

**FOURIER-SPEKTROSKOPISCHE
FREQUENZANALYSE
DER
SUBMILLIMETERWELLEN
AUS
FREQUENZMULTIPLIKATOREN
AUF
HALBLEITER-ÜBERGITTER-BASIS**

Dissertation

zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)

der

Naturwissenschaftlichen Fakultät II - Physik
Universität Regensburg

vorgelegt von

Jörg-Martin Batke

aus

Regensburg

2003



Promotionsgesuch eingereicht am: 08.07.2003

Die Arbeit wurde angeleitet von Prof. Dr. K. F. Renk.

Prüfungsausschuss: Vorsitzender: Prof. Dr. D. Strauch
1. Gutachter: Prof. Dr. K. F. Renk
2. Gutachter: Prof. Dr. A. Penzkofer
weiterer Prüfer: Prof. Dr. Ch. Strunk

Promotionskolloquium am: 17.09.2003

*Physics
would be dull and life most unfulfilling
if all physical phenomena around us were linear.
Fortunately, we are living in a nonlinear world.
While linearization beautifies physics,
nonlinearity provides excitement ...*

Y. R. Shen

I N H A L T S V E R Z E I C H N I S

DANKSAGUNG	5
SYMBOLVERZEICHNIS	6
ÜBERBLICK	8
EINFÜHRUNG	9

Frequenzmultiplikatoren auf Halbleiter-Übergitter-Basis

Elektronische Bauelemente zur Erzeugung von Submillimeterwellen

1 STRUKTUR UND EIGENSCHAFTEN DER HALBLEITER-ÜBERGITTER	13
1.1 Definition der Halbleiter-Übergitter	13
1.2 Beschreibung der Elektronenzustände	14
1.3 Bloch-Oszillationen	16
1.4 Ladungstransport	18
1.5 Selbsterregte Stromoszillationen	20
1.6 Mechanismen der Frequenzmultiplikation	22
2 AUFBAU DER FREQUENZMULTIPLIKATOREN	25
2.1 Bias-Oszillatoren	25
2.2 Fremdfeldmultiplikator	29

Das Fourier-Spektrometer

Funktion und Aufbau

3 GRUNDLAGEN DER FOURIER-SPEKTROSKOPIE	32
3.1 Messprinzip	32
3.2 Methodische Vorteile	38
3.3 Technologische Beschränkungen	44
4 GERÄTEAUFBAU UND VERSUCHSANORDNUNG	47
4.1 Aufbau des Spektrometers	47
4.2 Experimentelle Versuchsanordnung	52

Messungen und Auswertung

Analyse verschiedener Frequenzmultiplikatoren

5 FREQUENZMULTIPLIKATION VON BIAS-OSZILLATIONEN	54
5.1 Messergebnisse	54
5.2 Diskussion	57
6 FREQUENZMULTIPLIKATION EINES EXTERNEN FELDES	58
6.1 Messergebnisse	58
6.2 Diskussion	60
Anhang	
<i>Mathematische Grundlagen</i>	
A FOURIER-REIHEN UND KONTINUIERLICHE FOURIER-TRANSFORMATION	62
A.1 Fourier-Reihen	62
A.2 Kontinuierliche Fourier-Transformation	65
A.3 Darstellung als Faltung mit dem Dirac-Impuls	68
B DISKRETE FOURIER-TRANSFORMATION UND APODISATION	70
B.1 Diskrete Fourier-Transformation	70
B.2 Abtasttheorem nach Nyquist-Shannon	73
B.3 Signalverfälschung durch „Aliasing“ oder „Downsampling“	75
B.4 Apodisation	77
B.5 „Zero-Padding“	80
B.6 Spektrale Artefakte bei halbseitiger Datenaufnahme	82
C FALTUNGSALGEBRA	88
C.1 Kontinuierliche Faltung	88
C.2 Diskrete Faltung	89
C.3 Verschiebungssätze	89
C.4 Faltungstheorem	90
ZUSAMMENFASSUNG	92
ABBILDUNGSVERZEICHNIS	93
LITERATURVERZEICHNIS	95

DANKSAGUNG

Egal, was einer bewegt oder leistet, eines niemanden Arbeit steht ganz für sich allein. In allem, was wir tun, jedem Gedanken, den wir fassen, stecken die Ideen, das Wissen, die Vorarbeiten ungezählter anderer. Man denke allein an die Sprache, derer wir uns wie selbstverständlich bedienen, ohne sich ihrer kaum je wirklich bewusst zu werden. Die Sprache, die uns komplexes und abstraktes Denken überhaupt erst ermöglicht, was wären wir ohne sie? Die menschliche Gesellschaft lebt vom Pluralismus. Sie lebt vom Austausch der Gedanken und Ideen. In ganz besonderer Weise aber trifft dies auf den Bereich der Wissenschaft zu. Deshalb möchte auch ich an dieser Stelle all denen danken, ohne deren Anregungen, Unterstützung und Hilfe diese Arbeit undenkbar gewesen wäre.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. K. F. Renk, der mir die Mitarbeit an seinem Lehrstuhl ermöglicht und mir mit seinem Rat und Wohlwollen zur Seite gestanden hat.

Aber genauso schulde ich auch allen anderen gegenwärtigen und ehemaligen, ständigen oder zeitweisen Mitgliedern unserer Arbeitsgruppe meinen Dank. Für ihre Hilfe, ihre Freundschaft ... und manchmal auch für ihren Trost. Dies sind Kirill Alexeev, Natalia Alexeeva, Helmut Appel, Johannes Brandl, Stefan Brandl, Natalia Demarina, Michael Ellmauer, Anatoly Glukhovskoy, Michael Häußler, Klaus Hofbeck, Anatoly Ignatov, Manish Jain, Florian Klappenberger, Manfred Kraetschmer, Tanja Kube, Florian Maier, Alexander Meier, Roland Scheuerer, Ekkehard Schomburg, Raimund Summer, Harald Tietz, Annette Vollnhals, Stephan Winnerl.

Und, last but not least, die gute Seele unseres Lehrstuhls, Ulla Turba, sowie unsere Techniker Anton Humbs, Klaus Lachner und Rudi Reisser.

Regensburg, im Juli 2003

S Y M B O L V E R Z E I C H N I S

Die folgenden Zuordnungen gelten, sofern im Kontext nicht ausdrücklich eine abweichende Definition gegeben ist.

a	Übergitterperiode
A	Fläche
A_k	gerader, reeller Fourier-Koeffizient der Fourier-Reihe
α	Inklinationswinkel
B	Helligkeit
B_k	ungerader, reeller Fourier-Koeffizient der Fourier-Reihe
c	Lichtgeschwindigkeit
C_k	komplexer Fourier-Koeffizient der Fourier-Reihe
$D(\omega)$	Fourier-Transformierte des Dirac-Impulses
$\delta_{j,k}$	Kronecker- δ
$\delta(t)$	Dirac-Impuls, δ -Funktion
Δ	Minibandbreite, in Verbindung mit einer Variablen ein Intervall bezeichnend
e	Elementarladung
E	elektrische Feldamplitude
\acute{E}	Étendue, Strahlungsdurchsatz
\vec{E}	elektrisches Feld, Gleichfeld
\bar{E}_c	kritisches Feld
, ^(3d)	Energieigenwert, 1- bzw. 3-dimensional
f	Frequenz
f_k	Samplingwert einer Interferogrammfunktion
$f(t)$	beliebige Funktion endlicher/unendlicher Periode, Interferogrammfunktion
F	Fluss
F_j	komplexer Fourier-Koeffizient der diskreten Fourier-Transformation
$F(\omega)$	komplexer Fourier-Koeffizient der kontinuierlichen Fourier-Transformation
φ	Argument der komplexen Exponentialfunktion, Phasenwinkel
γ	Gangunterschied

$H(\mathbf{r}), H(z)$	Hamilton-Operator reduziertes Plancksches Wirkungsquantum
$I(k)$	Intensität
$I_{int}(\gamma)$	Interferogrammfunktion im Ortsraum
k	eindimensionaler Wellenvektor, Laufindex der Fourier-Reihe
λ	Wellenlänge
m^*	effektive Masse
\vec{n}	Normalenvektor
ν	Wellenzahl Nabla-Operator
ω, ω_k	Kreisfrequenz
ω_B	Bloch-Frequenz
ω_{Nyq}	Nyquist-Frequenz
ω_{scan}	Abtastfrequenz
Ω	Raumwinkel
$p(t)$	Wahrscheinlichkeit
$\Psi(\mathbf{r}), \psi(z)$	Elektronenzustand, ortsabhängige Wellenfunktion
q	elektrische Ladung
\mathbf{r}	3-dimensionale Raumkoordinate
$R_{xy} = r_{xy} r_{xy}^*$	Reflexionskoeffizient
t, t_k	unabhängige Variable im Interferogrammraum, z.B. Zeit oder Ort
T	Periodendauer der Funktion $f(t)$
$T_{xy} = t_{xy} t_{xy}^*$	Transmissionskoeffizient
$T(\omega)$	Periodendauer der zur Kreisfrequenz ω gehörenden Spektralkomponente
τ_{inel}, τ_{el}	inelastische, elastische Streuzeit
$v(t)$	Momentangeschwindigkeit
v_{drift}	Driftgeschwindigkeit
$V(\mathbf{r}), V(z)$	ortsabhängiges Potential
x	Ortskoordinate des Spiegelscanners
z	Ortskoordinate entlang der Übergitterachse
z_{lok}	Lokalisationslänge

ÜBERBLICK

Es wird gezeigt, dass mit Halbleiter-Übergittern durch Frequenzmultiplikation Submillimeterwellen von über einem Terahertz erzeugt werden können. Hierzu wurden in einem geeigneten Wellenleitersystem untergebrachte Übergitterelemente mit Mikrowellen der Frequenz 110 GHz bestrahlt. In Folge konnte die Generation von Oberwellen bis zur 16. Ordnung oder rund $1,8\text{ THz}$ nachgewiesen werden.

Daneben wird gezeigt, dass als Ausgangspunkt der Frequenzmultiplikation auch selbsterregte Bias-Oszillationen dienen können. An in Hohlraumresonatoren implementierte Übergitterbauelemente wurde ein elektrisches Feld angelegt derart, dass das spontane Auftreten von Bias-Oszillationen beobachtet wurde. Dies führte ebenfalls zur Erzeugung von Oberwellen, was bis zur 11. respektive 14. Ordnung oder jeweils knapp 500 GHz bestätigt werden konnte.

Kürzlich durchgeführte experimentelle Untersuchungen, deren theoretische Basis ein Drift-Diffusions-Modell für die Miniband-Elektronen ist, legen plausibel dar, dass die beobachtete Frequenzmultiplikation als eine unmittelbare Folge des Auftretens von propagierenden Raumladungsdomänen verstanden werden kann [Häu03_1, Sce03]. Ihr Auf- und Abbau an Kathode und Anode führt zu einem stark anharmonischen Verlauf des Stromes durch das Übergitter, der damit zur Quelle der emittierten Oberwellen wird.

Alle vorgestellten Ergebnisse wurden mit einem modifizierten Fourier(-Transformations)-Spektrometer gewonnen. Die Nutzbarmachung dieser Technik bietet gegenüber anderen Verfahren eine Reihe von wesentlichen Vorteilen, was sich in der Praxis insbesondere darin zeigt, dass in sehr kurzer Zeit große Frequenzbereiche mit Intervallbreiten von einigen Terahertz bei gleichzeitig im Bereich weniger Picowatt liegender Nachweisempfindlichkeit abgetastet werden können. Eine Schwierigkeit stellt hierbei das Auftreten spektraler Artefakte und deren korrekte Interpretation dar.

EINFÜHRUNG

Im Jahre 1891 konzipierte A. A. Michelson einen Versuchsaufbau, mit dem er Untersuchungen zur Lichtgeschwindigkeit durchführen wollte [Mic91, Mic92]. Diese heute als **Michelson-Interferometer** bekannte Anordnung ist, wenn auch bisweilen in abgewandelter Form, das Herzstück eines jeden modernen Fourier(-Transformations)-Spektrometers.

Michelson erkannte wohl das Potential seiner Entwicklung. Um das Interferometer jedoch für spektroskopische Untersuchungen nutzen zu können, müssen mit der **Fourier-Transformation** Berechnungen in einem Umfang durchgeführt werden, der von Hand kaum mehr zu bewältigen ist. So lag das Bestreben nahe, diese Kalkulationen zu automatisieren. Schon Michelson selbst versuchte sich zusammen mit S. W. Stratton um die Wende zum 20. Jahrhundert an diesem Problem und ersann einen mechanischen Rechenapparat [Mic98]. Erst in neuerer Zeit aber wurden mit den Fortschritten in der Mikroelektronik und Computertechnik die Voraussetzungen geschaffen, die großen anfallenden Datenmengen schnell und effizient verarbeiten und auswerten zu können. Gegen Ende der 60er Jahre kamen die ersten kommerziellen Fourier-Spektrometer auf den Markt. Mit den modernen Abkömmlingen dieser Geräte steht heute eine Methode zur Verfügung, die gegenüber der dispersiven Spektroskopie einige grundlegende Vorteile besitzt. Insbesondere dann, wenn es um die schnelle Abtastung großer Frequenzbereiche oder die Charakterisierung leistungsschwacher bzw. stark verrauschter, dabei aber über längere Zeiträume frequenzstabilier Strahlungsquellen geht, ist die Fourier-Spektroskopie anderen Verfahren systembedingt häufig überlegen.

Es waren diese beiden letztgenannten Aspekte – die Möglichkeit einer schnellen, überblicksartigen Abtastung eines großen Frequenzbereiches einerseits und eine hohe Sensitivität andererseits –, die auch den Ausschlag für unser Bemühen gaben, das Verhalten der in unserer Arbeitsgruppe erforschten **Halbleiter-Übergitter** fourier-spektroskopisch zu untersuchen.

Unter geeignet gewählten Bedingungen emittieren diese künstlichen Kristalle **Strahlung im Ferninfrarotbereich**. Die dabei effektiv in Strahlung umgesetzte Leistung beträgt jedoch vielfach kaum mehr als einige Mikrowatt. Da sich diese Leistung zum einen normalerweise auf eine ganze Reihe von Emissionslinien (Harmonische) verteilt, was sie zudem in einem höchst ungleichen Verhältnis tut (die Differenzen benachbarter Linien betragen üblicherweise ein bis zwei Größenordnungen und mehr), zum anderen Einkopplung und Prozessierung in einer spektroskopischen Messanordnung mit Verlusten behaftet sind, stößt man in Bezug auf die schwächeren Anteile eines solchen Spektrums rasch an messtechnische Grenzen. Die Fourier-Spektroskopie verspricht hier einmal aufgrund von **Multiplex- und Throughput-Vorteil** eine **Erhöhung der Nachweisempfindlichkeit** gegenüber dispersiven Verfahren [Fel51, Jac54]. Darüber hinaus kann durch Ausdehnung der Messzeit (Slow-Scan) respektive kumulative Messungen (iterierter Rapid-Scan) das Signal-Rausch-Verhältnis fast beliebig verbessert werden, eine entsprechend stabile Emissionsquelle vorausgesetzt.

Bei den in dieser Arbeit dokumentierten Experimenten wurden die Emissionen unserer Übergitterbauteile von außen in ein Rapid-Scan-Fourier-Spektrometer eingekoppelt und in Überlagerung mit dem thermischen Hintergrund charakterisiert. Ein mit flüssigem Helium gekühltes Silizium-Bolometer fungierte als hochempfindlicher Detektor. In Verbindung dieser Komponenten lässt das System den Nachweis von Strahlungsleistungen noch im Picowattbereich zu. Um das Signal-Rausch-Verhältnis zu verbessern, kann über eine im Prinzip unbegrenzte Anzahl von einzelnen Scans und damit Interferogrammen gemittelt werden. Eine Beschränkung hierbei stellt neben dem Zeitfaktor lediglich die Stabilität des jeweils untersuchten Bauelementes dar, dessen elektronische Eigenschaften innerhalb des Messzeitraumes, der sich ohne weiteres über mehrere Stunden erstrecken kann, keinen größeren Schwankungen unterworfen sein dürfen. Die gesamte Steuerung der Anlage sowie die Auswertung der gewonnenen Daten erfolgte über einen Rechner. Das Steuerungsprogramm verfügt über einen leistungsfähigen FFT(**Fast Fourier Transform**)-Algorithmus, mit dem sich die Interferogrammdaten annähernd in Echtzeit in die zugehörigen Spektren transformieren lassen.

Bei den untersuchten Halbleiter-Übergittern handelt es sich um Strukturen mit nichtlinearen Transporteigenschaften [Esa70]. Neben anderen Anwendungen – beispielsweise als ultraschnelle Detektoren für Hochfrequenzfelder –, auf die ich aber in diesem Zusammenhang nicht näher eingehen möchte, können sie sowohl als selbsterregte Oszillatoren betrieben als auch zur Frequenzvervielfachung eines von außen aufgeprägten Wechselfeldes benutzt werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurden Vertreter beider Funktionsgruppen

untersucht. Die Übergitterelemente waren mit Mitteln der Mikrostrukturierung ihrer jeweiligen Bestimmung entsprechend präpariert und in geeignete Hohlleiterstrukturen eingebettet worden.

Ziel dieser Arbeit war es, mithilfe der Fourier-Transformations-Spektroskopie nachzuweisen, dass mit elektronischen Bauelementen auf Basis von Halbleiter-Übergittern die Erzeugung elektromagnetischer Strahlung durch Vervielfachung im Frequenzbereich von über einem Terahertz möglich ist, und weiterhin, die qualitative Zusammensetzung dieser Strahlung mit möglichst großer Empfindlichkeit aufzulösen. Insbesondere bei den höheren Frequenzen erhofften wir uns im Hinblick auf die geringen Strahlungsintensitäten eine Herabsetzung der Nachweisgrenze gegenüber anderen Analyseverfahren. Darüber hinaus erwarteten wir von dieser Methode generell eine erhebliche Erweiterung des uns messtechnisch zugänglichen Frequenzbereiches sowie eine deutliche Verkürzung der Messzeiten beim Scannen ausgedehnter spektraler Areale.

Um ein Fourier-Spektrometer zum Vorteil nutzen zu können, ist es unbedingt erforderlich, sich nicht nur mit dem mechanischen Funktionieren und der dahinterstehenden Physik eines derartigen Instruments vertraut zu machen, sondern sich auch eingehend mit den mathematischen und informationstheoretischen Grundlagen insbesondere der diskreten Fourier-Transformation auseinanderzusetzen. Andernfalls nämlich bliebe einem nichts anderes übrig, als blind auf die Richtigkeit der ausgegebenen Spektren zu vertrauen. Das Auftreten von mess- und verarbeitungstechnisch bedingten Artefakten ist aber keineswegs ungewöhnlich, sondern unter bestimmten Voraussetzungen muss im Gegenteil mit solchen gerechnet werden. Da ihre Interpretation also ein fundiertes Verständnis der Fourier-Transformation voraussetzt (und mir im Verlaufe meiner Arbeit so einiges Kopfzerbrechen bereitet hat ☺), gehe ich im Anhang bewusst ausführlich auf die zugrundeliegende Mathematik ein. Besonderes Augenmerk richte ich dabei auf die Auswirkungen von endlicher Interferogrammlänge und diskreter Abtastung des Interferogramms.

Frequenzmultiplikatoren auf Halbleiter-Übergitter-Basis

*Elektronische Bauelemente
zur Erzeugung von Submillimeterwellen*



K a p i t e l 1

STRUKTUR UND EIGENSCHAFTEN DER HALBLEITER-ÜBERGITTER

1.1 Definition der Halbleiter-Übergitter

Kristalle sind räumliche Strukturen regelmäßig angeordneter, gleichartiger Atome, Atomgruppen oder Moleküle, deren elementare Einheit sich periodisch wiederholt und ein n -dimensionales Gitter ($n = 1, 2, 3$) charakteristischer Symmetrie formt. **Schichtet man zwei oder mehr Kristalle**, die sich in ihren chemischen oder physikalischen Eigenschaften unterscheiden, **in atomar dünnen, alternierenden Lagen gleichmäßig übereinander**, so wird der zyklischen Struktur der Reinkristalle eine zusätzliche Periodizität aufgeprägt. Aufgrund dieser **Metastruktur**¹ bezeichnet man einen solcherart zusammengesetzten Kristall als Übergitter. Grundsätzlich lassen sich zwei Klassen dieser Heterokristalle unterscheiden: Kompositions- und Dotierungsübergitter. In Kompositionsumbergittern differieren die konstituierenden Kristalle in ihrer chemischen oder physikalischen² Zusammensetzung; Dotierungsübergittern hingegen liegt überall derselbe Wirtskristall zugrunde, die einzelnen Schichten weisen jedoch qualitativ oder quantitativ verschiedene Dotierungen auf.

Man betrachte nun speziell Halbleiterkristalle. Die Elektronenaffinitäten zweier verschiedener solcher Kristalle werden sich normalerweise voneinander unterscheiden. Bringt man sie in gegenseitigen Kontakt, ist an der Grenzfläche daher mit **Diskontinuitäten der Bandstruktur** zu rechnen. Unter der Annahme eines abrupten Überganges bildet sich an einer derartigen Grenze ein scharfer Offset zwischen den Bandsystemen der jeweiligen Materialien aus. Vertikal zu den Schichtebenen findet man also ein periodisches Potential vor, das man als eine Aneinanderreihung von Potentialtrögen und -barrieren verstehen kann. Deren Ausdehnungen

¹ Meta- = Über-

² Gemeint sind Substanzen, die unter gewissen Bedingungen in mehr als einer festen Phase (Kristallstruktur) vorkommen können; Beispiel: Kohlenstoff in Form von Graphit oder Diamant.

entsprechen den zugehörigen Schichtdicken der konstituierenden Halbleiter. Ähnlich, wie sich in einem homogenen Festkörper durch die Akkumulation gleichartiger Atome oder Moleküle, die für sich genommen jeweils diskrete Energieniveaus zeigen, quasikontinuierliche Energiebänder ausbilden, führt die lokale Häufung von Potentialtöpfen (die isoliert wiederum nur diskrete Energien zulassen) im Übergitter nun ebenfalls zur Entstehung von Bändern. Man spricht hier aufgrund der im Verhältnis kleineren energetischen Abmessungen von einem **Minibandsystem**. Bei moderater Energiezufuhr³ können sich die Ladungsträger (in n-dotierten Halbleitern also die Elektronen) lediglich im untersten Miniband eines solchen Systems bewegen. Da für die nachstehenden Überlegungen allein dieser Zustand von Interesse, mithin oft auch der einzige stabile ist (höhere globale Feldenergien führen, begünstigt beispielsweise durch strukturelle Inhomogenitäten, häufig zum Lawinendurchbruch und so zur Zerstörung der Bauelemente), beziehen sich alle folgenden Betrachtungen ausschließlich auf diesen Fall.

1.2 Beschreibung der Elektronenzustände

Gegeben sei ein n-dotiertes Übergitter. Die Elektronenzustände $\Psi(\mathbf{r})$ und ihre Energieeigenwerte ^(3d) im untersten Miniband können durch Lösung der Schrödinger-Gleichung in Effektivmassennäherung

$$H(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) = {}^{(3d)}\Psi(\mathbf{r}) \quad (1.1)$$

für den Hamilton-Operator

$$H(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \quad (1.2)$$

berechnet werden. m^* ist die mittlere effektive Masse der Elektronen im jeweiligen Compoundsystem, die sich aus den effektiven Massen in den konstituierenden Kristallen und dem globalen Verlauf des Übergitterpotentials gewinnen lässt. Man schränke sich auf die Betrachtung der z -Richtung entlang der Übergitterachse, d.h. senkrecht zu den Schichtebenen, ein, da sich ja nur in dieser Richtung eine über das Gitter der Wirtskristalle hinausgehende Periodizität findet. Das Problem kann dann durch Separation auf die eindimensionale Schrödinger-Gleichung

³ „Moderat“ bedeutet in diesem Zusammenhang, dass die Elektronen nicht genügend Energie erhalten dürfen, um die energetische Lücke zum nächsthöheren Miniband überwinden zu können.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_u(z) \right) \psi(z) = \psi(z) \quad (1.3)$$

zurückgeführt werden. $V_u(z)$ beschreibe das durch die Minibandunterkante gebildete Potential. Unter der Annahme der Randbedingung

$$\psi(0) = \psi(Na) \quad \text{mit } N \in \mathbb{Z}, \quad (1.4)$$

wobei a die Länge einer Übergitterperiode und N deren Anzahl sei, gilt das Bloch-Theorem

$$\psi_k(z + na) = e^{ika} \psi_k(z), \quad (1.5)$$

das besagt, dass sich die einzelnen Lösungen der Schrödinger-Gleichung bei Translation um eine Übergitterperiode a oder ein ganzzahliges Vielfaches n davon nur um einen Phasenfaktor voneinander unterscheiden. Für den eindimensionalen Wellenvektor k gilt

$$k = \frac{2\pi}{Na} n, \quad (1.6)$$

so dass sich die Translationsbedingung auch in der Form

$$\psi_k(z + na) = e^{2\pi \frac{n}{N} i} \psi_k(z) \quad (1.7)$$

darstellen lässt. Diese Wellenfunktionen können z.B. mit der Tight-Binding-Methode bestimmt werden. Dazu berechnet man zuerst die gebundenen Eigenzustände $\varphi_m(z)$ eines isolierten Quantentopfes. Die Wellenfunktionen im Übergitterpotential ergeben sich dann als Linearkombination aus den Zuständen sämtlicher Quantentröge:

$$\psi_{m,k}(z) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{ikz_j} \varphi_m(z - z_j), \quad j \in \mathbb{Z}, m \in \mathbb{Z}_0. \quad (1.8)$$

Die Summe läuft über die Mittelpunkte $z_j = j \cdot a$ aller j Potentialtöpfe, der Vorfaktor dient der Normierung. Dieser Überlapp der Wellenfunktionen der einzelnen Potentialtröge führt zu einer Aufspaltung der Energiedichten in eine Vielzahl von dicht benachbarten Energieniveaus. Es entstehen quasikontinuierliche, energetisch erlaubte Bereiche, die erwähnten Minibänder, die durch Minibandlücken, auch Gaps genannt, voneinander getrennt sind. Wird nur das unterste

Miniband betrachtet, das sich aus der Linearkombination der Grundzustände $\varphi_{m=0}$ ergibt, und berücksichtigt man nur den Überlapp der Wellenfunktionen einander jeweils unmittelbar benachbarter Tröge, ergibt sich als Resultat die Dispersionsrelation

$$(k) = \frac{\Delta}{2} [1 - \cos(ka)]. \quad (1.9)$$

Δ ist hierbei die Minibandbreite und gibt die Energiedifferenz zwischen Ober- und Unterkante des Minibandes an. Abbildung 1.1 zeigt den periodischen Verlauf dieser Dispersionsrelation unter Kennzeichnung der ersten Brillouin-Zone.

