrischen Feld

2.1.1 Debyescher Relaxator

Die Auswirkung eines elektrischen Feldes auf Materie nach Gleichung (2.1) ist im allgemeinen von der Frequenz des elektrischen Feldes abhängig. Dies bedeutet, daß ε eine frequenzabhängige Größe ist. Der Einfachheit halber nimmt man zunächst einen harmonischen Verlauf des Feldes an, man setzt also

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_0 e^{i\omega t},$$

wobei $\omega = 2\pi\nu$ die Kreisfrequenz des Feldes ist.

In einem Material *ohne* frei verschiebbare Ladungsträger (Gleichstromleitfähigkeit $\sigma_{DC} = 0$) entsteht durch Ausrichtung permanenter oder induzierter Dipole eine Polarisation, die sich durch eine Störung des statistischen, dynamischen Gleichgewichtes der Besetzungswahrscheinlichkeiten beschreiben läßt. Die Polarisation wird dadurch aber nicht instantan erfolgen, sondern erst nach einer bestimmten Zeit auf einen Maximalwert angewachsen sein. Dies ist ein **Relaxationsprozeß**. Damit verbunden ist eine typische Zeit, die man als **Relaxationszeit** τ bezeichnet.

Gleichwohl wird es oszillierende Felder geben, deren Periodendauern T , verglichen mit der systemspezifischen Relaxationszeit, groß sind. Dies führt zu einer sehr langsamen Feldrichtungsänderung der Anregung. Die elektrischen Dipole können dieser Feldänderung quasi ohne Zeitverlust folgen und die dielektrische Verschiebung \vec{D} behält ständig ihren Maximalwert. Die daraus erhaltene Größe $\varepsilon_S = \frac{D_0}{\varepsilon_0 E_0}$ bezeichnet man als **statische Dielektrizitätskonstante (DK)**¹, und es wird dem Feld keine Energie entzogen.

Andererseits wird es äußere Felder geben, deren Periodendauer verglichen mit der Relaxationszeit so klein ist, daß es zu keiner merklichen Polarisation mehr kommt. Die Feldänderung erfolgt zu schnell, als daß Ladungsträger (mit ihrer endlichen Masse) dem Feld noch folgen könnten. Der Beitrag zur Polarisation verschwindet also, die daraus abgeleitete Größe bezeichnet man mit ε_∞ ². Zwischen diesen Grenzfällen existiert ein Bereich, in dem die Polarisation zu einer Verlagerung der Besetzungswahrscheinlichkeiten führt. Diese aber wird dauernd „umgepolt“, so daß ständig ein gewisser Bruchteil der Ladungsträger in einen energetisch sehr ungünstigen Zustand gehoben wird. Diese geben dann die erhaltene elektrostatische Energie zu späteren Phasenlagen des Feldes als thermische Energie an die Umgebung ab.

Für ein, wie oben angenommenes, harmonisches Feld \vec{E} gilt, daß auch die resultierende dielektrische Verschiebung \vec{D} eine harmonische Zeitabhängigkeit besitzt, also gilt:

$$\begin{aligned} D(t) &= D_0 e^{i(\omega t - \varphi)} \\ &= \frac{D_0}{\varepsilon_0 E_0} e^{-i\varphi} E(t) \\ \Rightarrow \varepsilon(\omega) &= \frac{D_0}{\varepsilon_0 E_0} e^{-i\varphi} \\ &\stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon' - i\varepsilon'' \end{aligned}$$

Man stelle sich nun vor, daß zum Zeitpunkt $t = u$ ein Feld eingeschaltet wird und für die Dauer du aufrecht erhalten wird. Die dielektrische Verschiebung D wird nach Abschalten des Feldes noch eine Zeitlang existieren, für $t \rightarrow \infty$ jedoch verschwinden. Dies läßt sich

¹Dies gilt für **einen** Relaxationsprozeß. Es bedeutet nicht, daß es keine anderen Relaxatoren mit größerer oder kleinerer „Trägheit“ gibt, die durch die entsprechende größere oder kleinere Relaxationszeit wesentlich langsameren Feldveränderungen instantan folgen können, bzw. noch sehr viel schnelleren Feldern zu folgen vermögen. Ein Material kann auf einer entsprechend großen Frequenzskala eine Vielzahl von Relaxationsprozessen zeigen.

²Hier gilt sinngemäß natürlich das gleiche wie für ε_S . Gäbe es nur einen möglichen Relaxationsprozeß, so müßte strenggenommen $\varepsilon_\infty \equiv 1$ (Vakuummwert) gelten. Es können jedoch noch Relaxationsprozesse bei höheren Frequenzen auftreten, so daß sich für einen bestimmten Prozeß ε_∞ aus der Summe aller statischen DK's ε_{S_i} der Relaxatoren und Polarisationsprozesse höherer Frequenz zusammensetzt. Genauso ist natürlich für den i -ten Prozeß $\varepsilon_{S_i} = \varepsilon_{\infty(i-1)}$ anzunehmen.

mit einer geeigneten **Relaxationsfunktion** $\alpha(t)$ beschreiben (siehe dazu [7] und [8]):

$$D(t-u) = \varepsilon_0 E(u) \alpha(t-u) du, \quad t > u + du$$

mit $\alpha(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0$

Nimmt man alle „instantanen“ Prozesse (s.o.) mit, so erhält man einen Anteil $\propto \varepsilon_\infty$:

$$\rightsquigarrow D(t-u) = \varepsilon_0 \varepsilon_\infty E(u) + \varepsilon_0 \alpha(0) E(u) du, \quad t-u < du$$

Geht man nun zu zeitabhängigen Feldern über, die verschiedene Einschalt Dauern haben, so folgt eine Superposition der Felder:

$$D(t) = \varepsilon_0 \varepsilon_\infty E(t) + \varepsilon_0 \int_0^t \alpha(t-u) E(u) du$$

Man beachte jedoch, daß bisher nur eine Abklingfunktion α betrachtet wird, d. h. es wird auch nur ein physikalischer Prozeß berücksichtigt.

Durch Vergleich von $E(t)$ und $D(t)$ folgt sofort

$$\begin{aligned} D(t) &= \varepsilon_0 \varepsilon_\infty E(t) + \varepsilon_0 \int_0^t \alpha(t-u) E(u) du \\ &= \varepsilon_0 \varepsilon_\infty E(t) + \varepsilon_0 E(t) \int_0^t \alpha(x) e^{-i\omega x} dx \\ &= \varepsilon_0 E(t) \underbrace{\left\{ \varepsilon_\infty + \int_0^t \alpha(x) e^{-i\omega x} dx \right\}}_{\varepsilon(\omega)} \end{aligned}$$

also:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \int_0^t \alpha(x) e^{-i\omega x} dx \quad (2.3)$$

Diese Funktion ist bisher noch nicht auf einen bestimmten Prozeß festgelegt. Die Information über den physikalischen Prozeß steckt in der zeitlichen Abklingfunktion $\alpha(x)$. Sie ist noch nicht einmal auf Relaxationen festgelegt, sie umfaßt genauso die noch zu besprechenden Resonanzphänomene.

Betrachtet man nun ein System von starren Dipolen, die mehrere Ruhelagen haben, so werden bei Anlegen eines äußeren Feldes die Dipole nach und nach die günstigste (sprich: energetisch niedrigste) Verteilung aufsuchen. Dies geschieht exponentiell mit der Zeit und man kann eine Abklingfunktion der Form $\alpha(t) = \alpha_0 e^{-\frac{t}{\tau}}$ einführen, die das zeitliche Abklingen der Polarisation nach Abschalten eines äußeren Feldes beschreibt (bzw. den Anstieg nach Einschalten einer Anregung). Eine Polarisation dieser Form ist in Bild (2.1) dargestellt.

Einsetzen dieser speziellen Funktion $\alpha(t)$ in Gleichung (2.3) und anschließende Integration liefert die Gleichung:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\alpha_0 \tau}{1 + i\omega \tau} \quad (2.4)$$

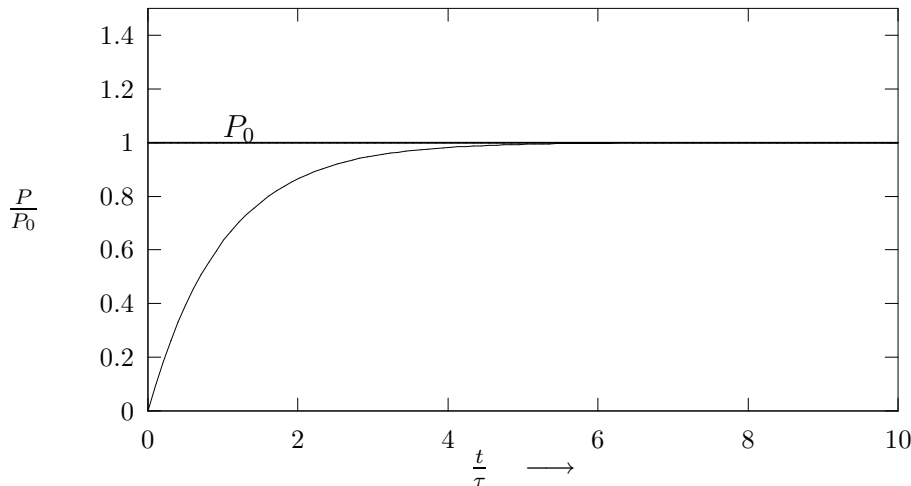


Abbildung 2.1: Dielektrische Polarisierung durch Relaxation: $P(t) = P_0(1 - e^{-\frac{t}{\tau}})$

Beachtet man, daß

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_S - \varepsilon_\infty &= \varepsilon(0) - \varepsilon_\infty \\
 &= \int_0^\infty \alpha_0 e^{-i\frac{x}{\tau}} dx \\
 &= \alpha_0 \tau
 \end{aligned} \tag{2.5}$$

gilt, so erhält man aus (2.4) und (2.5) die zuerst von **Debye** eingeführten Gleichungen

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_S - \varepsilon_\infty}{1 + i\omega\tau} \tag{2.6}$$

$$\begin{aligned}
 \Leftrightarrow \varepsilon' &= \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_S - \varepsilon_\infty}{1 + \omega^2\tau^2} \\
 \varepsilon'' &= \frac{\varepsilon_S - \varepsilon_\infty}{1 + \omega^2\tau^2} \omega\tau
 \end{aligned}$$

Der Verlauf dieser Funktionen ist in Bild (2.2) dargestellt. Man erkennt, daß ε'' ein Maximum bei $\omega\tau = 1$ aufweist. Dies entspricht einer Phasenverschiebung von $\frac{\pi}{2}$. Zu finden ist ein solches Verhalten bei polaren Substanzen, z. B. Wassermolekülen.

Welche Bedeutung haben die Terme ε' und ε'' nun? Betrachtet man eine **ebene Welle** der Form $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$, so gilt beim Übergang vom Vakuum (\vec{k}_0) in ein Medium mit der **Dielektrischen Funktion**³ (DF) ε und der Ausbreitungsgeschwindigkeit v :

$$k = \frac{\omega}{v} = \frac{\omega}{c} \frac{c}{v} = k_0 \sqrt{\varepsilon\mu}. \tag{2.7}$$

³Die dielektrische Funktion ist im nicht-statischen Fall eine Funktion der Frequenz und nicht mehr konstant. Kommt es auf diese Frequenzabhängigkeit nicht an, spricht man aber oft weiterhin von einer Dielektrizitätskonstanten (DK).

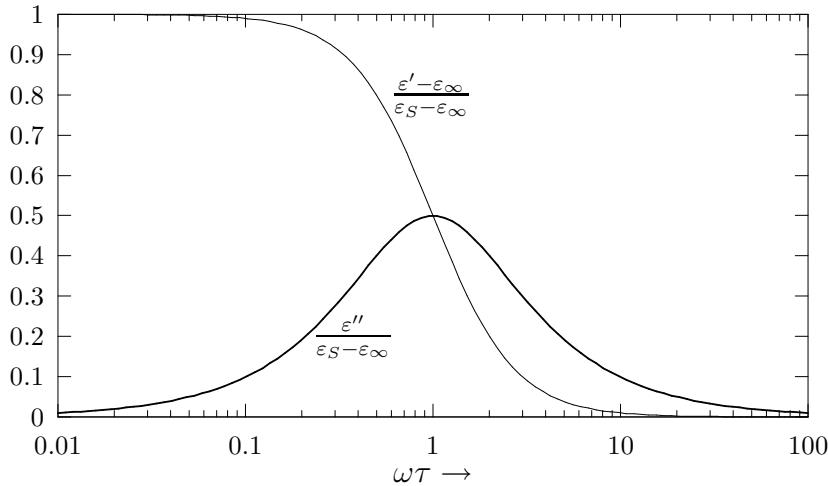


Abbildung 2.2: Idealer Debyescher Relaxator mit Relaxationszeit τ .

Grundsätzlich erfährt die Welle an der Grenzfläche eine Reflexion, so daß eine Amplitudenänderung der Welle entsteht. Setzt man zunächst $\mu = 1$, so sieht man, daß bei der Ausbreitung im Medium eine rein reelle Material-DF $\varepsilon \equiv \varepsilon'$ eine Änderung der Phasenlage der transmittierten Welle zur Folge hat, beim Auftreten von ε'' kommt ein imaginärer Anteil $Im(k)$ hinzu, der auf einen Vorfaktor der ebenen Welle der Form $e^{-\eta x}$, $\eta \in \mathbb{R}$ führt, also eine exponentielle Dämpfung der Welle. Dabei entspricht $\frac{1}{\eta}$ einer Eindringtiefe.

Gibt es für ein bestimmtes Material mehrere, gleichzeitig relevante Abklingzeiten τ_i , so ändert sich die Form der Gleichung (2.6) nicht. Lediglich die Relaxationsfunktion $\alpha(t, \tau_i)$ wird modifiziert. Ein Spektrum von Abklingzeiten führt zu einer **Verbreiterung des Verlustpeaks**⁴.

Bisher wurde nur von gebundenen Ladungsträgern gesprochen. Gibt es freie oder nur schwach gebundene Ladungsträger, so wird durch ein Feld zusätzlich zum Verschiebestrom ein Strom \vec{J} verursacht. Dieser ist im Gegensatz zum Verschiebestrom immer in Phase mit dem anregenden Feld und verursacht daher eine Dissipation von Energie. Daher können die hieraus resultierenden Verluste zum Verlustterm ε'' hinzugezählt werden, ein expliziter Strom, wie er in der Maxwellgleichung $\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J}$ auftritt, ist reine Konvention. Wie der Strom in den Verlustfaktor eingeht, zeigt folgender Vergleich: Betrachtet man die inhomogene Maxwell-Gleichung

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J} \stackrel{!}{=} \varepsilon_0 \tilde{\varepsilon}(\omega) \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

so erhält man aus $\vec{J} = \sigma \vec{E}$ einen Zusatzterm $\frac{\sigma}{\varepsilon_0 \omega}$, den man einer erweiterten dielektrischen Funktion $\tilde{\varepsilon}(\omega)$ zuordnen kann. Daraus ergibt sich für $\tilde{\varepsilon}''$

$$\tilde{\varepsilon}'' = \frac{\sigma}{\varepsilon_0 \omega} + \frac{\varepsilon_S - \varepsilon_\infty}{1 + \omega^2 \tau^2} \omega \tau . \quad (2.8)$$

⁴siehe dazu [8], Kap. III, §12.

Der erste Term ist offensichtlich ein Beitrag, der durch eine Gleichstromleitfähigkeit verursacht wird.

Eine weitere Konvention ist, Gleich- und Wechselstromanteile einzuführen, so daß einerseits (2.8) gilt, andererseits die konventionelle Form der inhomogenen Maxwellgleichung $\nabla \times \vec{H} - \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{J}$ erhalten bleibt. Diese Vereinbarung wurde z. B. in [7] benutzt.

Im folgenden wird die verallgemeinerte DF $\tilde{\epsilon}$ nur noch mit ϵ bezeichnet, wobei die Verluste durch Leitfähigkeiten des Mediums immer als Bestandteil von ϵ'' betrachtet werden.

2.1.2 Resonanzverluste

Bisher wurden zur Beschreibung der Relaxationen „starre“ Dipole betrachtet, die man sich in etwa als hantelförmige Gebilde mit auf den Endpunkten einer Stange liegenden Ladungen vorstellen kann. Die Verbindungslinie dieser Ladungen ist aber im allgemeinen nicht fest, sondern elastisch, d. h. die Ladungen können um eine Ruhelage schwingen und so ihre Entfernung zueinander variieren (im obigen Modell der Hantel müßte man also die Hantelstange durch eine Feder ersetzen).

Da die Entfernung zwischen den Ladungen aber direkt in die Polarisierbarkeit eingeht, kann man angesichts der Oszillation der Dipolmomente nur noch statistische Aussagen über die augenblickliche Polarisierung treffen: Im thermischen Gleichgewicht werden momentane Amplitude und Schwingungsrichtung gleichverteilt sein, so daß die globale, makroskopische Polarisierung verschwindet. Diese erhält man durch Summation über alle Oszillatoren in einem definierten Volumen. Legt man nun ein äußeres Feld \vec{E} an, so werden die Ruhelagen der Schwingungen um eine Strecke $\vec{r}_0 = \frac{e}{m\omega_0^2} \vec{E}$ verschoben (dabei wird angenommen, daß das angelegt Feld parallel zur Richtung des Dipolmomentes zeigt, siehe [8]). Die angeregte Schwingung wird durch termische Stöße gedämpft werden, so daß sie exponentiell abklingt. Durch Integration über ein Raumgebiet läßt sich daher für die makroskopische Polarisierung folgern, daß sie eine gedämpfte Schwingung um die mittlere Polarisierung P_0 ($\propto Nr_0e$ bei N Teilchen) ausführt. Ein solcher Verlauf ist in Bild (2.3) skizziert.

Nach Abschalten des Feldes erwartet man natürlich ein gleiches Verhalten mit einer Schwingung um die Polarisierung 0. Dies kann man wieder durch eine geeignete Abklingfunktion $\alpha(t)$ ausdrücken. Ein Ansatz ist die folgende Funktion:

$$\alpha(t) = \alpha_0 e^{-\frac{t}{\tau}} \cos(\omega_0 t + \phi_0) \quad (2.9)$$

Diese Funktion soll sich auf einen *makroskopischen* Körper, nicht auf einen einzelnen, mikroskopischen Oszillator beziehen. Die mikroskopischen Schwingungen werden bei Temperaturen $T > 0$ niemals ganz verschwinden, da aus der Thermodynamik folgt, daß jeder Freiheitsgrad einer Bewegung eine Energie $\propto k_B T$ besitzt. Insbesondere werden also Schwingungen bei Temperaturen $T \neq 0$ immer thermisch angeregt sein.

Setzt man diese Funktion in die allgemeine Gleichung (2.3) ein, so erhält man nach

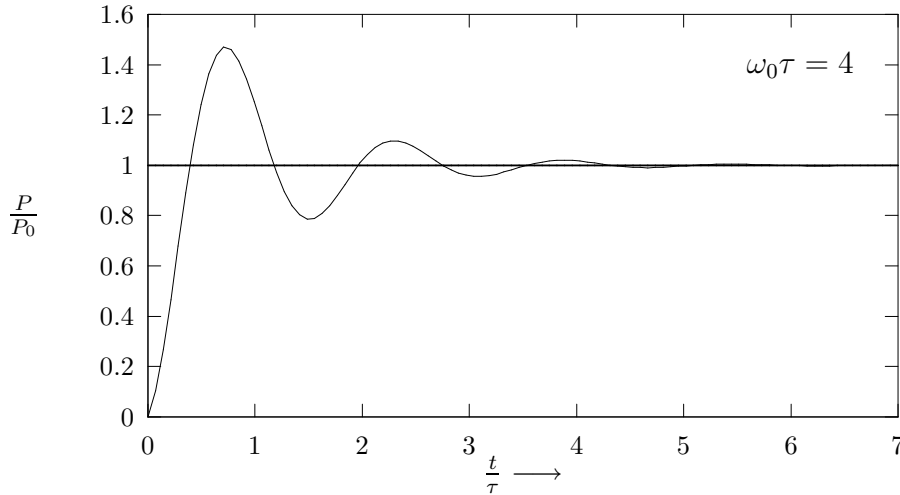


Abbildung 2.3: Polarisierung bei oszillierenden Systemen: $P(t) = P_0\{1 - e^{-\frac{t}{\tau}} \cos(\omega_0 t + \phi)\}$

einiger Umrechnung:

$$\begin{aligned} \varepsilon(\omega) - \varepsilon_\infty &= \alpha_0 \int_0^\infty e^{-\frac{x}{\tau}} \cos(\omega_0 x + \phi_0) e^{-i\omega x} dx \\ &= \frac{\alpha_0}{2} \left\{ e^{i\phi_0} \int_0^\infty e^{-x(\frac{1}{\tau} - i(\omega_0 - \omega))} dx + e^{-i\phi_0} \int_0^\infty e^{-x(\frac{1}{\tau} + i(\omega_0 + \omega))} dx \right\} \end{aligned}$$

Hieraus folgt dann $\varepsilon(\omega)$ für die **Resonanzabsorption**

$$\varepsilon(\omega) - \varepsilon_\infty = \frac{\alpha_0 \tau}{2} \cos(\phi_0) \left\{ \frac{1 + i \tan(\phi_0)}{1 - i(\omega_0 - \omega)\tau} + \frac{1 - i \tan(\phi_0)}{1 + i(\omega_0 + \omega)\tau} \right\} \quad (2.10)$$

Die Parameter α_0 und ϕ_0 lassen sich aus Grenzwertbetrachtungen für $\omega \ll \omega_0$ sowie $\omega \gg \omega_0$ ableiten. Man setzt dazu einen neuen Parameter $\Delta\varepsilon$ ein, wobei fern von der Resonanzstelle ω_0 die Beziehung $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \Delta\varepsilon$ gelten soll. Damit erhält man die Gleichung(en):

$$\begin{aligned} \varepsilon(\omega) - \varepsilon_\infty &= \frac{1}{2} \Delta\varepsilon \left\{ \frac{1 - i\omega_0\tau}{1 - i(\omega_0 - \omega)\tau} + \frac{1 + i\omega_0\tau}{1 + i(\omega_0 + \omega)\tau} \right\} \quad (2.11) \\ \Leftrightarrow \quad \varepsilon' - \varepsilon_\infty &= \frac{1}{2} \Delta\varepsilon \left\{ \frac{1 + \omega_0(\omega_0 - \omega)\tau^2}{1 + (\omega_0 - \omega)^2 \tau^2} + \frac{1 - \omega_0(\omega_0 + \omega)\tau^2}{1 + (\omega_0 + \omega)^2 \tau^2} \right\} \\ \varepsilon'' &= \frac{1}{2} \Delta\varepsilon \left\{ \frac{1}{1 + (\omega_0 - \omega)^2 \tau^2} + \frac{1}{1 + (\omega_0 + \omega)^2 \tau^2} \right\} \omega\tau \end{aligned}$$

Durch diese Gleichung (2.11) wird eine Absorption durch elektrische Dipolresonanz beschrieben. Der Parameter $\Delta\varepsilon$ ist nur noch vom verwendeten Material abhängig und muß durch Messungen bestimmt werden. Eine typische Resonanzkurve ist in Bild (2.4) dargestellt.

Zu einer Unterscheidung von Relaxationen und Resonanzen in der praktischen Meßtechnik werden im Normalfall Temperaturverläufe der DF aufgenommen, denn eine stark

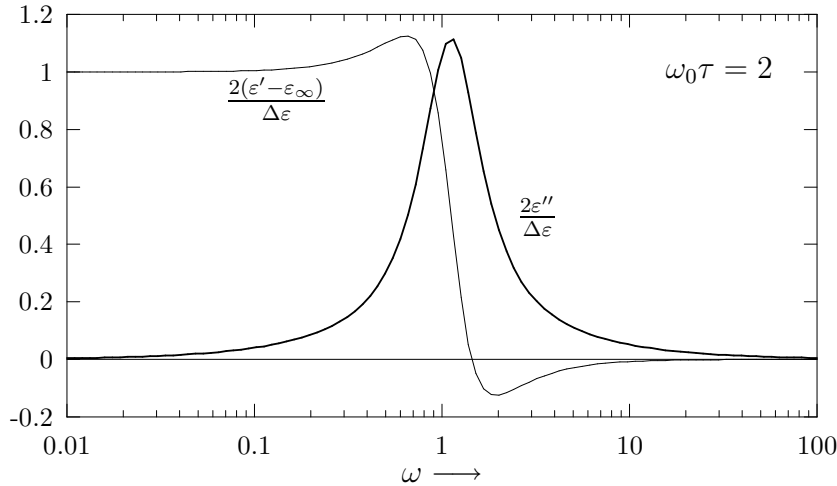


Abbildung 2.4: Die Dielektrische Funktion bei einer Resonanzabsorption

gedämpfte Resonanz ist von einer Relaxation u.U. nicht zu differenzieren. Der Einfluß der Temperatur geht bei beiden Prozessen glücklicherweise auf unterschiedliche Arten ein. Die Relaxationen sind thermisch angeregte Prozesse, also werden sie mit der Energie über einen Boltzmannfaktor $e^{\frac{\Delta G}{k_B T}}$ verknüpft sein. Die zur Resonanzabsorption notwendige Energie dagegen ist in erster Linie von der die Ladungen verbindenden Kopplung abhängig, deren Stärke normalerweise nicht drastisch von der Temperatur beeinflusst wird, dafür wird die Halbwertsbreite mit wachsender Temperatur größer.

Durch eine Messung der Verluste bei verschiedenen Temperaturen kann also eine Unterscheidung zwischen Absorption durch Relaxation und einer Absorption durch Resonanz getroffen werden.

2.2 Magnetische Wechselwirkungen

Vieles von dem, was über elektrische Dipole ausgesagt wurde, läßt sich auf magnetische Dipole übertragen. Lediglich die mathematischen Verfahren sind komplexer, da es sich teilweise um Vektor-Vektor-Wechselwirkungen handelt. Diese Analogie wird bewußt betont, da bei einer formalen Gleichbehandlung der Wechselwirkungseffekte eine ähnliche Form der Effektiv-Medien-Formeln erwartet werden kann. Weiterhin muß man den Umstand beachten, daß es sich bei den Verlusten, die auf Induktion von Wirbelströmen beruhen, eben um einen *Stromfluß* handelt, der *ohne* Leitfähigkeit nicht vorhanden ist. Daher kann man eigentlich μ'' und ϵ'' nur formal getrennt voneinander behandeln, falls das zu untersuchende Material eine von Null verschiedene Leitfähigkeit besitzt.

Eine Gegenüberstellung der verschiedenen Effekte und deren Einfluß auf die makroskopische Permeabilität findet sich am Ende des Abschnittes.

2.2.1 Hysterese-Verluste

In einem ferromagnetischen Material existieren sowohl reversible als auch irreversible Prozesse, die eine Veränderung der Magnetisierung zur Folge haben. Durch die irreversiblen Prozesse geht eine durch ein äußeres Feld erzeugte Magnetisierung eines vorher unmagnetischen Materials nach Abschalten des Feldes nicht mehr völlig auf Null zurück, sondern es bleibt eine Restmagnetisierung. Diese kann erst durch ein Gegenfeld zunichte gemacht werden, dessen Betrag als Koerzitivfeldstärke bezeichnet wird. Nimmt man eine quasistatische Magnetisierungskurve $M(H)$ mit hinreichend großer Feldstärke auf, so erhält man deshalb eine gespaltene Kurve, die **Hysterese-Schleife**. Durch die Asymmetrie dieser Kurve bedingt, ist die resultierende magnetische Induktion ebenfalls nicht symmetrisch und verformt, so daß durch eine streng harmonische Anregung $H = H_0 \cos(\omega t)$ der Verlauf der magnetische Induktion $B(H)$ zwar periodisch ist, aber nicht mehr durch eine einzelne harmonische Funktion beschrieben werden kann. Trotzdem behält die magnetische Induktion wichtige Symmetrieeigenschaften bei:

$$\begin{aligned} B(\omega t + 2\pi) &= B(\omega t) \\ B(\omega t + \pi) &= -B(\omega t) . \end{aligned}$$

Betrachtet man periodische Magnetfelder kleiner Amplitude, so geht die Magnetisierung und damit auch die magnetische Induktion nicht mehr in die Sättigung, daher kann man die entstehende, sogenannte **Rayleigh-Schleife** ([10]) in erster Näherung durch die Gleichungen

$$B = (\mu_A + \kappa H_m)H \pm \frac{\kappa}{2}(H^2 - H_m^2) \quad (2.12)$$

mit einer Konstante κ beschreiben (dies entspricht zwei Parabeln, + für den aufsteigenden, – für den absteigenden Ast, H_m ist die maximale Feldstärke). Führt man für B unter Ausnutzung der Symmetrie-Eigenschaften eine **Fourier-Zerlegung** durch (siehe [10]), so erhält man als Resultat durch Vergleich mit $B = \mu_0 \mu H$

$$\mu = \underbrace{\mu_A + \kappa H_0}_{\mu'} - i \underbrace{\frac{4}{3\pi} \kappa H_0}_{\mu''} , \quad (2.13)$$

wobei H_0 die Amplitude des anregenden Feldes ist. Bei kleinen Feldern ist κ genau wie die **statische Anfangspermeabilität** μ_A eine frequenzunabhängige Materialkonstante. Dies gilt allerdings, streng genommen, nur für nicht zu große Frequenzen, da sonst die noch zu erklärenden Resonanz- und Relaxationsmechanismen zum Tragen kommen. Letztere sind dabei im wesentlichen thermodynamischer Natur und beruhen hauptsächlich auf Diffusionsprozessen. In Hinsicht auf die in Messungen mit Mikrowellen auftretenden Frequenzen sei bereits hier angedeutet, daß auf Hysterese-Verlusten beruhende Effekte bereits im Bereich von Radiowellen keine Rolle mehr spielen. Zur Aufnahme einer Hysterese-Kurve ist immer eine quasistatische Änderung des anregenden Feldes angenommen, das Medium hat also immer ausreichen viel Zeit, um vollständig zu relaxieren. Bei steigender Frequenz rücken die Äste der Hysterese-Schleife immer weiter zusammen und werden (bei nicht zu hoher Feldamplitude) immer besser durch einen linearen Verlauf durch die Anfangspermeabilität beschrieben, d. h. die Permeabilität ist im wesentlichen durch μ_A gegeben.

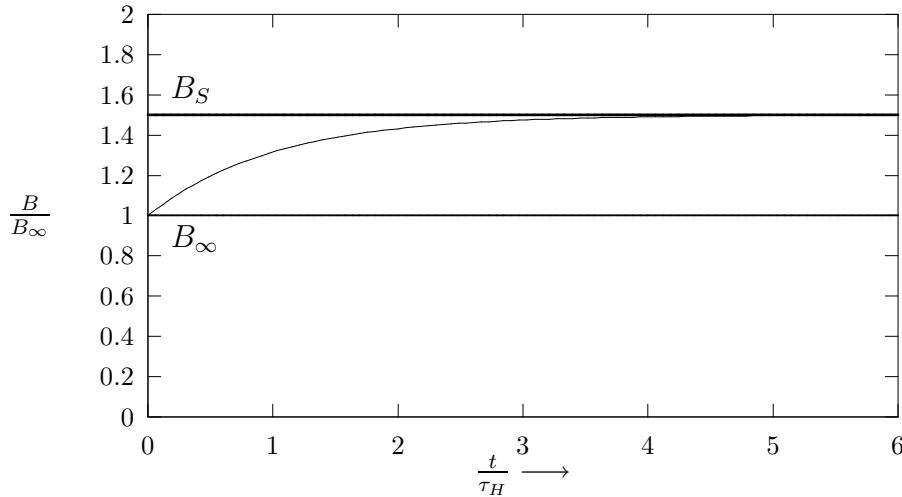


Abbildung 2.5: Relaxation der magnetischen Induktion nach Einschalten eines Feldes H bei $t = 0$

2.2.2 Relaxationsprozesse

Der Ansatz der nun folgenden Herleitung unterscheidet sich im Prinzip in nichts von dem oben bereits gezeigten Debyeschen Verfahren. Lediglich die mathematische Ableitung beschreitet einen anderen Weg (vgl. [10]).

Formal werden erst einmal abstrakte Dipole beschrieben. Diese Dipole können permanenter Natur (Spins) oder induzierbar sein (summierte Magnetisierungen in Domänen). Tatsache ist jedoch, daß in jedem magnetischen Material Dipole vorhanden sind und somit auch die entsprechenden Effekte verursachen.

Man geht auch hier von einem Einschaltvorgang des magnetischen Feldes H aus. Die magnetische Induktion B besitzt Anteile, die dem Feld relativ schnell⁵ folgen können, so daß bei Einschalten des Feldes (fast) augenblicklich ein Anteil der magnetischen Induktion B_∞ vorhanden ist. Danach wird die Induktion langsam auf ihren Endwert B_S (S steht für statisch) ansteigen (Die Wahl der Indizes soll auf die *Geschwindigkeit* hindeuten, mit welcher der entsprechende Wert erreicht wird). Auch hier setzt man der Einfachheit halber an, daß die Anstiegsgeschwindigkeit der Differenz $B_S - B_\infty$ proportional ist, was einem statistischen Prozeß entspricht (siehe dazu Abbildung (2.5)). Dies führt auf eine Differentialgleichung

$$\frac{\partial(B - B_\infty)}{\partial t} = \frac{1}{\tau}(B_S - B) .$$

⁵„Schnell“ bedeutet hier eine Größenordnung von 10^{-8} s. Siehe dazu auch die Abschnitte über Spin- und Wirbelstromrelaxation.

Diese DGL hat eine allgemeine Lösung⁶ der Form

$$(B(t) - B_\infty) = C e^{-\frac{t}{\tau}} + \int_0^t (B_S - B_\infty) e^{-\frac{t-x}{\tau}} \frac{dx}{\tau}$$

Setzt man eine harmonische Anregung der Form $H(t) = H_0 e^{i\omega t}$ an, und setzt weiterhin $B_\infty = \mu_0 \mu_\infty H$ sowie $B_S - B_\infty = \mu_0 (\mu_S - \mu_\infty) H$, so findet man

$$B = \mu_0 \left\{ \mu_\infty + \frac{\mu_S - \mu_\infty}{1 + i\omega\tau} \right\} H, \quad (2.14)$$

also

$$\mu(\omega) = \mu_\infty + \frac{\mu_S - \mu_\infty}{1 + i\omega\tau}. \quad (2.15)$$

Diese Gleichung hat demnach eine Debye-Form, was auch nicht verwundert, da es sich um eine Dipolrelaxation handelt. Um es an dieser Stelle noch einmal zu wiederholen: Man hätte den Debyeschen Relaxator auch über den gerade gezeigten Weg ableiten können, jedoch wurde an obiger Stelle die Debyesche Herleitung nachvollzogen. Die dahinterstehenden Modellvorstellungen sind identisch.

Es werden auch keine spezifischen Aussagen über den Mechanismus der Wechselwirkungen gemacht, diese sind in der Relaxationskonstanten τ enthalten. Den Faktor $\frac{B_S - B_\infty}{B_\infty} = \frac{\mu_S - \mu_\infty}{\mu_\infty}$ bezeichnet man hier als **Relaxationsstärke**.

In der Praxis wird man keine Relaxationen einzelner Dipole (Spins) in einer Messung bestimmen können (s.u.): typische Relaxationsphänomene sind Magnetisierungsdrrehungen in Domänen.

2.2.3 Resonanz-Effekte

Spinrelaxation

Das Anlegen eines magnetischen Gleichfeldes \vec{H}_0 führt zu einer gedämpften Präzessionsbewegung des magnetischen Momentes \vec{M} um den Richtungsvektor des Feldes. Diese Bewegung wird durch die **Gilbert-Gleichung** beschrieben⁷:

$$\frac{\partial \vec{M}_S}{\partial t} = -|\gamma| (\vec{M}_S \times \vec{H}_{eff}) + \frac{\alpha}{\|\vec{M}_S\|} (\vec{M}_S \times \frac{\partial \vec{M}_S}{\partial t}) \quad (2.16)$$

Dabei bedeutet \vec{H}_{eff} das lokale Magnetfeld, das sich aus verschiedenen Beiträgen wie äußerem Feld, Anisotropiefeld usw. zusammensetzt, γ ist das bekannte gyromagnetische Verhältnis und \vec{M}_S ist die durch die Spins verursachte Magnetisierung. Der letzte Term dieser Gleichung ist ein Ausdruck für die Dämpfungsbewegung des präzedierenden Spins mit einer empirischen Konstante α . Der Vektor $(\vec{M}_S \times \frac{\partial \vec{M}_S}{\partial t})$ steht zu jeder Zeit senkrecht auf der Präzessionsbahn und weist auf die Achse des Magnetfeldes hin. Er entspricht

⁶Es handelt sich um eine inhomogene Differentialgleichung des Typs $y'(x) + g(x)y(x) = h(x)$, welche mit dem Verfahren der *Variation der Konstanten* gelöst werden kann.

⁷Eine ausführlichere Herleitung findet sich ebenfalls in [10].

einer Kraft, die die präzedierende Magnetisierung ständig in Richtung des Magnetfeldes hin zwingt. Der Spin wird also, klassisch gesprochen, in das Feld hineingedreht. Die dazu benötigte Zeit ist von der Größenordnung $10^{-8}s$.

Die Bewegung ist eigentlich eine stark gedämpfte Schwingung und vom Relaxation nicht zu unterscheiden; der erwähnte rechte Term der Gleichung (2.16) ist ein Dämpfungsterm. Bei gleichzeitigem Anlegen eines hochfrequenten, orthogonalen Magnetfeldes können die Präzessionsbewegungen jedoch aufrecht erhalten werden, die dazu nötige Energie wird dem Feld entzogen. Es werden sich also Verluste des HF-Feldes einstellen, sobald dessen Frequenz sich der **Larmor**-Frequenz $\omega_0 = |\gamma|H_{eff}$ nähert.

Spin-Resonanzen lassen sich zum Beispiel bei Eisenproben ($H_{eff} \simeq 80000 \frac{A}{m}$) im Bereich von 1–30 GHz finden (je nach Form der Probe).

Zu diesen Resonanzen ist noch zu sagen, daß sie auch bei Fehlen eines äußeren Feldes zu finden sind. Das notwendige Gleichfeld wird dabei lokal durch Anisotropien im Kristall erzeugt. Daher lassen sich auf Spinresonanz beruhende Verluste auch durch Mikrowellen-Messungen feststellen. Auch hier wird der Effekt nicht von einzelnen Spins erzeugt, sondern durch die kollektive Bewegung vieler magnetischer Dipole.

Blochwandschwingungen

Zwischen zwei Bereichen homogener Magnetisierung in einem Ferromagneten gibt es Grenzflächen. Da die Magnetisierung nicht un stetig springt, müssen diese Grenzflächen eine gewisse Dicke haben, in denen die Spins aus der energetisch günstigsten Lage herausgekippt sind und somit einen stetigen Übergang von einer Domäne in die andere erlauben. Diese Schichten sind einige Atomlagen dick und werden **Blochwände** genannt. Ebenfalls aufgrund der gerade erwähnten **Spinträchtigkeit** verhalten sich Blochwände, als hätten sie eine Masse bzw. eine Trägheit. Bei Anlegen eines äußeren Wechselfeldes $H(\omega)$ sind sie deshalb in der Lage, Schwingungen um eine Ruhelage auszuführen. Dies gilt natürlich nur unter der Bedingung, daß die Feldamplituden nicht zu groß werden. Überschreiten sie eine Grenze H_C (Koerzitivfeldstärke), so sind die Bewegungen der Blochwand irreversibel und es kommt zu **Barkhausen-Sprüngen**.

Die Bewegung kann durch eine klassische Bewegungsgleichung dargestellt werden:

$$m\ddot{x} + \beta\dot{x} + \alpha x = pHM_S \cos(\theta) . \quad (2.17)$$

Hier ist m ein Maß für die „Masse“ der Wand, β eine Dämpfungskonstante und α eine Federkonstante. Der Winkel θ entspricht der Abweichung des Magnetfeldes von der Richtung der Blochwand. Die anregende Kraft resultiert aus der Wechselwirkung des Spinmomentes mit dem äußeren Feld. Der Parameter p ist ein Ausdruck für die Verkippung der Spins und vom Typ der Blochwand abhängig. Er ist von der Größenordnung 1. Eine allgemeine Lösung (unter den oben genannten Einschränkungen) mit einem periodischen Feld $H = H_0 e^{i\omega t}$ ist

$$x = \frac{pH_0 M_S \cos(\theta)}{\alpha} \cdot \frac{1}{1 - \frac{m}{\alpha}\omega^2 + i\omega\frac{\beta}{\alpha}} \cdot e^{i\omega t}$$

Nimmt man eine lamellenförmige Anordnung der Blochwände an mit Dicke d und Abstand

$2l$, so entspricht eine Verschiebung um x einer Magnetisierung

$$M = pM_S \cos(\theta) \frac{x}{2l}$$

Die statische Anfangssuszeptibilität $\chi_S = \frac{\mu_0 H}{M}$ findet man durch $\omega \rightarrow 0$ zu

$$\chi_S = \frac{p^2 M_S^2 \cos^2(\theta)}{2\alpha l} .$$

Läßt man alle Richtungen der Blochwände zu, gilt $\langle \cos^2(\theta) \rangle = \frac{1}{3}$, und somit

$$\chi_S = \frac{p^2 M_S^2}{6\alpha l} .$$

Daraus läßt sich über $\frac{\chi}{\chi_S} = \frac{\mu}{\mu_S}$ die komplexe Permeabilität berechnen:

$$\mu(\omega) = \mu_S \left\{ \frac{1}{1 - \frac{m}{\alpha} \omega^2 + i \cdot \frac{\beta}{\alpha} \omega} \right\} \quad (2.18)$$

Dies beschreibt ebenfalls einen Resonanzeffekt. Der typische Verlauf einer solchen Resonanz ist äquivalent zu der in Bild (2.4) für die dielektrische Funktion ε .

2.2.4 Wirbelstromverluste

Bei einem magnetischen Material mit Leitfähigkeit σ entstehen bei Einstrahlung elektromagnetischer Wellen Wirbelströme, die über den ohmschen Widerstand zu Joulschen Wärmeverlusten führen. Aus der Wellengleichung

$$\Delta \vec{H} = i\omega\sigma\mu_0\mu_S \vec{H} \quad (2.19)$$

und unter der Annahme, daß es sich um eine dünne, leitfähige Platte handelt, kann man mit dem Ansatz $H = H_0 e^{i\omega t}$ diese Gleichung lösen und erhält für die magnetische Induktion⁸ (gemittelt über die Blechdicke d):

$$\begin{aligned} B &= \frac{\mu_0 \mu_S}{d} \int_{-\frac{d}{2}}^{+\frac{d}{2}} H_z dx \\ &= \mu_0 \mu_S \frac{\tanh(\frac{d}{2} \sqrt{i\omega\sigma\mu_S})}{\frac{d}{2} \sqrt{i\omega\sigma\mu_S}} H_0 e^{i\omega t} . \end{aligned}$$

Mit der Vereinfachung $\omega_W = \frac{8}{\sigma\mu_0\mu_S d^2}$ (Wollmance Grenzfrequenz) leitet sich daraus die Gleichung

$$\mu(\omega) = \frac{\tanh(\sqrt{2i \frac{\omega}{\omega_W}})}{\sqrt{2i \frac{\omega}{\omega_W}}} \mu_S \quad (2.20)$$

her. Diese beschreibt Verluste durch Wirbelströme. In Bild (2.6) ist ein solcher Permeabilitätsverlauf dargestellt. Man erkennt, daß er auf den ersten Blick einer Relaxation ähnelt, jedoch ist die Verlustkurve ($\frac{\mu''}{\mu_S}$) gegenüber einem Relaxationsverlust verzerrt.

⁸Zur Herleitung siehe [10].

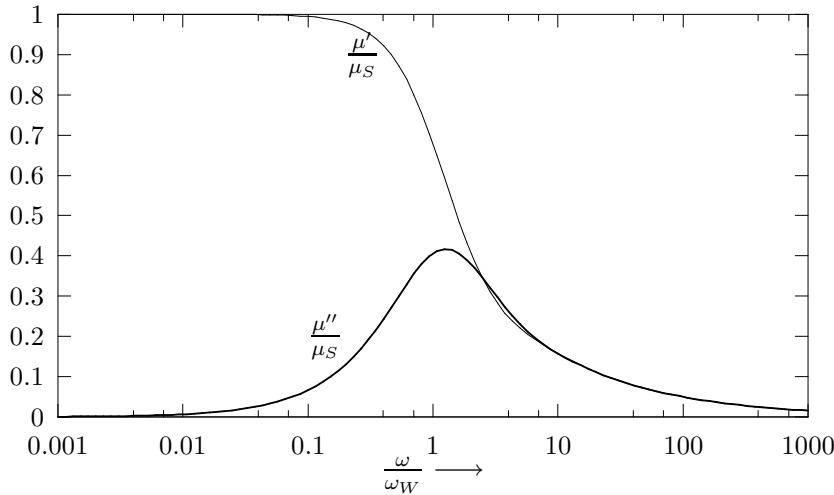


Abbildung 2.6: Relative Permeabilität μ als Folge von Wirbelstromverlusten.

