


Forschungszentrum Karlsruhe
Technik und Umwelt

Wissenschaftliche Berichte
FZKA 5885

**Simulationsrechnungen
zur verfahrenstechnischen
Anwendung von Millimeter-
wellen für die industrielle
Materialprozeßtechnik**

L. E. Feher

Institut für Technische Physik

August 1997



Forschungszentrum Karlsruhe

**Technik und Umwelt
Wissenschaftliche Berichte
FZKA 5885**

**Simulationsrechnungen zur verfahrenstechnischen
Anwendung von Millimeterwellen für die industrielle
Materialprozeßtechnik**

Lambert E. Feher

Institut für Technische Physik

**Von der Fakultät für Elektrotechnik der Universität Karlsruhe (TH)
genehmigte Dissertation.**

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

1997

Als Manuskript gedruckt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 76021 Karlsruhe

Mitglied der Hermann von Helmholtz-Gemeinschaft
Deutscher Forschungszentren (HGF)

ISSN 0947-8620

Simulationsrechnungen zur verfahrenstechnischen Anwendung von Millimeterwellen für die industrielle Materialprozeßtechnik

In dieser Arbeit werden mittels Simulationsrechnungen verfahrenstechnische Fragestellungen für die industrielle Materialverarbeitung mit hochfrequenten (HF) elektromagnetischen Wellen untersucht. Dabei steht das Sintern von Keramiken im Vordergrund. Erstmals konnten durch Simulationen zentrale Problemstellungen der HF-Prozeßtechnik, wie die Auslegung großer hochmodiger mm-Wellenapplikatoren, die Bereitstellung großräumig homogener Feldverteilungen, die Auswirkung verschiedener technischer Hilfsmittel (Modenrührer, Drehteller etc. in Kombination) auf die Feldverteilung im Applikator, bzw. der Keramik und die selbstkonsistente Temperaturdynamik in einer Probe während des Erhitzens/Sinterns systematisch untersucht und Konzepte zur Optimierung gewonnen werden.

Zur elektromagnetischen Feldberechnung in großen Applikatoren wurde ein Simulationsprogramm, basierend auf einer optischen Darstellung erstellt. Anhand eines kovarianten Formalismus wird eine vollständige Geometrisierung der stationären Wellenausbreitung erreicht. Es wird gezeigt, daß eine kovariante Eikonalttransformation eine allgemeine und vollständige Lösung der vektoriellen Helmholtzgleichung in optischen Begriffen darstellt.

Zur Simulation des Temperaturverhaltens einzelner Keramiken wurde ein weiteres Programm entwickelt. Es wurden Prozeßvorgänge von Keramiken im konventionellen Verfahren, sowie bei Verwendung von Millimeterwellen berechnet und verglichen.

Ergebniskonfigurationen aus Simulationsrechnungen wurden im Experiment realisiert und konnten in guter Übereinstimmung in Messungen bestätigt werden.

Computer Simulations for Processtechnical Application of Millimeterwaves for Industrial Processing of Materials

In this work processtechnical problems for industrial processing of materials with high frequency (HF) electromagnetic waves are investigated by computer simulations. This work is focussed especially on the sintering of ceramic materials. Basic problems like the design of large overmoded millimeterwave applicators, the generation of large spaced homogeneous field distributions, the effect of different technical devices (modes stirrers, rotating plates etc. in combination) on the field distribution within the applicator or the ceramic and the selfconsistent temperature dynamics in a sample during the heating/sintering process were systematically investigated and concepts for optimization were obtained.

A computer code for simulating the electromagnetic fields in large applicators based on optical terms was developed. By the use of a covariant formalism a full geometrical structure of the stationary wave propagation problem could be achieved. It is shown, that a covariant Eikonal transformation represents a complete solution of the vector Helmholtz equation in optical terms.

For the simulation of the temperature development of single ceramic samples another computer code was developed. Conventional processes for ceramics as well processes using millimeterwaves were calculated and were compared to each other.

Resulting configurations of the computer simulations were realized in experiments and were shown to be in good agreement to the measurements.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung und Zielsetzungen dieser Arbeit	1
1.1	Problemstellungen zur Materialprozeßtechnik mit mm-Wellen	1
1.2	Lösungskonzepte und inhaltliche Gliederung	2
1.3	Anwendungsspektrum und Vorteile innovativer HF-Wellentechnologie für die industrielle Materialverarbeitung	4
1.4	Millimeterwellen-Pilotanlage im Forschungszentrum Karlsruhe	5
1.5	Technische HF-Röhren für die Materialprozeßtechnik	7
1.5.1	Mikrowellen nach Industrienorm - das Magnetron	7
1.5.2	Millimeterwellenquelle hoher Leistung - das Gyrotron	8
1.6	Wirtschaftlichkeit und Technologietransfer	10
2	Theoretische Grundlagen zur elektromagnetischen Wellenausbreitung	12
2.1	Die Maxwellschen Gleichungen	12
2.2	Stationäre Wellenausbreitung	14
2.2.1	Die stationären Potentialgleichungen	14
2.2.2	Bestimmungsgleichung für das Vektorpotential	15
2.3	Ankopplung zwischen Feld und Materie	16
2.3.1	Das Eigenwertproblem für $\vec{E}(\vec{x})$ - Hochmodige Applikatoren	18
2.3.2	Die Energiedisposition in einem Applikator	19
2.4	Thermische Wechselwirkungen	21
2.4.1	Das Spektrum der Temperaturstrahlung	21
2.4.2	Körper im Temperaturstrahlungsfeld	23
2.4.3	Mechanismen der Wärmeübertragung	25
2.5	Dielektrische Eigenschaften keramischer Materialien	27
2.5.1	Wechselwirkung elektromagnetischer Wellen mit Dielektrika	27
2.5.2	Ankopplungsmechanismen von HF-Wellen mit dielektrischen Festkörpern	29
2.6	Wellenausbreitung und geometrische Optik	33
3	Die Berechnung stationärer Wellenfelder in hochmodigen Applikatoren	36
3.1	Vergleich verschiedener Feldberechnungsverfahren	36
3.1.1	Die Finite-Differenzen-Methode (FDTD)	36
3.1.2	Die Transmission Line Matrix (TLM)-Methode	37
3.1.3	Die Finite-Integrationsmethode (FIT)	39
3.1.4	Die Finite-Elemente-Methode (FEM)	39

3.1.5	Fortgeschrittene Teilchen- und Geometrie Probleme	40
3.1.6	Methode der konformen Abbildung	41
3.1.7	Methode der Greenschen Funktion	41
3.1.8	Das Momentenverfahren/Randwertmethode	42
3.1.9	Speicher- und Rechenzeitproblematik diskreter Gittermethoden	43
3.2	Kovarianter Formalismus optischer Feldberechnungen	45
3.2.1	Kovariante wellenoptische Bestimmungsgleichungen	45
3.2.2	Lösung des Eikonals $S(x^\alpha)$	47
3.2.3	Das lokal sphärische Koordinatensystem	50
3.2.4	Die Amplitudengleichungen	51
3.2.5	Berechnung der fluktuierenden Felder, Energie- und Leistungsdichte	52
3.2.6	Differentielle Wellenfronten	54
3.2.7	Optische Randbedingungen - Die Gullstrandschen und Fresnelschen Gleichungen	56
3.2.8	Optischer Formalismus verlustbehafteter Materialien	59
3.2.9	Kaustiken und Feldfokussierung	61
3.3	Der MiRa-Code	62
4	Ergebnisse zur Applikatorauslegung hochmodiger Millimeterwellenöfen	65
4.1	Die Messung von stationären Feldverteilungen mit Thermopapier	65
4.2	Simulationen zum GOTS-Applikator mit Dipoleinkopplung	66
4.2.1	Die Feldverteilung ohne Modenrührer	66
4.2.2	Die mittlere Feldverteilung mit rotierendem Modenrührer	67
4.3	GOTS Applikatoruntersuchungen mit Quasi-Gaußschem Strahl	68
4.3.1	Die Feldverteilung ohne Modenrührer	68
4.3.2	Die mittlere Feldverteilung mit rotierendem Modenrührer	71
4.4	Optimierungsstrategien zur Applikatorauslegung	75
4.4.1	Polygonale Optimierungsstudie	76
4.4.2	Ergebnisse der Optimierungsstudie	77
4.4.3	Untersuchungen zur hexagonalen Geometrie	80
5	Modellierung der thermischen Sinterdynamik keramischer Werkstoffe mit HF-Wellen	83
5.1	Verfahrenstechnische Betrachtungen zum Modellwerkstoff Aluminiumoxid Al_2O_3	83
5.2	Die Wärmeleitungsgleichung	86
5.3	Die effektive lokale Leistungsdichte $p_{eff}(\vec{x}, t)$	87

5.4	Reaktionskinetik des Sintervorgangs	89
5.5	Das isotrope Schrumpfungsmodell des THESIS3D-Codes	92
5.6	Die temperaturabhängigen Materialfunktionen von Al_2O_3	93
5.7	Numerische Modellierung der Wärmeleitungsgleichung - der zeitabhängige THE- SIS 3D-Code	93
5.8	Feldlösungen zur selbstkonsistenten Sintersimulation und Prozeßoptimierung für Keramiken	97
5.8.1	Allgemeine Feldlösung	98
5.9	Optimierung der Prozeßbedingungen für keramische Werkstücke	101
5.9.1	Hilfsmittel zur periodischen Phasenverwirbelung	101
5.9.2	Die Kombination Modenrührer und Diffusor	105
5.9.3	Die Kombination Modenrührer und Drehteller	107
5.10	Konzeption eines optimierten HF-Applikators	108
6	Simulation des Verarbeitungsprozesses mit Millimeterwellen	110
6.1	Konventionelles Sintern mit der Fast-Firing Methode	110
6.2	Ein THESIS3D-Vergleichsexperiment mit HF-Wellen	114
6.3	Simulation eines Heizexperiments am GOTS-Applikator	117
6.4	Selbstkonsistente Simulation und elektrothermische Effekte	118
7	Zusammenfassung, Schlußfolgerungen und Ausblick	122
8	Anhang	124
8.1	Die Christoffelsymbole bei Kugelsymmetrie (s,p,q)	124
8.2	Dielektrisch gekrümmter Raum	124
8.3	Gekrümmte Flächen	126
8.4	Metrische Eigenschaften einer Fläche	126
8.5	Innere Geometrie und Krümmung	128
8.6	Die Hauptkrümmungen einer Fläche	129

Abbildungsverzeichnis

1	Themenkreise der HF-Materialprozeßtechnik	1
2	Die GOTS Materialprozeßtechnik-Anlage des FZK, links Gyrotron, rechts geöff- neter Applikator	6
3	Schematische Skizze des GOTS-Applikators von IAP	7
4	Prinzipieller Aufbau eines Magnetrons mit 8 Kavitäten	8
5	Schema eines Gyrotrons mit axialer Auskopplung	9
6	Abschätzung der mittleren Feldstärke im GOTS-Applikator	20
7	Der Mikrowellenapplikator als Hohlraumstrahler	22
8	Zustandsvolumen der thermischen Strahlung	23
9	Die Spektralverteilung im Applikator von Zimmertemperatur bis 1200°C	24
10	Klassisches Polarisations- und Absorptionsverhalten von Dielektrika	27
11	Verlauf des Real- und Imaginärteils von $\tilde{\epsilon}(\omega)$	30
12	Verzerrung des Gitterpotentials bei einem angelegten E-Feld	31
13	Dispersionsrelation ionischer Kristalle im IR-Bereich	32
14	Schema einer TLM-Gitterzelle	38
15	Feldberechnung im Punkt P mit der Randwertmethode	43
16	FDTD-Applikatorgröße und Speicheranforderungen	44
17	Zum kovarianten Differential	46
18	Transversaler Feldtransport längs einer Strahlgeodäten	50
19	Lokale 2D-Transformation in ein sphärisches System	51
20	Die differentielle Wellenfront	54
21	Ausbreitung einer differentiellen Wellenfront und ihrer Hauptradien	55
22	Einfall einer differentiellen Wellenfront $\vec{W}(p, q)$ auf eine brechende Oberfläche $\vec{F}(u, v)$. Es wird nur das $\vec{q}_s = \vec{n}_s \times \vec{p}$ -System der Übersichtlichkeit wegen dar- gestellt.	57
23	Das Simulationskonzept des MiRa-Code	62
24	Die Thermopapiermessung und MiRa Dipol-Simulation zeigen hohe Feldschwan- kungen	66
25	Glättung des mittleren Feldes durch einen rotierenden Modenrührer	68
26	Einzelne Messung und MiRa-Simulation	69
27	Fotografische Überlagerung mehrerer Thermopapiere zum Nachweis der Strahl- reflexion. Der definierte Prozeßbereich im Applikator ist grau hervorgehoben. .	69
28	Querschnittsfeld im GOTS-Applikator ohne Modenrührer	70
29	Gemittelttes Feld des GOTS-Applikators mit Modenrührer	71
30	Momentaufnahmen der Energiedichte in einer Querschnittsebene	72

31	Momentaufnahmen der Energiedichte in der Einkopplungsebene	73
32	Temperaturmessaufbau und Temperaturmessung mit Modenrührer	74
33	Experimenteller Aufbau zur polygonalen Optimierungsstudie	76
34	Klassifizierungsschema der prismatischen GOTS-Studie	78
35	Ergebnisse der Geometriestudie im Balkendiagramm	79
36	Quantitative Optimierungszahlen der Geometriestudie	79
37	Der geteilte Strahl hebt sich vom Hintergrundfeld kaum ab	80
38	Vergleich von Messung und Simulation	81
39	Die keramische Beladung im hexagonalen Applikator unterliegt homogenen Feldbedingungen	82
40	Kornwachstum und Verdichtung führen zu einer Verringerung der Oberflächen- energie	85
41	Konzeption des THESIS3D-Codes	86
42	Isotrope Schrumpfung um den Schwerpunkt	92
43	Die temperaturabhängigen Modellierungsfunktionen des Werkstoffs Aluminiu- moxid [10] [55] [60]	94
44	Berechnungsschema für das Temperaturfeld in einer Keramik mit dem THESIS3D- Code	96
45	Keramiken in einem idealen homogenen Feld	98
46	Energiedichte in einer Keramik für $\epsilon' = 4$, $\sigma = 0.4 \frac{S}{m}$ bzw. $\sigma = 0.04 \frac{S}{m}$	100
47	Mittlere Energiedichte in einer Keramik für $\epsilon' = 4$, $\sigma = 0.4 \frac{S}{m}$, bzw. $\sigma = 0.04 \frac{S}{m}$ bei Phasenverwirbelung	104
48	Leistungsaufnahme bei vorgegebenem äußerem Feld und Phasenzustand $\Delta\Phi$.	105
49	Mittlere Energiedichte in einer Keramik für $\epsilon' = 4$, $\sigma = 0.4 \frac{S}{m}$, bzw. $\sigma = 0.04 \frac{S}{m}$ bei Phasenverwirbelung und Diffusor. Es ist eine starke Homogenisierung des Feldes in der Keramik zu sehen.	106
50	Variation der Phasenunterschiede $\Delta\Phi$ beim Drehteller im homogenen Feld . .	107
51	Konzept eines amplituden- und phasenoptimierten HF-Applikators	108
52	Vergleich eines Fast-Firing Experiments mit der THESIS3D-Simulation	111
53	Das temperaturdynamische Verhalten der Fast-Firing Probe aus der THESIS3D- Simulation	112
54	Typische Temperaturfeldverteilung in einer konventionell geheizten Keramik .	113
55	Zentraltemperaturentwicklung der Fast-Firing Probe bei Verwendung von HF- Wellen	114
56	THESIS3D-Simulation mit Mikrowellen bei gleicher aufgewendeter Leistung wie beim Fast-Firing Experiment	115

57	Temperaturentwicklung in einer mit einem homogenen HF-Feld erhitzten Keramik	116
58	Zentraltemperaturentwicklung einer Aluminiumoxidkeramik im GOTS-Applikator und THESIS3D-Simulation	118
59	Ausbilden von Temperaturschwankungen in der Anfangsphase des Heizens im Körper	119
60	Thermische Diffusion von Hot-Spots in einer Keramik	119
61	Bei hohen Heizraten bilden sich verstärkt Hot-Spots im Material	120

Tabellenverzeichnis

1	Beispiele dielektrischer Parameter (bei Raumtemperatur)	33
2	Aktivierungsenergien verschiedener Pulver	90
3	Mikroskopische Parameter beim Sintermechanismus der Gitterdiffusion	91
4	Technische Hilfsmittel zur Materialprozeßtechnik	97

1 Einführung und Zielsetzungen dieser Arbeit

1.1 Problemstellungen zur Materialprozeßtechnik mit mm-Wellen

Diese Arbeit hat zum Ziel, verfahrenstechnische Fragestellungen für die industrielle Materialverarbeitung mittels hochfrequenter (HF) elektromagnetischer Wellen theoretisch zu untersuchen. Dabei steht das Sintern von Struktur- und Funktionskeramiken im Vordergrund, das sehr hohe Ansprüche an die Materialprozeßtechnik stellt. Die dabei auftretenden physikalischen Abläufe und die für die Anwendung daraus erwachsenden ingenieurwissenschaftlichen Problemstellungen sind in ihren Zusammenhängen außerordentlich komplex und thematisch fundiert in Bereichen der Physik, Materialwissenschaft, Elektrotechnik und Verfahrenstechnik.