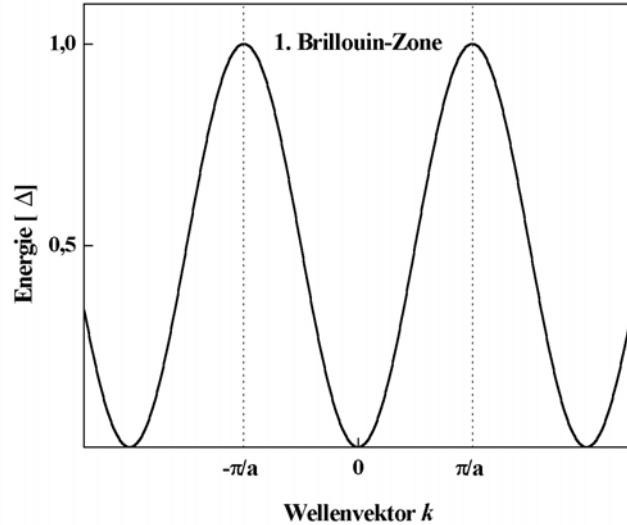


Abb. 1.1: Dispersionsrelation für die Elektronen im untersten Übergitterminiband

1.3 Bloch-Oszillationen

Man lege nun entlang der Übergitterachse ein statisches elektrisches Feld \vec{E} an und betrachte ein darin befindliches Elektron mit dem auf diese eine Dimension reduzierten Wellenvektor $k(t)$. Die Bewegungsgleichung dafür lautet:

$$\hbar \frac{d}{dt} k(t) = (-e) \vec{E}. \quad (1.10)$$

Ein konstantes elektrisches Feld führt hiernach zu einem linearen Anwachsen des Wellenvektors mit der Zeit,

$$k(t) = \frac{(-e)\vec{E}}{\hbar} t, \quad t \in \dots \quad (1.11)$$

Für die Geschwindigkeit des Elektrons dagegen gilt kein linearer Zusammenhang, wie man aus der Verknüpfung von (1.9) und (1.11) ersieht:

$$v(t) = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dk} k \quad (k) = \frac{\Delta a}{2\hbar} \sin \frac{(-e)\vec{E}a}{\hbar} t = \frac{\Delta a}{2\hbar} \sin \omega_B t. \quad (1.12)$$

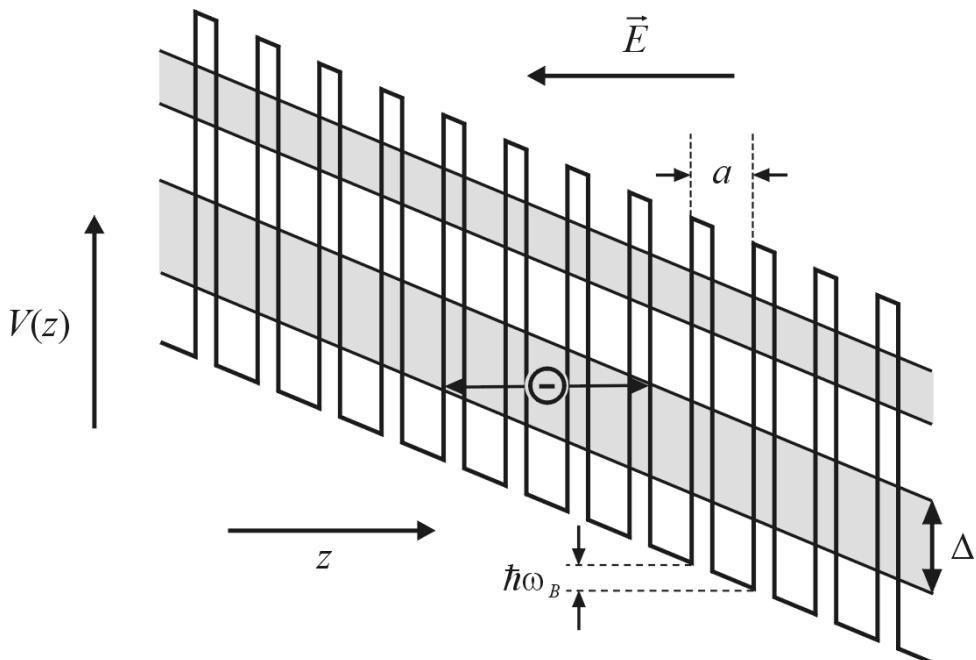


Abb. 1.2: Elektron in einem statischen elektrischen Feld im Übergitter

Unter dem Einfluss eines konstanten elektrischen Feldes oszilliert das Elektron also. Die Frequenz, mit der es dies tut, wird als Bloch-Frequenz

$$\omega_B = \frac{(-e)\vec{E}a}{\hbar} \quad (1.13)$$

bezeichnet, wobei das negative Vorzeichen der Ladung einen Phasenfaktor $| \pi |$ bewirkt (dieser ergibt sich, da mit dem Elektron eine negative Probeladung betrachtet wird; verglichen mit einem positiv geladenen Teilchen ist sein Bewegungsmuster um 180° phasenverkehrt). Den (klassischen) Aufenthaltsort des Elektrons erhält man durch Integration:

$$z(t) = \int v(t) dt = \frac{-\Delta}{2(-e)\vec{E}} \cos \omega_B t + z_0 = \frac{z_{lok}}{2} \cos \omega_B t + z_0. \quad (1.14)$$

Das Ergebnis sagt aus, dass das Elektron um einen in Abhängigkeit von den gegebenen Anfangsbedingungen bestimmten Ort z_0 oszilliert, und zwar innerhalb eines Intervalls, das als Lokalisationslänge bezeichnet wird:

$$z_{lok} = \frac{\Delta}{e\vec{E}} \quad \text{bzw. allgemein} \quad z_{lok} = \left| \frac{-\Delta}{q\vec{E}} \right|. \quad (1.15)$$

Diese Oszillationen heißen Bloch-Oszillationen. Der Effekt wurde von Clarence Zener, bezugnehmend auf Überlegungen von Felix Bloch [Blo28], bereits 1934 für die Elektronen im untersten Leitungsband von Festkörpern beschrieben [Zen34]. Die Frequenz der Oszillationen ist nach (1.13) proportional zur Periode der Kristallstruktur und sollte daher in Übergittern bei äquivalenten Feldstärken entsprechend größer sein als in homogenen Kristallen. Auf diese Art kann schon bei vergleichsweise niedrigen Spannungen erreicht werden, dass die Oszillationsfrequenz größer wird als die Streureate τ^{-1} . Die Elektronen führen dann im Mittel also tatsächlich Oszillationen aus. In homogenen Kristallsystemen hingegen kann der Effekt in der Regel nicht beobachtet werden, da die erforderlichen Feldenergien (um die Oszillationsfrequenz über den Wert der Streureate anzuheben) so groß sind, dass die Elektronen das Gap oberhalb des ersten Minibandes überwinden können.

1.4 Ladungstransport

In einem statischen elektrischen Feld oszillieren die Elektronen also innerhalb bestimmter Raumbereiche; man spricht daher auch von **dynamischer Lokalisation**. Die Oszillationen verschiedener Elektronen jedoch sind nicht miteinander korreliert und führen deshalb zu keinerlei messbaren Strömen durch das Übergitter. Um den Ladungstransport, der tatsächlich beobachtet wird, beschreiben zu können, muss die **inelastische Streuung** der Elektronen mitberücksichtigt werden. Im Mittel erfolgt solch ein Streuprozess jeweils nach Verstreichen der Zeit τ_{inel} . Die Wahrscheinlichkeit, zum Zeitpunkt t noch nicht gestreut worden zu sein, beträgt für ein Elektron demnach

$$p(t) = e^{-\frac{t}{\tau_{inel}}}. \quad (1.16)$$

Ferner nehme man an, das Elektron habe nach jedem Streuvorgang die mittlere Geschwindigkeit Null. Der (wiederum klassische) Ort, an dem sich ein Elektron zum Zeitpunkt t befindet, ergibt sich durch Integration über seine Geschwindigkeit, multipliziert mit der Wahrscheinlichkeit (1.16):

$$z(t) = -\frac{\Delta a}{2\hbar} \int_0^\infty \sin \omega_B t \cdot e^{-\frac{t}{\tau}} dt, \quad \tau = \tau_{inel}. \quad (1.17)$$

Eine Lösung dieses Integrals findet sich z. B. in [Gra65]; es ergibt sich

$$z(t) = \frac{\Delta a}{2\hbar} \frac{\omega_B \tau}{1 + (\omega_B \tau)^2} t + z_0 = \frac{\Delta a}{2\hbar} \frac{\vec{E}/\vec{E}_c}{1 + (\vec{E}/\vec{E}_c)^2} t + z_0 \quad (1.18)$$

mit der kritischen Feldstärke

$$E_c = \left| \frac{\hbar}{(-e)a\tau} \right|. \quad (1.19)$$

Damit erhält man für die Driftgeschwindigkeit den Ausdruck

$$v_{drift}(\vec{E}) = \frac{\Delta a}{2\hbar} \frac{\vec{E}/\vec{E}_c}{1 + (\vec{E}/\vec{E}_c)^2}. \quad (1.20)$$

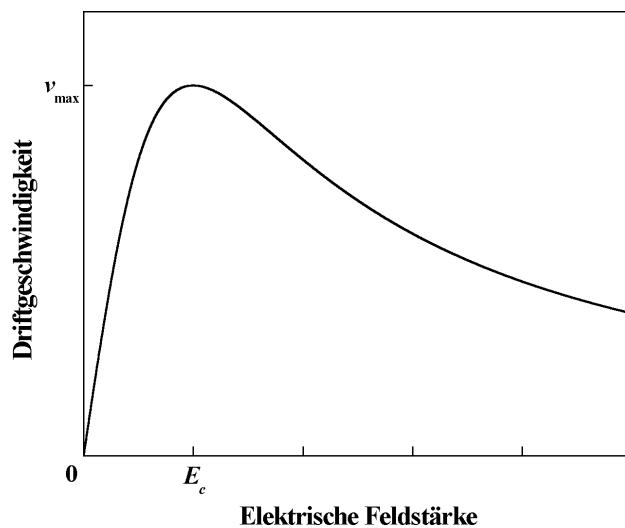


Abb. 1.3: Abhängigkeit der Driftgeschwindigkeit der Elektronen von der elektrischen Feldstärke im Esaki-Tsu-Modell

Sie erreicht bei E_c ein Maximum,

$$v_{max} = \frac{\Delta a}{4\hbar}, \quad (1.21)$$

so dass man auch

$$v_{drift}(\vec{E}) = 2v_{max} \frac{\vec{E}/\vec{E}_c}{1 + (\vec{E}/\vec{E}_c)^2} \quad (1.22)$$

schreiben kann. Diese Driftgeschwindigkeitsverteilung, von Esaki und Tsu erstmals formuliert [Esa70] und nach ihnen benannt, ist in Abbildung 1.3 dargestellt.

1.5 Selbsterregte Stromoszillationen

Die Berechnungen zum Ladungstransport zeigen die negative differentielle Beweglichkeit der Elektronen oberhalb einer kritischen Feldstärke E_c . Welche Konsequenzen ergeben sich daraus? Um diese Frage beantworten zu können, muss man sich klarmachen, dass sich die Lokalelemente der Feldstärke im Übergitter als Superposition aus dem global an das Bauelement angelegten und den durch lokale Inhomogenitäten der Raumladungsdichte hervorgerufenen Feldern ergeben. Je höher die lokale Raumladungsdichte, desto größere Felder treten lokal⁴ auch auf. Solange die Beweglichkeit der Ladungsträger mit der Feldstärke ansteigt, werden Fluktuationen der Raumladungsdichte automatisch wieder ausgeglichen, indem sich nämlich die Ladungsträger innerhalb einer Verarmungszone langsamer bewegen als die in den umgebenden Regionen (und somit Ladungen aus den umliegenden Bereichen in dieses Gebiet eindiffundieren) bzw. diejenigen innerhalb einer Anreicherungszone schneller (wodurch sie dazu neigen, aus diesem Areal hinauszudiffundieren).

Was aber passiert, wenn die Beweglichkeit der Elektronen mit wachsender Feldstärke abnimmt, anstatt anzusteigen? Man sieht leicht ein, dass Schwankungen der Raumladungsdichte in diesem Fall nicht mehr nivelliert werden, sondern sich im Gegenteil noch verstärken. Es kommt zur Bildung ausgeprägter Raumladungszonen. Ihr Wachstum wird zum einen durch die Anzahl vorhandener freier Ladungsträger, zum anderen durch deren repulsive Coulomb-Wechselwirkung gesteuert. Diese Raumladungszonen, bei denen es sich um Dipoldomänen

⁴ In Propagationsrichtung ist der Ladungssammelbereich stets ein Hochfeldbereich vorgelagert, ein Niederfeldbereich folgt ihr.

handelt, propagieren dann im globalen Feld nach einer gewissen Aufbauzeit durch das Bauelement. Wie Simulationen zeigen [Sce02], entstehen die Domänen stets an der Kathode und driften zur Anode. Nach Erreichen dieser werden sie dort abgebaut. An der Kathode beginnt eine neue Domäne, sich zu formieren, der Vorgang wiederholt sich periodisch. Im Außenkreis registriert man daher einen dem Gleichstrom aufgeprägten Wechselstromanteil. Abbildung 1.4 veranschaulicht diese Dynamik für den Fall eines hinreichend großen (d.h. im Bereich negativer differentieller Leitfähigkeit liegenden), konstanten externen elektrischen Feldes.

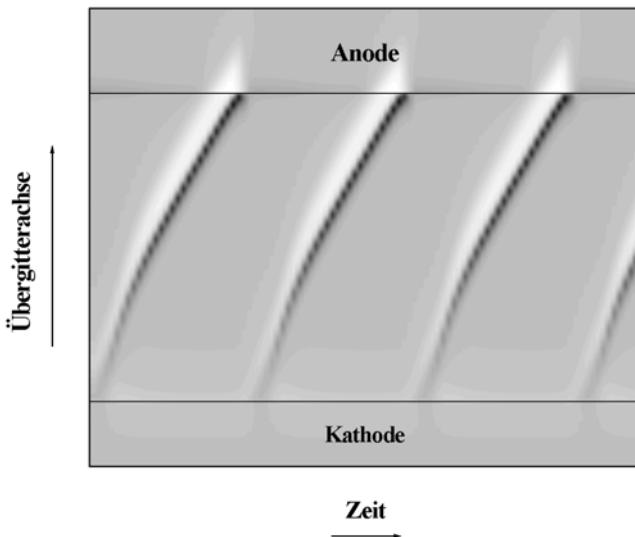


Abb. 1.4: Domänen-Dynamik: Konzentration freier Ladungsträger im Übergitter in Abhängigkeit von Ort und Zeit bei Anliegen eines konstanten externen elektrischen Feldes hinreichender Stärke [Computersimulation R. Scheuerer] (je dunkler, desto höher die Ladungsträgerkonzentration)

Betrachtet man den Zeitverlauf des so generierten Stromes (Abbildung 1.5), sieht man, dass es sich um kein harmonisches Signal handelt. Vielmehr wird in regelmäßigen zeitlichen Abständen ein kurzer Puls erzeugt und einem Gleichstrom überlagert. Man darf also erwarten, dass neben der Grundfrequenz Oberwellen entstehen, was auch tatsächlich der Fall ist.

Dies ist in Grundzügen der Mechanismus der in Übergittern zu beobachtenden Stromoszillationen. Allerdings handelt es sich natürlich um eine stark verknappte Darstellung. Damit ein Übergitteroszillator faktisch anschwingt, müssen weitere Bedingungen erfüllt sein. So muss das Produkt aus Ladungsträgerkonzentration und Übergitterlänge beispielsweise einen gewissen Schwellenwert überschreiten, damit den Domänen genügend Zeit zum Aufbau bleibt, bevor sie die Anode erreichen ($n_0 L$ -Kriterium). Auch passiert es unter bestimmten Umständen,

dass sich zwar einmalig eine Domäne formiert, diese dann jedoch „hängen bleibt“; so kann dies zum Beispiel vor der Anode geschehen, wenn die Domäne dort nicht schnell genug gelöscht wird. Das Phänomen der Eigenoszillationen ist also in komplexere Wirkzusammenhänge eingebettet, auf die ich aber in diesem Rahmen nicht weiter eingehen möchte.

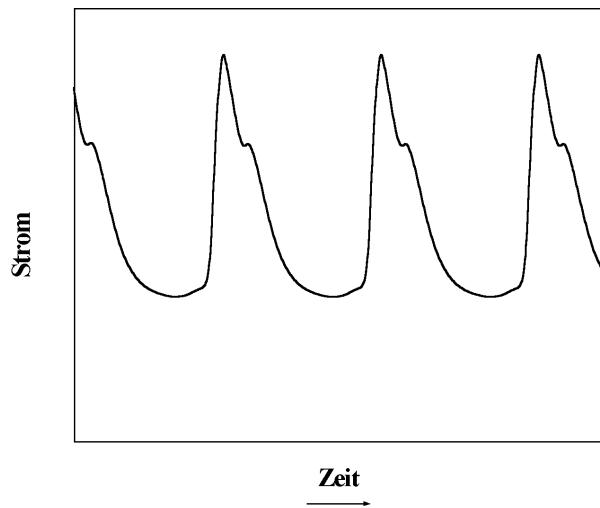


Abb. 1.5: Stromoszillationen, wie sie sich aus der Verteilung freier Ladungsträger in der durch Abb. 1.4 beschriebenen Situation ergeben [Computersimulation R. Scheuerer]

1.6 Mechanismen der Frequenzmultiplikation

Im vorangegangenen Abschnitt wurde gezeigt, dass sich Übergitter als Lokaloszillatoren einsetzen lassen. Eine weitere interessante Anwendung ist die zur Frequenzvervielfachung. Prinzipiell gibt es zwei Möglichkeiten, wie die beschriebene Nichtlinearität der Übergitterbauelemente in diesem Sinne genutzt werden kann.

Wird ein Bauelement mit nichtlinearer Strom-Spannungs-Charakteristik einem harmonischen, d.h. monochromatischen Wechselfeld ausgesetzt, finden sich in seiner Stromantwort auch Oberwellen des Initiatorfeldes. Besonders ausgeprägt ist dieser Effekt, wenn die Kennlinie Bereiche negativer differentieller Leitfähigkeit aufweist. Abbildung 1.6 gibt ein Beispiel: Ein Bauelement mit Esaki-Tsu-Charakteristik wird in ein Wechselfeld der Amplitude $2E_c$ eingebracht. Der dabei durch das Element generierte Strom weicht erheblich von der harmonischen Form des Erregerfeldes ab. Offensichtlich enthält das Antwortsignal also Oberwellen. Aus welchen spektralen Anteilen es sich zusammensetzt und in welcher Stärke diese auftreten, darüber gibt im konkreten Fall eine Fourier-Analyse Aufschluss. In diesem Modell der

Frequenzvervielfachung wird davon ausgegangen, dass die Stromantwort des nichtlinearen Bauelementes keine intrinsische Zeitabhängigkeit aufweist, sondern direkt und ausschließlich an die Phase des eingestrahlten Feldes gekoppelt ist.

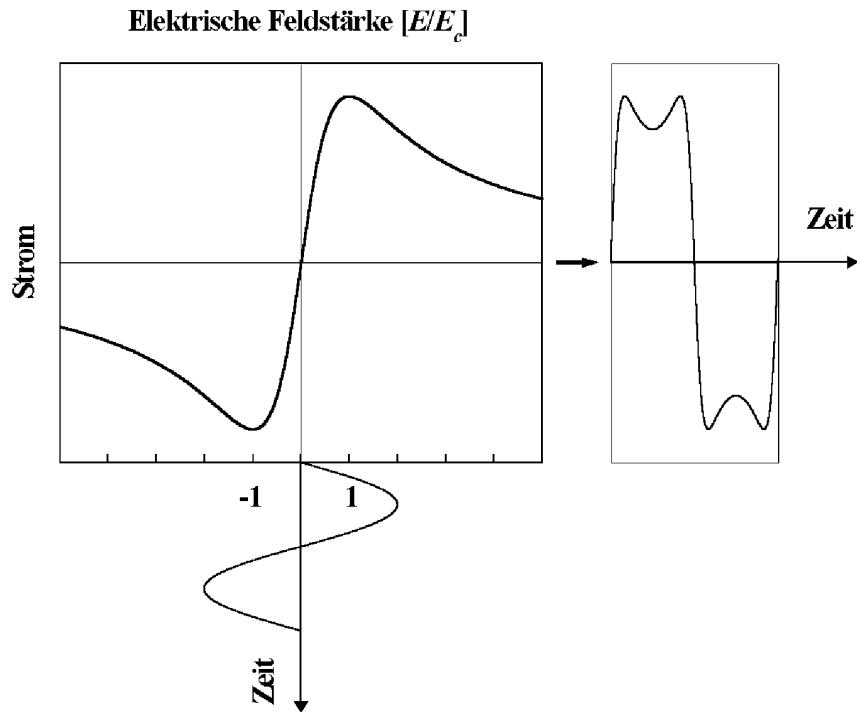
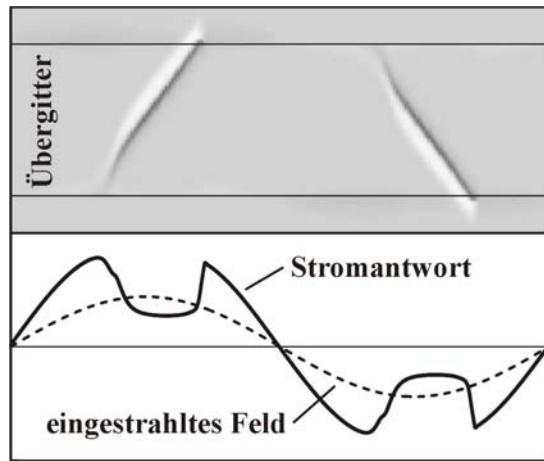


Abb. 1.6: Abtastung einer Kennlinie mit Esaki-Tsu-Charakteristik mithilfe eines harmonischen Wechselfeldes der Amplitude $2E_c$ (unten) und daraus resultierende Stromantwort (rechts)

Wie in Kapitel 1.5 beschrieben, trifft dies jedoch häufig nicht zu. Stattdessen führt eine negative differentielle Beweglichkeit der Ladungsträger zur Bildung von Raumladungszonen und wandernden Dipoldomänen und als Folge davon zu Stromoszillationen. Die Stromantwort des Bauelementes ist also nicht nur an das eingestrahlte Wechselfeld gebunden, sondern bei hinreichend großer Amplitude dieses Feldes in mehr oder weniger ausgedehnten Teilphasen davon auch explizit zeitabhängig.

Kürzlich konnte gezeigt werden, dass das Triggern von Domänen einen außerordentlich effektiven Mechanismus zur Frequenzvervielfachung darstellt [Häu03_1, Sce03]. Der Aufbau von Domänen führt zum Absinken, ihr Abbau zum Ansteigen des Stromes. Daraus resultiert ein stark anharmonischer Verlauf des Antwortsignals, was wie auch im ersten Modell zur Emission von Oberwellen führt. Abbildung 1.7 zeigt den Fall, dass pro Halbphase des Erregerfeldes das Auftreten genau einer Domäne getriggert wird. Dies ist natürlich nicht zwingend. Die Anzahl der

ausgelösten Domänen ist aber auch gar nicht entscheidend, da es lediglich auf die Erzeugung einer möglichst starken Anharmonizität ankommt.



*Abb. 1.7: Domänen als Ursache von Oberwellen in der Stromantwort
[Häu03_1]*

Und genau dies ist der Grund für die hohe Effektivität dieses zweitgenannten Mechanismus. Führt nämlich die Amplitude des eingestrahlten, weiterhin als harmonisch angenommenen Feldes zum Überschreiten der kritische Spannung im Bauelement, kommt es durch die Domänenbildung schlagartig zur Ausprägung eines stark anharmonischen Verlaufs des Antwortsignals. Im ersten Modell hingegen weicht die Form der Stromantwort jenseits des ohmschen, linearen Kennlinienbereiches mit steigender Amplitude des Primärfeldes nur langsam von der harmonischen Form ab.

Kapitel 2

AUFBAU DER FREQUENZMULTIPLIKATOREN

2.1 Bias-Oszillatoren

In Kapitel 1.5 wurde das spontane Auftreten **selbsterregter Stromoszillationen** im Falle negativer differentieller Beweglichkeit der Elektronen beschrieben. Da dieses Phänomen zu einer stark anharmonischen Form des resultierenden Stromes durch das Übergitter führt (vgl. die Abbildungen 1.4 und 1.5), werden neben der Grundfrequenz dieser Oszillationen auch Oberwellen davon generiert. Man kann insofern von einer Multiplikation der Eigenschwingungsfrequenz sprechen.

Das Konzept der beiden untersuchten Bias-Oszillatoren wurde im Rahmen unserer Arbeitsgruppe entwickelt [Häu03_2]. Es handelt sich dabei zum einen um einen metallischen Hohlraumresonator, der galvanisch von einem photolithographisch erzeugten Negativ abgeformt wurde, zum anderen um eine direkt auf photolithographischem Wege strukturierte, metallisierte Hohlleiterstruktur aus Kunststoff. Beide enthalten als aktives Element jeweils eine einzelne Übergitterdiode. Als photolithographischer Werkstoff dient ein UV-empfindlicher, zähflüssiger Photolack (SU-8), mit dem in einem Arbeitsgang Schichtdicken von etwa $100\mu m$ realisiert werden können.

Stellt man aus einem geeigneten Material zwei zueinander symmetrische Formen her und füllt diese anschließend galvanisch mit einem Metall auf, lassen sich die beiden so gewonnenen metallischen Profile nach Lösen aus den Formen zu einem Hohlraumresonator zusammensetzen. Ausgangspunkt für die Fertigung der Formen ist ein mit Titan bedampftes Substrat aus Silizium. Auf dieses Substrat werden sukzessive vier jeweils rund $100\mu m$ messende Schichten Photolack aufgeschleudert und mit unterschiedlichen Masken belichtet. Mit dem Entwickeln der

Lackschichten entstehen auf diese Weise die dreidimensionalen Negative der beiden Resonatorhälften.

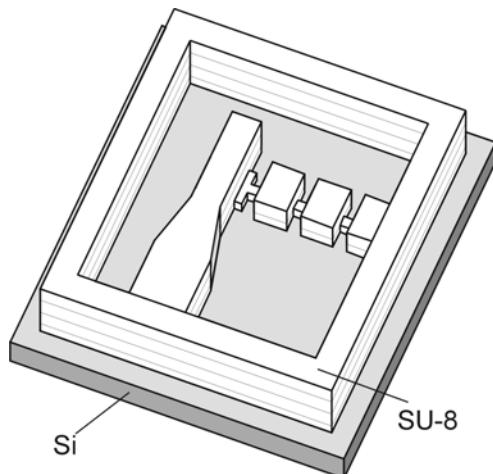


Abb. 2.1: SU-8-Negativ zur Abformung einer Resonatorhälfte [Häu03_2]

Anschließend wird in diese Formen aus einem galvanischen Bad Nickel abgeschieden, und zwar solange, bis sie vollständig gefüllt sind. Die Formen werden entfernt, und man erhält zwei Nickelprofile, die nach Implementation der Übergitterdiode zum fertigen Resonator zusammengesetzt werden. Abbildung 2.2 zeigt die elektronenmikroskopische Aufnahme einer der beiden Hälften mit bereits in die Struktur integriertem Übergitterelement.

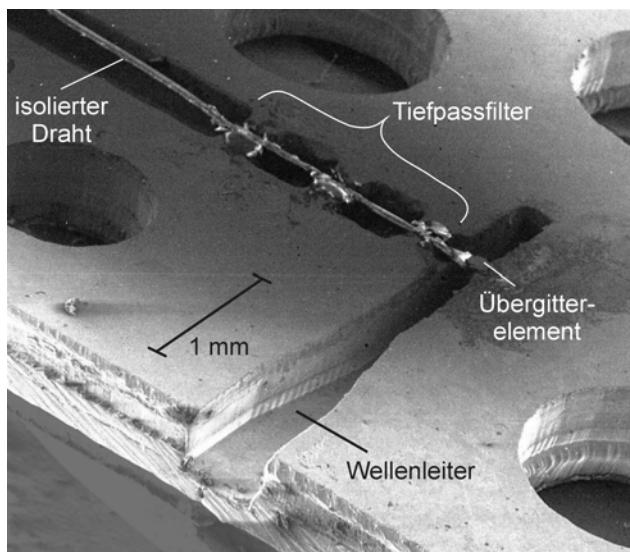


Abb. 2.2: Nickel-Oszillator: Eine Hälfte des fertig abgeformten Hohlleiterresonators mit Einbauten (aufgenommen mit einem Raster-elektronenmikroskop [Häu03_2])

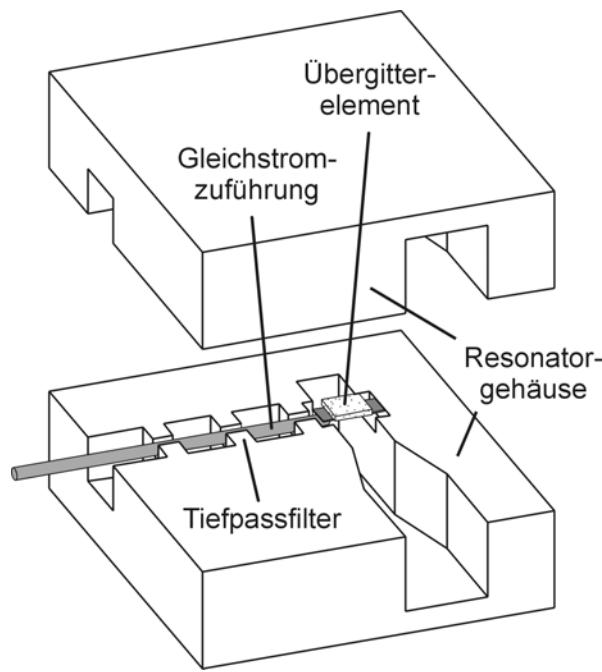


Abb. 2.3: Der Hohlraumresonator wird aus zwei Hälften zusammengesetzt
[Zeichnung: R. Reisser]

Anstatt aus Photolack ein räumliches Negativ zu strukturieren, um dieses dann galvanisch auf das gewünschte Positiv abzuformen, kann der Hohlraumresonator auch direkt auf photolithographischem Wege hergestellt werden. Da der Photolack, aus dem der Resonator dabei aufgebaut wird, allerdings ein Isolator ist, muss das fertige Relief noch mit einer leitenden Oberflächenbeschichtung versehen werden, bevor es seine Funktion als Wellenleiter erfüllen kann. Hierzu wird auf die beiden Hälften Gold aufgesputtert.

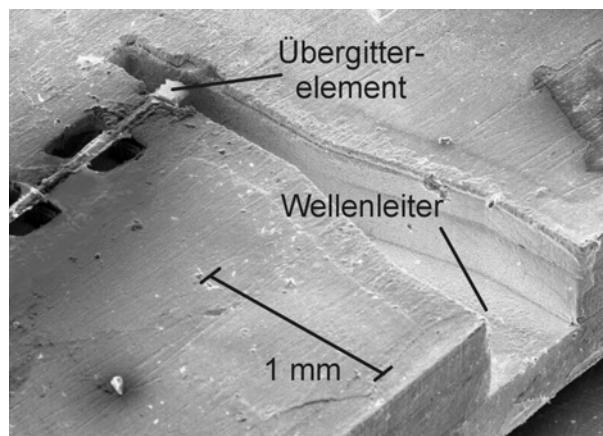


Abb. 2.4: SU-8-Oszillator: Rasterelektronenmikroskopische Aufnahme einer der beiden Resonatorhälften [M. Häußler]

Bei den verwendeten Übergitterelementen handelt es sich in beiden Fällen um dieselben, quasiplanaren Strukturen. Auf einem Substrat ($100\ \mu m \times 180\ \mu m \times 50\ \mu m$) aus n⁺-dotiertem GaAs befinden sich zwei Übergittermesas; ein kleiner mit einer Fläche von $18\ \mu m^2$ und ein großer, der rund $8000\ \mu m^2$ misst. Während der kleine Mesa das aktive Element darstellt, trägt der große lediglich zum Serienwiderstand bei. Grund hierfür ist, dass an ihm wegen seiner Größe und des damit verbundenen, bedeutend geringeren elektrischen Widerstandes auch erheblich weniger Spannung abfällt als am kleinen Mesa. Man bewegt sich daher noch im ohmschen Bereich seiner U-I-Charakteristik. Das aktive Element ist mit einer Au-Ge-Ni-Streifenleitung verbunden und wird mechanisch durch einen Polymid-Film stabilisiert. Das Übergitter ist auf einem Niveau von $2 \cdot 10^{17}\ cm^{-3}$ n-dotiert und besteht aus 70 Perioden, von denen sich jede aus jeweils einer $4,0\ nm$ dicken GaAs- und einer $0,9\ nm$ messenden AlAs-Schichten zusammensetzt. Mithilfe von leitfähigem Silber-Epoxyd-Kleber wird die Struktur mit dem Massekontakt an die Resonatorwand geklebt und die Streifenleitung mit der Gleichstromzuführung verbunden.