2.2.5 Vergleich der Effekte

Eine grundsätzliche Unterscheidung der Effekte kann in magnetischen Materialien nicht immer geleistet werden. Man kann nur in etwa die Frequenzbereiche dahingehend unterteilen, daß bestimmte Prozesse ab einer gewissen Frequenz nicht mehr auftreten. Hystereseverluste sind, wie oben schon erwähnt, bei Radiofrequenzen nicht mehr von Belang. Was die Verschiebung (aperiodischer Grenzfall der Schwingung) einer Blochwand angeht, so ist festzustellen, daß dies im weitesten Sinne eine Relaxation ist, welche im Extremfall zu einem Barkhausensprung führt. Man kann sie bei Wechselfeldern, vor allem in leitfähigen Materialien, nicht von Blochwandschwingungen trennen, da diese Schwingungen durch induzierte Wirbelströme stark gedämpft sind und in den Kriechfall übergehen. In leitfähigen Materialien benehmen sich verschobene Blochwände wie mikroskopische Wirbelstrombremsen. Solche Blochwand-Effekte sind, vor allem durch die Trägkeit der Blochwände bedingt, oberhalb von etwa 5 MHz nicht mehr feststellbar und tragen daher zu einer effektiven Permeabilität nicht mehr bei. Auch makroskopische Wirbelströme haben bei solch hohen Frequenzen keinen großen Einfluß mehr auf die Permeabilität $\mu(\omega)$, da Wirbelströme durch die (effektive) Masse der Ladungsträger nicht mehr beliebig stark anregbar sind.

Nach wie vor kann es aber zu makroskopischen Drehungen der Magnetisierung einzelner Domänen kommen. Dies sind aber ebenfalls „kollektive“ Effekte, die eine kohärente Drehungen einer Vielzahl von Spins erfordern. Auch diese Effekte tragen nur bis etwa 30 MHz zur Permeabilität wesentlich bei. Relaxations- und Resonanzeffekte einzelner Spins sind durch die starke Kopplung innerhalb der Ferromagnete eigentlich nur bei Temperaturen zu beobachten, die deutlich über 400 K liegen. Spinaufgelöste Resonanzerscheinungen sind in Mikrowellenexperimenten daher nicht zu erwarten.

Bei nicht-leitfähigen Materialien wie z. B. Ferriten ist es möglich, echte Blochwandresonanzen zu finden, deren Resonanzfrequenz in der gleichen Größenordnung liegt wie

die der stark gedämpften Schwingung. Sie werden hier nicht mehr durch die sonst allgegenwärtigen Wirbelstromverluste überlagert und sind direkt sichtbar.

Der einzige Effekt, der sich also breitbandig im Frequenzbereich bemerkbar machen kann, ist die Relaxation und Resonanz von durchgehenden Bereichen innerhalb kleiner Teilchen, die als ganzes angeregt und gedreht werden können. Hier hängt die Resonanzfrequenz in erster Linie von einem äußeren, homogenen Gleichfeld ab und auch die Größenverteilung der Teilchen spielt eine Rolle.

Es läßt sich somit festhalten, daß bei ferromagnetischen Stoffen die Bewegung einzelner Dipole normalerweise wegen der starken Kopplung der Spins untereinander nicht zu beobachten ist. Relaxationen und Resonanzen sind in erster Linie in den Grenzflächen zwischen Domänen anzusiedeln und werden durch eine kollektive Bewegung einer Vielzahl von Spins erzeugt.

Kapitel 3

Theorie der effektiven Medien

Nachdem im letzten Abschnitt die Mechanismen untersucht wurden, die verschiedene Beiträge zu den Materialparametern ε und μ leisten, stellt sich nun die Frage, wie aus den Materialparametern der Einzelkomponenten die Eigenschaften eines Gemisches folgen. Dabei werden diese Eigenschaften auch vom Mischungsverhältnis abhängen, mit denen die Komponenten in die Mischung eingehen. In nicht zu sehr verdünnten, stark geordneten Systemen können auch Mehrteilchenwechselwirkungen auftreten, bei denen die kleinen Beiträge einzelner Partikel durch geeignete Überlagerung zu makroskopisch meßbaren Effekten führen. Nicht zuletzt können an Grenzflächen neue Verlustarten hinzukommen, die in einem homogenen Festkörper keine Rolle spielen.

In dieser Arbeit wurde ein spezielles Gemisch betrachtet, welches besondere Eigenschaften aufweist und als **effektives Medium** bezeichnet wird. Ein solches Medium zeichnet sich dadurch aus, daß es in Bezug auf die Wechselwirkung mit elektromagnetischen Feldern quasi-homogen ist und somit der mikroskopische Einfluß der in eine homogene Matrix eingemischten Partikel keine Auswirkungen auf das makroskopische Verhalten des Mediums hat. Insbesondere dürfen keine geometrischen Effekte wie Interferenzen o.ä. auftreten, da in diesem Fall das Gemisch nicht homogen ist, sondern über bestimmte Vorzugsrichtungen verfügt. Selbstverständlich gibt es auf einer mikroskopischen Skala weiterhin die im letzten Abschnitt besprochenen physikalischen Vorgänge, jedoch dürfen die hierdurch meßbaren Effekte nur als Mittelwerte über ein Volumen spürbar sein und können somit einem Gemisch als effektive Materialparameter zugesprochen werden. *In einem effektiven Medium müssen alle Wechselwirkungen in einem Volumen gemittelt werden können, so daß diese Wechselwirkungen in einem scheinbar homogenen Material geschehen*¹.

Dieser Anforderung an das Gemisch sind natürlich Grenzen gesetzt, da sie immer auf die anregenden Felder bezogen werden müssen. Naiv gesprochen bedeutet dies, daß ein Medium, welches für Strahlung einer bestimmte Wellenlänge ein homogenes Material ist, bei Wellen viel kleinerer Länge sehr wohl Teilcheneffekte zeigen kann (z. B. Röntgenbeugung an einem durchsichtigen Kristall).

Die Forderung der Quasi-Homogenität, die zu einem effektiven Medium führt, kann also immer nur auf die zu betrachtende Wellenlänge bezogen werden, was man üblicher-

¹Dies entspricht einer Größe, die in der Statistischen Physik als intensive Größe bezeichnet wird.

weise durch die Bedingung

$$\|\vec{k}_0\|a \ll 1 \quad (3.1)$$

(Grenzfall langer Wellen) ausdrückt, wobei $\|\vec{k}_0\| = \frac{2\pi}{\lambda}$ der Betrag des Wellenvektors im Vakuum ist und a eine relevante Länge der kleinen Teilchen (z. B. Durchmesser, große Halbachse etc.). Dies macht zunächst noch keine Aussage über die Verhältnisse *innerhalb* dieser Teilchen, da der innere Wellenvektor $k_i = k_0\sqrt{\varepsilon\mu}$ (siehe Gleichung 2.7) in Abhängigkeit von den Materialwerten zunächst einmal fast beliebig groß werden kann. Bedingung (3.1) reicht also zur Bildung eines wirklich quasihomogenen Mediums nicht immer aus, denn falls die Materialparameter ε , μ groß genug sind, kann die im Vergleich zur Vakuumwellenlänge kleinere Wellenlänge in die Größenordnung der in der Matrix verteilten Partikel kommen, so daß auch geometrische Wechselwirkungen auftreten können. Trotzdem wird diese Bedingung oft benutzt, wenn die betrachteten Teilchen so klein sind, daß ihre Größe auf keinen Fall relevant ist. In diesem Fall ist Bedingung (3.1) eine Umschreibung dafür, daß der quasistatische Grenzfall gegeben ist.

Eine strengere Formulierung für das Vorliegen eines effektiven Mediums kann durch die Einsetzen des inneren Wellenvektor \vec{k}_i in Gleichung (3.1) erreicht werden:

$$\|\vec{k}_i\|a < 1 \quad (3.2)$$

(Quasistatischer Grenzfall). Wird diese Bedingung eingehalten, so integriert eine Welle über den Einfluß vieler Partikel deren Einzelwirkung auf die Welle sonst kaum meßbar wäre.

Bei steigendem Volumenanteil der eingestreuten Partikel kommt es, selbst ohne attraktive Wechselwirkung, zur Bildung größerer zusammenhängender Gebiete, welche mit Teilchenmaterial angefüllt sind. Diese sind im Falle einer statistische Gleichverteilung der Partikel nicht notwendigerweise kompakt und werden als Cluster bezeichnet. Gibt es allerdings eine Ordnung in diesem System, so daß die Cluster vollständig mit dem Teilchenmaterial angefüllt sind, so reicht auch die Bedingung (3.2) nicht mehr aus, sondern hier ist die Teilchengröße durch die Clustergröße zu ersetzen. In den hier betrachteten, statistisch gleichverteilten Systemen ist dies nicht notwendig, da die Cluster nicht massiv² werden.

Die statistische Gleichverteilung ist im Rahmen der hier zu beschreibenden Theorien eine wichtige Voraussetzung, die nicht immer erfüllt ist. Viele natürliche Systeme neigen dazu, Agglomerate zu bilden, so daß Abweichungen von der Gleichverteilung entstehen.

Zur Behandlung effektiver Medien in Bezug auf die dielektrische Funktion gibt es eine ganze Reihe von Veröffentlichungen, die zum Teil bis ins letzte Jahrhundert zurückreichen. Alle dort vorgestellten Theorien unterliegen aber mehr oder weniger starken Einschränkungen, was die Topologie der erlaubten Teilchen oder deren maximalen Volumenanteil angeht. Diese Einschränkungen erschweren oft den Einsatz in der Praxis oder die Übertragung der Theorien auf gemessene Daten. Weiterhin sind, je nach benutzter Teilchenform, deutliche Unterschiede der vorhergesagten effektiven Materialparameter festzustellen.

Im folgenden soll ein kurzer Abriß der klassischen Theorien erfolgen, was die dielektrische Funktion betrifft, und es soll versucht werden, diese Theorien auf die Permeabilität

²“Massiv“ bedeutet in diesem Zusammenhang, daß die Cluster ein geschlossenes Volumen belegen.

zu übertragen. Da bei allen vorgestellten Modellen der quasistatische Grenzfall gegeben ist, kann immer von einer Dielektrizitätskonstanten gesprochen werden. Insbesondere wird die Gültigkeit einer Effektiv-Medien-Formel durch frequenzabhängige Teilchenparameter nicht in Frage gestellt; man hat nur sicherzustellen, daß man im betrachteten Frequenzbereich die entsprechenden Werte der DF kennt. Mit der gleichen Begründung kann auch von einer Permeabilitätskonstanten gesprochen werden.

3.1 Effektive Dielektrische Konstante (DK)

3.1.1 Serien- und Parallelschaltung

Als allereinfachstes Modell kann man sich zwei Materialien so angeordnet vorstellen, daß sie zwei Schichten bilden (z. B. zwischen zwei Kondensatorplatten). Je nachdem, ob die Felder senkrecht oder parallel zur Grenzfläche stehen, spricht man von Serien- oder Parallelschaltung

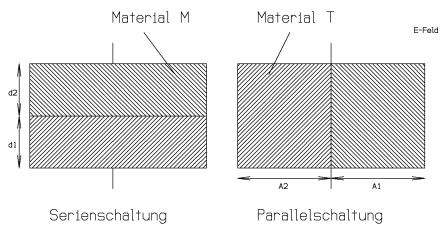


Abbildung 3.1: Einfache effektive Medien: Serien- und Parallelschaltung.

Ebenfalls im Kondensatormodell läßt sich leicht nachrechnen, daß für diesen Fall die Ableitung zweier „Effektiv-Medien-Formeln“ als Funktionen des **Volumenfüllfaktors** f möglich ist:

$$\bar{\epsilon} = \frac{\epsilon_T \epsilon_M}{\epsilon_M f + (1 - f) \epsilon_T} \quad \text{Serienschaltung} \quad (3.3)$$

$$\bar{\epsilon} = \epsilon_T f + (1 - f) \epsilon_M \quad \text{Parallelschaltung} \quad (3.4)$$

Die Vermutung, daß dies die beiden Extrema sind, welche ein effektives Medium annehmen kann, ist plausibel; beide Systeme sind im höchsten Maße geordnet und stellen, je nach Füllfaktor, ein mehr oder wenig verdünntes System dar. Da bei den betrachteten

Systemen immer ein mehr oder weniger ungeordnetes System vorliegt, sind die Grenzfälle der Ordnung orthogonal oder parallel zum Feld die geometrischen Extrema, zwischen denen sich der tatsächliche Zustand des Systems bewegt (vergl. [29]).

3.1.2 Die Clausius-Mosotti-Gleichung

Dieses Modell wurde eigentlich für Gase und stark verdünnte Flüssigkeiten entwickelt, was man auch daran sieht, daß die ursprüngliche Gleichung für $f \rightarrow 1$ divergiert.

Ausgangspunkt des Modelles ist es, ein Medium zu betrachten, dessen einzelne Partikel hinreichend weit voneinander entfernt sind, so daß Mehrteilchenwechselwirkungen ausgeschlossen werden können. Legt man ein äußeres Feld E an, so wird ein bestimmtes Teilchen statt dieses Feldes eine Summe von Feldern spüren. Diese Summe setzt sich zusammen aus dem ursprünglichen Feld, einem Feld, welches durch die Polarisierung der umgebenden, anderen Moleküle entsteht³, und einem inneren Feld, das durch die eigene Polarisierung hervorgerufen wird und in diesem Modell nicht relevant ist (die Teilchen sind hinreichend klein). Das Polarisierungsfeld soll allerdings nur von Molekülen erzeugt werden, die sich außerhalb einer Kugel K mit dem Radius R befinden. Dieser Radius soll groß ϵ zwischenraum d , also $R \gg d$.

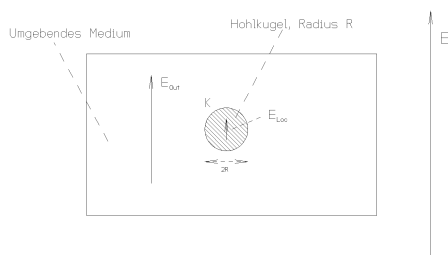


Abbildung 3.2: Modell zur Clausius-Mosotti-Gleichung: Ein beliebiges Molekül im Zentrum der Kugel K spürt lokal die Summe von äußerem Feld E und das durch die Polarisierung des Mediums außerhalb von K hervorgerufene Feld E_{Out} .

Ein beliebiges Molekül „sieht“ also ein Feld

$$E_{Loc} = E + E_{Out}, \quad (3.5)$$

³Betrachtet man nur verdünnte Gase, so wird es keinen Einfluß der weit entfernten Nachbarn geben und es gilt $E_{Loc} = E$.

wobei sich nun die Frage stellt, wie das Feld E_{Out} zu berechnen ist. Mit der Vorstellung, daß die Polarisierung einer Hohlkugel mit dem Radius R berechnet werden kann aus einer polarisierten Kugelfläche vom gleichen Radius, welche eine Flächenladungsdichte σ_p besitzt⁴, so findet man, daß das Feld E_{Out} aus der Polarisierung folgt durch

$$\vec{E}_{Out} = \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0}. \quad (3.6)$$

Solange nun die Polarisierung eine Folge der *Polarisierbarkeit* α eines Moleküls ist, wobei diese mit der Teilchenzahldichte $n = \frac{N}{V}$ verteilt sind, kann man die Polarisierung mittels der Polarisierbarkeit ausdrücken, andererseits muß natürlich auch die Verknüpfung über die elektrische Suszeptibilität gelten:

$$\vec{P} = n\alpha\vec{E}_{Loc} = \epsilon_0\chi_e\vec{E}_{Loc} = \epsilon_0(\epsilon_r - 1)\vec{E}_{Loc} \quad (3.7)$$

Somit erhält man schließlich

$$\frac{n\alpha}{3\epsilon_0} = \left(\frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} \right). \quad (3.8)$$

Dies ist die CLAUSIUS-MOSOTTI-GLEICHUNG. Der Parameter α ist bisher noch nicht bestimmt. Anhand eines einfachen Modelles kann man sich jedoch seine Bedeutung klar machen: Denkt man sich ein kleines Teilchen als leitende Kugel vom Radius a , so wird ein Dipolmoment $p = 4\pi\epsilon_0a^3E$ induziert⁵. Daraus folgt eine Polarisierbarkeit $\alpha = \epsilon_0 \cdot 4\pi a^3$. Durch Einsetzen erhält die Clausius-Mosotti-Gleichung damit die Form

$$\frac{n4\pi a^3\epsilon_0}{3\epsilon_0} = \left(\frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} \right)$$

Der Term $\frac{N\frac{4\pi}{3}a^3}{V} = \frac{\text{Volumen aller Kugeln}}{\text{Gesamtvolumen}}$ entspricht somit einem (Volumen-)Füllfaktor f :

$$f = 3 \left(\frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} \right)$$

Es gibt noch eine Erweiterung auf Stoffe mit einem permanenten Dipolmoment, jedoch ist diese streng auf polare Gase beschränkt und daher an dieser Stelle nicht von Interesse.

3.1.3 Maxwell-Wagner-Verluste

Durch die Tatsache, daß nun relativ ausgedehnte, d. h. makroskopische, aber nach wie vor kleine Partikel in einem Gemisch vorliegen, kommt es zu Grenzflächenpolarisationen durch freie Ladungsträger. Diese lassen sich dadurch erfassen, daß man ein System (komplexer) Admittanzen betrachtet und wiederum einen Ansatz nach dem Clausius-Mosotti-Verfahren macht, also ein Modell der gemittelten, lokalen Felder.

Tatsächlich läßt sich zum Beispiel die weiter unten noch beschriebene Garnett-Gleichung aus einer Maxwell-Wagner-Betrachtung ableiten⁶. Hier soll eine andere Methode

⁴Eine genauere Herleitung ist in [9] und [11] zu finden.

⁵Siehe [9], Seite 67.

⁶Eine gründliche Behandlung der Maxwell-Wagner-Verluste findet sich in [7].

vorgestellt werden, die der ursprünglichen Ableitung von Maxwell Garnett näherkommt. Eigentlich gehören die Maxwell-Wagner-Effekte nicht mehr exakt zur Problematik der effektiven Medien im Sinne der Definition, wie sie weiter oben benutzt wurde, denn makroskopische Grenzflächen dürfen nicht in einer Größe vorkommen, welche die Quasikontinuität zerstören würde. Ich möchte hier lediglich die Möglichkeit erwähnen, aus Leitfähigkeitsbetrachtungen und Analogieschlüssen ebenfalls Effektiv-Medien-Formeln zu entwickeln.

3.1.4 Die allgemeine Effektiv-Medien-Formel (GEM-Equation) nach Polder und van Santen

Hier wird ein ähnlicher Ansatz benutzt wie der von Clausius-Mosotti oder bei der Betrachtung von Maxwell-Wagner-Verlusten.

Polder und van Santen betrachteten zunächst Ellipsoide mit Materialkonstanten ε_T , welche von einem Matrixmaterial mit Parameter ε_M umgeben sind. Im Gegensatz zur Ableitung des Clausius-Mosotti-Modelles werden jedoch nun auch innere Felder der Ellipsoide zugelassen, so daß das lokale Feld im Inneren eines Ellipsoids zu

$$E_{Loc} = E + E_{Out} + E_{In}$$

wird. Weiterhin ließen sie die Möglichkeit zu, daß die unmittelbare Umgebung eines Partikels schon durch alle anderen eingestreuten Partikel beeinflusst wurde und somit nicht mehr notwendigerweise die DK ε_M , sondern eine schon veränderte DK $\bar{\varepsilon}_M$ besitzt. Dann läßt sich zeigen, daß das Feld innerhalb eines Ellipsoids durch

$$\langle E_{\bar{a}} \rangle = \frac{\varepsilon_0 \bar{\varepsilon}_M E}{\bar{\varepsilon}_M + A_a (\varepsilon_T - \bar{\varepsilon}_M)} \quad (3.9)$$

darstellbar ist (das Feld weist in Richtung der großen Halbachse). Der Parameter A_a ist der **Depolarisierungsfaktor** in Richtung der großen Halbachse. Die Polarisierbarkeit folgt nun als (siehe [7]):

$$\alpha_a = \frac{4}{3} \pi abc \bar{\varepsilon}_M \frac{(\varepsilon_T - \bar{\varepsilon}_M)}{\bar{\varepsilon}_M + A_a (\varepsilon_T - \bar{\varepsilon}_M)} . \quad (3.10)$$

Aus dem Vergleich von

$$P = \varepsilon_0 (\bar{\varepsilon} - \varepsilon_M) E_{Loc}$$

und

$$P = n \alpha E_{Loc}$$

(siehe oben) findet man unter Berücksichtigung von $n = \frac{N}{V}$ und $f = \frac{4}{3} \pi abc \frac{N}{V}$ (Volumenfüllfaktor des Materials T in Material M) die Gleichung

$$\bar{\varepsilon} - \varepsilon_M = f \bar{\varepsilon} \frac{\varepsilon_T - \varepsilon_M}{\bar{\varepsilon} + A_a (\varepsilon_T - \bar{\varepsilon}_M)} . \quad (3.11)$$

Dabei stellt $\bar{\varepsilon}$ die *effektive DK* dar. Eine Verallgemeinerung der Gleichung auf Ellipsoide beliebiger Orientierung (gleichförmig verteilt) führt zu der von POLDER und VAN SANTEN zuerst vorgestellten Formel

$$\bar{\varepsilon} - \varepsilon_M = \frac{1}{3} f(\varepsilon_T - \varepsilon_M) \sum_{a,b,c} \frac{\bar{\varepsilon}_M}{\bar{\varepsilon}_M + A_i(\varepsilon_T - \bar{\varepsilon}_M)} \quad (3.12)$$

Im folgenden wird in der Regel eine Vereinfachung für *Kugeln* benutzt. Hier kann der Depolarisierungsfaktor $A = \frac{1}{3}$ gesetzt werden. Gleichung (3.12) reduziert sich daher auf

$$\bar{\varepsilon} - \varepsilon_M = 3f\bar{\varepsilon}_M \frac{\varepsilon_T - \varepsilon_M}{\varepsilon_T + 2\bar{\varepsilon}_M} \quad (3.13)$$

3.1.5 Gleichung von Landau-Lifshitz

Für kleine Konzentrationen ist die Näherung $\bar{\varepsilon}_M = \varepsilon_M$ sicherlich erlaubt, da sich nicht allzuvielen anderen Kugeln des Materials T in der Nähe einer bestimmten, festgelegten Kugel K aufhalten werden. Somit vereinfacht sich die Gleichung (3.13) weiter zu

$$\frac{\bar{\varepsilon} - \varepsilon_M}{3\varepsilon_M} = f \frac{\varepsilon_T - \varepsilon_M}{\varepsilon_T + 2\varepsilon_M} \quad (3.14)$$

Sie leiteten auch eine zweite, anderslautende Beziehung ab, die im Abschnitt (3.1.9) noch vorgestellt wird.

3.1.6 Formel von Böttcher / sym. Bruggemann-Formel

Der andere Grenzfall tritt ein, falls die Konzentration der eingemischten Kugeln so groß wird, daß die Umgebung einer Kugel nicht mehr aus der ursprünglichen Matrix besteht, sondern schon aus dem Gemisch. Dazu setzt man $\bar{\varepsilon}_M = \bar{\varepsilon}$ und erhält, wieder aus (3.13), die Mischformel von BÖTTCHER

$$\frac{\bar{\varepsilon} - \varepsilon_M}{3\bar{\varepsilon}} = f \frac{\varepsilon_T - \varepsilon_M}{\varepsilon_T + 2\bar{\varepsilon}} \quad (3.15)$$

Diese Gleichung ist identisch mit der SYMMETRISCHEN BRUGGEMANN-FORMEL, die oft in der Form

$$f \frac{\varepsilon_T - \bar{\varepsilon}}{\varepsilon_T + 2\bar{\varepsilon}} + (1 - f) \frac{\varepsilon_M - \bar{\varepsilon}}{\varepsilon_M + 2\bar{\varepsilon}} = 0 \quad (3.16)$$

geschrieben wird.

3.1.7 Die Gleichung von Garnett

J.C.M. Garnett beschäftigte sich mit der Einfärbung von Gläsern, die mit Metallpartikeln versetzt waren. Er stellte daraus eine Theorie für die Streuung und auch für die Dispersion auf, um die Färbung qualitativ zu erklären (siehe [13]). Dazu ersetzte er die Metallpartikel

durch (anregbare) Hertzsche Dipole und berechnete die Feldverteilung der gestreuten Wellen. Er benutzte statt der Materialparameter die Brechungsindizes und erhielt für den (komplexen) Brechungsindex $N' = \sqrt{\bar{\epsilon}}$:

$$N'^2 = N_{Glas}^2 + \frac{3f N_{Glas}^2 \frac{N'^2 - N_{Glas}^2}{N'^2 + 2N_{Glas}^2}}{1 - f \frac{N'^2 - N_{Glas}^2}{N'^2 + 2N_{Glas}^2}} .$$

Eine auf der gleichen Vorstellung beruhende Herleitung findet sich in [14]⁷, der ein effektives Medium dadurch definiert, daß die darin enthaltenen Partikel in einem einfallenden Strahl keine Auslöschung und somit keine Interferenzeffekte verursachen dürfen. Dabei sind die kleinen Partikel wiederum Kugeln vom Radius a , die (wie bei Clausius-Mosotti) wieder in Kugeln vom Radius b des Matrixmaterials enthalten sind. Die Auslöschung wird bestimmt durch den Totalen Wirkungsquerschnitt, der durch

$$C_{ext} = 4\pi Re \left(\frac{S(0)}{k^2} \right)$$

definiert wird, wobei $S(0)$ die Streuamplitude in Vorwärtsrichtung ist. Die gerade eingeführte Definition des effektiven Mediums führt somit auf

$$S(0) \equiv 0 ,$$

was nur eine andere Formulierung für die Tatsache ist, daß in einem vorgegebenen Wellenlängenbereich die Partikel durch Strahlung (\equiv Streuung) als einzelne Teilchen nicht detektierbar sein dürfen (z. B. durch Beugungsexperimente) und ein quasihomogenes Gemisch vorliegt.

Eine Reihenentwicklung des Streukoeffizienten nach sphärischen Besselfunktionen liefert die Beziehung

$$S(0) = i(kb)^2 \frac{(\varepsilon_T - \bar{\varepsilon})(\varepsilon_M + 2\varepsilon_T) + f(2\varepsilon_M + \bar{\varepsilon})(\varepsilon_T - \varepsilon_M)}{(\varepsilon_M + 2\bar{\varepsilon})(\varepsilon_T + 2\varepsilon_M) + f(2\varepsilon_M - 2\bar{\varepsilon})(\varepsilon_T - \varepsilon_M)} + O[(kb)^5] \quad (3.17)$$

Der Füllfaktor wird dabei aus dem Verhältnis der Kugelradien bestimmt und entspricht dem normalen Volumenfüllfaktor: $f = (\frac{a}{b})^3$. Falls $(k \cdot b)$ hinreichend klein ist, verschwindet der zweite Term, und durch Umformung erhält man die MAXWELL GARNETT FORMEL

$$\frac{\bar{\varepsilon} - \varepsilon_M}{\bar{\varepsilon} + 2\varepsilon_M} = f \frac{\varepsilon_T - \varepsilon_M}{\varepsilon_T + 2\varepsilon_M} \quad (3.18)$$

Hier möchte ich nun insbesondere auf die gerade erhaltenen Garnett- und die Bruggemann-Formel (3.16) hinweisen: Wie man leicht sieht, ist die Garnett-Gleichung **nicht** symmetrisch, was die Vertauschungen $\varepsilon_T \leftrightarrow \varepsilon_M$ und $f \leftrightarrow (1-f)$ angeht, die Bruggemannformel erfüllt jedoch diese Beziehung. Dies ist anhand der Abbildung (3.3) nachzuvollziehen: In einem dünn verteilten System, wie es der Vorstellung von Garnett entspricht, ist es natürlich von Bedeutung, ob eine bestimmte Position zur Matrix oder zu den Partikeln

⁷Hier wird allerdings ebenfalls verwiesen, und zwar auf M. Kerker, *The Scattering of Light and Other Electromagnetic Radiation*, Academic, New York, 1969.

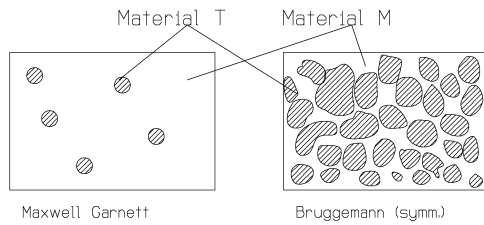


Abbildung 3.3: Im Modell von Garnett sind die Partikel des Materials T dünn im Matrixmaterial M verteilt. Die Zuordnung *Partikel* und *Matrix* ist leicht möglich. Bei Bruggemann sind die Materialien gleichberechtigt; nur eine Wahrscheinlichkeit für jeden Ort gibt an, ob es sich um Teilchen oder Matrix handelt

gehört; die Rollen sind eindeutig verteilt. In dem Modell von Bruggemann (und auch von Böttcher, der ja zur gleichen Formel gelangt ist), ist jedoch die Konzentration an Partikeln so groß, daß es eigentlich keinen Sinn mehr hat, von Matrix oder Partikeln zu sprechen. Ich behalte die Konvention trotzdem bei, was bei hohen Konzentrationen jedoch nur bedeutet, daß f grundsätzlich den Volumenfüllfaktor des Materials T beschreibt. Ab $f = 0.5$ ist es selbstverständlich legitim, Material T als Matrix zu betrachten. Die Bruggemann-(Böttcher-)Formel trägt dem Rechnung, indem sie invariant gegenüber den o.a. Vertauschungen ist.

Ich möchte weiterhin noch erwähnen, daß es, ausgehend von den Maxwell-Wagner-Verlusten, durch Analogiebetrachtungen möglich ist, eine Verallgemeinerung der Gleichung (3.13) zu gewinnen:

$$\bar{\epsilon} - \epsilon_M = \frac{3f\bar{\epsilon}_M \frac{(\epsilon_T - \epsilon_M)}{2\bar{\epsilon}_M + \epsilon_T}}{1 - f \frac{(\epsilon_T - \epsilon_M)}{2\bar{\epsilon}_M + \epsilon_T}}$$

Daraus kann man, wieder für den Grenzfall kleiner Konzentration ($\bar{\epsilon}_M = \epsilon_M$), ebenfalls die Maxwell Garnett-Gleichung entwickeln. Diese Vorgehensweise ist ausführlich in [7] dargestellt.

3.1.8 Die asymmetrische Bruggemann-Gleichung

Im Modell von Bruggemann ist das Gemisch zweier Materialien mit einem Füllfaktor f durch stetige, infinitesimale Zugabe von Teilchenmaterial T, beginnend bei $f = 0$, auf dynamische Art und Weise entstanden. Weiterhin definierte er, daß das Gemisch der Maxwell Garnett-Gleichung zu jedem Zeitpunkt gehorcht. Also ist zu jedem Zeitpunkt ein gerade hinzukommendes Teilchen nicht vom Matrixmaterial, sondern vom *vor* der Zugabe herrschenden Gemisch umgeben. Weiterhin verändern sich *bei* der Zugabe die Materialparameter nur infinitesimal, so daß folgende Werte in die Garnett-Gleichung einzusetzen sind:

$$\begin{aligned}\varepsilon_M &\longrightarrow \bar{\varepsilon} \\ \bar{\varepsilon} &\longrightarrow \bar{\varepsilon} + \delta\bar{\varepsilon} \\ f &\longrightarrow \delta f = \frac{\delta f'}{1-f'}\end{aligned}$$

Der seltsame Füllfaktor kommt dadurch zustande, daß nach einer Zugabe von ε_T die Garnett-Gleichung nur für die Zugabe gilt, wobei das Gemisch vorher als Matrix betrachtet wird; daher ist für f ein δf einzusetzen, welches sich aber durch die Volumenanteile *zu jeder Zeit* ausdrücken läßt:

$$\begin{aligned}f \rightarrow \delta f &= \frac{\delta V_T}{V_T + V_M} \\ f' &\stackrel{def.}{=} \frac{V_T}{V_T + V_M} \\ \Rightarrow \frac{\Delta f'}{\Delta V_T} &= \frac{V_M}{(V_T + V_M)^2} \\ \Leftrightarrow \Delta f' &= \frac{V_M \Delta V_T}{(V_T + V_M)^2} = (1 - f') \Delta f \\ \rightarrow \delta f &= \frac{\delta f'}{1 - f'}\end{aligned}$$

Einsetzen in (3.18) und Umformung liefert eine Differentialgleichung der Form

$$\frac{2\bar{\varepsilon} - \varepsilon_T}{3\bar{\varepsilon}} \delta\bar{\varepsilon} = -\frac{\delta f'}{1 - f'}. \quad (3.19)$$

Diese Gleichung kann zwischen ε_M , $\bar{\varepsilon}$ und $0, f$ integriert werden, wodurch man die ASYMMETRISCHE BRUGGEMANN-FORMEL erhält:

$$1 - f = \frac{\varepsilon_T - \bar{\varepsilon}}{\varepsilon_t - \varepsilon_M} \left(\frac{\varepsilon_M}{\bar{\varepsilon}} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (3.20)$$

3.1.9 Die Gleichung von Looyenga

Die folgende Beziehung wird hier zwar Looyenga zugeschrieben, wurde jedoch zeitgleich und völlig unabhängig auch von Landau und Lifshitz in [12] abgeleitet. Eine eindeutige Zuordnung kann daher nicht getroffen werden, jedoch scheint mir die Gleichung als Looyenga-Formel bekannter zu sein.

Looyenga nahm an, daß sich in einem binären Gemisch die Materialparameter ε_T und ε_M schreiben lassen als

$$\begin{aligned}\varepsilon_M &= \bar{\varepsilon} - \Delta\varepsilon \\ \varepsilon_T &= \bar{\varepsilon} + \Delta\varepsilon\end{aligned}$$

Daraus erhielt er wiederum eine Differentialgleichung⁸:

$$3\bar{\varepsilon} \frac{\partial^2 f}{\partial \bar{\varepsilon}^2} + 2 \frac{\partial f}{\partial \bar{\varepsilon}} = 0 \quad (3.21)$$

Die entsprechende Lösung unter Einbeziehung der Randbedingungen

$$\bar{\varepsilon} \stackrel{f=0}{=} \varepsilon_M, \quad \bar{\varepsilon} \stackrel{f=1}{=} \varepsilon_T$$

ist

$$f = \frac{\bar{\varepsilon}^{\frac{1}{3}} - \varepsilon_M^{\frac{1}{3}}}{\varepsilon_T^{\frac{1}{3}} - \varepsilon_M^{\frac{1}{3}}},$$

was umgeformt die GLEICHUNG VON LOOYENGA ergibt:

$$\bar{\varepsilon}^{\frac{1}{3}} = f \varepsilon_T^{\frac{1}{3}} + (1 - f) \varepsilon_M^{\frac{1}{3}} \quad (3.22)$$

Diese Gleichung ist ebenfalls symmetrisch in Bezug auf die Vertauschungen, die im letzten Abschnitt aufgeführt wurden. Ich möchte schon jetzt betonen, daß ich mich später auf die Looyenga-Formel konzentrieren werde; zum einen brauchte Looyenga keine geometrischen Aspekte (obwohl er implizit von Kugelflächen ausgegangen ist), um Gleichung (3.22) zu erhalten, zum anderen können die durch die Simulation erhaltenen Daten mit einer leichten Modifikation der Gleichung am besten durch eine Gleichung dieses Typs angepaßt werden.

Dennoch gibt es Modifikationen (erwähnt in [15]), die einen geometrischen Einfluß der eingestreuten Partikel zu erfassen versuchen, indem die üblichen Kugelflächen durch orientierte Ellipsoide ersetzt werden. Der nun ins Spiel kommende Depolarisierungsfaktor A verändert den Exponenten in (3.22), so daß man die Gleichung

$$\bar{\varepsilon}^{1-2A} = f \varepsilon_T^{1-2A} + (1 - f) \varepsilon_M^{1-2A} \quad (3.23)$$

erhält⁹.

Dieser Einfluß des Exponenten von der Geometrie ist auch der Kern meines Ansatzes, den ich in Kapitel (5.5) einführen möchte.

3.2 Effektive Permeabilitätskonstante (PK)

Wie schon eingangs erwähnt, wurde die Physik der Permeabilitätskonstanten¹⁰ nie so eingehend betrachtet wie die der Dielektrizitätskonstanten. Dies scheint insofern gerechtfertigt, als daß fast alle Materialien mit einer DK $\varepsilon \neq 1$ behaftet sind, wogegen es sehr viele technisch relevante Stoffe gibt, die nicht magnetisch sind ($\mu \equiv 1$). Andererseits ist es so, daß, sobald beide Materialkonstanten von 1 verschieden sind, sie gleichberechtigt in die

⁸Für eine genauere Herleitung siehe [7].

⁹Siehe dazu [15], auch dort ohne Herleitung.

¹⁰„Konstante“ ist hier im gleichen Sinne zu verstehen wie zu Anfang des Kapitels beschrieben; im quasistatischen Grenzfall kann die dielektrische Funktion als konstant im betrachteten Frequenzbereich angesehen werden.

Feldgleichungen eingehen. Ihr möglicherweise unterschiedlicher Einfluß auf die Feldausbreitung in einem Medium hängt dann nur noch von den Amplituden der vorhandenen Felder ab¹¹. Insbesondere bei bestimmten Anwendungen wie z. B. Absorbertechniken oder Supraleitern sind die magnetischen Eigenschaften von besonderer Relevanz.

Interessiert man sich nicht für die innere Struktur eines Gemisches, so stellt sich bei der Behandlung beider Materialparameter ein ähnliches, wenn nicht identisches Bild: Stets geht es um die Wechselwirkung von Dipolen mit dem anregenden Feld, was sich in den identischen Gleichungen der Relaxationsverluste in den Abschnitten (2.1.1) und (2.2.2) zeigt. Der einzige Unterschied ist das Fehlen einer Präzession von elektrischen Dipolen im elektrischen Feld. Da man aber, von einem makroskopischen Standpunkt aus gesehen, die Verluste ohnehin nur durch Temperatur- oder Frequenzgang in die verschiedenen Prozesse wie Wirbelströme, Relaxationen oder Blochwandverschiebungen einteilen kann, stellt sich die Situation für beide Konstanten gleich dar. Dies soll eine qualitative Begründung dafür sein, die meisten Gleichungen, welche für die DK hergeleitet wurden, auf die PK zu übertragen. Das ist überall dort möglich, wo keine spezifischen Dipol- oder Feldeigenschaften in die Herleitung eingehen. Eine Gleichung wie die von Looyenga oder die asymmetrische Bruggemann-Formel sollten sich direkt übertragen lassen, wobei aber zu zeigen wäre, daß die Maxwell Garnett-Gleichung anwendbar ist, da diese als Ausgangspunkt dient. Ebenfalls kann die symmetrische Bruggemann-Formel auf magnetische Materialien übertragen werden.

3.2.1 Zur Garnett-Formel

Betrachtet man die Maxwell-Gleichungen und leitet daraus die Wellengleichungen ab, welche die Ausbreitung von Wellen in einem Medium beschreiben, so stellt man eine Symmetrie bzgl. der Vertauschungen von $(\vec{H}, \mu) \longleftrightarrow (\vec{E}, \varepsilon)$ fest:

$$\nabla \times [\nabla \times \vec{H}(\vec{r}) - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \varepsilon(\vec{r})\mu(\vec{r})\vec{H}(\vec{r}) - \frac{1}{\varepsilon(\vec{r})}[\nabla\varepsilon(\vec{r})] \times [\nabla \times \vec{H}(\vec{r})]] = 0 \quad (3.24)$$

$$\nabla \times [\nabla \times \vec{E}(\vec{r}) - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mu(\vec{r})\varepsilon(\vec{r})\vec{E}(\vec{r}) - \frac{1}{\mu(\vec{r})}[\nabla\mu(\vec{r})] \times [\nabla \times \vec{E}(\vec{r})]] = 0 \quad (3.25)$$

Lamb, Wood und Ashcroft wählten in [16] folgenden Ansatz: Ausgehend von diesen Wellengleichungen machten sie in **periodischen Strukturen** eine Entwicklung dieser Gleichungen und suchten nach Lösungen, indem sie die Felder \vec{E} und \vec{H} als Blochwellen behandelten. Dabei definierten sie ein effektives Medium, respektive dessen Materialkonstante so, daß die aus diesen Werten über die Gleichung

$$\kappa = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon\mu}$$

gebildeten, makroskopischer Wellenvektoren die korrekte Phasen- und Amplitudenveränderung wiedergeben¹². Sie konnten dabei zeigen, daß für die entsprechenden Material-

¹¹In einem Kondensator wird das magnetische Feld nur eine untergeordnete Rolle spielen, das Gewicht der Permeabilität ist gering. Anders sieht es dagegen in einer Spulenordnung aus.

¹²Dabei wurden Phasen- und Amplitudenänderungen beim *Eintritt* explizit ausgeklammert, d. h. eine

konstanten folgende Beziehungen gelten:

$$\bar{\varepsilon} = \varepsilon_M \frac{\varepsilon_M + [P^E(1-f) + f](\varepsilon_T - \varepsilon_M)}{\varepsilon_M + P^E(1-f)(\varepsilon_T - \varepsilon_M)} \quad (3.26)$$

bzw.

$$\bar{\mu} = \mu_M \frac{\mu_M + [P^H(1-f) + f](\mu_T - \mu_M)}{\mu_M + P^H(1-f)(\mu_T - \mu_M)} \quad (3.27)$$

Diese Gleichungen gelten allerdings nur für den Fall $k_i a \ll 1$, die Größen P^E , P^H sind die entsprechenden Depolarisierungsfaktoren. Sie werden in erster Näherung durch

$$P^{E(H)} = \frac{1}{3} + \delta P^{(1)}$$

dargestellt¹³. Weiterhin kann gezeigt werden, daß im sogenannten *Quasistatischen Grenzfall*¹⁴ $kb \ll 1$ für den Depolarisierungsfaktor $P^E = P^H = \frac{1}{3}$ gilt. Damit reduzieren die Gleichungen (3.26) und (3.27) sich zu den entsprechenden Maxwell-Garnett-Formulierungen für ε und μ , zur Identifizierung jeweils mit dem Index (MG) versehen. **Eine der Maxwell-Garnett-Gleichung für die DK entsprechende Funktion läßt sich somit auch für die PK ableiten:**

$$\frac{\bar{\mu} - \mu_M}{\bar{\mu} + 2\mu_M} = f \frac{\mu_T - \mu_M}{\mu_T + 2\mu_M}. \quad (3.28)$$

Ein weiteres Ergebnis ihrer Arbeit war die Tatsache, daß in diesem speziellen Fall für ein Gemisch, welches sowohl elektrische (ε) als auch magnetische (μ) Eigenschaften hat, folgende Beziehung gilt:

$$\overline{(\varepsilon\mu)} = \bar{\varepsilon}^{MG} \bar{\mu}^{MG} \quad (3.29)$$

Auf diese wichtige Beziehung werde ich im Abschnitt (5.3) näher eingehen. Ich möchte allerdings bereits hier anmerken, daß auch in der vorliegenden Arbeit mittels des Programmes COSME III stets nur das *Produkt* $\overline{(\varepsilon\mu)}$ berechnet werden kann.

Die Gleichungen (3.26) und (3.27) werden von den Autoren als **Multipole Modified Maxwell Garnett**-Formeln bezeichnet. Die Beziehung (3.29) gilt mit Hilfe dieser Gleichungen auch ohne die restriktiven Näherungen des quasistatischen Grenzfalles und bei anderen als kubischen Gittern¹⁵. Die komplexere Struktur wird daher durch die Depolarisierungsfaktoren ausgedrückt (hier sei noch einmal an die verbesserte Looyenga-Formel erinnert, die sich ebenfalls auf die Depolarisierungsfaktoren stützt).

Anpassung an die außerhalb des Mediums gegebene **ebene Welle** wurde nicht vorgenommen. Dies verursacht jedoch keinen Schaden, da aus den effektiven Materialparametern Reflexion und Transmission zu berechnen sind.

¹³ $\delta P^{(1)}$ ist eine sehr komplizierte Reihenentwicklung und soll hier nicht näher spezifiziert werden. Zur genaueren Erläuterung siehe [16].

¹⁴Dies bedeutet, daß bei einer eventuellen Clusterbildung der Partikel die größte lineare Ausdehnung b ist. Die Wellenlänge soll also nicht nur groß zum Teilchendurchmesser, sondern auch zum Clusterdurchmesser sein.

¹⁵In [16] wird ausgiebig Gebrauch vom reziproken Gitter gemacht. Deshalb wurden einige Näherungen benötigt, die z. B. den Wellenvektor auf die erste Brillouin-Zone beschränken.

3.2.2 Die Formeln von Bruggemann und Looyenga für Magnetika

Wie zu Anfang dieses Abschnittes bereits ausgeführt, beruhen die asymmetrische Bruggemann-Formel und die Gleichung von Looyenga ohne weitere spezifische Bedingung auf der Formel von Garnett. Dies ist als formale Begründung zu verstehen im Sinne der Analogie, die im zweiten Kapitel aufgestellt wurde; in beiden Fällen handelt es sich um die qualitativ gleichen Vorgänge einer Dipol-Wechselwirkung. Es ist somit sicherlich legitim, die Gleichungen von Bruggemann und Looyenga auf die Permeabilitätskonstante zu übertragen, da die Herleitung sich bei gegebener Maxwell-Garnett-Formel in nichts von der oben gezeigten unterscheidet — allein die Tatsache, daß dort zur Herleitung immer $\mu_M = \mu_T = 1$ angenommen werden konnte, was an dieser Stelle zwar formal auch für $\varepsilon_M = \varepsilon_T = 1$ getan wird, jedoch in der Praxis nicht gilt. Es muß also im schlimmsten Fall davon ausgegangen werden, daß durch diesen Symmetriebruch die Gültigkeit der PK-Formeln in Frage gestellt wird. Glücklicherweise sind aber μ und ε in weiten Grenzen *voneinander unabhängig*, wie im Abschnitt (5.3) gezeigt wird.