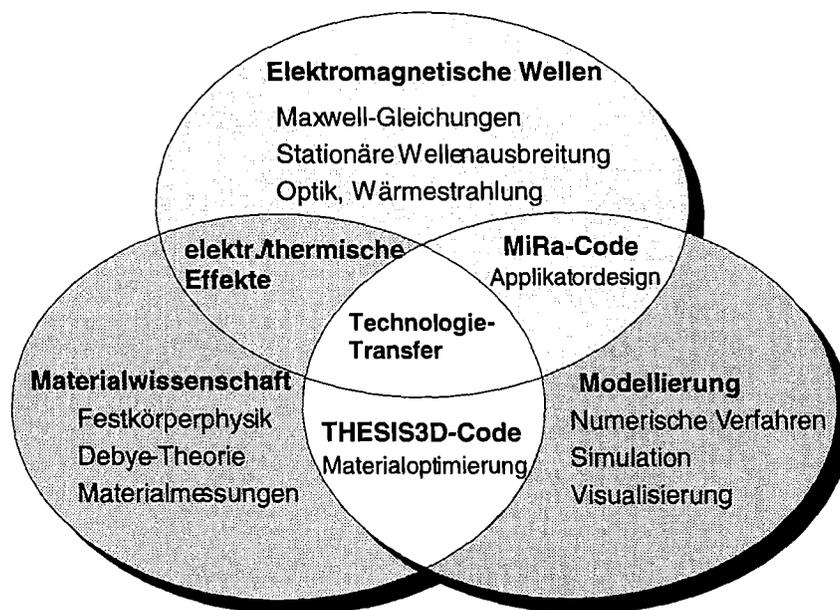


Abbildung 1: Themenkreise der HF-Materialprozeßtechnik

Die Komplexität der vorliegenden Problemstellung unterliegt hinsichtlich des pragmatischen Aspekts zum industriellen Technologietransfer keineswegs einer strikten Trennung in experimentelle und theoretische Arbeit. Vielmehr sind die Übergänge fließend und haben eine enge gegenseitige Prüfung aus theoretischen Modellen und experimentellen Befunden in ihren Deutungen zur Folge. Diese Arbeit geht von der theoretischen Seite in der Entwicklung von Modellen und numerischen Verfahren aus. Durch Simulationsrechnungen mit virtuellen Experimenten im Rechner kann ein effektiver, kostengünstiger Zugang zur Optimierung apparativer Prozeßabläufe gewonnen werden. Dabei werden auch Vergleiche und Kombinationen der Mikrowellentechnik mit bestehenden konventionellen Sinterverfahren diskutiert und

mittels Computerprogrammen simuliert. Zu diesem Zweck war die Erstellung verschiedener neuartiger Rechnerprogramme für die Simulation der konkret vorliegenden experimentellen Anordnungen notwendig. Die Überprüfung und Verifizierung der numerisch gewonnenen Modellergebnisse und Vorhersagen im Experiment ist dabei von grundlegender Bedeutung und wird in dieser Arbeit für jeden Einzelfall im Vergleich dokumentiert.

1.2 Lösungskonzepte und inhaltliche Gliederung

Hinsichtlich großtechnischer Materialverarbeitungsanwendungen in der Industrie stellt die Kenntnis und Kontrolle von elektromagnetischen Feldverteilungen in hochmodigen Applikatoren, die in ihren Ausdehnungen sehr groß gegenüber der Wellenlänge der verwendeten HF-Strahlung sind, eine wesentliche Notwendigkeit dar. Großräumig homogene Feldverteilungen zu erreichen ist hierbei ein erklärtes Ziel der Auslegung von Applikatoren. Bisher allerdings konnten nur wenig übermodierte Applikatoren mit Hilfe von Simulationsprogrammen untersucht werden. In dieser Arbeit wurden erstmalig hochmodige Applikatoren großer Ausdehnung mit eingekoppelten Millimeterwellen erfolgreich berechnet und optimiert.

Ein homogenes Feldprofil ermöglicht einer Charge keramischer Werkkörper einen kontrollierbaren, gleichmäßigen Verarbeitungverlauf. Simulationen und Experimente an vorliegenden Anlagen zeigten, daß diese Anforderungen zur industriellen Verarbeitung dort unmittelbar nicht gegeben sind. Technologische Maßnahmen und Vorrichtungen zur Applikatoroptimierung wurden daher in Designstudien einer systematischen Untersuchung und Bewertung unterzogen und durch Experimente verifiziert.

Die numerische Simulation dieser ingenieurwissenschaftlichen Problematik erforderte die Entwicklung eines mathematischen Formalismus, der die stationäre elektromagnetische Wellenausbreitung kompakt beschreibt. Dieser Formalismus ermöglicht über verallgemeinerte optische Begriffe numerische Feldberechnungen für komplexe geometrische Designstudien mit kurzen Antwortzeiten auf PCs und Workstations. Aus einer mathematischen Analyse der physikalischen Grundgleichungen wurde der Berechnungsalgorithmus des Computerprogramms **MiRa** (**M**icrowave **R**aytracer) entwickelt. Für die Anforderung, komplexe Geometrien auf einfache Weise modellieren zu können, wurden moderne objektorientierte Programmstrukturen verwendet. Die Implementation auch auf Rechnern mit paralleler Prozessorarchitektur ist aufgrund der algorithmischen Konzeption sehr gut möglich und empfiehlt sich bei aufwendigen Studien zur Auslegung neuartiger industrieller Anlagen.

Die Vorgänge beim HF-Erwärmen eines keramischen Materials unterliegen einer Vielfalt materialspezifischer Gesetzmäßigkeiten. Die bisher verfügbaren Simulationsprogramme gehen dabei von Vereinfachungen und Linearisierungen zur Temperatur- und Materialdynamik aus. Dieses schränkt ihren Einsatz- und Gültigkeitsbereich stark ein. Zur Lösung der selbstkonsistenten Materialdynamik wurde daher ein neuer dreidimensionaler Code erstellt. Da starke

Nichtlinearitäten den Sintervorgang prägen, stellen sich hohe Ansprüche an die numerische Stabilität des Programms, um in einem Temperaturbereich bis ca. 1500 K Temperaturverteilungen im Material und phänomenologische Verdichtungseffekte beim Sintern untersuchen zu können. Materialeigenschaften werden für die Berechnungen über einen "Fingerabdruck" des Materials, das heißt durch Angabe verschiedener temperaturabhängiger Materialfunktionen charakterisiert. Das Ziel ist es, in einen Materialkörper während des Sintervorgangs "hineinzusehen", um die kritischen Vorgänge während des Prozeßverlaufs herauszuarbeiten und verstehen zu können. Für diese Aufgabenstellung wurde das dreidimensionale **THESIS3D**-Programm (**Th**ermodynamische **S**inter **S**imulation) zur Untersuchung der Temperaturverteilungen und deren zeitlicher Dynamik in dielektrischen Werkstoffen entwickelt.

Im industriellen Zuschnitt für Ofenbauunternehmen stellt sich neben der Frage der Kosten einer Sinterungsanlage mit Mikro-/Millimeterwellen die Frage nach ihrer Effektivität im Vergleich zu konventionellen Methoden. Vorteile der Kombination elektromagnetischer Sinterungsanlagen mit konventioneller Technik (thermisches Heizen) werden in Kapitel 6 aus vergleichenden Untersuchungen beider Verfahren ersichtlich.

Die vorliegende Arbeit gliedert sich in ihren Kapiteln schwerpunktmäßig wie folgt:

- Dieses Kapitel dient einer allgemeinen Einführung und Gliederung zu den Untersuchungen und Entwicklungen der Mikro-/ Millimeterwellentechnologie im Institut für Technische Physik (ITP) des Forschungszentrums Karlsruhe (FZK).
- In Kapitel 2 sind theoretische Grundlagen zusammengestellt, die als Basis für die Code-Entwicklung und Simulation des Verarbeitungsprozesses dienen. Hier sind in allgemeiner Form Ableitungen zu finden. Dieses Kapitel teilt sich schwerpunktmäßig auf in Gebiete der Elektrodynamik, Festkörperphysik, Thermodynamik und geometrischen Optik.
- Kapitel 3 beschäftigt sich mit der Simulationsproblematik zur Auslegung von großen, hochmodigen Applikatoren. Die wichtigsten numerischen Verfahren werden kurz vorgestellt und diskutiert. Die Motivation zur Entwicklung des semianalytischen optischen MiRa-Codes zur Feldberechnung wird aufgezeigt, ebenso wie eine mathematische Abhandlung, die in allgemeiner Weise eine Äquivalenz zwischen Feld- und optischen Begriffen herstellt.
- Kapitel 4 diskutiert Ergebnisse des MiRa-Codes für verschiedene Applikatoren. Eine Designstudie führte zu signifikanten Verbesserungen von Feldverteilungen im Vergleich zur Originalanordnung, die sich im Lauf der Experimente und Simulationen als unzureichend herausstellte. Experimentelle Messungen und Simulationen werden in direkter Weise präsentiert und verglichen.

- Kapitel 5 widmet sich der Temperaturentwicklung und Thermodynamik der Keramiken beim Sinterprozeß. Der hierzu entwickelte THESIS3D-Code wird beschrieben, sowie Feldlösungen in Keramiken, die die Verwendung diverser technischer Optimierungshilfsmittel repräsentieren.
- Kapitel 6 zeigt Ergebnisse selbstkonsistenter Berechnungen der temperaturabhängigen Materialverarbeitungsvorgänge und der Auswirkung von thermisch/elektromagnetischen Phänomenen. Konventionelle und elektromagnetische Sinterungsvorgänge werden verglichen.
- In Kapitel 7 findet sich eine Zusammenfassung der Ergebnisse und ein darauf basierender Ausblick der Materialverarbeitung mit Millimeterwellen.

1.3 Anwendungsspektrum und Vorteile innovativer HF-Wellentechnologie für die industrielle Materialverarbeitung

Für die Anwendung von HF-Wellen besteht ein großes industrielles Potential. In verschiedenen Verfahren der Werkstoffherstellung bzw. Bearbeitung, der chemischen Verfahrenstechnik und Plasmachemie, der Nahrungsmittelindustrie, bei der klinischen Desinfektion und Müllverwertung, Sintern von Porzellan und Keramiken, Polymerchemie (z.B. Kontaktlinsenherstellung), Oberflächenbehandlung wie Verbinden von Glas und Metall, Keramik und Metall (Cermets) etc. werden HF-Wellen in zunehmendem Maße industriell eingesetzt. Neuartige Eigenschaften, wie Superplastizität bei heißen Keramiken aus Nanopulvern, können unter Verwendung von HF-Wellen zu neuen innovativen Verfahren und Produkten führen. Die größte Verbreitung bis heute haben Mikrowellen im Haushaltsbereich mit der "Küchenmikrowelle" und in der nahrungsverarbeitenden Industrie gefunden. Hier sind die Anforderungen an die gewünschten Materialeigenschaften vergleichsweise gering.

Keramische Pulver werden konventionell gesintert durch Brennen im Gasofen oder unter Verwendung thermischer Strahlung in elektrisch vorgeheizten Öfen (Fast-Firing Methode). Die Mechanismen der Sintervorgänge konventioneller Art bzw. HF-Technologie unterscheiden sich grundlegend und werden mit dem THESIS3D-Code im Kapitel 6 genauer untersucht und verglichen. Dabei zeigen sich eindeutige Vorteile bei der Verwendung von Mikro- bzw. Millimeterwellen auf.

- Insbesondere das **volumetrische Aufheizen** der Materialien stellt eine wesentliche Verbesserung dar: hochfrequente elektromagnetische Millimeterwellen durchdringen das Material und deponieren Leistung damit auch innerhalb des Werkstücks im Gegensatz zu konventionellen Verfahren, bei der die Wärme von der Oberfläche über Wärmeleitungsprozesse nur langsam in den Körper eindringt.

- Dieses führt zu einer **Reduzierung der Verarbeitungszeit (bis ca. Faktor 10)**, da sich die Reaktionsgeschwindigkeiten unter Mikro-/Millimeterwelleninduktion durch das im gesamten Volumen angreifende Feld beträchtlich erhöhen. Zudem erreicht die Millimeterwelle das Material in der Zeitskala thermischer Wirkungen trägheitslos (instantan) zur Energiedeposition, was sich in **stark erhöhten Heizraten** äußert.
- **Die Produktqualität kann erheblich verbessert werden:** höhere Dichten und Härtegrade der Materialien im Vergleich zu konventionell verarbeiteten werden erreicht.
- **Verbesserte und neue Materialeigenschaften** sind mit dieser Technologie möglich: neuartige Materialverbundstoffe lassen sich herstellen und weiterverarbeiten, synthetisch hergestellte CVD-Diamanten (chemical vapor deposition), kubisches Bornitrid und plastisch verformbare nanokristalline Keramiken.
- Zudem ergibt sich eine **Einsparung von Energiekosten:** Durch die drastisch verringerten Verarbeitungszeiten und den trägheitslosen Aufheizungsmechanismus kann die aufzubringende Energie sehr effizient und sparsam umgesetzt werden.