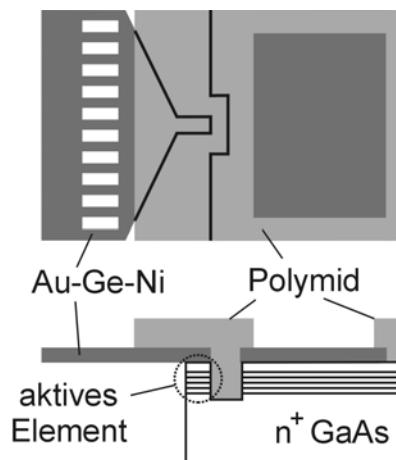


Abb. 2.5: Quasiplanare Übergitterstruktur
[Häu03_2]

Um zu verhindern, dass die Hochfrequenzstrahlung durch die Bias-Zuführung nach außen leckt, geschieht die Gleichstromversorgung über eine Koaxialleitung mit Tiefpassfilter. Der Tiefpass- bzw. Bandpassfilter (Stopband ca. 75 – 250 GHz) besteht aus einem Hohlleiter mit periodisch moduliertem, rechteckigem Querschnitt, in den ein isolierter Draht eingebettet ist, wie auf den Abbildungen 2.2, 2.3 und 2.4 jeweils gut zu erkennen ist.

Der Ausgangswellenleiter ist ein in der Höhe reduzierter Rechteckhohlleiter (Höhe $0,2\text{ mm}$, Breite $0,9\text{ mm}$), der an einem Ende kurzgeschlossen ist und in der anderen Richtung impedanzangepasst in einen Wellenleiter normaler Höhe ($0,45\text{ mm}$) übergeht. Die Cut-Off-Frequenz, die sich aus seinen geometrischen Abmessungen ergibt, liegt bei ca. 160 GHz . Abschließend wird die Hohlleiterstruktur noch in einer Messinghalterung fixiert, die mit einem Normanschluss versehen ist, so dass der Resonator verlustarm an andere Hohlleiterkomponenten angebunden werden kann. Abbildung 2.6 zeigt einen solchermaßen fertiggestellten SU-8-Oszillator.

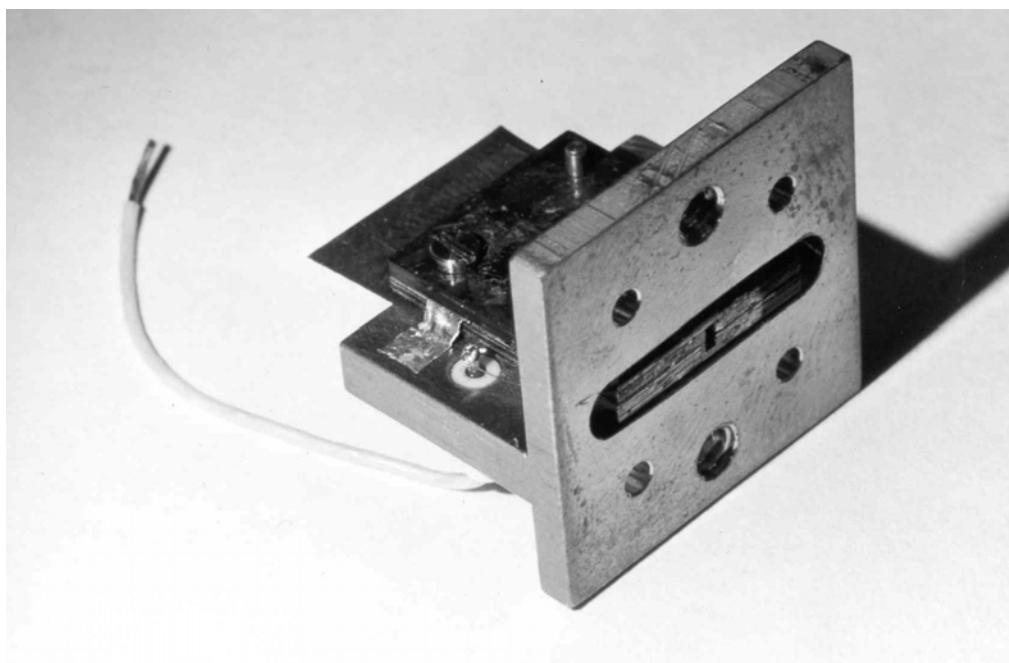


Abb. 2.6: SU-8-Oszillator mit Messing-Flansch; im Zentrum ist der aus zwei Hälften zusammengesetzte Hohlleiterausgang zu erkennen
[Aufnahme: M. Häußler]

2.2 Fremdfeldmultiplikator

In Kapitel 1.6 wurde eine zweite Möglichkeit dargestellt, wie sich Halbleiter-Übergitter zur Erzeugung von hochfrequenter Strahlung nutzen lassen: Durch **Multiplikation eines von außen aufgeprägten Feldes**. Die in diesem Zusammenhang beschriebene Messung ist das Ergebnis einer Zusammenarbeit mit D. G. Pavel'ev et al., der für Design und Herstellung des untersuchten Frequenzvervielfachers verantwortlich zeichnet. Das Bauelement besteht aus einem in Messing gearbeiteten Hohlleiterresonator, in den zwei antiparallel angeordnete Übergitterdioden als aktive Elemente eingebettet sind. Werden diese mit einem Wechselfeld

bestrahlt, reemittieren sie nicht nur bei der Frequenz des Erregerfeldes, sondern auch bei ganzzahligen Vielfachen davon.

Ähnlich wie im Falle der Bias-Oszillatoren ist auch der Hohlleiterresonator dieses Frequenzvervielfachers aus zwei Hälften zusammengesetzt. Hier werden die Hohlleiterstrukturen allerdings auf feinmechanischem Wege anteilig in kleine Messingblöcke gefräst und diese anschließend zusammengefügt. Zur Bias-Versorgung dient eine Koaxialleitung. Das Erregerfeld wird mit einem Hohlleiter (Cut-Off-Frequenz 60 GHz) an die beiden aktiven Elemente herangeführt. Die Abmessungen des Ausgangswellenleiters sind so gewählt, dass sich durch diesen nur die Oberwellen ausbreiten können, nicht aber das Primärfeld (Cut-Off-Frequenz 140 GHz). Dies ist wichtig, weil Ein- und Ausgangswellenleiter direkt ineinander übergehen, und auf diese Weise die Detektion der Harmonischen, die gemessen an der Leistung des treibenden Feldes stets schwach sind, nicht gestört wird. Abbildung 2.7 zeigt den messfertigen Vervielfacher. Vorne sieht man den Eingangswellenleiter, oben den Koaxialanschluss.

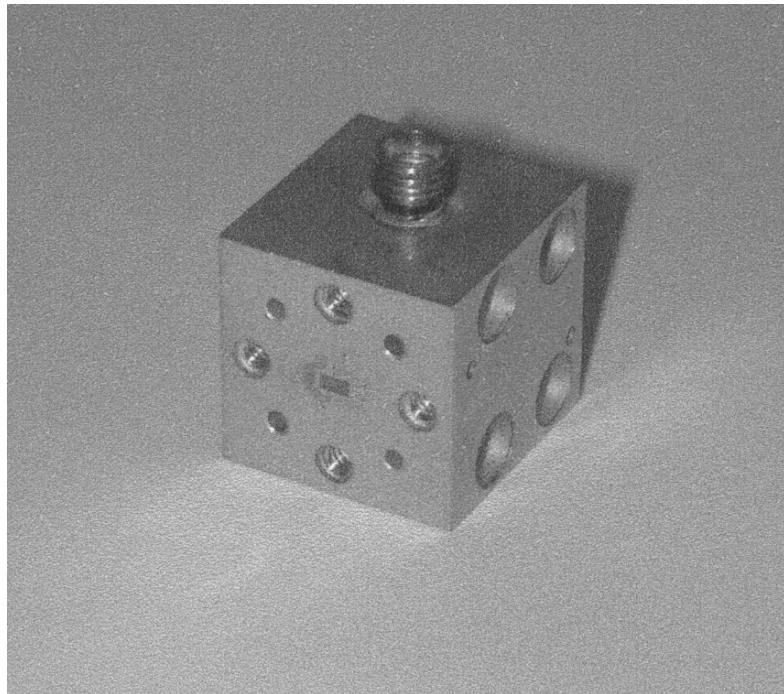
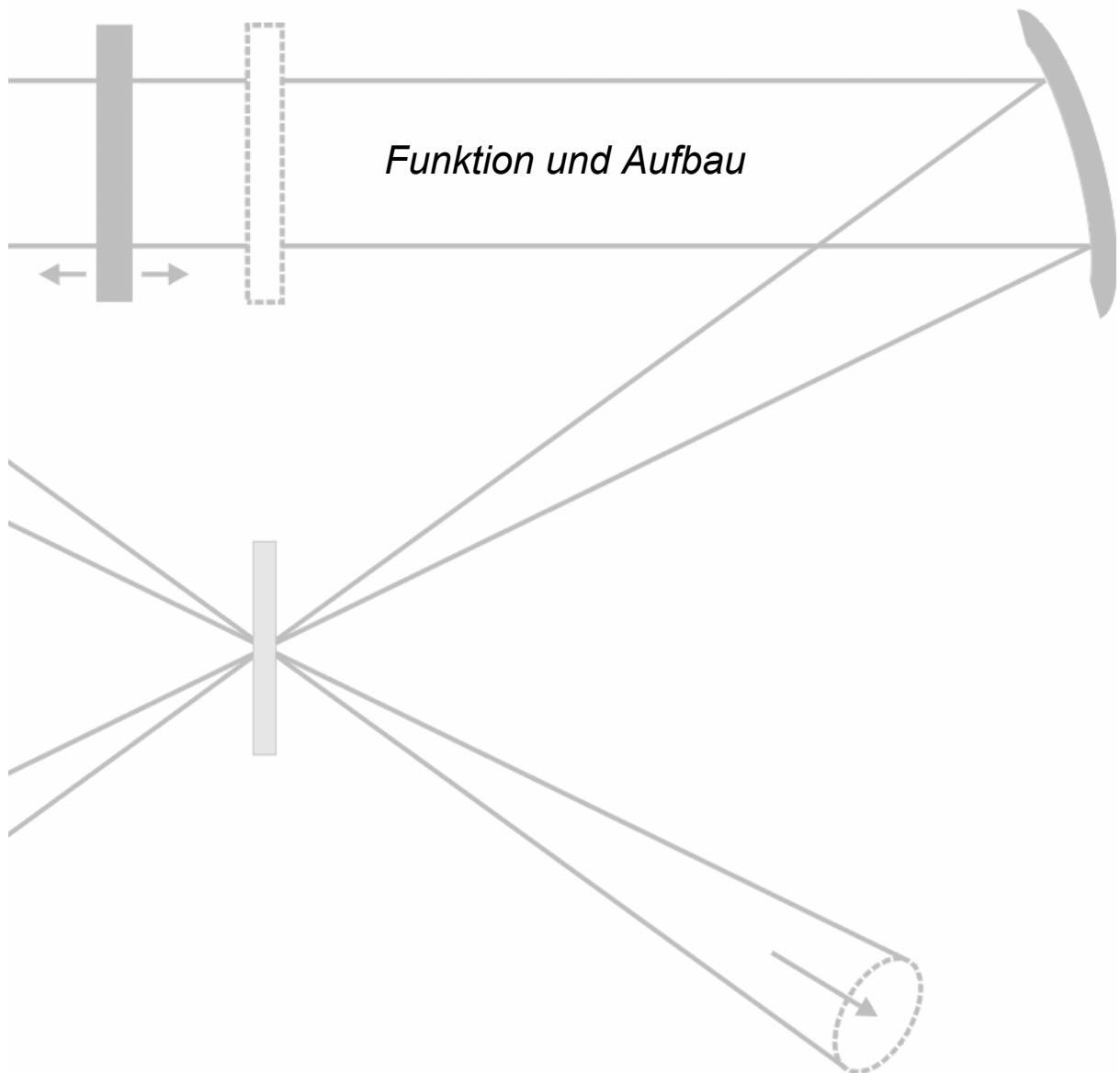


Abb. 2.7: Übergitter-Frequenzvervielfacher:
links vorne ist der Eingangshohlleiter zu sehen, oben der
Koaxialanschluss;
der Ausgangswellenleiter befindet sich auf der Rückseite

Das Fourier-Spektrometer



Kapitel 3

GRUNDLAGEN DER FOURIER-SPEKTROSKOPIE

3.1 Messprinzip

Das Herzstück eines jeden Fourier-Spektrometers ist das **Interferometer**. Es liefert primär ein vom Gangunterschied der beiden Teilstrahlen abhängiges Signal, das als Interferogramm bezeichnet wird. Dieses stellt die – durch die physikalischen Eigenschaften des Gerätes allerdings noch gewichtete – Autokorrelationsfunktion der einfallenden Strahlung dar. Durch eine Fourier-Transformation wird das Interferogramm dann in das zugehörige, natürlich gleichfalls gewichtete Spektrum umgerechnet. Ein Interferometer kann geometrisch unterschiedlich verwirklicht werden; Abbildung 3.1 zeigt schematisch einen Aufbau, wie er sich in dem von uns verwendeten Spektrometer findet. Diese Anordnung wird als Genzel-Interferometer bezeichnet.

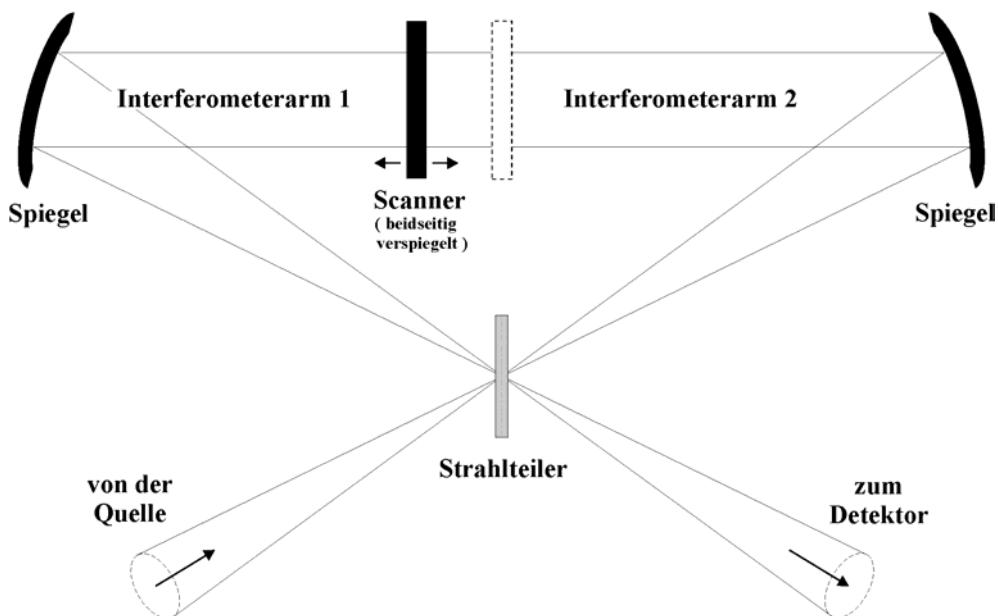


Abb. 3.1: Schematischer Aufbau eines Genzel-Interferometers mit gekoppelt-variablen Interferometerarmen

Die Emissionen einer Strahlungsquelle werden mithilfe einer geeigneten Optik gebündelt und fallen auf einen Strahlteiler. Hier kommt es zu einer Aufspaltung in zwei kohärente Teilstrahlen, einen reflektierten und einen transmittierten. Jeder durchläuft einen der beiden Interferometerarme, deren Längenverhältnis zueinander variabel ist; danach treffen sie wieder auf den Strahlteiler. Durch erneutes Splitting entstehen dort nun insgesamt vier Einzelstrahlen. Zwei davon verlassen das Interferometer zurück in Richtung Strahlungsquelle, die anderen beiden werden auf den Detektor fokussiert und kommen dort zur Interferenz. Der Detektor liefert ein Signal, das ein Maß für die Intensität der interferierenden Strahlung als Funktion des Gangunterschiedes der konstituierenden Teilstrahlen ist. Die optische Wegdifferenz γ zwischen den zwei interferierenden Strahlkomponenten summiert sich bei der vorliegenden Anordnung auf das vierfache der Strecke x , um die der Scanner verfahren wird, da die optische Weglängenänderung für jeden Arm

$$\Delta x = 2 \cdot |x| \quad (3.1)$$

beträgt und dies stets gegengleich, also:

$$\gamma = 2 \cdot \Delta x = 4 \cdot |x|. \quad (3.2)$$

Für die folgenden Überlegungen werden idealisierte Spiegel und Strahlteiler angenommen. Die Reflexionskoeffizienten der Spiegel sollen 1, Reflexions- und Transmissionskoeffizient des Strahlteilers wellenlängenunabhängig jeweils gleich $1/2$ sein:

$$R_{\text{mirror}} = R_m = r_m r_m^* = 1 \quad \text{und} \quad T_{\text{mirror}} = T_m = t_m t_m^* = 0, \quad (3.3)$$

$$R_{\text{beamsplitter}} = R_{bs} = r_{bs} r_{bs}^* = \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad T_{\text{beamsplitter}} = T_{bs} = t_{bs} t_{bs}^* = \frac{1}{2}. \quad (3.4)$$

Vor einer Verallgemeinerung auf beliebige, polychromatische Strahlung möchte ich das Interferogramm der Anschaulichkeit wegen für eine monochromatische Strahlungsquelle der Wellenzahl

$$\nu_0 = \frac{1}{\lambda_0} = \frac{f_0}{c}, \quad (3.5)$$

entsprechend einem Wellenvektor

$$k_0 = 2\pi \cdot v_0 = \frac{2\pi \cdot f_0}{c} = \frac{\omega_0}{c}, \quad (3.6)$$

ableiten. Das ins Interferometer eingekoppelte Strahlungsfeld habe die Amplitude

$$E_{in}(t) = E_0 \cdot e^{i\omega_0 t}. \quad (3.7)$$

Dann können die Feldamplituden der beiden, auf dem Detektor zur Interferenz gebrachten Teilstrahlen folgendermaßen ausgedrückt werden:

$$E_1(t, x) = r_{bs} t_{bs} \cdot E_0 \cdot e^{i(\omega_0 t - 2k_0 x)}, \quad (3.8)$$

$$E_2(t, x) = t_{bs} r_{bs} \cdot E_0 \cdot e^{i(\omega_0 t + 2k_0 x)}. \quad (3.9)$$

Nach dem Superpositionsprinzip überlagern sich diese zu

$$E_{det}(t, x) = E_1(t, x) + E_2(t, x). \quad (3.10)$$

Die vom Detektor registrierte Intensität beträgt

$$\begin{aligned} I_{det} &= |E_{det}|^2 = E_{det} E_{det}^* = (E_1 + E_2)(E_1 + E_2)^* \\ &= |E_1|^2 + |E_2|^2 + E_1 E_2^* + E_2 E_1^*. \end{aligned} \quad (3.11)$$

In Verbindung mit (3.4), (3.8) und (3.9) erhält man den folgenden Zusammenhang zwischen der Strahlungsintensität I_{det} am Detektor und dem Verfahrweg x des Scanners:

$$\begin{aligned} I_{det}(x) &= 2 \cdot r_{bs} r_{bs}^* t_{bs} t_{bs}^* E_0^2 + r_{bs} r_{bs}^* t_{bs} t_{bs}^* E_0^2 (e^{-4ik_0 x} + e^{4ik_0 x}) \\ &= 2 \cdot r_{bs} r_{bs}^* t_{bs} t_{bs}^* E_0^2 + r_{bs} r_{bs}^* t_{bs} t_{bs}^* E_0^2 (2 \cdot \cos(4k_0 x)) \\ &= 2 \cdot r_{bs} r_{bs}^* t_{bs} t_{bs}^* E_0^2 (1 + \cos(4k_0 x)) \\ &= \frac{1}{2} E_0^2 (1 + \cos(4k_0 x)) = \frac{1}{2} I_0 (1 + \cos(4k_0 x)). \end{aligned} \quad (3.12)$$

I_0 ist die im Amplitudenmaximum von der Quelle ins Interferometer eingekoppelte Feldintensität. In Einheiten der optischen Weglängendifferenz γ ergibt sich nach (3.2) entsprechend

$$I_{det}(\gamma) = \frac{1}{2} I_0 (1 + \cos(k_0 \gamma)) = \frac{1}{2} I_0 + \frac{1}{2} I_0 \cos(k_0 \gamma) \quad (3.13)$$

bzw. allgemein für einen beliebigen Strahlteiler (durch Vergleich der Zeilen 3 und 4 in (3.12))

$$I_{det}(\gamma) = 4R_{bs}T_{bs} \cdot \frac{1}{2} I_0 (1 + \cos(k_0 \gamma)) = 4R_{bs}T_{bs} \left(\frac{1}{2} I_0 + \frac{1}{2} I_0 \cos(k_0 \gamma) \right). \quad (3.14)$$

Eine monochromatische Quelle erzeugt also ein durch den maximalen Gangunterschied γ_{max} zwar beschränktes, im Prinzip aber unendlich periodisches Interferogramm⁵.

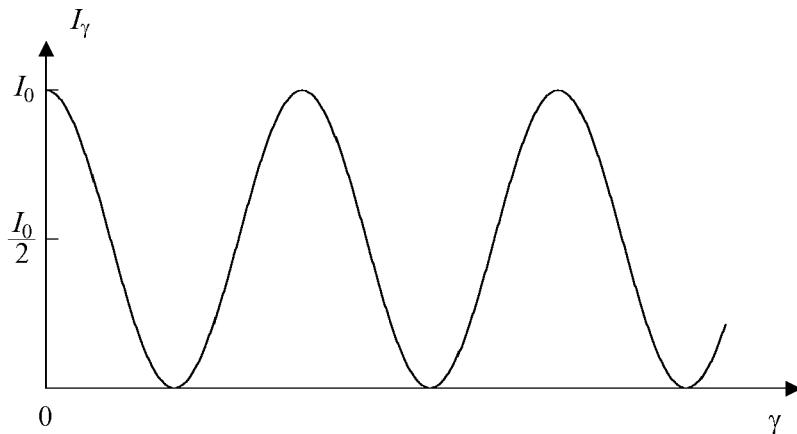


Abb. 3.2: Einseiten-Interferogramm für monochromatische Strahlung

Möchte man die Gültigkeit der Beziehung (3.13) auf beliebige, polychromatische Strahlung ausdehnen, ersetzt man I_0 durch den differentiellen Ausdruck

$$I(k)dk, \quad (3.15)$$

der die Intensität des Spektralelementes zwischen k und $k + dk$ angibt. $I(k)$ entspricht somit dem Emissionsspektrum der Strahlungsquelle. Integration über den gesamten Bereich führt auf

⁵ Hierbei handelt es sich um eine streng nur für Parallelstrahlung gültige Idealisierung. In der Realität wird das Aussehen des Interferogramms stark vom Auflösungsvermögen des Gerätes beeinflusst [Bel72, Chap. 11].

$$I_{det}(x) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} I(k)(1 + \cos(4kx)) dk \quad \text{bzw.} \quad (3.16)$$

$$I_{det}(\gamma) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} I(k)(1 + \cos(k\gamma)) dk. \quad (3.17)$$

Bei $\gamma = 0$ sind die Interferometerarme gerade gleich lang, so dass ***unabhängig von ihrer Wellenlänge alle spektralen Komponenten konstruktiv interferieren***. Dies bedeutet, dass die gesamte ins Interferometer eingekoppelte Strahlung dieses in der genannten Konstellation auch passiert:

$$I_{det}(\gamma = 0) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} I(k) \cdot 2 dk = \int_0^{\infty} I(k) dk = I_0. \quad (3.18)$$

Man bezeichnet die zugehörige Stellung des Scanners daher auch als ***Weißlichtposition*** und kann (3.17) dann in Äquivalenz zu (3.13) zerlegen und schreiben:

$$I_{det}(\gamma) = \frac{1}{2} I_0 + \frac{1}{2} \int_0^{\infty} I(k) \cos(k\gamma) dk \equiv \frac{1}{2} I_0 + \frac{1}{2} I_{int}(\gamma). \quad (3.19)$$

Der explizit von γ abhängende Term

$$I_{int}(\gamma) = \int_0^{\infty} I(k) \cos(k\gamma) dk \quad (3.20)$$

wird als ***Interferogrammfunktion*** bezeichnet. Um nun die Fourier-Transformation zur Anwendung bringen und das Spektrum berechnen zu können, muss die physikalisch motivierte und in diesem Sinne nur für positive Werte existierende Funktion $I(k)$ gleichermaßen für negative Wellenzahlen definiert werden. Dies ist eine Folge der Einführung der komplexen Schreibweise, siehe (A.12); vergleiche hierzu auch die Bemerkungen im Anhang am Ende von Kapitel A.1. Man definiert also eine erweiterte Spektralfunktion

$$I_{komp}(k) \equiv \frac{1}{2} I(k) \quad \text{mit} \quad (3.21)$$

$$I_{komp}(k) = I_{komp}(-k). \quad (3.22)$$

Aus (3.20) wird dann durch Umformung

$$I_{int}(\gamma) = \int_{-\infty}^{\infty} I_{komp}(k) \cos(k\gamma) dk . \quad (3.23)$$

Sowohl $I_{komp}(k)$ als auch $\cos(k\gamma)$ sind gerade Funktionen, und damit auch $I_{int}(\gamma)$. In der Praxis hat dies die angenehme Konsequenz, dass es genügt, das Interferogramm wie in Abbildung 3.2 halbseitig aufzunehmen; die Information, die in der zweiten Hälfte steckt, ist redundant. Die Fourier-Transformation zwischen Orts- und Impulsdomäne ist in Entsprechung zu (A.21) und (A.22) gegeben durch

$$F(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \cdot e^{-ikx} dx \quad \text{und} \quad (3.24)$$

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) \cdot e^{ikx} dk . \quad (3.25)$$

Handelt es sich bei $f(x)$ und $F(k)$ um reelle, gerade Funktionen, dann vereinfachen sich die Transformationsgleichungen:

$$F(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \cdot \cos(kx) dx , \quad (3.26)$$

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) \cdot \cos(kx) dk . \quad (3.27)$$

Danach lassen sich die Interferogrammfunktion $I_{int}(\gamma)$ und die Spektralfunktion $I_{komp}(k)$ ebenfalls als ein Paar korrespondierender Kosinustransformierter auffassen:

$$I_{komp}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} I_{int}(\gamma) \cdot \cos(k\gamma) d\gamma , \quad (3.28)$$

$$I_{int}(\gamma) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} I_{komp}(k) \cdot \cos(k\gamma) dk . \quad (3.29)$$

In Sachen Skalierung und Normierung der Transformationsgleichungen hat man, wie im Anhang, Kapitel A.1 näher ausgeführt, gewisse Freiheiten; die Definitionen (3.28) und (3.29) entsprechen wie (A.21) und (A.22) gängiger Konvention. Als Ergebnis dieser Betrachtungen kann damit festgehalten werden, dass die Fourier-Transformation grundsätzlich ein geeignetes Werkzeug ist, um aus einem gegebenen Interferogramm das zugehörige Spektrum zu berechnen. Allerdings muss jede Messung im Hinblick auf mögliche Artefakte durch die Digitalisierung kritisch hinterfragt werden. Im Zusammenhang damit sei hier auf den Anhang, Abschnitt B verwiesen, der ausführlich auf verschiedene Aspekte dieser Problematik eingeht.

3.2 Methodische Vorteile

Insbesondere in Konkurrenz zu dispersiven Gitter- und Prismenspektrometern aber auch gegenüber Fabry-Perot-Interferometern weisen Fourier-Spektrometer ein günstigeres Signal-Rausch-Verhältnis auf. Die Ursachen hierfür sind prinzipieller Natur und wurden von P. Fellgett [Fel51] und P. Jacquinot [Jac54] in theoretischen Arbeiten begründet.

An erster Stelle ist hier der **Multiplex-** oder **Fellgett-Vorteil** zu nennen. Bei allen dispersiven Spektroskopieverfahren ebenso wie bei der Fabry-Perot-Interferometrie wird vom Detektor während der Zeit τ , die die Aufzeichnung eines einzelnen Messwertes in Anspruch nimmt, nur ein sehr kleiner Ausschnitt des zu untersuchenden Frequenzbandes erfasst. Im Sinne einer hohen Auflösung ist es erstrebenswert, dieses Fenster möglichst klein zu wählen. Um das Spektrum in seiner Gesamtheit zu erhalten, müssen der interessierende Frequenzbereich durchfahren und N Spektralelemente zeitlich in Folge aufgenommen werden. Die Messzeit für ein vollständiges Spektrum beträgt somit $N \cdot \tau$, wobei N und damit die Messdauer im selben Verhältnis anwachsen wie die Auflösung. Im Gegensatz dazu „sieht“ der Detektor eines Fourier-Spektrometers bei der Aufnahme eines jeden von N Interferogrammwerten, was ebenfalls jeweils die Zeit τ in Anspruch nehme, das komplette Frequenzband. Bei weißem Rauschen, das unabhängig von der auf den Detektor einfallenden Strahlungsfrequenz und -leistung ist, ist das Signal-Rausch-Verhältnis aber proportional zur Quadratwurzel aus der Zeit, die erforderlich ist, um den gesamten Spektralbereich zu erfassen. Setzt man also gleiche Gesamtzeit voraus, ist das Signal-Rausch-Verhältnis eines Fourier-Spektrometers um den Faktor \sqrt{N} besser als bei dispersiver Spektroskopie. Andersherum ausgedrückt erreicht man mit dispersiven Verfahren erst nach N -fach längerer Messzeit ein vergleichbares Signal-Rausch-Verhältnis wie mit Fourier-spektroskopischen Methoden; dies macht sich insbesondere mit zunehmender Auflösung bemerkbar.