Es läßt sich somit festhalten, daß auch für die PK die folgenden Gleichungen aufstellbar sind:

$$\begin{aligned}\bar{\mu}^{\frac{1}{3}} &= f\mu_T^{\frac{1}{3}} + (1-f)\mu_M^{\frac{1}{3}}, \\ 1-f &= \frac{\mu_T - \bar{\mu}}{\mu_T - \mu_M} \left(\frac{\mu_M}{\bar{\mu}}\right)^{\frac{1}{3}}.\end{aligned}$$

Was die Erweiterung von Bánhegyi betrifft, soll zunächst angenommen werden, daß eine ähnliche Modifikation auch für Magnetika gültig ist. Es liegt hier aber nahe, den Depolarisierungsfaktor A durch den Entmagnetisierungsfaktor N zu ersetzen:

$$\bar{\mu}^{1-2N} = f\mu_T^{1-2N} + (1-f)\mu_M^{1-2N} \quad (3.30)$$

3.2.3 Serien- und Parallelschaltung

Genauso wie für die DK läßt sich auch für die PK ein einfaches, quasistatisches Modell finden: Man stelle sich einen stromdurchflossenen Leiter vor, der mit einem zylinderförmigen Block umgeben ist. Der Strom sei konstant, der Durchmesser der Leitung sei infinitesimal klein, der Leiter befinde sich in der Achse des Zylinders. Aus dem Zylinder aus Material M1 sei ein „Kuchenstück“ herausgeschnitten und mit einem anderen Material M2 aufgefüllt (Abbildung (3.4)). Das Kuchenstück wird dabei von einem Kreissektor mit Winkel ϕ gebildet.

Nun sei die **magnetische Spannung**

$$V^{Mag} = \int_{\vec{r}_1}^{\vec{r}_2} \vec{H} d\vec{r}$$

betrachtet: im hier vorliegenden Modell folgt sie einfach durch Integration längs eines Kreises mit Radius R :

$$V^{Mag} = \int_0^{2\pi R} H ds$$

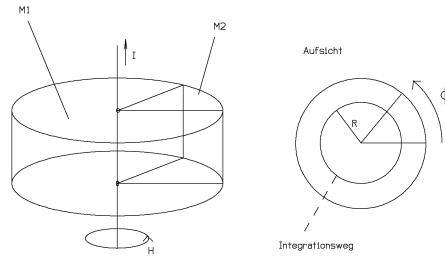


Abbildung 3.4: Stromdurchflossener, in Material eingeschlossener Leiter

$$\begin{aligned}
 &= \int_0^{\phi R} H_1 ds + \int_{\phi R}^{2\pi R} H_2 ds \\
 \Leftrightarrow \quad \frac{1}{\bar{\mu}} B 2\pi R &= \frac{1}{\mu_1} B \phi R + \frac{1}{\mu_2} B (2\pi - \phi) R . \quad (3.31)
 \end{aligned}$$

Dabei wurde ausgenutzt, daß die Normalkomponente der magnetischen Induktion stetig ist. Aus

$$V_K = \int_0^R r dr \int_0^\phi d\phi \int_0^h dz$$

folgt das Volumen eines Zylindersektors zu

$$V_K(\phi) = \frac{1}{2} R^2 h \cdot \phi$$

Daraus folgt sofort der **Volumenfüllfaktor** $f = \frac{\phi}{2\pi}$. Somit gilt für die Serienschaltung zweier Magnetika:

$$\bar{\mu} = \frac{\mu_1 \mu_2}{(1-f)\mu_1 + f\mu_2} \quad (3.32)$$

Die Benennung als *Serienschaltung* folgt einfach aus der Tatsache, daß sich die entsprechenden magnetischen Spannungen auf einem gewählten Radius addieren. Würde man das obige Modell eher als Anordnung zwischen zwei Kondensatorplatten betrachten, so müßte es, bezogen auf das elektrische Feld, als Parallelschaltung bezeichnet werden. Ich möchte hier und beim nächsten Modell die Namensgebung lieber aus der Betrachtung der magnetischen Größen folgern.

Ganz analog kann man mit dem Leitermodell auch eine Parallelschaltung realisieren: Der den Leiter umschließende Zylinder sei in zwei Scheiben geschnitten und mit unterschiedlichem Material aufgefüllt.

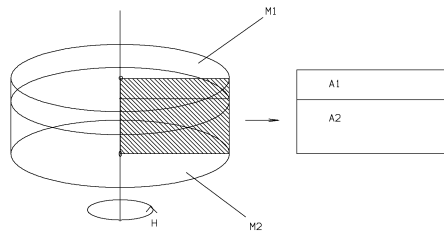


Abbildung 3.5: Zur Parallelschaltung von Magnetika

Betrachtet man nun den **magnetischen Fluß** Φ durch eine vertikale Querschnittsfläche, so findet man aus

$$\Phi = \Phi_1 + \Phi_2 = A_1 B_1 + A_2 B_2 = A_1 \mu_1 H + A_2 \mu_2 H = A_G \bar{\mu} H$$

(H_{\parallel} ist stetig) die Gleichung für die Parallelschaltung:

$$\bar{\mu} = f \mu_1 + (1 - f) \mu_2 . \quad (3.33)$$

Natürlich gilt die Herleitung des letzten Modelles nur auf einem sehr kleinen Flächenstück, da sonst die $\frac{1}{r}$ -Abhängigkeit des Magnetfeldes berücksichtigt werden muß. Bei entsprechender Abänderung der Herleitung würde die letzte Beziehung allerdings auch dann gelten.

Auch bei den magnetischen Materialien ist anzunehmen, daß die Serien- und die Parallelschaltung der Medien die beiden Grenzfälle darstellen. Ein wirklicher Effektiv-Medium-Verlauf muß sich zwischen diesen beiden Kurven befinden, wie im entsprechenden Abschnitt für die Dielektrika bereits ausgeführt wurde.

Kapitel 4

Das Computerprogramm COSME II

Das Programm COSME wurde 1990/1991 von S. Stölzle zur Simulation effektiver Medien entwickelt ([17]). In der ursprünglichen Version diente es speziell zur Berechnung dielektrischer Materialeigenschaften ([18] – [19]). Es verwendet dazu einen Diskretisierungsalgorithmus von T. Weiland, der in [1] – [6] vorgeschlagen wurde. Diese Diskretisierungsmethode ist anderen numerischen Verfahren in wichtigen Bereichen überlegen, was die Genauigkeit und Anwendbarkeit der Algorithmen angeht. Diese Vorteile werden im folgenden noch genauer erläutert. Leider führt diese Diskretisierung auf außerordentlich unhandliche verallgemeinerte Eigenwertgleichungen mit Vektordimensionen > 50000 , die mit konventionellen Methoden nicht gelöst werden können. In [17] wurde daher von S. Stölzle ein neues Lösungsverfahren vorgestellt, welches mit einem guten Laufzeitverhalten die erwähnten Eigenwertgleichungen lösen kann.

Als Raumbereich der Simulation wird ein Hohlleiterresonator (HLR) angenommen, wodurch ein eigentlich unendlich ausgedehntes Problem der Wellenausbreitung auf ein endliches Gebiet mit definierten Randgebieten abgebildet werden kann. Die Feldverteilung im leeren HLR ist analytisch bekannt und wird als Startwert der Simulation, die sich auf ein iteratives Verfahren stützt, benutzt. Als Ergebnis erhält man eine durch die Inhomogenitäten modifizierte Feldverteilung mit einer veränderten Resonanzfrequenz, aus welcher die Materialparameter bestimmt werden können.

4.1 Das Diskretisierungsverfahren nach WEILAND

Das von Weiland ([1], [2] und [3]) vorgeschlagene Verfahren beruht darauf, die Maxwellgleichungen nicht in differentieller sondern in Integralform zu behandeln. Dadurch lassen sie sich in Matrixformen übertragen, welche numerisch besser lösbar sind als entsprechende Differentialgleichungen.

Die Material- und Maxwellgleichungen lauten:

$$\left. \begin{array}{l} \textit{Differentielle Form} \\ \nabla \vec{D} = \rho \\ \nabla \vec{J} = -\frac{\partial \rho}{\partial t} \end{array} \right\} \longrightarrow \oint_{O(V)} \left(\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J} \right) \cdot d\vec{A} = 0 \quad (4.1)$$

$$\nabla \vec{B} = 0 \longrightarrow \oint_{O(V)} \vec{B} \cdot d\vec{A} = 0 \quad (4.2)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \longrightarrow \oint_{O(A)} \vec{E} d\vec{s} = - \int_A \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \cdot d\vec{A} \quad (4.3)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J} \longrightarrow \oint_{O(A)} \vec{H} d\vec{s} = \int_A \left(\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J} \right) \cdot d\vec{A} \quad (4.4)$$

Hier bedeuten die Variablen E, B, D, H die Felder bzw. die Flußdichten, J und ρ sind die Strom- und die Ladungsdichte. Da immer nur die Ausbreitung von Wellen betrachtet wird, setzt man die Ladungsdichte $\rho = 0$, d. h. man betrachtet zwar mitunter leitfähige, aber im statischen Fall ungeladene Materie. Ansonsten wäre die Stromdichte $\vec{J} = \sigma \vec{E}$ in den Gleichungen (4.1) – (4.4) mit einem Zusatzterm $\rho \cdot \vec{v}$ zu ergänzen. Diese Gleichungen werden nun getrennt diskretisiert und in den numerischen Rechnungen werden ausschließlich die resultierenden Matrixgleichungen benutzt. Es sei hier schon angemerkt, daß die Eigenschaften der Lösungen der Maxwellgleichungen erhalten bleiben und die Matrixoperatoren, welche den Ableitungsoperatoren $\nabla \dots$ und $\nabla \times \dots$ entsprechen, weiterhin Beziehungen wie $\text{rot}(\text{grad}(\phi)) \equiv 0$ identisch erfüllen.

4.1.1 Transformation der ersten Maxwell-Gleichung

Die Methode der Diskretisierung soll hier exemplarisch für die Gleichung (4.3) vorgeführt werden. Dazu wird der zu untersuchende Raumbereich (hier also der Hohlleiterresonator) mit einem dreidimensionalen Gitter G überzogen, was einer Aufteilung in Elementarzellen entspricht. Das elektrische Feld einer Elementarzelle wird durch ein **Dreibein** von Vektoren E_x, E_y, E_z gebildet, die in Richtung der Translationsachsen liegen (der Einfachheit und der späteren Anwendung halber benutze ich stets Cartesische Koordinaten, d. h. rechtwinklige Netze). Jede Zelle des Gitters G kann mit beliebigen Materialien, ausgedrückt durch $(\varepsilon, \mu, \sigma)$, gefüllt sein.

Betrachtet man ein eindimensionales Integral $F(x) = \int_a^b f(x) \cdot dx$, so gilt für die eingeschlossene Fläche in erster Näherung

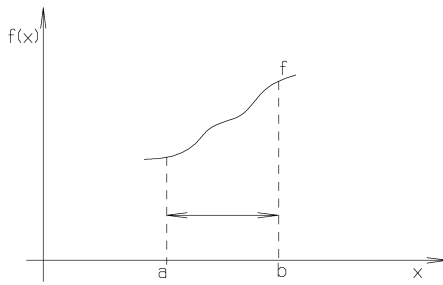
$$[F(x)]_a^b = \int_a^b f(x) \cdot dx \simeq \Delta \cdot f \left(a + \frac{\Delta}{2} \right) + O(\Delta^2)$$

(vergl. Abbildung (4.1)). Dies läßt sich direkt auf Gleichung (4.3) übertragen, da definitionsgemäß die Wege $d\vec{s}$ immer parallel zu den jeweiligen Feldvektoren liegen, und zwar auf den Kanten der Zellen. Da wir außerdem ein äquidistantes Netz betrachten, kann die Kantenlänge überall auf Δ gesetzt werden (Abbildung(4.2)). Man erhält sofort für die linke Seite der Gleichung (4.3):

$$\oint \vec{E} \cdot d\vec{s} = \Delta(E_1 + E_2 - E_3 - E_4) + O(\Delta^2) \quad (4.5)$$

Analog kann auch die rechte Seite der Gleichung (4.3) diskretisiert werden; da unter dem Integral ein Skalarprodukt vorkommt, nimmt man lediglich die zum Flächenelement $d\vec{A}$ parallele Komponente B_\perp und erhält so

$$\int \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \cdot d\vec{A} = \Delta^2 \cdot \frac{\partial B_\perp}{\partial t} + O(\Delta^4) \quad (4.6)$$



△

Abbildung 4.1: Zur Näherung einfacher Integrale.

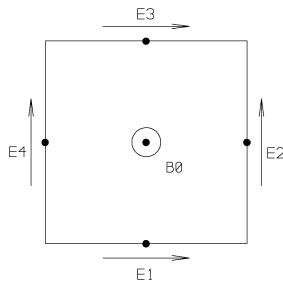


Abbildung 4.2: Ringintegral in einer Elementarzelle.

Als Ergebnis dieser Diskretisierung findet man aus (4.5) und (4.6) eine numerisch lösbare Gleichung der Form

$$\Delta(E_1 + E_2 - E_3 - E_4) + O(\Delta^2) = -\Delta^2 \frac{\partial B_{\perp}}{\partial t} + O(\Delta^4)$$

Zum Fehler $O(\Delta^2)$ kann gesagt werden, daß bei hinreichend kleiner Schrittweite der Diskretisierung die Feldkomponenten sich zu wenig ändern, als daß er einen wesentlichen Beitrag leistet, trotz gleicher Ordnung in Δ wie der auf der rechten Seite dominierende

Term $-\Delta^2 \frac{\partial B}{\partial t}$. Handelt es sich insbesondere um räumlich periodische Felder, so nimmt der Beitrag des Fehlers weiter ab, da der Fehler die erste Ableitung des E -Feldes nach dem Ort repräsentiert. Bei hinreichend kleiner Schrittweite der Diskretisierung kann dieser Fehler vernachlässigt werden. Als erste transformierte Maxwellgleichung erhält man also

$$\Delta(E_1 + E_2 - E_3 - E_4) = -\Delta^2 \frac{\partial B_{\perp}}{\partial t} \quad (4.7)$$

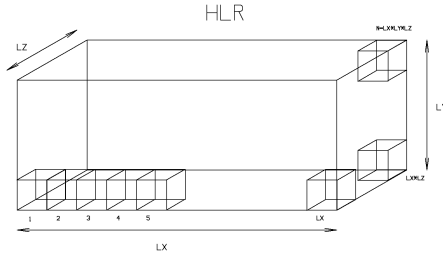


Abbildung 4.3: Anordnung der Elementarzellen im Hohlleiterresonator.

Um nun von einer Zelle auf N Zellen zu verallgemeinern, werden alle Zellen und die darin enthaltenen Feldkomponenten auf eine bestimmte Weise durchnummeriert (siehe Abb. (4.3)): Man beginnt bei der Zelle *vorne unten links* und gibt ihr die Nummer 1. Die *obere hintere rechte* Zelle hat die Nummer N . Hat der HLR eine Dimension von $LX \times LY \times LZ$ Zellen, gilt demnach $N = LX \cdot LY \cdot LZ$. Diese Vorgehensweise weiter verfolgend gibt man der x -Komponente E_x der ersten Zelle den Index 1, und numeriert dann fortlaufend erst zeilenweise (von links nach rechts), dann Schichtenweise (von unten nach oben) alle x -Komponenten der Zellen durch. Die x -Komponente der letzten Zelle hat also auch den Index N . Danach verfährt man erst mit den z -, dann mit den y -Komponenten analog. Der z -Vektor der Zelle N hat somit den Laufindex $2N$, der y -Vektor dieser Zelle den Index $3N$.

Allgemein gilt:

Die Feldkomponenten der Zelle an Position (x, y, z) haben die Indizes

$$\begin{aligned} \text{Zelle : } i &= x + (z - 1) \cdot LX + (y - 1) \cdot LZ \cdot LX \\ &= x + (z - 1) \cdot ix + (y - 1) \cdot ixq \quad (ix = LX, ixq = LX * LZ) \\ \rightarrow E_x &= e_i \\ \rightarrow E_z &= e_{(i+N)} \\ \rightarrow E_y &= e_{(i+2N)} \end{aligned}$$

Auf diese Weise kann also ein **komplexer** Vektor der Dimension $3N$ gebildet werden, der das gesamte elektromagnetische Feld innerhalb des HLR beschreibt.

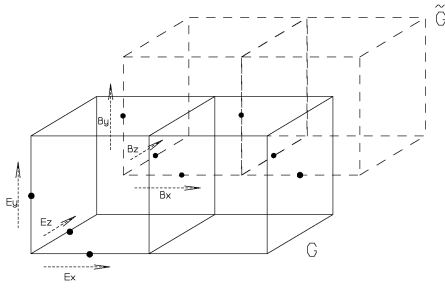


Abbildung 4.4: Beim dualen Gitter \tilde{G} handelt es sich um ein um die halbe Raumdiagonale verschobenes, ansonsten zu G identisches Gitter. Auf den Kanten des ursprünglichen Gitters liegen die elektrischen Feldkomponenten, auf denen des dualen Gitters die Komponenten der magnetischen Verschiebung.

Die Sortierung der magnetischen Induktion vollzieht sich auf genau dieselbe Art und Weise: Wie in Bild (4.4) dargestellt, stehen die magnetischen Feldvektoren immer senkrecht auf den von vier E -Feldvektoren eingeschlossenen Flächen. Die Summe aller Vektoren des Magnetfeldes bilden in diesem Modell ebenfalls ein Gitter. Man führt deshalb ein **duales Gitter** \tilde{G} ein, das gegenüber G um eine halbe Raumdiagonale in $[111]$ -Richtung verschoben ist. Hier werden, genau wie in G , die Vektoren der magnetischen Induktion in Dreibeine aufgeteilt, die gemäß der oben eingeführten Regeln durchnummeriert werden. Man erhält daraus einen Vektor \vec{b} der magnetischen Induktion, der wiederum die gesamte Feldverteilung im HLR beschreibt.

Mit diesen Vektoren läßt sich die Verallgemeinerung von Gleichung (4.7) als Matrixgleichung schreiben:

$$\boxed{\mathbf{C}\mathbf{D}_S\vec{e} = -\mathbf{D}_A\vec{b}} \quad (4.8)$$

Bei den komplexen Größen \mathbf{D}_S und \mathbf{D}_A handelt es sich um reguläre, symmetrische Matrizen, die in unserem Fall sogar diagonal sind. Da es sich bei beiden Gittern G und \tilde{G} um äquidistante Gitter mit Gitterkonstante Δ handelt, ist der **Längenoperator** $\mathbf{D}_S \equiv \Delta \cdot \mathbf{I}$, der **Flächenoperator** $\mathbf{D}_A \equiv \Delta^2 \mathbf{I}$. Die Matrix \mathbf{C} ist das diskrete Äquivalent des **Rotationsoperators** und hat die Form einer Bandmatrix mit sieben Bändern, deren Einträge aus 1 und -1 besteht.

4.1.2 Transformation der zweiten Maxwell-Gleichung

Wie man oben gesehen hat, ergibt sich durch die spezielle Anordnung der Vektoren des elektrischen Feldes in einem Gitter G ganz zwangsläufig ein duales Gitter \tilde{G} , in dem die Vektoren der magnetischen Induktion genauso angeordnet sind wie E-Feld-Vektoren in G . Das heißt, daß in \tilde{G} jeweils vier magnetische Vektoren eine Fläche umschließen, die von einem elektrischen Feldvektor durchstoßen wird.

Auf den Kanten des Gitters G liegen die Vektoren des elektrischen Feldes und damit auch die der dielektrischen Verschiebung, auf den Kanten des Gitters \tilde{G} liegen die Vektoren von magnetischer Induktion und Magnetfeld. Jeder Vektor auf einer Kante des einen Gitters durchstößt eine Fläche des anderen.

Dies bedeutet aber nichts anderes, als daß für die dielektrische Verschiebung D und das Magnetfeld H die zweite Rotationsgleichung im dualen Gitter \tilde{G} auf genau die gleiche Weise gelöst werden kann, wie es für die erste im eigentlichen Gitter G vorgeführt wurde. Man erhält somit eine bis auf das Vorzeichen identische Lösung für die in Vektorform nach den obigen Regeln in Vektorform übertragenen Größen \vec{h} (Magnetfeld) und $\vec{g} = \vec{d} + \vec{j}$ (Verschiebestrom und äußerer Strom). Natürlich sind mit diesen Vektoren auch die entsprechenden Operatoren im dualen Gitter \tilde{G} lokalisiert:

$$\tilde{\mathbf{C}}\tilde{\mathbf{D}}_S\vec{h} = \tilde{\mathbf{D}}_A(\vec{d} + \vec{j}) \quad (4.9)$$

Allerdings ist man an den Werten für \vec{e} und \vec{b} interessiert, um beide Gleichungen zu einer Wellengleichung verknüpfen zu können. Hier müssen nun die **Materialgleichungen** hinzugezogen werden, welche sofort (ohne Herleitung) in Matrixschreibweise übertragen werden:

$$\vec{D} = \varepsilon_0\varepsilon\vec{E} \quad \longrightarrow \quad \vec{d} = \varepsilon_0\mathbf{D}_\varepsilon\vec{e} \quad (4.10)$$

$$\vec{B} = \mu_0\mu\vec{H} \quad \longrightarrow \quad \vec{b} = \mu_0\mathbf{D}_\mu\vec{h} \quad (4.11)$$

$$\vec{J} = \sigma\vec{E} \quad \longrightarrow \quad \vec{j} = \mathbf{D}_\sigma\vec{e} \quad (4.12)$$

In diesen Gleichungen werden implizit die weiter oben im Abschnitt über magnetische Serien- und Parallelschaltung schon einmal erwähnten **Stetigkeitsbedingungen** ausgenutzt: An den Grenzflächen zweier Materialien sind E_{\parallel} und B_{\perp} stetig. Bedenkt man, daß die Feldgleichungen letztendlich für \vec{e} und \vec{b} , also im regulären Gitter G gelöst werden, so stellt man folgende Situation fest: Die Vektoren des elektrischen Feldes liegen auf den *Kanten* einer Zelle und sind somit von vier Zellen umgeben. Die Vektoren der magnetischen Induktion durchstoßen eine *Fläche* des Gitters G und haben deshalb direkten Kontakt mit zwei Zellen.

Dies wiederum bedeutet, daß die Matrizen \mathbf{D}_μ und \mathbf{D}_ε keine bloße Aneinanderreihung der Zell-Medien sind (z. B. $\mathbf{D}_\varepsilon = \varepsilon_0\text{diag}(\varepsilon_i, \dots, \varepsilon_N)$), sondern daß jede Feldkomponente der dielektrischen Verschiebung, die ja definitionsgemäß eine Tangentialkomponente ist, in einer Zelle sich als Mittelwert über die Medien in den *vier umgebenden Zellen* darstellt:

In der oben eingeführten Notation für die Indizes bedeutet das

$$\begin{aligned} d_i &= \varepsilon_0 \frac{\varepsilon(i) + \varepsilon(i-ix) + \varepsilon(i-ixq-ix) + \varepsilon(i-ixq)}{4} e_i \quad (x - \text{Komponente}) \\ d_{i+N} &= \varepsilon_0 \frac{\varepsilon(i) + \varepsilon(i-1) + \varepsilon(i-ixq-1) + \varepsilon(i-ixq)}{4} e_{i+N} \quad (z - \text{Komponente}) \\ d_{i+2N} &= \varepsilon_0 \frac{\varepsilon(i) + \varepsilon(i-1) + \varepsilon(i-1-ix) + \varepsilon(i-ix)}{4} e_{i+2N} \quad (y - \text{Komponente}) \end{aligned}$$

Diese Darstellung zeigt, wie die Matrix \mathbf{D}_ε zu bilden ist. Ebenfalls sind die Komponenten des magnetischen Feldes zu mitteln, allerdings nicht mit so viel Aufwand; da hier die Normalkomponente der magnetischen Induktion stetig ist, braucht man nur über zwei Zellen zu mitteln:

$$\begin{aligned} h_i &= \frac{1}{\mu_0} \frac{2}{\mu(i) + \mu(i+1)} b_i \quad (x - \text{Komponente}) \\ h_{i+N} &= \frac{1}{\mu_0} \frac{2}{\mu(i) + \mu(i+ix)} b_{i+N} \quad (z - \text{Komponente}) \\ h_{i+2N} &= \frac{1}{\mu_0} \frac{2}{\mu(i) + \mu(i+ixq)} b_{i+2N} \quad (y - \text{Komponente}) \end{aligned}$$

Fazit: Die Matrizen \mathbf{D}_ε und \mathbf{D}_μ^{-1} sind komplexe Diagonalmatrizen, deren Einträge aus Mittelungen über ein umgebendes Raumgebiet gebildet werden.

Mit Hilfe dieser Material-Gleichungen läßt sich (4.9) umschreiben in

$$\boxed{\frac{1}{\mu_0} \tilde{\mathbf{C}} \tilde{\mathbf{D}}_S \mathbf{D}_\mu^{-1} \vec{b} = \varepsilon_0 \tilde{\mathbf{D}}_A (\mathbf{D}_\varepsilon \dot{\vec{c}} + \mathbf{D}_\sigma \vec{c})} \quad (4.13)$$

4.1.3 Die Divergenzgleichungen

Im diskretisierten Raum gibt es natürlich auch eine Entsprechung der Divergenz. Man kann die Gleichungen (4.1) und (4.2) in Matrixschreibweise durch den **Divergenzoperator** \mathbf{S} ausdrücken, den man durch Integration über die Oberflächen der Elementarzellen gewinnt:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{B} = 0 &\quad \Rightarrow \quad \mathbf{S} \mathbf{D}_A \vec{b} = 0 \\ \nabla \cdot (\vec{D} + \vec{J}) = 0 &\quad \Rightarrow \quad \tilde{\mathbf{S}} \tilde{\mathbf{D}}_A ((\vec{d} + \vec{j})) = 0 \end{aligned}$$

Beachtet man die letzte Gleichung und vergleicht sie mit (4.13), so folgt die wichtige Beziehung

$$\tilde{\mathbf{S}} \tilde{\mathbf{C}} \equiv \mathbf{0}, \quad (4.14)$$

was nichts anderes heißt als $\nabla \cdot (\nabla \times \dots) \equiv 0$. Die analytischen Vektorbeziehungen der Differentialoperatoren bleiben also erhalten, wie eingangs schon erwähnt. Daraus folgt aber ebenso, daß die diskreten Lösungen der diskreten Matrixgleichungen alle Eigenschaften (Energiefluß, Ladungsverteilung) der Lösungen der analytischen Maxwellgleichungen

¹In der Grundlage dieser Arbeit, der Dissertation von S. Stölzle ([17]), wurde die Matrix \mathbf{D}_μ gleich der Einheitsmatrix gesetzt. Dies vereinfachte alle Gleichungen erheblich, verhinderte jedoch naturgemäß eine Behandlung magnetischer Stoffe. Die explizite Behandlung dieser Matrix war eine der wesentlichen Aufgaben im Rahmen meiner Diplomarbeit.

besitzen. Man ist also nicht darauf angewiesen, Näherungslösungen zu finden und nachher möglicherweise zu erweitern bzw. zu verallgemeinern, sondern man findet bei der Lösung der Matrixgleichungen automatisch vollständige Lösungen unter **Einbeziehung aller höheren Multipolterme**.

Zusammenfassung

Im Gegensatz zu anderen Diskretisierungsmethoden werden im Verfahren von Weiland die Maxwellgleichungen getrennt diskretisiert und erst *danach* zu einer Wellengleichung zusammengefaßt. Damit wird die Einführung zusätzlicher numerischer Fehler, die durch die Vereinfachung einer sonst nicht explizit lösbaren DGL höherer Ordnung auftreten, vermieden. Natürlich bleibt auch hier der eigentliche Diskretisierungsfehler erhalten, aber durch die Lösung der Maxwellgleichungen statt einer daraus abgeleiteten DGL ist dies der einzige Beitrag. Höhere Multipolterme werden berücksichtigt und führen zu keinem Näherungsfehler.

4.2 Entwicklung der Wellengleichung

Da man an einer stationären Lösung innerhalb des Hohlleiterresonators interessiert ist, kann man annehmen, daß die Lösungen harmonischer Natur sind². Dies wiederum bedeutet, daß die Operation der Ableitung durch Multiplikation mit $i\omega$ ersetzt werden kann:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} \longrightarrow i\omega \cdot \varphi$$

Aus der Gleichung (4.13) folgt durch Umformung und $\frac{1}{\varepsilon_0 \mu_0} = c^2$

$$\vec{b} = \frac{1}{c^2} \mathbf{D}_\mu \tilde{\mathbf{D}}_S^{-1} \tilde{\mathbf{C}}^{-1} \tilde{\mathbf{D}}_A (i\omega \mathbf{D}_\varepsilon + \mathbf{D}_\sigma) \vec{e} \quad (4.15)$$

Wie im Abschnitt über die dielektrische Funktion erwähnt, kann eine Leitfähigkeit ohne Fehler dem imaginären Teil ε'' der komplexen DK $\varepsilon(\omega)$ zugeschlagen werden. Darauf basierend, kann die Matrix \mathbf{D}_σ in den folgenden Rechnungen fortgelassen werden. Es ist dabei immer daran zu denken, daß die so erhaltene dielektrische Funktion für $\varepsilon'' \neq 0$ immer einen Leitfähigkeitsanteil $\propto \omega^{-1}$ besitzt, also kein reiner Resonator oder Relaxator ist. Ebenfalls ist die Möglichkeit von Maxwell-Wagner-Verlusten einzukalkulieren, da bei größeren Clustern aus leitfähigen Teilchen eine Grenzflächenpolarisation zunehmendes Gewicht erhalten kann. Dies heißt allerdings nicht, daß Maxwell-Wagner-Verluste nicht berechnet werden. Sie sind implizit im effektiven ε'' enthalten, können jedoch nicht ohne weiteres separiert werden.

4.2.1 Ableitung der Eigenwertgleichung

Einsetzen von (4.15) in Gleichung (4.8) führt (endlich) auf die gesuchte Wellengleichung. Implizit wird immer angenommen, daß sowohl die Permittivität als auch die Permeabilität in erster Näherung im verwendeten Frequenzbereich konstant sind. Dies ist keine

²Im Falle der Magnetika muß man voraussetzen, daß die Feldamplituden nicht zu groß werden und immer die Linearität zwischen B und H gegeben ist.

Annahme, um die Gültigkeit der Eigenwertgleichung zu waren, sondern nur eine Vereinfachung, die zu ebenfalls frequenzunabhängigen effektiven Materialparametern führt. Eine Effektiv-Medien-Formel behält auch bei frequenzabhängigen Materialparametern ihre Gültigkeit. In der Meßtechnik hat die Frage der Frequenzabhängigkeit natürlich ein größeres Gewicht, da man, z. B. in einem Hohlleiterresonator, durch Änderung des Füllfaktors die Resonanzfrequenz verschiebt und somit u.U. die Materialparameter verändert. Bei den meisten Materialien ist man jedoch im hier betrachteten GigaHertz-Bereich oberhalb von Resonanzen und Relaxationen ³. Man findet:

$$\begin{aligned} \mathbf{C}\mathbf{D}_S\vec{e} &= -\mathbf{D}_A\dot{\vec{b}} \\ &= -\mathbf{D}_A\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{c^2}\mathbf{D}_\mu\tilde{\mathbf{D}}_S^{-1}\tilde{\mathbf{C}}^{-1}\tilde{\mathbf{D}}_A i\omega\mathbf{D}_\epsilon\vec{e}\right) \\ &= \frac{\omega^2}{c^2}\mathbf{D}_A\mathbf{D}_\mu\tilde{\mathbf{D}}_S^{-1}\tilde{\mathbf{C}}^{-1}\tilde{\mathbf{D}}_A\mathbf{D}_\epsilon\vec{e} \end{aligned}$$

Da man im vorliegenden, speziellen Fall noch folgende Vereinfachungen machen kann (s.o.):

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_S = \tilde{\mathbf{D}}_S &= \Delta\mathbf{I}, \\ \mathbf{D}_A = \tilde{\mathbf{D}}_A &= \Delta^2\mathbf{I}, \\ \mathbf{C} &= \tilde{\mathbf{C}}^T, \end{aligned}$$

so vereinfacht sich die obige Gleichung zu

$$\boxed{\frac{\omega^2}{c^2}\Delta^2\mathbf{D}_\epsilon\vec{e} = \mathbf{C}^T\mathbf{D}_\mu^{-1}\mathbf{C}\vec{e}} \quad (4.16)$$

Dies ist die diskretisierte Wellengleichung zur Beschreibung einer harmonischen Welle in Materie. Durch die Umsetzung in eine Matrixgleichung hat diese Wellengleichung die Form einer **verallgemeinerten Eigenwertgleichung** (EWG), die sich mit numerischen Methoden lösen läßt. Die dazu notwendigen Verfahren werden im Abschnitt (4.4) besprochen.

Ich möchte hier noch einmal betonen, daß es sich keineswegs um eine genäherte DGL 2. Ordnung handelt, sondern um eine vollständige, aus den Maxwell-Gleichungen abgeleitete Wellengleichung. Die im Vektor \vec{e} beinhaltete Feldverteilung entspricht daher exakt den Anforderungen, welche die Maxwell-Gleichungen an eine Lösungsverteilung stellen. Es war bisher *keine* Vereinfachung der Wellengleichung nötig. Man muß allerdings bedenken, daß eine innere Strukturierung der Partikel im Rahmen der hier geschilderten Methode nur durch Verfeinerung der Diskretisierung möglich ist. Bei nur einem Satz von Feldvektoren pro Elementarzelle können Effekte wie Feldgradienten an den Kanten und Spitzen der Würfel nicht explizit nachgebildet werden. Echte Probenkörper werden allerdings nie über scharfe Kanten verfügen.

4.2.2 Randbedingungen

Die geometrischen Randbedingungen lassen sich nun auf sehr elegante Art und Weise in die Gleichung einbauen. Da man sich in einem Resonator befindet, muß eine stationäre

³Vergleiche dazu [21] und [10].

Lösung in drei Dimensionen begrenzt sein, was nichts anderes bedeutet, als daß ein **diskretes Spektrum an Resonanzfrequenzen** vorliegt. Ebenfalls kann man aus den Stetigkeitsbedingungen für Grenzflächen schließen, daß **alle** Tangentialkomponenten des elektrischen Feldes an den Metallflächen des Resonators verschwinden müssen. Da aber der Vektor \vec{e} immer mit der Matrix $\mathbf{C}^T \mathbf{D}_\mu^{-1} \mathbf{C}$ multipliziert wird, lassen sich diese Randbedingungen einfach dadurch realisieren, daß die entsprechenden Einträge dieser Matrix auf 0 gesetzt werden. Die „störenden“ Tangentialkomponenten des Feldes verschwinden in der Iteration (s.u.) automatisch und werden auf den physikalisch korrekten Wert fixiert.

4.3 Berechnung der effektiven Materialparameter

Die Berechnung der effektiven Materialparameter erfolgt aus den Eigenwerten. Man betrachte noch einmal die Gleichung (4.16): Diese läßt sich weiter abkürzen, indem man die Konstanten zusammenfaßt durch

$$\eta \mathbf{D}_\epsilon \vec{e} = \mathbf{C}^T \mathbf{D}_\mu^{-1} \mathbf{C} \vec{e}, \quad \eta = \frac{\omega^2}{c^2} \Delta^2. \quad (4.17)$$

Zur Berechnung der effektiven Materialparameter benutzt man die Grundmode des Resonators. Diese Mode hat gewisse Vorteile, die sie zur experimentellen Nutzung besonders auszeichnet. Zum einen ist sie durch ihre spezielle Lage (am unteren Ende eines unendlichen Frequenzspektrums) leicht zu erkennen, zum anderen ist bei ihr der Abstand zur nächsthöheren Mode am größten (vergl. [17]). Als dritten Punkt kann man noch anführen, daß die zugehörige Feldverteilung leicht zu erkennen ist und somit eine Identifizierung der Grundmode möglich ist. Prinzipiell könnte man die Effektivwerte auch aus jeder anderen Mode berechnen.

Aus den genannten Gründen wird auch hier die Grundmode bevorzugt. Daher ist man immer am kleinsten Eigenwert η interessiert, da er wegen $\eta \propto \omega^2$ immer auch die kleinste Eigenfrequenz repräsentiert. Diese muß man verlangen, um eine durch die Grundmode geprägte Feldverteilung vorzufinden und den Anteil der höheren Moden zu unterdrücken (wie dieser kleinste Eigenwert aufgesucht werden kann, wird ebenfalls im Abschnitt (4.4) aufgezeigt).

Leerlaufmessung:

Zunächst wird eine Simulation des leeren Hohlleiterresonators durchgeführt. Dazu setzt man

$$\mathbf{D}_\epsilon = \mathbf{D}_\mu = \mathbf{I},$$

so daß man die Gleichung

$$\eta_0 \vec{e} = \mathbf{C}^T \mathbf{C} \vec{e} \quad (4.18)$$

zu lösen hat. Der so gefundene **Leerlauf eigenwert** η_0 entspricht also der reellen Leerlauf-Resonanzfrequenz $\omega_0 = \frac{c}{\Delta} \cdot \sqrt{\eta_0}$. Die zugehörige Feldverteilung ist analytisch bekannt, da es sich um die Verteilung des ungestörten HLR handelt; dies ist aber ein Produkt zweier Sinusfunktionen gemäß

$$E_y(x, z) = E_0 \sin\left(\frac{\pi}{LX} x\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi}{LZ} z\right), \quad E_x = E_z = 0$$

Danach wird der HLR „gefüllt“, also der Eigenwert η zur Gleichung (4.17) gesucht.

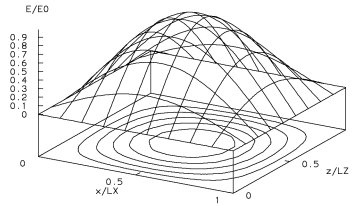


Abbildung 4.5: Feldverteilung im ungestörten Hohlleiterresonator: Die Grundmode besteht aus einem Feld $E_y(x, z) = E_0 \cdot \sin(k_x x) \sin(k_z z)$

Ein effektives Medium, wie es hier untersucht wird, zeichnet sich nun dadurch aus, daß das Medium im quasistatischen Grenzfall *homogen* und *isotrop* ist. Dies bedeutet, daß die Materialparameter ε und μ nicht mehr durch Matrizen darzustellen sind, sondern zu **einfachen (komplexen) Skalaren** werden. In der hier benutzten Matrixschreibweise bedeutet dies:

$$\begin{array}{ll} \text{Mikroskopisch} & \text{Effektiv} \\ \mathbf{D}_\varepsilon & \longrightarrow \bar{\varepsilon} \cdot \mathbf{I} \\ \mathbf{D}_\mu & \longrightarrow \bar{\mu} \cdot \mathbf{I} . \end{array}$$

Dadurch vereinfacht sich Gleichung (4.17) weiter zu

$$\begin{aligned} \eta \mathbf{D}_\varepsilon \vec{e} &= \mathbf{C}^T \mathbf{D}_\mu^{-1} \mathbf{C} \vec{e} \\ \Leftrightarrow \eta \bar{\varepsilon} \vec{e} &= \frac{1}{\bar{\mu}} \mathbf{C}^T \mathbf{C} \vec{e} \\ \Leftrightarrow \eta \bar{\varepsilon} \bar{\mu} \vec{e} &= \mathbf{C}^T \mathbf{C} \vec{e} \\ \Leftrightarrow \eta \bar{\varepsilon} \bar{\mu} &= \eta_0 \\ \Leftrightarrow \bar{\varepsilon} \bar{\mu} &= \frac{\eta_0}{\eta} \end{aligned} \tag{4.19}$$

Ich möchte aber sofort darauf hinweisen, daß der Übergang zwischen den beiden letzten Zeilen eigentlich nicht korrekt ist. Die obige Herleitung spiegelt vor, daß man $\bar{\varepsilon}$ und $\bar{\mu}$ voneinander separieren könnte. Im Resonator kann man jedoch stets nur das *Produkt* $\bar{\varepsilon} \bar{\mu}$ bestimmen, sobald es sich um dielektrische und magnetische Materialien handelt (siehe

[16]); die ersten Schritte der Herleitung können in Wirklichkeit nie ausgeführt werden und dienen nur zur Anschaulichkeit. Daher ist nur die letzte Zeile völlig korrekt⁴.

Der zum Eigenwert erhaltene Eigenvektor \vec{e} enthält die vollständige Verteilung des elektrischen Feldes im mit Material gefüllten Resonator. Mit dieser Feldverteilung können die Auswirkungen der Inhomogenitäten direkt beobachtet werden. Sie kann jedoch im Zweifelsfall auch zur Kontrolle der Modenreinheit herangezogen werden, um zu entscheiden, ob die Grundmode simuliert wurde.

4.4 Lösung der Eigenwertgleichung

Wie schon in der Einleitung erwähnt, wurde das folgende Verfahren von S. Stölzle in [17] entwickelt. Da es aber nach wie vor den Kern des von mir weiterentwickelten Programmes darstellt, wird es hier noch einmal ausführlich vorgestellt.

Wie im letzten Abschnitt gezeigt, handelt es sich um eine verallgemeinerte Eigenwertgleichung vom Typ

$$\eta \mathbf{D}\vec{x} = \mathbf{A}\vec{x}$$

Um ein optimiertes Laufzeitverhalten des Programmes zu erreichen, war es notwendig, den Datentyp COMPLEX bzw COMPLEX*16 möglichst zu vermeiden⁵. Insbesondere darf dieser Typ nicht in Vektoren benutzt werden, da sonst keine gute Vektorisierung erreicht wird. Daher wurde der Vektor \vec{e} nochmals aufgespalten, indem die Real- und Imaginärteile des Vektors während der Programmierung explizit aufgeteilt wurden. Somit sind in dem im Programm benutzten Vektor insgesamt 6 Blöcke festzuhalten (vergl. Bild (4.6))

Dementsprechend müssen natürlich auch die beteiligten Matrizen umgestellt werden. Alles in allem führt dies bei einer typischen Resonatorgeometrie von $40 \times 30 \times 40$ (= 48000 Knoten) zu einer typischen Vektorlänge von 288000 Elementen. Aus diesem Grund scheiden klassische Lösungsverfahren, die auf Gleichungssystemalgorithmen beruhen, von vorneherein aus. Ebenso kann nicht an eine direkte Inversion der Matrix \mathbf{A} gedacht werden, da die hierfür erforderlichen Rechnungen viel zu aufwendig wären, um in einer vernünftigen Zeitspanne durchführbar zu sein. Letztendlich bleibt nur noch ein **Iterationsverfahren** zur Lösung des Eigenwertproblems übrig.

4.4.1 Das Iterationsverfahren

Zunächst muß man sich noch weitere Gedanken über die gewünschte Lösung machen. Man ist wegen der Modenreinheit (s.o.) an der kleinsten Resonanzfrequenz interessiert, welche nach obigen Überlegungen dem kleinsten Eigenwert entspricht. Versucht man nun, mit einem klassischen Iterationsalgorithmus

$$\begin{aligned} \vec{x}_{n+1} &\leftarrow \mathbf{A}\vec{x}_n \\ \vec{x}_{n+1} &\leftarrow \mathbf{D}^{-1}\vec{x}_{n+1} \\ \eta &= \frac{\|\vec{x}_{n+1}\|}{\|\vec{x}_n\|} \end{aligned}$$

⁴Über die Problematik der Faktorisierung wird im Abschnitt (5.3) noch näher eingegangen.

⁵Siehe dazu den Anhang (A).

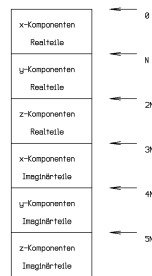


Abbildung 4.6: Der Vektor entsteht aus den N Knoten des Gitters, indem nach den im Text erklärten Regeln zunächst alle x -Komponenten, dann alle y - und alle z -Komponenten hintereinander angeordnet werden. Zur besseren Vektorisierung werden auch Real- und Imaginärteile getrennt angeordnet.

den Eigenwert zu ermitteln, so findet man in der Regel immer den *größten* Eigenwert. Der Anschaulichkeit wegen betrachtet man zunächst ein System mit einem endlichen Spektrum von Eigenwerten. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit sei darin eine (ebenfalls endliche) Basis $\{v_\nu\}$ aus Eigenvektoren mit Eigenwerten η_i im Lösungsraum U gegeben (die Vektorpfeile werden weggelassen); somit ist

$$U = \text{span}\{\nu_1, \dots, \nu_N\} .$$

Dann läßt sich jeder Vektor als Linearkombination der Eigenvektoren schreiben, insbesondere der Startvektor der Iteration:

$$x_0 = \sum_{i=1}^N c_i v_i .$$

Die Anwendung der Abbildung $x_{n+1} = Ax_n$ führt dann auf

$$\begin{aligned}
x_{n+1} &= Ax_n \\
&= A^n x_0 \\
&= A^n \left(\sum_{i=1}^N c_i v_i \right) \\
&= \sum_{i=1}^N c_i \eta_i^n v_i \\
&= \eta_m^n \left\{ c_m v_m + \sum_{i \neq m} c_i \underbrace{\left(\frac{\eta_i}{\eta_m} \right)^n}_{<1} v_i \right\},
\end{aligned}$$

wobei der Index m den maximalen Eigenwert bezeichnet. Da die Eigenvektoren frei normierbar sind, kann der Faktor c_m zu eins gewählt werden, und das Iterationsverfahren liefert als Ergebnis den größten Eigenwert mit zugehörigem Eigenvektor zurück. In unserem Fall wäre das wirklich tragisch, denn das Resonanzspektrum des Hohlleiterresonators ist unbeschränkt, so daß das Verfahren nicht konvergieren könnte.