1.4 Millimeterwellen-Pilotanlage im Forschungszentrum Karlsruhe

An der GOTS-Anlage (Gyrotron Oscillator Technological System) werden seit 1994 im Institut für Technische Physik (ITP) Experimente zur Verarbeitung von keramischen Werkstoffen mit Millimeterwellen vorgenommen [1]. Diese Pilotanlage [2], zugehörig einem Technologietransferprojekt des Forschungszentrums Karlsruhe [3], hat als Ziel zum einen die Untersuchung der signifikanten physikalischen Vorgänge bei der Materialprozeßtechnik mit Millimeterwellen als auch die Weiterentwicklung dieser Technologie für eine kommerzielle Einführung bzw. Ergänzung bestehender konventioneller Verarbeitungstechniken [4]. Dabei steht das Brennen, bzw. Sintern von fortgeschrittenen Struktur- und Funktionskeramiken im Vordergrund [5]. Diese Verfahren gehören zu den kritischsten Phasen der Keramikherstellung. Die zur Materialverarbeitung verwendete Millimeterwellenstrahlung mit $\lambda = 10$ mm Wellenlänge (30 GHz) wird durch ein sogenanntes "Technologie-Gyrotron", einer speziellen Hochfrequenzröhre für hohe Leistung im kontinuierlichen Betrieb erzeugt. Das Gyrotron wird in der TE_{02} -Mode betrieben. Im Gegensatz zu denen im Rahmen eines Magnetfusionsprogramms im ITP untersuchten Fusionsgyrotrons [6], unterscheidet sich das Technologie-Gyrotron durch kleine, kompakte Abmessungen. Das verwendete Technologie-Gyrotron ist eine Entwicklung des Instituts für Angewandte Physik (IAP) in Nizhny Novgorod, Rußland. Eine kurze Darstellung der Funktionsweise eines Gyrotrons wird im folgenden Abschnitt gegeben. Die erzeugte Millimeterwellenstrahlung wird aus dem Gyrotron über eine quasi-optische Übertragungsleitung und einen Gaußschen Strahl formenden Spiegel in einen zylindersymmetrischen Applikator

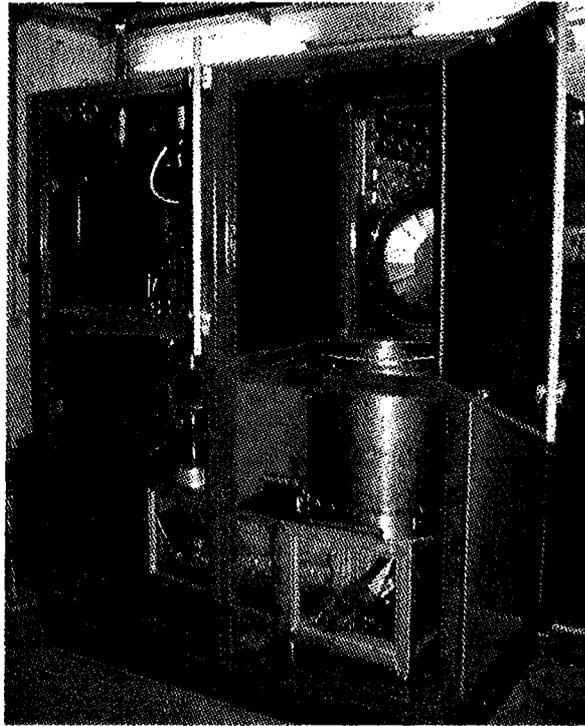


Abbildung 2: Die GOTS Materialprozeßtechnik-Anlage des FZK, links Gyrotron, rechts geöffneter Applikator

(100 l Volumen, 50 cm Durchmesser) aus Edelstahl schräg eingekoppelt. Ein luftgekühltes Bornitridfenster trennt den Applikatorinnenbereich räumlich von der Übertragungsleitung. In einem vorgesehenen Arbeitsbereich werden keramische Grünkörper (vorgepreßte, ungesinterte Proben, die oft in eine thermische Isolierung verpackt sind) für die Sinterung eingebracht. Die Ausgangsleistung des Gyrotrons kann bis $P=10$ kW im kontinuierlichen Betrieb betragen. Die Applikatorhülle muß während des Sinterbetriebs wassergekühlt werden. Dabei können sowohl die Druckverhältnisse im Applikator zwischen $10^{-3} \dots 2$ bar geregelt werden, als auch die Zugabe von Progasen, wie Stickstoff. Der für diese Anlage zulässige Temperaturbereich für die Keramikverarbeitung reicht bis 1900° C. Der im Foto (Abb.2) erkennbare geöffnete sphärisch geformte Deckel enthält eine Vorrichtung mit Elektromotor für einen Modenrührer. Dieser vollführt im eingeschalteten Zustand eine exzentrische, konusförmige Umlaufbewegung mit einer Periodendauer von $\Delta t_{Stirr} = 12$ s um die Achsenaufhängung (Symmetrieachse). Diese Anordnung folgt der Absicht, eine Verwirbelung des eingekoppelten elektromagnetischen Feldes und damit im zeitlichen Mittel eine Homogenisierung der Feldverteilung im Applikator zu erreichen. Eine schematische Darstellung des Applikators in der Einkopplungsebene des Millimeterwellenstrahls ist in Abb.3 zu finden.

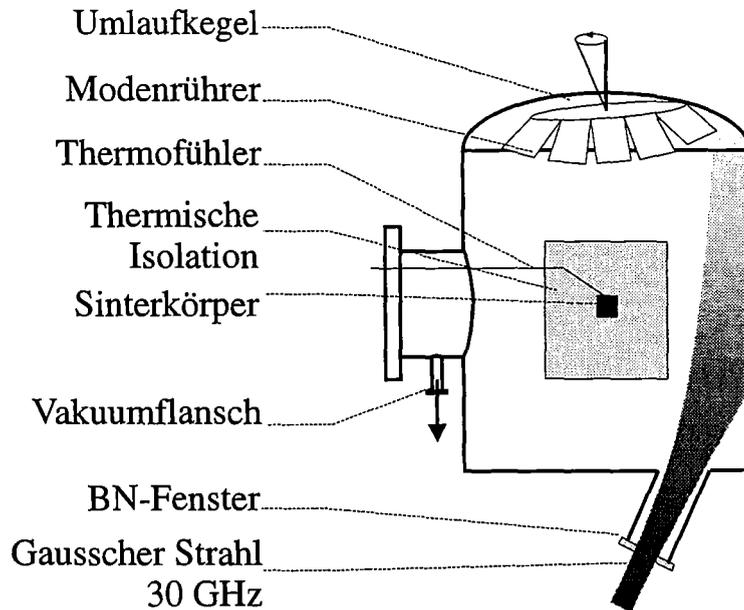


Abbildung 3: Schematische Skizze des GOTS-Applikators von IAP

1.5 Technische HF-Röhren für die Materialprozeßtechnik

Zur Erzeugung von HF-Wellen hoher Leistung sind eine Vielzahl von Laufzeitröhren unterschiedlicher Funktion und Auslegung entwickelt worden. Alle Röhren erzeugen HF-Wellen über einen elektrisch, bzw. magnetisch fokussierten Elektronenstrahl, dessen kinetische oder potentielle Energie durch Wechselwirkung mit seinen abgestrahlten Raumladungswellen (Rauschfeld) in nutzbare HF-Energie umgesetzt wird. Als ein kostengünstigster Vertreter wird das Magnetron kurz beschrieben, sowie das am FZK für die Millimeterwellenerzeugung benutzte Gyrotron.

1.5.1 Mikrowellen nach Industriennorm - das Magnetron

Das Magnetron stellt die verbreitetste und billigste Mikrowellenquelle dar. Diese Röhre wird für Untersuchungen zur Materialprozeßtechnik verwandt [7], üblicherweise bei der genormten Industriefrequenz von $f=2.45$ GHz (CW), $\lambda = 12.25$ cm. Das Prinzip des Magnetrons, schon 1921 von Albert Wallace Hull in der Theorie vorgestellt, ist eine Röhre mit rechtwinklig gekreuzten elektrischen und magnetischen Feldern. Im Zentrum befindet sich eine Elektronen emittierende Kathode mit einer zwischen Anode und Kathode konstanten angelegten statischen Spannung. Die Anode besteht aus mehreren radial angeordneten Segmenten mit periodisch unterteilten Kavitäten. Diese sind über Randfelder miteinander resonant gekoppelt. Ein zur Magnetronachse angelegtes paralleles statisches Magnetfeld lenkt emittierte Elektronen

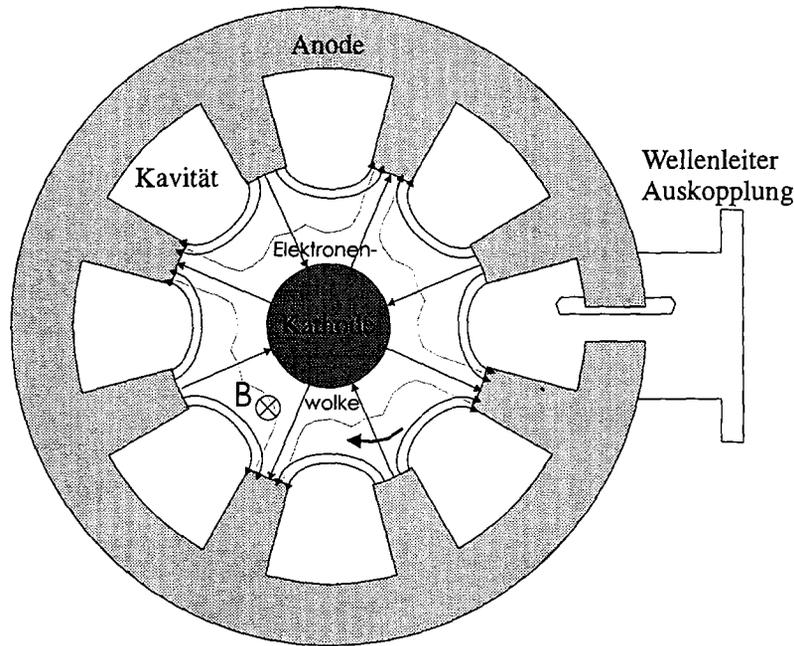


Abbildung 4: Prinzipieller Aufbau eines Magnetrons mit 8 Kavitäten

auf gekrümmten Bahnen zur Anode, wobei sie mit dem elektrischen HF-Feld der Kavitäten wechselwirken. Das radiale elektrische HF-Feld führt zu einer Ausbildung von Elektronenpaketen ("Bunching") mit einhergehender Phasenfokussierung. Befinden sich benachbarte Kavitäten im gegenphasigen Schwingungszustand, hat sich die leistungseffektivste π -Mode eingestellt. Synchron zur HF-Welle laufende Elektronen gelangen allmählich zur Anode und geben potentielle Energie an das HF-Feld ab. Diese Leistung wird über eine Koppelschleife in einer der Kavitäten ausgekoppelt. Etwa 1929 wurde das Magnetron unabhängig voneinander in verschiedenen Ländern (Tschechoslowakei, Deutschland, Japan, U.S.A) zur Erzeugung von Mikrowellen erfunden. Die Herstellung dieses Röhrentyps geht 1939 u.a. auf John Turton Randall zurück. Frequenzen im Millimeterbereich sind mit Magnetrons bei hoher Leistung nicht zu erreichen, da in den dann sehr klein ausfallenden Kavitäten die Ohmschen Verluste zu hoch werden. Bei 3 GHz können Magnetrons im kontinuierlichen Betrieb eine Leistung bis zu 10 kW erreichen.

Die Kosten eines Standard 1 kW Magnetrons liegen bei etwa 10^3 DM.

1.5.2 Millimeterwellenquelle hoher Leistung - das Gyrotron

Das Gyrotron (Gyros: griech. Kreis) gehört zur Klasse der Laufzeitröhren mit schneller Phase. Es wurde 1961 von P. Petelin, Rußland, erstmals im Experiment erprobt. Das Wirkungsprinzip unterliegt relativistischen Gesetzmäßigkeiten. In einem halboffenen zylindersymmetrischen

Resonator, in dem von außen ein starkes axiales Magnetfeld angelegt ist, werden Elektronen des Strahls auf eine Kreisbahn längs dieser Magnetfeldlinien gezwungen (Gyration) mit der Zyklotronfrequenz $\omega_z = \frac{eB_0}{m_r}$, e: Elektronenladung, m_r : relativistische Elektronenmasse, B_0 : magnetische Flußdichte). Ein hochfrequentes Wechselfeld stellt sich im Resonator ein, wobei

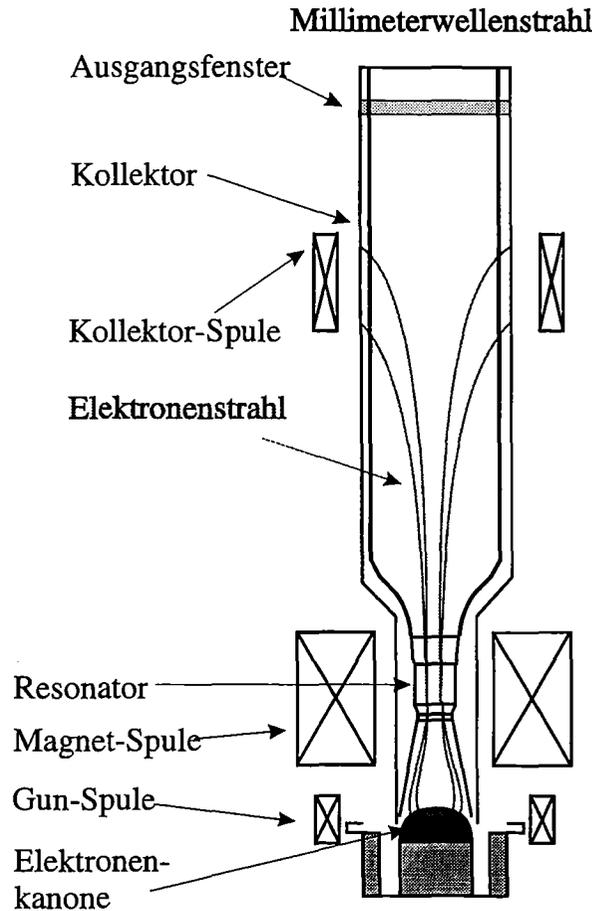


Abbildung 5: Schema eines Gyrotrons mit axialer Auskopplung

der hintere Teil des Gyrotronresonators im Cut-Off liegt und einem Spiegel gleich die Wellen reflektiert. Der vordere Teil (in Richtung des auskoppelnden Strahls) ist getapert. Der dabei auftretende Impedanzsprung führt zu einer Teilreflexion (einem teildurchlässigen Spiegel gleich), so daß sich im Resonator resonant verstärkte Felder ausbilden. Die zeitharmonische Wechselwirkung des resonanten HF-Feldes mit den Elektronen führt zu einer periodischen Schwankung ihrer Gyrationgeschwindigkeit (über m_r ändert sich w_z). Dabei findet eine Phasenfokussierung mit Dichteschwankungen statt ("Bunching"), wobei von den abgebremsten Elektronen mehr Energie an das HF-Feld abgegeben wird, als von den beschleunigten aufgenommen wird. Diese Leistung wird in dem halboffenen Gyrotron-Resonator ähnlich wie in

einem Maser verstärkt und kohärent abgegeben. Mit Gyrotrons können sehr hohe Leistungen ($> 1\text{MW}$, CW) bei sehr hohen Frequenzen im Millimeterbereich erreicht werden.

Die Kosten für ein kompaktes Industriegyrotron (10-20 kW) liegen allerdings derzeit bei etwa 10^5 DM.

1.6 Wirtschaftlichkeit und Technologietransfer

Die Verarbeitung von Materialien mit HF-Wellen weist eine Anzahl vielversprechender Vorteile gegenüber konventionellen Verarbeitungstechniken auf. Eine erfolgreiche Kommerzialisierung dieser neuen Technologie hängt von vielen verschiedenen, betriebswirtschaftlich sorgfältig aufeinander abgestimmten Produktions- und Fertigungsfaktoren ab. Die wirtschaftliche Vorteilhaftigkeit der HF-Technologie als betriebliche Investition ist nur gegeben bei einer positiven Kostendifferenz zwischen alter und neuer Anlage. Als wesentliche Faktoren sind dabei zu berücksichtigen

- Kosten der Anlage
- Zuverlässigkeit der Anlage, Instandhaltung
- Produktionsdurchsatz, Zeit für einen Prozeßzyklus
- Energiekosten
- Qualitätskontrolle

Aus den verkürzten Durchlaufzeiten und den damit verbundenen niedrigeren Energiekosten mit der HF-Technologie ergibt sich bei einer gleichbleibenden Kapazität direkt eine Senkung der Fertigungsstückkosten. Diese können mit einer direkten Qualitätsverbesserung einhergehen. Hierbei wurde naheliegenderweise zum einen von einer konventionell kostenvergleichbaren Qualitätskontrolle und zum anderen einer vergleichbaren Ausschußrate des Produkts ausgegangen.