Wie schon erwähnt, gilt dieser von P. Fellgett beschriebene Multiplex-Vorteil ausschließlich bei intensitätsunabhängigem Rauschen, z.B. solchem thermischer Natur (intrinsisches Detektorrauschen). Er hat daher vor allem im Infraroten, wo in erster Linie thermische Detektoren zum Einsatz kommen, Bedeutung. Bei Verwendung von Detektoren, deren Rauschleistung von der Intensität der einfallenden Strahlung abhängig ist (wie im UV/VIS-Bereich in der Regel der Fall), geht er verloren.

Daneben gibt es noch den **Throughput-** oder **Jacquinot-Vorteil**. Er gilt gleichermaßen für alle optischen Systeme mit radialsymmetrischer Strahlgeometrie, also neben der Fourier-Spektroskopie z.B. auch für die Fabry-Perot-Interferometrie. Die axiale Symmetrie erlaubt die Verwendung von aufeinander abbildenden Loch- oder Ringblendensystemen zwischen Quelle und Detektor (gegenüber Spaltblenden bei den dispersiven Verfahren). Im Gegensatz zu den Betrachtungen im vorangegangenen Kapitel 3.1, denen unausgesprochen eine idealisierte, punktförmige Leuchtquelle zugrunde lag, gelten die folgenden Überlegungen nun unter der Annahme einer realen Strahlungsquelle endlicher Ausdehnung.

Parallel zur optischen Achse beträgt die Phasendifferenz für Strahlung der Frequenz f zwischen den beiden Interferometerarmen

$$\Delta\varphi(f, \gamma) = k(f) \cdot \gamma = \frac{2\pi \cdot f}{c} \cdot \gamma. \quad (3.30)$$

Strahlung, die schräg ins Interferometer gelangt, passiert dieses hingegen unter einem gewissen Inklinationswinkel α zur optischen Achse und erleidet eine etwas geringere Phasendifferenz [Jen57, p. 247]:

$$\Delta\varphi'(f, \gamma, \alpha) = k(f) \cdot \gamma'(\gamma, \alpha) = \frac{2\pi \cdot f}{c} \cdot (\gamma \cdot \cos \alpha) = \Delta\varphi(f, \gamma) \cdot \cos \alpha. \quad (3.31)$$

Entwickelt man den Kosinus unter Berücksichtigung der Tatsache, dass α extrem klein ausfällt (die Abmessungen der limitierenden Blenden sind äußerst gering im Verhältnis zur Länge des Strahlenganges, die in der Größenordnung von mehreren Metern liegen kann),

$$\cos \alpha = 1 - \frac{\alpha^2}{2!} \left(+ \frac{\alpha^4}{4!} - \frac{\alpha^6}{6!} + \dots \right), \quad (3.32)$$

bedeutet dies für die Phasenverschiebung des schräg eingekoppelten Strahls:

$$\Delta\varphi'(f, \gamma, \alpha) \approx \Delta\varphi(f, \gamma) \cdot \left(1 - \frac{\alpha^2}{2}\right). \quad (3.33)$$

Verursacht nun der achsenparallele Strahlungsanteil gerade ein Intensitätsmaximum aufgrund konstruktiver Interferenz, so findet sich ein Minimum erster Ordnung infolge destruktiver Interferenz bei Erfüllung der Bedingung

$$\Delta\varphi(f, \gamma) - \Delta\varphi'(f, \gamma, \alpha) = \frac{2\pi \cdot f}{c} \cdot \gamma \cdot \frac{\alpha^2}{2} = \pi. \quad (3.34)$$

Nach α^2 aufgelöst folgt daraus

$$\alpha^2 = \frac{c}{f \cdot \gamma}. \quad (3.35)$$

Diese Relation wird für gegebenes α zuerst von der höchsten im Spektrum enthaltenen Frequenz f_{max} erfüllt oder, falls die hochfrequenten Anteile aus dem Spektrum herausgefiltert werden, durch den maximalen optischen Gangunterschied γ_{max} . Die Grenzbedingung für den minimalen Winkel, für den die Beziehung (3.34) überhaupt erfüllbar ist, ist durch das simultane Eintreten beider Ereignisse definiert:

$$\alpha_{min}^2 = \frac{c}{f_{max} \gamma_{max}} \quad \text{bzw.} \quad \alpha^2 \geq \frac{c}{f_{max} \gamma_{max}}. \quad (3.36)$$

Mit dem Gangunterschied γ_{max} kann eine Spektralkomponente f_γ in Beziehung gesetzt werden, nämlich

$$\gamma_{max} = \frac{\lambda_\gamma}{2} = \frac{1}{2 \cdot v_\gamma} = \frac{c}{2 \cdot f_\gamma}. \quad (3.37)$$

Es handelt sich hierbei um die Frequenz

$$f_\gamma = \frac{c}{2 \cdot \gamma_{max}}, \quad (3.38)$$

die mindestens erforderlich ist, um bei maximalem Gangunterschied und **verschwindendem Winkel** α , entsprechend dem Maximum in γ' , gerade noch destruktive Interferenz, d.h. eben

noch eine Phasendifferenz π zwischen den beiden Interferometerarmen zu bekommen. In Verbindung mit (3.36) bedeutet dies:

$$\alpha_{min}^2 = 2 \frac{f_\gamma}{f_{max}}. \quad (3.39)$$

Der bei gegebener Apparatur geometrisch maximal mögliche Inklinationswinkel sollte im Sinne einer optimalen Ausnutzung der im Hauptmaximum steckenden Strahlungsintensität also naheliegenderweise etwas kleiner, höchstens gleich α_{min} sein. Denn lässt man Inklinationswinkel größer als α_{min} zu, nimmt die Amplitude des auf dem Detektor registrierten Signals aufgrund der dann auftretenden destruktiven Interferenz effektiv wieder ab. Für den zugehörigen, maximal nutzbaren Raumwinkel ergibt sich so

$$\Omega_{max} = \pi \cdot \tan^2 \alpha_{min} \quad (3.40)$$

bzw. unter Anwendung der hier zulässigen Kleinwinkelnäherung für den Tangens

$$\Omega_{max} \approx \pi \cdot \alpha_{min}^2 \stackrel{(3.36)}{=} \pi \frac{c}{f_{max} \gamma_{max}} \stackrel{(3.39)}{=} 2\pi \frac{f_\gamma}{f_{max}}. \quad (3.41)$$

Man betrachte nun den Strahlungsfluss F (Leistung) durch das Spektrometer. Sieht man von der in der Realität unvermeidbaren teilweisen Absorption und Streuung einmal ab, ist der Fluss eine Erhaltungsgröße. Es sei gegeben eine Strahlungsquelle der Helligkeit B (Leistung pro emittierender Fläche und Raumwinkel) und Fläche a_s . Flächennormale und optische Achse schließen den Winkel φ_s ein. Bestrahlt werde ein Flächenelement der Ausdehnung a_d im Abstand r , der Winkel zwischen dessen Normalen und der optischen Achse sei φ_d . Dann lässt sich der Fluss in das dadurch definierte Raumwinkelement wie folgt darstellen:

$$F = \frac{B \cdot (a_s \cdot \cos \varphi_s) \cdot (a_d \cdot \cos \varphi_d)}{r^2}. \quad (3.42)$$

Führt man noch die Projektion

$$A_x \equiv a_x \cdot \cos \left(\vec{n}(a_x), \frac{\vec{\gamma}}{\gamma} \right) \quad (3.43)$$

(mit dem Normalenvektor \vec{n} von a_x) als die von der Strahlung senkrecht durchsetzte Fläche ein, gelangt man zu

$$\dot{E} \equiv \frac{F}{B} = \frac{A_s}{r^2} \cdot A_d = \Omega_s \cdot A_d . \quad (3.44)$$

Die den relativen Strahlungsdurchsatz bezeichnende, in Einheiten einer Fläche angegebene Größe \dot{E} wird Étendue⁶ genannt und ist eine von der konkreten Beleuchtungsstärke unabhängige Gerätekonstante, bestimmt allein durch die Geometrie des Aufbaus. Im Falle des Fourier-Spektrometers wird man versuchen eine Anordnung zu wählen, in welcher der Raumwinkel Ω_s kleiner oder gleich Ω_{max} aus (3.41) ist:

$$\dot{E}_{Fourier-Spektrometer} = \Omega_s \cdot A_d \leq \Omega_{max} \cdot A_d = 2\pi \frac{f_\gamma}{f_{max}} \cdot A_d . \quad (3.45)$$

Der Étendue ist also proportional zum Strahlquerschnitt und zur Auflösung der Apparatur.

Welchen relativen Strahlungsdurchsatz erhält man demgegenüber mit einem dispersiv arbeitenden Spektrometer? Der abgebildete Raumwinkel wird in dem Fall bestimmt durch die Fläche des ausblendenden Spaltes (Länge l , Breite b) und beträgt

$$\Omega_s = \frac{A_{Spalt}}{r^2} = \frac{l \cdot b}{r^2} . \quad (3.46)$$

Für ein Spektrum mit kontinuierlicher Intensitätsverteilung und näherungsweise linearer Dispersionsrelation gilt [Bel72, Chap. 2]

$$\frac{b}{r} \approx \frac{\delta f}{f_{max}} . \quad (3.47)$$

Daraus folgt für den Raumwinkel

$$\Omega_s = \frac{l}{r} \frac{\delta f}{f_{max}} \quad (3.48)$$

⁶ Den Étendue kann man sich als eine Art „Wirkungsquerschnitt“ des Spektrometers für die Strahlung vorstellen, worauf auch die Dimension dieser Größe hindeutet.

bzw. für den Étendue

$$\dot{E}_{\text{Dispersionsspektrometer}} = \Omega_s \cdot A_d = \frac{l}{r} \frac{\delta f}{f_{\max}} \cdot A_d . \quad (3.49)$$

Im Falle gleichen Auflösungsvermögens und gleich großer, bestrahlter Detektorflächen lassen sich die Ergebnisse (3.45) und (3.49) für Fourier- und Dispersionsspektrometer unmittelbar miteinander vergleichen; man findet:

$$\frac{\dot{E}_{\text{Fourier-Spektrometer}}}{\dot{E}_{\text{Dispersionsspektrometer}}} = 2\pi \frac{r}{l} . \quad (3.50)$$

Selbst ein lichtstarkes Gitterspektrometer weist ein Verhältnis r/l von wenigstens 30 auf, so dass der Étendue eines Fourier-Spektrometers, d.h. dessen Vermögen, Strahlung bis zum Detektor zu transmittieren und damit für die Messung zu nutzen, bei gleicher Helligkeit B der Quelle nach (3.50) mindestens um einen Faktor 180 höher liegt. In der Praxis zeigt sich jedoch, dass der Throughput-Vorteil weniger bestimmend für die Verbesserung des Signal-Rausch-Verhältnisses ist als der Multiplex-Vorteil. Denn auch die Fourier-Spektroskopie erfordert nach (3.41) in Abhängigkeit vom verlangten Auflösungsvermögen den Einsatz von Aperturblenden. Und durch optische Komponenten wie den Strahlteiler wird der theoretisch höhere Strahlungsdurchsatz weiter herabgesetzt.

3.3 Technologische Beschränkungen

Trotz der im vorangegangenen Abschnitt beschriebenen Vorzüge hat das Verfahren der Fourier-Spektroskopie aber natürlich auch gewisse Grenzen. Ein limitierendes Element des Fourier-Spektrometers ist der eben genannte Strahlteiler. Ideale Strahlteiler, wie zu Beginn dieses Kapitels angenommen, deren Reflektivität und Transmissivität wellenlängenunabhängig jeweils $1/2$ betragen, existieren nicht. Die bei unseren Experimenten verwendeten Strahlteiler aus Mylar-Folie (Polyethylenterephthalat, PET) verschiedener Dicke zeigen materialbedingte Absorptionsbanden wie auch bei bestimmten, äquidistant gelegenen Wellenlängen so gut wie überhaupt keine Reflexion. Diese letztgenannte Eigenschaft ergibt sich aus dem Prinzip, nach dem die Strahlzerlegung an Folien und dünnen Schichten stattfindet, nämlich durch Vielfachreflexion und Interferenz an planparallelen Mediengrenzen.

Aus den Fresnelschen Formeln lässt sich ableiten, dass es in Abhängigkeit von Einfallswinkel und Wellenlänge der Strahlung Konstellationen gibt, bei denen die reflektierten Anteile praktisch vollständig destruktiv interferieren. Die Strahlung durchläuft in diesem Fall nur den in Transmission erreichbaren Interferometerarm und wird dann nach erneutem Durchgang durch den Strahlteiler zur Quelle zurückgeworfen. Dieser von Fabry-Perot-Interferometern her bekannte Effekt tritt im übrigen nicht nur am Strahlteiler auf, sondern an allen dünnen Fenstern, Filtern und sonstigen planparallelen, (semi-)transparenten Schichten, die in den Strahlengang eingebracht werden.

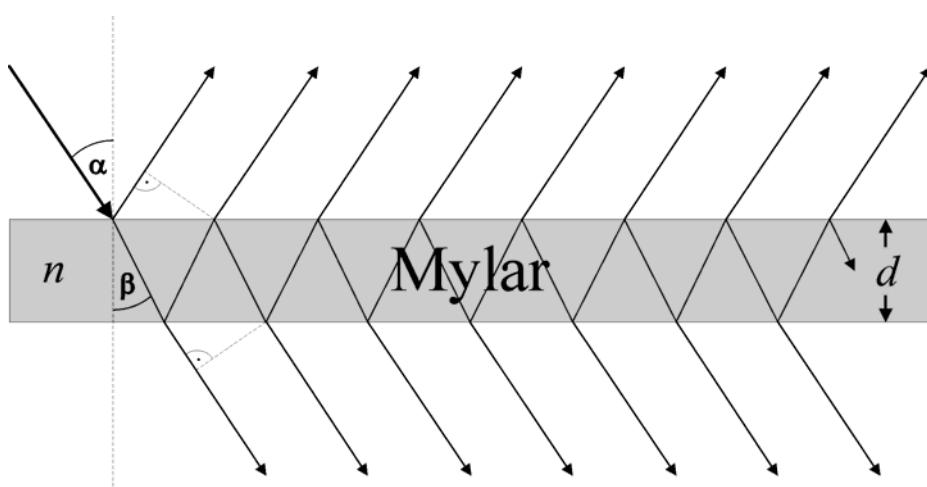


Abb. 3.3: Zerlegung eines Strahls am Strahlteiler durch Vielfachreflexion

Man betrachte also den optischen (nicht den rein geometrischen !) Gangunterschied Δ zwischen benachbarten reflektierten oder transmittierten Teilstrahlen. Nimmt man für das brechende Medium einen Brechungsindex n an, beträgt dieser

$$\Delta = \frac{2nd}{\cos \beta} - 2d \tan \beta \cdot \sin \alpha = \frac{2nd}{\cos \beta} - \frac{2d \sin \beta \cdot \sin \alpha}{\cos \beta}. \quad (3.51)$$

Unter Verwendung des Snelliusschen Brechungsgesetzes und der trigonometrischen Identität

$$\sin^2 r + \cos^2 r = 1 \quad (3.52)$$

kann (3.51) vereinfacht werden zu

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{2n^2 d}{n \cos \beta} - \frac{2d \sin^2 \alpha}{n \cos \beta} = \frac{2n^2 d - 2d \sin^2 \alpha}{\sqrt{n^2(1 - \sin^2 \beta)}} \\ &= \frac{2d(n^2 - \sin^2 \alpha)}{\sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha}} = 2d \sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha}. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Aus den Bedingungen für konstruktive bzw. destruktive Interferenz erhält man für die charakteristischen Wellenzahlen in Transmission:

$$v_{konstr. Interf. (Transmission)} = \frac{k}{2d \sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha}} \quad \text{und} \quad (3.54)$$

$$v_{destr. Interf. (Transmission)} = \frac{k + 1/2}{2d \sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha}}, \quad k \in \mathbb{Z}_0. \quad (3.55)$$

In Reflexion muss für den von der Grenzfläche zum optisch dichteren Mylar zurückgeworfenen Primärstrahl zusätzlich ein Phasensprung von π berücksichtigt werden, so dass sich die Interferenzbedingungen umkehren:

$$v_{konstr. Interf. (Reflexion)} = \frac{k + 1/2}{2d \sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha}} \quad \text{und} \quad (3.56)$$

$$v_{destr. Interf. (Reflexion)} = \frac{k}{2d \sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha}}, \quad k \in \mathbb{Z}_0. \quad (3.57)$$

Der Winkel, unter dem die Strahlung bei unserem Gerät auf den Strahlteiler fällt, beträgt in etwa 15° , der mittlere Brechungsindex von Mylar werde zu 1,60 angenommen. Damit gelten die folgenden Beziehungen:

$$\nu_{k, \text{konstr. Interf. (Reflexion)}}(d) \approx \frac{k+1/2}{3,16 \cdot d} \quad \text{und} \quad (3.58)$$

$$\nu_{k, \text{destr. Interf. (Reflexion)}}(d) \approx \frac{k}{3,16 \cdot d}, \quad k \in \mathbb{N}_0. \quad (3.59)$$

Im Bereich der sich aus (3.59) ergebenden Wellenzahlen ist das Fourier-Spektrometer bei vorgegebenem Strahlteiler also nicht sensitiv. Die nachstehende Tabelle 3.1 gibt eine Übersicht über die Arbeitsbereiche der in den Experimenten verwendeten Strahlteiler.

Strahlteiler Mylar 125 μm								
	[cm^{-1}]		12,7		38,0		63,3	
Maxima	[THz]		0,38		1,14		1,90	
Minima	[cm^{-1}]	0		25,3		50,6		75,9
	[THz]	0		0,76		1,52		2,28

Strahlteiler Mylar 75 μm								
	[cm^{-1}]		21,1		63,3		105,5	
Maxima	[THz]		0,63		1,90		3,16	
Minima	[cm^{-1}]	0		42,2		84,4		126,6
	[THz]	0		1,27		2,53		3,80

Strahlteiler Mylar 50 μm								
	[cm^{-1}]		31,6		94,9		158,2	
Maxima	[THz]		0,95		2,85		4,75	
Minima	[cm^{-1}]	0		63,3		126,6		189,9
	[THz]	0		1,90		3,80		5,70

Tab. 3.1: Nach (3.58) und (3.59) berechnete Wirkungsextrema der verwendeten Strahlteiler

Kapitel 4

GERÄTEAUFBAU UND VERSUCHSANORDNUNG

4.1 Aufbau des Spektrometers

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde ein Fourier-Spektrometer der Firma **Bruker**, Modell **IFS 113v**, verwendet. Es handelt sich dabei um ein **Rapid-Scan-Spektrometer** mit einseitiger Interferogrammaufnahme, das für den Einsatz im nahen, mittleren und fernen Infrarotbereich ausgelegt ist. Das Setup des Gerätes wurde so modifiziert, dass sich damit Emissionsmessungen an externen Strahlungsquellen vornehmen lassen.

Das IFS 113v ist aus einzelnen Modulen aufgebaut und besteht aus einer Reihe von miteinander verbundenen Kammern, in denen die verschiedenen Funktionsgruppen räumlich voneinander getrennt untergebracht sind. Das Kammersystem ist derart konstruiert, dass es hermetisch gegen den Außenraum abgeschlossen und so als Ganzes evakuiert werden kann. Auf diese Weise ist es möglich, die im Infraroten auftretende, störende Absorption und Streuung durch atmosphärische Bestandteile wie Wasserdampf, Kohlendioxid und diverse Spurengase zu verringern. Für unsere Messungen schien es jedoch von Vorteil, das Gerät mit einer Öffnung zu versehen, durch die sich ein externes Strahlungsfeld möglichst frei von Verlusten und sonstigen, durch ein Fenster verursachten Artefakten in den Strahlengang einkoppeln lässt. Die Absorption durch die Atmosphäre muss damit zwar in Kauf genommen werden; da unser Interesse jedoch Linienspektren galt, auf deren Frequenzen wir zudem in gewissen Grenzen Einfluss nehmen konnten, spielt dies eine eher untergeordnete Rolle, solange nur Emissions- und Absorptionslinien oder -banden nicht genau zusammenfallen. Abbildung 4.1 zeigt den Aufbau des Fourier-Spektrometers einschließlich eines freitragenden, fest an der Außenseite des Gehäuses angebrachten Experimentiertisches.

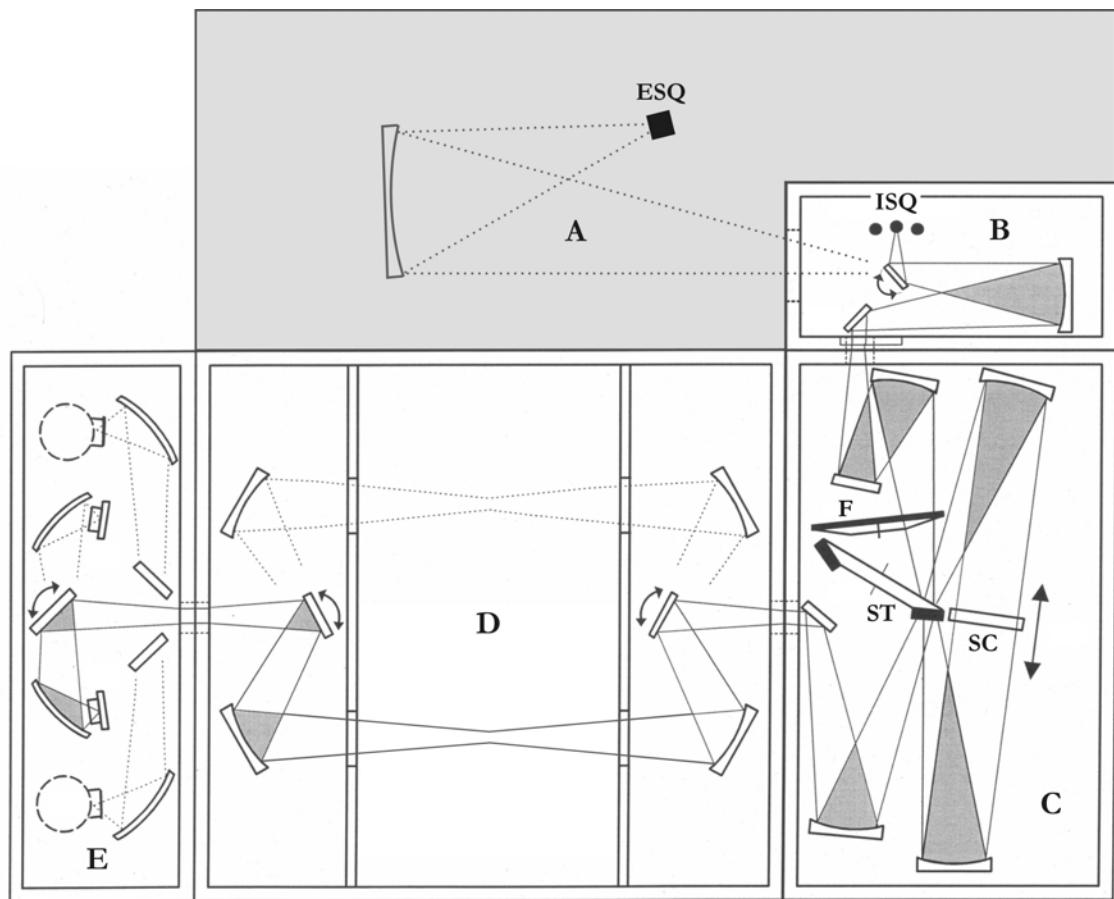


Abb. 4.1: Schemazeichnung des Fourier-Spektrometers Bruker IFS 113v

- A: Am Gehäuse angebrachte Experimentierplattform, darauf externe Strahlungsquelle (ESQ)
- B: Kammer mit internen Strahlungsquellen (ISQ)
- C: Interferometerkammer mit Filter- (F) und Strahlteilerwechselvorrichtung (ST), Scanner (SC)
- D: Probenkammer
- E: Kammer mit Detektoren

Kernstück des IFS 113v ist ein Interferometer in Genzel-Anordnung mit gekoppelt-variablen Armen (vgl. auch Kapitel 3, Abb. 3.1). Der Hauptvorteil gegenüber einem klassischen Michelson-Interferometer besteht darin, dass die optische Wegdifferenz zwischen den beiden interferierenden Teilstrahlen das vierfache der Strecke beträgt, um die der beidseitig verspiegelte Scanner (SC) verfahren wird (und damit doppelt soviel wie beim Michelson-Interferometer). Dies kommt der erreichbaren Auflösung insbesondere bei Untersuchungen an sehr langwelliger Strahlung im Ferninfraroten zugute. Denn es ist nicht ganz einfach, den dynamischen Spiegel so zu bewegen, dass die Kongruenz von ein- und ausfallendem Strahlenbündel auch über längere Verfahrwege hinreichend gewährleistet ist. Auf die genannte Weise können die Anforderungen an die mechanische Präzision des Gerätes auf einem ökonomisch günstigeren Niveau gehalten werden.

Ein weiterer Vorzug der Genzel-Anordnung liegt im flacheren Einfallswinkel auf den Strahlteiler, der beim IFS 113v rund 15° beträgt. Dadurch werden Polarisationseffekte, wie sie im Bereich um den Brewster-Winkel herum auftreten und bei einem Interferometer in Michelson-Anordnung daher häufig zu beobachten sind, weitgehend vermieden. Dies bedeutet insofern einen Vorteil, als die Polarisation den Étendue (siehe Kapitel 3.2) in der Regel herabsetzt: Ist bereits die einfallende Strahlung polarisiert, und ist diese Polarisationsebene derjenigen des vom Strahlteiler reflektierten Anteils nicht parallel, so sind nur die (in Projektion) parallelen Komponenten nutzbar. Im Extremfall (wenn nämlich die beiden Ebenen genau senkrecht aufeinander stehen) bedeutet dies, dass überhaupt keine Reflexion stattfindet; das Spektrometer versagt den Dienst. Und ist das einfallende Licht unpolarisiert, verringert sich der Wirkungsgrad des Spektrometers generell um die Hälfte. Es besteht also ein vitales Interesse daran, diesen Effekt nach Möglichkeit zu unterbinden.

Entsprechend seiner ursprünglichen Bestimmung zur Messung von Absorptions- und Transmissionskoeffizienten besitzt das Spektrometer drei wassergekühlte, interne Strahlungsquellen (ISQ): Eine Quecksilberdampflampe für den Ferninfrarotbereich (bis etwa 15 THz oder 500 cm^{-1}), eine Siliziumkarbidlampe für mittleres Infrarot ($3 - 120\text{ THz}$ bzw. $100 - 4000\text{ cm}^{-1}$) sowie eine Halogenlampe für das Nahinfrarote ($60 - 300\text{ THz}/2000 - 10000\text{ cm}^{-1}$). Über einen den Strahlungsquellen gegenüberliegenden, positionierbaren Spiegel kann die Strahlung der jeweils verwendeten Quelle eingekoppelt werden. Der Spiegel lässt sich auch ganz aus dem Strahlengang herausschwenken; in diesem Fall „blickt“ das Spektrometer durch die Öffnung in Kammer B nach draußen auf die Experimentierplattform (A). Da wir externe Strahler charakterisieren wollten, waren die internen Quellen für unsere Messungen ohne unmittelbaren Belang. Mittelbar wurden sie dennoch benötigt, zum einen, um das Spektrometer zu justieren, zum anderen, um das Gesamtsystem unter den gegebenen Bedingungen auf Durchlässigkeit bei bestimmten Wellenlängen hin überprüfen zu können.

Zur notwendigen optischen Tiefpassfilterung, vergleiche Kapitel B.3, wird normalerweise ein Filter in den Strahlengang eingebracht. Das IFS 113v verfügt hierzu vor dem Interferometer über ein Wechselrad (F), in dem maximal 4 Filter aufgespannt und je nach Bedarf in den Strahlengang hineingedreht werden können. Bei unseren Experimenten wurden Filter aus schwarzer Polyethylenfolie eingesetzt, die im Bereich zwischen 300 GHz und 18 THz ($10 - 600\text{ cm}^{-1}$) gute Transmissionseigenschaften besitzen. Oberhalb davon absorbiert das Material zunehmend, und Strahlung ab etwa 30 THz (1000 cm^{-1}) wird praktisch vollständig geschluckt. Allerdings zeigt schwarzes Polyethylen auch zu sehr niedrigen Frequenzen hin

Absorption, so dass es für Messungen deutlich unterhalb von 300 GHz (10 cm^{-1}) nur noch bedingt geeignet ist. In diesen Fällen erfolgte die Tiefpassfilterung mithilfe eines $0,8\text{ mm}$ dicken, einseitig mit Granatpulver beschichteten Quarzfilters, der im Kryostatengehäuse in einer schwenkbaren Halterung direkt vor dem Detektor angebracht ist und Strahlung bis etwa $1,5\text{ THz}$ (50 cm^{-1}) ohne nennenswerte Schwächung passieren lässt. Danach setzt spürbare Absorption ein, und ab ca. 3 THz (100 cm^{-1}) sperrt der Filter dann.

Auf die beiden Interferometerarme aufgeteilt wird die Strahlung mittels dünner Folien aus Mylar (Polyethylenterephthalat, PET), die wie auch die Filter in einem Wechselrad (ST) untergebracht sind. In der gegenwärtigen Konfiguration ist das Spektrometer mit insgesamt 6 solchen Strahlteilerfolien unterschiedlicher Dicke ausgerüstet: $3,5\text{ }\mu\text{m}$, $6\text{ }\mu\text{m}$, $12\text{ }\mu\text{m}$, $50\text{ }\mu\text{m}$, $75\text{ }\mu\text{m}$ und $125\text{ }\mu\text{m}$. Die Foliendicke entscheidet, wie in Kapitel 3.3 erläutert, über die jeweiligen Nutzungsbereiche. Da sich unsere Messungen auf den Spektralbereich zwischen 0 und $1,5\text{ THz}$ ($0 - 50\text{ cm}^{-1}$) konzentrierten, verwendeten wir wahlweise die Strahlteiler mit $50\text{ }\mu\text{m}$, $75\text{ }\mu\text{m}$ und $125\text{ }\mu\text{m}$ Dicke.