Um dies zu vermeiden, benutzt man die **inverse Iteration**. Dieses Verfahren wird auf folgende Weise angewendet:

Zunächst wird durch einen **Spektralshift** mit einem geeigneten Startwert η_0 der Eigenwert verschoben. Das heißt, daß man eine modifizierte Eigenwertgleichung betrachtet:

$$\begin{aligned}
\eta \mathbf{D} \vec{x} &= \mathbf{A} \vec{x} & | & - \bar{\eta} \mathbf{D} \vec{x} \\
\Leftrightarrow (\eta - \bar{\eta}) \mathbf{D} \vec{x} &= (\mathbf{A} - \bar{\eta} \mathbf{D}) \vec{x} \\
\Leftrightarrow (\mathbf{A} - \bar{\eta} \mathbf{D})^{-1} \mathbf{D} \vec{x} &= \frac{1}{\eta - \bar{\eta}} \vec{x},
\end{aligned}$$

wobei der letzte Schritt den Übergang zur inversen Iteration bedeutet. Dies bedeutet mit $\lambda = 1/(\eta - \bar{\eta})$ und $\mathbf{M} = (\mathbf{A} - \bar{\eta} \mathbf{D})$ die neue Iterationsvorschrift

$$\vec{x}_{n+1} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{D} \vec{x}_n \quad (4.20)$$

$$\lambda = \frac{\|\vec{x}_{n+1}\|}{\|\vec{x}_n\|}. \quad (4.21)$$

Somit ist sichergestellt, daß mit λ der größte Eigenwert gefunden wird, falls man $\bar{\eta}$ hinreichend dicht bei η gewählt hat. Wie diese Auswahl im Einzelnen getroffen werden kann, wird in (Abschnitt 4.4.2) noch genauer erklärt. Leider ist der Rang der Matrix \mathbf{M} derart groß, daß sie nicht direkt invertiert werden kann. Als Ausweg bietet sich an, statt dessen lieber in *jedem Iterationsschritt* das Gleichungssystem

$$\mathbf{D} \vec{x}_n = \boxed{\vec{b} = \mathbf{M} \vec{x}} = (\mathbf{A} - \bar{\eta} \mathbf{D}) \vec{x}_{n+1} \quad (4.22)$$

zu lösen. Dies geschieht mit dem Verfahren der **konjugiert-komplexen konjugierten Gradienten**, welches in [20] und [17] beschrieben ist. Hier sei nur soviel gesagt, als daß es sich ebenfalls um ein Iterationsverfahren handelt. In jedem Iterationsschritt wird dabei ein Gradient auf dem bisherigen Lösungsraum in Richtung des Residuums gebildet, wodurch sichergestellt wird, daß jeder weitere Schritt eine optimale Minimierung des verbliebenen Fehlers darstellt. Ein Beweis der Konvergenz dieses Verfahrens steht bislang noch aus, jedoch hat es sich in der Praxis als stabil und zuverlässig erwiesen.

Hat man schließlich den (gegenüber Spektralshift invarianten) Eigenvektor \vec{x} gefunden, so kann man durch

$$\eta = \frac{\langle \vec{x}, \mathbf{D}_\varepsilon^{-1} \mathbf{A} \vec{x} \rangle}{\langle \vec{x}, \vec{x} \rangle} \quad (4.23)$$

den gesuchten Eigenwert bestimmen.

4.4.2 Startwerte

Die Festlegung der Startwerte muß bei der Programmierung noch gelöst werden. Die einzigen Anhaltspunkte sind dabei die Moden im vollständig leeren bzw. vollständig gefüllten HLR. Die Feldverteilung und Resonanzfrequenz sind analytisch zugänglich und können als Startwerte benutzt werden. Tatsächlich wird die Grundmodenverteilung

$$E_y(x, z) = E_y^0 \sin(k_x x) \sin(k_z z)$$

immer als Ursprungsfeldverteilung im Programm eingesetzt. Von den Shiftwerten zu einem beliebigen, von 0 und 1 verschiedenen Füllfaktor weiß man lediglich, daß sie sich zwischen den Extrema befinden müssen, die von den Resonanzfrequenzen des leeren und vollständig gefüllten Resonators gebildet werden. Bei der Aufnahme einer Füllfaktorkurve kann man sich an den resultierenden Eigenwerten des letzten Durchlaufes orientieren, sofern die Füllfaktoren nicht in zu großen Schritten erhöht werden. Ein Verfahren zur automatisierten Startwertsuche wird im Abschnitt (A.3) vorgestellt.

Der Algorithmus zur Lösung des Eigenwertproblems, der sich aus zwei Iterationen zusammensetzt, reagiert äußerst sensibel auf die Wahl der Startwerte; insbesondere die Treffergenauigkeit, mit dem $\bar{\eta}$ bei η liegt, entscheidet darüber, ob und wie schnell das Verfahren konvergiert. Glücklicherweise zeigt der Algorithmus eine absonderliche, nichtsdestotrotz erfreuliche Gutmütigkeit: Ist der geratene Shift-Wert zu schlecht, verirrt sich die Iteration der komplexen konjugierten Gradienten ziemlich schnell und läuft ein lokales, stabiles und falsches Minimum an. Da das Verfahren aus diesem Minimum nicht mehr herauskommt, meldet es bei weiteren Schritten der übergeordneten inversen Iteration schon nach einem Durchlauf, daß die Lösung gefunden wurde, und man verliert auf diese Weise wenigstens keine kostbare (weil teure) Rechenzeit. Anhand dieses Verhaltens kann man aber sehr wohl entscheiden, daß man *keine* Lösung vorliegen hat, so daß man mit den gleichen Parametern, aber neuem Shift-Wert einen neuen Versuch machen kann. Zusätzlich kann noch die Feldverteilung kontrolliert werden, um evtl. Abweichungen von der Grundmode auszuschließen.

Kapitel 5

Ergebnisse

5.1 Laufzeitverhalten von *COSME II*

Da die Funktionsweise des Programms in den Abschnitten (4) und (A) bereits ausführlich erläutert wurde, brauche ich hier nicht mehr näher darauf einzugehen. Der theoretische Speicherbedarf berechnet sich aus der Anzahl der verwendeten Matrizen und Vektoren bei einer Systemgröße von $40 \times 30 \times 40$ insgesamt zu etwa **70 MByte**, wobei alle statischen Hilfsvektoren in Betracht gezogen wurden. Dazu ist jedoch zu sagen, daß einige Routinen der **IMSL**-Bibliothek (NEC-SX3: /usr/local/lib1/libimsl_stat.a) benutzt werden. Auch scheint es so zu sein, daß der Compiler zur besseren Vektorisierung bzw. Optimierung weitere Hilfsvektoren und/oder COMMON-Blöcke anlegt. Es hat sich nämlich gezeigt, daß bei einer Zuweisung von 80 MByte Hauptspeicherplatz im Queue-Betrieb der NEC-SX3 das Programm ohne äußerlich ersichtlichen Grund abstürzt (ohne Fehlermeldung!). Eine Zuweisung von 128 MByte pro Job konnte dies beheben und das Programm lief fehlerfrei. Diese Steigerung von mindestens 10 MByte konnte von mir jedoch im Detail nicht nachvollzogen werden.

Beim fehlerfreien Betrieb erreicht das Programm, nicht zuletzt wegen seiner sehr langen Vektoren, **Vektorisierungsraten** von **98%** bei einer Verarbeitungsgeschwindigkeit von **595 bis 607 MFlops**¹. Die theoretische Grenze der verwendeten Maschine liegt bei 1.2 GFlops, so daß eine weitere Steigerung möglich scheint. Man darf dabei allerdings nicht vergessen, daß dieser theoretische Wert praktisch nie zu erreichen ist, da reine Flops-Angaben eine Zuweisungszeit des errechneten Wertes an eine bestimmte Adresse genausowenig berücksichtigen wie das Laden der Register vor der Operation. Daher sind immer echte Datenverwaltungszeiten einzukalkulieren, welche die Leistungsfähigkeit einer Maschine negativ beeinflussen.

Abgesehen von der guten Vektorisierungsrate (d. h. dem Zeitanteil, der im Vergleich zur Gesamtzeit für Vektoroperationen verbraucht wird), trägt die große Vektorlänge ebenfalls dadurch zur Verarbeitungsgeschwindigkeit bei, daß die Wahrscheinlichkeit gering ist, daß hintereinander oder (noch schlimmer) gleichzeitig auf ein und dieselbe Hauptspeicherbank zugegriffen werden muß.

¹1 Flops = 1 Floating point operation per second: Dies ist ein Maß für die Rechengeschwindigkeit eines Rechners. Hier wird speziell bezüglich der Verarbeitungsgeschwindigkeit von Fließkommazahlen gemessen, da diese Operationen die aufwendigsten und häufigsten sind.

Es zeigt sich, daß die Berechnung einer effektiven Füllfaktorkurve $\overline{(\varepsilon\mu)}(f)$ je nach Füllfaktor und Betrag der Teilchenparameter unterschiedlich lange dauert. Die längste Zeit wird bei Füllfaktoren von etwa 0.4–0.6 benötigt, was auch plausibel ist, da hier die „Unordnung“ im System am größten ist. Weiterhin spielt bei der Berechnungsdauer auch die Nähe der Shiftwerte zum eigentlichen Eigenwert eine entscheidende Rolle, denn hiervon hängt primär die Anzahl der benötigten inversen Iterationen ab. Vor allem bei hohen Materialparametern hat die Güte des Shiftwertes und damit die Routine zur Shiftwertbestimmung einen großen Einfluß. Eine typische Anzahl ist hierbei drei, d. h. nach drei inversen Iterationen sollte der entsprechende Eigenwert mit hinreichender Konvergenz gefunden sein. Bei sehr schlechtem Shiftwert (oder sehr hohen Materialwerten) kann sich diese Zahl bis auf 8 erhöhen, was sich natürlich negativ auf die verbrauchte Rechenzeit auswirkt (siehe dazu das Blockdiagramm im Anhang).

Spaltet man die benötigte Rechenzeit in Anteile auf, die auf die DK zurückzuführen sind (siehe nächster Abschnitt) und in Rechenzeit, die eine von Null verschiedene PK verbraucht, so stellt man fest, daß die Berechnung einer effektiven PK im Vergleich zur Berechnung einer DK signifikant weniger Zeit benötigt. Die Zeiten für eine DK-Berechnung von quantitativ gleichwertigen Dielektrizitätskonstanten sind, wiederum je nach Füllfaktor, mindestens dreimal, manchmal jedoch bis zu fünfmal länger! Die Begründung hierfür vermute ich in der ungünstigen Lage der Matrix \mathbf{D}_ε in der Eigenwertgleichung. In einer eventuellen Neufassung des Programms könnte daran gedacht werden, für eine Optimierung der DK-Berechnungen lieber eine Eigenwertgleichung der Form

$$\eta \vec{e} = \mathbf{D}_\varepsilon^{-1} \mathbf{C}^T \mathbf{D}_\mu^{-1} \mathbf{C} \vec{e} = \mathbf{A} \vec{e}$$

zu lösen, denn in der jetzigen Form des Programmes muß in jedem Schritt der inversen Iteration die Matrix $\mathbf{D}_\varepsilon^{-1}$ berechnet werden. Dies ist zwar nicht sehr aufwendig (Diagonalmatrix), jedoch werden explizit *Divisionen* verwendet. Dabei ist zu beachten, daß die meisten bekannten CPU's zur Division auf ein Verfahren zurückgreifen, das man zur Elementarmathematik rechnen muß und sich auf Restwertbildungen stützt. Da dies einen sehr viel größeren Aufwand verlangt als eine normale Multiplikation, verrichtet eine CPU in der Regel eine Division auch entsprechend langsamer.

An Hand der oben genannten Punkte ist auch zu erkennen, daß die geforderten Leistungen im Augenblick nur von der im Kölner Rechenzentrum installierten NEC-SX3 erbracht werden. Insbesondere die hohen Anforderungen an den Hauptspeicher verhindern in der aktuellen Version eine Portierung auf die in der KFA Jülich eingesetzte CRAY.

Zur Vollständigkeit muß noch erwähnt werden, daß die Anforderungen des Programms an Festplattenkapazitäten sehr gering sind. Der Quelltext selbst hat mittlerweile die 40 KByte-Grenze erreicht, als kompiliertes, ausführbares Programm ist es etwa 1 MByte groß. Verzichtet man auf eine Abspeicherung des Eigenvektors (in dem die Feldverteilung enthalten ist), so kommen für jeden berechneten Füllfaktorwert etwa 4 KByte hinzu. Möchte man hingegen das Feld sichern, so ist die entsprechende Datei (je nach Resonatorgeometrie) bis zu 10 MByte groß. Dies muß vor Start des Programms beachtet werden, da auf der SX3, genauso wie auf der als *Front End* dienenden AIX370, eine Quotierung des Plattenplatzes installiert ist. Ein Überschreiten der zugeteilten Kapazität führt dann zum Datenverlust.

5.2 Aufnahme von Füllfaktorkurven $\overline{(\varepsilon\mu)}(f)$

Mit Hilfe des Programmes *COSME II* wurden effektive Medien simuliert, deren Mischungsverhältnis zu einem gegebenen Satz von Parametern $(\varepsilon_M, \mu_M, \varepsilon_T, \mu_T)$ kontinuierlich von $f = 0$ zu $f = 1$ gesteigert wurde. Die Matrix besteht immer aus einem elektromagnetisch neutralen Medium, welches über die Materialparameter $\varepsilon_M = \mu_M = 1$ verfügt. Dies stellt aber keine starke Einschränkung dar, da, wie in [17] gezeigt, davon abweichende Matrixparameter durch eine Normierung auf die angegebenen Werte transformiert werden können ($\mathbf{D}_\varepsilon \rightarrow \frac{1}{\varepsilon_M} \mathbf{D}_\varepsilon^*$). Zu jedem vorgegebenen f wurde der Eigenwert des simulierten Hohlleiterresonators berechnet, aus dem, wie in Kapitel (4) gezeigt, der effektive Materialparameter $\overline{(\varepsilon\mu)}(f)$ folgt. Die Effektivwerte wurden anschließend gegen den Füllfaktor aufgetragen und man erhält so die in den Abbildungen (5.1) — (5.4) dargestellten Füllfaktorkurven.

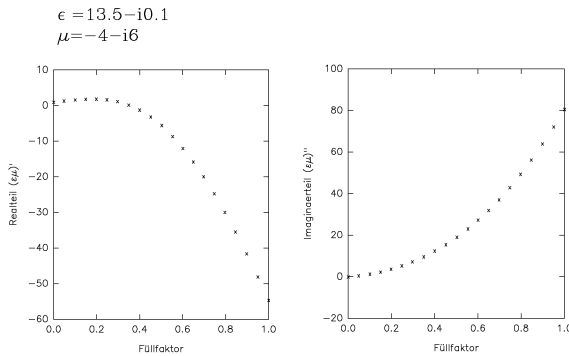


Abbildung 5.1: Simulation eines effektiven Mediums aus einer neutralen Matrix ($\varepsilon_M = \mu_M = 1$) und magnetischen, schwach leitfähigen Teilchen mit $\varepsilon_T = 13.5 - i0.1$ und $\mu = -4 - i6$. Der negative Realteil der Permeabilität rührt daher, daß es sich um ein gerade an einer Resonanzfrequenz befindliches Teilchen handelt (die Daten stammen aus einer Messung eines Absorbermaterials). Man stellt fest, daß der Realteil einen Nulldurchgang hat, der Imaginärteil ist streng monoton steigend.

Es lassen sich aus der Betrachtung der Kurven und dem Vergleich untereinander verschiedene Feststellungen treffen:

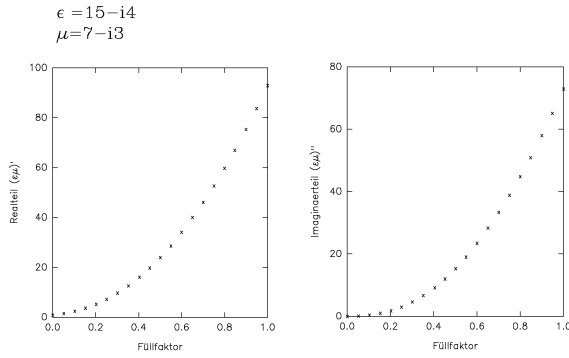


Abbildung 5.2: Simulation zu Teilchen mit $\epsilon_T = 15 - i4$, $\mu_T = 7 - i3$, die Matrix ist nach wie vor neutral. Hier sind Real- und Imaginärteil streng monoton steigend und es wird ein anderer Effekt sichtbar, der in der letzten Kurve nur schwach erkennbar ist: Das Krümmungsverhalten von $\overline{(\epsilon\mu)}$ und $\overline{(\epsilon\mu)''}$ ändert sich mit wachsendem Füllfaktor. Die Kurve ist im unteren Bereich stärker gekrümmt als im oberen.

Der Realteil $\overline{(\epsilon\mu)}$ der Kurven besitzt unter Umständen einen Nulldurchgang (Bilder (5.1) und (5.3)). Das läßt sich aber aus der Wahl der Teilchenparameter ϵ_T und μ_T erklären, bedenkt man, daß im vollständig gefüllten Resonator genau wie in jedem anderen Wellenleiter beide Materialparameter als Produkt eingehen. Dies ist eine analytisch korrekte Beziehung, so daß in dem „effektiven Medium“ bei $f = 1$ tatsächlich die Beziehung

$$\overline{\epsilon\mu} = \epsilon_T \cdot \mu_T$$

gilt. Eine elementare Aufspaltung dieser Beziehung in Real- und Imaginärteile zeigt, daß $\overline{(\epsilon\mu)'} = \mu'_T \epsilon'_T - \mu''_T \epsilon''_T$ gilt.

Da bei der neutralen Matrix für $f = 0$ $\overline{(\epsilon\mu)'} = 1$ gilt und die Kurve der Effektivwerte aus Gründen der Feldkontinuität bei Ladungsfreiheit² eine stetige Kurve sein muß,

²Falls es eine Unstetigkeit in der Kurve der effektiven Materialparameter gibt, könnte die Situation eintreten, daß durch geringe Dichteschwankungen die Füllfaktorergrenze an einer beliebigen Stelle des Resonators überschritten wird und lokal der Resonator zweigeteilt wird. Eine Welle, die diesen Bereich durchläuft, müßte dann auch Unstetigkeiten des elektrischen Feldes (in Normalrichtung) oder der di-

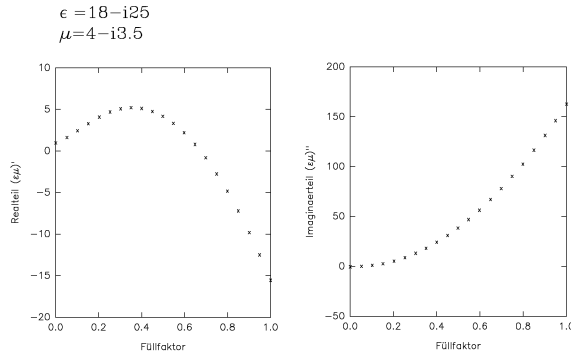


Abbildung 5.3: Simulation von Mischungen der obigen Matrix mit Teilchen der Materialwerte $\varepsilon_T = 18 - i25$, $\mu_T = 4 - i3.5$. Auch hier findet wieder ein Vorzeichenwechsel von $\overline{(\varepsilon\mu)}'$ statt, jedoch findet man hier bei genauem Hinsehen einen neuen Effekt: Die Kurve des Realteils $\overline{(\varepsilon\mu)}'$ ist zunächst linksgekrümmt und durchläuft anschließend einen Wendepunkt. Der Übergang zur Linearität des Imaginärteils ist im rechten Bild deutlich zu erkennen.

kann somit durch geeignete Wahl der Einteilchenparameter ein Nulldurchgang der Kurve $\overline{(\varepsilon\mu)}'(f)$ erzwungen werden.

Ein solches Material wäre für einen bestimmten Füllfaktor und eine bestimmte Frequenz rein dämpfend, da hier keine Phasenverschiebungen mehr auftreten, sondern nur noch Dämpfungen³. In Bild (5.1) ist zusätzlich zu Beginn der Kurve ein Wendepunkt zu verzeichnen, in dem die linksgekrümmte Kurve in eine rechtsgekrümmte übergeht.

Bei allen Bildern, insbesondere bei Materialwerten μ_T , ε_T , die nicht zu einem verschwindenden $\overline{(\varepsilon\mu)}'$ führen (Bilder (5.2) und (5.4)), läßt sich eine Änderung des Krümmungsverhaltens feststellen. Die zunächst relativ stark gekrümmte Kurve geht in einem Bereich von etwa $f = 0.2$ bis $f = 0.4$ in eine gestrecktere Form über.

elektrischen Verschiebung (in Tangentialrichtung) hinnehmen. Dies ist allerdings in einem Gebiet ohne statische Ladungsverteilung, was hier vorausgesetzt wurde, unmöglich.

³Wie im nächsten Kapitel aber noch gezeigt wird, muß ein realer Absorber neben den Reflexionen an den Grenzflächen immer auch Phasenverschiebungen erzeugen, was man allerdings auch gezielt zur Verbesserung der Absorptionseigenschaften einsetzen kann.

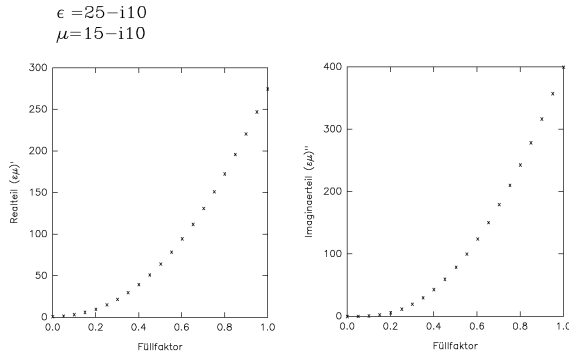


Abbildung 5.4: Simulation zu $\epsilon_T = 25 - i10$, $\mu_T = 15 - i10$. Hier sind beide Kurven wieder streng monoton. Mit steigenden Materialparametern scheinen die Knickpunkte sich stärker auszuprägen.

Der Verlauf der Imaginärteile $\overline{(\epsilon\mu)}''$ aller gezeigten Kurven ist immer streng monoton steigend. Ein Nulldurchgang des Imaginärteiles wäre auch unphysikalisch, da somit die Energieerhaltung verletzt wäre. Alle Kurven der Imaginärteile haben einen im Vergleich zu den Realteilen stärker ausgeprägten Übergang von einer starken Krümmung zu einem mehr linearen Verlauf, der bei ähnlichen Füllfaktoren anzusiedeln ist wie in den Kurven der Realteile.

Es stellt sich die Frage, wie diese Kurven auszuwerten sind. Eine detaillierte Aussage über das Verhalten der effektiven Medien bei verschiedenen Materialparametern läßt sich auf den ersten Blick nicht treffen, da es eine ganze Reihe von verschiedenen Ausformungen der Kurven gibt. Es besteht zwar die Möglichkeit, die Permittivität getrennt zu untersuchen, jedoch hilft das bei einer Bewertung der durch die Permeabilität verursachten Effekte nicht weiter. Es muß nach einer Alternative gesucht werden, um das Permeabilitätsverhalten zu separieren. Eine Möglichkeit besteht darin, in einer Simulation gezielt die DK zu vernachlässigen, also rein magnetische Materialparameter zu betrachten. Eine solche Simulation hat zwar keine reale, physikalische Entsprechung mehr, da man kein ferromagnetisches Material finden kann, dessen Dielektrizitätskonstante $\epsilon_T = 1$ ist; Die Begründung dafür, daß dieser Weg trotzdem beschritten werden kann, wird im nächsten

Abschnitt gegeben.

5.3 Faktorisierungseigenschaften

Eine wichtige Frage bei der Untersuchung der effektiven Materialparameter $\bar{\varepsilon}$, $\bar{\mu}$ ist, in welchem Maße sich beide Parameter gegenseitig beeinflussen. In den bisher besprochenen Simulationen wurden stets beide Eigenschaften eingesetzt, also elektrische und magnetische Materialwerte gleichzeitig angenommen. Dies ist insofern unpraktisch, als daß man die verschiedenen Einflüsse nicht voneinander trennen kann. Dazu müßte man ein Separationsverfahren finden, welches im einfachsten Fall durch eine Faktorisierung der Materialparameter geschehen kann.

Es gilt also zu klären, ob und bis zu welcher Grenze die Gleichung

$$\overline{\varepsilon\mu} = \bar{\varepsilon} \cdot \bar{\mu} , \quad (5.1)$$

abgesehen von $f = 0$ und $f = 1$, ihre Gültigkeit behält.

Dazu gab es in der Literatur bereits verschiedene Ansätze. Lamb, Wood und Ashcroft versuchen in [16] zu zeigen, daß in einem sc-Gitter für die Hauptachsen einer Mischung mit orientierten Ellipsoiden immer

$$\overline{\varepsilon\mu} = \bar{\varepsilon}^{MMMMG} \cdot \bar{\mu}^{MMMMG}$$

gilt, falls man in der Lage ist, die bekannten Formulierungen von Maxwell Garnett $\bar{\varepsilon}^{MG}$ sowie $\bar{\mu}^{MG}$ mit einer Korrektur durch alle höheren Multipolterme zu versehen und dadurch Multipol-Modifizierte Maxwell-Garnett-Gleichungen zu erhalten (MMMMG). Dabei wurde immer der quasistatische Grenzfall als gegeben angenommen, d. h. alle relevanten Längen sind kleiner als die (innere) Wellenlänge. Da dies auch in den verlustbehafteten Medien gelten muß, ist somit auch die **Eindringtiefe**

$$\delta = \frac{1}{\text{Im}(k)} = \frac{c}{\omega \text{Im}(\sqrt{\varepsilon\mu})}$$

groß im Vergleich zu den Teilchendimensionen a , h. h. das Teilchen muß vollständig von den einfallenden Feldern durchflutet werden.

Da bei hohen Verlustwinkeln die Eindringtiefe rapide abnimmt, das Produkt $(k_i \cdot a)$ damit in die Größenordnung 1 kommt, verläßt man den quasistatischen Grenzfall und es ist eigentlich nicht zu erwarten, daß die Beziehung (5.1) unverändert gilt. Dies wurde von Grimes und Grimes in [30] eingehend untersucht. Sie gingen dabei von einem Clausius-Mosotti-Modell aus und entwickelten die auftretenden Felder in eine Reihe unter Verwendung der sphärischen Bessel- und Hankel-Funktionen. Dadurch gelangten sie zu einer Effektiv-Medien-Formel für $\bar{\varepsilon}$ und $\bar{\mu}$:

$$\bar{\mu} = \frac{3\sigma_0^3 + i8\pi a^3 Cn}{3\sigma_0^3 - i4\pi a^3 Cn}$$

$$\bar{\varepsilon} = \frac{3\sigma_0^3 + i8\pi a^3 Dn}{3\sigma_0^3 - i4\pi a^3 Dn}$$

$$\sigma_0 \stackrel{def.}{=} k_0 \cdot a ,$$

wobei für den quasistatischen Grenzfall $\|k_i \cdot a\| \ll 1$ die Koeffizienten C , D jeweils nur von einem Materialparameter abhängen, so daß in erster Näherung

$$C = -i\sigma_0^3 \frac{\mu_T - 1}{\mu_T + 2}$$

$$D = -i\sigma_0^3 \frac{\varepsilon_T - 1}{\varepsilon_T + 2}$$

$$n = \frac{N}{V} \quad \text{Teilchenzahldichte}$$

gilt. Es konnte gezeigt werden, daß bei einer Einbeziehung auch nur des nächsthöheren Terms der Reihenentwicklung Mischterme auftreten, so daß $C = C(\varepsilon, \mu)$ und $D = D(\varepsilon, \mu)$ ist. Eine numerische Analyse dieses Sachverhaltes zeigte, daß ab einem Wert $\|k_i \cdot a\| \approx 1$ signifikante Abweichungen zwischen der quasistatischen Näherung und der Rechnung mit der vollständigeren Entwicklung der Koeffizienten auftraten. Dies entspricht einem Verhältnis von Teilchengröße zu innerer Wellenlänge von etwa 1 : 1.

Diese Problemstellung wurde auch mit dem Programm *COSME II* im Bereich $\|k_i \cdot a\| < 1$ untersucht. Dazu wurden für jedes Wertepaar (μ_T, ε_T) , wobei immer $\mu_M = \varepsilon_M = 1$ gesetzt wurde, jeweils drei Füllfaktorkurven aufgenommen:

1. $\mu_T = \mu' - i\mu''$, $\varepsilon_T = 1 \rightarrow \bar{\mu}$;

2. $\varepsilon_T = \varepsilon' - i\varepsilon''$, $\mu_T = 1 \rightarrow \bar{\varepsilon}$;

3. $\varepsilon_T = \varepsilon' - i\varepsilon''$, $\mu_T = \mu' - i\mu'' \rightarrow \overline{\varepsilon\mu}$.

Es wurde dabei immer mit einer definierten Sequenz von Zufallszahlen gearbeitet, damit in allen drei Durchläufen die Teilchenverteilung exakt reproduziert werden konnte. Anschließend wurde an jedem Füllfaktorwert das Produkt der ersten beiden Kurven $\bar{\varepsilon} \cdot \bar{\mu}$ mit den schon oben gezeigten simulierten Ergebnissen $\overline{\varepsilon\mu}(f)$ verglichen (Abbildungen (5.5) — (5.7)).

Stichprobenartig (zur Senkung der Kosten durch Rechenzeitverbrauch) wurde dies mit verhältnismäßig großen Materialwerten getestet, u. a. mit

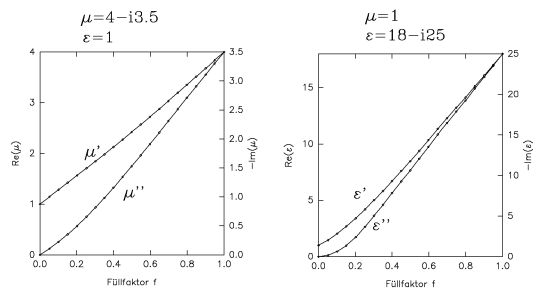
$$\varepsilon_T = 50 - i20, \mu_T = 30 - i10 \rightarrow \overline{\varepsilon\mu} = 66.241 - i43.303 \text{ bei } f = 0.3 .$$

Dabei wurden sehr geringe Eindringtiefen von $\delta = 3.3 \cdot a$ (a =Teilchengröße) erreicht, ohne daß eine nennenswerte Verschlechterung der Faktorisierungseigenschaften zu verzeichnen gewesen wäre. Die Abweichungen von $\overline{\varepsilon\mu}$ zu $\bar{\varepsilon} \cdot \bar{\mu}$ bewegen sich stets in der Größenordnung $< 1\%$. Diese Eindringtiefe entspricht einem Verhältnis $k_0 a = 0.11$ und $k_i a = 0.99$, was der in [30] vorhergesagten Grenze für eine Faktorisierung entspricht. Trotzdem sind noch keine nennenswerten Fehler zu verzeichnen, da bei der gewählten Art der Simulation höhere Multipolterme implizit berücksichtigt sind und man sich trotzdem noch im Grenzfall langer Wellen befindet. Somit ist nach Lamb, Wood und Ashcroft diese Exaktheit auch zu erwarten.

Eine Betrachtung der Kurven zeigt, daß im Rahmen der numerischen Ungenauigkeit die Materialparameter gemäß Gleichung (5.1) immer exakt faktorisieren. Die in (5.8) abgebildeten absoluten Fehler weisen darauf hin, daß die Abweichungen in erster Linie

durch numerische Ungenauigkeiten hervorgerufen werden. Da die Fehler bei allen gezeigten Kurven fast identisch sind und sich im wesentlichen nur durch die Lage der Peaks des relativen Fehlers unterscheiden (der nach unten noch zu nennenden Gründen nicht aussagekräftig ist), wird hier exemplarisch nur ein Fehlerdiagramm in Bild (5.8) gezeigt. Die absoluten Fehler zeigen alle das gleiche, gerade beschriebene Verhalten. Bei einem Füllfaktor von $f = 0.5$ ist die Unordnung des Systems am größten und die Felder sind u.U. sehr verzerrt. Das Auffinden von Eigenwert und -vektor ist hier deshalb am schwierigsten. Ein Beleg dafür ist die Tatsache, daß der Verlauf des absoluten Fehlers direkt mit der zur hinreichend genauen Konvergenz benötigten Laufzeit korreliert ist. Der relative Fehler schließlich zeigt deutliche Peaks. Diese sind jedoch nicht physikalischer Natur, sondern ebenfalls numerische Abbruchfehler bei der Division zweier sehr kleiner Zahlen durcheinander; die Peaks liegen an den Stellen der Nulldurchgänge von $\bar{\varepsilon}\mu'$ und $\bar{\varepsilon}\mu''$.

Numerische Berechnung mit COSME V3.0



Matrixmaterial: $\mu_M = \epsilon_M = 1$

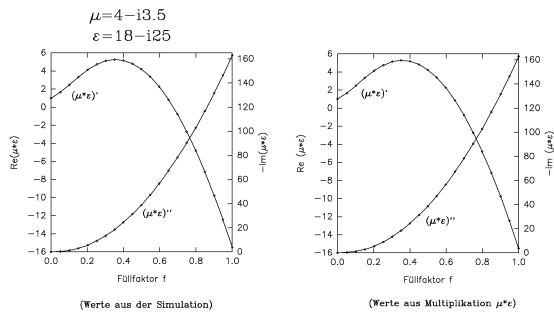


Abbildung 5.5: Untersuchung zur Faktorisierung der effektiven Materialparameter. Wie man sehr gut erkennen kann, ist die Übereinstimmung der Kurven von simuliertem $\overline{\epsilon\mu}$ mit dem berechneten $\bar{\epsilon} \cdot \bar{\mu}$ außerordentlich groß.

Numerische Berechnung mit COSME V3.0

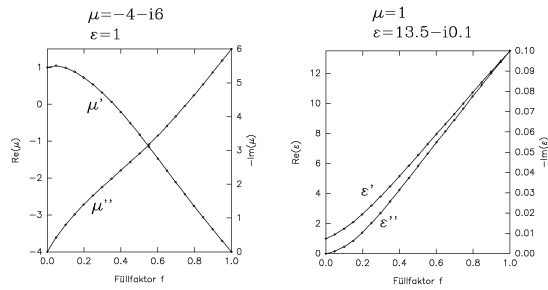
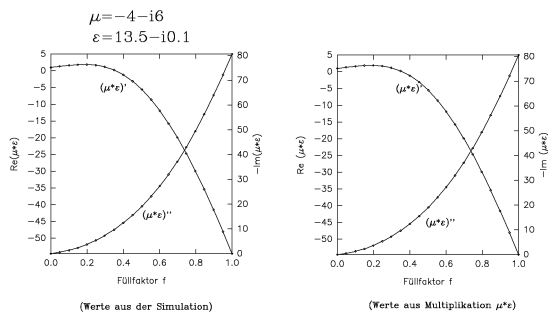
Matrixmaterial: $\mu_M = \varepsilon_M = 1$ 

Abbildung 5.6: Weitere Kurven zur Demonstration der Faktorisierung. Bemerkenswert an dieser Abbildung und auch in Bild (5.5) ist die Tatsache, daß je nach Wahl der Real- und Imaginärteile leicht Nulldurchgänge von $\overline{\varepsilon\mu}'$ erzeugt werden können (s.o.). Somit gibt es eine Frequenz, für die die Mischung nur noch Verluste verursacht und keine Phasenverschiebung.

Numerische Berechnung mit COSME V3.0

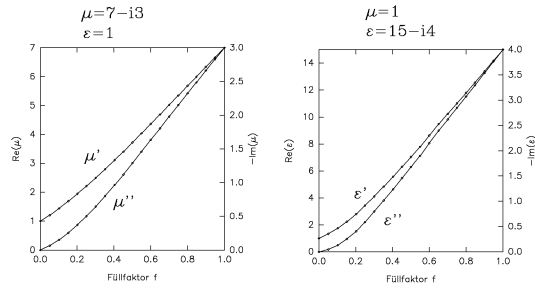
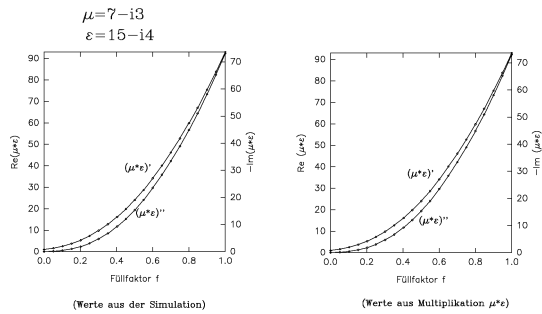
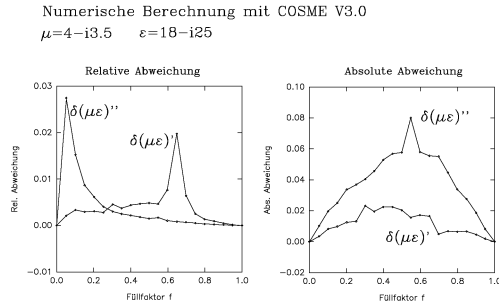
Matrixmaterial: $\mu_M = \varepsilon_M = 1$ 

Abbildung 5.7: Falls die Realteile der Materialparameter ε , μ größer sind als die Imaginärteile, kommt es zu keinem Nulldurchgang mehr. Die Faktorisierung bleibt aber davon völlig unbeeinflusst, und man kann von einer hervorragenden Übereinstimmung der Kurven sprechen



Abweichung der berechneten von den simulierten Werten

Abbildung 5.8: Relativer und absoluter Fehler der Faktorisierungskurven. Der absolute Fehler ist bei $f = 0.5$ maximal, was durch erhöhten Rechenaufwand bei mittleren Füllfaktoren zu erklären ist. Die relativen Fehler sind bei Materialparametern mit Nulldurchgängen von $\overline{\varepsilon\mu}'$ und $\overline{\varepsilon\mu}''$ kein gutes Maß, da numerische Rundungsfehler die relativen Abweichungen künstlich in die Höhe treiben. Die Fehlerdiagramme der anderen Plots sind mit dem hier gezeigten vergleichbar und werden nicht gesondert gezeigt.

Das Verhalten des Materials ist durch Durchflutungseffekte erklärbar. Wie man aus der Arbeit von Grimes und Grimes ableiten kann, ist primär die vollständige Durchflutung der Partikel die Hauptursache einer guten Faktorisierung. Nehmen die Verluste im Medium zu, so kommt es zu einem Feldgradienten innerhalb der Partikel und damit zu Skin-Effekten, so daß der Einfluß der Partikel auf das Gesamtgemisch abnimmt. Die Felder „sehen“ einfach weniger von den Teilchen.

Schaut man nun noch einmal auf das vorgestellte Diskretisierungsverfahren, mit dem im Programm *COSME II* die Resonatorstrukturen erfaßt wurden, so stellt man fest, daß zu jeder Elementarzelle des Gitters jeweils genau *ein* Dreibein an Feldvektoren vorhanden ist, um die Felder E und H in den Zellen zu beschreiben. Die Felder sind somit auf dem Bereich einer Elementarzelle konstant und ein Feldgradient ist nicht vorhanden. Die vollständige Faktorisierung der simulierten Materialparameter für $\|k_i a\| < 1$ ist also ein Ausdruck der Selbstkonsistenz des Programmes, wobei die Ergebnisse mit theoretischen Vorhersagen in [30] übereinstimmen.

Theoretisch müßten die simulierten Werte sogar für alle denkbaren Materialwerte ε_T , μ_T genau faktorisieren, also insbesondere auch im Bereich $\|k_i a\| > 1$. Hier sind [30]

zufolge aber Abweichungen von der exakten Faktorisierung zu erwarten. Dies könnte prinzipiell durch eine Verfeinerung der Diskretisierung bei gleicher Teilchengröße überprüft werden, so daß die Partikel eine Struktur erhalten. Durchflutungseffekte können dann nachgebildet und die Auswirkungen auf die Faktorisierung untersucht werden.

Ein Umkehrschluß ist aber bereits jetzt möglich, der als Indiz zur Unterstützung der Theorie von Grimes und Grimes gewertet werden kann: Solange Durchflutungssphänomene und Skin-Effekte in einem Material keine Rolle spielen, kann davon ausgegangen werden, daß die Materialparameter $\bar{\mu}$ und $\bar{\varepsilon}$ vollständig ausfaktorisieren. Eine Kenntnis dieser Parameter erlaubt somit eine Berechnung des Verhaltens des Mediums auf Welleneinstrahlung, also eine Berechnung des effektiven Materialparameters $\overline{\varepsilon\mu}$.

Eine Erhöhung der Verluste im Medium durch wachsendes μ'' , ε'' kann unter dieser Annahme immer durch eine Verkleinerung der Partikelgröße aufgefangen werden, um die Durchflutung der Teilchen zu erhöhen.

5.4 Füllfaktorkurven $\bar{\mu}(f)$

Die in den letzten beiden Abschnitten dargelegten Gründe erlauben es, die Permeabilität getrennt von einer bei realen Materialien immer vorhandenen Permittivität zu betrachten. Dies ermöglicht die separate Untersuchung der Permeabilität im Rahmen einer Effektiv-Medien-Theorie mit der gleichen Vorgehensweise, die auch zur Untersuchung der Dielektrizitätskonstante in der Regel benutzt wird, z. B. in [17].

Mit Hilfe des Programmes *COSME II* wurde wieder der Füllfaktorbereich von $f = 0 \rightarrow 1$ durchfahren und die jeweiligen Eigenwerte berechnet. Wieder wurde aus den Eigenwerten die effektive Permeabilität $\bar{\mu}$ berechnet und gegen den Füllfaktor aufgetragen. Die Matrix besteht auch hier aus einem elektromagnetisch neutralen Medium.

Man beachte, daß die folgenden Simulationen alle auf einem sc-Gitter durchgeführt wurden.

Typische Verläufe der Füllfaktorkurven sind in den Bildern (5.9) — (5.13) für verschiedene Teilchen-PK dargestellt.

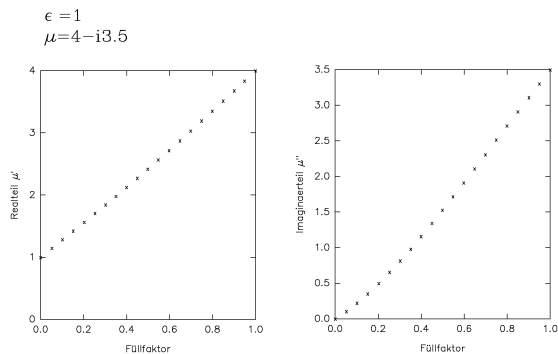


Abbildung 5.9: Verlauf der komplexen effektiven Permeabilität bei einer Teilchen-PK von $\mu_T = 4 - i3.5$. Durch die geringen Beträge von Real- und Imaginärteil ist eine Krümmung der Kurve nur bei $\bar{\mu}''$ festzustellen.

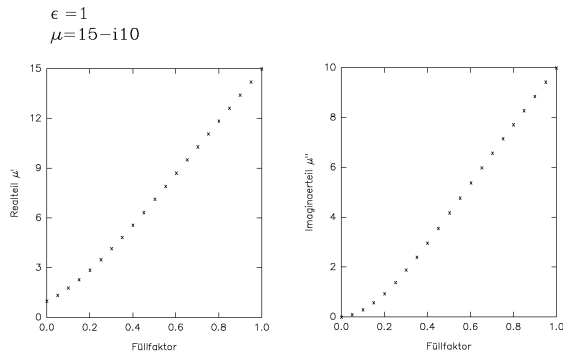


Abbildung 5.10: Bei einer Teilchen-PK von $\mu_T = 15 - i10$ sind die Krümmungen deutlicher ausgeprägt. Es läßt sich ein gekrümmter und ein linearer Bereich ausmachen.

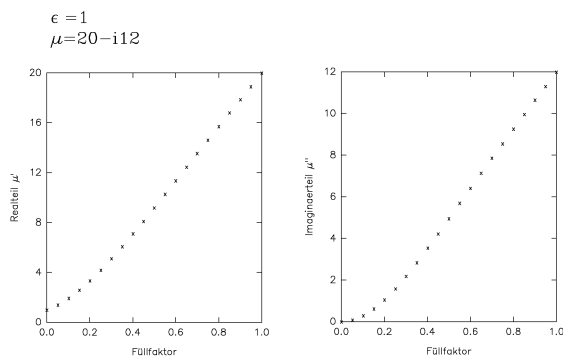


Abbildung 5.11: Eine weitere Steigerung der Permeabilität auf $\mu_T = 20 - i12$ läßt die Strukturierung der Kurven ausgeprägter werden.

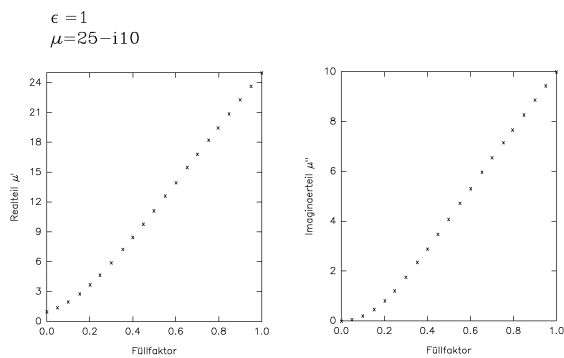


Abbildung 5.12: Je größer die Beträge der PK werden (hier $\mu_T = 25 - i10$), desto deutlicher setzt sich der untere, gekrümmte Bereich vom oberen, linear verlaufenden ab.

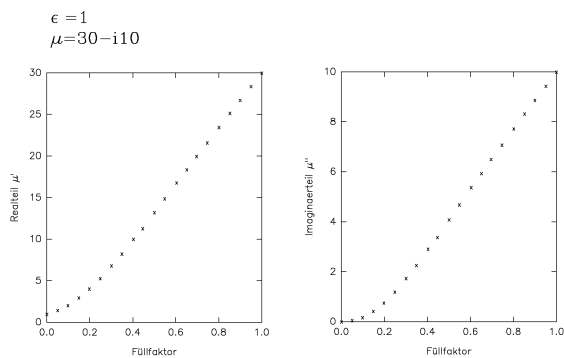


Abbildung 5.13: Bei $\mu_T = 30 - i10$ läßt sich erkennen, daß der scheinbar lineare Verlauf für $f > 0.3$ in Wirklichkeit leicht rechtsgekrümmt ist.

5.5 Allgemeine Form der Füllfaktorkurven

Die gezeigten Kurven stellen einen Auszug aus den durchgeführten Simulationen in einem breiten Spektrum von Teilchenparametern dar. Die Beträge der komplexen Permeabilitätskonstanten lagen dabei zwischen $\|\mu\| = 5$ und $\|\mu\| = 100$, die Verlustwinkel $\tan(\delta) = \frac{\mu''}{\mu'}$ im Bereich von 0 bis 1.