Großtechnische materialverarbeitende Anwendungen, die in der Kostenstruktur besonders vorteilhaft durch einen erhöhten Produktionsdurchsatz gekennzeichnet sind, weisen für den industriellen Technologietransfer besonders günstige Merkmale auf.

Ein wesentliches Entscheidungskriterium sind in der Gesamtheit die Anlagekosten, die nach Möglichkeit so gering gehalten werden müssen, daß im Fall gleich veranschlagter Ausbringungsmengen der konkurrierenden Techniken ein Kostenvorteil der HF-Technik zugeschlagen werden kann.

Unter diesen Aspekten ist die ingenieurmäßige Auslegung der jeweiligen Anlage zu untersuchen. Hierfür sind Faktoren wie

- Design des Applikators
- Wahl der verwendeten Frequenz
- Prozeßkontrolle

verfahrenstechnisch zu optimieren.

Unter der Prämisse gleichbleibender Anlagenkapazität ist für die Verarbeitung hochqualitativer Keramiken mit HF-Wellen die Entwicklung großer hochmodiger Applikatoren unumgänglich. Die Benutzung kleiner Wellenlängen (Millimeterwellen) ist dabei von großem Vorteil. Zum einen wird eine weitaus höhere Neigung zu gleichmäßigeren Feldverteilungen im Applikator erreicht (geringer Ausschuß einer Charge) mit damit einhergehender Vergrößerung des verfügbaren Arbeitsvolumens im Applikator. Zum anderen vereinfacht sich erheblich die Prozeßführung durch die verbesserten Absorptionseigenschaften.

Durch die derzeit vergleichsweise noch hohen Kosten einer einzelgefertigten Gyrotronquelle müssen besonders hohe Anforderungen an das Applikator-Design in Nutzungsvolumen und Feldhomogenität gestellt werden, um direkte Vorteile der neuen Technologie dem potentiellen Anwender und Kunden an einer Pilotanlage demonstrieren zu können. Die industrielle Herstellung und Verfügbarkeit technologischer Gyrotrons in größeren Stückzahlen bei geringeren Kosten wird sich daher neben der erfolgreichen Entwicklung einer innovativen vorteilhaften HF-Materialverarbeitungstechnologie als wegweisend für ihre breite Einführung in die Industrie darstellen.

2 Theoretische Grundlagen zur elektromagnetischen Wellenausbreitung

2.1 Die Maxwell'schen Gleichungen

Mikro- und Millimeterwellen sind hochfrequente elektromagnetische Wellen. Ihre einfachste Klassifizierung erfolgt durch Angabe der vorliegenden Frequenz f . James Clerk Maxwell gelang es 1873, die zu diesem Zeitpunkt vorliegenden experimentellen Ergebnisse (insbesondere von Faraday, Ampère, Laplace et al.) auf dem Gebiet des Magnetismus und der Elektrizität durch einen Satz von 8 Differentialgleichungen innerhalb einer Feldtheorie widerspruchsfrei und als einheitliches Phänomen zu beschreiben. 1886-88 konnte Heinrich Hertz den experimentellen Beweis im Raum selbständig fortschreitender Wellenfelder am Polytechnikum Karlsruhe antreten. Der mit diesen Entdeckungen vollzogene technologische Wandel veränderte bis heute entscheidend das gesellschaftliche Zusammenleben.

Die moderne Form der Maxwellgleichungen, als lokale Feldtheorie, drückt differentielle Zusammenhänge in Raum und Zeit aus zwischen den beschreibenden gerichteten Größen $\vec{E}(\vec{x}, t)$ für das elektrische Feld, und $\vec{B}(\vec{x}, t)$ für das magnetische Feld über das Gleichungssystem

$$\operatorname{div} \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad \operatorname{div} \vec{B} = 0 \quad (1)$$

$$\operatorname{rot} \vec{B} = \mu_0 \vec{j} + \mu_0 \epsilon_0 \epsilon_r \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad \operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2)$$

Stoffliche Materie zeigt sich in dieser Theorie repräsentiert durch die Materialparameter $\epsilon_r, \mu_r, \sigma, \rho$. Dabei sind ϵ_r die relative Dielektrizitätszahl, μ_r die relative magnetische Permeabilität, σ ist die Leitfähigkeit und ρ die räumliche Dichte elektrischer Ladungsträger. Die Maxwellgleichungen erfüllen unmittelbar den Erhaltungssatz der elektrischen Ladung, wie sofort durch Anwenden des Divergenzoperators aus der Kontinuitätsgleichung

$$\operatorname{div} \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (3)$$

ersehen werden kann. Allgemein setzt sich die Stromdichte zusammen aus $\vec{j} = \rho \vec{v} + \sigma \vec{E}$, einem Anteil der mit \vec{v} bewegten Ladungsdichte und einen Anteil über die Ohmsche Leitfähigkeit. Eine wesentliche Eigenschaft der Maxwellgleichungen ist ihre Invarianz unter Lorentztransformationen. 1891 stellte Albert Einstein die spezielle Relativitätstheorie vor, unter der Voraussetzung der Existenz einer maximalen endlichen Signalgeschwindigkeit. Das Zusammenfallen der Lichtgeschwindigkeit und der Ausbreitungsgeschwindigkeit der aufgefundenen elektromagnetischen Wellen als Signalträger unterstreicht die Bedeutung der Erkenntnissynthese scheinbar verschiedener Teilgebiete in der Physik dieser Zeit. Hieraus entstanden verschiedene allgemeinere Formulierungen der Maxwell'schen Feldtheorie unter relativistischen Aspekten.

Durch Einführen eines skalaren Potentials Φ (ursprünglich motiviert aus der Elektrostatik) und des Vektorpotentials \vec{A} , die das magnetische Feld gemäß

$$\vec{B} = \text{rot}\vec{A} \quad (4)$$

und das elektrische Feld

$$\vec{E} = -\frac{\partial\vec{A}}{\partial t} - \text{grad}\Phi \quad (5)$$

bestimmen, erhält man nach Einsetzen in die Maxwellgleichungen inhomogene Wellengleichungen:

$$\Delta\vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2\vec{A}}{\partial t^2} = -\mu_0\vec{j} \quad , \quad (6)$$

$$\Delta\Phi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2} = -\rho \quad . \quad (7)$$

Für das Ergebnis in (6),(7) mußte noch von der relativistisch bedeutsamen Lorentzbedingung

$$\text{div}\vec{A} + \frac{\partial\Phi}{\partial t} = 0 \quad (8)$$

Gebrauch gemacht werden. Es ist an dieser Stelle zu bemerken, daß weder das Skalarpotential Φ noch das Vektorpotential \vec{A} eindeutig bestimmt werden können, d.h. die eindeutigen Felder \vec{E} und \vec{B} ändern sich nicht unter den Transformationen

$$\vec{A}' = \vec{A} + \text{grad}f \quad , \quad (9)$$

$$\Phi' = \Phi - \frac{\partial f}{\partial t} \quad , \quad (10)$$

mit f , einer Funktion des Raumes und der Zeit. Die Wellengleichungen (6) und (7) können dann bei bekanntem \vec{j} und ρ allgemein gelöst werden in der Form

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \iiint \frac{\vec{j}(\vec{x}', t - |\vec{x} - \vec{x}'|/c)}{|\vec{x} - \vec{x}'|} d\vec{x}' \quad , \quad (11)$$

$$\Phi(\vec{x}, t) = \iiint \frac{\rho(\vec{x}', t - |\vec{x} - \vec{x}'|/c)}{|\vec{x} - \vec{x}'|} d\vec{x}' \quad . \quad (12)$$

Diese Freiraumlösungen (eine Berandung [8] der einfachen Darstellung wegen ist hier nicht berücksichtigt) sind bekannt als retardierte Potentiale und bringen den zuvor bemerkten Umstand der endlichen Signalausbreitung (Lichtgeschwindigkeit) aus der speziellen Relativitätstheorie in deutlicher Weise zum Ausdruck. An dieser Stelle sei bemerkt, daß sich sämtliche elektromagnetischen Phänomene zur Materialverarbeitung mit HF-Wellen, dazu gehört auch die Temperaturabstrahlung im Material (bzw. Applikator) aus obigen Wellengleichungen mit Randbedingungen, bzw. Anfangsbedingungen herleiten lassen.

2.2 Stationäre Wellenausbreitung

2.2.1 Die stationären Potentialgleichungen

Untersuchungen zu Verarbeitungsverfahren von Materialien in einem Applikator mit HF-Wellen bedeutet primär die Untersuchung von elektromagnetischen Feldverteilungen in einer geschirmten Struktur und einer dielektrischen Last. Elektromagnetische Wellenfelder stellen sich innerhalb einer solchen Struktur nach einer, im Verhältnis zur Verarbeitungszeit des Materials, sehr kurzen Einschwingzeit ein. Hinsichtlich einer kompakten allgemeinen Beschreibung und daraus erfolgender Ableitungen wählen wir nun eine Darstellung der elektromagnetischen Felder mittels der Potentiale $\vec{A}(\vec{x}, t)$ und $\Phi(\vec{x}, t)$. Geht man im eingeschwungenen Zustand von der Idealisierung eines getriebenen, monochromatisch zeitharmonisch fluktuierenden Feldes aus, so können wir für das Vektorpotential ansetzen unter fortlaufender Verwendung einer physikalischen Notation (i ist die komplexe imaginäre Einheit, für die fortschreitende Zeit t wird der negative Exponentialteil benutzt)

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \vec{A}(\vec{x})e^{-i\omega t} \quad (13)$$

Aus der Nichteindeutigkeit der Potentiale (9),(10) kann man diesen stets eine Zusatzbedingung auferlegen, so daß wir hier zweckmäßigerweise für das Skalarpotential

$$\Phi(\vec{x}, t) = 0 \quad (14)$$

fordern. Im Falle freier Ladungsdichten, z.B. bei Teilchenstrahlen und den damit verbundenen Raumladungseffekten muß $\Phi(\vec{x}, t)$ aus den Randbedingungen explizit berechnet werden. Für $\vec{E}(\vec{x}, t)$ und $B(\vec{x}, t)$ gilt damit unmittelbar mit (4), (5)

$$\vec{B}(\vec{x}, t) = \text{rot}\vec{A}(\vec{x}, t) = \vec{B}(\vec{x})e^{-i\omega t} \quad (15)$$

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = i\omega\vec{A}(\vec{x}, t) = \vec{E}(\vec{x})e^{-i\omega t} \quad (16)$$

ein ebenfalls zeitharmonischer Zusammenhang. Wir nennen dabei den räumlichen Vektor $\vec{B}(\vec{x}) = \text{rot}\vec{A}(\vec{x})$ und $\vec{E}(\vec{x}) = i\omega\vec{A}(\vec{x})$. Die hier ersichtliche Proportionalität von $\vec{E}(\vec{x}, t)$ und $\vec{A}(\vec{x}, t)$ im stationären Fall ist zur Behandlung von Randbedingungen von großer vereinfachender Bedeutung.

Wir betrachten nun die Materialparameter genauer: bei den für die keramische Materialverarbeitung auftretenden Energien und Prozeßbedingungen kann von Plasmaeffekten, freien Ladungsträgern, Ionisierungseffekten usw. abgesehen werden, so daß für die Ladungsdichte im folgenden $\rho(\vec{x}, t) = 0$ gilt. Allerdings sind während des Verarbeitungsprozesses der Keramiken ϵ_r, μ_r Funktionen im Raum \vec{x} und der fortschreitenden Zeit t . Diese zeitliche Abhängigkeit läuft auf einer thermodynamischen Zeitskala ab, die auf der elektromagnetischen Skala zur

im Verhältnis instantanen Einstellung der Felder nicht beiträgt. Wir halten für die Materialparameter von Keramiken zusammenfassend fest:

$$\epsilon_r(\vec{x}, t) \rightarrow \epsilon_r(\vec{x}) \quad \sigma(\vec{x}, t) \rightarrow \sigma(\vec{x}) \quad (17)$$

$$\mu_r(\vec{x}, t) \rightarrow \mu_r(\vec{x}) = 1 \quad \rho(\vec{x}, t) = 0 \quad (18)$$

Für Ferrite und ferromagnetische Stoffe wäre μ_r mit einzubeziehen. Keramische Festkörper sind im allgemeinen optisch aktive Materialien aufgrund ihrer strukturellen anisotropen Ausrichtung der optischen Achsen (Dichroismus). Zur Verarbeitung werden hochfeine Keramikpulvern verwendet, die als isotrop in dem Sinne angesehen werden können, daß eine stochastische Ausrichtung der Achsen im Gesamtkörper vorliegt und damit der effektive Skalar

$$\epsilon_r = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \epsilon_{ii} \quad (19)$$

wirksam ist. ϵ_{ii} sind dabei die Diagonalkomponenten des vorliegenden Dielektrizitätstensors. Gleiches gilt gegebenenfalls für die anderen Materialparameter. Um für das keramische Pulver/Luftgemisch das elektromagnetisch tatsächlich wirksame ϵ_r zu ermitteln, sind experimentell motivierte Mischungsregeln zu benutzen. Dieses wird bei der Beschreibung des THESIS3D-Codes aufgezeigt.

2.2.2 Bestimmungsgleichung für das Vektorpotential

Mit obiger Vorarbeit lauten die Maxwellgleichungen im stationären Zustand, mit $j(\vec{x})$ einer zeitharmonisch schwingenden Stromdichte und dem Ohmschen Anteil $\sigma \vec{E}(\vec{x})$

$$\operatorname{div} \vec{E}(\vec{x}) = 0 \quad \operatorname{div} \vec{B}(\vec{x}) = 0 \quad (20)$$

$$\operatorname{rot} \vec{B}(\vec{x}) = [\mu_0 \sigma(\vec{x}) - i\omega \mu_0 \epsilon_0 \epsilon_r(\vec{x})] \vec{E}(\vec{x}) + \mu_0 \vec{j}(\vec{x}) \quad \operatorname{rot} \vec{E}(\vec{x}) = i\omega \vec{B}(\vec{x}) \quad (21)$$

Durch Einsetzen der Potentialbedingungen (15), (16) erhalten wir

$$\operatorname{grad} \operatorname{div} \vec{A}(\vec{x}) - \Delta \vec{A}(\vec{x}) - i\mu_0 \sigma(\vec{x}) \omega \vec{A}(\vec{x}) - \mu_0 \epsilon_0 \epsilon_r(\vec{x}) \omega^2 \vec{A}(\vec{x}) = \mu_0 \vec{j}(\vec{x}) \quad (22)$$

Wir können nun mit der Festlegung (14) für $\Phi(\vec{x}, t)$ zu \vec{A} den Gradienten einer beliebigen, aber zeitunabhängigen Funktion wählen. Damit fordern wir die Coulomb-Eichung ein,

$$\operatorname{div} \vec{A}(\vec{x}) = 0 \quad (23)$$

die keine relativistischen Retardierungen mehr beinhaltet. Dies ist im stationären Fall auch nicht zu erwarten.

Wir erhalten als Bestimmungsgleichung für das räumliche Vektorpotential die Helmholtzgleichung (reduzierte Wellengleichung)

$$\Delta \vec{A}(\vec{x}) + k^2(\vec{x}) \vec{A}(\vec{x}) = -\mu_0 \vec{j}(\vec{x}) \quad . \quad (24)$$

Die komplexe Wellenzahl $k(\vec{x})$ als Funktion des Ortes beinhaltet nun die Materialeigenschaften wie Permeabilität und Absorption. Sie erfüllt die Relation

$$k(\vec{x})^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_r^*(\vec{x}) \quad \epsilon_r^* := \epsilon_r' + i\epsilon_r'' \quad \epsilon_r''(\vec{x}) = \frac{\sigma(\vec{x})}{\omega \epsilon_0} \quad (25)$$

ϵ_r^* ist die komplexe Dielektrizitätskonstante. Ihre komplexe Phase

$$\tan \delta = \frac{\text{Im}(\epsilon_r^*)}{\text{Re}(\epsilon_r^*)} = \frac{\sigma}{\omega \epsilon_0 \epsilon_r} \quad (26)$$

wird im allgemeinen benutzt zur Angabe dielektrischer Verluste.