Um hochauflöste Interferogramme aufnehmen zu können, bedarf es neben einer präzisen mechanischen Führung des Scanners eines Systems, mit dem sich dessen Position entsprechend genau bestimmen lässt. Das IFS 113v nutzt dazu einen He-Ne-Laser. Der Laserstrahl wird mithilfe eines kleinen Michelson-Interferometers, das sich seitlich unter dem Genzel-Interferometer befindet und dessen Scanner mitbenutzt, moduliert und fällt auf eine photosensitive Diode. Aufgrund der Monochromasie des Laserlichts ermöglicht die Periodizität dieses Signals dann eine relative Ortsbestimmung. Gleichzeitig wird mit einer kleinen Glühbirne ein Weißlichtinterferogramm erzeugt. Da dieses praktisch nur aus einem einzigen, scharfen Intensitätspeak besteht, stellt es einen ausgezeichneten Referenzpunkt dar. Nach dem Nyquist-Kriterium muss das Interferogramm der Probenstrahlung in Entsprechung zu Kapitel B.2 mindestens zweimal pro Modulationsperiode, verursacht durch die höchste im Signal enthaltene Frequenzkomponente, gesampelt werden. Nimmt man die Extrema des modulierten Laserstrahls als Zählgröße (zwei pro Periode), bedeutet dies, dass die Laserlinie (15798 cm^{-1} bzw. $632,8\text{ nm}$) eine obere Frequenzgrenze markiert. Berücksichtigt man weiterhin den Umstand, dass das Genzel-Interferometer das Probensignal doppelt so schnell moduliert wie das Michelson-Referenzinterferometer den Laser, so ergibt sich im Falle unseres Gerätes eine absolute obere Messbereichsgrenze von etwa 235 THz .

Für diesen Messbereich bietet das IFS 113v insgesamt sechs verschiedene Detektoren an: Zwei bei Raumtemperatur betriebene, pyroelektrische DTGS-Detektoren (**D**euteriertes **T**ritylinsulfat) für FIR und MIR, einen MCT-Detektor (**M**ercury, **C**admium, **T**ellur) für MIR (gekühlt auf Stickstofftemperatur), einen InSb-Detektor (**N**IR, ebenfalls mit flüssigem Stickstoff gekühlt) sowie zwei heliumgekühlte Si-Bolometer (FIR). Um insbesondere im Ultrafern infraroten bei Frequenzen unterhalb von einem Terahertz ($< 33 \text{ cm}^{-1}$) noch mit ausreichender Empfindlichkeit messen zu können, wurde mit einem auf die Temperatur flüssigen Heliums gekühlten Si-Bolometer gearbeitet.

Ein Bolometer ist ein thermischer Detektor und besteht im Wesentlichen aus einem Strahlungsabsorber, der mit einem Kältebad konstanter Temperatur in Kontakt steht. Trifft Strahlung auf den Absorber, erhöht sich dessen Temperatur proportional zur absorbierten Strahlungsleistung. Diese Temperaturänderung wird z.B. in Form einer elektrischen Widerstandsänderung des Absorbers erfasst. Durch Wärmeleitung kommt es wieder zum Temperaturausgleich mit dem Bad. Die dafür benötigte Relaxationszeit τ ist eine für das Bolometer charakteristische Größe, für die in Abhängigkeit von der Wärmekapazität C des Absorbers und der Wärmeleitfähigkeit G zum Reservoir gilt:

$$\tau = \frac{C}{G}. \quad (4.1)$$

Erwünscht ist eine kleine thermische Zeitkonstante, also eine möglichst geringe Wärmekapazität des Absorbers bei gleichzeitig guter Wärmeleitung. In "Hot-Electron-Bolometern", zu denen das von uns verwendete Si-Bolometer zählt, wird eine dünne (halb-)leitende Schicht als Absorber verwendet. Ein einfallendes Photon überträgt seine Energie auf ein Elektron, das nun mit anderen Elektronen oder auch mit Phononen wechselwirken kann. Da in dünnen Schichten die Elektron-Elektron-Wechselwirkung jedoch wesentlich schneller abläuft als die zwischen Elektron und Phonon, wird nur das Elektronengas erhitzt, was eine sehr geringe Wärmekapazität, einen großen Diffusionskoeffizienten und also eine hohe Empfindlichkeit zur Folge hat. Die Elektronengastemperatur übersteigt die Gittertemperatur dabei deutlich; deshalb spricht man von "Hot Electrons".

Nahezu sämtliche mechanische Funktionen des Spektrometers können über einen Rechner gesteuert werden, ohne manuell eingreifen zu müssen. Dies reicht von der Auswahl der Strahlungsquelle über die Verwendung der gewünschten Blenden, Filter und Strahlteiler und den Wechsel zwischen verschiedenen Detektoren bis hin zur Möglichkeit, das detektierte Signal durch

elektromechanische Feinjustierung des Interferometers zu maximieren. Benutzerplattform ist die Windows-XP-basierte, von der Herstellerfirma des Spektrometers vertriebene Anwendersoftware **OPUS 4.0**. Die Software verfügt neben einem leistungsfähigen FFT-Algorithmus über ein umfangreiches Paket zur Datenanalyse, -visualisierung und -manipulation.

4.2 Experimentelle Versuchsanordnung

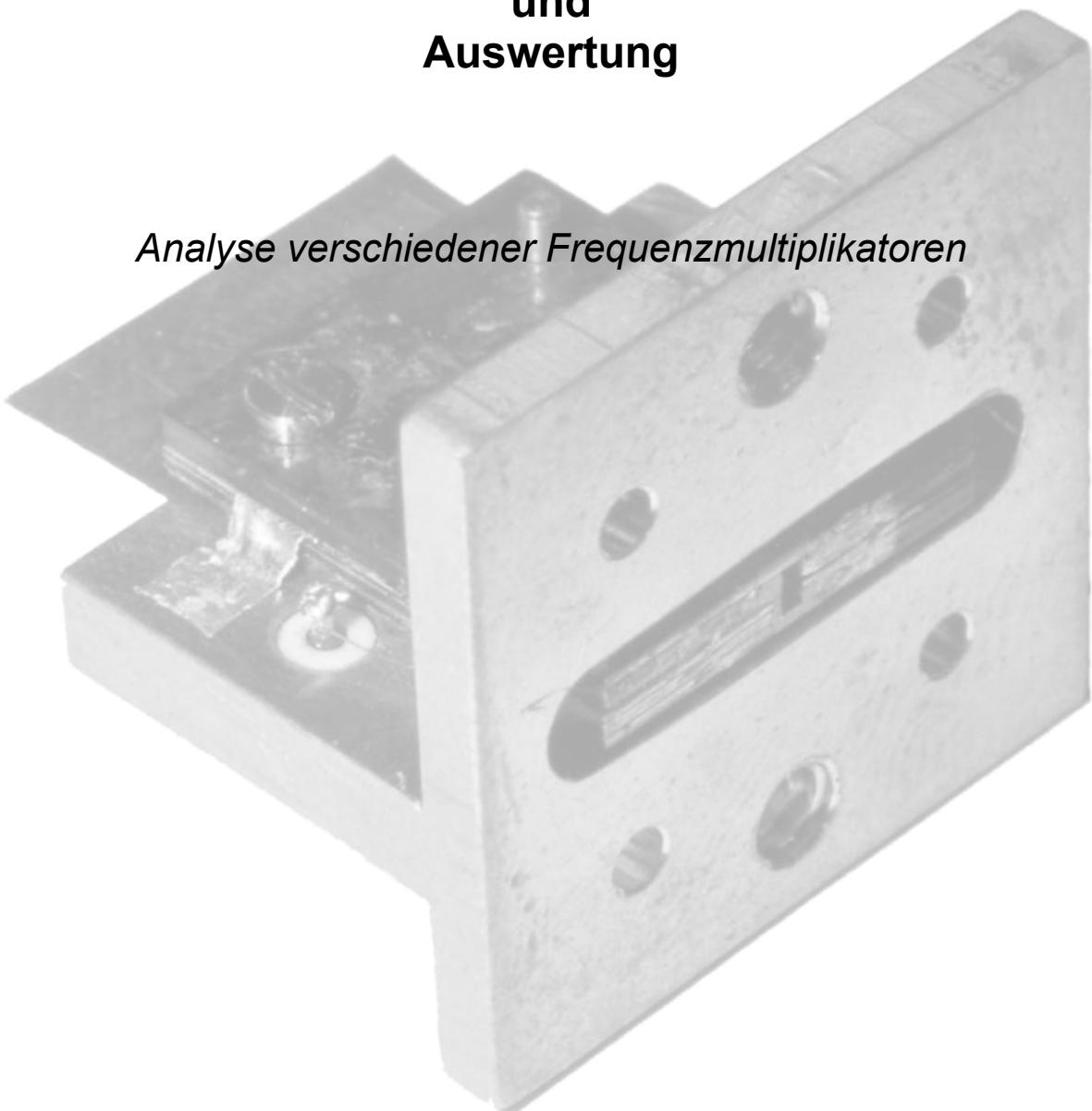
Unser Interesse galt wie bereits erwähnt der Charakterisierung externer Strahlungsquellen. Diese wurden auf der außen am Gerät angebrachten Experimentierplattform positioniert und ihre Emissionen über einen sphärischen Hohlspiegel ins Spektrometer eingekoppelt. Der sich dabei ergebende Strahlengang entspricht dem in Abbildung 4.1 skizzierten. Die Anordnung von Quelle und Hohlspiegel wurde dabei so gewählt, dass sich eine im Verhältnis 2:1 vergrößernde Abbildung ergibt. Auf diese Weise kann ein viermal so großer Raumwinkel der Strahlungskeule (bei gleichzeitig noch akzeptablem Reflexionswinkel am Hohlspiegel und damit annehmbaren Abbildungsfehlern⁷) genutzt werden, ohne dass die Quelle im in Richtung Spektrometer reflektierten Strahl einen allzu störenden Schatten wirft.

Neben dem Spektrometer wurde zum einen eine stabilisierte Gleichspannungsquelle für die Bias-Versorgung der Übergittermultiplikatoren benötigt, zum anderen ein hinreichend leistungsstarker Frequenzgenerator zur Erzeugung des zu multiplizierenden Primärfeldes. Zur Spannungsversorgung bedienten wir uns einer **Model 236 SMU** (Source Measure Unit) der Firma **Keithley Instruments** (Messbereich $\pm 110\text{ V}$, $\pm 100\text{ mA}$, Stabilisierung des Regelparameters nach Zustandsänderung in $\leq 500\mu\text{s}$). Das Primärfeld wurde mithilfe eines **Agilent 83650L** Frequenzgenerators mit externen Mischerköpfen synthetisiert, der bei einer Ausgangsleistung von mindestens 3 dBm oder mehr den gesamten Bereich von 10 MHz bis 110 GHz kontinuierlich abzudecken vermag. Die Mischerköpfe verfügen jeweils über einen Hohlleiterausgang, der direkt an die Eingangswellenleiter der Multiplikatoren angeflanscht werden kann. Auf diese Weise lässt sich die mit dem Synthesizer generierte Strahlung ohne nennenswerte Verluste an das aktive Element heranführen. Um die Richtcharakteristik der reemittierten Strahlungskeule zu verbessern, wurden außerdem die Ausgangswellenleiter der Frequenzmultiplikatoren mit Hornantennen versehen.

⁷ Abbildungsfehler führen zu Verzerrungen des Strahlenganges, insbesondere des Strahlquerschnitts, wodurch die effektive Nutzung der Blenden erschwert bzw. eingeschränkt wird.

Messungen und Auswertung

Analyse verschiedener Frequenzmultiplikatoren



Kapitel 5

FREQUENZMULTIPLIKATION VON BIAS-Oszillationen

5.1 Messergebnisse

Im Folgenden werden die Messergebnisse für einen Nickel- und einen SU-8-Oszillator vorgestellt. Der Nickel-Oszillator hatte die in Abbildung 5.1 geplottete Gleichstromkennlinie. Bei Anlegen einer Spannung innerhalb des schraffiert gekennzeichneten Spannungsbereiches zeigte er Bias-Oszillationen.

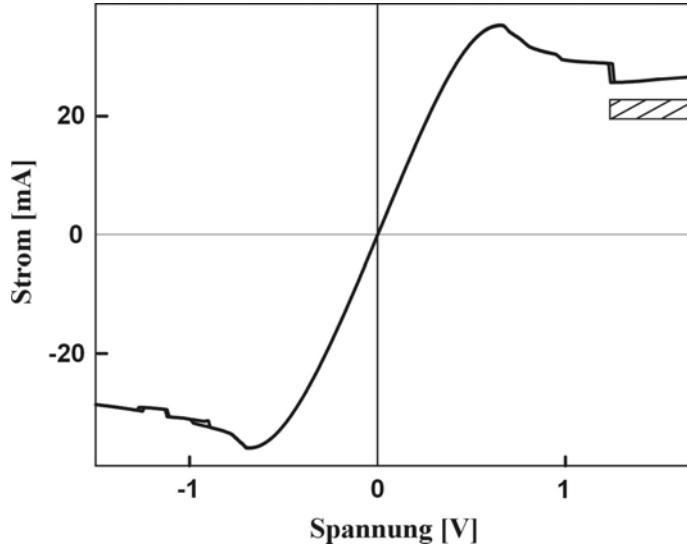


Abb. 5.1: Gleichstromkennlinie des Nickel-Oszillators; die Schraffur markiert den Spannungsbereich, in dem Bias-Oszillationen auftraten

Der Nickel-Oszillator wurde auf der außenliegenden Experimentierplattform (A) des Fourier-Spektrometers positioniert (siehe Abbildung 4.1 und Beschreibung in Kapitel 4.2). Um der Strahlungskeule aus dem Oszillator eine schärfere Richtcharakteristik zu verleihen und so einen

möglichst großen Anteil der Emissionen ins Spektrometer einkoppeln zu können, wurde der Hohlleiterausgang des Oszillators mit einer Hornantenne versehen. Bei einer Betriebsspannung von $1,4\text{ V}$ fanden wir im Fourier-Spektrum Emissionslinien bei 169 GHz , $202,8\text{ GHz}$, $236,6\text{ GHz}$, 338 GHz , $371,8\text{ GHz}$, $405,6\text{ GHz}$, $439,4\text{ GHz}$ und $473,2\text{ GHz}$. Bei allen Linien handelt es sich um Vielfache von $33,8\text{ GHz}$; diese Frequenz markiert offenbar die Grundharmonische der Bias-Oszillationen. Das unter Verwendung des $125\mu\text{m}$ -Mylar-Strahlteilers erhaltene Spektrum ist in Abbildung 5.2 dargestellt. Der Maßstab der Signalstärke ist dabei willkürlich. Da das Fourier-Spektrum um die Gerätefunktion, in die die Gesamtheit der Einflüsse der verschiedenen optischen Komponenten des Versuchsaufbaus eingeht, im Fall von Emissionsmessungen nicht ohne weiteres bereinigt werden kann, hat dieses aber ohnehin keine absolute Aussagekraft, sondern ist als qualitative Annäherung an das tatsächliche Spektrum zu verstehen.

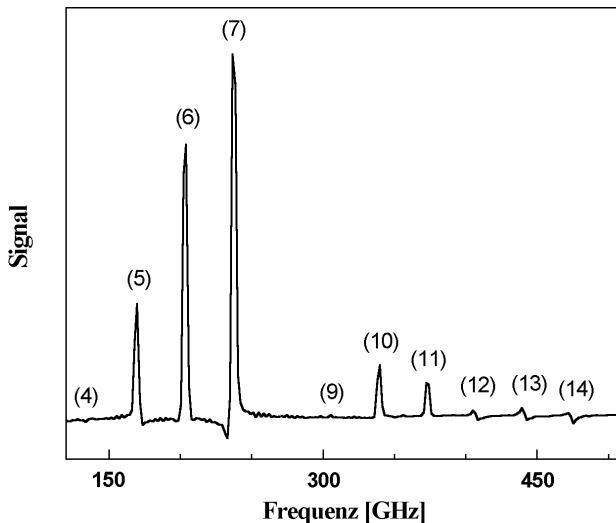


Abb. 5.2: Spektrum des Nickel-Oszillators (Strahlteiler: $125\mu\text{m}$ Mylar); die Ziffern in Klammern bezeichnen die Ordnung der jeweiligen Harmonischen

Der SU-8-Oszillator wurde unter denselben experimentellen Bedingungen untersucht. Seine Gleichstromkennlinie zeigte das in Abbildung 5.3 dargestellte Verhalten. Auch dort ist mit der Schraffur der Spannungsbereich des Auftretens von Bias-Oszillationen gekennzeichnet. Bei Anlegen einer Versorgungsspannung von ebenfalls $1,4\text{ V}$ zeigte das Fourier-Spektrum Linien bei $127,5\text{ GHz}$, $170,0\text{ GHz}$, $212,5\text{ GHz}$, $255,0\text{ GHz}$, $297,5\text{ GHz}$, $382,5\text{ GHz}$, $425,0\text{ GHz}$ und $467,5\text{ GHz}$ (Abbildung 5.4; verwendeter Strahlteiler auch hier $125\mu\text{m}$ Mylar). Daraus kann auf eine Grundharmonische der Bias-Oszillationen von $42,5\text{ GHz}$ geschlossen werden.

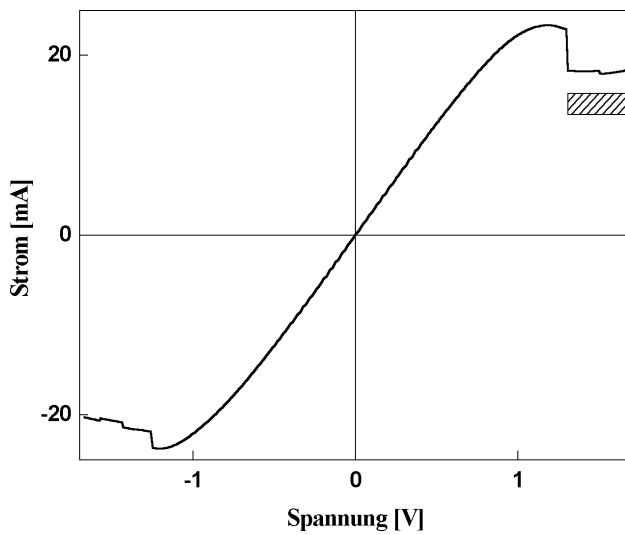


Abb. 5.3: Gleichstromkennlinie des SU-8-Oszillators; die Schraffur markiert wieder den Bereich des Auftretens von Oszillationen

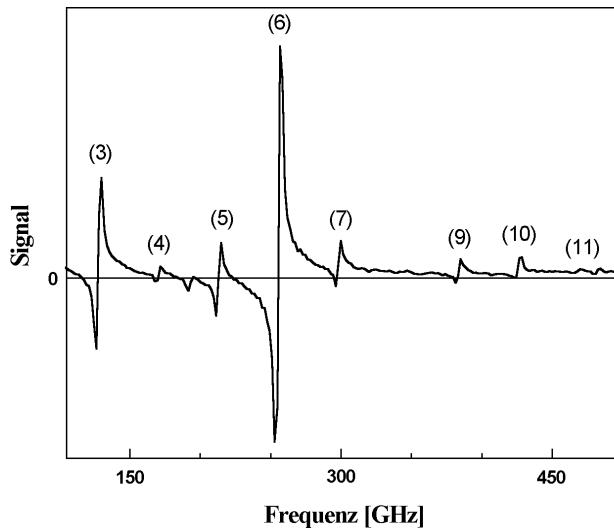


Abb. 5.4: Spektrum des SU-8-Oszillators (bei Verwendung des $125\mu\text{m}$ -Strahlteilers); Erläuterungen zu den Artefakten in Kapitel B.6; auch hier bezeichnen die Ziffern in Klammern die Ordnung der jeweiligen Harmonischen

Das Spektrum des SU-8-Oszillators in Abbildung 5.4 zeigt starke Artefakte (negative Signaleanteile!), die auf Fehler bei der halbseitigen Abtastung des Interferogramms zurückzuführen sind. Dieses Phänomen ist Gegenstand des Kapitels B.6 im Anhang und wird dort ausführlich behandelt. Hier möchte ich daher nicht weiter darauf eingehen.

5.2 Diskussion

Wie in Kapitel 2.1 bei der Beschreibung des Aufbaus der Bias-Oszillatoren bereits erwähnt, liegt die Cut-Off-Frequenz des Ausgangswellenleiters, die sich aus seinen geometrischen Abmessungen ergibt, bei ca. 160 GHz . Zwar markiert dieser Wert keine scharfe Grenze, unterhalb derer sämtliche spektrale Komponenten schlagartig und vollständig an ihrer Ausbreitung gehindert würden; dies insbesondere deshalb nicht, da der Wellenleiter sehr kurz ist und man daher immer auch Nahfeldeffekte mitberücksichtigen muss. Andernfalls dürfte die dritte Harmonische des SU-8-Oszillators bei $127,5\text{ GHz}$, die deutlich unterhalb der Cut-Off-Frequenz liegt, nicht zu sehen sein. Aber natürlich führt der Hohlleiter zu einer spürbar zunehmenden Dämpfung hin zu kleineren Frequenzen.

Dies ist im Wesentlichen der Grund, weshalb die Grundharmonische und die ersten Oberwellen der Bias-Oszillationen über den Wellenleiter nicht direkt beobachtet werden konnten (abgesehen davon, dass auch die Empfindlichkeit des Fourier-Spektrometers bei Frequenzen unterhalb von 100 GHz rapide nachlässt, dies allerdings langsamer, als die durch den Hohlleiter verursachte Dämpfung zunimmt). Mithilfe eines Heterodyn-Spektral-Analysators wurden die Bias-Oszillationen, durch den Tiefpassfilter nur unzureichend abgeschirmt, aber schließlich an der Gleichstromzuführung, die wie eine Antenne wirkte, nachgewiesen.

Die Bias-Oszillationen gehen zurück auf wandernde Dipoldomänen, die sich aufgrund negativer differentieller Beweglichkeit der Ladungsträger im Übergitter bilden. Die Grundfrequenz der dabei emittierten Strahlung ist gegeben durch die Transitfrequenz, die sich aus der Länge des Übergitters und der Propagationsgeschwindigkeit der Domänen errechnet. Für das vorliegende Übergittersystem war eine Transitfrequenz von ca. 85 GHz abgeschätzt worden; Strahlung dieser Frequenz sollte sich aber weder durch die tiefpassgefilterte Gleichstromzuführung noch durch den Wellenleiter ausbreiten können. Mit der Wahl dieses Setups war die Hoffnung verbunden, der Oszillator würde seine Leistung vornehmlich über die Oberwellen jenseits der Cut-Off-Frequenz des Ausgangswellenleiters abgeben. In den beiden beschriebenen Experimenten lag die Grundfrequenz jedoch unterhalb des Stopbandes des Biasfilters (75 GHz), wodurch sich über die Gleichstromzuführung beträchtliche Strahlungsverluste ergeben haben dürften. Nichtsdestotrotz beobachteten wir im Frequenzbereich bis annähernd 500 GHz zahlreiche Harmonische. Durch eine Verbesserung des Resonatordesigns und ein Minimieren der Strahlungsverluste über den Bias-Kreis bei niedrigen Frequenzen müsste es möglich sein, die in die Oberwellen fließende Leistung zu erhöhen.

Kapitel 6

FREQUENZMULTIPLIKATION EINES EXTERNEN FELDES

6.1 Messergebnisse

Die Gleichstromkennlinie des präsentierten Frequenzvervielfachers ist in Abbildung 6.1 wiedergegeben. Mit der Schraffur ist der Vorspannungsbereich hervorgehoben, in dem der Wirkungsgrad der Frequenzmultiplikation besonders hoch war, und in dem von daher auch die vorgestellte Messung angesiedelt ist. Der Multiplikator wurde mit $1,7\text{ V}$ vorgespannt und mit einer Frequenz von 110 GHz bei einer Leistung von rund 3 mW bestrahlt. Die Abbildung 6.2 zeigt das dabei erhaltene Emissionsspektrum.

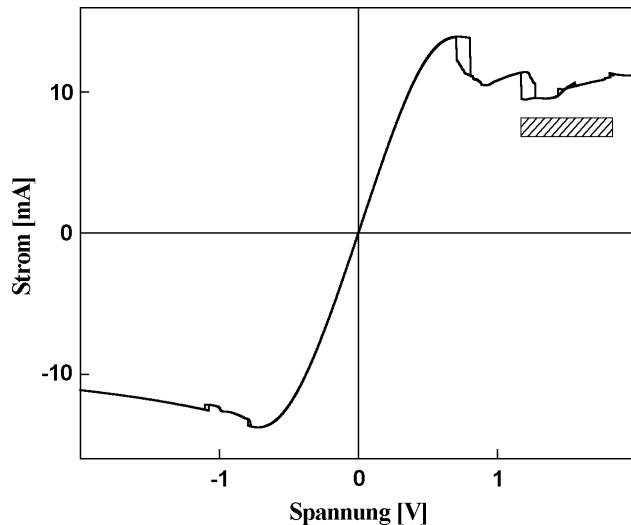


Abb. 6.1: Gleichstromkennlinie des Frequenzvervielfachers

Wie man sieht, lässt sich die Reihe der Harmonischen lückenlos bis zur 11. Ordnung verfolgen. Darüber hinaus können die 13., die 15. und die 16. Harmonische zugeordnet werden. Interessant

ist das Auftreten zweier weiterer Linien, bezeichnet mit (ii) und (iii), die im Verhältnis 2:3 zueinander zu stehen scheinen. Es ist allerdings nicht geklärt, ob zwischen diesen beiden Linien tatsächlich ein kausaler Zusammenhang besteht oder auf welche gemeinsame Ursache sie zurückzuführen wären. Des weiteren fällt auf, dass auch die Grundharmonische zu sehen ist, obwohl sie mit 110 GHz eigentlich signifikant kleiner ist als die Cut-Off-Frequenz des Ausgangswellenleiters (140 GHz). Zu erklären ist dieser Umstand mit der hohen Leistung des anregenden Feldes und der geringen Länge des Wellenleiters, die nicht ausreicht, um das Nahfeld vollständig abzuschirmen.

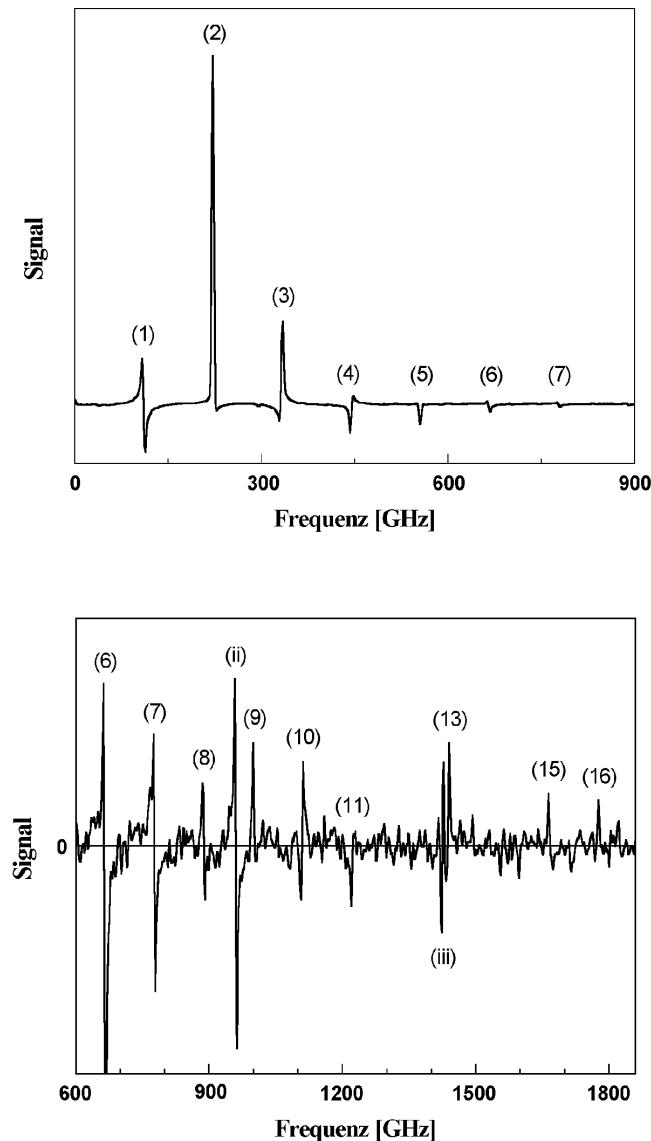


Abb. 6.2: Spektrum des mit 110 GHz angeregten Frequenzvervielfachers; die Signalstärke des unteren Ausschnittes ist gegenüber der des oberen etwa um den Faktor 40 vergrößert dargestellt;
Strahlteiler: $125\mu\text{m}$ Mylar

Wie schon im Falle des SU-8-Oszillators (Abbildung 5.4) stellt man auch in Abbildung 6.2 (besonders im unteren Plot) wieder erhebliche spektrale Artefakte fest (negative Signalanteile!). Und auch hier ist die Ursache wieder eine fehlerhafte halbseitige Abtastung des Interferogramms. In diesem Zusammenhang sei nochmals auf das Kapitel B.6 im Anhang verwiesen, das sich damit eingehend auseinandersetzt.