Alle Kurven weisen qualitativ einen identischen Verlauf auf. Sowohl bei Real- als auch Imaginärteil ist zunächst ein relativ stark gekrümmter Verlauf bei kleinen Füllfaktoren zu beobachten. Dieser Bereich ist in etwa auf das Intervall $f \in [0, 0.25]$ beschränkt, danach verlaufen bei allen Kurven Real- und Imaginärteil im wesentlichen linear. Bei genauer Beobachtung findet man in den Kurven jedoch bei einem Füllfaktor von etwa $f = 0.6-0.65$ einen Wendepunkt, der mit zunehmendem Materialparameter μ_T deutlicher wird und in den Kurven des Imaginärteils $\bar{\mu}''$ stärker ausgeprägt ist (siehe Bilder (5.12) und (5.13)).

Ein Vergleich mit den in Kapitel (3) vorgestellten Effektiv-Medien-Formeln zeigt, daß die aus der Simulation erhaltenen Daten sich nur schlecht mit den klassischen Formeln beschreiben lassen, wie Abbildung (5.14) deutlich zeigt. Nur die zur Looyenga-Gleichung gehörige Kurve und die Parallelschaltungskurve liegen in der Nähe der Daten. Dies läßt sich dadurch erklären, daß man bei den klassischen Gleichungen ständig gezwungen ist, spezielle Teilchenformen anzunehmen und Näherungen in Bezug auf die Feldverteilung zu machen (fehlende Multipolterme u.ä.). Auch ist es von vornherein unfair, die simulierten effektiven Permeabilitäten mit der Maxwell-Garnett-Formel zu vergleichen, da sie, wie schon erwähnt, wegen des zugrunde liegenden Modelles bei hohen Füllfaktoren nicht mehr zulässig ist. Hier wird noch einmal der Wert der hier benutzten Computersimulation deutlich, die solchen Einschränkungen nicht unterliegt.

Wenn überhaupt, so müßten die erhaltenen Daten durch eine Mischung der klassischen Formeln beschrieben werden; bei kleinen Füllfaktoren ist die Kurve der simulierten Daten stark gekrümmt und liegt in etwa bei einer Serienschaltung oder auch einer Looyenga-Kurve. Bei Füllfaktoren oberhalb von $f = 0.5$ ist (in erster Näherung) nur noch eine Beschreibung mittels einer Parallelschaltung möglich.

Alle Kurven wurden mit statistisch verteilten Ensembles aufgenommen, d. h. zu jedem Durchlauf wurde die zufällige Verteilung der Partikel im Hohlleiterresonator neu gewählt. Dies hat zur Folge, daß Fluktuationen der Teilchenverteilung auftreten müssen, die sich in der Kurve durch Schwankungen um einen Mittelwert äußern werden. Um diesen Effekt quantitativ bestimmen zu können, wurde deshalb eine "Ausschnittsvergrößerung" eines Kurvenstückes durchgeführt (Abbildung (5.15)).

Man betrachtet hier einen kleinen Füllfaktorbereich und führt dort relativ viele Simulationen durch, wobei man tatsächlich die erwartete Streuung feststellt. Nach wie vor ist jedoch eine deutliche Tendenz der Punkte zu sehen, in der Umgebung einer gemittelten Kurve zu liegen, wobei die Schwankungen etwa 1 % betragen (Vergrößerung aus der Kurve zu $\mu_t = -4 - i6$).

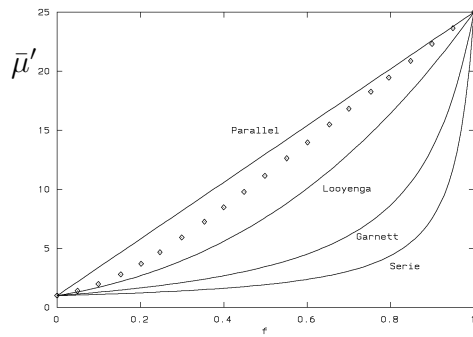


Abbildung 5.14: Vergleich der Simulationsdaten mit klassischen Formeln. Aufgetragen ist noch einmal der Realteil $\bar{\mu}'$ der mit $\mu_T = 25 - i10$ aufgenommenen Kurve und die aus diesem Parameter berechneten Kurven der konventionellen Gleichungen.

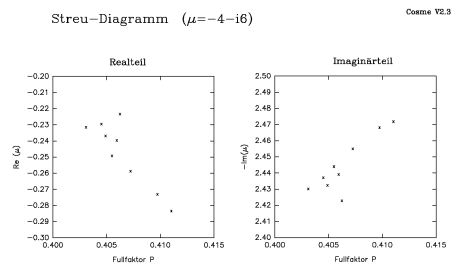


Abbildung 5.15: Streuung der effektiven Materialparameter bei verschiedenen Verteilungen zu einem engen Füllfaktorbereich. Die Lage der Kurve ist aus der Tendenz der Punkte aber noch immer erkennbar.

Würde man den gleichen Versuch mit einer definierten Sequenz von Zufallszahlen wiederholen, so würden die simulierten Punkte exakt (im Rahmen der numerischen Genauigkeit) auf *einer* Kurve liegen. Man kann die statistischen Schwankungen also gezielt einsetzen, um zufällige geometrische Ungleichgewichte über viele Verteilungen zu mitteln und so eine verbesserte, mittlere Füllfaktorkurve zu erhalten. Dies wirkt sich durch die Schwankungen um den Mittelwert zwar negativ auf die Glattheit der Kurven aus, führt dafür aber zu einem besseren, weil geometrisch unabhängigerem Resultat. Aus diesem Grund wurden alle in dieser Arbeit gezeigten Füllfaktorkurven mit jeweils neuen, statistischen Verteilungen aufgenommen. Die einzigen Ausnahmen bilden die Simulationen zur Untersuchung der Faktorisierung, wo diese Unabhängigkeit zugunsten einer besseren Reproduzierbarkeit der Füllfaktoren aufgegeben wurde.

5.5.1 Physikalische Interpretation

Perkolationstheorie

Eine entscheidende Rolle für die Interpretation der Füllfaktorkurven spielt die Perkolationstheorie⁴. Diese Theorie wurde bisher in der Elektrodynamik vor allem zur Beschreibung von Leitfähigkeitsphänomenen mit Erfolg angewendet.

Die Perkolationstheorie beschäftigt sich mit regelmäßigen Strukturen, deren Plätze mit einer vorgegebenen Besetzungswahrscheinlichkeit p gefüllt sind. Dabei muß man grundsätzlich zwischen einer **Site-Perkolation** und einer **Bond-Perkolation** unterscheiden. Erstere befaßt sich mit den Plätzen selbst, während bei der letzteren die Verbindungen zwischen zwei möglichen Plätzen untersucht werden. Da die Gitterplätze zufällig besetzt werden, kommt es immer vor, daß eine Anzahl von belegten Plätzen einen zusammenhängenden Bereich bildet. Eine solche Ansammlung wird als **Cluster** bezeichnet. Wie man sich leicht klar macht, wächst die Anzahl und die Größe von Clustern mit steigender Besetzungswahrscheinlichkeit. Dabei ist natürlich die Frage bislang noch nicht geklärt, *wie* die Cluster wachsen. Dazu wurden eine Unzahl von Simulationen durchgeführt ([25]), um das Clusterwachstum genauer zu untersuchen. Es zeigte sich, daß zu jeder geometrischen Struktur (sc-, bcc-, fcc-Gitter, ...) immer eine bestimmte, **kritische Besetzungswahrscheinlichkeit** p_C existiert. Bei Erreichen dieser Schwelle hat mindestens *ein* Cluster die Ausdehnung „unendlich“, ist also unbeschränkt groß. Da unendlich große Strukturen in der Realität nicht vorkommen, werden Cluster, welche sich über die gesamte Struktur erstrecken, normalerweise bei etwas kleineren Besetzungswahrscheinlichkeiten erreicht, als der theoretische Wert angibt. Die Differenz zu p_C ist für nicht zu kleine Gitter nicht sehr groß und Gegenstand der **Finite-Size-Theory**. In der Nähe dieser Schwellenwahrscheinlichkeit verhält sich die Clustergröße L (oft auch mit Clustermasse bezeichnet) wie

$$L \propto \frac{1}{\|p - p_C\|^t}, \quad (5.2)$$

wobei der Parameter t der **kritischer Exponent** ist.

⁴Eine gute Einführung hierzu findet sich in [25], eine erweiterte Anwendung auf Leitfähigkeitserscheinungen in [23].

Effektive Medien als perkolierende Systeme

Das für diese Untersuchung relevante System ist das *einfach-kubische Gitter*, welches durch die Diskretisierung nachgebildet wird. In diesem Gitter befinden sich die Elementarzellen, deren Inhalte durch die jeweiligen Materialparameter gegeben sind. Da die Füllung der Elementarzellen durch einen vorgegebenen Füllfaktor f bestimmt werden, entspricht dieses Modell einer Perkolation auf dem genannten Gitter bei einer bestimmten Besetzungswahrscheinlichkeit p .

Bei kleinen Füllfaktoren ist das Modell von Maxwell-Garnett oder Clausius-Mosotti anwendbar. Es gibt nur sehr wenige Partikel in einer sehr viel größeren Matrix. Die Teilchen als solche sind stark voneinander isoliert und spüren die Gegenwart der anderen kaum. Eine Berechnung der effektiven Materialparameter aufgrund von gemittelten lokalen Feldern ist also auf jeden Fall korrekt und spiegelt die physikalischen Tatsachen richtig wieder. Somit ist es auch nicht verwunderlich, daß die Berechnungen bei kleinen Füllfaktoren auch gut mit den experimentell bestimmten Daten übereinstimmen ([7], [16] und [24]). Aus Sicht der Perkolationstheorie gesehen bedeutet dies: **Die Mehrzahl der Cluster besteht aus einem einzigen Teilchen.**

Bevor man sich nun weiter über die Cluster Gedanken macht, muß man sich erst darüber klar werden, welche Art von Cluster hier zu wählen ist. In der Site-Perkolation bilden genau dann zwei Teilchen ein Cluster, wenn sie eine gemeinsame, vollständige Fläche haben. Bruchteile von Flächen, also Überschneidungen zählen demnach *nicht* als Grenzfläche. Dieses Modell ist hier aber nicht erlaubt, da für die physikalischen Mechanismen wie z. B. Leitfähigkeit, Entmagnetisierung oder Polarisierung ein *Kontakt* ausreichend ist. Diese Tatsache wird besser durch eine **Bond-Perkolation** beschrieben. Ein Vergleich mit der Perkolationstheorie muß daher auf der Basis der Bond-Perkolation stattfinden.

Steigert man den Füllfaktor, so beginnen die Cluster zu wachsen, also mehr und mehr Teilchen geraten in Kontakt miteinander. Dies geschieht so lange, bis die kritische Besetzungswahrscheinlichkeit erreicht ist, also in unserem Falle ein kritischer Füllfaktor f_C . Theoretische Berechnungen ergaben, daß diese kritische Wahrscheinlichkeit bei einem Wert von $f_C = p_C = 0.2492$ liegt⁵. Wie oben beschrieben, wird der kritische Füllfaktor dadurch charakterisiert, daß es mindestens ein Cluster C_∞ der Größe „Unendlich“ gibt. Da dies im Hohlleiterresonator nicht möglich ist, bedeutet dies, **daß mindestens ein Cluster im HLR von Rand zu Rand reicht**. Da aber keine Richtung ausgezeichnet ist, wird es im statistischen Mittel auch ein solches Cluster geben, das parallel zum Feld liegt. Wenn es aber eine direkte Verbindung zwischen den Rändern gibt, und der maximale Cluster C_∞ nicht mehr weiter wachsen kann, so entspricht dies auch einer maximalen Polarisierung bzw. Magnetisierung in dieser Richtung. Spätestens an dieser Stelle endet der klassische Ansatz der gemittelten Felder⁶. Der maximale Cluster ist nach wie vor umgeben von einem Gemisch aus Matrixmaterial und Clustern verschiedener Größe, besitzt aber selbst die Materialwerte der Teilchen (als zusammenhängendes Gebiet). Somit kann man in diesem Fall von einer **Parallelschaltung der Medien im**

⁵Aus [25]. Andere Autoren sprechen von leicht abweichenden Werten, so z. B. 0.247 in [23].

⁶In Wahrheit endet diese Theorie schon früher, aber aus anderen Gründen. Dies wird weiter unten noch genauer erläutert.

Hohlleiterresonator⁷ sprechen.

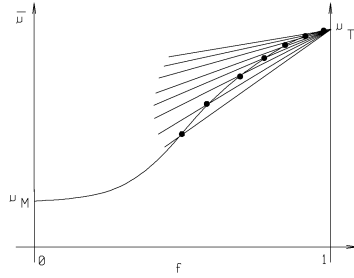


Abbildung 5.16: Effektives Medium jenseits der Perkolationsschwelle: Eine infinitesimale Abfolge von Parallelschaltungen aus dem maximalen Cluster C_∞ und einem umgebenden Gemisch aus Matrixmaterial und Clustern verschiedener Größe.

Eine weitere Steigerung des Füllfaktors kann nun nicht mehr zu einer Vergrößerung des Clusters C_∞ (in geometrischer Hinsicht) führen. Allerdings wächst die *Clustermasse* weiter, und die Größenverteilung des umgebenden Mediums verschiebt sich zu größeren Clustern hin. Dies wiederum bedeutet, daß man in der Vorstellung der Parallelschaltung einerseits einen höheren *effektiven* Füllfaktor $f^* = \frac{\text{Volumenanteil des maximalen Clusters}}{\text{Gesamtvolumen}}$ erreicht, andererseits verändert sich ja auch die Zusammensetzung des umgebenden Gemisches, welches als modifizierte, effektive Matrix mit Materialwerten $\bar{\mu}_M$ anzusehen ist. Diese beiden Punkte zusammen lassen sich so deuten, daß auf der imaginären Parallelschaltungsgeraden das *linke Ende*, also $\bar{\mu}_M$ „*angehoben*“ wird und gleichzeitig der effektive Füllfaktor vergrößert wird. Beide Bewegungen zusammengenommen führen zu einer Kurve bei der Berechnung von $\bar{\mu}$, die, insgesamt gesehen, rechtsgekrümmt ist.

Da sich dieser Vorgang für infinitesimal kleine Füllfaktor erhöhungen abspielt, und für jedes δf eine neue Parallelschaltungsgerade erzeugt wird, **stellt der obere Teil der berechneten Füllfaktorkurve die Einhüllende einer Geradenschar dar, die aus infinitesimalen Parallelschaltungen eines massiven Clusters mit Materialparameter μ_T und einem ständig modifizierten effektiven Matrixmaterial mit $\mu_M < \bar{\mu}_M \leq \mu_T$ resultieren.**

Eine (natürlich etwas übersteigerte) Darstellung dieses Modells ist in Abbildung (5.16) gezeigt. An ihr läßt sich jedoch leicht nachvollziehen, wie die Form der Kurven (5.9) — (5.13) zustande kommt. Anhand der simulierten Daten kann man den Wechsel des

⁷Ein Vergleich mit dem Modell der Parallelschaltung im Kapitel (3) zeigt, daß dieser μ -Cluster als Ring oder Scheibe interpretierbar ist.

Krümmungsverhaltens der Kurve an der Perkolationschwelle, vor allem bei den Imaginärteilen, relativ deutlich erkennen. Der Übergang ist allerdings etwas verschmiert, so daß man die echte Schwelle nicht sehr genau lokalisieren kann. Da der Hohlleiterresonator in seiner Größe selbstverständlich begrenzt ist, ist nach der Finite-Size-Theorie der Übergang immer unterhalb der theoretischen Grenze zu erwarten. Die Differenz zum theoretischen Wert muß dabei eine Funktion der Resonatorgröße (in Diskretisierungsschritten) sein. Entsprechende Untersuchungen wurden ebenfalls (in einem anderen Zusammenhang) in [17] durchgeführt und haben gezeigt, daß ab einer Resonatorgröße von etwa $30 \times 15 \times 30$ keine nennenswerte Verfälschung des Überganges zu finden ist.

5.5.2 Auswahl einer geeigneten Fit-Funktion

Da, wie im letzten Abschnitt gezeigt, die klassischen Effektiv-Medien-Formeln zur Beschreibung der simulierten Daten im hier gewählten System nicht ausreichen, muß nach einer Gleichung gesucht werden, die sowohl den physikalischen Überlegungen des letzten Abschnittes als auch den empirisch gewonnenen Daten gerecht wird. Natürlich stellt sich die Frage nach einer möglichst einfachen Fit-Funktion. Dabei wurden insbesondere folgende Punkte bei der Wahl dieser Funktion berücksichtigt, wobei im folgenden von einem unendlich ausgedehnten System ausgegangen wird:

1. Es konnte im letzten Abschnitt eine Interpretation geboten werden, in der der bei $f \geq 0.6$ auftretende Wendepunkt in der Füllfaktorkurve ein echter Effekt ist. Ein Fit sollte diesen Wendepunkt reproduzieren können, also das Verhalten als *Clustergrößenmodifizierte Parallelschaltung* nachbilden. Wegen der durchgehenden Pfade ist dies als Parallelschaltung aufzufassen. Solche Parallelschaltungskomponenten können von klassischen Formeln nicht direkt nachgebildet werden, weil sie durch Clusterwachstum erzeugt werden.
2. Die in den theoretischen Abschnitten ausführlich diskutierte *Symmetrie* der Gleichungen bezüglich der Vertauschungen

$$\begin{aligned} f &\rightarrow (1 - f) \\ \mu_T &\rightarrow \mu_M \end{aligned}$$

ist auch im vorliegenden Fall zu fordern. Bei einer Betrachtung des gesamten Füllfaktorbereiches $f = 0 \rightarrow f = 1$ wird eine Vorstellung der dünn verteilten Partikel, auf denen Theorien wie die von Clausius-Mosotti oder Maxwell-Garnett beruhen, der tatsächlichen Mengenverteilung nicht mehr gerecht. Ein Modell wie das von Bruggemann ist auf jeden Fall vorzuziehen. Bei einem Füllfaktor von $f = 0.5$ kann man nicht mehr von Matrix oder Teilchen reden; diese Namen dienen nur noch der Konvention. Auch vom Perkolationsstandpunkt kann man nicht unterscheiden, ob man ein Cluster des Materials M bei $p = 0.3$ betrachtet oder ein Cluster des Materials T bei $p^* = 0.7$ ($p = 1 - p^*$).

3. Von allen hergeleiteten Theorien zeigt eine LOOYENGA-Funktion noch am ehesten eine Annäherung an den errechneten Kurvenverlauf. Trotzdem ist die Abweichung zu groß, als daß noch von einer guten Anpassung an die Daten geredet werden

könnte; vor allem das analytische Aussehen ist grundverschieden vom simulierten Verlauf (Fehlen des „Knicks“ bei f_C , kein Wendepunkt). Dies liegt vor allem daran, daß die Voraussetzungen, die Looyenga bei der Herleitung machte (und die, wie gezeigt, ja auch für die Permeabilitätskonstante gelten), im vorliegenden Fall (Hohlleiterresonator) nicht mehr erfüllt sind. Insbesondere ging Looyenga grundsätzlich davon aus, daß zu jeder Zeit der *quasistatische Grenzfall* gegeben sei. Dies bedeutet, zu jeder Zeit ist die Wellenlänge sehr viel größer als die Teilchendimensionen. Als Folge dessen konnten die Geometrien der Teilchen weitgehend vernachlässigt werden, die Herleitung basiert auf der analytischen Lösung einer Differentialgleichung, in denen nur die Materialparameter und der Füllfaktor als Größen auftauchen. Diese Annahme ist aber in manchen Fällen zu streng; wie Lamb, Ashcroft und Wood in [16] zeigen konnten, reicht es oft aus, den Grenzfall großer Wellenlängen zu betrachten (orig. long wavelength limit). Eine Modifikation der Looyenga-Formel wurde in [15] vorgestellt, um eine Erweiterung auf ausgedehnte, speziell ellipsoide Partikel zu ermöglichen. Dadurch gelangt man zu der Gleichung (3.23), bei der der Depolarisierungsfaktor in den Exponenten eingeht.

Im vorliegenden Fall eines räumlich begrenzten Hohlleiterresonators muß man jedoch berücksichtigen, daß die Teilchengröße nur noch bei allerkleinsten Füllfaktoren weit unterhalb von f_C eine Rolle spielen. Selbst ohne attraktive Wechselwirkung kommt es zur Bildung von Gruppen, so daß bei einer Berechnung der effektiven Materialparameter nicht mehr die Teilchengrößen, sondern die mittleren Clustergrößen als relevante Größen zu verwenden sind! Dies ist im quasistatischen Grenzfall nicht möglich, so daß die Beschreibung durch eine Looyenga-Kurve in jedem Fall unzureichend bleiben muß.

Auch eine Verwendung der modifizierten Looyenga-Gleichung (3.30) ist nicht möglich. Da mit steigendem Füllfaktor die mittleren Clustergrößen ebenfalls ansteigen, ist es nicht möglich, den Exponenten der Looyenga-Gleichung durch eine Konstante zu korrigieren. Zusätzlich sind die Cluster immer unregelmäßig geformt, so daß die Herleitung einer entsprechenden Korrektur auf geometrischem Wege nicht erreicht werden kann. Damit bleibt nur noch die Berechnung einer Korrektur auf statistische Weise, wobei die Aussagen über mittlere Clustergröße bzw. mittlere Clustermasse herangezogen werden müssen. Diese Größen hängen bei einem gegebenen Gitter, unter Voraussetzung einer statistischen Gleichverteilung der Teilchen, einzig und allein von der Besetzungswahrscheinlichkeit ab, also vom Füllfaktor. Oberhalb von f_C müssen Parallelschaltungskomponenten erwartet werden.

Die geometrische Korrektur der Looyengaformel aufgrund von Clustergrößenverteilungen muß eine Funktion des Füllfaktors sein!

Eine auf gemittelten Feldern aufgebaute Gleichung kann nach den genannten Gründen keine Basis für eine Anpassungskurve sein. Eine einfache Rechnung zeigt bereits, daß es z. B. in dem in [16] gewählten Modell (einfach-kubisches Gitter mit eingeschlossener Kugel) immer einen maximalen Füllfaktor geben muß, bis zu der die Theorie höchstens gilt (hier: $f = \frac{\pi}{6}$). Es bleiben nur noch Gleichungen, welche auf dem gesamten Füllfaktorbereich gültig sind, insbesondere Gleichungen von der Art der symmetrischen Bruggemann-

formel oder eine Looyenga-ähnliche Funktion. Um die wesentlichen Punkte noch einmal zusammenzufassen:

Die Fit-Funktion muß

- symmetrisch in Bezug auf die o.g. Vertauschungen sein
- in Hinsicht auf die statistische Teilchen bzw. Clusterform korrigiert sein
- der wachsenden Clustergröße Rechnung tragen
- beide Korrekturen durch den Füllfaktor ausdrücken können
- für kleine Füllfaktoren in die entsprechenden quasistatischen Gleichungen übergehen.

Zur Beschreibung der simulierten Daten wurde deshalb eine Funktion gewählt, die einer „Clustergrößenmodifizierten Looyenga-Formel“ entspricht:

$$\boxed{\{\bar{\mu}(f)\}^{\alpha(f)} = f \cdot \mu_T^{\alpha(f)} + (1 - f) \cdot \mu_M^{\alpha(f)}}. \quad (5.3)$$

Der Exponent wurde dabei von einer Abstraktion des von Bánhegyi in [15] gefundenen Exponenten $(1 - 2A)$ abgeleitet, indem die Korrektur $2A$ des konstanten Exponenten mit dem Depolarisierungsfaktor ersetzt wurde durch eine Funktion des Füllfaktors. Man erhält somit:

$$\alpha(f) = a + b \cdot f. \quad (5.4)$$

Diese Funktion des Füllfaktors wurde dabei als Polynom erster Ordnung angesetzt und die beiden Terme 0. Ordnung zum Parameter a zusammengefaßt. Der zweite Term dieses Exponenten übernimmt die Korrektur durch die Geometrie der Cluster und durch die wachsenden Clustergrößen.

Ein ähnlicher Ansatz wurde auch in [17] zur Beschreibung entsprechender DK-Kurven angewendet, wenn auch mit einer anderen Begründung⁸. Zudem wurde dieser Fit nur für den Bereich $< f_C$ verwendet, wohingegen für den Bereich jenseits des kritischen Exponenten eine Gerade angesetzt wird. Dies bricht allerdings die zu fordernde Symmetrie und ist, im Vorgriff auf die Ergebnisse, auch unnötig.

5.5.3 Anpassungsverfahren

Nachdem eine anzupassende Funktion gefunden ist, stellt sich die Frage, wie die Parameter des Fit gefunden werden können. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde eine Vielzahl von Daten gewonnen, so daß die Funktion mit entsprechenden Algorithmen an diese angenähert werden können. Zunächst wurde dazu ein in dem kommerziellen Programm SIGMAPLOTTM eingebundener Programmteil benutzt, der entsprechende Fit-Algorithmen zur Verfügung stellt. Es zeigte sich jedoch, daß die Genauigkeit der Anpassung unzureichend war, weil in diesem Programm offenbar nicht die Summe der

⁸Der Fit wurde in Hinsicht auf ε'' mit Leitfähigkeitsargumentationen begründet. Entsprechende Untersuchungen mit Hilfe der Perkolationstheorien finden sich in [23].

Fehlerquadrate, sondern deren Ableitung nach den Fitparametern minimiert wurde (also, ab wann sich bei einer Variation der Parameter der Fehler nicht mehr ändert). Dabei ist jedoch die Gefahr groß, in ein lokales Minimum zu laufen und die optimalen Parameter nicht zu finden.

Aus diesem Grund wurde ein spezielles Programm zur Anpassung der Fit-Funktion an die simulierten Daten entwickelt. Es handelt sich dabei um das Programm ARBFIT (Arbitrary Fit Funktion), welches in der Programmiersprache FORTRAN erstellt wurde. Mit diesem Programm wird die Summe der Fehlerquadrate minimiert (χ^2 -Fit). Dazu wird im Parameterraum diese Summe χ als Funktion der Parameter bestimmt, also die Abbildung $\chi : \mathfrak{R}^n \rightarrow \mathfrak{R}$ betrachtet. Dann wird der Gradient dieser Funktion bestimmt und in Richtung der negativen Steigung fortgeschritten, bis das Minimum erreicht wird⁹. Zur Steigerung der Genauigkeit wird durch die letzten drei Punkte noch eine Parabel gelegt, deren Scheitelpunkt das Minimum des Fehlers mit hervorragender Genauigkeit angibt. Die Kernroutinen stammen zu großen Teilen aus *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences* von Philip R. Bevington ([22]) und wurden auf die im II. Phys. Inst. installierte HP Apollo 9000/720 portiert. Mit diesem Programm kann eine beliebige Funktion mit maximal 10 Parametern an eine Datenmenge angepaßt werden.

Mit dem beschriebenen Programm wurde eine Anpassung der Fit-Funktion an die vorhandenen Daten durchgeführt. Obwohl der Fit grundsätzlich auch an komplexen $\bar{\mu}$ -Daten angepaßt werden könnte, wurden zunächst rein reelle Materialparameter μ_T gewählt und eine Füllfaktorkurve zu $\mu_T = 18$ aufgenommen. Ein Ergebnis dieser Anpassung ist in Bild (5.17) zu sehen.

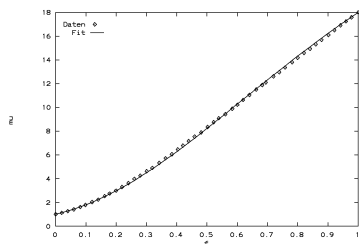


Abbildung 5.17: Mit Hilfe des Programms ARBFIT erzeugter Fit der Funktion (5.3) an die Daten zu $\mu_M = 1$, $\mu_T = 18$. Die ermittelten Parameter sind $a = 0.5618$, $b = 0.3719$.

Der Fit reproduziert alle an ihn gestellten Forderungen: Er zeigt sowohl die

⁹Auf die Gefahr lokaler Minima wird später noch genauer eingegangen.

Fitparameter des Exponenten $a + b \cdot f$			
Wichtungsart	a	b	Summe der relativen Fehler
Instrumenten	0.5366	0.4236	0.468
Keine	0.5618	0.3719	0.553
Statistische	0.5133	0.4827	0.472

Tabelle 5.1: Fitparameter bei verschiedener Gewichtung

gewünschte Änderung des Krümmungsverhaltens von kleinen Füllfaktoren hin zu größeren als auch einen Wendepunkt im oberen Drittel des Füllfaktorbereiches. Der relative Fehler dieses Fits ist als ausgesprochen klein zu bezeichnen und übersteigt an keiner Stelle 4% (wobei der statistische Fehler sich in der Größenordnung 1% bewegt). Er kann jedoch zur Untersuchung der Güte der Anpassung herangezogen werden, da sich damit eine Aussage über die zu wählende Datenverarbeitungsmethode machen läßt.

Grundsätzlich können die Parameter auf drei verschiedene Arten ermittelt werden, was die Bearbeitung der Eingangsdaten angeht:

Instrumentenwichtung: Hierbei werden die Datenpaare $(x, y) (\equiv (f, \bar{\mu}))$ mittels $\frac{1}{y}$ gewichtet, was einer instrumentellen Ungenauigkeit entspricht (kleine Werte sind ungenauer als große, falls man die gleiche Skala verwendet).

Ohne Wichtung: Die Werte werden alle gleich behandelt, die Fehler sind systematisch und für alle Wertepaare gleich.

Statistische Wichtung: Die Fehler sind rein zufällig und machen keine spezielle Aussage über die Güte eines bestimmten Punktes. Die Gewichtung erfolgt mit $\frac{1}{\sigma_y}$ (siehe auch hier [22]).

Da im vorliegenden Fall Instrumentenfehler (=numerische Ungenauigkeit) sicherlich in den statistischen Schwankungen untergehen, kommen nur die letzten beiden Möglichkeiten in Frage. Ein statistische Fehlergewichtung des Fits ist natürlich möglich, teilweise durch die gezielte Initialisierung des Zufallszahlengenerators sogar erwünscht.

Es zeigte sich jedoch, daß die Parameter, die durch verschiedene Wichtung bei ansonsten gleichen Materialwerten gefunden wurden, sich kaum voneinander unterschieden, so daß zur Minimierung des Rechenaufwandes auf eine Wichtung der Eingangsdaten verzichtet werden kann. Die relativen Abweichungen, die durch verschiedene Wichtungen erzeugt werden, sind in Bild (5.18) gegenübergestellt. Man sieht, daß die Instrumentenwichtung die Werte zu kleinen Füllfaktoren bevorzugt (also am besten anpaßt), wären die statistische Wichtung bei den größeren Füllfaktoren die besten Werte liefert. Die Kurve der ungewichteten Werte ist eine Art Mischung aus beiden, die hinreichend genaue Ergebnisse erzielt. In der Folge wird deshalb immer ein ungewichteter Fit durchgeführt.

Die ermittelten Parameter a , b für die anzupassende Funktion (5.3) bei den verschiedenen Wichtungen sind dabei wie in Tabelle 5.1 dargestellt ermittelt worden.

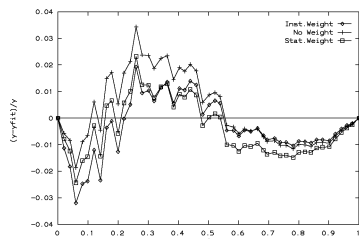


Abbildung 5.18: Relative Fehler des Fit's bei verschiedener Wichtung. Die Fehler sind bei allen Arten systematisch übereinstimmend; sie zeigen "Überschwinger" bei kleinen Füllfaktoren, d. h. der Fit liegt über den Daten, bei mittleren Füllfaktoren hängt der Fit ein wenig durch, bei großen Füllfaktoren schließlich liegt der Fit wieder über den Daten.

5.6 Einfluß der Materialparameter auf den Fit

Natürlich ist für eine korrekte Anpassung zu klären, inwieweit die Parameter a , b der Fitfunktion von der Wahl der Materialparameter μ_M , μ_T abhängen.

Dazu wurde die Variation des Exponenten mit μ_T genauer untersucht. Um auch hier den numerischen Aufwand klein zu halten, wurden wieder rein reelle Materialparameter in der Simulation benutzt und eine ganze Reihe von Füllfaktorkurven mit wachsenden Materialparametern μ_T aufgenommen. Die Werte wurden dabei zwischen $\mu_T = 10$ und $\mu_T = 100$ gewählt.

Zunächst wurde die Fehlerfunktion

$$\chi_{\mu_T}^2(a, b) = \sum_{f_i} \left\{ \frac{1}{\sigma_i^2} (\bar{\mu}(f_i) - \mu_i)^2 \right\}$$

im Parameterraum mit $a, b \in [0, 1]$ aufgetragen, um die Abhängigkeit von der Genauigkeit der Fitparameter genauer kennenzulernen. Die Indizes i sollen andeuten, daß es sich hier um die Datenpaare $(f, \bar{\mu})$ der Füllfaktorkurve handelt. Die Parameter σ_i werden durch die Gewichtung bestimmt und sind im vorliegenden Fall (keine Wichtung) auf 1 gesetzt.

Diese Auftragung wurde jeweils mit $\mu_T = \text{const.}$ durchgeführt. Wie man in Bild (5.19) erkennen kann, existiert **ein** deutliches, aber sehr flaches und breites Minimum der Fehler-summe. Dies macht es dem in ARBFIT benutzten Algorithmus überaus schwer, das exakte Minimum zu finden, schließt aber die Gefahr aus, ein lokales Minimum aufzusuchen (es gibt keines). Eine Ausschnittvergrößerung bei verschiedenen Teilchen-PK zeigt, daß das Minimum sich mit der PK verschiebt, und zwar in etwa längs einer Diagonalen, die von

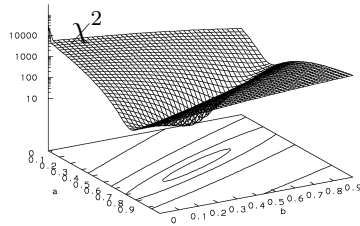


Abbildung 5.19: Summe der quadratischen Fehler χ^2 der Anpassung mit Funktion (5.3) als Funktion der Fitparameter a , b . Die χ^2 -Skala wurde logarithmisch gewählt, die Teilchenparameter betragen $\mu_M = 1$, $\mu_T = 50$

links unten nach rechts oben über die quadratische Grundfläche der Zeichnung verläuft (Bilder (5.20), (5.21) und (5.22)).

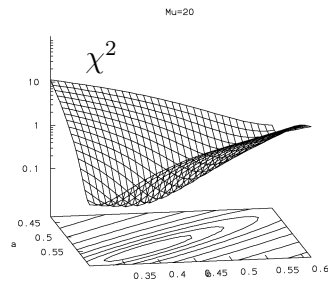


Abbildung 5.20: Ausschnittvergrößerung der Funktion $\chi(a, b)$ bei $\mu_T = 20$. Man erkennt, daß das Minimum im Vergleich zu $\mu_T = 50$ verschoben ist.

Auffällig ist, daß sich die Verschiebung des Minimums bei höheren PK-Werten nicht so stark auswirkt wie bei kleineren Teilchen-PK'en. Um diesen Effekt qualitativ und quanti-

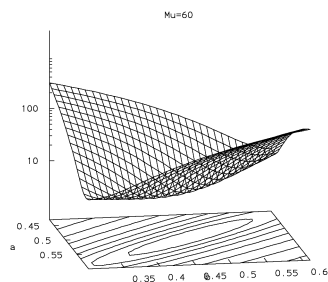


Abbildung 5.21: Ausschnittvergrößerung der Funktion $\chi(a, b)$ bei $\mu_T = 60$. Das Minimum ist fast identisch mit dem für $\mu_T = 50$.

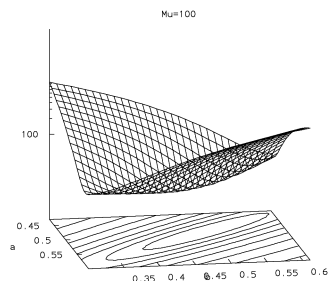


Abbildung 5.22: Ausschnittvergrößerung der Funktion $\chi(a, b)$ bei $\mu_T = 100$. Das Minimum ist zwar auch hier deutlich verschoben, aber nicht so drastisch wie in Bild(5.20). Hohe PK-Werte haben also offensichtlich nicht den gleich starken Effekt wie niedrige Werte.

tativ erfassen zu können, wurde eine ganze Serie von Füllfaktorkurven simuliert, wobei der reelle Materialparameter der Teilchen $\mu_T = 10, \dots, 100$ gewählt wurde. Das Matrixmaterial bestand, wie üblich, aus einem neutralen Medium. An jede Kurve wurde anschließend die Funktion (5.3) angepaßt und mit den ungewichteten Daten die Funktionsparameter

PK μ_T	a	b
10.0	0.6042574	0.3062887
18.0	0.5617614	0.3718568
20.0	0.5519793	0.3939356
30.0	0.5277532	0.4221427
40.0	0.5210893	0.4447510
50.0	0.5102616	0.4628542
60.0	0.5075700	0.4689490
70.0	0.4999582	0.4831633
80.0	0.4969280	0.4875858
90.0	0.4937379	0.4923290
100.0	0.4934753	0.4919000

Tabelle 5.2: Fitparameter in Abhängigkeit von der Teilchen-Permeabilität μ_T

a , b bestimmt. Die Ergebnisse sind in Tabelle (5.2) aufgeführt.

Eine Auftragung dieser Werte zeigt, daß das Verhalten ein systematischer Effekt sein muß, was die Glattheit der Kurve belegt. Ausgehend von zwei relativ weit auseinanderliegenden Werten der Fit-Parameter a und b wird die Differenz mit zunehmender Permeabilitätskonstante immer geringer, bis sie offenbar auf einen gemeinsamen Grenzwert zustreben (Bild (5.23)).

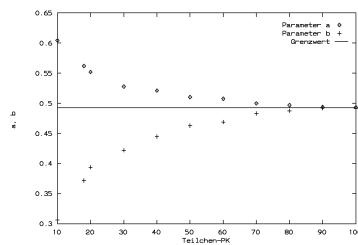


Abbildung 5.23: Verlauf der Fit-Parameter in Abhängigkeit von der Teilchen-PK. Mit wachsender Permeabilität nähern sich die Parameter einander an und streben einem gemeinsamen Grenzwert zu.

Eine Interpretation dieses Verhaltens ist ohne weitere Untersuchung an dieser Stelle nicht möglich. An einer geringer werdenden Eindringtiefe kann es bei rein reellen Materialparametern nicht liegen. Möglicherweise spielen der Entmagnetisierungsfaktor oder

andere geometrische Effekte eine Rolle. Es wurde zwar ausgesagt, daß der Exponent der modifizierten Looyenga–Gleichung durch eine Funktion des Füllfaktors korrigiert werden muß, jedoch ist der hier gewählt Ansatz durch ein Polynom erster Ordnung die einfachste aller Möglichkeiten. Es bereitet prinzipiell keine Schwierigkeiten, im Exponenten der Fit–Funktion auch Terme höherer Ordnung in f mitzunehmen. Diese Beiträge wären dann wahrscheinlich nicht mehr auf eine Clustergrößenverteilung zurückzuführen, sondern müßten durch die unregelmäßige Formgebung der Cluster bedingt sein.

Trägt man nun diese Fitfunktion gegen die simulierten Daten auf und setzt für die Parameter a und b die graphisch ermittelten Grenzwerte ein, so stellt man fest, daß die Variation der Parameter auf die Güte der Anpassung nur einen mäßigen Einfluß haben. So ist die Differenz des „optimalen“ Fits zur Anpassung mittels der Grenzwertdaten für große PK nur minimal, wie in Bild (5.24) zu sehen ist.

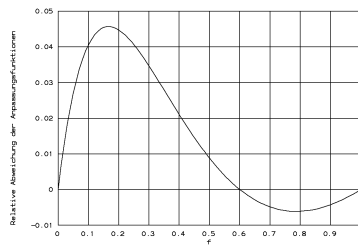


Abbildung 5.24: Relative Abweichung des „Grenzwertfits“ mit den graphisch ermittelten Grenzwerten für a und b zum „optimalen Fit“, d. h. der zu den Daten ermittelten Anpassung. Zur Verstärkung des Kontrastes wurde der Datensatz zu $\mu_T = 10$ gewählt, der ja die größte Abweichung in den Exponenten besitzt (Vergl. Bild (5.23) und Tabelle (5.2))

Somit läßt sich feststellen, daß der Materialparameter μ_T zwar einen systematischen Einfluß auf die durch einen Fit gemäß Funktion (5.3) ermittelten Parameter a und b haben, dieser jedoch praktisch nicht von Belang ist. Die Abweichung, die durch die Wahl der entgegengesetzten Extrema für a , b zu erzielen ist, beträgt am Gipfelwert lediglich 4.5%. Daher ist die Anpassung in weiten Bereichen einsetzbar ohne Berücksichtigung der Teilchen-PK.

Mit den graphisch bestimmten Grenz–Parametern ergibt sich letztlich die vollständig bestimmte Fit-Funktion

$$\boxed{\{\bar{\mu}(f)\}^{(0.493+0.493 \cdot f)} = f \cdot \mu_T^{(0.493+0.493 \cdot f)} + (1 - f) \cdot \mu_M^{(0.493+0.493 \cdot f)}} \quad (5.5)$$

Man könnte den Faktor 0.493 im Exponenten noch ausklammern. Da das Zusammenreffen der Grenzwerte aber eher zufällig ist, wurde darauf verzichtet, um die noch zu zeigende Analogie zu entsprechenden Gleichungen für die Dielektrizitätskonstante nicht zunichte zu machen.

Man beachte, daß die qualitativen Überlegungen zur Form der Anpassungsfunktion zwar für alle perkolierenden Systeme gilt, die hier präsentierten Zahlenwerte aber zunächst nur auf das benutzte sc-Gitter anwendbar sind. Eine andere Geometrie muß zu anderen Perkolationschwellen und deshalb auch zu anderen Parametern a , b führen.

5.7 Anwendung der Fit-Funktion auf Dielektrika

Wie S. Stölzle in ihrer Arbeit [17] bereits gezeigt hat, kann man eine ähnliche Fit-Funktion unterhalb von f_C in sehr guter Übereinstimmung mit den experimentellen Daten auf dielektrische Materialien anwenden. Ich möchte hier nun einen Schritt weiter gehen und die Beschränkung des Füllfaktors aufgeben. Die Argumentation, die zur Entwicklung der Fit-Funktion zur Anpassung magnetischer Simulationsdaten diente (Abschnitt (5.5)), möchte ich ohne Änderung auch für die dielektrischen Materialparameter übernehmen. Als Begründung möchte ich noch einmal die im theoretischen Teil besprochene Analogie der Wechselwirkungen von elektrischen und magnetischen Feldern mit Materie ins Feld führen. In beiden Fällen handelt es sich um Resonanzen und Relaxationen. Diese Analogie ist allerdings nur von qualitativer Art, so daß über die Quantität der Wechselwirkungen keine Angaben gemacht werden können. Es ist also zu erwarten, daß die Kurven bei betragsmäßig gleichen Materialparametern ε und μ wohl nicht völlig identisch sein werden. Eine einfache Plausibilitätsbetrachtung macht die Unterschiede deutlich: Betrachtet man die Imaginärteile ε , μ und hier speziell die Anteile, die durch ohmsche Verluste zustande kommen, so liegt die Vermutung nahe, daß die Verluste durch Wirbelströme mit dem *Umfang* eines Clusters wachsen, die linearen Stromflüsse bei einem elektrischen Wechselfeld jedoch mit dem Durchmesser in Feldrichtung. Selbst in dieser naiven Näherung des Problems läßt sich somit leicht ein Faktor π lokalisieren, der zu einer unterschiedlichen Skalierung führt. Dies würde sich in der anzunehmenden Fit-Funktion dadurch äußern, daß die Fit-Parameter des Exponenten sich von jenen in Gleichung (5.5) unterscheiden.

Um dies eingehender zu untersuchen, wurde die gleiche Verfahrensweise angewendet wie zur Bestimmung der Fit-Funktion der effektiven Permeabilität. Dazu wurden zunächst eine Reihe von reellen Füllfaktorkurven $\bar{\varepsilon}(f)$ aufgenommen. Hierbei trat jedoch die Schwierigkeit auf, daß durch Konvergenzprobleme die DK nicht wesentlich über $\varepsilon_T = 60$ gesteigert werden konnte. Es ist zu vermuten, daß die Stellung der Dielektrizitätsmatrix in der Eigenwertgleichung (4.16) dafür verantwortlich ist, vielleicht auch numerische Schwierigkeiten bei der Berechnung von $\mathbf{D}_\varepsilon^{-1}$.

Ungeachtet dieser Probleme wurde auch hier anschließend an jede Kurve mit dem Programm ARBFIT eine optimale Anpassung der Funktion

$$\bar{\varepsilon}(f) = \left(f \cdot \varepsilon_T^{\beta(f)} + (1 - f) \cdot \varepsilon_M^{\beta(f)} \right)^{\frac{1}{\beta(f)}}, \quad (5.6)$$

$$\beta(f) = c + d \cdot f \quad (5.7)$$

an die simulierten effektiven DK'en durchgeführt. Die so erhaltenen Parameter c , d sind in Diagramm (5.25) zu sehen.

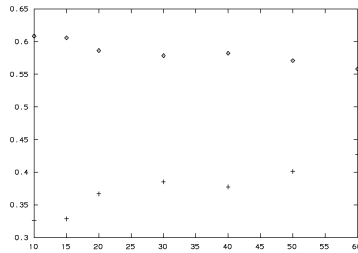


Abbildung 5.25: Durch Anpassung der Funktion (5.6) an Füllfaktorkurven zu verschiedenen ϵ_T . Die Kurven sind, verglichen mit (5.23), unregelmäßiger, streben aber auch hier auf Grenzwerte zu. Diese Grenzwerte sind hier aber nicht identisch.