2.3 Ankopplung zwischen Feld und Materie

Zwischen einem elektromagnetischen Feld und Materie findet Wechselwirkung statt. Bei der Materialprozeßtechnik mit HF-Wellen beabsichtigt man, in kontrollierter Weise aus diesem Umstand Nutzen zu ziehen. Verschiedene von Materialeigenschaften, Frequenz und Temperatur abhängige Ankopplungsmechanismen sind in späteren Kapiteln im Detail zu diskutieren und in ihrer Wirkung zu klassifizieren.

Der Austausch zwischen Feld und Materie ist im allgemeinen im Sinne der elektromagnetischen Energie dissipativ und führt zu einer Erwärmung des Materials über Joulesche Heizung. Betrachten wir hierzu zunächst die Maxwellschen Gleichungen in ihrer allgemeinen, zeitabhängigen Form. Als Vorgabeparameter für ein Material haben wir die Dielektrizitätszahl ϵ_r und eine modellbezogene, effektive Leitfähigkeit σ_{eff} . Diese Leitfähigkeit σ_{eff} stellt z.B. für unpolare Keramiken und Millimeterwellen keine elektrische Leitfähigkeit dar im Sinne eines klassischen elektrischen Ladungstransports. Der Mechanismus dazu wird in Kapitel 3 näher beschrieben.

Wir bilden aus den zeitabhängigen Maxwellgleichungen die Skalarprodukte

$$\vec{E} \cdot \text{rot} \vec{B} = \mu_0 \sigma_{eff} |\vec{E}|^2 + \mu_0 \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E} \cdot \dot{\vec{E}} \quad (27)$$

$$\vec{B} \cdot \text{rot} \vec{E} = -\vec{B} \cdot \dot{\vec{B}} \quad (28)$$

Aus der Differenz von (28) und (27) führen wir zusätzlich den Pointing-Vektor \vec{S} ein,

$$-\mu_0 \text{div} \vec{S} = -\mu_0 \text{div}(\vec{E} \times \vec{B}) = \vec{E} \cdot \text{rot} \vec{B} - \vec{B} \cdot \text{rot} \vec{E} \quad (29)$$

wobei sich die Bilanzgleichung ergibt

$$\mu_0 \sigma_{eff} |\vec{E}|^2 + \mu_0 \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E} \cdot \dot{\vec{E}} + \vec{B} \cdot \dot{\vec{B}} + \mu_0 \operatorname{div} \vec{S} = 0 \quad . \quad (30)$$

Wir ersehen unmittelbar aus der folgerichtigen Kontinuitätsgleichung die energetischen Zusammenhänge nach Umformen der zeitlichen Ableitungen

$$\operatorname{div} \vec{S} + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \epsilon_0 \epsilon_r |\vec{E}|^2 + \frac{1}{2\mu_0} |\vec{B}|^2 \right) = -\sigma_{eff} |\vec{E}|^2 \quad . \quad (31)$$

Der rechte negative Term gibt die dissipierte Leistungsdichte in Materie an, die dort in Joulesche Wärme umgewandelt wird. Für verlustfreie Gebiete mit $\sigma \rightarrow 0$ sehen wir sofort, daß elektromagnetische Feldenergie beim Wellentransport vollständig erhalten bleibt und Leistung transportiert wird. Die Terme $w_e = \frac{1}{2} \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E} \cdot \dot{\vec{E}}$ und $w_m = \frac{1}{2\mu_0} \vec{B} \cdot \dot{\vec{B}}$ geben die jeweilige lokale Energiedichte des propagierenden Wellenfeldes an. Die Energie wechselt bei der Wellenausbreitung zwischen ihrer elektrischen und magnetischen Natur hin und her.

Der stationäre Zustand

Spezialisieren wir dieses Ergebnis auf zeitharmonisch fluktuierende Felder. Wir gehen vom Realteil $\vec{A}(\vec{x}, t) = \Re(\vec{A}(\vec{x})e^{-i\omega t})$ aus ($E(\vec{x})$ und $B(\vec{x})$ seien reell, daher können wir eine im cos-Argument auftretende Phase zu Null setzen)

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = \vec{E}(\vec{x}) \cos(\omega t) \quad \vec{B}(\vec{x}, t) = \vec{B}(\vec{x}) \cos(\omega t) \quad . \quad (32)$$

Bilden wir die über eine Periode gemittelte Energiebilanz

$$\operatorname{div} \langle \vec{S}(\vec{x}, t) \rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \epsilon_0 \epsilon_r |\vec{E}(\vec{x}, t)|^2 + \frac{1}{2\mu_0} |\vec{B}(\vec{x}, t)|^2 \right) \right\rangle = -\sigma_{eff} \langle |\vec{E}(\vec{x}, t)|^2 \rangle \quad , \quad (33)$$

so verschwindet der Mittelwert über die Ableitungen.

Wir erhalten nach Ausführung der Integration das Ergebnis

$$\operatorname{div} \langle \vec{S}(\vec{x}, t) \rangle = -\frac{1}{2} \sigma_{eff} |\vec{E}(\vec{x})|^2 \quad . \quad (34)$$

Im stationären Fall ist der dissipierte Leistungsfluß lokal aus dem maximalen räumlichen Feld $|\vec{E}(\vec{x})|^2$ und der Materialeigenschaft Leitfähigkeit σ_{eff} als Senke gegeben. In einem Raumgebiet, das mit der geschlossenen Fläche \vec{A} berandet ist, folgt über den Satz von Gauß

$$\langle P_{abs} \rangle = \oint \langle \vec{S}(\vec{x}, t) \rangle \cdot d\vec{A} = \iiint \operatorname{div} \langle \vec{S}(\vec{x}, t) \rangle dV \quad . \quad (35)$$

Die in einem dielektrischen Körper effektiv absorbierte Leistung folgt dem Zusammenhang

$$\langle P_{abs} \rangle = -\frac{1}{2} \iiint \sigma_{eff} |\vec{E}(\vec{x})|^2 dV = -\frac{1}{2} \omega \epsilon_0 \iiint \epsilon_r'' |\vec{E}(\vec{x})|^2 dV \quad . \quad (36)$$

In Gebieten ohne Leitfähigkeit findet kein Leistungstransport statt ($\text{div} \langle \vec{S}(\vec{x}) \rangle = 0$), lediglich ein feststehendes, mit ω fluktuierendes Energiedichtefeld $\sim |\vec{E}|^2$ bzw. $\sim |\vec{B}|^2$ hat im Applikator eine physikalische Realität. Da die Ableitung der Mittelwerte der elektrischen und magnetischen Energiedichte über eine Periode verschwindet, können wir räumlich die zeitliche Konstanz der gesamten elektromagnetischen Energiedichte im eingeschwungenen Zustand folgern

$$\langle w_e \rangle + \langle w_m \rangle = \text{const.} \quad (37)$$

2.3.1 Das Eigenwertproblem für $\vec{E}(\vec{x})$ - Hochmodige Applikatoren

Das ursprüngliche Problem der Lösung der Maxwellgleichungen im Raum und der Zeit kann als ein zeitharmonisches räumliches Eigenwertproblem für das Vektorpotential formuliert werden. Mit (24) kann das elektrische Feld über (15) in äquivalenter Weise durch eine Helmholtzgleichung dargestellt werden

$$\Delta \vec{E}(\vec{x}) + k^2(\vec{x}) \vec{E}(\vec{x}) = 0 \quad (38)$$

Der einfachste vektorielle, zur phänomenologischen Betrachtung lösbare Fall ist ein quaderförmiger Applikator mit den Abmessungen d_x, d_y, d_z und ideal leitenden metallischen Wänden (entsprechende tangentielle elektrische Komponenten verschwinden an der Berandung). Zunächst sei dieser ohne Dielektrikum, daher $k^2(\vec{x}) = k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$. Einige grundlegende Problemeigenschaften seien damit kurz angeführt. Das elektrische Feld $\vec{E}(\vec{x})$ ergibt sich hier unmittelbar im kartesischen Eigenfunktionensystem in anregbaren Moden l_{mn}

$$\vec{E}_{l_{mn}}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} E_x \ l_{mn} \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z) \\ E_y \ l_{mn} \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z) \\ E_z \ l_{mn} \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z) \end{pmatrix} \quad (39)$$

Die eigentliche Feldverteilung im Applikator ist abhängig von der vorliegenden Einkopplung und läßt sich als Superposition aller entsprechend angeregten Moden darstellen. Im Fall für große Abmessungen der Applikatorausdehnung im Verhältnis zur eingekoppelten Wellenlänge (hochmodiger Applikator) ergibt sich ein großes Spektrum an scharfen resonanten Eigenfrequenzen

$$\left(\frac{l\pi}{d_x}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{d_y}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{d_z}\right)^2 = \left(\frac{\omega_{l_{mn}}}{c}\right)^2 \quad (40)$$

Liegen bestimmte symmetrische Bedingungen vor, wie z.B. übereinstimmende Abmessungen $d_x = d_y$, erhalten wir Entartung von Eigenfrequenzen, d.h., eine Eigenfrequenz ist zugehörig zu verschiedenen Tripeln l, m, n . Gleichzeitig nimmt damit die Spektraldichte resonanter Eigenfrequenzen ab. Durch Einbringen eines Dielektrikums werden Symmetrien im Allgemeinen gestört. Dieses führt dazu, daß entartete Moden auseinanderfallen und damit Anzahl

und Dichte der angeregten Moden in einem Frequenzintervall zunehmen, was sich in einer erhöhten Homogenität des resultierenden Feldes äußert. Zudem kann geschlossen werden, daß für kleinere Applikatoren, Geometrien, die zu Entartungen führen können, im Sinne einer hohen Eigenfrequenzspektraldichte vermieden werden sollten.

Für die Einkopplung einer Strahlungsquelle in einen Applikator läßt sich die Schlußfolgerung erkennen, daß zur Auslegung des Applikators in der Umgebung der eingekoppelten Frequenz möglichst viele anregbare Eigenfrequenzen des Applikators liegen sollten. Mit (40) kann damit die Anzahl der Moden in einem Applikator aus dem Verhältnis $\frac{d}{\lambda_{Quelle}}$ abgeschätzt werden

$$l^2 + m^2 + n^2 = 4 \left(\frac{d}{\lambda_{Quelle}} \right)^2 \quad . \quad (41)$$

Der Übergang zu komplizierteren Geometrien gestaltet sich durch den vektoriell wirkenden $\vec{\Delta} \vec{E} = -\text{rot rot} \vec{E}$ Operator als sehr schwierig, da die Komponentengleichungen differentiell gekoppelt auftreten. Geschlossene Lösungen sind hier nur unter bestimmten Vorgaben zu erwarten. In zylindrischen Koordinaten (r, ϕ, z) (der GOTS-Applikator kann abschnittsweise zylindrisch betrachtet werden) gilt beispielsweise

$$\left(\begin{array}{c} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial r} (r E_\phi) - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} E_r - \frac{\partial^2}{\partial z^2} E_r + \frac{\partial}{\partial z \partial r} E_z + k^2 E_r \\ \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial z \partial \phi} E_z - \frac{\partial^2}{\partial z^2} E_\phi - \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r E_\phi) - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \phi} E_r + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r \partial \phi} E_r \right) + k^2 E_\phi \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial z} E_r - r \frac{\partial}{\partial r} E_z \right) - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} E_z + \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial \phi z} E_\phi + k^2 E_z \end{array} \right) = 0 \quad . \quad (42)$$

2.3.2 Die Energiedisposition in einem Applikator

Zur Klassifizierung des gesamten Schwingungsverhaltens eines großen hochmodigen Applikators ist der Modenbegriff, wie im vorigen Kapitel ersichtlich ist, für die Praxis ungeeignet. Die Berücksichtigung leitender Wände und eingebrachter Dielektrika müssen für den real vorliegenden Fall zusätzlich noch in Betracht gezogen werden.

Einen Applikator mit seinem stationären elektromagnetischen Feld kann man als ein einziges, schwingungsfähiges System ansehen. Verschiedenartige Einflüsse, wie das Einbringen verlustbehafteter Dielektrika und ihre Veränderung während des Materialverarbeitungsprozesses verstimmen das System gegen die Resonanzfrequenzen im idealen Fall. Über den Gütewert Q lassen sich resonante dissipative Schwingungssysteme charakterisieren. Dieser ist definiert als das Verhältnis

$$Q = 2\pi \frac{\text{gespeicherte Energie}}{\text{Energieverlust pro Schwingung}} = 2\pi \frac{\iiint w_e dV}{\frac{2\pi}{\omega} P_{abs}} \quad . \quad (43)$$

Aus der stationären Leistungsbilanz (33) und (36) erhalten wir unmittelbar für einen voll beladenen Applikator das elementare Ergebnis

$$Q_L = \frac{\epsilon_0 \iiint \epsilon'_r(\vec{x}) |\vec{E}(\vec{x})|^2 dV}{\iiint \sigma_{eff}(\vec{x}) |\vec{E}(\vec{x})|^2 dV} \approx \frac{1}{\tan \delta_{eff}} \quad . \quad (44)$$

Bei einer teilweisen Beladung [5] ist der Zusammenhang komplizierter:

$$Q_L = \frac{1}{\tan \delta_{eff}} + \frac{1}{\epsilon'_r \tan \delta_{eff}} \frac{\iiint_{V_{leer}} |\vec{E}_{leer}(\vec{x})|^2 dV}{\iiint_{V_{Probe}} |\vec{E}_{Probe}(\vec{x})|^2 dV} \quad (45)$$

Dabei ist V_{leer} das verbleibende Applikatorvolumen ohne Material mit zugehöriger Feldverteilung $\vec{E}_{leer}(\vec{x})$, und V_{Probe} mit $\vec{E}_{Probe}(\vec{x})$ selbiges im Material.