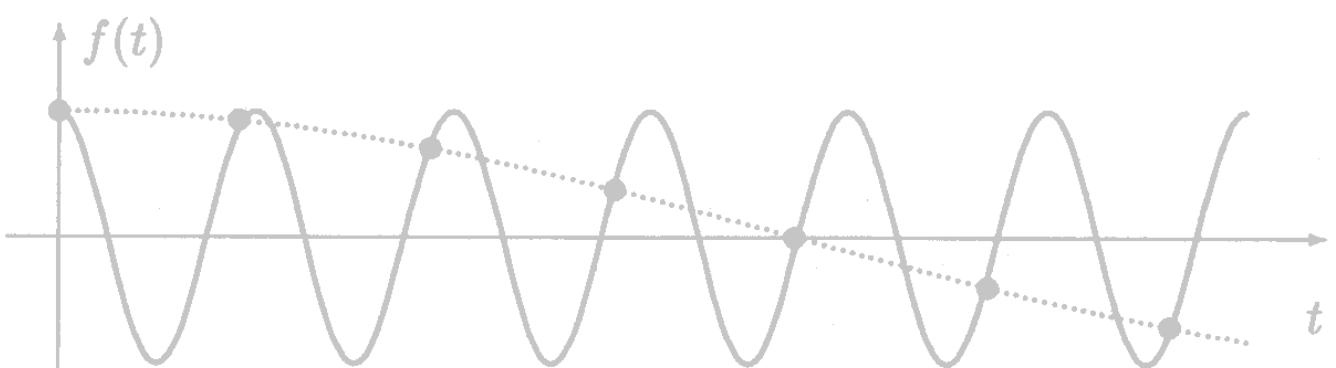
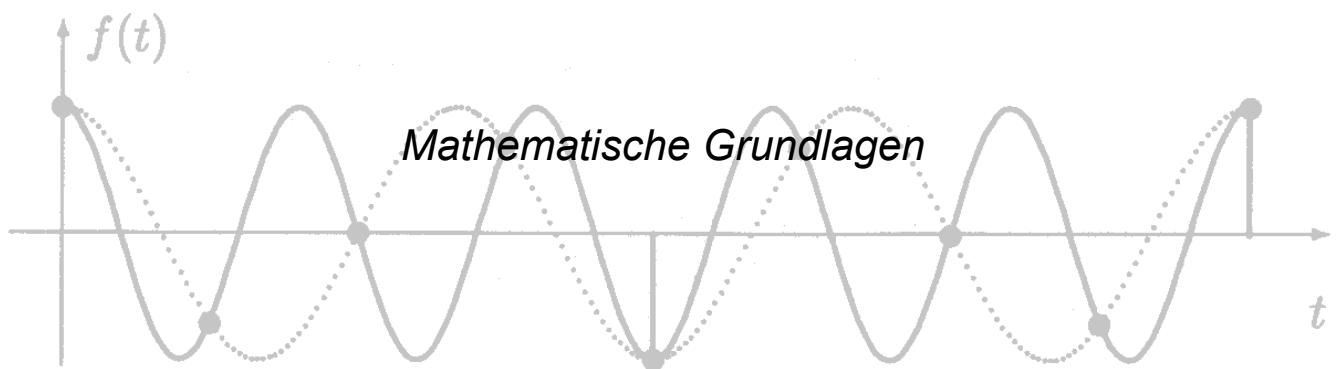
6.2 Diskussion

Dass elektronische Bauelemente mit nichtlinearer Strom-Spannungs-Charakteristik zur Frequenzvervielfachung benutzt werden können, ist ein schon seit langem bekannter Umstand. Bestrahlt man solche Bauelemente mit einem harmonischen Wechselfeld, finden sich in ihrer Stromantwort aufgrund deren Anharmonizität Oberwellen des Erregerfeldes. Besonders ausgeprägt ist diese Anharmonizität und damit der genannte Effekt, wenn die Gleichstromkennlinie Bereiche negativer differentieller Leitfähigkeit aufweist. Die in höhere Harmonische fließende Leistung steigt dann rasch an.

Noch neu ist hingegen die Erkenntnis, dass die in solchen Bauelementen häufig zu beobachtenden Stromoszillationen, die auf die spontane Bildung von wandernden Raumladungsdomänen zurückzuführen sind, ebenfalls einen Mechanismus zur Frequenzmultiplikation darstellen. Und: Dieser ist außerordentlich wirksam. Das ist eine Erklärung dafür, weshalb der untersuchte Frequenzvervielfacher gerade im Bereich ausgeprägter Kennliniensprünge besonders effektiv arbeitet: Kennliniensprünge weisen auf die Bildung von Raumladungsdomänen hin.

Die konkrete Zusammensetzung des Oberwellenspektrums hängt von der genauen Form der Stromantwort ab. Im dokumentierten Experiment sahen wir ausgehend von 110 GHz Grundfrequenz Harmonische bis zur 16. Ordnung oder rund $1,8\text{ THz}$. Damit ist gezeigt, dass sich mit Halbleiter-Übergittern durch Frequenzmultiplikation Submillimeterwellen, insbesondere Strahlung mit Frequenzen von deutlich über einem Terahertz, erzeugen lassen.

Anhang



A n h a n g A

FOURIER-REIHEN UND KONTINUIERLICHE FOURIER-TRANSFORMATION

A.1 Fourier-Reihen

So wie sich viele Funktionen als Potenzreihen darstellen lassen, können speziell periodische nach den trigonometrischen Funktionen Sinus und Kosinus entwickelt werden. Oft wird die Fourier-Analyse daher auch harmonische Analyse genannt, da bei harmonischen Schwingungen die trigonometrischen Funktionen eine zentrale Rolle spielen. Die allgemeine **Definition der Fourier-Reihe** lautet:

$$f(t) = \sum_{k=0}^{\infty} (A_k \cos \omega_k t + B_k \sin \omega_k t) \quad \text{mit} \quad \omega_k = \frac{2\pi k}{T}, \quad k \in \mathbb{N}, \quad t \in \mathbb{R}. \quad (\text{A.1})$$

T ist hierbei das Zeitintervall einer Periode der Funktion $f(t)$. Die Fourier-Koeffizienten A_k und B_k sind so zu bestimmen, dass die unendliche Reihe mit der Funktion $f(t)$ identisch ist. Jede periodische Funktion kann also als Superposition von Sinus- und Kosinusanteilen geeigneter Amplituden dargestellt werden, bestehend unter Umständen aus unendlich vielen Termen. Jedoch lassen sich alle Funktionen, die stetig und stetig differenzierbar sind, in der Praxis durch eine endliche Anzahl von Reihengliedern hinreichend genau nähern. Die beteiligten Frequenzen sind, wie der Definition zu entnehmen, ganzzahlige Vielfache der durch die Periodendauer T festgelegten Grundfrequenz.

Zur Gewinnung der Fourier-Koeffizienten reicht es aus, **eine vollständige Periode** der Funktion $f(t)$ zu betrachten. Sie **enthält bereits die gesamte spektrale Information**. Das aus (A.1) abgeleitete Basisfunktionensystem

$$1, \cos \frac{2\pi t}{T}, \sin \frac{2\pi t}{T}, \cos \frac{4\pi t}{T}, \sin \frac{4\pi t}{T}, \dots \quad (\text{A.2})$$

ist ein **Orthogonalsystem**⁸, d.h.

$$\int_{-T/2}^{+T/2} \cos \frac{2\pi n t}{T} \cos \frac{2\pi m t}{T} dt = \begin{cases} 0 & n \neq m \\ T/2 & n = m \neq 0 \\ T & n = m = 0 \end{cases} \quad n, m \in \mathbb{Z}_0, \quad (\text{A.3})$$

$$\int_{-T/2}^{+T/2} \sin \frac{2\pi n t}{T} \sin \frac{2\pi m t}{T} dt = \begin{cases} 0 & n \neq m \quad \text{oder} \quad n = m = 0 \\ T/2 & n = m \neq 0 \end{cases}, \quad (\text{A.4})$$

$$\int_{-T/2}^{+T/2} \cos \frac{2\pi n t}{T} \sin \frac{2\pi m t}{T} dt = 0. \quad (\text{A.5})$$

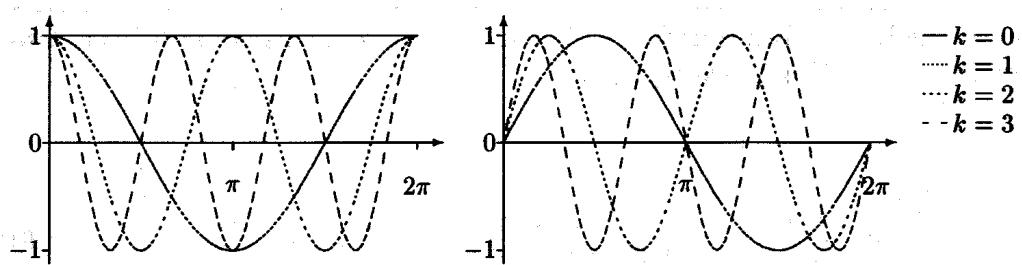


Abb. A.1: Basisfunktionen der Fourier-Reihe; links die geraden (Kosinus), rechts die ungeraden Komponenten (Sinus) [But00]

Mit diesen Orthogonalitätsrelationen lassen sich die Koeffizienten A_k und B_k nun leicht berechnen, indem nämlich die Definitionsgleichung für $f(t)$ mit $\cos \omega_k t$ bzw. $\sin \omega_k t$ erweitert und das Produkt über eine Periode T integriert wird. Man erhält

$$A_k = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) \cos \omega_k t dt \quad \text{für } 0 \neq k \in \mathbb{Z} \quad (\text{A.6})$$

mit dem Sonderfall

$$A_0 = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) dt \quad \text{für } k = 0. \quad (\text{A.7})$$

⁸ In Äquivalenz zu zwei Vektoren, die senkrecht aufeinander stehen und deren Skalarprodukt 0 ergibt, bezeichnet man einen Satz von Basisfunktionen als Orthogonalsystem, wenn das Integral über das Produkt von zwei verschiedenen Basisfunktionen verschwindet.

Der Koeffizient A_0 beschreibt einfach das arithmetische Mittel der Funktion $f(t)$. Analog findet man

$$B_k = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) \sin \omega_k t dt \quad \text{für alle } k \in \mathbb{Z}_0 \quad \text{mit} \quad B_0 \equiv 0. \quad (\text{A.8})$$

Die Ausdrücke (A.6) bis (A.8) lassen sich so interpretieren, dass die Funktion $f(t)$ mit $\cos \omega_k t$ respektive $\sin \omega_k t$ gewichtet wird, und man isoliert auf diese Weise jeweils die spektralen Komponenten, die den geraden bzw. ungeraden Anteilen der zugehörigen Frequenzen ω_k entsprechen.

Auch im Folgenden werde weiterhin stets angenommen, $f(t)$ sei eine reellwertige Funktion; die Verallgemeinerung auf den komplexen Fall wäre, sofern erforderlich, jedoch unproblematisch. Mit einem Trick lassen sich (A.6), (A.7) und (A.8) nun zusammenfassen. Man bedient sich dazu der **Eulerschen Identität**.

$$e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi. \quad (\text{A.9})$$

Damit lassen sich die trigonometrischen Funktionen darstellen als

$$\cos \varphi = \frac{1}{2} (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) \quad \text{und} \quad \sin \varphi = \frac{1}{2i} (e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}). \quad (\text{A.10})$$

Einsetzen in die Definitionsgleichung (A.1) liefert

$$f(t) = A_0 + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{A_k - iB_k}{2} \cdot e^{i\omega_k t} + \frac{A_k + iB_k}{2} \cdot e^{-i\omega_k t} \right). \quad (\text{A.11})$$

Führt man noch die Substitutionen

$$C_0 = A_0 \quad \text{und}$$

$$\left. \begin{aligned} C_k &= \frac{A_k - iB_k}{2} \\ C_{-k} &= \frac{A_k + iB_k}{2} \end{aligned} \right\} 0 \neq k \in \mathbb{Z} \quad (\text{A.12})$$

ein, wobei C_k und C_{-k} praktischerweise konjugiert komplex zueinander sind (genau genommen war das gerade der Zweck dieser Substitution), kann man schließlich schreiben:

$$f(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} C_k \cdot e^{i\omega_k t} \quad \text{für alle } k \in \mathbb{Z}. \quad (\text{A.13})$$

Die Berechnung der komplexen Fourier-Koeffizienten (für die nach wie vor reelle Funktion $f(t)$!) gestaltet sich ebenso einfach, man bekommt:

$$C_k = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) \cdot e^{-i\omega_k t} dt \quad \text{für } k \in \mathbb{Z}. \quad (\text{A.14})$$

Die Gleichungen (A.13) und (A.14) besitzen aufgrund ihrer Einfachheit im Vergleich zu (A.1) und (A.6) bis (A.8) zweifelohne ästhetischen Reiz. Im Umgang mit ihnen sollte man sich dennoch eine gewisse Kritikfähigkeit bewahren; zu verstehen sind sie nur in Verbindung mit ihrer Herleitung. Denn rein formal ergeben sich dort für $k < 0$ **negative Frequenzen**, was im **Widerspruch zur Definition** (A.1) zu stehen scheint. Es handelt sich jedoch lediglich um einen mathematischen Kunstgriff, mit dem der Ausdruck (A.11) durch die Einführung der Substitutionen (A.12) vereinfacht wurde. Und dabei ist dem Laufindex k stillschweigend eine neue Aufgabe zugewiesen worden, womit sich der scheinbare Widerspruch aufklärt. Die Terme mit den komplexen Koeffizienten C_k und C_{-k} sind jeweils **komplementär**⁹ und **tragen gemeinsam die Phaseninformation**. Man lasse sich also nicht in die Irre führen, die physikalische Aussage bleibt davon unberührt!

A.2 Kontinuierliche Fourier-Transformation

Im Gegensatz zu den bis hierher angestellten Überlegungen soll die stillschweigend gemachte Einschränkung der Definitionsgleichung (A.1) auf Funktionen $f(t)$, die eine endliche Periode T besitzen, nunmehr fallengelassen werden ($T \rightarrow \infty$). Das **Integrationsintervall** muss also auf **die gesamte reelle Achse** ausgedehnt werden, da die Information längs dieser Achse ja

⁹ Mit jedem Koeffizienten für sich allein genommen beschreitet man einen Umweg in der komplexen Ebene. Betrachtet man jedoch Terme mit komplementären Koeffizienten jeweils gemeinsam, erhält man wieder rein reelle Größen (da die imaginären Anteile stets gegengleich groß sind), ergänzt allerdings nun um die Kenntnis Phase, wie man sich anhand eines Zeigerdiagramms leicht klarmacht.

nicht mehr redundant verteilt ist. Während eine periodische Funktion $f(t)$ ein Spektrum aus diskreten Spektrallinien im Abstand

$$\Delta\omega = \omega_0 = \frac{2\pi}{T} \quad (\text{A.15})$$

zeigt, wobei diese mit wachsender Periodendauer T immer dichter zusammenrücken, gibt es im Grenzfall $T \rightarrow \infty$ kein diskretes Linienspektrum mehr:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \Delta\omega = \lim_{T \rightarrow \infty} \omega_0 = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2\pi}{T} = d\omega. \quad (\text{A.16})$$

Stattdessen erhält man ein Kontinuum in ω ,

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \omega_k = k \cdot \lim_{T \rightarrow \infty} \Delta\omega = k \cdot d\omega = \omega \quad \text{für } k \in \dots \rightarrow \omega \in \dots, \quad (\text{A.17})$$

siehe z.B. [Hot97, Kap. 2, S. 35 ff.]. Physikalisch bedeutet das, es tritt jede beliebige Frequenz von 0 bis ∞ auf (und nicht $-\infty$ bis ∞ , siehe oben!). Nach (A.13) und (A.14) gilt

$$f(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t') \cdot e^{-i\omega_k t'} dt' \right) \cdot e^{i\omega_k t}. \quad (\text{A.18})$$

Davon ausgehend lässt sich der Grenzübergang wie folgt formulieren:

$$\begin{aligned} f(t) &= \lim_{T \rightarrow \infty} \left\{ \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left(\frac{\omega_0}{2\pi} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t') \cdot e^{-i\omega_k t'} dt' \right) \cdot e^{i\omega_k t} \right\} \\ &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left(\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\omega_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(t') \cdot e^{-i \cdot \lim_{T \rightarrow \infty} \omega_k \cdot t'} dt' \right) \cdot e^{i \cdot \lim_{T \rightarrow \infty} \omega_k \cdot t}. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Mit (A.16) und (A.17) führt dies nach Limesbildung auf den Ausdruck

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(t') \cdot e^{-i\omega t'} dt' \right) \cdot e^{i\omega t} . \quad (\text{A.20})$$

Man gelangt so zu einer der gebräuchlichen **Definitionen der kontinuierlichen Fourier-Transformation** und ihrer Inversen:

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cdot e^{-i\omega t} dt, \quad \omega \in \mathbb{R}, \quad (\text{A.21})$$

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) \cdot e^{i\omega t} d\omega, \quad \omega \in \mathbb{R}. \quad (\text{Umkehrtransformation}) \quad (\text{A.22})$$

$F(\omega)$ wird hierbei als **Fourier-Transformierte** oder **spektrale Dichte** der allgemeinen Zeitfunktion $f(t)$ bezeichnet. Unglücklicherweise hat man bei der Ableitung dieser Relationen aus (A.20) gewisse Freiheiten im Hinblick auf Skalierung und Normierung, und es finden sich daher auch unterschiedliche Darstellungen. So werden die Gleichungen manchmal symmetrisiert, indem man beide mit einem Faktor $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ versieht. Allerdings gehen damit Änderungen wie z.B. der Definition des Mittelwertes einher:

$$F(0) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) dt \quad \rightarrow \quad F(0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) dt. \quad (\text{A.23})$$

Beim Vergleich von (A.21) mit (A.14) stellt man außerdem fest: Die Koeffizienten $F(\omega)$ und C_k sind mit verschiedenen Einheiten behaftet! Das verwirrt, würde man für die Koeffizienten doch naheliegend, wie in (A.14) auch tatsächlich der Fall, dieselbe Dimension erwarten wie für die Funktion, die sie in ihrer Gesamtheit repräsentieren. Dies wirft die Frage nach einer angemessenen physikalischen Interpretation von (A.21) auf. Umgehen ließe sich dieses Problem durch eine geeignete Zerlegung des Faktors $\frac{1}{2\pi}$ in Intervall- und Frequenzanteil,

$$\frac{1}{2\pi} = \frac{1}{\omega \cdot T(\omega)} \quad \rightarrow \quad f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d\omega}{\omega \cdot T(\omega)} \int_{-\infty}^{\infty} f(t') \cdot e^{-i\omega t'} dt' \right) \cdot e^{i\omega t}, \quad (\text{A.24})$$

und man erhielte für die Transformationsgleichungen dann:

$$\tilde{F}(\omega) = \left(\frac{1}{T(\omega)} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cdot e^{-i\omega t} dt \right) = \frac{\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cdot e^{-i\omega t} dt \quad \text{und} \quad (\text{A.25})$$

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{F}(\omega)}{\omega} \cdot e^{i\omega t} d\omega. \quad (\text{A.26})$$

Die Fourier-Transformation ist in dieser Form jedoch unüblich, und ich werde im weiteren wieder auf die Definitionsgleichungen (A.21) und (A.22) zurückgreifen. Mathematisch ist an ihnen ja auch nichts auszusetzen.

A.3 Darstellung als Faltung mit dem Dirac-Impuls

Es gibt noch einen anderen, intuitiven und sehr eleganten, daher ebenfalls oft beschrittenen Weg, $F(\omega)$ auszudrücken. Und zwar mithilfe des **Dirac-Impulses**, zumeist als **δ -Funktion**¹⁰ bezeichnet. Der Dirac-Impuls ist definiert als

$$\delta(t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t \neq 0 \\ \infty & \text{für } t = 0 \end{cases} \quad t \in \mathbb{R} \quad (\text{A.27})$$

mit der Eigenschaft, dass sein Flächenintegral endlich und normiert ist, nämlich

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(t) dt = 1. \quad (\text{A.28})$$

Aufgrund dieser Beschaffenheit, dass die δ -Funktion nur an der Stelle, an der ihr Argument 0 wird, nicht verschwindet, werden beim Integrieren über ein Produkt mit einer beliebigen Funktion $g(t)$ alle Beiträge unterdrückt bis auf den einen, diesem Argument zugeordneten Funktionswert. Im einfachsten Fall ist das eben $g(0)$, aber natürlich kann man sich auch jeden anderen Funktionswert $g(\tau)$ „herauspicken“:

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(t) \cdot \delta(\tau - t) dt = g(\tau). \quad (\text{A.29})$$

Die Fourier-Transformierte eines isoliert betrachteten Dirac-Impulses ergibt sich durch Einsetzen von (A.27) und (A.28) in (A.21) zu

$$D(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t) \cdot e^{-i\omega t} dt = e^{-i\omega \cdot 0} = 1. \quad (\text{A.30})$$

¹⁰ Anmerkung: Der Dirac-Impuls ist keine Funktion im eigentlichen Sinne, sondern zählt zu den sog. Distributionen. Das sind verallgemeinerte Funktionen, deren Funktionswerte sich nicht durch Einsetzen eines Arguments ergeben, sondern durch Anwendung einer Zuteilungsvorschrift.

Über die Umkehrtransformation (A.22) erhält die δ -Funktion dann folgendes Aussehen:

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} D(\omega) \cdot e^{i\omega t} d\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} d\omega . \quad (\text{A.31})$$

Dies ist eine recht nützliche Darstellung, denn mit ihrer Hilfe lässt sich das Wesen der Fourier-Transformation veranschaulichen; und zwar als **Faltung**¹¹ mit dem Dirac-Impuls (formal eigentlich mit dessen Spiegelbild, was aus Symmetriegründen aber äquivalent ist):

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega') \cdot \delta(\omega' - \omega) d\omega' = F(\omega) * \delta(-\omega) = F(\omega) * \delta(\omega) . \quad (\text{A.32})$$

Beweis:

$$\begin{aligned} F(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cdot e^{-i\omega t} dt \stackrel{(\text{A.22})}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega') \cdot e^{i\omega' t} d\omega' \cdot e^{-i\omega t} dt \\ &\stackrel{\text{Integration vertauschen}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega') \cdot \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega'-\omega)t} dt d\omega' \stackrel{(\text{A.31})}{=} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega') \cdot \delta(\omega' - \omega) d\omega' . \square \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

Wie man sieht, filtert die Fourier-Transformation aus dem Gemenge aller in $f(t)$ vorkommenden Spektralkomponenten jeweils **genau eine** (nämlich die für $\omega' = \omega$) heraus. Mit der Umkehrtransformation funktioniert es natürlich ganz genauso, es gilt evident:

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t') \cdot \delta(t' - t) dt' . \quad (\text{A.34})$$

¹¹ Einzelheiten zu Definition und Eigenschaften dieser Form der Verknüpfung finden sich im Anhang C.

A n h a n g B

DISKRETE FOURIER-TRANSFORMATION UND APODISATION

B.1 Diskrete Fourier-Transformation

Oftmals ist die zu untersuchende Funktion $f(t)$, also beispielsweise ein zeit- oder ortsabhängiger Signalverlauf, nicht als kontinuierliche Funktion bekannt, sondern nur innerhalb eines endlichen Intervalls zu N diskreten, äquidistant gelegenen Zeitpunkten

$$t_k = k \cdot \Delta t \quad \text{für } k \in [0, N-1] \in \mathbb{N}_0. \quad (\text{B.1})$$

Man entnimmt der Funktion $f(t)$ gewissermaßen Stichproben $f(t_k) = f_k$. Jede digitale Datenaufnahme und -verarbeitung verfährt gezwungenermaßen nach diesem Prinzip, das als **Sampling** bezeichnet wird. Mathematisch handelt es sich um eine Faltung von $f(t)$ mit einem Dirac-Kamm, d.h. einem „Rechen“ aus k zeitlich äquidistant verteilten Dirac-Impulsen. Auf die genannte Weise erhält man als Datensatz eine Zahlenfolge $\{f_k\}$. Außerhalb des gesampelten Intervalls

$$T = N \cdot \Delta t \quad (\text{B.2})$$

ist die Funktion unbekannt. Da die Fourier-Transformation aber nur für periodische Funktionen auf einem endlichen Intervall ausgeführt werden kann, macht die diskrete Fourier-Transformation nun die (im Prinzip unzulässige) Annahme, $\{f_k\}$ setze sich außerhalb des Intervalls T periodisch fort. Dies scheint nicht nur unstatthaft zu sein, sondern darüber hinaus eine sehr störende Beschränkung: Zum einen ist $f(t)$ im Allgemeinen eben nicht periodisch; zum anderen könnte es passieren, dass $f(t)$ zwar periodisch ist, das Intervall T aber gerade keine ganze Anzahl von Perioden umfasst. Eine periodische Fortsetzung der Folge $\{f_k\}$ würde dann auf eine

unstetig zusammengestückelte Funktion führen. Welche Auswirkungen dies hat – und wie diese gegebenenfalls gemildert oder beseitigt werden können – muss daher noch geklärt werden.

Um den spektralen Gehalt $\{F_j\}$ der Samplingfolge $\{f_k\}$ aufzuklären, geht man von der Bestimmungsgleichung für die komplexen Fourier-Koeffizienten (A.14) aus:

$$C_j = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} f(t) \cdot e^{-i \frac{2\pi j}{T} t} dt \quad \text{für } j \in \dots . \quad (\text{B.3})$$

Substituiert man mit (B.1) und (B.2), so gelangt man zu

$$C_j = \frac{\Delta t}{N \cdot \Delta t} \sum_{k=0}^{N-1} f_k \cdot e^{-i \frac{2\pi j}{N \cdot \Delta t} k \cdot \Delta t} = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f_k \cdot e^{-i \frac{2\pi j}{N} k}, \quad j, k \in \dots . \quad (\text{B.4})$$

Durch die Substitution wird nun auch in die Menge der Koeffizienten eine Periodizität der Länge N implementiert, was, wie sich noch zeigen wird, unter ungünstigen Umständen störende Effekte nach sich ziehen und das Resultat erheblich verfälschen kann. Erst einmal ist damit aber eine **Definition der diskreten Fourier-Transformation** und ihrer Umkehrung gefunden:

$$F_j = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f_k \cdot e^{-i \frac{2\pi j}{N} k}, \quad j, k \in \dots , \quad (\text{B.5})$$

$$f_k = \sum_{j=0}^{N-1} F_j \cdot e^{i \frac{2\pi j}{N} k}, \quad j, k \in \dots . \quad (\text{B.6})$$

Beim Übergang von (B.3) nach (B.4) wurden die Intervallgrenzen von $-T/2$ und $+T/2$ nach 0 und T verschoben, was jedoch zulässig ist, da es ja nur darauf ankommt, über **eine ganze Periode** zu integrieren, und $\{f_k\}$ respektive $f(t)$ vorläufig per definitionem als periodisch vorausgesetzt worden sind.

Ähnlich wie im Zusammenhang mit der kontinuierlichen Transformation kann man auch die „Filterwirkung“ der diskreten Fourier-Transformation als Faltung mit einer Art „diskreten δ -Funktion“ ausdrücken:

$$\delta(k) = \begin{cases} 0 & \text{für } k \neq 0 \\ 1 & \text{für } k = 0 \end{cases} \quad k \in \dots . \quad (\text{B.7})$$

Ihre Fourier-Transformierte ist nach (B.5)

$$D_j = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \delta(k) \cdot e^{-i \frac{2\pi j}{N} k} = \frac{1}{N} \cdot e^{-i \frac{2\pi j}{N} \cdot 0} = \frac{1}{N}. \quad (\text{B.8})$$

Die Rücktransformation (B.6) führt auf die Gestalt

$$\delta(k) = \sum_{j=0}^{N-1} D_j \cdot e^{i \frac{2\pi j}{N} k} = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} e^{i \frac{2\pi j}{N} k}. \quad (\text{B.9})$$

Damit lässt sich schreiben:

$$F_j = \sum_{j'=0}^{N-1} F_{j'} \cdot \delta(j' - j) = \sum_{j'=0}^{N-1} F_{j'} \cdot \delta_{j',j}. \quad (\text{B.10})$$

Das Kronecker- δ , das hier üblicherweise verwendet wird, hat in Entsprechung zu (B.7) die Eigenschaft

$$\delta_{j,k} = \begin{cases} 0 & \text{für } j \neq k \\ 1 & \text{für } j = k \end{cases} \quad j, k \in \dots \quad (\text{B.11})$$

Beweis von (B.10):

$$\begin{aligned} F_j &\stackrel{(B.5)}{=} \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f_k \cdot e^{-i \frac{2\pi j}{N} k} \stackrel{(B.6)}{=} \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{j'=0}^{N-1} F_{j'} \cdot e^{i \frac{2\pi j'}{N} k} \cdot e^{-i \frac{2\pi j}{N} k} \\ &\stackrel{\text{Summenvertauschen}}{=} \sum_{j'=0}^{N-1} F_{j'} \cdot \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} e^{i \frac{2\pi (j'-j)}{N} k} \stackrel{(B.9)}{=} \sum_{j'=0}^{N-1} F_{j'} \cdot \delta_{j',j}. \quad \square \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Mit der Umkehrtransformation geht es wieder ebenso:

$$f_k = \sum_{k'=0}^{N-1} f_{k'} \cdot \delta_{k',k}. \quad (\text{B.13})$$

B.2 Abtasttheorem nach Nyquist-Shannon

Auf diese Art und Weise kann also der Spektralgehalt $\{F_j\}$ der Folge $\{f_k\}$ bestimmt werden. Wie aber lässt sich sicherstellen, dass die in $\{f_k\}$ bezüglich $f(t)$ enthaltene Information **vollständig** ist, d.h. sie das Verhalten von $f(t)$ tatsächlich eindeutig beschreibt? Oder anders gefragt: Mit welcher Frequenz muss man die Funktion $f(t)$ mindestens scannen, damit alle ihre spektralen Komponenten gerade noch erfasst werden? Denn es ist klar, dass zwischen zwei Messpunkten im Prinzip ein Verlust an Information auftritt, der tendenziell umso größer wird, je länger der „Blindflug“ dauert.