Hier scheinen doch numerische Ungenauigkeiten zu Schwankungen im Verlauf der Kurve zu führen. Eine physikalische Ursache möchte ich wegen der Sprunghaftigkeit dieser Schwankungen ausschließen, jedenfalls in dem Rahmen der Realitätstreue¹⁰, der durch die Simulationen erreicht werden kann. Mit ein wenig gutem Willen kann man auch hier Grenzwerte erahnen, die sich aber im betrachteten Intervall $\epsilon \in [10, 60]$ einander nicht annähern.

Als vorläufige Werte der Parameter c , d kann man in etwa

$$\begin{aligned} c &= 0,56, \\ d &= 0,42 \end{aligned}$$

annehmen. Als Ergebnis kann man also die Fit-Funktion zur Beschreibung effektiver Dielektrizitätskonstanten festhalten:

$$\boxed{\{\bar{\epsilon}(f)\}^{(0,56+0,42 \cdot f)} = f \cdot \epsilon_T^{(0,56+0,42 \cdot f)} + (1 - f) \cdot \epsilon_M^{(0,56+0,42 \cdot f)}}. \quad (5.8)$$

Ein Vergleich der Ergebnisse der Simulation mit dem nunmehr bestimmten Fit (5.8) zeigt, daß die Anpassung zufriedenstellend ist und die Fehler sich in der gleichen Größenordnung bewegen wie die Fehler $\bar{\mu}(f)$. Da die erhaltenen Kurven sich qualitativ nicht von den entsprechenden $\bar{\mu}(f)$ -Kurven unterscheiden, brauchen sie hier nicht extra gezeigt zu werden.

¹⁰Siehe Abschnitt 5.3.

Trotzdem möchte ich die Bestimmung der Parameter c , d nicht als endgültig bezeichnen. Der Verlauf der Exponenten-Parameter ist viel zu rau, um hinreichend definierte Grenzwerte bestimmen zu können. Es ist sogar vorstellbar, daß beide Parameter doch einen gemeinsamen Grenzwert haben. Es ist in der Tat so, daß ein willkürliches Einsetzen der Parameter a , b aus dem Fit für $\bar{\mu}$ ein nicht sehr viel schlechteres Ergebnis zeigten. Somit wäre es durchaus möglich, daß auch hier der Exponent zu $\beta(f) = \alpha(f) = 0.493 \cdot (1+f)$ wird. Dann aber drängt sich der Verdacht auf, daß dieser Wert eine materialunabhängige Größe darstellt, die sich vielleicht sogar durch formale Überlegungen im Bereich der Perkolationsstheorie verifizieren lassen.

Um dies jedoch definitiv festzustellen, müssen erst die Konvergenzprobleme ausgeräumt werden, die höhere Materialwerte im Augenblick noch nicht zulassen. Ich möchte jedoch feststellen, daß diese Probleme sicherlich nicht in den von S. Stölzle entwickelten Algorithmen zur Lösung der Eigenwertgleichung liegen, sondern eher in den noch unzureichenden Routinen zur automatischen Shiftwertsuche. Einzelne Füllfaktoren lassen sich sehr wohl mit wesentlich höheren Materialparametern simulieren, sofern man die Shiftwerte manuell vorgibt. Da man hierzu aber immer ein wenig herumprobieren (oder aber aus dem als korrekt angenommenen Fit zurückrechnen) muß, ist diese Methode zu langwierig, um die geforderten Füllfaktorkurven mit einer ausreichenden Punktedichte der Kurve zu berechnen.

Der Grund des Scheiterns der Shiftwertsuche-Routine ist anscheinend auch nicht, daß die Shiftwerte zu schlecht sind, sondern vielmehr zu gut. Bei zunehmendem Betrag der Teilchen-DK ist es durchaus möglich, daß die Annäherung des Fit so gut wird, daß die Differenzbildung $\frac{1}{\eta-\eta^*}$ in Verbindung mit der Stellung von \mathbf{D}_ϵ in der inversen Iteration zu numerischen Problemen führt, welche die Konvergenz des Verfahrens verhindert. Da die Routinen bei der Berechnung von $\bar{\mu}$ funktionieren, kann die Differenzbildung nicht alleine verantwortlich sein. Ein Ausweg könnte in der künstlichen Verschlechterung der Shiftwerte liegen, jedoch hat man nun darauf zu achten, daß der Algorithmus bei kleinen Materialwerten noch korrekt funktioniert.

5.8 Übertragung auf verlustbehaftete Medien

Die Herleitungen und Annahmen, die zur Erlangung der Fit-Funktionen (5.5) und (5.8) gemacht wurden, verlangen an keiner Stelle, daß die Anpassung auf verlustfreie Medien mit einem reellen μ beschränkt ist. Es ist daher plausibel, daß die Anpassungsfunktion ohne Änderung auch auf komplexe Materialparameter anwendbar ist. Die Einschränkung auf reelle Daten wurde nur zur Reduktion des numerischen Aufwandes bei der Suche der Exponenten aufgestellt, wobei nun zu zeigen ist, daß man hierdurch keinen Fehler begangen hat, welche die Gültigkeit der Fit-Funktionen bei komplexen Materialparametern zunichte macht.

Es ist sogar so, daß es speziell für Leitfähigkeitsverluste sehr gute Ansätze im Rahmen der Perkolationsstheorie gibt, so zum Beispiel von Mitsunobu Nakamura ([29]). Er ging dabei von einer Mischformel der Form

$$\frac{\sigma^* - \sigma_1}{\sigma_1 + (1/p_C - 1)\sigma^*}p + \frac{\sigma^* - \sigma_2}{\sigma_2 + (1/p_C - 1)\sigma^*}(1-p) = 0 \quad (5.9)$$

für die Gleichstromleitfähigkeiten aus (vergl. dazu die Mischformel von BÖTTCHER (3.15)). Es sind σ_1 , σ_2 die Leitfähigkeiten der Komponenten ($\sigma_1 > \sigma_2$), p der Füllfaktor des Materials 1 und p_C der kritische Füllfaktor, der bei $\sigma_2 \equiv 0$ zur Leitfähigkeit des Gemisches führen würde (Perkolationsschwelle). Er verbesserte Gleichung (5.9), indem er annahm, daß die Materialparameter σ_1 , σ_2 selbst ebenfalls modifiziert werden müßten, um der durch das Gemisch veränderten Umgebung der leitfähigeren Komponente Rechnung zu tragen. Er setzte dazu für diese Komponente eine Parallelschaltungsgleichung an und führte den Gedanken konsequent zu Ende, indem er für die weniger leitfähige Komponente ebenfalls eine Modifikation durch eine Serienschaltungsgleichung einführte. Er erhielt daraus zwei neue Materialparameter σ_1^a , σ_2^a , die in Gleichung (5.9) einzusetzen sind. Ich möchte hier bemerken, daß diese Modifikation der Materialparameter ebenfalls eine Funktion des Füllfaktors ist. Der hier gezeigte Ansatz ist sicherlich vergleichbar mit dem Versuch, in einer Looyenga-ähnlichen Funktion die Auswirkung der mittleren Clustergröße durch eine Veränderung der Exponenten darzustellen. Eine Umformung dieses Exponenten macht das deutlich:

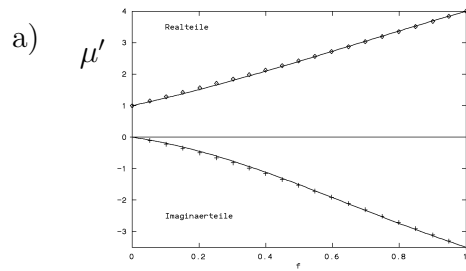
$$\varepsilon^{c+d \cdot f} = \varepsilon^c \varepsilon^{d \cdot f} = \varepsilon^c \left(\varepsilon^{\frac{d \cdot f}{c}} \right)^c \stackrel{\text{def.}}{=} \varepsilon_a^c$$

Er konnte mit der nunmehr verbesserten Mischformel zeigen, daß experimentelle Daten sehr gut mit dieser Gleichung übereinstimmen. Somit bleibt festzuhalten, daß zumindest für Leitfähigkeitsverluste, also auch für Wirbelströme, ein Perkolationsansatz möglich ist und gute Ergebnisse liefert.

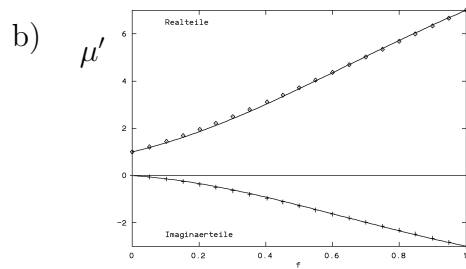
Das ist ein zusätzlicher Grund, die entwickelten Fit-Funktionen (5.5) und (5.8) auch auf verlustbehaftete Medien anzuwenden. Dazu wurden mit *COSME II* eine Reihe von Simulationen durchgeführt, wobei zunächst immer der Materialparameter μ_T als komplexe Zahl variiert wurde, die Dielektrizitätskonstante wurde auf $\varepsilon_T = 1$ gesetzt.

Die Ergebnisse für verschiedene Materialwerte sind in den Bildern (5.26) — (5.28) dargestellt.

Anhand der Abbildungen kann man feststellen, daß die Fit-Funktion (5.5) bei einem breiten Spektrum von Permeabilitätskonstanten eine gute Anpassung an die simulierten Daten zeigt. Auch das schon diskutierte Problem der μ -abhängigen Fit-Parameter im Exponenten der Anpassungsfunktion macht sich nicht schwerwiegend bemerkbar. Man muß allerdings feststellen, daß in Übereinstimmung mit der gezeigten Kurve (5.23) die Abweichung bei kleiner PK am größten ist, dann aber mit wachsendem μ_T zunehmend verschwindet.

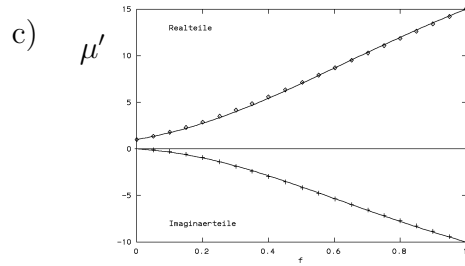


$-\mu''$

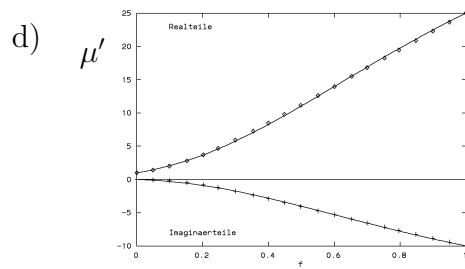


$-\mu''$

Abbildung 5.26: Anpassung mit der Fit-Funktion (5.5) an simulierte Werte verlustbehafteter Medien. Im oberen Teil jeder Zeichnung ist dabei μ' , im unteren $-\mu''$ aufgetragen. Die Materialparameter waren a) $\mu_T = 4 - i3.5$ und b) $\mu_T = 7 - i3$

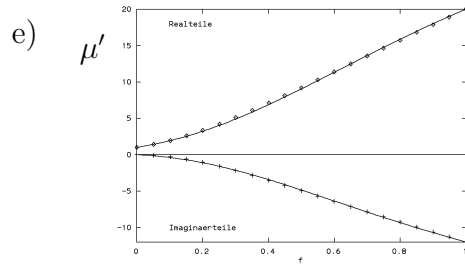


$$-\mu''$$

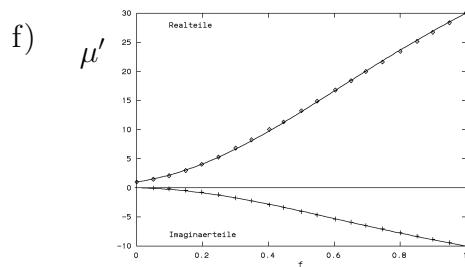


$$-\mu''$$

Abbildung 5.27: Weitere Kurven wurden für $\mu_T = 15 - i10$ (c) und $\mu_T = 25 - i10$ (d) aufgenommen. Auch hier stellt man eine gute Übereinstimmung der simulierten Daten mit der angepaßten Kurve fest.



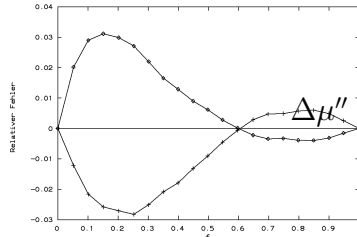
$$-\mu''$$



$$-\mu''$$

Abbildung 5.28: Die letzten beiden Kurven gehören zu den Materialparametern $\mu_T = 20 - i12$ (e) und $\mu_T = 30 - i10$ (f). Man beachte, daß die durchgezogenen Kurven alle mit einem Exponenten erzeugt wurden, der bei $\mu_T = 100$ ermittelt wurde.

Um diese Tendenz quantitativ erfassen zu können, wurden die Abweichungen bei den Kurven zur kleinsten und zur größten Teilchenpermeabilität noch einmal explizit als relative Fehler aufgetragen. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen (5.29) und (5.30) zu sehen.



$\Delta\mu'$

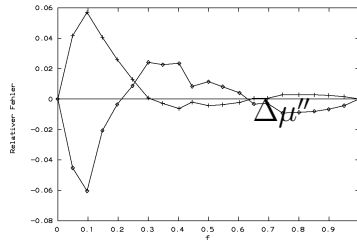
Abbildung 5.29: Relativer Fehler der Fit-Funktion zu den simulierten Werten mit $\mu = 4 - i3.5$. Erfreulicherweise bleibt der Fehler trotz der kleinen Materialparameter unter drei Prozent.

Auch wurde die Gültigkeit der Fitfunktion für effektive Permittivitäten überprüft. Hier zeigte sich die gleiche, gute Übereinstimmung der simulierten Daten mit dem Fit im Rahmen der oben angegebenen Fehlergrenzen.

Es läßt sich somit festhalten, daß die vorgestellte Anpassungsfunktion auch bei verlustbehafteten Medien anwendbar ist. Die relativen Fehler liegen maximal bei etwa 5% (bei sehr kleinen Füllfaktoren, siehe Bild (5.18)) und sind für das wichtige praktische Kriterium, daß die simulierten Werte auf dem **gesamten** Füllfaktorintervall gut genähert werden können, in Kauf zu nehmen. Zur Erinnerung sei noch einmal angemerkt, daß alle Anpassungen mit den graphisch ermittelten Grenzwerten der Fit-Parameter durchgeführt wurden. Die Abhängigkeit dieser Fitparameter von der Teilchen-PK sind also nicht so schwerwiegend, wie der erste Blick auf die Kurve (5.23) glauben machen könnte.

Allerdings muß man bei Verlusten die Einschränkung machen, daß der Fit hier irgendwann versagen muß, da bei zu hohen Leitfähigkeiten Durchflutungsprobleme in den Vordergrund treten und zu einem Abflachen der Verlustkurve führen müssen¹¹. Wo genau diese Grenze anzusiedeln ist, kann in dieser Simulation (noch) nicht untersucht werden, da dies aus den gleichen Gründen eine weitere Steigerung der Diskretisierung bedingen würde. Die Diskretisierungsstufe ist aber grundsätzlich durch die Rechenleistung begrenzt und momentan nicht mehr auszubauen.

¹¹Auf diesen Sachverhalt wurde in Abschnitt (5.3) bereits eingegangen.



$$\Delta\mu'$$

Abbildung 5.30: Relativer Fehler für $\mu = 30 - i10$. Der Fehler ist hier zwar etwas größer, die Anpassung ist aber nach wie vor als gut zu bezeichnen. Die Unregelmäßigkeit der Kurve läßt auf Einflüsse durch statistische Schwankungen schließen.

5.9 Statistische Schwankungen und numerische Fehler

Bei der Beschreibung des Programmes *COSME II* wurde schon auf die Möglichkeit eingegangen, den Zufallszahlengenerator bei jedem Durchlauf neu zu initialisieren oder immer eine definierte Sequenz zu erzeugen. Das Bemerkenswerte der festen Sequenz besteht darin, daß das Ensemble sozusagen festgehalten wird. Es kommen bei einer Steigerung des Füllfaktors immer nur Teilchen dazu; einmal bei kleineren Füllfaktoren besetzte Plätze werden für jeden höheren Füllfaktor wieder besetzt. Man könnte dies durch die Vorstellung beschreiben, als ob man die Verteilung nach und nach manuell erstellen würde. Somit lassen sich die Verhältnisse in einem bestimmten Ensemble bei verschiedenen Materialparametern genau beobachten, ohne daß man mit statistischen Abweichungen der Ergebnisse zu kämpfen braucht. Trotzdem kann man sich leicht klar machen, welche Auswirkungen eine statistische Schwankung auf die Eigenwerte und damit auf die effektiven Materialparameter haben muß. Es wird bei einem guten Zufallszahlengenerator, wie dem der NEC-SX3, bei einer endlichen Menge von Zufallszahlen immer Abweichungen von der Gleichverteilung geben. Somit ist auch das Teilchenmaterial nicht ideal gleichverteilt im Hohlleiterresonator. Je nach (zufälliger) Ausrichtung dieses Ungleichgewichtes werden dadurch Serien- oder Parallelschaltungskomponenten des Ensembles verstärkt, je nachdem, ob eine Kette von Teilchen orthogonal oder parallel zum Feld liegt. Dies äußert sich in einer Verschiebung des entsprechenden effektiven Parameters nach oben oder unten, da ja zum gleichen Füllfaktor bereits mehr oder weniger Parallelschaltungsanteile vorliegen (vergl. Bild (5.16)).

Eine Betrachtung der Abbildung (5.15) zeigt, daß die statistischen Schwankungen

durch eine zufällige Betonung von Serien- oder Parallelschaltung in der Größenordnung von etwa 1% liegen. Numerische Ungenauigkeiten (damit sind nicht die Konvergenzprobleme gemeint) liegen sicherlich unterhalb dieser Grenze und sind daher im Vergleich zu den geometrischen Schwankungen zufälliger, statistisch gleichverteilter Ensembles vernachlässigbar.

5.10 Vermessung magnetischer Proben

Durch die Herstellung von Mischproben verschiedener Füllfaktoren wurde versucht, die Simulation zu verifizieren. Dazu wurde der schon von S. Stölzle in [17] benutzte Hohlleiterresonator verwendet. Dieser hat die Geometrie $20\text{ mm} \times 10\text{ mm} \times 20\text{ mm}$ und eine theoretische Resonanzfrequenz $f_0 = 10.599\text{ GHz}$.

Präparation der Proben

Als magnetisches Material wurde eine industriell gefertigte Ferrit-Absorberkachel der Firma TOYO benutzt, die aus verschiedenen Metalloxiden besteht, in der Hauptsache Fe_2O_3 . Da an die Herstellung von Mischproben gedacht wurde, mußten in irgendeiner Form kleine Teilchen aus der massiven Kachel erzeugt werden, also entweder relativ große Würfelchen, wie es in [17] durchgeführt wurde, oder Zermahlung zu Pulver. Der Umstand, daß die Kachel sehr hart und außerordentlich spröde war, verhinderte die Herstellung von Würfeln brauchbarer Geometrie, so daß die Pulverform gewählt wurde. Also wurde die Kachel zunächst zerkleinert und anschließend in einem Keramikmörser pulverisiert, was zwar die Gefahr einer zusätzlichen Verunreinigung barg, ein Achatmörser aber wegen der Härte der Kachel nicht einzusetzen war. Hierdurch konnte, gerade wegen der spröden Konsistenz des Materials, ein sehr feines Pulver gewonnen werden.

Als Matrixmaterial kamen mehrere Möglichkeiten in Betracht. Zunächst könnte man ein Gießharz verwenden, jedoch ist hier nicht sicherzustellen, daß die Aushärtung nicht zu einer Blasenbildung führt. Somit müßte die Härtung unter Vakuumbedingungen durchgeführt werden, was bei uns nicht möglich war. Auch besteht bei viskosem Material die Gefahr, daß während der Aushärtedauer ein Absinken der Teilchen einsetzt und zu einer Gradientenbildung führt.

Ein einfacherer Weg schien durch einen von der DLR¹² Porz erhaltenen Kunststoff **Thaloplast** gegeben zu sein, der bei geringer Wärme (Größenordnung 100 °C) duktil wird und nach Erkalten sehr gut zu bearbeiten ist. Als Rohstoff lag er als Granulat vor, so daß auch er gemörsert wurde, bis ein hinreichend feines Pulver entstanden war.

Nun wurde zunächst eine Referenzprobe hergestellt. Eine Menge reinen Kunststoffes wurde dazu in einer Kaltpresse bei 200 °C und 4 bar Druck gepresst. Die niedrigen Druck- und Temperaturwerte mußten benutzt werden, da die genaue Zusammensetzung der Materialien nicht bekannt war und somit immer die Gefahr einer chemischen Veränderung bestand. Insbesondere durften keinesfalls Metall-Agglomerate gebildet werden, da zu hohe Leitwerte eine Vermessung in einem Resonator verhindern würden. Wegen der Reproduzierbarkeit der Verhältnisse mußten diese Randbedingungen auch bei der Kunststoffprobe eingehalten werden.

¹²Vormals DFVLR: Deutsche Forschungs- und Versuchsanstalt für Luft- und Raumfahrttechnik mit Sitz in Köln-Porz.

Diese Referenzprobe wurde einerseits auf die genauen Resonatorinnenmaße gebracht ($20 \times 10 \times 20 \text{ mm}$) und als Probe für $f = 0$ benutzt, andererseits konnte mit den bei der Bearbeitung abfallenden Resten die durch die Pressung erzielte Dichte der Matrix bestimmt werden ($\rho_K = 1.4046 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$). Aus der ebenfalls gemessenen Dichte des Kachelmaterials ($\rho_T = 5.135 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$) konnte nunmehr gezielt das Massenverhältnis der Materialien für bestimmte Füllfaktoren berechnet werden.

Die beiden Pulver wurden gemischt und waren nach längerem Schütteln gleichmäßig verteilt. Aus verschiedenen Mischungsverhältnissen der Pulver wurden dann Proben mit Füllfaktoren $f = 0, 0.1, 0.15, 0.2, 0.25, 0.3, 0.35, 0.4, 0.5$ und 0.6 hergestellt, bei höheren Füllfaktoren wurden die gepreßten Körper zu brüchig, weil zuwenig Kunststoff in der Probe enthalten war.

Vermessung der Proben

Die Proben wurden mit Hilfe des erwähnten Resonators und dem in [17] im Detail beschriebenen Meßverfahren dielektrisch vermessen. Dabei wurde ein **Network-Analyzer-System HP8510B** der Firma Hewlett Packard eingesetzt. Im bei der Messung relevanten Frequenzbereich von $5 - 11 \text{ GHz}$ konnten durch eine präzise Kalibrierung Rauschabstände besser als 80 dB erreicht werden. Die Transmissionsamplitude durch den leeren Resonators hindurch wurde mit -18 dB bei einer Resonanzfrequenz $f_0 = 10.595 \text{ GHz}$ gemessen und die Resonatorgüte¹³ Q betrug $Q = 2788$.

Bei der Vermessung der Matrix konnte unter der berechtigten Annahme, daß der Kunststoff unmagnetisch ist, eine DK von $\varepsilon_M = 1.68 - i0.08$ bestimmt werden. Es zeigte sich jedoch, daß bei Steigerung des Füllfaktors bis $f = 0.6$ nur eine Veränderung dieses Wertes in der Größenordnung von einigen Prozent zu verzeichnen war. Auch waren die Resonanzfrequenzen für die anzunehmenden hohen DK-Werte des Kachelmaterials unangemessen hoch. Eine weitere Vermessung des reinen Kunststoffes mit einer Reflexionsmethode¹⁴ zeigte, daß bereits der Wert für das Matrixmaterial falsch war; der echte DK-Wert von Thaloplast ist ca. $\varepsilon = 4.4 - i0.25$ bei 1 GHz .

Deutung der Ergebnisse

Vermutlich kommen hier mehrere Effekte zusammen: zum einen konnte durch eine wiederholte Messung der Referenzprobe aus reinem Kunststoff mit dem oben erwähnten Reflexionsverfahren festgestellt werden, daß die DK-Werte an verschiedenen Flächen der Probe systematisch unterschiedlich sind und bis zu 25% schwanken. Dies kann mit einem Dichtegradienten erklärt werden, der durch unterschiedliche thermische Einwirkung während des Heizens bei der Pressung entstanden sein können. Dies führt dazu, daß die Probe sozusagen in Schichten unterteilt ist, was die schlimmste Verfälschung eines effektiven Mediums im quasistatischen Grenzfall bedeutet: eine makroskopische Serienschaltung. Die Werte sind dadurch grob verändert worden. Bei allen mit Teilchenpulver versetzten Proben kommt erschwerend hinzu, daß es auch hier zu einem Absinken des schwereren Metallpulvers gekommen ist, was zu einer Anreicherung des Kunststoffes an der während der Pressung oben gelegenen Fläche führt.

Bei den Resonatormessungen führen solche Inhomogenitäten im Größenbereich der Wellenlängen senkrecht zur Richtung des elektrischen Feldes zu einer empfindlichen Störung

¹³Zur Definition der Güte siehe [26].

¹⁴HP 85070 A, dielectric probe.

der sinusförmigen makroskopischen Grundmoden–Feldverteilung und sind kaum noch analytisch zu erfassen. Insbesondere die Errechnung der effektiven Materialparameter aus dem Verhältnis der Resonanzfrequenzen des leeren und des mit den Mischproben gefüllten Resonators ist nicht mehr möglich, was ja das Ziel dieser Messungen war. Auf der anderen Seite bleibt positiv festzuhalten, daß die Experimente eindrucksvoll die Notwendigkeit der statistischen Verteilung im quasistatischen Grenzfalles zeigen, da im Experiment bereits Inhomogenitäten in der Größenordnung der 0.1–fachen Wellenlänge bei kleinen Füllfaktoren die effektive Mittelung zerstören.

Ein weiterer vermuteter Effekt wird durch die geringe Dichte des Kunststoffes begründet. Es scheint Luft in den Proben enthalten zu sein, so daß die effektiven Füllfaktoren, die ja aus dieser Dichte berechnet wurden, viel kleiner als angenommen sind. Es liegt in diesem Fall kein binäres Gemisch vor, sondern es sind drei Komponenten beteiligt, wobei Luft und Kunststoff einen Großteil des Volumens besetzen.

Zur Behebung der beschriebenen Fehler müßte man mit deutlich höheren Drücken bei der Herstellung der Preßlinge arbeiten. Gleichzeitig sollte ein anderer Kunststoff verwendet werden, der viskoser ist und eine bessere Gleichverteilung ermöglicht. Auch könnte versucht werden, die Proben unter einem Vakuum herzustellen, damit die Luft soweit als möglich aus den Materialien herausgehalten wird. Diese Arbeiten werden auf jeden Fall noch Gegenstand von Experimenten sein, die zur Stützung der Simulationen nötig sind.

Festzuhalten bleibt, daß zumindestens für die ε –*Kurven* experimentelle Daten vorliegen ([17]) und gut mit den simulierten Ergebnissen übereinstimmen. Somit können grobe Programmier– oder Rechenfehler ausgeschlossen werden, zumal im Abschnitt über die Faktorisierungseigenschaften ein Selbstkonsistenzbeweis des Programmes vorgelegt werden konnte.

Weiterhin wurden in bisher unveröffentlichten Rechnungen der Gruppe um Prof. Weiland, Uni Darmstadt, einzelne Werte der hier gezeigten Daten überprüft, wobei die dort ermittelten Ergebnisse bis zur dritten Nachkommastelle übereinstimmen.

Kapitel 6

Absorbersimulationen

Mit diesem Abschnitt wird im Prinzip ein neues Themengebiet angeschnitten. Es handelt sich dabei um die Problematik, elektromagnetische Wellen eines relativ breiten Frequenzspektrums zu absorbieren, was zum Beispiel bei der Vermessung elektromagnetisch empfindlicher Geräte im Rahmen der EMV— Problematik¹ erforderlich ist. Dazu müssen Meßplätze geschaffen werden, die möglichst gut die Verhältnisse in freiem Gelände nachbilden, also geringe Reflexionen und Streustrahlungen der umgebenden Elemente (Wände, Aufbauten etc.) aufweisen.

Zu diesem Zweck wurden Absorber entwickelt, mit denen die Wände ausgekleidet werden und einfallende Strahlung absorbiert werden soll. Weit verbreitet sind die sogenannten **Pyramidenabsorber**, also Körper, die die Form einer regelmäßigen Pyramide mit quadratischer Grundfläche haben. Da der Absorber natürlich einen Großteil der einfallenden Energie umsetzen soll, muß die integrale Reflexion minimal sein. Die entsprechende Größe ist der Reflexionskoeffizient, der durch das Verhältnis von reflektierter zu einfallender Feldstärke gegeben ist:

$$\rho = \frac{E_{\text{Rueck}}}{E_{\text{Ein}}} \quad (6.1)$$

Ein Maß für die Güte des Absorbers ist die **Reflexionsdämpfung**, die durch die Beziehung

$$R[\text{dB}] = -20 \log |\rho| \quad (6.2)$$

gegeben ist. Ziel bei der Entwicklung von Absorbern ist es also, diese Größe zu maximieren. Dabei wird ein Absorber als “hinreichend gut“ definiert, wenn er eine Reflexionsdämpfung von 20 dB aufweist. Problematisch ist jedoch nach wie vor die Tatsache, daß dieser Wert möglichst für ein relativ breites Frequenzspektrum erreicht werden soll. Daran scheitern die meisten Ansätze, denn lokal, also für ein enges Frequenzband, läßt sich der geforderte Wert leicht erbringen.

Eine echte dreidimensionale Simulation eines solchen Absorbers, wie sie zur Berechnung der effektiven Medien benutzt wurde, ist prinzipiell möglich. Dabei ist zu beachten, daß man ja in der Regel nicht einen einzigen Absorber betrachten möchte, sondern eine

¹Elektromagnetische Verträglichkeit: Untersuchungen der Reaktion technischer Vorrichtungen und Geräte auf die Einwirkung elektromagnetischer Wellen.

große Fläche, welche mit diesen Absorbern bestückt ist. Eine Simulation von vielen Absorbern gleichzeitig unterliegt aber Beschränkungen, da man mit einer begrenzten Diskretisierungsmöglichkeit die Absorber nicht hinreichend glatt darstellen könnte, oder man kann nur wenige (Größenordnung 1) Absorber gleichzeitig simulieren. Ein Ausweg würde die Anwendung von periodischen Randbedingungen in zwei Dimensionen bieten, so daß man aus der Berechnung eines Absorbers bei korrekter Behandlung der Randbedingungen zwischen zwei Zellen auf eine im Prinzip unendliche Fläche schließen kann.

Eine Entwicklung eines solchen Programmes ist möglich und auch in der Planung, jedoch ist ein vollständiger Neuanfang der Entwicklung hierfür nötig. Ein Umschreiben des vorhandenen Programmes *COSME II* ist nicht möglich, da an zu vielen Stellen implizit die Randbedingungen des metallischen Hohlleiterresonators eingehen. Auch die Erweiterung auf periodische Randbedingungen ist im Nachhinein nicht mehr einzuflechten. Der Aufwand hierzu würde meiner Meinung nach denjenigen einer kompletten Neuentwicklung bei weitem übertreffen.

Der hier vorgestellte Ansatz ist als Zwischenschritt auf dem Weg zu diesem 3D-Programm zu verstehen, um erste Informationen über die Geometrieabhängigkeit des Absorptionsvermögens zu erhalten. Die Idee dabei ist, durch Variation der Form eines Absorbers bessere Absorptionseigenschaften erreichen zu können, ohne daß die Werkstoffe selbst verändert werden müssen.

Als Einschränkung ist zu erwähnen, daß es sich in den Berechnungen stets um massive Pyramiden mit quadratischer Grundfläche handelt. Dies wurde allein aus Gründen der Bequemlichkeit gewählt; es ist jederzeit möglich, anders geformte oder ausgehöhlte Körper zu betrachten. Weiterhin werden die Materialparameter ε und μ im betrachteten Frequenzbereich als konstant angenommen. Das wird in einem späteren, noch zu entwickelndem Programm korrigiert, denn speziell Verluste müssen immer frequenzabhängig sein. Da quantitative Aussagen aber fürs erste nicht getroffen werden können, reicht für eine qualitative Betrachtung die einfache Form aus und zeigt im direkten Vergleich zu der klassischen, konventionellen Form die Möglichkeiten auf, die mit dieser Methode zu erzielen sind.

6.1 Theoretische Grundlagen

Der Kern der hier benutzten Methode ist, das eigentlich dreidimensionale Problem auf eines kleinerer Dimension zu projizieren. Am Ende steht hier eine eindimensionale Theorie, wobei für jede eliminierte Dimension eine Annahme gemacht werden muß. Die eine ist die Anwendbarkeit der **Leitungstheorie** auf das gestellte Problem, die andere besteht darin, daß bei hinreichend großen Wellenlängen der einfallenden Wellen eine große Anzahl von Absorbern in lateraler Richtung ein **effektives Medium** darstellen.

Wesentlicher Bestandteil der Leitungstheorie ist die Bestimmung von **Impedanzen**, also komplexen Widerstandswerten Z entlang einer Leitung. Diese Größe folgt aus den Maxwellgleichungen durch die Quotientenbildung der zu Spannung U und Strom I transversal integrierten Feldgrößen. Sowohl Strom als auch Spannung besitzen eine Ortsabhängigkeit entlang der Leitung, die zu einer räumlichen Phasenvariation führen. Durch den komplexen Widerstand Z werden die beiden Größen U und I an jedem Ort der

Leitung verknüpft:

$$U = Z \cdot I .$$

Bei einem im Verhältnis zur Wellenlänge kleinen Bauteil ist durch Kenntnis der Impedanz Z das elektromagnetische Verhalten, d. h. Amplituden- und Phasenänderung vollständig bestimmt. Die Leitung selbst hat jedoch i. a. einen ortsabhängigen Widerstand, der nur im Spezialfall einer angepaßten, also reflexionsfreien Leitung einen konstanten Wert, den **Wellenwiderstand**, annimmt.

Trotzdem lassen sich Aussagen über den Impedanzverlauf auf nicht angepaßten Leitungen treffen. Ist der Widerstand Z_{Last} an einer bestimmten Stelle $z = 0$ auf der Leitung bekannt und kennt man bestimmte Materialparameter der Leitung, so ist man in der Lage, auch den Widerstand Z_l an der Stelle $z = l$ zu errechnen. Dazu dient die sogenannte **Impedanztransformation** ([26]), die genau den bekannten Widerstand mit dem zu errechnenden verknüpft (Bild (6.1)):

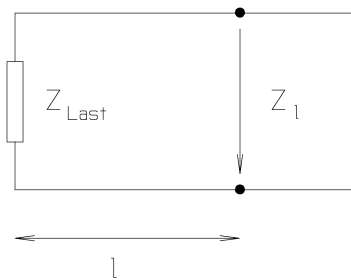


Abbildung 6.1: Impedanztransformation auf einer Leitung

$$\frac{Z_l}{Z_M} = \frac{Z_{Last} + iZ_M \tan(kl)}{Z_M + iZ_{Last} \tan(kl)} \quad (6.3)$$

Dabei bedeuten die Parameter Z_M den **Wellenwiderstand** der Leitung, der durch

$$Z_M = \sqrt{\frac{\mu_0 \mu}{\varepsilon_0 \varepsilon}}$$

gegeben ist und k den **Wellenvektor** der sich auf der Leitung ausbreitenden Welle mit

$$k = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon \mu} .$$

An dieser Stelle gehen also die Materialparameter ε , μ der Umgebung der Leitung ein. Auch in der Luft erfährt eine Welle einen Wellenwiderstand, der im SI-System den Wert $Z_M = Z_0 = 377\Omega$ annimmt.

6.2 Diskretisierung des Absorbers

Zur Berechnung der Absorber-Pyramiden wird auf die Impedanztransformation (6.3) zurückgegriffen. Dazu zerlegt man den Absorber gemäß Bild (6.2) in N Schichten parallel zur Grundfläche. Jede Schicht hat die (kleine) Dicke dx . Unter der Grundfläche der Pyramide befindet sich eine Metallplatte, welche die Impedanz $Z = 0$ hat (Kurzschluß). Vor der Pyramide befindet sich eine Luftschicht ($Z_M = Z_0$), aus der die Welle einstrahlt.

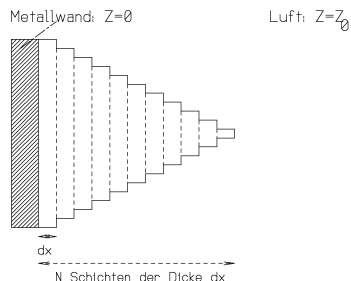


Abbildung 6.2: Diskretisierung einer Absorberpyramide in N Schichten der Dicke dx . Das Bild zeigt einen Schnitt durch die Mitte des Absorbers parallel zur Längsachse. Die Grundfläche der Pyramide ist quadratisch. Jede Schicht kann als eine homogene Leitung aufgefaßt werden. Zur Schicht gehört nicht nur der Absorber, sondern auch die umgebende Luft, so daß jede Schicht die gleiche Ausdehnung hat. Nur der Füllungsgrad ist in Abhängigkeit vom Ort variiert.

Jede Schicht kann nun als homogenes Leitungsstück aufgefaßt werden, auf der die Impedanztransformation anwendbar ist. Die Materialparameter des Absorbers definieren dabei den Wellenwiderstand Z_M und den Wellenvektor k innerhalb dieser Schicht. Die Schicht selbst umfaßt sowohl den Anteil des Absorbers als auch die umgebende Luft; jede Schicht ist also gleich breit und entspricht der Ausdehnung der (vollgefüllten) Grundfläche. Gleichsam ist in dieser Vorstellung klar, daß der Lastwiderstand einer Schicht durch den Endwiderstand der vorhergehenden Schicht gegeben ist, wobei man immer von der Grundfläche ausgeht. Sowohl der Wellenwiderstand als auch der Wellenvektor wird nun aber vom Absorbermaterial verändert. Diese Veränderung kann durch die Materialparameter beschrieben werden. Bei einer Anwendung der Impedanztransformation

auf die j -te Schicht ($j > 1$) des Absorbers gelten somit folgende Regeln:

$$\begin{aligned} Z_l &\rightarrow Z(j) \\ l &\rightarrow dx \\ Z_M &\rightarrow Z_M(j) = Z_0 \sqrt{\frac{\mu(j)}{\varepsilon(j)}} \\ k &\rightarrow k(j) = k_0 \sqrt{\mu(j)\varepsilon(j)} \\ Z_{Last} &\rightarrow Z(j-1) \end{aligned}$$

Die Impedanztransformation schreibt sich nun als

$$\frac{Z(j)}{Z_M(j)} = \frac{Z(j-1) + iZ_M(j) \tan(k(j) \cdot dx)}{Z_M(j) + iZ(j-1) \tan(k(j) \cdot dx)} \quad (6.4)$$

Die Impedanz der ersten Schicht erhält dabei eine Sonderrolle, da hier der Lastwiderstand an der Metallschicht verschwindet ($Z_{Last} = 0$):

$$Z(1) = Z_M(j) \cdot i \tan(k(j) \cdot dx)$$

Die Impedanz wird durch die Vorschrift (6.4) also sukzessive von der Metallfläche unterhalb des Absorbers nach vorne zur Spitze transformiert. Der sich hier ergebende Wert $Z(N)$ repräsentiert den gesamten Einfluß der Pyramide auf eine senkrecht einfallende Welle. Der Absorber ist dadurch ersetzt durch einen einzelnen Lastwiderstand an der Stelle $x = N \cdot dx$. Aus der Impedanz $Z(N)$ errechnet sich auch der Betrag des **Reflexionskoeffizienten** ρ durch die Gleichung

$$\rho = \left| \frac{Z_0 - Z(N)}{Z_0 + Z(N)} \right| \quad (6.5)$$

Ziel muß es also sein, in irgendeiner Weise den Reflexionskoeffizienten zu minimieren. Nach wie vor ist ρ aber eine Funktion des Wellenvektors, somit auch eine Funktion der Wellenlänge (oder Frequenz). Da man aber, wie eingangs gesagt, an einer breitbandigen Reflexionsdämpfung interessiert ist, kann man mit einer Minimierung für eine bestimmte Wellenlänge nicht zufrieden sein. Deshalb wird nicht der Reflexionskoeffizient direkt betrachtet, sondern man integriert diesen über ein vorgegebenes Intervall und minimiert die Funktion

$$F = \int_{\nu_1}^{\nu_2} \rho(\nu) \cdot d \log(\nu) \quad (6.6)$$

Dadurch wird sichergestellt, daß der Absorber für ein ganzes Frequenzband eine optimale Oberflächengeometrie erhält. Dies geschieht natürlich zuungunsten der Reflexionsdämpfung einzelner Frequenzpunkte.

Weiterhin sollte der Absorber möglichst optimal vor allem für kleine Frequenzen sein, da die langen Wellen im Augenblick in der Praxis die größten Schwierigkeiten bereiten. Deshalb wurde bei der Integration für die Wellenvektoren eine logarithmische Skala gewählt, die kleinere Frequenzen bewußt bevorzugt und damit den technischen Anforderungen an Absorber entspricht.

Es blieb bisher ungeklärt, in welcher Weise die Geometrie auf die Absorptionseigenschaften der Pyramide Einfluß nehmen kann. Dazu betrachte man noch einmal die von den Materialparametern abhängigen Größen $Z_M(j) = Z_M(j)(\varepsilon(j), \mu(j))$ und $k(j) = k(\varepsilon(j), \mu(j))$. Da die meisten Absorber mit rein dielektrischen Materialien arbeiten, sei im folgenden $\mu = 1$ gesetzt. Die Dielektrizitätskonstante ist nun aus den beiden Anteilen der Luft und des Absorbermaterials zu bestimmen; es handelt sich um ein **effektives Medium**. Danach muß es sich als Funktion des Füllfaktors berechnen lassen, der letztendlich von der Geometrie der Pyramide abhängt. Ist in einer vorgegebenen Schicht j die Querschnittsfläche des Absorbers $y(j)^2$ und die gesamte Fläche durch y_m^2 gegeben (s.o.), so ist der Füllfaktor

$$f(j) = \frac{y(j)^2}{y_m^2}.$$

Da die effektive DK über den Wellenwiderstand der Leitung und den Wellenvektor direkt in die Impedanztransformation eingeht, *wird bei einer vorgegebene Effektiv-Medien-Formel der Impedanzverlauf direkt durch die Absorbergeometrie bestimmt*. Eine optimierte Impedanzanpassung führt somit direkt auf eine definierte Geometrie.

Die Variation der Absorber unterliegt natürlich gewissen Einschränkungen. So soll die Höhe und die Breite der Pyramide und damit deren Verhältnis unangetastet bleiben. Lediglich die Wände der Absorber sollten sich verändern, dabei allerdings auch keine wilden Krümmungen ausbilden, da solche Geometrien fertigungstechnisch zu aufwendig und zu teuer wären, um in großem Maße hergestellt zu werden. Auch darf eine eventuelle Wölbung niemals breiter werden als die Grundfläche, denn der Absorber ist nach wie vor von (fiktiven) Nachbarpyramiden umgeben.

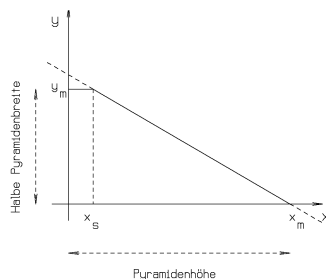


Abbildung 6.3: Längsschnitt durch einen klassischen Absorber mit Sockel. Gezeigt wird nur die obere Halbebene eines Schnittes durch die Mitte des Absorbers.

Um eine geeignete Funktion zu finden, geht man zunächst vom „klassischen“ Absorber aus, wie er in der Einleitung schon beschrieben wurde: Eine regelmäßige Pyramide mit

quadratischem Grundriß. Betrachtet man einen Schnitt längs der Achse der Pyramide (Bild (6.3), die untere Hälfte kann aus Symmetriegründen weggelassen werden), so läßt sich die Oberflächenfunktion beschreiben durch die Gerade

$$\begin{aligned} y_K(x) &= y_m \left(\frac{x_m - x}{x_m - x_s} \right) & x > x_s \\ y_K(x) &= y_m & x \leq x_s \end{aligned}$$

Der hiermit beschriebene Absorber besitzt einen **Sockel** der Dicke x_s , welcher verhindert, daß die Welle in den Zwischenräumen der Absorber direkt auf die Metallwand treffen kann. Vor dem Metall befindet sich somit eine kompakte Schicht aus dem Absorbermaterial. Weiterhin ist darauf zu achten, daß diese Funktion für Werte $x < x_s$ „abgeschnitten“ werden muß, da die Breite $y(x)$ den Maximalwert y_m nicht überschreiten darf.

Eine geeignete und möglichst einfache Methode besteht nun in der Modulation der Wandform mit einem Polynom dritten Grades:

$$y_A(x) = y_K(x) \cdot \left\{ 1 + \sum_{i=1}^3 a_i x^i \right\}. \quad (6.7)$$

Es gelten hier die gleichen Einschränkungen wie oben. Durch diese spezielle Wahl kann man durch die Ausgangswerte $a_i = 0$ den klassischen Absorber als Startfunktion ansetzen. Danach kann durch Variation dieser Parameter eine optimale Impedanzanpassung erzeugt werden.

6.2.1 Programmierung des Verfahrens

Zur Berechnung der optimierten Absorber wurde in FORTRAN das Programm ABSORB entwickelt. Es besteht aus einem iterativen Verfahren zur Parametersuche, wobei es sich mit äquidistanter Schrittweite auf einem dreidimensionalen Netz im Parameterraum bewegt:

Ausgehend bei $a_i = 0$ werden nacheinander alle Parameter mit Schrittweiten δa_i variiert und in jedem Schritt das Integral F (Gleichung (6.6)) berechnet, so daß formal das Integral F auch als Funktion der Parameter anzusehen ist: $F = F(a_1, \dots, a_3)$.