Die Gesamtverluste in einem Applikator setzen sich zusammen aus Reflexionsverlusten (Ohmsche Verluste) an den Wänden, Beugungsverluste an der Einkopplungsöffnung und den Absorptionsverlusten in einem Medium. Für die Gesamtgüte Q folgt damit

$$\frac{1}{Q} = \frac{1}{Q_{Ohm}} + \frac{1}{Q_B} + \frac{1}{Q_L} \quad (46)$$

Damit können wir die mittlere Feldstärke im leeren GOTS-Applikator unter der Annahme [12] einer vollkommenen Gleichverteilung abschätzen. Aus Abb.6 können die geometrischen Gegebenheiten entnommen werden. Die Ohmsche Güte folgt dem Zusammenhang

$$Q_{Ohm} = \frac{\omega \epsilon_0 \iiint |E|^2 dV}{R_A \iint |H|^2 dA} = \frac{\omega \mu_0 V}{R_A A} = 59600 \quad (47)$$

Dabei ergibt sich der Ohmsche Reflexionswiderstand an der Applikatoroberfläche über den

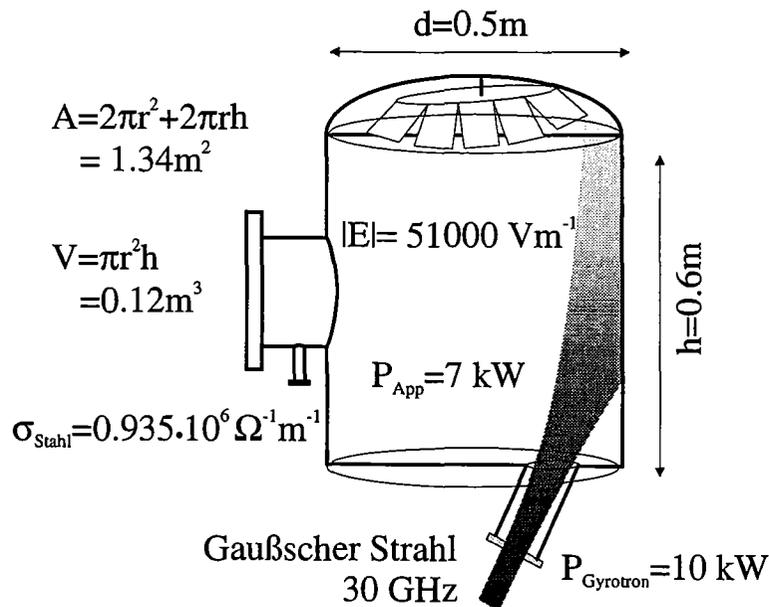


Abbildung 6: Abschätzung der mittleren Feldstärke im GOTS-Applikator

Oberflächenwiderstand

$$R_A = \sqrt{\frac{\omega \mu_0}{2\sigma_{\text{Stahl}}}} = 0.356 \Omega \quad (48)$$

Die an der Oberfläche tangential magnetische Feldstärke läßt sich bei einem verlustbehafteten Metall aus dem E -Feld ausdrücken

$$|H(\vec{x})|^2 = \frac{\epsilon_0}{\mu_0} |E(\vec{x})|^2 \quad . \quad (49)$$

Die Beugungsverluste erhalten wir aus dem Verhältnis der Fläche des Einkoppelfensters zur Gesamtfläche des Applikators

$$Q_B = \frac{2\pi LA}{\lambda A_{\text{Fenster}}} = 100500 \quad . \quad (50)$$

Wir erhalten damit einen Gesamtgütwert des leeren Applikators von $Q = 37400$.

Wir berechnen nun für den idealen Fall das homogene mittlere Feld bei einer im Applikator eingekoppelten Leistung von $P = 7 \text{ kW}$ zu

$$|\bar{E}| = \sqrt{\frac{2PQ}{\omega\epsilon_0 V}} = 51000 \frac{V}{m} \quad . \quad (51)$$

2.4 Thermische Wechselwirkungen

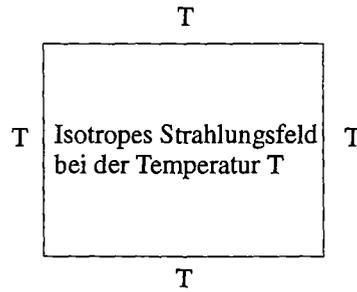
2.4.1 Das Spektrum der Temperaturstrahlung

In Kapitel 2.3.1 wurde der Modenbegriff für Anregungen des elektrischen Feldes aus (38) in geschlossenen Geometrien eingeführt und unter dem Aspekt hochmodiger Mikrowellenapplikatoren diskutiert. Prinzipiell ist keine obere Beschränkung für anregbare Eigenmoden aus der spektralen Gleichung gegeben, wenn $\lambda_{\text{Quelle}} \rightarrow 0$ in (40). Lediglich Randbedingungen (Geometrie, Einkopplung) bestimmen den Lösungscharakter.

Eine weitere, wesentliche Randbedingung zur elektromagnetischen Phänomenologie stellt die Temperatur der Applikatorbewandung selber dar, die primär Anregungen weit höherer Frequenz wie Infrarot und Wärmestrahlung im Applikator zur Folge hat. Zur korrekten Beschreibung des sich einstellenden Temperaturstrahlungsspektrums müssen allerdings noch quantenmechanische Gesetzmäßigkeiten herangezogen werden. Die zum weiteren Verständnis notwendigen Zusammenhänge sollen im folgenden kurz skizziert werden. Zur kollektiven Beschreibung der Zustandsdichte $\frac{dn}{V d\omega}$ innerhalb eines differentiellen Intervalls $\vec{k} + \vec{d}k$, wird ein Übergang von diskret liegenden Moden zu einem Kontinuum vollzogen. V ist dabei das Volumen aller Anregungen, und dn die Anzahl der Moden in diesem Intervall $\vec{k} + \vec{d}k$. Damit gilt unter Berücksichtigung zweier möglicher Polarisationszustände des elektromagnetischen Feldes und $k = \frac{\omega}{c}$

$$dn = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} dk_x dk_y dk_z = \frac{V \omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega \quad . \quad (52)$$

Um die spektrale Dichte $\rho_\omega = 2\pi\bar{n}\hbar\omega \frac{dn}{V d\omega}$ zu erhalten, muß die statistische Verteilung der Zustände über ω und T bekannt sein. Diese ergibt sich für Photonen aus der Quantenmechanik



Photonen im thermischen Gleichgewicht in einem Applikator. Die Gesamtzahl der Photonen hängt von der Temperatur der ideal reflektierenden Wände ab.

Abbildung 7: Der Mikrowellenapplikator als Hohlraumstrahler

(Einstein-Bose Statistik) zu

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \quad . \quad (53)$$

mit $k = 1.381 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$ der Boltzmann-Konstanten und $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, wobei $h = 6.626 \cdot 10^{-34} Js$ die Plancksche Konstante ist. Die Spektralverteilung wird das Plancksche Gesetz genannt

$$\rho_{\omega}(\omega, T) = \frac{2\omega^2}{\pi c^3} \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \quad . \quad (54)$$

Wir formulieren es als eine Funktion der Temperatur und Wellenlänge (Strahlungsenergie pro Fläche, Wellenlänge und Zeit) über die spektrale spezifische Ausstrahlung $M_{\lambda_s}(\lambda, T)$

$$M_{\lambda_s}(\lambda, T) = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5 (e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1)} \quad \left[\frac{W}{m^3} \right] \quad . \quad (55)$$

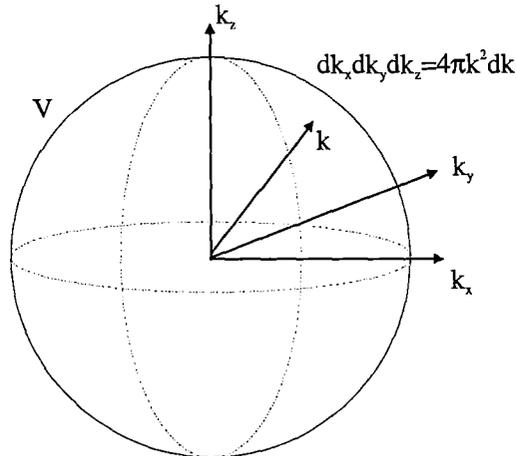
Die gesamte Strahlungsleistung pro Flächeneinheit über alle Wellenlängen erhält man durch Integration

$$M_s(T) = \int_0^{\infty} M_{\lambda_s}(\lambda, T) d\lambda = \frac{2\pi^5 k^4}{15h^3 c^2} T^4 = \sigma T^4 \quad . \quad (56)$$

Dieser einfache Zusammenhang ist das Stefan-Boltzmannsche Gesetz mit gleichnamiger Konstante $\sigma = 5.603 \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4}$. Im Temperaturbereich um 300 K (die Applikatorbewandung ist isotherm wassergekühlt) gilt das Wiensche Verschiebungsgesetz, welches das Maximum der emittierten Strahldichte angibt

$$f = 5.88 \cdot 10^{10} T \quad . \quad (57)$$

Man sieht sofort im Temperaturbereich von Sinterungen $T = 300 \dots 2000K$ den abgestrahlten Hauptanteil erwartungsgemäß in einem Frequenzbereich von $f = 1.8 \cdot 10^{13} \dots 1.2 \cdot 10^{14} Hz$, also im Infrarotgebiet liegen.



Das Zustandsvolumen legt jede anregbare Mode fest durch einen Punkt im kontinuierlichen k_x, k_y, k_z -Raum.

Abbildung 8: Zustandsvolumen der thermischen Strahlung

Zum Schluß schätzen wir den Anteil der Strahlungsdichte ab, der im für die Gitterankopplung relevanten Millimeterwellenspektralbereich liegt. Dieser wird üblicherweise durch die Bruchteilfunktion $F_{\lambda_1-\lambda_2}$

$$F_{\lambda_1-\lambda_2} = \frac{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} M_{\lambda_s}(\lambda, T) d\lambda}{\int_0^{\infty} M_{\lambda_s}(\lambda, T) d\lambda} = \frac{1}{\sigma T^4} \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} M_{\lambda_s}(\lambda, T) d\lambda \quad (58)$$

angegeben. Dieses Integral ist analytisch nicht darstellbar und ist in Tabellen zu finden [55]. Für den Wellenlängenbereich von $\lambda = 1 \dots 10$ cm ergibt sich bei Raumtemperatur $F_{\lambda_1-\lambda_2} < .001$. Dieser Effekt wird mit steigender Temperatur schnell kleiner. Damit hat das Temperaturfeld einen vernachlässigbaren Einfluß und Anteil auf das im Applikator eingestellte Millimeterwellenfeld während des Sintervorgangs.

2.4.2 Körper im Temperaturstrahlungsfeld

Die thermischen Strahlungseigenschaften eines Körpers schließen unmittelbar an die Ergebnisse zur Hohlraumstrahlung an. Befindet sich ein Körper im Applikator, so steht er mit seiner Umgebung in einem Austauschverhältnis an thermischer Energie. Hierbei sind sowohl die Wechselwirkungsmechanismen für das angelegte HF-Feld zu untersuchen, als auch der Energieaustausch über das Temperaturstrahlungsfeld. Dabei hängt die abgegebene Strahlung von Eigenschaften der Oberfläche wie Material, Rauigkeit usw. ab. Zu diesem Zweck wird zur Definition der Absorptions-, bzw. Emissionseigenschaften ein idealisierter Vergleichskörper (Schwarze Körper) herangezogen. Dieser unterliegt folgenden Bedingungen:

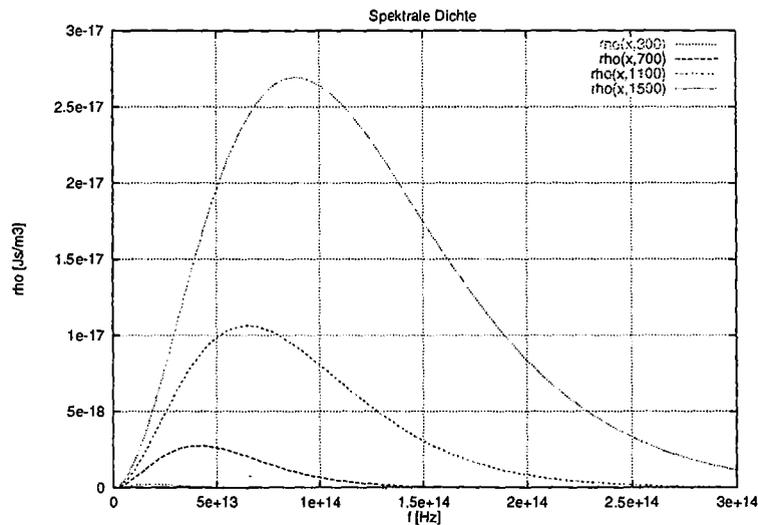


Abbildung 9: Die Spektralverteilung im Applikator von Zimmertemperatur bis 1200°C

- Alle einfallende Strahlung wird absorbiert, d.h. keine Reflexion.
- Im thermischen Gleichgewicht emittiert der schwarze Strahler genausoviel, wie er absorbiert.
- Die den umschlossenen Raum erfüllende schwarze Strahlung ist isotrop.
- Ein schwarzer Körper erfüllt idealerweise das Lambertsche Strahlungsgesetz.
- Der schwarze Körper strahlt ideal bei jeder Wellenlänge.
- Im Vakuum ist die Gesamtstrahlung des schwarzen Körpers nur von der Temperatur des Körpers abhängig.

Ein realer Körper wird anteilig an obigen Eigenschaften bemessen.

Emissivität:

Der gerichtete spektrale Emissionsgrad wird aus dem Verhältnis

$$\epsilon'_\lambda(\theta, \phi, T) = \frac{M'_\lambda(\theta, \phi, T)}{M'_{\lambda_s}(\theta, T)} \quad (59)$$

bei gleicher Temperatur bestimmt, dabei ist $M'_\lambda(\theta, \phi, T)$ die gerichtete spezifische Ausstrahlung des realen Körpers, $M'_{\lambda_s}(\theta, T)$ die des schwarzen idealen Referenzkörpers. Wesentlich im Beitrag für Strahlungsbilanzen ist der über die Plancksche Spektralverteilung im Raum

hemisphärisch gemittelte Gesamtemissionsgrad (Emissivität),

$$\epsilon'(T) = \frac{1}{\sigma T^4} \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \epsilon'_{\lambda}(\lambda, \theta, \phi, T) M'_{\lambda_s}(\lambda, \theta, T) d\lambda \cos \theta d\Omega \quad (60)$$

Hängt nun der gerichtete Emissionsgrad $\epsilon'_{\lambda}(\lambda, \theta, \phi, T)$ nicht von der Richtung ab, so liegt der Fall diffuser Emission vor. Ist $\epsilon'_{\lambda}(\lambda, \theta, \phi, T)$ von der Wellenlänge unabhängig, wird von einem 'grauen' Körper gesprochen. Es ist anzumerken, daß die Emissivität ein stoffspezifischer, temperaturabhängiger Materialparameter ist, dessen Funktionsabhängigkeit aus Messungen in Tabellen zu finden ist.

Absorptionsgrad:

Der Absorptionsgrad α_{λ} ist definiert als das Verhältnis aus der gesamten auf einen Körper einfallenden Leistung und der vom Körper absorbierten Strahlung. Für den Gesamtabsorptionsgrad können wir schreiben

$$\alpha(T) = \frac{\int_{\Omega} \int_0^{\infty} \alpha_{\lambda}(\lambda, T) d\Phi_{quelle} d\Omega}{\int_{\Omega} \int_0^{\infty} d\Phi_{quelle} d\Omega} \quad (61)$$

$d\Phi_{quelle}$ ist dabei die gerichtete Leistung einer äußeren Strahlungsquelle. Für einen beliebigen materiellen Körper in einem schwarzen Hohlraumstrahler folgt aus der isotropen Strahlungsverteilung das Kirchhoffsche Gesetz

$$\epsilon'_{\lambda}(\lambda, \theta, \phi, T) = \alpha_{\lambda}(\lambda, \theta, \phi, T) \quad (62)$$

2.4.3 Mechanismen der Wärmeübertragung

Ein realer Körper emittiert im allgemeinen weniger Leistung als ein idealisierter, schwarzer Strahler. Für viele Stoffe können individuelle Richtungs-, Temperatur- und Wellenlängenspezifische Abhängigkeiten bestehen. Zur weiteren Beschreibung des Strahlungsaustausches in HF-Applikatoren, bzw. konventionell geheizten Sinteröfen gehen wir von einer grauen, diffusen Wärmestrahlung aus. Neben der Wärmeübertragung auf einen Körper durch Strahlung existieren aber noch weitere Mechanismen, die unterschiedliche Funktionalitäten der Temperatur haben.

Wärmeleitung:

Ein quantitatives Maß für die Wärmeleitung (Konduktion) ist mit der lokal fließenden Wärmestromdichte $\vec{j}_T(\vec{x})$ gegeben, die sich nach dem linearen Fourierschen Gesetz zu

$$\vec{j}_T(\vec{x}) = -\sigma_T(\vec{x}, T) \text{ grad } T(\vec{x}) \quad (63)$$

ergibt. $\sigma_T(\vec{x}, T)$ ist die, im allgemeinen temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeit im Material. Sind 2 Körper wärmeleitend miteinander verbunden, so erhalten wir an der Grenzfläche (bei $z = z_G$) für ein Flächenelement die fließende Leistung P_{cond}

$$dP_{cond} = \int_x^{x+dx} \int_y^{y+dy} \vec{j}_T(\vec{x}) \cdot \vec{d}A = -\sigma_T \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=z_G} dx dy \quad (64)$$

als zu erfüllende Randbedingung.