Notwendige Voraussetzung dafür, dass eine solche Grenzfrequenz überhaupt existieren kann, ist, dass die Funktion $f(t)$ **bandlimitiert** ist, d.h. dass sie nur aus Spektralanteilen bis zu einer gewissen oberen Schranke besteht. Wie im nachfolgenden Abschnitt B.3 noch genauer ausgeführt wird, können mit der diskreten Fourier-Transformation bei N Samples auch höchstens N verschiedene Komponenten des Spektrums einer Funktion $f(t)$ aufgelöst werden, für deren (physikalische) Frequenzen die Beziehung

$$\omega_j = \frac{2\pi j}{N \cdot \Delta t}, \quad j \in [0, N-1] \in \mathbb{R} \quad (\text{B.14})$$

gilt. Man erinnere sich nun wieder an den „mathematischen Trick“ in Kapitel A.1, durch den im Zusammenhang mit der Einführung der komplexen Schreibweise negative Frequenzen „erzeugt“ wurden. Nach (A.12) waren dabei die Koeffizienten C_k und C_{-k} konjugiert komplex zueinander. Hier verhält es sich natürlich entsprechend, und unter der zusätzlichen Annahme gerader Funktionen $f(t)$, deren Koeffizienten keinen Imaginärteil besitzen, bedeutet es sogar:

$$F_{-j} = F_j. \quad (\text{B.15})$$

Da wie angesprochen bei der diskreten Fourier-Transformation weiterhin davon ausgegangen wird, $\{f_k\}$ setze sich außerhalb des Samplingintervalls periodisch fort, was zur erwähnten Periodizität auch in $\{F_j\}$ führt, gilt für die Koeffizienten ferner die Identität

$$F_{-j} = F_{N-j}. \quad (\text{B.16})$$

Die Konklusion aus (B.15) und (B.16) ergibt dann

$$F_j = F_{N-j}. \quad (\text{B.17})$$

Als jeweils komplementäre Koeffizienten sind F_j und F_{-j} mit derselben (physikalischen) Frequenzkomponente assoziiert, und damit also auch F_{N-j} .

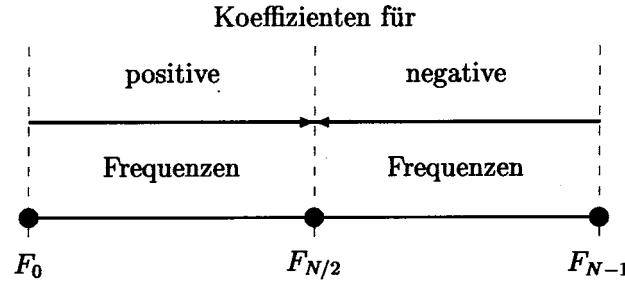


Abb. B.1: Verknüpfung von Koeffizienten und Frequenzen innerhalb des Grundintervalls [But00]

Daher ist im Intervall $j \in [0, N-1] \in \mathbb{Z}_0$ der höchsten Frequenz der Koeffizient $F_{N/2}$ zugeordnet.

Durch Einsetzen von $j = N/2$ in (B.14) erhält man so die gesuchte Abschneidebedingung:

$$\omega_{max} = \frac{2\pi}{N \cdot \Delta t} \cdot \frac{N}{2} = \frac{\pi}{\Delta t}. \quad (\text{B.18})$$

In Einheiten der Scanfrequenz

$$\omega_{scan} = \frac{2\pi}{\Delta t} \quad (\text{B.19})$$

ausgedrückt ist das

$$\omega_{max} = \frac{\pi}{\Delta t} = \frac{\omega_{scan}}{2} = \omega_{Nyq}. \quad (\text{B.20})$$

Diese Größe wird als **Nyquist-Frequenz** ω_{Nyq} bezeichnet und bedeutet, dass man **mindestens zwei Samples pro Periode** von ω_{max} machen, das Signal also mindestens doppelt so schnell abtasten muss wie die höchste in $f(t)$ vorkommende Frequenz. Dann ist die in der Koeffizientenfolge $\{F_j\}$ enthaltene Information tatsächlich vollständig und das Ursprungssignal in eindeutiger Weise rekonstruierbar. Das ist die zentrale Aussage des **Abtasttheorems nach Nyquist-Shannon**.

B.3 Signalverfälschung durch „Aliasing“ oder „Downsampling“

So weit, so gut. Was aber, wenn das Signal nun doch Frequenzanteile größer als ω_{Nyq} enthält, oder andersherum ausgedrückt, wenn ein gegebenes Signal nicht schnell genug abgetastet wird? Vielleicht, weil es nicht anders geht, oder ganz unbeabsichtigt, ohne dass man es überhaupt bemerkt? Man nehme also für einen Augenblick an, als Input seien beliebige Funktionen $f(t)$ erlaubt, d.h. die (physikalischen) Frequenzen ω_j , die diese konstituieren, sind nach oben hin nicht beschränkt. Es gilt:

$$\omega_j = \frac{2\pi j}{N \cdot \Delta t}, \quad j \in \mathbb{Z}_0. \quad (\text{B.21})$$

Da die Koeffizienten periodisch sind in j mit der Periode N ,

$$F_j = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f_k \cdot e^{-i \frac{2\pi j}{N} k}, \quad j, k \in \mathbb{Z}_0, \quad (\text{B.22})$$

kann man nicht mehr trennen zwischen den m verschiedenen Beiträgen

$$F_{m \cdot j} = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f_k \cdot e^{-i \frac{2\pi m \cdot j}{N} k}, \quad j \in [0, N-1] \subset \mathbb{Z}_0, \quad k, m \in \mathbb{Z}_0. \quad (\text{B.23})$$

Stattdessen erhält man eine Summe über alle Möglichkeiten:

$$F_{j(\text{sum})} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} F_{m \cdot j}, \quad j(\text{sum}) = j \in [0, N-1] \subset \mathbb{Z}_0, \quad m \in \mathbb{Z}_0. \quad (\text{B.24})$$

Das rekonstruierte Signal ist somit nicht mehr gleich dem Ursprungssignal, da ja unterschiedslos sämtliche Terme mit gleichem j zu einem gemeinsamen Koeffizienten verschmolzen sind,

$$f_k = \sum_{j(\text{sum})=0}^{N-1} F_{j(\text{sum})} \cdot e^{i \frac{2\pi j(\text{sum})}{N} k}, \quad j(\text{sum}) \in [0, N-1] \subset \mathbb{Z}_0, \quad k \in \mathbb{Z}_0. \quad (\text{B.25})$$

Im Falle gerader Funktionen, deren Fourier-Koeffizienten rein reell sind, verschärft sich das Problem noch! Dann nämlich gilt außerdem (vgl. (A.12) und (B.15))

$$F_{m \cdot j} = F_{m \cdot (N-j)}, \quad (\text{B.26})$$

so dass man als Summe schließlich bekommt:

$$F_{j(\text{sum})} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (F_{m \cdot j} + F_{m \cdot (N-j)}), \quad j(\text{sum}) = j \in \left[0, \frac{N-1}{2} \right] \in \mathbb{Z}, \quad m \in \mathbb{Z}. \quad (\text{B.27})$$

Alle in $f(t)$ vorkommenden spektralen Komponenten werden damit ohne Ansehen ihrer Ordnung in m ins Intervall $[0, \omega_{Nyq}]$ rückgefaltet. Das Ursprungssignal lässt sich aus dem dabei entstehenden Koeffizientensatz nicht mehr eindeutig rekonstruieren. Dieser Vorgang wird als **Aliasing**¹² oder **Downsampling** bezeichnet. In der Praxis ist also darauf zu achten, dass das Signal keine merklichen Frequenzanteile größer als ω_{Nyq} enthält. Eventuell muss der Input mithilfe eines Tiefpassfilters, den man deshalb auch Anti-Alias(ing)-Filter nennt, künstlich bandlimitiert werden.

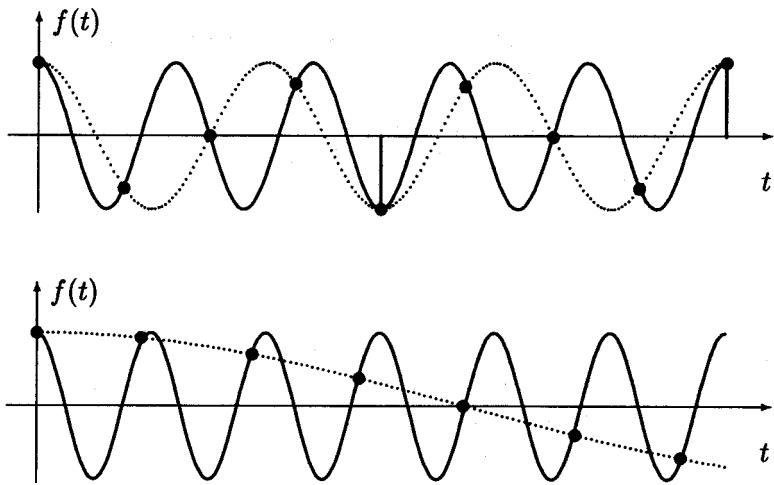


Abb. B.2: *Downsampling: Durchgezogen das Eingangssignal, gepunktet seine Rekonstruktion nach Unterabtastung mit rückgefalteter Frequenz [But00]*

Abbildung B.2 zeigt zwei Fälle von Aliasing: Das durchgezogene dargestellte Eingangssignal wird jeweils gleichmäßig abgetastet, oben mit etwas weniger als zwei Scans pro Periode, unten mit etwas mehr als einem Scan. In beiden Szenarien liegt damit Unterabtastung im Sinne des Abtasttheorems vor. Als Folge davon tritt bei der Rekonstruktion (gepunktet) des Signals die beschriebene Frequenzrückfaltung (Downsampling) auf. Ein gerades Signal wird dabei an der Nyquist-Frequenz des betreffenden Systems „gespiegelt“, wie man sich anhand von (B.17) bzw.

¹² Der Begriff kommt aus dem Lateinischen und bedeutet in etwa „unter anderem Namen auftreten“. Gemeint ist damit der Umstand, dass Signale, die ursprünglich Komponenten oberhalb der Nyquist-Frequenz enthalten, nach Rekonstruktion ein anderes Erscheinungsbild haben, eine neue Identität sozusagen.

(B.26) klarmachen kann. Man spricht aus diesem Grunde auch von Spiegelfrequenzen. Besonders deutlich wird dies, wenn man sich im Frequenzraum die Rekonstruktion eines kontinuierlich ansteigenden, monochromatischen Signals betrachtet. Das aus den Koeffizienten wiederhergestellte Signal wird im Intervall $[0, \omega_{Nyq}]$ stetig hin- und hergefaltet.

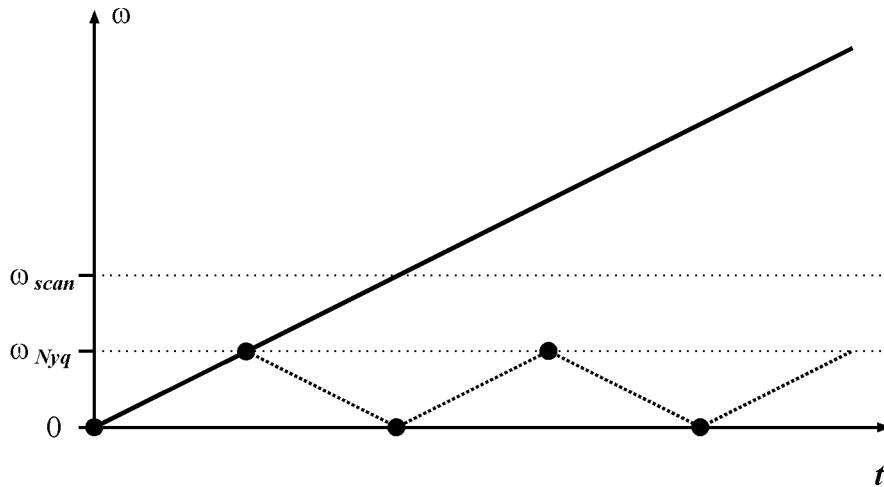


Abb. B.3: Ein im Frequenzraum gleichförmig ansteigendes Signal wird bei Rekonstruktion wiederholt an der Nyquist-Frequenz gespiegelt

B.4 Apodisation

Zu Beginn dieses Kapitels war unter informationstheoretischen Gesichtspunkten die voraussetzende Annahme gemacht worden, dass sich $\{f_k\}$ über das Samplingintervall hinaus periodisch fortsetzen solle. In der Praxis stößt man dabei auf Probleme. Denn oft hat man es mit unperiodischen Funktionen $f(t)$ zu tun, die zudem nur in einem endlichen Intervall T abgetastet werden können. Ja selbst wenn ein periodisches Signal vorliegt, müsste man doch die Periodendauer schon kennen, um entscheiden zu können, wann abgeschnitten werden darf und wann nicht. Und bei mehreren spektralen Komponenten bricht man immer irgendeine zum falschen Zeitpunkt ab. Es sei denn, man wählt das Samplingintervall gleich dem kleinsten gemeinsamen Vielfachen der Einzelperioden, was aber wiederum nicht ohne entsprechendes Vorwissen geht. Wie also lässt sich diesem Dilemma begegnen?

Um bei der periodischen Fortsetzung von $\{f_k\}$ Stufen und Knicke, d.h. Unstetigkeitsstellen in Funktion und 1. Ableitung zu vermeiden, versucht man, das Signal (und damit die darin enthaltene Information) an den Intervallgrenzen sanft ein- und auszublenden. Erreicht wird das,

indem man die einzelnen Folgeglieder passend wichtet. Dieses Verfahren heißt *Apodisation*¹³. Man multipliziert die Folge $\{f_k\}$ bzw. die Funktion $f(t)$ mit einem „Fenster“ $\{g_k\}$ oder $g(t)$. Erst dieses Produkt wird dann transformiert. Allerdings erkauft man sich die Vorteile der Wichtung mit einer spektralen Verbreiterung, d.h. einer Verringerung der Auflösung. Und natürlich transformiert man auch die spezifischen Eigenschaften der jeweiligen Fensterfunktion mit. Diese sollte sich bezüglich der Transformation daher möglichst neutral verhalten.

Fensterfunktionen sind naheliegenderweise gerade Funktionen. Ihre Fourier-Transformierten besitzen also keinen Imaginärteil. Die einfachste unter ihnen ist das sog. Rechteckfenster, bei dem allen Funktionswerten dasselbe Gewicht zugeordnet wird. Sie ist damit eigentlich noch gar keine echte Wichtungsfunktion, aber gerade deshalb sollte man sich klarmachen, was ihr unspezifischer Charakter bewirkt:

$$f(t) = \begin{cases} 1 & \text{für } -T/2 \leq t \leq T/2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}. \quad (\text{B.28})$$

Die Fourier-Transformierte des Rechteckfensters hat in der „Power“-Darstellung die Form

$$|F(\omega)|^2 = T^2 \left[\frac{\sin(\omega T/2)}{(\omega T/2)} \right]^2. \quad (\text{B.29})$$

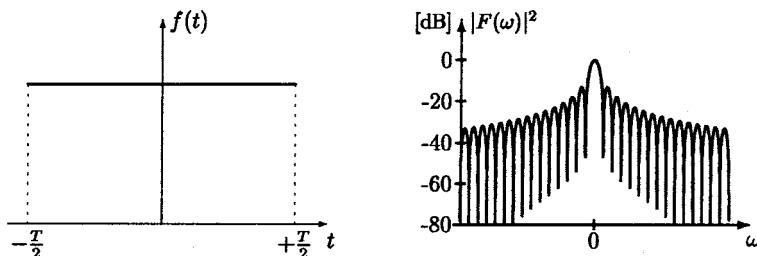


Abb. B.4: Rechteckfenster und seine Transformierte in „Power“-Darstellung [But00]

Eine genauere Analyse zeigt, dass rund 90% der Intensität und damit der Information im zentralen Peak liegen und die Nebenkeulen erster Ordnung um etwa 13,2 dB unterdrückt sind. Wenn auch bei allen sonstigen Fensterfunktionen die Bandbreite der Hauptkeule größer, die Auflösung also geringer ist, ist es aber doch ärgerlich, dass 10% des Informationsgehaltes in den

¹³ Das Wort ist dem Griechischen entlehnt und bezeichnet den Vorgang, sich „einer Sache zu entledigen“. Was genau man hier loswerden möchte, wird gleich klar werden.

„Sidelobes“ verloren gehen. Weist das zu untersuchende Signal neben der prominenten spektralen Komponente noch weitere mit einer um mindestens 10 dB geringeren Intensität auf, so werden diese von den Nebenkeulen der Hauptkomponente praktisch ertränkt. Es ist also durchaus erstrebenswert, diese Sidelobes loszuwerden. Die einfachste echte Wichtungsfunktion ist das Dreieck- oder Fejer-Fenster:

$$f(t) = \begin{cases} 1+2t/T & -T/2 \leq t \leq 0 \\ 1-2t/T & \text{für } 0 \leq t \leq T/2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} . \quad (\text{B.30})$$

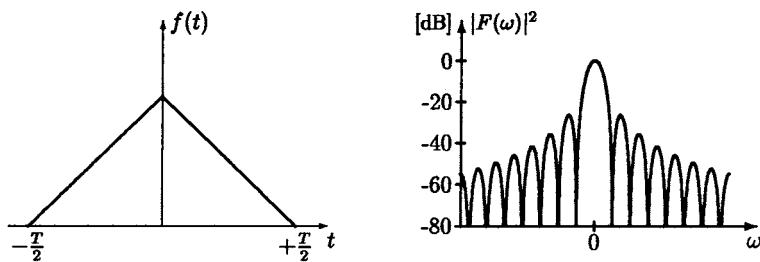


Abb. B.5: Fejer-Fenster und „Power“-Darstellung seiner Transformierten [But00]

Die Intensität im zentralen Peak beträgt 99,7%, die Höhe der 1. Nebenkeule liegt um knapp 26,5 dB unter dem Niveau des Hauptmaximums. Die Bandbreite der Hauptkeule ist allerdings schon fast 1,5-mal so groß wie beim Rechteckfenster. Trotzdem: Dies scheint der richtige Weg zu sein.

Die Thematik soll nicht weiter vertieft werden. Es ist eine Wissenschaft für sich, die jeweils richtige, dem Problem angepasste Apodisationsfunktion zu finden. Mal kommt es auf eine geringe Bandbreite des Zentralpeaks an, dann wieder ist wichtig, dass die Sidelobes besonders rasch abfallen. In Abbildung B.6 sind noch einige gebräuchliche Fensterfunktionen vorgestellt, ohne dass ich aber näher auf diese eingehen möchte. Sie sollen lediglich einen Eindruck davon vermitteln, dass die Parameter entsprechend der jeweiligen Problemstellung durchaus sehr differenziert eingestellt werden können.

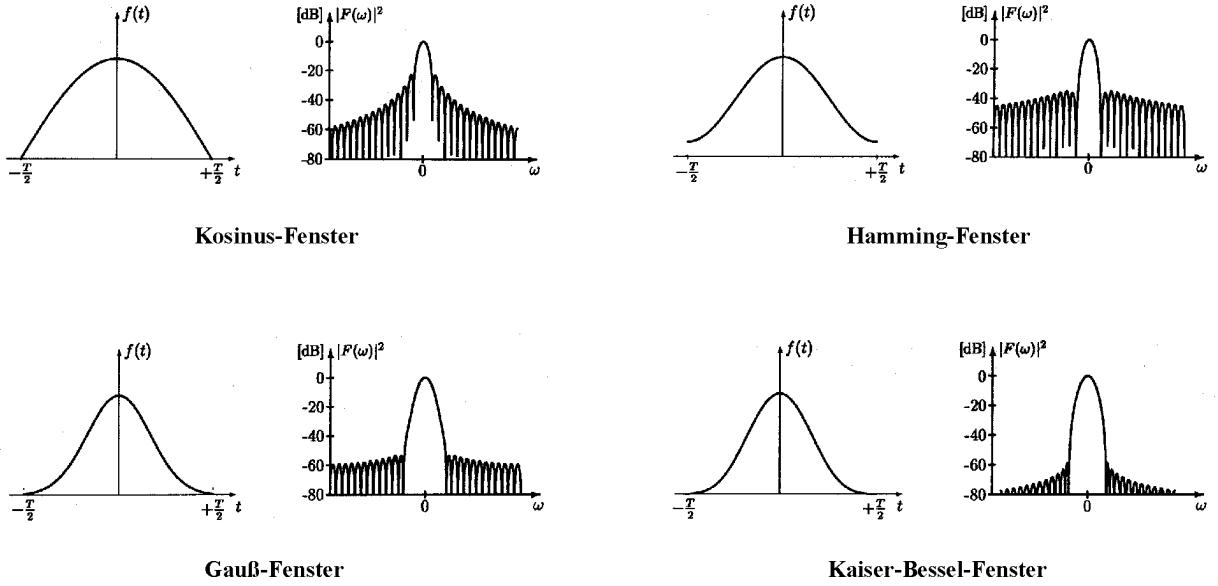


Abb. B.6: Einige gebräuchliche Fensterfunktionen und ihre Transformierten [But00]

B.5 „Zero-Padding“

Da das Spektrum bei der diskreten Fourier-Transformation nur für einzelne, diskrete Frequenzen ermittelt wird, können bei vorgegebenem Samplingraster unter Umständen wichtige Details des kontinuierlichen Spektrums nicht erfasst werden. Um mehr Einzelheiten erkennen zu können, muss die Frequenzauflösung in einem solchen Fall erhöht werden. Ein wichtiges Verfahren in der praktischen Spektralanalyse ist **das Verlängern einer Samplingfolge durch Anhängen von Nullen**, das sog. „Zero-Padding“ oder „Zero-Filling“. Dies ist deshalb von besonderer Bedeutung, weil Zero-Padding in der Zeitdomäne zu einer scheinbar erhöhten Samplingrate in der Frequenzdomäne führt.

Sei also z.B. eine Folge $\{f_k\}$ der Länge N gegeben. Verlängert man diese Folge durch Anhängen von $(M - N)$ Nullen auf M Glieder,

$$f_k = \begin{cases} f_k & \text{für } 0 \leq k \leq N-1 \\ 0 & \text{für } N \leq k \leq M-1 \end{cases}, \quad (\text{B.31})$$

ändert sich damit auch die Periodizität der Koeffizientenfolge:

$$F_{j,N} = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f_k \cdot e^{-i \frac{2\pi j}{N} k} \quad \rightarrow \quad F_{j,M} = \frac{1}{M} \sum_{k=0}^{M-1} f_k \cdot e^{-i \frac{2\pi j}{M} k}, \quad j, k \in \dots \quad (\text{B.32})$$

Die Auflösung verbessert sich so um einen Faktor $\frac{M}{N}$:

$$\Delta\omega_N = \frac{2\pi}{N \cdot \Delta t} \quad \rightarrow \quad \Delta\omega_M = \frac{2\pi}{M \cdot \Delta t}. \quad (\text{B.33})$$

Abbildung B.7 gibt ein Beispiel: Eine Samplingfolge der Länge 22 wird durch Zero-Padding auf die doppelte Länge gebracht. Dadurch verdoppelt sich auch die Samplingrate im Frequenzraum; es werden zusätzliche Strukturen sichtbar. Aber natürlich macht es nicht in jedem Falle Sinn, eine gegebene Messreihe durch Zero-Padding unnötig „aufzublähen“. Ob sich daraus ein Zugewinn an spektraler Information ergibt oder nicht, muss individuell beurteilt werden. Dies hängt sowohl von der zu untersuchenden Funktion ab als auch möglicherweise vom Faktor, um den die Originalfolge erweitert wird. Sinnvoll ist es insbesondere dann, wenn $f(t)$ nicht stetig differenzierbar und damit nicht bandlimitiert ist; dann nämlich kann unabhängig von der Samplingfrequenz immer nur ein begrenzter Teil des Koeffizientenspektrums erfasst werden (allerdings kommt es in einem solchen Fall zwingend immer auch zu Aliasing und damit zur Verfälschung des Spektrums).

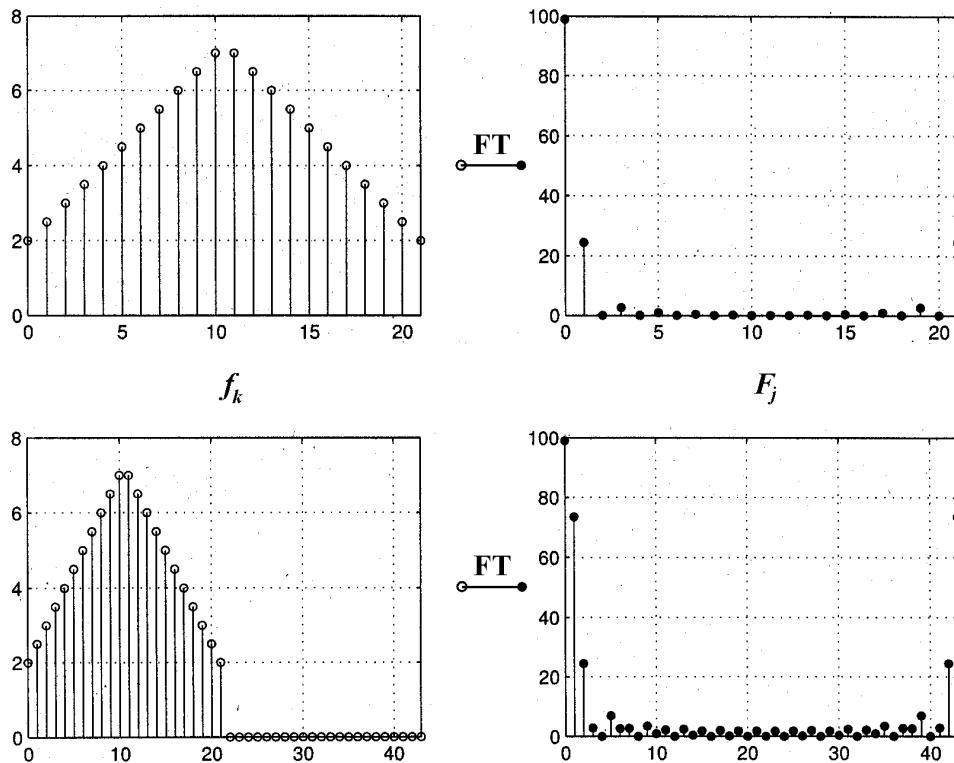


Abb. B.7: Oben: Samplingfolge der Länge 22 und daraus gewonnene Koeffizienten
Unten: Durch Zero-Padding auf die doppelte Länge erweiterte Folge, daneben
interpoliertes Koeffizientenspektrum

B.6 Spektrale Artefakte bei halbseitiger Datenaufnahme

Mit der Problematik des Aliasing wurde in Kapitel B.3 bereits eine potentielle Fehlerquelle im Zusammenhang mit der diskreten Abtastung einer kontinuierlichen Funktion $f(t)$ angesprochen. Aber nicht nur die Rate, mit der $f(t)$ gerastert wird, kann das Ergebnis beeinflussen. Auch der Umstand, wo die Samplingpunkte auf $f(t)$ zu liegen kommen, spielt unter bestimmten Voraussetzungen eine Rolle. Wie sich im dritten Kapitel herausstellen wird, hat man es bei der Fourier-Spektroskopie mit Abtastfunktionen zu tun, die Spiegelsymmetrie zum Ursprung (bzw. allgemein in Bezug auf ein ausgezeichnetes Zentrum, das sich durch Translation aber immer in den Ursprung verschieben lässt) zeigen sowie im Ursprung (Symmetriezentrum) ein globales Maximum aufweisen. Dies erlaubt es im Prinzip, sich damit zu begnügen, nur eine der beiden Hälften zu rastern, ohne dass sich der Informationsgehalt der Messung dadurch ändern würde. Im Prinzip! Die Praxis wartet hier allerdings mit einer Tücke auf. Kann man nämlich das Zentrum in Form des globalen Funktionsmaximums nicht mit hinreichender Genauigkeit lokalisieren, führt dies beim Spiegeln (um $f(t)$ transformieren zu können) entweder dazu, dass ein kleiner Bereich um den Ursprung herum „verschluckt“ wird, oder aber die Peripherie des Ursprungs geht doppelt in die Transformation ein. In beiden Fällen sind die Folgen einerseits ein mehr oder weniger stark ausgeprägter Knick¹⁴ im Zentrum der daraus rekonstruierten Funktion $f(t)$, andererseits eine frequenzabhängige Phasenverschiebung sämtlicher spektraler Komponenten.

Zur Erinnerung: In (B.1) waren die Samplingpunkte so definiert worden, dass der erste von ihnen mit dem Ursprung (als einem in diesem Fall willkürlich ausgezeichneten Zentrum) zusammenfällt, nämlich

$$t_k = k \cdot \Delta t \quad \text{für } k \in [0, N-1] \in \mathbb{Z} \quad (B.34)$$

Zum Zeitpunkt der Definition war das noch ohne tiefere Bedeutung, entscheidend nur, exakt eine Phase der dort als periodisch angenommenen Funktion $f(t)$ zu erfassen. Es bekommt jedoch Gewicht in Verbindung mit der erwähnten Spiegelsymmetrie einer ansonsten unperiodischen Funktion, wenn man durch Beschränkung auf halbseitige Abtastung Zeit und Rechenleistung einsparen möchte. Denn aus einer gegebenen, einseitig aufgenommenen Samplingfolge kann man die Lage des Symmetriezentrums höchstens auf Δt genau

¹⁴ Der Verlust der stetigen Differenzierbarkeit von $f(t)$ führt bekanntlich dazu, dass sich die Funktion nicht mehr durch endlich viele Fourier-Koeffizienten repräsentieren lässt; es werden also (Hoch-)Frequenzanteile ohne reale Entsprechung generiert.

rekonstruieren. Was also, falls sich der zentrale Samplingpunkt mit dem wahren Ursprung nicht deckt, sondern ihn um einen kleinen Betrag $|\tau| \leq \Delta t/2$ verfehlt?