Beginnend mit a_1 schreitet man solange in Richtung fallender Werte von F fort, bis die Funktion wieder zu steigen beginnt. Durch die letzten drei Punkte wird dann eine Parabel gelegt, aus deren Scheitelpunkt sich der vorerst beste Wert des Parameters a_i berechnet. Danach verfährt man mit dem nächsten Parameter analog, bis man bei a_3 angelangt ist.

Diese Schritte werden nun solange aufs neue mit abnehmender Schrittweite δa_i durchgeführt, bis eine weitere Variation der Parameter a_i keine weitere Verkleinerung von F zur Folge hat; das Minimum der Funktion $F(a_i)$ ist gefunden. Durch die Funktion $y_a(x)$ ist aber gleichzeitig eine optimierte Form des Absorbers definiert, der breitbandig ein möglichst gutes Ergebnis liefert, ohne vom vorgegebenen Verhältnis von Länge zu Breite abzuweichen.

Das Programm ABSORB ist im Anhang vollständig abgedruckt und hinreichend im Quelltext kommentiert, so daß die wesentlichen Programmschritte dort nachvollzogen werden können.

6.3 Ergebnisse

Aufgrund der (gedachten) Anordnung vieler Absorber in einer regelmäßigen Struktur wurde als Effektiv–Medien–Formel zunächst eine Serienschaltung angenommen. Ein Einsatz der in Kapitel (5) ermittelten Funktionen bietet sich wegen der fehlenden statistischen Gleichverteilung nicht an. Ob es bessere Beschreibungsmöglichkeiten gibt, wird Gegenstand späterer Untersuchungen sein.

Man kann feststellen, daß die berechneten Absorberkörper sich im Vergleich zur konventionellen Pyramide stets nach außen wölben und den vorgegebenen Sockel immer vergrößern (Bild(6.4)).

Abbildung 6.4: Geometrisch optimierter Absorber: Im Vergleich zum Pyramidenabsorber ist eine Wölbung der Wandflächen nach außen zu verzeichnen sowie eine Verdickung des Sockels. Alle Einheiten der Skizze sind in Metern angegeben. Die Materialwerte sind $\varepsilon = 30 - i30$, $\mu = 1$, die vorgegebene Sockelhöhe war 10 cm.

Das Wölbungsverhalten ist durch die Anwendung der Impedanztransformation sofort erklärbar: Da in jeder Schicht die Impedanz nur durch die bis zur Wand noch zu durchlaufenden Schichten gegeben ist, darf eine einfallende Welle nicht zu abrupt auf die abschließende Metallwand treffen. Ein nach innen gewölbter Körper würde die Welle zwar langsam an den Absorber heranführen, aber direkt vor dem Kurzschluß müßte die Impedanz stark abfallen. Dies würde zu einer verstärkten Reflexion führen. Es ist wesentlich günstiger, den Impedanzabfall zum Teil auf die vorderen, zur Spitze hin gelegenen Schichten des Absorbers zu verlagern und somit eine sehr viel flachere Anpassung der Impedanz an den Kurzschluß zu gewinnen.

Durch die verbesserte Anpassung der Impedanz wird eine beachtliche Steigerung der Absorptionseigenschaften erreicht. Dabei ist festzuhalten, daß in den meisten Fällen die magische Grenze von 20 dB Reflexionsdämpfung schon etwa bei 100 MHz überschritten wird, während die meisten konventionellen Absorber vergleichbarer Länge in diesen Fre-

quenzbereichen noch nicht einsetzbar sind. Man muß quantitative Aussagen allerdings mit Vorsicht treffen, da es sich natürlich um idealisierte Rechnungen handelt, die keine Rücksicht auf Fertigungstoleranzen oder Materialerscheinungen nehmen muß. Weiterhin wurden auch Vereinfachungen in Bezug auf die Wahl der Effektiv–Medien–Formel und die Konstanz der Materialparameter getroffen, welche absolute Zahlenwerte verfälschen können. In den hier vorgestellten Rechnungen wird deshalb grundsätzlich für jeden Satz von Parametern (DK, Höhe, Länge etc.) ein konventioneller Absorber mitberechnet, so daß beide Kurven direkt verglichen werden können. Die hier gemachten Feststellungen sind auf diesen klassischen idealisierten Absorber zu normieren. Trotzdem bleibt die Tatsache bestehen, daß für fast alle Parametersätze die Reflexionsdämpfungskurve die 20 dB-Grenze bei deutlich kleineren Frequenzen überschreitet, bzw. ein Absorber bei vorgegebenem Frequenzbereich mit einer kleineren Bautiefe auskommt.

In Bild (6.5) ist der Vergleich mit einer Pyramide *ohne* Sockel dargestellt. Man sieht, daß die Kurve des optimierten Absorbers einige Peaks aufweist und überall mindestens 10 dB oberhalb der Kurve der Pyramide liegt.

Abbildung 6.5: Reflexionsdämpfungskurve von konventionellem und optimiertem Absorber. Die Absorptionseigenschaften der gewölbten Form mit vergrößertem Sockel sind deutlich besser und bereits bei kleineren Frequenzen verfügbar.

Die Materialparameter waren dabei $\frac{\text{Höhe}}{\text{Breite}} = \frac{2}{1}$, $\epsilon = 20 - i20$. Versieht man bei gleichen Parametern die konventionelle Pyramide mit einem Sockel (z. B. 20 cm), so stellt man fest, daß auch sie nun über eine bessere Absorption verfügt. Die Dämpfungseigenschaften der klassischen, massiven Absorber wird also zu einem großen Teil von dem Vorhandensein eines Sockels mitbestimmt (deshalb werden auch kommerziell erhältliche Absorber mit Sockel gefertigt). Nach wie vor liegt die neue Kurve aber deutlich unter der des optimierten Absorbers. Man muß aber festhalten, daß vor allem im Bereich hoher Frequenzen, also sehr kleiner Wellen, die Impedanztransformation die theoretische Grundlage verliert. Es treten dann zunehmend longitudinale Komponenten der Feldstärken auf, die

die Unterteilung in homogene Wellenleiterstücke zunichte machen, wobei irgendwann der Grenzfall der Strahlenoptik erreicht wird. Es ist aber ohne weitere Simulation mit neu zu entwickelnden Programmen unmöglich, genau die Grenze festzulegen, ab der dies geschieht. Es kann nur der Richtwert angegeben werden, daß spätestens ab ca. 1 GHz die vorgestellte Impedanztransformation fraglich ist. Dies ist zum Glück hier nicht zu tragisch, da es bei diesen Berechnungen vor allem um die Optimierung in Bezug auf große Wellenlängen ankam. Man sollte trotzdem in der Erinnerung behalten, daß die sehr hohen Dämpfungen ab 500 MHz wohl nicht realistisch sind.

Abbildung 6.6: Auswirkungen des Sockels auf Absorber: Der Sockel führt zur Anhebung der Reflexionsdämpfung vor allem bei höheren Frequenzen. Außerdem führt es bei der Pyramide ebenfalls zur Ausbildung eines Peaks.

Bemerkenswert ist, daß nun auch die Pyramide einen Peak auf der Dämpfungskurve ausbildet. Die zum Peak gehörende Materialwellenlänge $\lambda/\sqrt{\epsilon}$ entspricht der Höhe der Pyramide. Dies ist als starkes Indiz dafür zu werten, daß auch die Peaks auf der Dämpfungskurve des optimierten Absorbers von solchen geometrischen Effekten herrühren. Sie werden offenbar von Interferenzeffekten verursacht. Da solche Effekte natürlich immer stark von der Phase der Welle abhängen, ist zu erwarten, daß der Realteil der DK ϵ' diese Effekte beeinflußt. Tatsächlich werden beide Kurven, sowohl die der Pyramide als auch die des optimierten Absorbers, durch eine Verringerung der Realteile geglättet (Bilder (6.7) und (6.8)).

Dieses Verhalten der Absorptionseigenschaften bei einer Variation des Realteils läßt also darauf schließen, daß die Peaks und damit das Anheben der Reflexionsdämpfungskurven im Bereich kleinerer Frequenzen auf destruktive Interferenzerscheinungen zurückzuführen ist. Durch die besondere Form der optimierten Absorber ist es offensichtlich möglich, bei mehr als einer Wellenlänge diese Effekte zu erzeugen, so daß durch den beträchtlichen Überlapp der Peaks die Absorptionseigenschaften vor allem bei langen Wellen insgesamt deutlich besser werden.

Abbildung 6.7: Einfluß von ε' auf die Dämpfung. Eine Verkleinerung von ε' von 20 auf 10 verkleinert die Peaks im linken Bereich der Kurven beträchtlich. Der rechte Teil der Kurven bleibt im Wesentlichen unbeeinflusst.

Abbildung 6.8: Weitere Verkleinerung von ε' auf 2 führt zu einem fast völligen Verschwinden der Interferenzpeaks. Übrig bleiben nur die von ε'' verursachten Dämpfungen bei kleinen Wellenlängen, also im oberen Frequenzbereich.

Eine Umkehrung dieses Schlusses legt natürlich den Verdacht nahe, daß die Kurven im Bereich größerer Frequenzen wesentlich von den Dämpfungseigenschaften des Materials, also von ε'' geprägt werden. Um dies näher zu untersuchen, wurde schrittweise der Imaginärteil der DK verkleinert (Bilder (6.9) und (6.10)). Dabei kann man feststellen,

daß die Absolutwerte der Kurven deutlich sinken, die Absorptionseigenschaften also insgesamt schlechter werden. Weiterhin werden die Kurven zunehmend ausgezackter, da die Interferenzkomponente der Absorber nunmehr in den Vordergrund tritt. Wird eine fast reelle DK gewählt, so bleiben fast nur noch geometrische Absorptionseffekte übrig und insbesondere der konventionelle Absorber ist fast nicht mehr zu gebrauchen.

Abbildung 6.9: Auswirkung von ε'' auf die Dämpfungskurve. Man sieht, daß bei einer Verringerung von ε'' von 20 auf 10 die Dämpfung insgesamt schlechter wird und die Kurven zunehmend auszacken.

Zum Schluß wurde noch die Einwirkung der Absorberlänge auf die Reflexionsdämpfung untersucht. Dabei konnte festgestellt werden, daß bei einer Verkürzung des Absorbers die Kurve zu höheren Frequenzen hin verschoben wird. Nimmt man die Interferenzeigenschaften des Absorbers als gegeben hin, so ist dieses Verhalten zu erwarten, da es sich dann um eine einfache Umskalierung der Frequenzachse handelt, bzw. mehr Material zur Absorption zur Verfügung steht und eine kontinuierlichere Impedanzanpassung möglich ist.

Eine Halbierung der Länge führt dazu, daß die Frequenz entsprechend höher sein muß, damit Interferenzen auftreten können. Die Form der Kurve bleibt unverändert.

Fazit:

Man kann feststellen, daß das Absorptionsvermögen aus zwei Komponenten besteht: Zum einen der geometrische Anteil, der zu Interferenzdämpfungen führt und im Bereich längerer Wellen auftritt, zum anderen der Dämpfungsanteil, der durch die Dämpfungsverluste im Material erzeugt wird. Durch die geometrische Optimierung der Absorberkörper kann im Vergleich zu den konventionellen Pyramiden der Interferenzanteil verstärkt werden, was die Reflexionsdämpfung der Absorber vor allem bei kleineren Frequenzen, also größeren Wellenlängen, beträchtlich steigert. Um ein Gleichgewicht beider Effekte zu bewahren, ist es unerlässlich, daß weder ε' noch ε'' in der DK dominiert, also sollten sie in der gleichen Größenordnung gewählt werden. Die geometrische Optimierung kann also als Möglichkeit

Abbildung 6.10: Eine fast reelle DK $\varepsilon = 20 - i2$ führt zu einer Kurve, die fast nur noch von Interferenzeffekten geprägt ist. Die maximale Dämpfung hat um fast 3 Größenordnungen abgenommen und insbesondere der konventionelle Absorber überschreitet nur noch im Intervall von 1–2 GHz die 20 dB-Grenze (im Plot nicht zu sehen).

Abbildung 6.11: Verkleinerung der Länge des Absorbers

betrachtet werden, ohne Entwicklung neuer Materialien Absorber zu verbessern und sie vor allem bei größeren Wellen im Vergleich zur Höhe des Absorbers einzusetzen. Somit kann man entweder kleinere Frequenzen gut dämpfen, oder aber die Absorber bei höheren Frequenzen verkleinern, was die Herstellungskosten senkt und die Stabilität steigert.

Es muß allerdings davor gewarnt werden, die hier gezeigten Kurven quantitativ auszuwerten. Es gibt eine Reihe von Einschränkungen der Berechnung, die den Vergleich mit realen Absorbergeometrien erschwert. So ist die DK im verwendeten Frequenzbereich immer als konstant angesehen worden, und Feldverzerrungen² vor allem im Fußpunkt der Absorber können bei der leitungstheoretischen Impedanztransformation nicht berücksichtigt werden.

Auch ist die Wahl der Effektiv–Medien–Formel bei hohen Frequenzen schwierig, denn eine Serienschaltung kann eigentlich nur solange gewählt werden, wie die verwendeten Wellen groß zu den Abständen der Pyramidenspitzen bleiben.

Trotzdem werden durch die vorgestellten Berechnungen qualitative Tendenzen belegt, die durch echte Freifeldmessungen und eine dreidimensionale Simulation noch zu untermauern sind. Es kann als Anhaltspunkt für die weitere Erforschung von Absorbergeometrien dienen.

²Diese Feldverzerrungen tragen zu den Verlusten bei. Somit sind beide Dämpfungskurven, die des konventionellen Absorbers als auch des optimierten Absorbers in der Realität wahrscheinlich etwas besser. Für die Auswirkung der Feldverzerrungen siehe [28].

Kapitel 7

Zusammenfassung

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit konnten einige Ergebnisse erzielt werden, die den Umgang mit den sogenannten effektiven Materialparametern $\bar{\varepsilon}$ und $\bar{\mu}$ in der Praxis erleichtern und in einem begrenzten Problembereich zukünftige Simulationen überflüssig machen. Auch konnten einige Fortschritte in der physikalischen Interpretation der errechneten Daten gemacht werden, die einen tieferen Einblick in das Verhalten von Gemischen im Grenzfall großer Wellenlängen erlauben.

Eine notwendige Voraussetzung zur Berechnung effektiver magnetischer Eigenschaften von Medien war natürlich die Weiterentwicklung des Programmes COSME, das in der ursprünglichen Version nur dielektrische Materialparameter verarbeiten konnte. Doch sind hier neben der Einbeziehung der Matrix \mathbf{D}_μ , was einen erheblichen Programmieraufwand erforderte, weitere Routinen zu erwähnen, ohne die eine Berechnung großer Datenmengen nur schwer möglich gewesen wäre. An erster Stelle ist die neue Fähigkeit des Programmes zu nennen, selbstständig die zum Eigenwertshift der inversen Iteration benötigten Shiftwerte zu finden, die dicht bei den Eigenwerten liegen müssen. Damit war die Möglichkeit gegeben, ganze Füllfaktorbereiche mit vorgegebener Schrittweite zu durchfahren und somit Füllfaktorkurven $\bar{\varepsilon}\bar{\mu}(f)$ aufzunehmen.

Auch die Möglichkeit, gezielt statistische Schwankungen zur Elimination geometrischer Effekte zu benutzen, sollte hier genannt werden. Somit können die erhaltenen Kurven noch einmal geglättet werden. Andererseits ist es durch Verwendung definierter Sequenzen von Zufallszahlen möglich, vollständig reproduzierbare Ensembles zu erzeugen.

Nachdem eine ausreichende Anzahl von Simulationen durchgeführt worden war, konnten aus den zur Verfügung stehenden Füllfaktorkurven verschiedene Resultate abgeleitet werden:

Faktorisierungseigenschaften: In Übereinstimmung mit theoretischen Vorhersagen konnte gezeigt werden, daß im betrachteten Wertebereich ($k_i a < 1$) der Einzelmaterialparameter ε , μ eine Separation der Permeabilität $\bar{\mu}$ von der Permittivität $\bar{\varepsilon}$ im Hohlleiterresonator möglich ist. Somit konnten die magnetischen Eigenschaften der Materialien ohne Berücksichtigung der Dielektrizitätskonstante untersucht werden.

Analyse der Füllfaktorkurven $\bar{\mu}(f)$: Mit Hilfe von perkolationstheoretischen Überlegungen konnte eine Interpretation des Verhaltens der Gemische vorgestellt werden,

die die Auswahl einer eindeutigen Anpassungsfunktion ermöglichte. Wie gezeigt wurde, lassen sich mit dieser Funktion nach Bestimmung zweier Fitparameter die simulierten Daten sehr gut reproduziert. Auch eine Anpassung an die Kurven der effektiven Dielektrika gelang sehr gut, allerdings mit leicht veränderten Fitparametern. Es zeigte sich, daß die hier vorgestellte „Clustergrößenmodifizierte Looyengleichung“ die vorhandenen Daten sehr viel besser beschreibt als die bekannten klassischen Formeln. Dies gilt allerdings mit der Einschränkung, daß speziell kubische Gitter betrachtet wurden. Somit ändern sich zwar möglicherweise die Zahlenwerte der Fitparameter, die qualitative Form der Kurve muß davon aber unbeeinflusst bleiben. Solche Effektiv–Medien–Kurven könnten prinzipiell für jedes Gitter simuliert werden.

In der Praxis sind die erhaltenen Gleichungen für $\bar{\mu}(f)$ und $\bar{\varepsilon}(f)$ wegen ihrer einfachen Form leicht zu handhaben, so daß man im Falle von Gemischen aus statistisch verteilten Teilchen in bestimmten Gittern auf eine Computersimulation verzichten kann. Muß dagegen eine spezielle Teilchenform oder –verteilung angenommen werden, können die effektiven Materialwerte zu jedem beliebigen Füllfaktor mit dem Programm *COSME II* jederzeit berechnet werden. Man kann also festhalten, daß die Bestimmung effektiver Materialparameter oder von Gesamteigenschaften, falls das Material nicht mehr als effektives Medium betrachtet werden darf, prinzipiell immer möglich ist.

Weiterhin wurden Experimente zur Messung effektiver Materialparameter eines magnetischen Materials durchgeführt. Diese führten zwar nicht zu Ergebnissen, die zur Stützung der numerisch gefundenen Resultate benutzt werden konnten, bewiesen aber die Notwendigkeit der statistischen Gleichverteilung der Partikel in der Matrix als Voraussetzung für effektive Eigenschaften.

Auch in Bezug auf die Entwicklung von Absorbern wurden in der vorliegenden Arbeit fundamentale Fortschritte zur geometrischen Optimierung von Absorberstrukturen gemacht. Es konnte gezeigt werden, daß so das Absorptionsvermögen über die Interferenzeigenschaften im Vergleich zu pyramidenförmigen Körpern entscheidend verbessert werden kann. Die Formgebung der Absorber für eine optimale Reflektionsdämpfung konnte eindeutig charakterisiert werden. Somit können Absorber geringerer Ausmaße eingesetzt, bzw. gute Reflektionsdämpfungen bereits bei relativ kleinen Frequenzen erzielt werden.

Für die Zukunft sind noch einige Arbeiten geplant, welche die hier gezeigten Ergebnisse abrunden sollen. Dies sind im einzelnen folgende Punkte:

a) Effektive Medien:

- Zunächst müssen Experimente durchgeführt werden, die unmittelbar die simulierten Füllfaktorkurven verifizieren. Es muß überlegt werden, ob dazu gänzlich neue Proben erstellt werden müssen, oder ob die vorhandenen mit einem anderen Meßverfahren erneut benutzt werden können.
- Weitere Untersuchungen über den Einfluß der Teilchengemetrien auf den Verlauf der Effektiv–Medien–Formel sollen durchgeführt werden. Insbesondere

stabförmige Körper oder flache Scheiben sollen dabei betrachtet werden. Weiterhin müssen verschiedene Gittertypen betrachtet werden, um deren Auswirkung auf die Fitparameter zu bestimmen. Lassen sich hier systematische Tendenzen feststellen, so kann dies zur Strukturanalyse von Gemischen benutzt werden.

- Agglomerationseffekte, wie sie in vielen natürlichen Systemen von Bedeutung sind, lassen sich mit einer nicht-statistischen Teilchenverteilung studieren.
- Eine Verfeinerung der Diskretisierung würde die konkretere Diskussion von Durchflutungsphänomenen erlauben. Es muß geprüft werden, ob dies bei den vorhandenen Rechnerkapazitäten durchführbar ist.

b) Absorbersimulationen:

- Zur quantitativen Überprüfung der Absorbersimulationen ist der Bau einiger optimierter Modellabsorber bei der Firma Cerasiv bereits in der Planung, die unter Freifeldbedingungen vermessen werden sollen.
- Weitere Rechnungen zur Überprüfung der bisher vernachlässigten Einflüsse von Longitudinalkomponenten im Fußbereich des Absorbers.
- Programmierung eines echten dreidimensionalen Simulationsverfahren mit periodischen Randbedingungen. Dies ist zum Verständnis der Wechselwirkungen der einfallenden Welle mit dem Absorber notwendig und erlaubt einen Einblick in die Feldverteilung auf einer mikroskopischen Skala. Insbesondere muß die Winkelabhängigkeit des Reflektionskoeffizienten bei anderem als senkrechtem Einfall ebener Wellen untersucht werden. Solche Wellen gehören zu den wesentlichen Störeffekten in Meßhallen.
- Berücksichtigung einer expliziten Frequenzabhängigkeit der Materialparameter.

Die Durchführung dieser Aufgaben ist teilweise bereits in ein konkretes Stadium getreten. Die oben genannten Aufgaben werden Gegenstand längerfristiger Forschungen sein.

Literaturverzeichnis

- [1] Weiland, Thomas: On the numerical Solution of Maxwell's Equations and Applications in the Field of Accelerator Physics, Particle Accelerators (1984) Vol. 15, pp 245-292
- [2] Weiland, Thomas: On the Unique Numerical Solution of Maxwellian Eigenvalue Problems in Three Dimensions, Particle Accelerators (1985) Vol. 17, pp 227-242
- [3] Weiland, Thomas: Maxwell's Grid Equations, FREQUENZ 44 (1990) 1, pp 9–16
- [4] Weiland, Thomas: Eine Methode zur Lösung der Maxwellschen Gleichungen für sechskomponentige Felder auf diskreter Basis, Archiv für Elektro- und Übertragungstechnik (AEÜ, 1977), Vol. 31-3, pp 116-120
- [5] Weiland, Thomas: Ein Verfahren zur Berechnung von Wirbelströmen in massiven, dreidimensionalen, beliebig geformten Eisenkörpern, Archiv für Elektrotechnik (1979), H. 9
- [6] Weiland, Thomas: Zur Berechnung der Wirbelströme in beliebig geformten, lamelierten, dreidimensionalen Eisenkörpern, Archiv für Elektrotechnik 60 (1978), pp 345-351 und 61 (1979), pp 103-109
- [7] Van Beek, L.H.K.: Dielectric Behaviour of heterogeneous Systems, Progress in Dielectrics 7 (1967), pp 69ff.
- [8] Fröhlich, H.: Theory of Dielectrics, Oxford University Press, 1950
- [9] Sommerfeld, Arnold: Vorlesungen über Theoretische Physik, Band III: Elektrodynamik, Verlag Harri Deutsch, 1977
- [10] Kneller, Eckart: Ferromagnetismus, Springer-Verlag, 1962
- [11] Dobbs, E.R.: Electromagnetic Waves, Routledge & Keagan Paul, 1985
- [12] L.D. Landau, E.M. Lifshitz: Electrodynamics of Continuous Media, Pergamon Press, London, 1960
- [13] Garnett, J.C.M.: Colours in Metal Glasses and in Metallic Films, Philos. Trans. R. Soc. London 203, 385 (1904)

- [14] G.A. Niklasson, C.G. Grandqvist, O. Hunderi: Effective medium models for the optical properties of inhomogeneous materials, *Appl. Optics*, Vol 20, No. 1 (1981), p. 26 ff
- [15] Bánhegyi, G.: Numerical analysis of complex dielectric mixture formulae, *Colloid & Polymer Science*, 266, p. 11 ff, 1988
- [16] W. Lamb, D.M. Wood, N.W. Ashcroft: Long-wavelength electromagnetic propagation in heterogeneous media, *Phys. Rev. B*, 21, 2248 (1980)
- [17] S. Stölzle: Computersimulation effektiver Medien, Dissertation an der Universität zu Köln, 1992
- [18] S. Stölzle, A. Enders, G. Nimtz: Numerical simulation of random composite dielectrics, *J. Phys. I France* 2 (1992) 401–408
- [19] S. Stölzle, A. Enders, G. Nimtz: Numerical simulation of random composite dielectrics. II. Simulations including dissipation, *J. Phys. I France* 2 (1992) 1765–1777
- [20] H.A. van der Vorst, J.B.M. Melissen: A Petrov-Galerkin Type Method for Solving $Ax=b$, where A is Symmetric Complex, *IEEE Transactions on Magnetics*, Vol 26, No. 2, March 1990
- [21] G.T. Rado, R.W. Wright, W.H. Emerson: Ferromagnetism at Very High Frequencies III. Two Mechanisms of Dispersion in a Ferrite, *Phys. Rev.*, Vol. 80, No. 2 (1950)
- [22] Philip R. Bevington: *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*. McGraw–Hill Book Company, 1969
- [23] D.S. McLachlan, M. Blaszkievicz, R.E. Newnham: Electrical Resistivity of Composites, *J. Am. Ceram. Soc.*, 73 [8], pp 2187–2203 (1990)
- [24] S.O. Nelson, Tian-Su You: Use of Dielectric Mixture Equations for Estimating Permittivities of Solids from Data on Pulverized Samples, Paper S8.7, Symposium S, Physical Phenomena in Granular Materials, 1990 Spring Meeting, Materials Research Society.
- [25] D. Stauffer: *Introduction to Percolation Theory*, Taylor & Francis, London/Philadelphia 1985
- [26] G. Nimtz: *Mikrowellen*, BI Wissenschaftsverlag Mannheim/Wien/Zürich, 1990
- [27] M. Jamil Ahmed: Impedanz Transformation Equations for Exponential, Cosine-Squared and Parabolic Tapered Transmission Lines, *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, Vol. MTT-29, 1, Jan. 1981

- [28] B.L. Michielsen, L. Leyten, R.W.C. van der Veen: Numerical analysis of plane-wave reflection from double periodic absorber structures, Proceedings of EMC-Conference Zürich, Paper 104/03, Feb. 1991
- [29] Mitsonubo Nakamura: Conductivity for the site-percolation problem by an improved effektive-medium-theory, Phys. Rev. B, 29, 3691 (1984)
- [30] C.A. Grimes, D.A. Grimes: Permeability and permittivity spectra of granular materials, Phys. Rev. B, 43, 10780–10788 (1991)

Anhang A

Das Programm COSME II : Programmierung

Das in den letzten Abschnitten vorgestellte Verfahren wurde, wie zu Anfang erwähnt, von S. Stölzle im Rahmen ihrer Dissertation entwickelt und erprobt. Die von ihr programmierten Routinen zur Bestimmung der Eigenwerte blieben auch weitgehend unangetastet, sofern es nicht zur Erweiterung auf magnetische Materialparameter notwendig war. Eine exakte Beschreibung der Routinen zur inversen Iteration sowie zu den komplexen konjugierten Gradienten findet sich deshalb in [17] und braucht an dieser Stelle nicht weiter diskutiert zu werden. Hier soll nun ein kurzer Abriß des Programmablaufes der inneren Strukturen aufgeführt werden (Ein Struktogramm des Programmes findet sich am Ende).

A.1 Die Matrix \mathbf{A}

Der Einbau der magnetischen Materialparameter führte zu weitaus komplizierteren Iterationsgleichungen, welche von der Matrix $\mathbf{A} = \mathbf{C}^T \mathbf{D}_\mu \mathbf{C}$ herrühren; in der ursprünglichen Version bestand diese Matrix, welche eine $\nabla \times \nabla \times \dots$ -Operation darstellte, aus reinen Vertauschungen, d.h. die Einträge bestanden ausschließlich aus 0 und 1. Nun kommt die invertierte Permeabilitätsmatrix hinzu, so daß in jeder Komponente der Matrix \mathbf{A} geeignete Mittelungen über benachbarte Raumgebiete durchzuführen waren. Die EWG

$$\eta \mathbf{D}_\epsilon \vec{e} = \mathbf{C}^T \mathbf{D}_\mu \mathbf{C} \vec{e}$$

lautet für die i . Elementarzelle ausgeschrieben (nächste Seite):

$$\begin{aligned}
x) \quad \frac{\varepsilon(i)+\varepsilon(1-ix)+\varepsilon(1-ixq)+\varepsilon(i-ix-ixq)}{4} e(i) &= \frac{c^2}{\omega^2 \Delta^2} \left(e(i) \left[\frac{2}{\mu(i)+\mu(i-ixq)} + \frac{2}{\mu(i-ix)+\mu(i-ix-ixq)} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{2}{\mu(i-ixq)+\mu(i-ix-ixq)} + \frac{2}{\mu(i)+\mu(i-ix)} \right] \right. \\
&\quad \left. - \frac{2e(i+ix)}{\mu(i)+\mu(i-ixq)} - \frac{2e(i-ix)}{\mu(i-ix)+\mu(i-ix-ixq)} \right. \\
&\quad \left. - \frac{2e(i-ixq)}{2e(i+ixq)} - \frac{2e(i+ixq)}{2e(i-ixq)} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\mu(i-ixq)+\mu(i-ix-ixq)}{2e(i+1+nzr)} + \frac{\mu(i)+\mu(i-ix)}{2e(i-ix+nzr)} \right. \\
&\quad \left. - \frac{\mu(i)+\mu(i-ixq)}{2e(i+nzr)} - \frac{\mu(i-ix)+\mu(i-ix-ixq)}{2e(i+1-ix+nzr)} \right. \\
&\quad \left. + \frac{2e(i-ixq+nyr)}{\mu(i-ixq)+\mu(i-ix-ixq)} + \frac{2e(i+1+nyr)}{\mu(i)+\mu(i-ix)} \right. \\
&\quad \left. - \frac{2e(i+1-ixq+nyr)}{\mu(i-ixq)+\mu(i-ix-ixq)} - \frac{2e(i+nyr)}{\mu(i)+\mu(i-ix)} \right) \\
y) \quad \frac{\varepsilon(i)+\varepsilon(i-1)+\varepsilon(i-ix)+\varepsilon(i-ix-1)}{4} e(i+nyr) &= \frac{c^2}{\omega^2 \Delta^2} \left(e(i+nyr) \left[\frac{2}{\mu(i)+\mu(i-ix)} + \frac{2}{\mu(i)+\mu(i-1)} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{2}{\mu(i-ix)+\mu(i-ix-1)} + \frac{2}{\mu(i-1)+\mu(i-1-ix)} \right] \right. \\
&\quad \left. - \frac{2e(i-ix+nyr)}{\mu(i-ix)+\mu(i-1-ix)} - \frac{2e(i+ix+nyr)}{2e(i+1+nyr)} \right. \\
&\quad \left. - \frac{2e(i+1+nyr)}{\mu(i)+\mu(i-ix)} - \frac{2e(i-1+nyr)}{\mu(i-1)+\mu(i-1-ix)} \right. \\
&\quad \left. + \frac{2e(i+ixq)}{\mu(i)\mu(i-ix)} + \frac{2e(i-1)}{\mu(i-1)+\mu(i-1-ix)} \right. \\
&\quad \left. - \frac{2e(i)}{2e(i-1+ixq)} - \frac{\mu(i-1)+\mu(-1-ix)}{2e(i-ix+nzr)} \right. \\
&\quad \left. + \frac{2e(i-ix+nzr)}{\mu(i-ix)+\mu(i-1-ix)} + \frac{2e(i+ixq+nzr)}{\mu(i)+\mu(i-1)} \right. \\
&\quad \left. - \frac{2e(i+nzr)}{\mu(i)+\mu(i-1)} - \frac{2e(i-ix+ixq+nzr)}{\mu(i-ix)+\mu(i-1-ix)} \right) \\
z) \quad \frac{\varepsilon(i)+\varepsilon(i-1)+\varepsilon(i-ixq)+\varepsilon(i-ixq-1)}{4} e(i+nzr) &= \frac{c^2}{\omega^2 \Delta^2} \left(e(i+nzr) \left[\frac{2}{\mu(i)+\mu(i-1)} + \frac{2}{\mu(i-ixq)+\mu(i-1-ixq)} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{2}{\mu(i-1)+\mu(i-1-ixq)} + \frac{2}{\mu(i)+\mu(i-ixq)} \right] \right. \\
&\quad \left. - \frac{2e(i+ixq+nzr)}{\mu(i)+\mu(i-1)} - \frac{2e(i-ixq+nzr)}{\mu(i-ixq)+\mu(i-1-ixq)} \right. \\
&\quad \left. - \frac{2e(i-1+nzr)}{2e(i+1+nzr)} - \frac{2e(i+1+nzr)}{2e(i-ixq+nyr)} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\mu(i-1)+\mu(i-1-ixq)}{2e(i+ix+nyr)} + \frac{\mu(i)+\mu(i-ixq)}{2e(i-ixq+nyr)} \right. \\
&\quad \left. - \frac{\mu(i)+\mu(i-1)}{2e(i+nyr)} - \frac{\mu(i-ixq)+\mu(i-1-ixq)}{2e(i+ix-ixq+nyr)} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\mu(i)+\mu(i-1)}{2e(i+ix)} + \frac{2e(i-1)}{\mu(i-ixq)+\mu(i-1-ixq)} \right. \\
&\quad \left. - \frac{2e(i)}{\mu(i)+\mu(i-ixq)} - \frac{2e(i-1+ix)}{\mu(i-1)+\mu(i-1-ixq)} \right)
\end{aligned}$$

Es fällt auf, daß jeweils nur vier verschiedene Nenner auftreten, so daß es naheliegt, diese Nenner zuerst zu berechnen und in Variablen abzulegen. Weiter ist nun die Matrix \mathbf{A} durch die komplexen $\mu(i)$ auch komplexwertig¹, was dazu führt, daß in den Routinen, in denen die Matrix mit dem Vektor multipliziert wird, ebenfalls eine Verdoppelung der Gleichungen auftritt. Der einfachste Weg war es daher, aus den 13 Komponenten der Iterationsgleichungen eine Matrix zu erstellen, die mit dem Vektor \vec{e} multipliziert werden kann. Diese Vorgehensweise kommt auch dem Vektorrechner NEC-SX3 entgegen, da er explizit über Vektoroperationen verfügt. Die Vorgehensweise dabei ist so gewählt, daß man einfach die Vorfaktoren der Feldkomponenten durchnumeriert und so die Struktur der Matrix einmal verbindlich festlegt. Auf die gleiche Weise wird dabei aus den vier ε -Werten ein Vektor erstellt, der die entsprechenden Mittelungen schon enthält. Man erhält so für eine beliebige x -Komponente:

$$\begin{aligned}
 (\Sigma\varepsilon)(i)e(i) = & \eta\{e(i)ax(i,1) - e(i+ix)ax(i,2) - e(i-ix)ax(i,3) - e(i-ixq)ax(i,4) \\
 & - e(i+ixq)ax(i,5) + e(i+1+nzr)ax(i,6) + e(i-ix+nzr)ax(i,7) \\
 & - e(i+nzr)ax(i,8) - e(i+1-ix+nzr)ax(i,9) \\
 & + e(i-ixq+nyr)ax(i,10) + e(i+1+nyr)ax(i,11) \\
 & - e(i+1-ixq+nyr)ax(i,12) - e(i+nyr)ax(i,13)\},
 \end{aligned}$$

die anderen Komponenten werden analog erzeugt. Dadurch wird sichergestellt, daß in der späteren Vektorisierung der Rechenaufwand im wesentlichen auf Multiplikationen reduziert wird, wodurch ein schnellerer Durchlauf erzielt wird. Die Matrix \mathbf{A} hat, laut dieser Darstellung, also eine Dimension von $\dim(A) = N \times 13$. Man darf allerdings nicht vergessen, daß es sich um die *programmtechnische* Matrix handelt. Die in der theoretischen Ableitung vorkommende Matrix \mathbf{A} ist selbstverständlich regulär. Nachdem nun diese Konvention gemacht worden ist, was die Reihenfolge der Komponenten der Matrix \mathbf{A} angeht, kann man die Randbedingungen einbauen. Dies geschieht dadurch, daß bei der Erstellung der Matrix darauf geachtet wird, ob die zugehörige Feldkomponente möglicherweise eine Tangentialkomponente an der Oberfläche des Hohlleiterresonators ist (dies erkennt man an dem Index i). Ist dies der Fall, so kann einfach die entsprechende Komponente von \mathbf{A} auf Null gesetzt werden, was weniger aufwendig ist als in jedem Durchlauf den eigentlichen Vektor zu kontrollieren. Somit wird in jeder Iteration der Feldvektor an diesen Stellen konstant auf Null gehalten. Die Randbedingungen sind so zu jeder Zeit erfüllt.

A.2 Programmablauf

Das Programm folgt im Kern nun folgendem Verfahren:

1. Zunächst wird dem Vektor \vec{e} die Feldverteilung der ungestörten Grundmode zugewiesen. Diese entspricht der schon erwähnten $E_y(x, z) = E_y^0 \sin(k_x x) \sin(k_z z)$ -Mode.

¹Die hier gezeigte Darstellung ist eigentlich nicht die, welche im Programm verwendet wird, sondern es handelt sich noch um die komplexe Vorstufe. Um eine geeignete Vektorisierung und damit ausreichende Geschwindigkeit zu erhalten, müssen diese Gleichungen noch explizit in Real- und Imaginärteil aufgespalten werden.

2. Anschließend wird, wie oben beschrieben, die Matrix \mathbf{A} erstellt, allerdings zunächst für den leeren HLR ($\varepsilon = \mu = 1$).
3. Nun kann durch $\|Ae\|/\|e\|$ der Eigenwert des leeren HLR bestimmt werden. Dies geht prinzipiell natürlich auch analytisch, aber auf diese Weise kann man mögliche systematische Rundungsfehler minimieren.
4. Danach wird mit Hilfe eines Zufallszahlengenerators mit vorgegebener Besetzungswahrscheinlichkeit (= Füllfaktor) das Medium im leeren HLR „verteilt“. Dazu wird für jede Zelle des Netzes eine Zufallszahl gezogen und bei einer Besetzung die Zelle mit den Parametern des Mediums gefüllt, sonst mit den Matrixwerten.
5. Jetzt kann, wie oben aufgezeigt, durch inverse Iteration zusammen mit den komplexen konjugierten Gradienten der Eigenwert η der komplexen Eigenwertgleichung bestimmt werden.
6. Durch eine Korrelationsbetrachtung von linker und rechter Seite der Eigenwertgleichung (4.17) kann nun entschieden werden, ob die Genauigkeit des Resultats ausreicht. Ist dies nicht der Fall, so wird die Iteration wiederholt.
7. Ist die gewünschte Genauigkeit erreicht, so wird aus dem Eigenwert der entsprechende Materialparameter $\overline{\varepsilon\mu}$ berechnet, wie es in Abschnitt (4.3) hergeleitet wurde.

Zum Eigenwert möchte ich noch folgende Anmerkung machen: Da der Eigenwert eine komplexe Größe ist, ist auch die zugehörige Resonanzfrequenz komplex. Eine komplexe Frequenz muß so verstanden werden, daß der Imaginärteil die entstehenden Verluste repräsentiert und ein Maß für den zeitlichen Zerfall der Eigenschwingung ist.

A.3 Erweiterungen und Veränderungen

Hiermit kommen wir zum Kernpunkt dieser Arbeit, deren eigentliches Thema das Umschreiben des Programmes auf Magnetika war. Seit der ursprünglichen Version COSME wurden eine Reihe von Veränderungen am Programm vorgenommen. Dazu gehören eher kosmetische Veränderungen, die eine Neustrukturierung des gesamten Quelltextes beinhalten oder auch die Vermeidung von Standard-Kanälen für die Ein/ Ausgabe. Diese Änderungen hatten aber keinerlei Einfluß auf das Laufzeitverhalten des Programmes. Weiterhin wurden einige Veränderungen vorgenommen, was die Schachtelung und Struktur der Schleifen angeht. Dadurch konnte die sowieso schon gute Laufgeschwindigkeit von etwa 500 MFlops² auf bis zu 607 MFlops gesteigert werden. Aber auch dieser Eingriff änderte nichts an der logischen Struktur des Programmes. Einige weitere Details haben schließlich nur etwas mit persönlichem Stil und eigener, aber wohl nicht allgemeingültiger Vorstellung von Typen- und Arraydeklaration zu tun und brauchen hier nicht aufgezählt zu werden.

Die Erweiterungen, die zum Funktionieren des Programmes im Hinblick auf magnetische Materialien und Automatisierung des Programmes notwendig waren, möchte ich nun im Detail vorstellen.

²1 Flops = 1 Floating point Operation per Second

Verteilung des Materials im Resonator: Der Zufallszahlengenerator. Das Modell, wie es hier benutzt und berechnet wird, sieht eine beliebige Verteilung der Materialien im Resonator vor. Dabei handelt es sich grundsätzlich um kleine Würfel, also eine schon sehr spezielle Geometrie. Eine Möglichkeit besteht natürlich darin, diese immer bei jedem Durchlauf von Hand zu verteilen, was bei einem gewünschten, z.B. von der Gleichverteilung abweichendem Gemisch die einzige Möglichkeit ist. In der ursprünglichen Version wurde ein Zufallszahlengenerator eingesetzt, der mit einem vorgegebenen Wert initialisiert wurde. Dadurch wird die Sequenz der Zufallszahlen definiert und ist reproduzierbar. Der Algorithmus zur Besetzung ist dabei immer (der Vektor MU soll eine Auflistung aller Zellen des Resonators darstellen):

```

...
CALL RANSET(ISEED)
DO 1 I=1,N
  RND=RAND(0)
  IF (RND.LE.F) THEN
    MU(I)=MU2
  ELSE
    MU(I)=MU1
  END IF
1 CONTINUE
...

```

Dies bedeutet, daß in Abhängigkeit von der Besetzungswahrscheinlichkeit f (= Füllfaktor) eine Elementarzelle mit dem Medium 2 (Teilchen) oder dem Medium 1 (Matrix) gefüllt wird. Eine Verbesserung dieser Routine kann durch Benutzung der IMSL- Bibliotheksroutine `RNUN(N,RTMP)` erreicht werden. Diese Routine liefert einen Vektor `RTMP` der Länge N , dessen Elemente gut gleichverteilt sind³ im Intervall $[0, 1]$:

```

...
CALL RNUN(N,RTMP)
DO 1 I=1,N
  RND(I)=INT(1.+P-RTMP(I))
1 CONTINUE
RT=0
DO 2 I=1,N
  RT=RT+RND(I)
2 CONTINUE

```

³Bei jedem numerischen Zufallszahlengenerator handelt es sich eigentlich um einen Pseudo-Zufallszahlengenerator (PZG), der immer nur eine endliche Sequenz von Zufallszahlen generiert und diese Sequenz in einer unendlichen Abfolge hintereinanderschaltet. Ein Maß für die Güte der Zufallszahlen ist zum einen die Periodenlänge der erzeugten Sequenz, zum anderen ein Test, ob in jedem vorgegebenen Intervall die erzeugten Zufallszahlen überall gleich dicht liegen.


```

RP=REAL(RT)/N
DO 3 I=I,N
    EPS(I)=EPS1*(1-RND(I))+EPS2*RND(I)
    MU(I)=MU1*(1-RND(I))+MU2*RND(I)
3    CONTINUE
...

```

Aus diesem Vektor kann man mit der gewünschten Besetzungswahrscheinlichkeit P einen weiteren Vektor erzeugen, dessen Elemente aus 0 und 1 bestehen und sozusagen die Positionen des Mediums 2 markieren. Diese Positionen werden dann mit der Teilchenpermeabilität und Teilchenpermittivität besetzt.

Die Variable RT wird hierbei gebraucht, um den *tatsächlichen* Füllfaktor des HLR zu ermitteln. Da der Zufallszahlengenerator der SX3 gut ist, wird die Verteilung statistischen Schwankungen unterliegen, so daß der echte Füllungsgrad sich leicht vom vorgegebenen unterscheiden muß. Diese Korrektur wirkt sich daher stark auf die Glättung der erhaltenen Füllfaktor-Kurven aus.

Das gezeigte Verfahren mag auf den ersten Blick sehr viel umständlicher erscheinen, kommt der Vektorisierungsmöglichkeit der SX3 aber wesentlich entgegen, da bei langen Vektoren lediglich schematisierte Multiplikationen und Additionen ohne zusätzliche Funktionsaufrufe benutzt werden. Aus dem gleichen Grund wurde die Bestimmung des Füllfaktors in eine eigene Schleife verlagert, so daß es vermieden wird, die Komponente $RND(I)$ gleichzeitig in einer Quell- und einer Ergebnis-Pipe zu halten. Möglicherweise könnte das vom Betriebssystem der SX3 ausgeglichen werden, aber das schien mir nicht sicher genug zu sein.

Statistische Schwankungen: Um diesen Zufallszahlengenerator steuern zu können, wurde ein Schalter eingebaut, um wahlweise die Zufallszahlen mit einer festen, reproduzierbaren Sequenz zu erzeugen oder eine wiederum zufällige, vom System erzeugte Sequenz zu erhalten. Dabei wird der Zufallszahlengenerator mit der Systemzeit in Millisekunden initialisiert, was eine hinreichende Zufälligkeit der Sequenz garantiert. Auf diese Weise kann in jedem Durchlauf eine neue Verteilung erzielt werden, so daß die Illusion eines echten Gemisches erzeugt wird. Darauf möchte ich später noch einmal zurückkommen. Die statistischen Schwankungen können also gezielt ausgenutzt werden, um eine Fehlerabschätzung durch geometrische Verteilungsänderungen zu gewinnen. Der Steuerungsschalter ist von außen zugänglich, so daß das Programm ohne Änderung in einen oder anderen Modus benutzt, also die Anzahl der Rekompilierungen auf ein Minimum reduziert werden kann.