Konvektion:

Keramiken können konventionell in Öfen über einem brennenden Gasstrom aufgeheizt werden. Ein Gasstrom mit der Temperatur T_{Gas} im Abstand Δz von der Oberfläche des Körpers mit T_{z_G} möge laminar und zeitlich konstant auf den Körper fallen. Damit können wir im Bild des Wärmeleitungsprozesses die übertragene Leistung an der Grenzfläche für $z = z_G$ mit (64) berechnen zu

$$dP_{conv} = \int_x^{x+dx} \int_y^{y+dy} \vec{j}_T(\vec{x}) \cdot \vec{d}A = -\frac{\sigma_T}{\Delta z} \Delta T dx dy = -h_{conv} (T_{Gas} - T_{z_G})^\zeta dA \quad (65)$$

h_{conv} bezeichnen wir als Konvektionsparameter. Experimentelle Messungen allerdings zeigen, daß bei der Konvektion zur Proportionalität der Differenz der relevanten Temperaturen temperaturabhängige Abweichungen im Exponenten ζ vom Wert 1 auftreten können ($\zeta = 1.25 \dots 1.4$, [56]). Weitere Nichtlinearitäten ergeben sich aus einem temperaturabhängigen h_{conv} . Für weitere Betrachtungen vernachlässigen wir diese Phänomene und nehmen (65) mit $\zeta = 1$ als idealisierte Grundlage.

Ist keine äußere konvektive Gasheizung vorhanden, bildet sich in einem nicht-evakuierten Applikator, wenn die Probe wärmer ist als die Applikatorwand, natürliche Konvektion aus, die zu einer Abkühlung des Körpers beiträgt. Sie ist der gleichen Gesetzmäßigkeit wie (65) unterworfen. Eine einfache theoretische Bestimmung von h_{conv} ist wegen im allgemeinen einsetzender Turbulenzphänomene der Luft an der Oberflächengrenzschicht allerdings nicht möglich.

Wärmestrahlung:

Wir gehen für die Modellierung zur Keramikverarbeitung in einem Mikrowellenapplikator von diffuser, grauer und isotroper Wärmestrahlung aus, sowie einer isothermen Applikatorwand. Damit erhalten wir mit (60),(61) und dem Kirchhoffschen Gesetz (62) folgende Strahlungsrandbedingung

$$dP_{rad} = \int_x^{x+dx} \int_y^{y+dy} \vec{j}_T(\vec{x}) \cdot \vec{d}A = -\sigma(\epsilon'(T)T_{z_G}^4 - \alpha(T)T_{Umg}^4) dA = -\sigma\epsilon'(T)(T_{z_G}^4 - T_{Umg}^4) dA \quad , \quad (66)$$

wobei T_{Umg} für die Umgebungstemperatur, bzw. Temperatur der Applikatorbewandung steht. Um Leistungsbilanzen aufstellen zu können, die sich summarisch aus obigen einzeln aufgeführten Effekten ergeben, dürfen keine Wechselwirkungsmechanismen zwischen diesen selbst bestehen.

2.5 Dielektrische Eigenschaften keramischer Materialien

2.5.1 Wechselwirkung elektromagnetischer Wellen mit Dielektrika

Der Dissipationsmechanismus elektromagnetischer Wellen hängt spezifisch vom Material und dem vorliegenden Frequenzbereich ab. Im klassischen Fall der Mikrowellen müssen die Materialbausteine ein hinreichend hohes Dipolmoment besitzen, das ein effizientes Mikrowellenheizen erlaubt (z.B. Wasser). Bei keramischen Dielektrika und Millimeterwellen ist der Mechanismus weitaus komplexer. Über eine Kopplung des schwingenden elektromagnetischen Feldes an das Eigenschwingungssystem des Festkörpers findet Streuung zwischen den Trägern (Quanten) der beiden Wellenformen, den Photonen als Mittler des elektromagnetischen Feldes und den Phononen als Mittler der Kristallgitterschwingungen, statt mit dissipativer Wirkung.

In Abbildung 10 ist der Verlauf für verschiedene klassische Polarisierungsmechanismen in Abhängigkeit der verwendeten Frequenzen aufgeführt. Im klassischen Bild sehen wir die Ab-

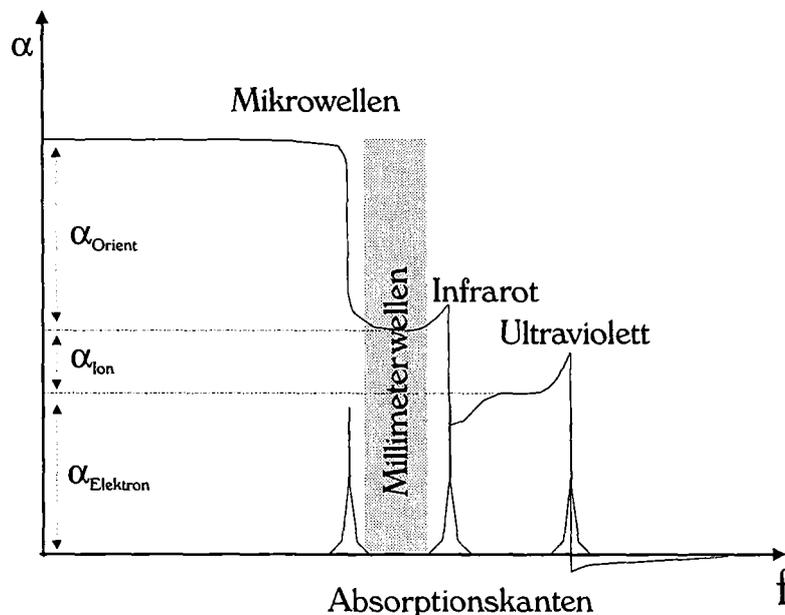


Abbildung 10: Klassisches Polarisations- und Absorptionsverhalten von Dielektrika

sorptionskanten für Dielektrika im Millimeterwellenbereich an beiden Rändern des Frequenzbereiches liegen. Dieses sollte an und für sich eine schlechte Ankopplung zur Folge haben.

Tatsächlich ist die Ankopplung von Keramiken im Mikrowellenbereich schlechter als im Millimeterwellenbereich. Zur Erklärung seien aber zunächst die klassischen Mechanismen skizziert

- **Raumladungs-Polarisation**

tritt bei niedrigen Frequenzen in Materialien mit freien Ladungsträgern auf (Halbleitern) und führt zur Ladungstrennung innerhalb des Materials. Hier findet keine Absorption statt, die Dielektrizitätszahl kann sich aber ändern.

- **Dipolpolarisation**

Tritt bei polaren Molekülen auf im hochfrequenten Bereich (HF, Mikrowellen). Sie ist der Hauptmechanismus bei der konventionellen Mikrowellenmaterialverarbeitung. Ein polares Material ist nach außen hin elektrisch neutral, die Zentren der positiven und negativen Ladung sind lediglich getrennt. Dies hat ein permanentes elektrisches Dipolmoment zur Folge, das durch

$$\vec{p} = q\vec{d} \quad (67)$$

ausgedrückt werden kann, wobei q die Ladung und d den Abstand der Ladungen zueinander angibt. Durch die Wärmebewegung wie beispielsweise bei Wassermolekülen liegen allerdings die Dipolmomente völlig ungeordnet vor, so daß kein resultierendes Dipolmoment übrig bleibt. Ein äußeres elektrisches Feld führt paraelektrische Substanzen zur sogenannten Orientierungspolarisation, wobei durch das Feld ein ordnendes Drehmoment $\vec{M} = \vec{p} \times \vec{E}$ auf die statischen Dipole wirkt. Bei der dabei entstehenden Umorientierung wird durch intramolekulare Reibung Wärme frei. Orientierungspolarisation läßt sich nur beobachten, wenn der Festkörper aus asymmetrischen Molekülen oder Ionen aufgebaut ist.

Unpolare Materialien ($d \approx 0$), die in einem festen Gitter angeordnet sind, gehorchen der Verschiebungspolarisation. Durch molekulare Deformation beim Anlegen eines äußeren Feldes wird der Ladungsschwerpunkt der Elektronenwolke in Bezug auf den Kern verschoben, was einen induzierten temporären Dipol hervorruft. Die Feldenergie wird hier in dem sich ausbildenden Gegenfeld relaxierbar gespeichert und führt zur Erwärmung des Materials. Dieses kann als Mechanismus der 2.45 GHz-Technologie zur Materialverarbeitung betrachtet werden.

- **Ionische Polarisation**

erfolgt bei Infraroteinstrahlung. Hier wechselwirkt das elektromagnetische Feld mit den Eigenschwingungen des Kristallgitters. Dabei kommt es zur Dissoziation des Moleküls, bzw. in einem Ionenkristall zur Verschiebung der positiven und negativen Ionen zueinander.

- **Elektronische Polarisation**

tritt auf bei sehr hohen Frequenzen nahe des Ultravioletten (UV) und sichtbaren Bereichs und führt zu einer resonanten Verlagerung der den Atomkern umhüllenden Elektronenwolke in Richtung des angelegten elektrischen Feldes.

2.5.2 Ankopplungsmechanismen von HF-Wellen mit dielektrischen Festkörpern

Keramiken und keramische Pulver zählen zu der Klasse der Festkörper. Ihr Aufbau besteht aus Kristallstrukturen mit dreidimensionalen periodischen Anordnungen einzelner Elementarzellen. Im allgemeinen Fall einer komplizierten Kristallgitterstruktur werden die dielektrischen Eigenschaften durch einen von der Lage der Hauptachsen determinierten dielektrischen Tensor $\bar{\epsilon}_r$ beschrieben, nur für kubische Kristalle besteht keine räumliche Anisotropie (vgl. auch (19)). Die Abhängigkeiten der dielektrischen Eigenschaften, wie auch Reflexion und Absorption von der Frequenz der einfallenden elektromagnetischen Welle wurden von Debye, Lorentz et al. untersucht und in Modellen aufgezeigt. Die wesentlichen Aussagen für unsere Untersuchungen werden nun im folgenden diskutiert. Es zeigt sich, daß verschiedene Wechselwirkungsmechanismen zwischen elektromagnetischen Wellen und Materie existieren.

Das klassische Lorentz-Modell

Dieses Modell beschreibt physikalisch den Fall der elektronischen und ionischen Polarisation, bewährt sich aber in der mathematischen Beschreibung (gedämpfte Schwingungsgleichung) für eine allgemeine Phänomenologie des Ankopplungsverhaltens in Festkörpern. Lorentz ging aus von einem klassischen Oszillatoransatz, indem er das Elektron eines Atoms als schwingungsfähiges System unter einer periodisch getriebenen elektrischen Feldstärke $\vec{E}_{lokal}(t)$ durch eine einfallende elektromagnetische Welle sieht. Durch die periodische Anordnung der Atome im Festkörper werden Auslenkungen \vec{x}_e der Elektronen von ihrer Ruhelage verstärkt, was zu einer makroskopischen elektronischen Polarisation führt. Dabei bilden sich aufgrund einer periodischen Ladungstrennung temporäre Dipole aus.

$$\ddot{\vec{x}}_e + \frac{1}{\tau} \dot{\vec{x}}_e + \omega_0^2 \vec{x}_e = -\frac{e}{m} \vec{E}_{lokal} e^{i\omega t} \quad (68)$$

ω_0 ist aus der Quantenmechanik als Übergangsfrequenz im Absorptionsspektrum eines Gitteratoms gegeben, $\tau = \frac{1}{\beta}$ ist die Relaxationszeit zur Einstellung des stationären Zustandes des Elektrons. Aus der dort herrschenden Auslenkung x_{stat} ergibt sich das Dipolmoment der Elektronen zu

$$\vec{p} = \frac{e^2}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\beta\omega} \vec{E}_{lokal} \quad (69)$$

Man erhält die komplexe dielektrische Funktion $\tilde{\epsilon}(\omega)$

$$\tilde{\epsilon}(\omega) = 1 + \frac{Ne^2}{m\epsilon_0} \frac{1}{\omega_1^2 - \omega^2 - i\beta\omega} \quad (70)$$

mit $\omega_1^2 = \omega_0^2 - \frac{Ne^2}{3m\epsilon_0}$, N ist die Dichte der Elektronen. Die komplexe Dielektrizitätskonstante $\epsilon(\omega)$ kann in Real- und Imaginärteil zerlegt werden gemäß (siehe Abb.13)

$$\epsilon'(\omega) = \text{Re } \tilde{\epsilon}(\omega) = 1 + \frac{Ne^2}{m\epsilon_0} \frac{\omega_1^2 - \omega^2}{(\omega_1^2 - \omega^2)^2 + \beta^2\omega^2} \quad (71)$$

$$\epsilon''(\omega) = \text{Im } \tilde{\epsilon}(\omega) = \frac{Ne^2}{m\epsilon_0} \frac{\beta\omega}{(\omega_1^2 - \omega^2)^2 + \beta^2\omega^2} \quad (72)$$

ω_1 stellt die Resonanzfrequenz der dielektrischen Funktion $\epsilon(\omega)$ dar. Der Imaginärteil ϵ''

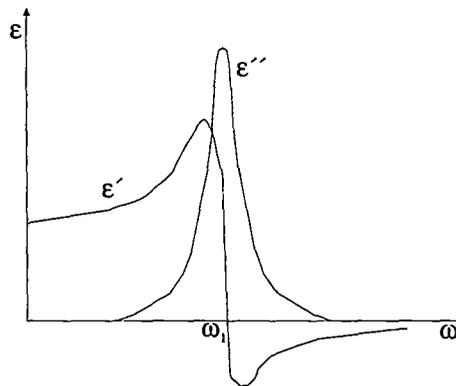


Abbildung 11: Verlauf des Real- und Imaginärteils von $\tilde{\epsilon}(\omega)$

hat bei ω_1 sein Maximum und fällt wieder auf 0 ab. Der Mechanismus der elektronischen Polarisation tritt im ultravioletten Spektralbereich, also bei Übergangsfrequenzen ω_1 um die 10^{16} Hz auf [13].

Das Debyesche Modell - Paraelektrische Polarisation im Festkörper

Das Debyesche Modell ist der Wechselwirkungsmechanismus, der die Ankopplung des Materials mit Mikrowellen beschreibt. Keramische Materialien bestehen aus permanenten polaren Gitterelementen. Ein schnelles, angelegtes elektromagnetisches Wechselfeld führt zu einer Umorientierung dieser Dipole, wobei Aktivierungsenergie gegen die Gitterkräfte der umliegenden Teilchen geleistet werden muß. Diese wird aus der thermischen Energie erbracht. Die beschreibende Gleichung ist ähnlich (68). Hier wird die Zeit, die zur Neuorientierung der Dipole notwendig ist, Relaxationszeit τ genannt (siehe (68)).