Man betrachte zu diesem Zweck eine Spektralfunktion $F(\omega - \omega_0)$, $\omega_0 \in \mathbb{R}_+$, und überlege sich, auf welche konstituierende Funktion $f(t)$ diese zurückgeführt werden kann¹⁵. Nach (A.22) ist diese gegeben durch

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega - \omega_0) \cdot e^{i\omega t} d\omega, \quad t \in \mathbb{R}. \quad (\text{B.35})$$

Mit Hilfe des 2. Verschiebungssatzes, siehe Anhang C, Korrespondenzbeziehung (C.10), lässt sie sich auch in der Form

$$f(t) = e^{i\omega_0 t} \cdot \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) \cdot e^{i\omega t} d\omega, \quad t \in \mathbb{R}. \quad (\text{B.36})$$

darstellen. Wollte man umgekehrt zu einer gegebenen Funktion $f(t)$ das zugehörige Spektrum berechnen, so hat man wegen (A.12) eine paritätische Verteilung der spektralen Anteile auf positive und negative Koeffizienten zu erwarten; das physikalische Spektrum ist im Sinne der Fourier-Transformation also gleichwertig mit der zusammengesetzten Spektralfunktion

$$\frac{1}{2} F(\omega - \omega_0) + \frac{1}{2} F(-\omega + \omega_0) \stackrel{\substack{\text{bei} \\ \text{Symmetrie} \\ \text{bzgl. } \omega_0}}{=} \frac{1}{2} F(\omega - \omega_0) + \frac{1}{2} F(\omega + \omega_0). \quad (\text{B.37})$$

Für $f(t)$ ergibt sich damit:

$$f(t) = \frac{1}{2} (e^{i\omega_0 t} + e^{-i\omega_0 t}) \cdot \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) \cdot e^{i\omega t} d\omega$$

$$= \frac{\cos \omega_0 t}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) \cdot e^{i\omega t} d\omega \stackrel{\substack{\text{wegen} \\ \text{Symmetrie}}}{=} \frac{\cos \omega_0 t}{\pi} \int_0^{\infty} F(\omega) \cdot \cos \omega t d\omega. \quad (\text{B.38})$$

¹⁵ Die gewählte Darstellung ist der Beschreibung eines physikalischen Systems mit einer einzelnen Emissionslinie bei $+\omega_0$ angepasst. F enthält, ohne hier weiter spezifiziert zu werden, Informationen bezüglich Linienform und -breite, die das Dämpfungsverhalten der Transformierten bestimmen.

Dies ist tatsächlich die Transformierte der (physikalischen) Spektralfunktion $F(\omega - \omega_0)$, die ich im Folgenden als Interferogramm bezeichnen werde.

Angenommen, das Interferogramm liegt in der Form (B.38) vor. Beschränkt man sich der Symmetrie wegen auf die (in der Praxis natürlich diskrete und auf ein endliches Intervall begrenzte) Abtastung einer der beiden Hälften, so sollte sich das Spektrum durch

$$\begin{aligned} F(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cdot e^{-i\omega t} dt \stackrel{\text{Symmetrie}}{\sim} 2 \int_0^{\infty} f(t) \cdot \cos \omega t dt \\ &= 2 \int_0^{\infty} \frac{\cos \omega_0 t}{\pi} \int_0^{\infty} F(\omega') \cdot \cos \omega' t d\omega' \cdot \cos \omega t dt \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

beschreiben lassen. Verfehlt man mit dem zentralen Samplingpunkt dabei den Ursprung jedoch um ein kleines Intervall

$$\tau = t_{wahr} - t_{mess} \quad \text{mit } t_{wahr} \equiv t, \quad (\text{B.40})$$

dann nimmt das Spektrum, das man aus dem dabei erhaltenen Interferogramm gewinnt, die Gestalt

$$\begin{aligned} F(\omega, t_{mess}) &= 2 \int_0^{\infty} f(t_{mess}) \cdot \cos \omega t dt \\ &= 2 \int_0^{\infty} \frac{\cos \omega_0 t_{mess}}{\pi} \int_0^{\infty} F(\omega') \cdot \cos \omega' t_{mess} d\omega' \cdot \cos \omega t dt \quad \text{bzw.} \end{aligned} \quad (\text{B.41})$$

$$F(\omega, \tau) = 2 \int_0^{\infty} \frac{\cos \omega_0 (t - \tau)}{\pi} \int_0^{\infty} F(\omega') \cdot \cos \omega' (t - \tau) d\omega' \cdot \cos \omega t dt \quad (\text{B.42})$$

an; man ordnet den Abtastpunkten des Interferogramms also fälschlicherweise um den Betrag von τ verschobene Werte zu. Wendet man auf (B.42) die trigonometrische Identität

$$\cos(a - b) = \cos a \cos b + \sin a \sin b \quad (\text{B.43})$$

an, erhält man in Umformung den Ausdruck

$$\begin{aligned}
 F(\omega, \tau) = & 2 \cdot \left\{ \cos \omega_0 \tau \int_0^\infty \frac{\cos \omega_0 t}{\pi} \left(\int_0^\infty F(\omega') \cdot \cos \omega' t \cos \omega' \tau d\omega' + \dots \right. \right. \\
 & \left. \left. \dots + \int_0^\infty F(\omega') \cdot \sin \omega' t \sin \omega' \tau d\omega' \right) \cdot \cos \omega t dt + \dots \right. \\
 & \left. \dots + \sin \omega_0 \tau \int_0^\infty \frac{\sin \omega_0 t}{\pi} \left(\int_0^\infty F(\omega') \cdot \cos \omega' t \cos \omega' \tau d\omega' + \dots \right. \right. \\
 & \left. \left. \dots + \int_0^\infty F(\omega') \cdot \sin \omega' t \sin \omega' \tau d\omega' \right) \cdot \cos \omega t dt \right\} \quad (B.44)
 \end{aligned}$$

Bei $f(t)$ handelt es sich nach Voraussetzung um eine gerade Funktion, d.h. die zugehörigen Koeffizienten $F(\omega)$ sind reell. Die Fehlinterpretation der Samplingwerte führt nun aber zum Auftreten ungerader Anteile: Die resultierenden Koeffizienten werden im Allgemeinen komplexer Natur sein, wobei ihre Orientierung neben dem Absolutbetrag von τ auch von der jeweils betrachteten Frequenz ω abhängt. Maximal wird dieser Effekt für $|\omega\tau| = \pi/2$, da sich in dem Fall die Richtung des Koeffizientenvektors in der komplexen Ebene für gegebenes t gerade um 90° dreht. Aus den in Wahrheit eigentlich reellen Koeffizienten würden so ganz und gar imaginäre Größen (und aus $f(t)$ eine scheinbar vollständig ungerade Funktion). Muss mit dem Eintreten eines solchen Falles gerechnet werden?

Das angeführte Beispiel beschreibe, wie gesagt, ein monochromatisches Spektrum mit endlicher Linienbreite. Man gehe davon aus, das Interferogramm werde mit einer Rate abgetastet, die gerade etwas größer ist als die doppelte Mittelfrequenz ω_0 , d.h.

$$\omega_{\text{scan}} = 2 \cdot (\omega_0 + \delta\omega), \quad \delta\omega \vee \omega_0. \quad (B.45)$$

Dadurch sei, siehe Kapitel B.2, die Gültigkeit der Abtastbedingung

$$\omega_{\text{Nyq}} \geq \omega_{\text{max}} \quad (B.46)$$

gewährleistet. Für das Intervall Δt zwischen zwei Abtastpunkten bedeutet dies:

$$\Delta t = \frac{\pi}{(\omega_0 + \delta\omega)}. \quad (B.47)$$

Da sich die wirkliche Lage des Ursprungs systembedingt nur auf Δt genau eingrenzen lässt, gilt weiterhin

$$|\tau| \leq \frac{\Delta t}{2} = \frac{\pi}{2 \cdot (\omega_0 + \delta\omega)}, \quad (\text{B.48})$$

so dass man schließlich findet:

$$|\omega_0 \tau| \leq \frac{\pi \cdot \omega_0}{2 \cdot (\omega_0 + \delta\omega)} \approx \frac{\pi}{2}. \quad (\text{B.49})$$

$|\omega_0 \tau| \approx \pi/2$ bezeichnet hierbei den ohne weiteres denkbaren Fall, dass sich das gesuchte Zentrum in etwa mittig zwischen zwei Samplingpunkten befindet. Es muss also gefolgert werden, dass tatsächlich mit deutlichen spektralen Artefakten zu rechnen ist.

Wie nun verändert sich das Erscheinungsbild der Spektren dadurch in der Praxis? Um diese Frage beantworten zu können, muss man sich zunächst noch einmal klar machen, dass $f(t)$ eine gerade Funktion ist und man deshalb reelle Koeffizienten erwartet. Darauf basiert ja die Idee der halbseitigen Datenaufnahme. Diese Erwartungshaltung führt bei der Bestimmung der Spektralfunktion $F(\omega)$ aber dazu, dass man für eventuell eben doch auftretende imaginäre Anteile „blind“ ist.

Ein konkretes Beispiel [Bel72, Chap. 12, pp. 154]:

Angenommen, das zu untersuchende Spektrum habe die Form

$$F(\omega) := \frac{A \cdot \varepsilon}{(\omega - \omega_0)^2 + \varepsilon^2}. \quad (\text{B.50})$$

Gleichung (B.50) beschreibt eine Lorentz-Linie, wie sie z.B. häufig in atomaren und molekularen Absorptions- und Emissionsspektren angetroffen wird. Die Peakintensität bei $\omega = \omega_0$ beträgt A/ε , die Halbwertsbreite 2ε . Lösen von (B.44) führt dann in Abhängigkeit von einem bestimmten Zuordnungsfehler τ auf die neue Spektralfunktion

$$F(\omega, \tau) = \frac{A \cdot \varepsilon}{(\omega - \omega_0)^2 + \varepsilon^2} \cdot \cos \varepsilon \tau \left(\cos \omega_0 \tau + \sin \omega_0 \tau \cdot \frac{\omega_0 - \omega}{\varepsilon} \right). \quad (\text{B.51})$$

Daran lässt sich die vom Betrag des Produkts aus ω_0 und τ vorgegebene Verteilung auf gerade (Kosinus) und ungerade Anteile (Sinus) nun unmittelbar ablesen. Die Projektion der ungeraden Komponente dieser Summe auf die reelle Achse bewirkt das Auftreten eines antisymmetrischen Verteilungsterms und verursacht somit negative Spektralbereiche.

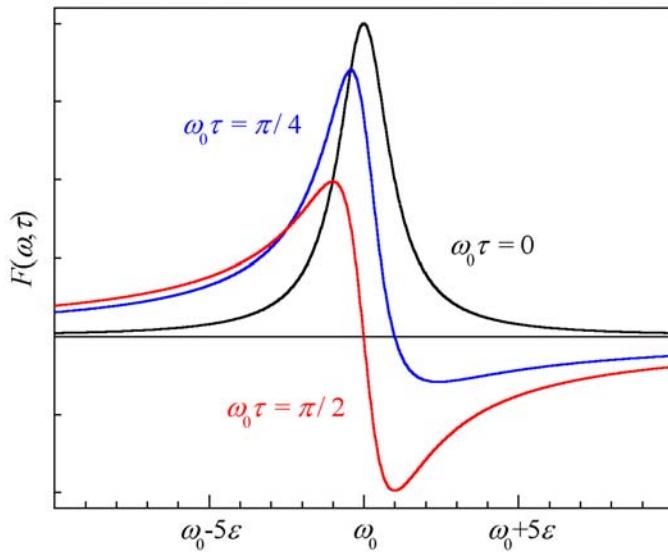


Abb. B.8: Numerische Simulation des sich wandelnden Erscheinungsbildes einer Lorentz-Linie unter dem Einfluss verschieden großer Phasenfehler

Ein Spektrum mit negativen Anteilen ist auf den ersten Blick natürlich eine unschöne Sache. Ist man sich des eben beschriebenen Effekts jedoch bewusst, verliert der Anblick eines solchen Spektralverlaufs seinen Schrecken. Da zudem der Schwerpunkt und die Gesamtamplitude der spektralen Verteilung Erhaltungsgrößen sind, lassen sich zumindest Linienspektren relativ problemlos interpretieren.

$$A \text{ } n \text{ } h \text{ } a \text{ } n \text{ } g \text{ } \quad C$$

FALTUNGSALGEBRA

C.1 Kontinuierliche Faltung

Die Faltung ist eine der Multiplikation verwandte Rechenvorschrift zur Verknüpfung zweier Funktionen. **Definition:** Unter der Faltung einer Funktion $f(t)$ mit einer anderen Funktion $g(t)$ versteht man die Verknüpfungsrelation

$$f(t) * g(t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f(t') \cdot g(t-t') dt', \quad \text{mit } t, t' \in \mathbb{R}. \quad (\text{C.1})$$

Das Faltungsintegral wird auch **Duhamel-Integral** genannt und mit dem Sternsymbol abgekürzt. Die Faltung ist kommutativ,

$$f(t) * g(t) = g(t) * f(t), \quad (\text{C.2})$$

distributiv,

$$f(t) * (g(t) + h(t)) = f(t) * g(t) + f(t) * h(t), \quad (\text{C.3})$$

und assoziativ,

$$f(t) * (g(t) * h(t)) = (f(t) * g(t)) * h(t). \quad (\text{C.4})$$

Das Neutralelement der Faltung ist der Dirac-Stoss:

$$f(t) * \delta(t) = f(t). \quad (\text{C.5})$$

C.2 Diskrete Faltung

Definition: Unter der *linearen Faltung* einer unendlichen Folge $\{f_k\}$ mit einer anderen unendlichen Folge $\{g_k\}$ versteht man die Verknüpfungsrelation

$$f_k * g_k \equiv \sum_{j=-\infty}^{\infty} f_j \cdot g_{k-j} \quad \text{mit } j, k \in \dots . \quad (\text{C.6})$$

Um die diskrete Faltung tatsächlich ausführen zu können, müssen die Folgen $\{f_k\}$ und $\{g_k\}$ von endlicher Länge N sein. Sind die Sequenzen ungleich lang, so wird die kürzere von beiden durch Anhängen von Nullen auf N Glieder verlängert (Zero-Padding). Unter der Annahme periodischer Fortsetzung der Folgen gelangt man dann zur *zyklischen* oder *zirkulären Faltung*:

$$f_k * g_k \equiv \sum_{j=0}^{N-1} f_j \cdot g_{k-j} \quad \text{mit } j, k \in [0, N-1] \in \dots . \quad (\text{C.7})$$

C.3 Verschiebungssätze

Verschiebung in der Zeitdomäne (1. Verschiebungssatz): Es seien gegeben eine Funktion $x(t)$ und ihre Fourier-Transformierte $X(\omega)$. Dann gilt für die Transformierte der um $-\tau$ verschobenen Funktion $x(t-\tau)$:

$$x(t-\tau) \leftrightarrow X(\omega) \cdot e^{-i\omega\tau} . \quad (\text{C.8})$$

Beweis:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x(t-\tau) \cdot e^{-i\omega t} dt \stackrel{\text{Substitution}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} x(t') \cdot e^{-i\omega t'} dt' \cdot e^{-i\omega\tau} = X(\omega) \cdot e^{-i\omega\tau} . \square \quad (\text{C.9})$$

Verschiebung in der Frequenzdomäne (2. Verschiebungssatz): Gegeben eine Funktion $x(t)$ und ihre Fourier-Transformierte $X(\omega)$. Für die Zeitfunktion der um die Frequenz $-\psi$ verschobenen Transformierten gilt:

$$X(\omega - \psi) \leftrightarrow x(t) \cdot e^{i\psi t} . \quad (\text{C.10})$$

Beweis:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} X(\omega - \psi) \cdot e^{i\omega t} d\omega \stackrel{\text{Substitution}}{=} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} X(\omega') \cdot e^{i\omega' t} d\omega' \cdot e^{i\psi t} = x(t) \cdot e^{i\psi t}. \square \quad (\text{C.11})$$

C.4 Faltungstheorem

Es seien gegeben zwei Funktionen $x_1(t)$ und $x_2(t)$ und eine Verknüpfung darauf derart, dass

$$y(t) = x_1(t) * x_2(t), \quad (\text{C.12})$$

sowie die Fourier-Transformierten der beiden Funktionen $X_1(\omega)$ und $X_2(\omega)$. Dann gilt für die Fourier-Transformierte $Y(\omega)$ der Verknüpfung:

$$Y(\omega) = X_1(\omega) \cdot X_2(\omega). \quad (\text{C.13})$$

Beweis:

$$\begin{aligned} Y(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} y(t) \cdot e^{-i\omega t} dt = \int_{-\infty}^{\infty} x_1(t) * x_2(t) \cdot e^{-i\omega t} dt \\ &\stackrel{(C.1)}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x_1(t') \cdot x_2(t-t') dt' \cdot e^{-i\omega t} dt \stackrel{\text{Integration vertauschen}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} x_1(t') \int_{-\infty}^{\infty} x_2(t-t') \cdot e^{-i\omega t} dt dt' \\ &\stackrel{(C.8)}{=} X_2(\omega) \int_{-\infty}^{\infty} x_1(t') \cdot e^{-i\omega t'} dt' = X_1(\omega) \cdot X_2(\omega). \square \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

Genauso kann mit einer Faltung im Frequenzbereich

$$Y(\omega) = X_1(\omega) * X_2(\omega) \quad (\text{C.15})$$

verfahren werden, man erhält:

$$y(t) = 2\pi \cdot x_1(t) \cdot x_2(t). \quad (\text{C.16})$$

Beweis:

$$y(t) = \int_{-\infty}^{\infty} Y(\omega) \cdot e^{i\omega t} d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} X_1(\omega) * X_2(\omega) \cdot e^{i\omega t} d\omega$$

$$\stackrel{(C.1)}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} X_1(\omega') \cdot X_2(\omega - \omega') d\omega' \cdot e^{i\omega t} d\omega$$

$$\stackrel{\text{Integration vertauschen}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} X_1(\omega') \int_{-\infty}^{\infty} X_2(\omega - \omega') \cdot e^{i\omega t} d\omega d\omega'$$

$$\stackrel{(C.10)}{=} x_2(t) \int_{-\infty}^{\infty} X_1(\omega') \cdot e^{i\omega' t} d\omega' = 2\pi \cdot x_1(t) \cdot x_2(t). \quad \square \quad (C.17)$$

Damit lässt sich das **Faltungstheorem der Fourier-Transformation** formulieren:

Eine Faltung in der Zeitdomäne entspricht einer Multiplikation in der Frequenzdomäne (und umgekehrt).

ZUSAMMENFASSUNG

Im Rahmen dieser Dissertation wurden die Emissionen elektromagnetischer Strahlung aus Frequenzmultiplikatoren auf Halbleiter-Übergitter-Basis untersucht. Es wurde gezeigt, dass mit Halbleiter-Übergittern durch Frequenzvervielfachung Submillimeterwellen, insbesondere mit Frequenzen von über einem Terahertz, erzeugt werden können. Dabei wurden Oberwellen bis zur 16. Ordnung oder knapp $1,8\text{ THz}$ nachgewiesen. Die Oberwellen wurden teils durch Multiplikation selbsterregter Bias-Oszillationen erzeugt, teils durch Vervielfachung eines von außen aufgeprägten Hochfrequenzfeldes.

Gegenstand der Untersuchungen waren zum einen zwei Bias-Oszillatoren. Die Bauelemente wurden mittels in unserer Gruppe entwickelter Verfahren der photolithographischen Mikrostrukturierung und galvanischen Abformung von Hohlleiterkomponenten hergestellt. Die Oszillatoren zeigten Emissionen mit Grundfrequenzen von $33,8\text{ GHz}$ bzw. $42,5\text{ GHz}$ und Oberwellen bis jeweils knapp 500 GHz .

Zum anderen wurde der Effekt der Frequenzmultiplikation bei Bestrahlung einer Übergitterstruktur mit einem hochfrequenten Wechselfeld untersucht. Es konnte gezeigt werden, dass es möglich ist, auf diese Art Strahlung von über einem Terahertz zu erzeugen. Ausgehend von einem Erregerfeld der Frequenz 110 GHz lag die höchste beobachtete Oberwelle in 16. Ordnung oder bei rund $1,8\text{ THz}$.

Die Untersuchungen wurden mit einem modifizierten Rapid-Scan-Fourier-Spektrometer durchgeführt. Ein auf die Temperatur flüssigen Heliums gekühltes Silizium-Bolometer, das den Nachweis von Strahlungsleistungen im Picowattbereich erlaubt, diente zur Detektion der Emissionen. In Verbindung mit den verfahrensbedingten Vorzügen ermöglichte dies eine hochempfindliche Charakterisierung der Übergitterbauelemente.

A B B I L D U N G S V E R Z E I C H N I S

- Abb. 1.1* S. 16 *Dispersionsrelation für die Elektronen im untersten Übergitterminiband*
- Abb. 1.2* S. 17 *Elektron in einem statischen elektrischen Feld im Übergitter*
- Abb. 1.3* S. 19 *Abhängigkeit der Driftgeschwindigkeit der Elektronen von der elektrischen Feldstärke im Esaki-Tsu-Modell*
- Abb. 1.4* S. 21 *Domänendynamik: Konzentration freier Ladungsträger im Übergitter in Abhängigkeit von Ort und Zeit bei Anliegen eines konstanten externen elektrischen Feldes hinreichender Stärke*
- Abb. 1.5* S. 22 *Stromoszillationen, wie sie sich aus der Verteilung freier Ladungsträger in der durch Abb. 1.4 beschriebenen Situation ergeben*
- Abb. 1.6* S. 23 *Abtastung einer Kennlinie mit Esaki-Tsu-Charakteristik mithilfe eines harmonischen Wechselfeldes und daraus resultierende Stromantwort*
- Abb. 1.7* S. 24 *Domänen als Ursache von Oberwellen in der Stromantwort*
- Abb. 2.1* S. 26 *SU-8-Negativ zur Abformung einer Resonatorhälfte*
- Abb. 2.2* S. 26 *Nickel-Oszillator: Eine Hälfte des fertig abgeformten Hohlleiterresonators mit Einbauten*
- Abb. 2.3* S. 27 *Der Hohlraumresonator wird aus zwei Hälften zusammengesetzt*
- Abb. 2.4* S. 27 *SU-8-Oszillator: Rasterelektronenmikroskopische Aufnahme einer der beiden Resonatorhälften*
- Abb. 2.5* S. 28 *Quasiplanare Übergitterstruktur*
- Abb. 2.6* S. 29 *SU-8-Oszillator mit Messing-Flansch*
- Abb. 2.7* S. 30 *Übergitter-Frequenzvervielfacher*

- Abb. 3.1 S. 32 Schematischer Aufbau eines Genzel-Interferometers mit gekoppelt-variablen Interferometerarmen*
- Abb. 3.2 S. 35 Einseiten-Interferogramm für monochromatische Strahlung*
- Abb. 3.3 S. 44 Zerlegung eines Strahls am Strahlteiler durch Vielfachreflexion*
- Abb. 4.1 S. 48 Schmacezeichnung des Fourier-Spektrometers Bruker IFS 113v*
- Abb. 5.1 S. 54 Gleichstromkennlinie des Nickel-Oszillators*
- Abb. 5.2 S. 55 Spektrum des Nickel-Oszillators*
- Abb. 5.3 S. 56 Gleichstromkennlinie des SU-8-Oszillators*
- Abb. 5.4 S. 56 Spektrum des SU-8-Oszillators*
- Abb. 6.1 S. 58 Gleichstromkennlinie des Frequenzvervielfachers*
- Abb. 6.2 S. 59 Spektrum des mit 110 GHz angeregten Frequenzvervielfachers*
- Abb. A.1 S. 63 Basisfunktionen der Fourier-Reihe*
- Abb. B.1 S. 74 Verknüpfung von Koeffizienten und Frequenzen innerhalb des Grundintervalls*
- Abb. B.2 S. 76 Downsampling*
- Abb. B.3 S. 77 Ein im Frequenzraum gleichförmig ansteigendes Signal wird bei Rekonstruktion wiederholt an der Nyquist-Frequenz gespiegelt*
- Abb. B.4 S. 78 Rechteckfenster und seine Transformierte*
- Abb. B.5 S. 79 Fejer-Fenster und seine Transformierte*
- Abb. B.6 S. 80 Einige gebräuchliche Fensterfunktionen und ihre Transformierten*
- Abb. B.7 S. 81 Interpolation des Koeffizientenspektrums durch Zeropadding*
- Abb. B.8 S. 87 Numerische Simulation des sich wandelnden Erscheinungsbildes einer Lorentz-Linie unter dem Einfluss verschieden großer Phasenfehler*

L I T E R A T U R V E R Z E I C H N I S

- [Bel72] Bell, R. J., *Introductory Fourier Transform Spectroscopy*, Academic Press, New York (1972)
- [Blo28] Bloch, F., *Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern*, Z. Phys., **52**, 555 (1928)
- [But00] Butz, T., *Fouriertransformation für Fußgänger*, Teubner Verlag, Stuttgart, 2. Aufl. (2000)
- [Chm79] Chamberlain, J. E., *The Principles of Interferometric Spectroscopy: Fourier Transform Spectroscopy*, Wiley Interscience, New York (1979)
- [Chn71] Chantry, G. W., *Submillimetre Spectroscopy*, Academic Press, New York (1971)
- [Esa70] Esaki, L., Tsu, R., *Superlattices and Negative Differential Conductivity in Semiconductors*, IBM J. Res. Dev., **14**, 61 (1970)
- [Fel51] Fellgett, P. B., *Theory of Infra-Red Sensitivities and its Application to Investigations of Stellar Radiation in the Near-Infra-Red*, Thesis, University of Cambridge (1951)
- [Gra65] Gradsteyn, I. S., Ryzhik, I. M., *Tables of Series, Integrals and Products*, Academic Press, New York (1965)
- [Häu03_1] Häußler, M., Scheuerer, R., Renk, K. F., Koschurinov, Yu., Pavel'ev, D. G., *Microwave Frequency Multiplication by Use of Space Charge Domains in a Semiconductor Superlattice*, Electron. Lett., **39**, 628 (2003)
- [Häu03_2] Häußler, M., Schomburg, E., Batke, J.-M., Klappenberger, F., Weber, A., Appel, H., Renk, K. F., Hummel, H., Stroebel, B., Pavel'ev, D. G., Koschurinov, Yu., *Millimetre-Wave Generation with Semiconductor Superlattice Mounted in Cavity Fabricated by UV-Photolithography and Galvanoforming*, Electron. Lett., **39**, 784 (2003)

- [Hof96] Hofbeck, K., Grenzer, J., Schomburg, E., Ignatov, A. A., Renk, K. F., Pavel'ev, D. G., Koschurinov, Yu., Melzer, B., Ivanov, S., Schaposchnikov, S., Kop'ev, P. S., ***High Frequency Self-Sustained Current Oscillation in an Esaki-Tsu Superlattice Monitored via Microwave Emission***, Phys. Lett. A., **218**, 349 (1996)
- [Hot97] Hotop, H.-J., Oberg, H.-J., ***Fourier- und Laplace transformation: Theorie und Anwendungen in der Elektrotechnik***, Vorlesungen zum Informatik- und Ingenieurstudium Band 9, Verlag Dr. Bernd Wißner, Augsburg, 2. Aufl. (1997)
- [Jac54] Jacquinot, P., ***The Luminosity of Spectrometers with Prisms, Gratings or Fabry-Perot Etalons***, J. Opt. Soc. Amer., **44**, 761 (1954)
- [Jen57] Jenkins, F. A., White, H. E., ***Fundamentals of Optics***, McGraw-Hill Book Company, New York, 3rd Edition (1957)
- [Joh91] Johnston, S. F., ***Fourier Transform Infrared: A Constantly Evolving Technology***, Ellis Horwood Limited, London (1991)
- [Mey98] Meyer, M., ***Signalverarbeitung***, Vieweg Verlag, Wiesbaden (1998)
- [Mic91] Michelson, A. A., ***On the Application of Interference-Methods to Spectroscopic Measurements***, Phil. Mag. (Ser. 5), **31**, 338 (1891)
- [Mic92] Michelson, A. A., ***On the Application of Interference-Methods to Spectroscopic Measurements***, Phil. Mag. (Ser. 5), **34**, 280 (1892)
- [Mic98] Michelson, A. A., Stratton, S. W., ***A New Harmonic Analyser***, Phil. Mag. (Ser. 5), **45**, 85 (1898)
- [Mil95] Mildenberger, O., ***System- und Signaltheorie***, Vieweg Verlag, Wiesbaden (1995)
- [Sce02] Scheuerer, R., ***Domänendynamik in Halbleiter-Übergittern***, Dissertation, Universität Regensburg (2002)

- [Sce03] Scheuerer, R., Häußler, M., Renk, K. F., Schomburg, E., Koschurinov, Yu., Pavel'ev, D. G., Male'ev, N., Ustinov, V., Zhukov, A., **Frequency Multiplication of Microwave Radiation by Propagating Domains in a Semiconductor Superlattice**, Appl. Phys. Lett., **82**, 2826 (2003)
- [Scb98] Schomburg, E., Grenzer, J., Hofbeck, K., Blomeier, T., Winnerl, S., Brandl, S., Ignatov, A. A., Renk, K. F., Pavel'ev, D. G., Koschurinov, Yu., Ustinov, V., Zhukov, A., Kovsch, A., Ivanov, S., Kop'ev, P. S., **Millimeter Wave Generation with a Quasi Planar Superlattice Electronic Device**, Solid-State Electron., **42**, 1495 (1998)
- [Ste64] Steel, W. H., **Interferometers without Collimation for Fourier Spectroscopy**, J. Opt. Soc. Amer., **54**, 151 (1964)
- [Zen34] Zener, C., Proc. Roy. Soc. London (Ser. A), **145**, 523 (1934)