Durchlauf eines Füllfaktorbereichs Um eine Automatisierung des Programmes zu erreichen, was die Berechnung verschiedener Füllfaktoren angeht, mußten in das Programm Routinen eingebaut werden, die das eigenständige Abarbeiten mehrerer Füllfaktoren hintereinander erlauben. Zunächst war es notwendig, *alle* benutzten Variablen innerhalb der inneren Schleifen mit einem sinnvollen Wert zu initialisieren. Mit anderen Worten, das ursprüngliche Programm ist nun zur äußeren Schleife der neuen Version geworden. Zu diesem Zweck wurden neue Zählvariablen für den

Füllfaktor eingeführt, insbesondere für Start- und Endwert und die gewünschte Schrittweite. Somit wurde es also möglich, eine „Messung“ der effektiven Werte in einem Füllfaktorbereich durchzuführen, um eine Kurve $(\overline{\varepsilon\mu})(f)$ zu erhalten. Hier kommt die Steuerung des Zufallszahlengenerators zum Tragen, da man nun die Wahl hat, diese Messung immer am gleichen Ensemble durchzuführen oder für jeden einzelnen Durchlauf eine neue Verteilung „auszuwürfeln“. Auf diese Art kann eine bessere Statistik gewonnen werden.

Mehrere Durchläufe zu einem bestimmten Füllfaktor: Um die in den letzten beiden Punkten beschriebenen Möglichkeiten noch intensiver zu nutzen, wurde direkt unter die nunmehr äußere Füllfaktorschleife noch eine weitere Statistiksleife geschoben. Diese ermöglicht, zu einem bestimmten Füllfaktor mehrere Durchläufe zu machen. Das hat natürlich nur dann einen Sinn, wenn der Schalter zum Zufallszahlengenerator so gewählt wird, daß immer eine neue Verteilung im Hohlleiterresonator entsteht. Somit können zufällige geometrische Ungleichgewichte herausgefiltert und untersucht werden, inwieweit sie das Ergebnis beeinflussen. Da der reale Füllfaktor ebenfalls immer leicht variiert, bekommt man als Ergebnis einer solchen Untersuchung so etwas wie eine Fehlerfläche in der Füllfaktorkurve (siehe Abschnitt(5.4)). Die Anzahl der Durchläufe kann von 1 bis 9 gewählt werden.

Ein höherer Wert würde keinen Sinn machen, da die Schwankungsbreite in die Größenordnung der extrem kleinen Füllfaktor-Schrittweite käme. Man kann mit diesen 9 Durchläufen und sehr kleinen Schrittweiten des Füllfaktors (~ 0.001) in jedem Intervall eine fast beliebige Dichte an Punkten erzeugen.

Parameter – und Ergebnisdateien: Ziel eines solchen Programmes muß es natürlich immer sein, wie eine Maschine zu funktionieren, d.h. ohne Neukompilierung verschiedene Werte verarbeiten zu können. Dies ist auf zwei verschiedene Arten zu erreichen:

1. Durch interaktives Arbeiten mit dem Programm, also Eingaben über die Tastatur (stdin) nach einer Anforderung eines bestimmten Wertes durch das Programm. Der Nachteil dieses Verfahrens ist natürlich, daß das Programm von der Reaktion des Benutzers abhängig ist, also für die Wartezeit seinen Ablauf unterbrechen muß.
2. Durch eine sogenannte **Steuerdatei**. Hierbei wird eine vorher angefertigte Datei zur Laufzeit des Programmes eingelesen, in der die benötigten Daten stehen. Nachteil dieses Verfahrens ist, daß die Steuer- (oder auch Parameter-) Datei vom Programm gefunden werden muß, der Aufenthaltsort muß dem Programm also bekannt sein.

Im Programm *COSME II* wird das letztere Verfahren angewendet, nicht zuletzt dadurch, daß in der Regel jedes Programm auf der SX3 im Batch- (oder Queue-) Betrieb abgearbeitet wird. Dies bedeutet, daß die ausführbaren Programme in eine Warteschlange geschickt werden, was auch von Fremdrechnern aus geschehen kann. Dazu wird in der Warteschlange eine spezielle Steuerdatei untergebracht, welche mit Hilfe von Shell-Befehlen das Laufzeitverhalten der Programme beeinflusst. Hier kann

auch ein „Laufort“ definiert werden, wo die Parameterdatei untergebracht wird und wo später die Ergebnisdateien zu finden sind.

In der ursprünglichen Version wurden für Ein/Ausgabe keine expliziten Dateien, sondern sogenannte Standard-Kanäle verwendet. Diese werden bei der Benutzung z.B. von `WRITE(XX,*)` ... ohne vorherige `OPEN(UNIT= XX,...)`-Anweisung geöffnet und haben auf der SX3 danach den Name `fort.XX`, wobei XX jeweils die Kanal-Nummer bezeichnet. Dies wurde dahingehend verändert, daß das Programm zur Eingabe von Daten jetzt gezielt nach einer Datei `COSME.PAR` sucht.

Für Ergebnisse gelten die gleichen Überlegungen wie oben:

1. Ausgabe auf den Bildschirm (`stdout`). Dies impliziert aber, daß der Anwender ständig beim Gerät bleibt oder eine andere Möglichkeit hat, den Bildschirm zu überwachen. Das Problem stellt sich nicht, falls an der Standard-Ausgabe „`stdout`“ kein Bildschirm (TTY), sondern z.B. ein Drucker angeschlossen ist.
2. Ausgabe in eine vorher festgelegte Ergebnis-Datei. Dabei werden alle Ergebnisse in diese Datei geschrieben, also die Datei wie ein Bildschirm benutzt. Diese Datei kann zu einem beliebigen Zeitpunkt ausgewertet werden. Ein Nachteil dieses Verfahrens auf der SX3 ist es, daß diese Datei im Batch- Betrieb erst dann geschlossen wird (durch einen entsprechenden Betriebssystemaufruf), wenn das Programm seinen Durchlauf ordnungsgemäß beendet hat. Ein vorher auftretender Fehler führt dazu, daß die Datei ungeachtet dessen, wie viel schon hineingeschrieben wurde, die Länge NULL behält, die Daten also auf jeden Fall verloren sind.

Hier wird wiederum die zweite Möglichkeit benutzt, allerdings werden gleichzeitig alle Ergebnisse auch auf „`stdout`“ geschrieben⁴.

Zur Ausgabe von Ergebnissen konnte die Verwendung von Standard-Kanälen auf keinen Fall aufrecht erhalten werden; dies hätte eine Automatisierung völlig ausgeschlossen. Damit das Programm weitgehend selbstständig verschiedene Durchläufe machen kann (z.B. für verschiedenen Füllfaktoren oder mehrere Durchläufe für einen Füllfaktor), muß es in der Lage sein, in jedem Durchlauf der jeweiligen Ergebnisdatei einen eindeutigen Namen zuordnen zu können. Kann es das nicht (insbesondere bei Standard-Kanälen), so wird bei jedem neuen Durchlauf die vorherige Datei gelöscht und überschrieben. Eine Möglichkeit, eindeutige Dateinamen zu finden, war also Voraussetzung, um den Programmablauf zu automatisieren.

Aus diesem Grund wurde eine Routine geschrieben, die den Namen der Ergebnisdatei nach einem bestimmten Schema erzeugt. Dieser Name hat stets die Form „`COSME.OUTY.FX-XXX`“. Dabei stehen X und Y für Ziffern, und zwar derart, daß die Ziffer Y den Statistik-Durchlauf bezeichnet und die Form X-XXX den Füllfaktor

⁴Eine (nur unter UNIX oder MSDOS) mögliche Umlenkung dieses Kanals auf eine Datei liefert im Fehlerfall einen Rettungsanker, der bei einer Fehlersuche benutzt werden kann. Da die Umlenkungsdatei aber nur einmal pro Aufruf definiert werden kann, ist dieser Weg bei einer Automatisierung sehr unkomfortabel, da die gesamte Ausgabe nachher in einer Datei steht

eines Durchlaufes enthält: Die Datei COSME.OUT2.0-450 wäre demnach eine Ergebnisdatei (.OUT) zum Füllfaktor $f = 0.45$, wobei dies der zweite Durchlauf für diesen Füllfaktor ist. Mit Hilfe dieser „Namensgebungsroutine“ kann man also 9009 Ergebnisdateien zu einer Parameterdatei erzeugen. Diese Zahl dürfte, nicht zuletzt im Hinblick auf die Kosten der Rechenzeit, in jedem Fall ausreichend sein. Ein positiver Nebeneffekt der nun möglichen Eindeutigkeit ist, daß man die wichtigsten Eingangsdaten bereits dem Dateinamen entnehmen kann und gezielt Dateien einer Messung⁵ zusammenfassen.

Automatische Startwertsuche: Wie im Abschnitt (4.4.2) bereits erwähnt, braucht man zu dem Verfahren der inversen Iteration geeignete Start- bzw. Shiftwerte. Diese verändern sich je nach Betrag der Materialparameter bzw. dem Füllfaktor stark. Es mußte also ein Weg gefunden werden, diese Shiftwerte aus den genannten Daten zu bestimmen (Da natürlich die Shiftwerte *fast* den Eigenwerten entsprechen, ist dies ein redundantes Problem, das eng mit der Bestimmung einer Effektiv-Medien-Formel verknüpft ist).

1. Zuerst wurde versucht, den Shiftwert der Iteration aus dem Eigenwert des vorherigen Durchlaufes zu bestimmen. Obwohl dies an sich logisch ist, trifft man bei der praktischen Anwendung auf große Probleme. Zum einen müßte man die Schrittweite berücksichtigen, d.h. wie weit auf der Achse der Füllfaktoren der letzte Durchlauf entfernt war. Unterläßt man dies, so ist man auf konstante Schrittweiten festgelegt, oder man muß eine von der Schrittweite unabhängige Methode finden. Da letzteres nicht möglich ist, wurde eine lineare Extrapolation versucht, indem aus dem letzten Eigenwert und einer von der Schrittweite abhängigen Geraden durch diesen Eigenwert der neue Shiftwert geraten wurde:

$$\eta(f) = \eta(f - \Delta f) + m \cdot \Delta f \quad (\text{A.1})$$

Dies funktionierte aber nur bei sehr kleinen Schrittweiten, da zu Anfang der Kurve, also bei kleinen Füllfaktoren, die Steigung sehr groß ist (vergl. Bild (A.1)), zum Ende hin aber wird der Verlauf sehr flach. Daher kann man für die Steigung der Geraden keinen vernünftigen Kompromiß finden, und die geratenen Werte sind in der Regel schlecht. Oft endete man bei größeren Schrittweiten (ab $\Delta f = 0.05$) sogar bei negativen Shiftwerten, was sofort zu einem Abbruch des Programmes mit einer Fehlermeldung führte.

2. Danach wurde eine rein empirische Formel für die Startwerte angesetzt. Dabei wurde benutzt, daß die Eigenwerte für $f = 0$ und $f = 1$ natürlich aus den Materialparametern ε_M , μ_M und ε_T , μ_T des vollständig leeren bzw. vollständig gefüllten Hohlleiterresonators folgen durch die Gleichungen

$$\eta_0 = \frac{c^2}{\omega^2 \Delta^2}$$

⁵Ab hier spare ich mir die Anführungsstriche; Messung soll hier als Reihe von Simulationen verstanden werden.

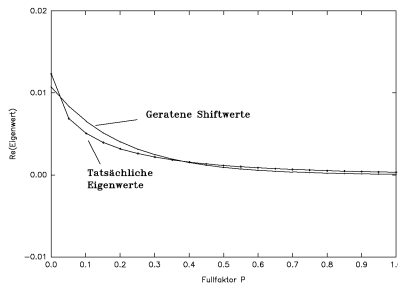


Abbildung A.1: Verlauf der Eigenwerte bei steigendem Füllfaktor

und

$$\eta_1 = \frac{\eta_0}{\varepsilon_T \mu_Z}$$

Zwischen diese beiden Werte konnte man zunächst eine Exponentialfunktion legen mit

$$\eta(f) = \eta_0 \left(\frac{\eta_0}{\eta_1} \right)^f \quad (\text{A.2})$$

Wieder zeigt sich jedoch, daß die Krümmung dieser Funktion zu stark ist, als daß dieser Ansatz brauchbare Ergebnisse liefern könnte. Das Problem waren die Füllfaktoren < 0.4 , in der die Kurve der Shiftwerte deutlich unterhalb der Näherung blieben. Als Folge konnte das Programm kleine Füllfaktoren nicht durchrechnen.

3. Von dem Exponentialansatz ausgehend konnte eine (wieder rein empirische) Modifikation eingeführt werden, in dem die Näherung künstlich zum „Durchhängen“ gebracht wurde. Dies geschah durch doppelte Potenzierung mit

$$\eta(f) = \eta_0 \left(\frac{\eta_0}{\eta_1} \right)^{f^{0.6}} \quad (\text{A.3})$$

Mit diesem Ansatz konnte zum erstenmal eine befriedigende Annäherung der Shiftwerte an die Eigenwerte erreicht werden. Somit war es nun möglich, automatisch ganze Füllfaktorkurven ($f = 0 \rightarrow 1$) aufzunehmen und den Verlauf der Funktion $(\overline{\varepsilon\mu})(f)$ zu untersuchen. Diese Näherungsweise scheiterte erst bei relativ hohen DK- und PK- Werten, wo der erratene Shiftwert zu weit vom Eigenwert entfernt lag, als daß noch eine Konvergenz zu erreichen war. In moderaten Bereichen dieser Parameter erwies sich diese Näherung als durchaus brauchbar.

Aus den Untersuchungen im Abschnitt (5.4) konnte eine Effektiv-Medien-Formel bestimmt werden, mit der der Algorithmus zur automatischen Startwertsuche nochmals verbessert werden konnte. Dabei wurden die Shiftwerte durch die Umkehrung der Effektiv-Medien-Formel nach

$$\eta(f) = \frac{\eta_0}{\varepsilon\mu(f)}$$

bestimmt. Diese Näherung erlaubte schließlich auch die Untersuchung der Füllfaktorkurve für hohe Materialparameter.

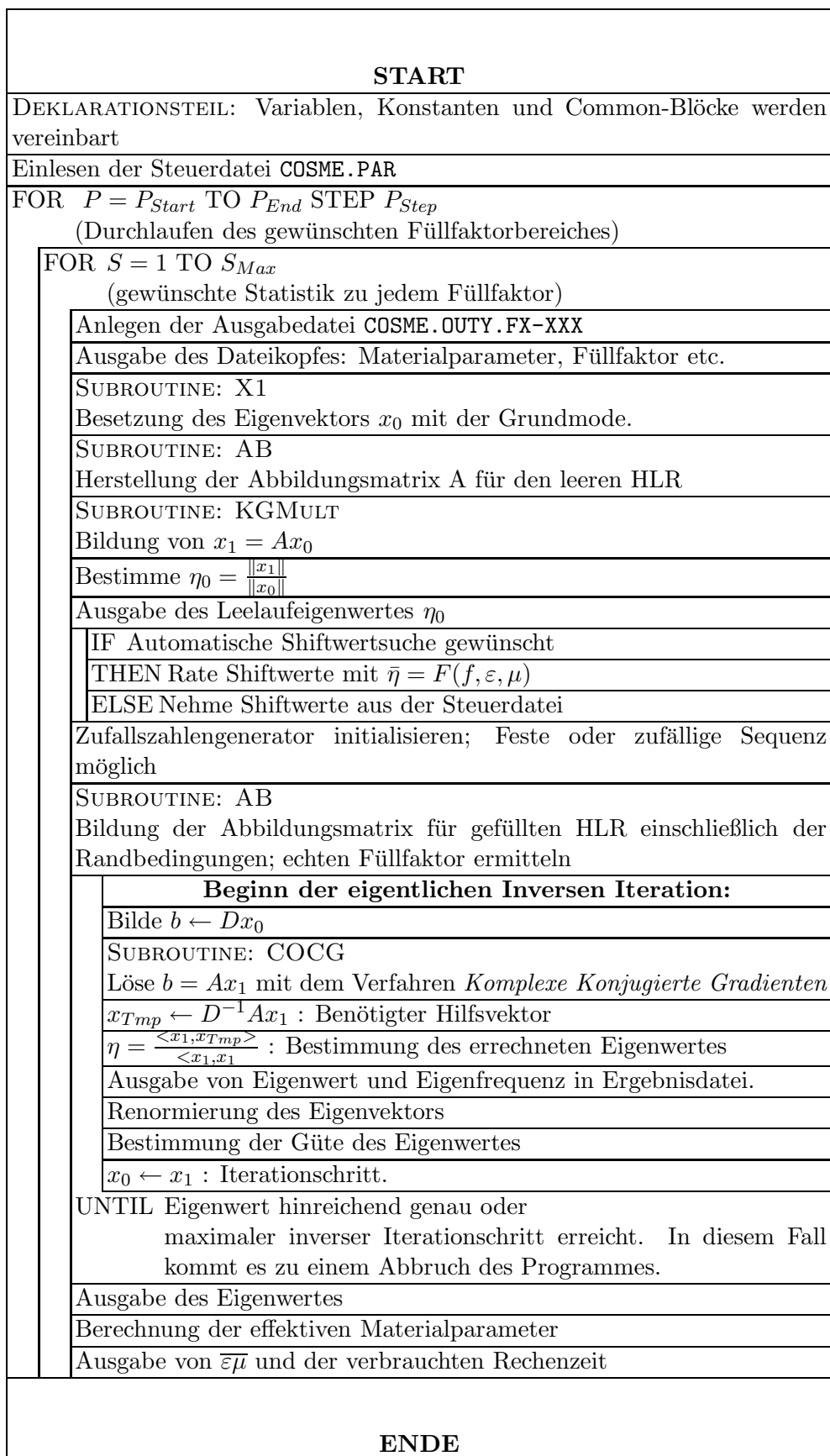
Anhang B

Blockdiagramm zu COSME II

Das hier gezeigte Blockdiagramm soll lediglich einen Überblick über die innere Struktur des Programmes liefern. Aus diesem Grund beschränkt sich die Erläuterung der Unterrou-tinen auf deren bloße Funktion und, gegebenenfalls, deren Rückgabewerte an das Haupt-programm. Die Namen der Routinen werden allerdings genannt, so daß ein Vergleich mit dem in [17] explizit abgedruckten möglich bleibt. Dabei ist allerdings zu berücksichtigen, daß die meisten Unterrou-tinen verändert werden mußten, um sie an die Berechnung von magnetischen Materialien anzupassen. Der Quelltext selbst ist zu umfangreich, als daß er an dieser Stelle zum Verständnis beitragen würde.

Eine typische Steuerdatei `COSME.PAR`, wie sie im Batchbetrieb des Programmes `COSME III` benutzt wird, soll hier noch kurz vorgestellt werden; in ihr sind die Daten zu finden, die den Programmablauf steuern. So sind alle Start- und Endwerte, Abbruchbedingun-gen und Materialparameter zu finden. Ebenfalls finden sich hier die Flags, welche die automatische Shiftwertsuche und die Zufallszahleninitialisierung steuern.

0.00018	0.00007	Shiftwerte
1		Shiftwertflag (1=Automatische Suche)
1.00	0.0	Eps-Matrix
1.00	0.0	Eps-Teilchen
1.00	0.0	Mu-Matrix
25.00	0.0	Mu-Teilchen
0.0		P-start
1.005		P-ende
0.01		P-step
0		Rnd-Seed
1		Runs / p
5		Max-Iteration
'xxalt000'		Filename fuer FELDSAVE
0		Save-Flag (1=save Vector)



Anhang C

Programm zur Anpassung einer Funktion

Das hier gezeigte Programm wurde zur Berechnung der Fitparameter a und b der Funktion

$$\begin{aligned}\bar{\mu}(f) &= \{f \cdot \mu_T^{\alpha(f)} + (1-f) \cdot \mu_M^{\alpha(f)}\}^{\frac{1}{\alpha(f)}}, \\ \alpha(f) &= a + b \cdot f\end{aligned}$$

geschrieben. Die Routinen zur Gradientensuche im Parameterraum stammen im wesentlichen aus [22] (siehe Text).

```
PROGRAM ARBFIT
REAL X(1000), Y(1000), YFIT(1000), SIGMAY(1000)
REAL PARAMS(10), DP(10)
INTEGER N, NTERMS, NPTS, MODE, I, J
REAL CHISQR, CHIOLD, DIFF, GOODNESS
REAL EMMATR, EMTEIL
CHARACTER INFILE*12
COMMON/MATTER/EMMATR,EMTEIL
C
PARAMS(1)=0.02
PARAMS(2)=0.0
DP(1)=0.01
DP(2)=0.01
NTERMS=2
MODE=0
N=1
CHIOLD=0.
WRITE(*,*) 'EFFECTIVE MEDIA FIT:'
WRITE(*,*) '-----'
WRITE(*,*) 'INPUTFILE (12 CHARS MAXIMUM): '
READ(*,FMT='(A12)',ERR=499,END=499) INFILE
OPEN(11,FILE=INFILE)
OPEN(12,FILE='OUTFIT.DAT')
```

```

10  READ(11,*,ERR=20,END=20) X(N), Y(N)
    SIGMAY(N)=Y(N)
    N=N+1
    GOTO 10
20  NPTS=N-1
    CLOSE(11)
    EMMATR=Y(1)
    EMTEIL=Y(NPTS)
    WRITE(*,*) 'DATA-FILE: ',INFILE
    WRITE(*,*) 'NO. OF POINTS: ',N
    WRITE(*,*) 'MATRIX: ',EMMATR
    WRITE(*,*) 'PARTICLE: ',EMTEIL
    WRITE(*,*) 'MODUS: -1, 0, +1 ->'
    READ(*,*) MODE
30  CONTINUE
    CALL GRADLS(X,Y,SIGMAY,NPTS,NTERMS,MODE,
&          PARAMS,DP,YFIT,CHISQR)
    WRITE(*,*) 'CHISQR=',CHISQR,' PARS: ',
&          (PARAMS(J),J=1,NTERMS)
    DIFF=ABS((CHISQR-CHIOLD)/CHISQR)
    CHIOLD=CHISQR
    IF(DIFF .GT. 0.00005) GOTO 30
    WRITE(*,*) ' '
    WRITE(*,*) 'FIT FOR FUNCTION (A+B*F):'
    WRITE(*,*) '=====
    WRITE(*,*) 'A=',PARAMS(1)
    WRITE(*,*) 'B=',PARAMS(2)
    WRITE(*,*) '=====
    GOODNESS=0.
    DO 40 I=1,NPTS
    GOODNESS=GOODNESS+ABS((Y(I)-YFIT(I))/Y(I))
40  WRITE(12,*) X(I),Y(I),YFIT(I),(Y(I)-YFIT(I))/Y(I)
    CLOSE(12)
    WRITE(*,*) 'GOODNESS OF FIT: ',GOODNESS
    WRITE(*,*) ' '
499  CONTINUE
500  STOP
    END

C
C
C
C =====
C SUBROUTINES
C
    SUBROUTINE GRADLS(X, Y, SIGMAY, NPTS, NTERMS, MODE, A, DELTAA,

```

```

&                YFIT, CHISQR)
REAL X(*), Y(*), SIGMAY(*), A(*), DELTAA(*), YFIT(*)
REAL GRAD(10)
REAL SUM, DELTA, CHISQR, CHISQ1, CHISQ2, CHISQ3, FCHISQ
INTEGER I, J, NFREE, NPTS, NTERMS, MODE

C
  NFREE=NPTS-NTERMS
  IF(NFREE) 13,13,21
13  CHISQR=0.
    GOTO 110
21  DO 22 I=1,NPTS
22  YFIT(I)=FUNCTN(X,I,A)
    CHISQ1=FCHISQ(Y,SIGMAY,NPTS,NFREE,MODE,YFIT)
C
  SUM=0.
  DO 39 J=1,NTERMS
  DELTA=0.1*DELTAA(J)
  A(J)=A(J)+DELTA
  DO 36 I=1,NPTS
36  YFIT(I)=FUNCTN(X,I,A)
    A(J)=A(J)-DELTA
    GRAD(J)=CHISQ1-FCHISQ(Y,SIGMAY,NPTS,NFREE,MODE,YFIT)
39  SUM=SUM+GRAD(J)**2
    DO 42 J=1,NTERMS
42  GRAD(J)=DELTAA(J) * GRAD(J)/SQRT(SUM)
C
51  DO 52 J=1,NTERMS
52  A(J)=A(J)+GRAD(J)
    DO 54 I=1,NPTS
54  YFIT(I)=FUNCTN(X,I,A)
    CHISQ2=FCHISQ(Y,SIGMAY,NPTS,NFREE,MODE,YFIT)
C
  IF(CHISQ1-CHISQ2) 62,71,71
62  DO 64 J=1,NTERMS
    A(J)=A(J)-GRAD(J)
64  GRAD(J)=GRAD(J)/2.
    GOTO 51
C
71  DO 72 J=1,NTERMS
72  A(J)=A(J)+GRAD(J)
    DO 74 I=1,NPTS
74  YFIT(I)=FUNCTN(X,I,A)
    CHISQ3=FCHISQ(Y,SIGMAY,NPTS,NFREE,MODE,YFIT)
    IF(CHISQ3-CHISQ2) 81,91,91
81  CHISQ1=CHISQ2

```

```

      CHISQ2=CHISQ3
      GOTO 71
C
91  IF (CHISQ3-CHISQ2) 92,90,92
90  DELTA=0.
      GOTO 94
92  DELTA=1./(1.+(CHISQ1-CHISQ2)/(CHISQ3-CHISQ2))+0.5
      DO 93 J=1,NTERMS
93  A(J)=A(J)-DELTA*GRAD(J)
94  DO 95 I=1,NPTS
95  YFIT(I)=FUNCTN(X,I,A)
      CHISQR=FCHISQ(Y,SIGMAY,NPTS,NFREE,MODE,YFIT)
      IF (CHISQ2-CHISQR) 102,110,110
102 DO 103 J=1,NTERMS
103 A(J)=A(J)+(DELTA-1.)*GRAD(J)
      DO 105 I=1,NPTS
105 YFIT(I)=FUNCTN(X,I,A)
      CHISQR=CHISQ2
110 RETURN
      END
C
C
C -----
C
      REAL FUNCTION FCHISQ(Y, SIGMAY, NPTS, NFREE, MODE, YFIT)
      DOUBLE PRECISION CHISQ, WEIGHT, FREE
      REAL Y(*), SIGMAY(*), YFIT(*)
      INTEGER I, NFREE, NPTS
C
      CHISQ=0.
      IF(NFREE) 13,13,20
13  FCHISQ=0.
      GOTO 40
20  DO 30 I=1,NPTS
      IF(MODE) 22,27,29
22  IF(Y(I)) 25,27,23
23  WEIGHT=DBLE(1./Y(I))
      GOTO 30
25  WEIGHT=DBLE(1./(-Y(I)))
      GOTO 30
27  WEIGHT=DBLE(1.0)
      GOTO 30
29  WEIGHT=DBLE(1./SIGMAY(I)**2)
30  CHISQ=CHISQ+WEIGHT*(Y(I)-YFIT(I))**2
      FREE=DBLE(NFREE)

```

```
FCHISQ=CHISQ/FREE
40  RETURN
    END
C
C -----
C FIT-FUNKTION WIRD DEKLARIERT MIT PARAMETERN A(I)
C
    REAL FUNCTION FUNCTN(X,I,A)
    REAL X(*), A(*), TMP
    REAL EMMATR, EMTEIL
    REAL EXPO
    COMMON/MATTER/EMMATR,EMTEIL
C
    EXPO=A(1)+A(2)*X(I)
    IF(EXPO.NE.0.0) GOTO 20
    FUNCTN=1.
    GOTO 999
20  TMP=X(I)*EMTEIL**EXPO+(1.-X(I))*EMMATR**EXPO
    FUNCTN=TMP**(1./EXPO)
999  RETURN
    END
```


Anhang D

Programm zur Absorberoptimierung

Das hier gezeigte Programm berechnet einen geometrisch optimierten Absorber. Eingangsgrößen sind u.A. die DK des Absorbermaterials, Länge und Höhe des Absorbers und zu untersuchender Frequenzbereich. Dazu wird eine Steuerdatei ABSORB.PAR eingelesen, deren Einträge aus den entsprechenden READ-Anweisungen abgelesen werden können. Eine genaue Erklärung des Programmes erfolgte im Text.

```
C
C DIESES PROGRAM FITTET EINE HUELLKURVE AN DIE OBERFLAECHE EINER
C GEOMETRISCH OPTIMierten ABSORBERPYRAMIDE.
C
      PROGRAM ABSORB
C
CC*$* OPTIMIZE ON
CC*$* VECTORIZE ON
C
C      IMPLICIT NONE
      INTEGER NDIM,LDIM
      PARAMETER(NDIM=100,LDIM=100)
C
      REAL A(10),DA(10),XMAX,XSOCK,YMAX,DX,C,PI
      REAL X(NDIM),Y(NDIM),FREQ(LDIM),R(LDIM),RP(LDIM)
      REAL RHO1,RHO2,RHO3,RHOTMP,RHOALT,EPO
      REAL RHOINT,FMIN,FMAX,DF,LSPEC
      COMPLEX KO,ZO,EPS,MU
      COMPLEX Z(NDIM)
      INTEGER NPARS,N,NL,I,IA,ABBR,TESTM,MAXRUN
C
      COMMON/GEO/XMAX,XSOCK,YMAX,DX
      COMMON/INTCONST/FMIN,FMAX
      COMMON/CONST/C,PI,KO,ZO,EPS,MU
C
```


C DEKLARATIONEN:

```

  ABBR=0
  N=NDIM
  NL=LDIM
  NPARS=3
  C=2.9979E8
  PI=3.1415926356
  WRITE(*,*) 'LESE STEUERDATEI: '
  OPEN(10,FILE='ABSORB.PAR',STATUS='OLD',ERR=800)
  READ(10,*,ERR=800) FMIN
  READ(10,*,ERR=800) FMAX
  READ(10,*,ERR=800) LSPEC
  READ(10,*,ERR=800) XMAX
  READ(10,*,ERR=800) XSOCK
  READ(10,*,ERR=800) YMAX
  READ(10,*,ERR=800) EPS
  READ(10,*,ERR=800) MU
  READ(10,*,ERR=800) EPO
  READ(10,*,ERR=800) MAXRUN
  GOTO 801
800  WRITE(*,*) 'FEHLER IN DER PARAMETERDATEI. ABBRUCH.'
      GOTO 201
801  CLOSE(10)
C RECHNE INTERN NICHT MIT KANTENLAENGE, SONDERN MIT HALBER KANTENLAENGE:
  YMAX=YMAX/2.0
  WRITE(*,*) '=====
  WRITE(*,*) '=          ABSORB          ='
  WRITE(*,*) '=====
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) 'FREQUENZBEREICH:'
  WRITE(*,*) 'UNTERE GRENZE= ',FMIN,' HZ'
  WRITE(*,*) 'OBERE GRENZE = ',FMAX,' HZ'
  WRITE(*,*) 'SPEZIELLE WELLENLAENGE: ',LSPEC,' M'
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) 'PYRAMIDENHOEHE = ',XMAX
  WRITE(*,*) 'PYRAMIDENSOCKEL = ',XSOCK
  WRITE(*,*) 'PYRAMIDENBREITE = ',2.*YMAX
  WRITE(*,*) 'EPSILON = ',EPS
  WRITE(*,*) 'MU =          ',MU
  WRITE(*,*) 'GENAUGIGKEIT: ',EPO
  WRITE(*,*) 'DURCHLAEUFE MAXIMAL: ',MAXRUN
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) 'ITERATIONS-SCHRITTE: ',NL
  WRITE(*,*) 'TRANSFORMATIONEN:      ',N
  WRITE(*,*) ' '

```

```

C
C ZUR BEVORZUGUNG KLEINERER FREQUENZEN (=GR"O"SERER WELLELL"ANGEN)
C WIRD INTERN MIT EINER LOGARITHMISCHEN SKALA GERECHNET.
C
      FMIN=ALOG10(FMIN)
      FMAX=ALOG10(FMAX)
      DF=(FMAX-FMIN)/FLOAT(NL)
      FREQ(1)=FMIN
      DO 9 I=2,NL
          FREQ(I)=FREQ(I-1)+DF
9      CONTINUE
C
C IMPEDANZ DES VAKUUMS IST BEKANNT:
      ZO=(377.,0.)
C AUSGANGSFUNKTION: KLASSISCHE PYRAMIDENFORM.
      DO 10 I=1,NPARS
          A(I)=0.0
          DA(I)=0.1
10     CONTINUE
C
      DX=XMAX/FLOAT(N)
      X(1)=0.
      DO 11 I=2,N
          X(I)=X(I-1)+DX
11     CONTINUE
C
C PYRAMIDENABSORBER ZUM VERGLEICH: ERGEBNIS WIRD IN RP GESPEICHERT.
C
      CALL PYRAMID(N,X,Y,NPARS,A)
      RHOALT=RHOINT(N,Y,Z,NL,FREQ,RP)
C
C BEGINN DER EIGENTLICHEN ITERATION. DIE PARAMETER A WERDEN MIT DA
C VARIIERT, BIS SIE ZU STEIGEN BEGINNEN. DANACH WIRD DAS LOKALE MINIMUM
C DURCH EINEN PARABEL-FIT BESTIMMT UND DER NAECHSTE PARAMETER ANGEPASST.
C DER FIT HAT DIE FORM (1+X*(XMAX/YMAX))*(1+A(1)*X+A(2)*X**2+...)
C
      WRITE(*,*)
      & '***** BEGINNE ITERATION: *****'
      RHOALT=0.
22     DO 20 IA=1,NPARS
          CALL PYRAMID(N,X,Y,NPARS,A)
          RHO1=RHOINT(N,Y,Z,NL,FREQ,R)
          A(IA)=A(IA)+DA(IA)
          CALL PYRAMID(N,X,Y,NPARS,A)
          RHO2=RHOINT(N,Y,Z,NL,FREQ,R)

```

```

      IF(RHO2.GT.RHO1) THEN
        RHOTMP=RHO1
        RHO1=RHO2
        RHO2=RHOTMP
        A(IA)=A(IA)-DA(IA)
        DA(IA)=-DA(IA)
      ENDIF
21    A(IA)=A(IA)+DA(IA)
      CALL PYRAMID(N,X,Y,NPARS,A)
      RHO3=RHOINT(N,Y,Z,NL,FREQ,R)
C    WRITE(*,*) IA,RHO1,RHO2,RHO3
      IF (TESTM(N,Y).NE.0) THEN
        A(IA)=A(IA)-DA(IA)
        DA(IA)=-DA(IA)
        GOTO 20
      ENDIF
      IF (RHO3.LT.RHO2) THEN
        RHO1=RHO2
        RHO2=RHO3
        GOTO 21
      ENDIF
C MINIMUM BESTIMMEN:
      A(IA)=A(IA)-DA(IA)*(0.5+(RHO3-RHO2)/
&      (RHO3-2.*RHO2+RHO1))
      DA(IA)=-DA(IA)/1.5
20    CONTINUE
      ABBR=ABBR+1
      CALL PYRAMID(N,X,Y,NPARS,A)
      RHO3=RHOINT(N,Y,Z,NL,FREQ,R)
      WRITE(*,901) ABBR,RHO3,(RHO3-RHOALT)/RHO3
900   FORMAT(1X,6F12.7)
901   FORMAT(1X,1I3,11H INT(RHO)= ,F8.6,9H EPSREL= ,F8.6)
      IF( (ABS((RHO3-RHOALT)/RHO3).LT.EPO) .OR.
& (ABBR.GE.MAXRUN)) GOTO 100
      RHOALT=RHO3
      GOTO 22
100   WRITE(*,*)
& '*****'
      write(*,*) ' '
      WRITE(*,*) 'ENDE DER VARIATION:'
      WRITE(*,900) (A(I),I=1,NPARS)
      WRITE(*,900) (DA(I),I=1,NPARS)
      WRITE(*,901) ABBR,RHO3,RHOALT-RHO3
C
      CALL DMPRES(NPARS,A,N,Y,Z,NL,FREQ,R,RP,LSPEC)

```

```
201 STOP
    END
```

```
C =====
    SUBROUTINE PYRAMID(N,X,Y,NPARS,A)
C   IMPLICIT NONE
    INTEGER N,NPARS
    REAL A(*),X(*),Y(*)
C
    REAL XMAX,XSOCK,YMAX,DX,YTMP,XTMP
    INTEGER I,J
C
    COMMON/GEO/XMAX,XSOCK,YMAX,DX
C
    DO 10 I=1,N
        YTMP=1.
        XTMP=X(I)
        DO 20 J=1,NPARS
            YTMP=YTMP+A(J)*XTMP**J
20    CONTINUE
        Y(I)=ABS(YTMP*YMAX*(XMAX-XTMP)/(XMAX-XSOCK))
C        Y(I)=ABS(YTMP*YMAX*(1.-XTMP/XMAX))
        IF(Y(I).GT.YMAX) Y(I)=YMAX
10    CONTINUE
    RETURN
    END
```

```
C -----
    SUBROUTINE SIMPINT(NN,XX,YY,FINT)
C   IMPLICIT NONE
    INTEGER NN
    REAL XX(*),YY(*),FINT
C
    INTEGER I
    FINT=0.
    DO 10 I=1,NN-1
        FINT=FINT+((XX(I+1)-XX(I))*(YY(I+1)+YY(I)))/2.
10    CONTINUE
    RETURN
    END
```

```
C -----
    REAL FUNCTION RHOINT(N,Y,Z,NL,FREQ,R)
C   IMPLICIT NONE
    INTEGER N,NL
```

```

REAL Y(*),FREQ(*),R(*)
COMPLEX Z(*)
C
REAL REFLEX,RESULT,C,PI
REAL FMIN,FMAX
COMPLEX KO,ZO,EPS,MU
INTEGER I
C
COMMON/CONST/C,PI,KO,ZO,EPS,MU
COMMON/INTCONST/FMIN,FMAX
C
DO 200 I=1,NL
  KO=2.0*PI*(10.0**FREQ(I))/C
  R(I)=REFLEX(N,Y,Z)
200 CONTINUE
CALL SIMPINT(NL,FREQ,R,RESULT)
RHOINT = RESULT
RETURN
END

C -----
REAL FUNCTION REFLEX(N,Y,Z)
C
IMPLICIT NONE
INTEGER N
REAL Y(*)
COMPLEX Z(*)
C
REAL F,XMAX,XSOCK,YMAX,DX,C,PI
INTEGER I
COMPLEX KO,K,ZO,ZL,EPS,MU
COMPLEX*16 TTAN,TARG,ZTAN
COMPLEX EPSQ,MUQ,EPFIT,MUFIT
C
COMMON/GEO/XMAX,XSOCK,YMAX,DX
COMMON/CONST/C,PI,KO,ZO,EPS,MU
C
C ZUNAECHST DIE ERSTE SCHICHT DIREKT OBERHALB DER METALLWAND:
F=(Y(1)*Y(1))/(YMAX*YMAX)
EPSQ=EPFIT(F,EPS)
MUQ=MUFIT(F,MU)
ZL=ZO*CSQRT(MUQ/EPSQ)
K=KO*CSQRT(EPSQ*MUQ)
TARG=K*CMLX(DX)
TTAN=ZTAN(TARG)
Z(1)=ZL*(0.,1.)*TTAN

```

```

C
C JETZT DER REST:
  DO 10 I=2,N
    F=(Y(I)*Y(I))/(YMAX*YMAX)
    EPSQ=EPSFIT(F, EPS)
    MUQ=MUFIT(F, MU)
    ZL=Z0*CSQRT(MUQ/EPSQ)
    K=K0*CSQRT(EPSQ*MUQ)
    TARG=K*CMPLX(DX)
    TTAN=ZTAN(TARG)
    Z(I)=ZL*(Z(I-1)+(0.,1.)*ZL*TTAN)/
&      (ZL+(0.,1.)*Z(I-1)*TTAN)
10  CONTINUE
C
  REFLEX=CABS((Z0-Z(N))/(Z0+Z(N)))
  RETURN
  END

C -----
  COMPLEX FUNCTION EPSFIT(F, EPS)
C  IMPLICIT NONE
  REAL F
  COMPLEX EPS

C
C  A=0.493+0.493*F
C  EPSFIT=(F*EPS**A+(1-F))**(1/A)
  EPSFIT=EPS/(F+EPS*(1-F))
  RETURN
  END

C -----
  COMPLEX FUNCTION MUFIT(F, MU)
C  IMPLICIT NONE
  REAL F
  COMPLEX MU

C
C  A=0.493+0.493*F
C  MUFIT=(F*MU**A+(1-F))**(1/A)
  MUFIT=MU/(F+MU*(1-F))
  RETURN
  END

C -----
  SUBROUTINE DMPRES(NPARS, A, N, Y, Z, NL, FREQ, R, RP, LSPEC)
C  IMPLICIT NONE

```

```

REAL A(*),Y(*),R(*),RP(*),FREQ(*)
COMPLEX Z(*)
INTEGER NPARS,N,NL
C
REAL XMAX,XSOCK,YMAX,DX,C,LSPEC,PI
INTEGER I
COMPLEX KO,ZO,EPS,MU
COMMON/CONST/C,PI,KO,ZO,EPS,MU
COMMON/GEO/XMAX,XSOCK,YMAX,DX
C
OPEN(11,FILE='ABSORB.CMD')
WRITE(11,*) 'set nologscale'
WRITE(11,*) 'set dummy x'
WRITE(11,*) 'xmax=',XMAX
WRITE(11,*) 'xsock=',XSOCK
WRITE(11,*) 'ymax=',YMAX
WRITE(11,*) 'set xrange[0:xmax]'
WRITE(11,*) 'set yrange[0:ymax]'
WRITE(11,777) (A(i),I=1,NPARS)
WRITE(11,*) 'plot abs(ff(x))'
WRITE(11,*) 'pause -1'
WRITE(11,*) 'set autoscale'
WRITE(11,*) 'set title "Reflexionsdaempfung"'
WRITE(11,*) 'set xlabel "Frequenz [Hz]"'
WRITE(11,*) 'set ylabel "-20*Log(rho) [Db]"'
WRITE(11,*) 'set logscale x'
WRITE(11,*) 'set grid'
WRITE(11,*) 'set data style lines'
WRITE(11,*) 'plot"R_OPT.DAT"t"Optimiert",20t"20 dB","R_PYR.DAT"
& t"Klassisch"'
WRITE(11,*) 'pause -1'
CLOSE(11)
OPEN(12,FILE='R_OPT.DAT')
DO 20 I=1,NL
    WRITE(12,*) 10**FREQ(I),-20*ALOG10(R(I))
20 CONTINUE
CLOSE(12)
OPEN(12,FILE='R_PYR.DAT')
DO 30 I=1,NL
    WRITE(12,*) 10**FREQ(I),-20*ALOG10(RP(I))
30 CONTINUE
CLOSE(12)
777 FORMAT(1X,'ff(x)=ymax*((xmax-x)/(xmax-xsock))*(1+',F10.6,'*x+',
&F10.6,'*x**2+',F10.6,'*x**3)')
RETURN

```

END

```
C -----  
      INTEGER FUNCTION TESTM(N,Y)  
C      IMPLICIT NONE  
      REAL Y(*)  
      INTEGER I,N  
C  
      DO 10 I=2,N  
10      IF(Y(I).GT.Y(I-1)) GOTO 20  
      TESTM=0  
      RETURN  
20     TESTM=1  
      RETURN  
      END
```


Ich möchte mich an dieser Stelle herzlich bei Prof. Dr. G. Nimtz bedanken, der mir die Gelegenheit gab, im II. Physikalischen Institut der Universität zu Köln diese Arbeit durchzuführen. Er ließ mir dabei den nötigen Freiraum, um eigene Gedanken zu verfolgen und Schwerpunkte zu setzen.

Ebenfalls möchte ich Achim Enders, Rolf Pelster und Susanne Stölzle für die Betreuung und die mühevollen Kleinarbeit danken, mit der sie mir bei der Anfertigung der Arbeit halfen und mir insbesondere bei vielen Problemen mit ihrer großen Erfahrung und vielen guten Vorschlägen zur Seite standen.

Weiterhin gilt mein Dank Gazi Barut, Winfried Heitmann, Huang Jian-Xin, Andreas Kops, Hans Georg Krauthäuser (der den Kampf gegen \TeX niemals aufgibt und für uns viele Schlachten gewinnt), Ren Jing, Jürgen Lange, Arnold Schroeder und Harald Spieker, welche eine Arbeitsgruppe bilden, in der die Arbeit Spaß macht und die für viele fruchtbare Diskussionen sorgten. Sie haben ebenfalls ihren Teil zum Gelingen der Arbeit beigetragen.

Bei Herrn Dietz und seiner Arbeitsgruppe möchte ich mich ebenfalls bedanken, da sie immer mehr über magnetische Phänomene wußten als ich mir merken konnte und ich somit oft als Gast bei ihnen zu finden war.

Bei Susanne Mäcker bedanke ich mich für ihre ständige Hilfsbereitschaft und das permanente Wissen, welche Chemikalie in welchem Schrank zu finden ist.

Auch Herr Hemptenmacher und Jürgen Schilz von der DLR müssen erwähnt werden, die mir freundlicherweise bei der Herstellung der Roh-Proben geholfen und ihre Presse zur Verfügung gestellt haben.

Der Belegschaft der Werkstätten des II. Physikalischen Institutes danke ich für die Anfertigung der Proben.

Besonderer Dank gilt schließlich meiner Freundin Marika Riewe, die mir während meines Studiums und speziell des Zusammenschreibens immer viel Verständnis und Anteilnahme entgegenbrachte, und meinen Eltern, die mir dieses Studium ermöglicht haben.

Hiermit erkläre ich, daß ich diese Arbeit selbstständig verfaßt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie Zitate kenntlich gemacht habe.

Köln, im Dezember 1992