Bei steigender Temperatur kann mehr thermische Energie dem Umorientierungsprozeß zur

Verfügung gestellt werden, so daß die Relaxationszeit abnimmt. Dieses wird deutlich aus der Beziehung

$$\tau = \frac{\epsilon_s + 2}{\nu(\epsilon_\infty + 2)} e^{\frac{E_a}{kT}} \quad (73)$$

ν ist gegeben als die Stoßfrequenz zweier Dipole in einer Potentialmulde. Mit dieser Modellvorstellung ergibt sich für die komplexe Dielektrizitätskonstante der Zusammenhang

$$\epsilon'(\omega) = \text{Re } \tilde{\epsilon}(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_s - \epsilon_\infty}{1 + \omega^2\tau^2} \quad (74)$$

$$\epsilon''(\omega) = \text{Im } \tilde{\epsilon}(\omega) = \frac{\epsilon_s - \epsilon_\infty}{1 + \omega^2\tau^2} \quad (75)$$

ϵ_s und ϵ_∞ sind die statische bzw. optische Dielektrizitätskonstante, ν die Eigenfrequenz des Kristallgitters. Die bei höherer Temperatur beweglicheren Dipole können nun leichter Gitterschwingungen anregen und tragen verstärkt zur Wärmeausbreitung in dem keramischen Material bei. Dieses führt in (74) und (75) unmittelbar zur Vorhersage, daß der Permeabilitätswert und die Absorptionseigenschaften keramischer Materialien mit höherer Temperatur steigen. Es kann auch aus (74) und (75) gefolgert werden, daß eine Temperaturerhöhung die absorptiven Eigenschaften stärker prägt als die der Permeabilität. Für genauere Materialuntersuchungen während des Sintervorgangs müssen $\epsilon'(T)$ und $\epsilon''(T)$ für das jeweilige Material und die verwendete Frequenz bekannt sein. Dieses Modell geht von einer symmetrischen Po-

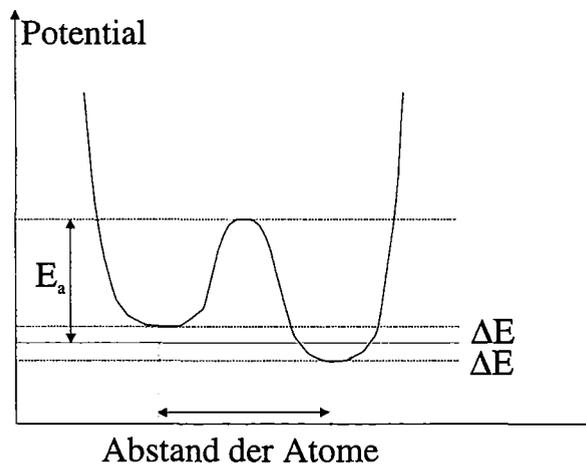


Abbildung 12: Verzerrung des Gitterpotentials bei einem angelegten E-Feld

tentialmuldenvorstellung aus, wobei die Aktivierungsenergie E_a aufgebracht werden muß, um gegen die Gitterkräfte von dem Zustand 1 in den Zustand 2 zu drehen. Durch Anlegen eines externen Feldes ergibt sich die Absenkung eines Zustandes und damit eine dissipative Energiedifferenz.

Ankopplung ionischer Kristalle an Millimeterwellen und IR

Wie zuvor bemerkt, sollte nach dem klassischen Verständnis im Millimeterwellenbereich eher die Neigung bestehen, schlechter an das elektromagnetische Feld, bzw. vergleichbar dem paraelektrischen Verhalten entsprechend anzukoppeln. Um die Gegebenheiten kurz zu skizzieren, muß auf den Ankopplungsmechanismus im Infrarotbereich eingegangen werden. Die eigentliche Theorie hierzu ist mathematisch sehr aufwendig und bis heute noch nicht vollständig abgeschlossen.

Ein Kristallgitter selbst ist ein schwingungsfähiges System, das transversale und longitudinale Eigenfrequenzen besitzt. Es zeigt sich, daß für die Frequenzabhängigkeit der Dielektrizitätszahl $\epsilon(\omega)$ der Zusammenhang [14]

$$\epsilon(\omega) = \epsilon(\omega_s) \frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2} \quad (76)$$

besteht. Dabei ist ω_T die Kristallgitterfrequenz einer transversalen Schwingung, und ω_L einer longitudinalen Schwingung. Die Dispersionrelation erhält man damit einfach zu

$$k^2 = \frac{\epsilon(\omega_s)}{c^2} \frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2} \omega^2 \quad (77)$$

$\epsilon(\omega_s)$ ist der Wert der Permeabilität, der das Material im sichtbaren Bereich annimmt. Man

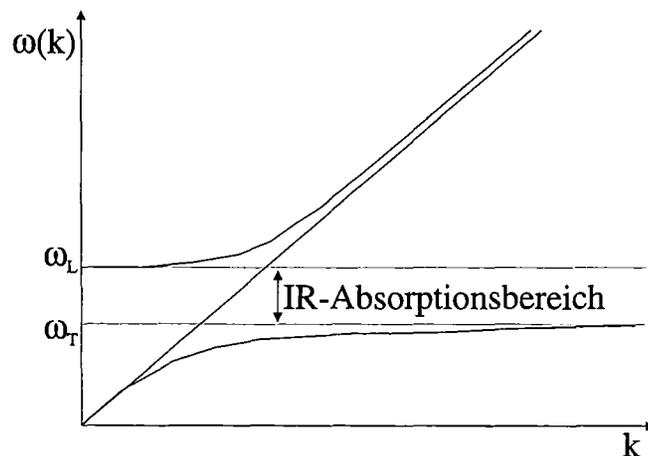


Abbildung 13: Dispersionsrelation ionischer Kristalle im IR-Bereich

erhält 2 Dispersionszweige, die durch eine Frequenzlücke voneinander getrennt sind. In diesem Wertebereich ergibt sich eine imaginäre Lösung von (77). Eine eindringende elektromagnetische Welle

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = \vec{E}(\vec{x}) e^{i(kx - \omega t)} \quad (78)$$

zeigt damit Absorption durch den imaginären Anteil von k .

Im Falle einfallender Millimeterwellen zeigt die quantenmechanische Störungsrechnung [15], daß kurzfristig virtuelle IR-aktive Gitterschwingungen nach der Energieunschärferelation

$$\Delta E \Delta t > \frac{\hbar}{2} \quad (79)$$

angeregt werden können. In der Störungstheorie sind dieses Prozesse zweiter und dritter Ordnung. Die virtuellen IR-Phononen zerfallen sehr schnell, wobei eine Dämpfung (Absorption) stattfindet, die zu einer inelastischen Gitterdämpfung und Erwärmung des Materials führt.

Material	ϵ_r	$\tan \delta$	$\sigma[S/m]$	Referenz
Teflon ^R [2.45GHz]	2.1	0.0019	$5.4 \cdot 10^{-4}$	[9]
Al ₂ O ₃ [8.5 GHz]	9.31	0.00034	$1.5 \cdot 10^{-3}$	[10]
Si ₃ N ₄ [8.5 GHz]	8.63	0.0064	$2.6 \cdot 10^{-2}$	[10]
BN [24 GHz]	7.01	0.0048	$4.5 \cdot 10^{-2}$	[10]
AlN [145 GHz]	8.3	≈ 0.00075	$5.0 \cdot 10^{-2}$	[11]
BeO [145 GHz]	6.7	0.0007	$3.7 \cdot 10^{-2}$	[11]

Tabelle 1: Beispiele dielektrischer Parameter (bei Raumtemperatur)

2.6 Wellenausbreitung und geometrische Optik

Die zentrale Ausgangsgleichung für die stationären \vec{E} -Felder stellt (38) dar. Für das stationäre Mikrowellenfeld im Applikator sind Interferenzeffekte der verschiedenen, angeregten Moden von großer Bedeutung für die resultierende Feldhomogenität. Mit der geometrischen Optik können wir Aussagen über diese interferenzbedingte räumliche Phasenstruktur gewinnen. $S(\vec{x})$ nennen wir die dabei zugehörige Phasenfunktion. Allerdings ist die geometrische Optik eine skalare Näherung der Feldgleichungen. In diesem Bild ist u eine beliebige kartesische Komponente von $\vec{E}(\vec{x})$. Wir gehen in die zugehörige skalare Helmholtzgleichung

$$\Delta u + k^2 u = 0 \quad (80)$$

mit einem Ansatz, wie ihn Sommerfeld et al. [40] einführen

$$u(\vec{x}) = A(\vec{x}) e^{ik_0 S(\vec{x})} \quad (81)$$

$A(\vec{x})$ kann dabei als die für die jeweilige kartesische Komponente zugehörige Amplitudenfunktion aufgefaßt werden. Die Phasenfunktion $S(\vec{x})$ wird in der Literatur auch als Eikonol

(griech. Bild) bezeichnet. Wir erhalten die gekoppelten Gleichungen sortiert nach Real- und Imaginärteil zu

$$k_0^2(\text{grad}S)^2 = k_0^2\epsilon'_r + (\text{grad}(\ln A))^2 + \Delta(\ln A) \quad (82)$$

$$2(\text{grad}S) \cdot \text{grad}(\ln A) = -\Delta S - k_0\epsilon''_r \quad (83)$$

Wir untersuchen nun diese (noch exakten) Umformulierungen der Helmholtzgleichung unter dem Aspekt, daß das Verhältnis der charakteristischen Resonatorausdehnung L zur im Resonator sich ausbreitenden Welle mit Wellenlänge λ groß zueinander ist. In diesem Sinne dominieren in (82) die Terme mit k_0 , und wir erhalten den wichtigen Zusammenhang

$$[\text{grad}S(\vec{x})]^2 = \epsilon'_r(\vec{x}) = n(\vec{x})^2 \quad (84)$$

$$\epsilon''_r \approx 0 \iff \sigma \rightarrow 0 \quad (85)$$

Dieses sind die Grundlagen der geometrischen Optik, wobei (84) als Eikonalgleichung bekannt ist. In [40] ist (84) für verschiedene Geometrien diskutiert.

Die Absorption (ϵ''_r) hat in (84) in diesem Zusammenhang selbst keinen Einfluß auf die Phasenverteilung $S(\vec{x})$, diese wird ausschließlich durch die Permeabilität der Materie bestimmt. Unsere Vorgabe $\lambda \rightarrow 0$ bzw. $k_0 \rightarrow \infty$ erzwingt zusätzlich die Aussage (85), daß die Leitfähigkeit σ der vorhandenen Materialien sehr klein sein muß, um (83) konsistent zu halten. Dieses ist aber bei den vorliegenden dielektrischen Materialien (Keramiken: z.B. Al_2O_3) bestens erfüllt. Wir haben mit der Phase aber erst Teilaussagen für den ursprünglichen Ansatz (81). Wir betrachten nun $A(\vec{x})$ in (81) genauer. In (82) sind für den geometrisch-optischen Fall die k_0 Terme dominant. Wir folgern, daß in diesem Fall der andere Teil der Gleichung (84) hinreichend klein sein muß um wiederum die Konsistenz des Gleichungssystems zu gewährleisten:

$$[\text{grad}(\ln A(\vec{x}))]^2 \approx -\Delta[\ln A(\vec{x})] \quad (86)$$

Diese Gleichung stellt eine nichtlineare Differentialgleichung zweiter Ordnung dar für die Amplitudenfunktion $A(\vec{x})$ dar. Wir erwarten daher zwei linear unabhängige Lösungen für $A(\vec{x})$. Zudem ist eine Kopplung zwischen A und S in (83) ersichtlich. Eine Lösung von (86) können wir unmittelbar ersehen, nämlich den Fall

$$A_1(\vec{x}) = \beta = \text{const.} \quad (87)$$

Überträgt man dieses auf den kartesischen Raum, so identifizieren wir diese triviale Lösung als eine ebene Welle

$$\vec{E}(\vec{x}) = \vec{\beta} e^{ik_0 S(\vec{x})} \quad (88)$$

Die geometrische Optik baut auf diesem Ergebnis konsequent auf, insbesondere bei der Untersuchung von Randbedingungen (Grenzflächen, Reflexion und Transmission, Fresnelsche

Gleichungen). Die Näherungsgleichung (86) werden wir in Kapitel 3 über einen kovarianten Formalismus in geschlossener Weise für die Amplitude lösen können, wobei dem vektoriellen Problemcharakter voll Rechnung getragen wird. Dieses Ergebnis hat die Konsequenz, daß die im Sommerfeldschen Näherungsbild gewonnenen optischen Begriffe als eine der Feldformulierung äquivalente Beschreibung durch Auflösen des elektromagnetischen Wellenfeldes in Strahlen herangezogen werden können. Damit lassen sich Methoden entwickeln, die eine numerische Berechnung der Applikatorproblematik aus einer strengen und kompakten Analysis für nichtebene Wellen sowie gekrümmte Oberflächen erlauben. Wie sich zeigt, besitzt eine sphärische Beschreibungsform (Kugelwelle) für die Allgemeinheit bevorzugte Lösungseigenschaften. Es sei hier nur soweit vorgegriffen, daß tatsächlich (86) in sphärischer, isotroper Geometrie eine zweite exakte Lösung

$$A_2(s) = \frac{a}{s} \quad . \quad (89)$$

besitzt. Dieses kann durch Einsetzen in (86) direkt nachgeprüft werden.

3 Die Berechnung stationärer Wellenfelder in hochmodigen Applikatoren

3.1 Vergleich verschiedener Feldberechnungsverfahren

Dieses Kapitel bietet einen kurzen Überblick über wichtige Verfahren der elektromagnetischen Feldberechnung, sowie eine bewertende Diskussion der verschiedenen Anwendungsbereiche. Dabei wird die Motivation für ein optisches Verfahren in einer neuen dreidimensionalen Tensoranalysis [17] und der simulationstechnischen Umsetzung für die vorliegende Problematik verdeutlicht. Optische Berechnungsmethoden wurden schon sehr erfolgreich für die Auslegung von Mobilfunknetzen in offenen Geometrien verwendet [35].

Es existiert eine Vielzahl verschiedener mathematischer Verfahren zur Modellierung und Simulation physikalischer Problemstellungen, deren grobe Unterteilung in numerische (gitterbezogene) und analytische Verfahren gefaßt werden kann. Der Übergang zwischen diesen beiden Kategorien kann sich mehr oder weniger fließend gestalten.

Allgemein stellt die Lösung eines elektrodynamischen Problems die räumliche und zeitliche Quadratur der Maxwell'schen Gleichungen (1),(2) dar, wobei für jedes spezifische Problem Randbedingungen im Raum und der Zeit bekannt oder als fundierte Annahme gegeben sein müssen.

Numerische Verfahren gehen zum einen von einer Diskretisierung der differentiellen oder integralen Operatoren aus, wie z.B. die Methode der finiten Differenzen im Zeitbereich (FDTD = Finite Difference Time Domain) [18] durch Diskretisierung der Differentialoperatoren im Ortsraum \vec{x} und der Zeit t oder zum anderen die TLM-Methode in einer integralen Matrixformulierung (Transmission Line Matrix) [19],[20], [21]. Eine weitere integrale Form ist die Finite-Integrations-Methode, wie sie beispielsweise das kommerzielle Produkt MAFIA [22] benutzt. Signifikantes Kennzeichen dieser numerischen Methoden ist die Notwendigkeit eines Rechengitters, dessen Auflösung die Anwendbarkeit des Verfahrens hinsichtlich Speicher und Rechenzeit für die Problemstellung bestimmt. Es existieren aber auch dazu im Ansatz unterschiedliche Verfahren, wie die Finite-Elemente-Methode (FEM). Bei dieser Methode wird der Begriff eines einheitlichen Berechnungsgitters über diskret vorgegebene Approximationsfunktionen und ihr Verhalten in einer vergleichsweise geometrieunabhängigen Form aufgelöst.

3.1.1 Die Finite-Differenzen-Methode (FDTD)

Die bewährte FDTD-Methode (Finite Difference Time Domain), 1969 von Yee et al. [23] vorgestellt, wird für sehr unterschiedliche Problemstellungen in der Feldtheorie angewandt. Sie geht aus von einer Diskretisierung der differentiellen Rotationsgleichungen (2) durch ein streng schematisches Umformulieren in Differenzgleichungen. Dadurch ist ein explizites Lösen nach

den zeitlich fortschreitenden Feldkomponenten in einer sehr allgemeinen Form

$$\mu_0 \epsilon_0 \epsilon_r \left. \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right|_{ijk}^n = \text{rot} \vec{B} \Big|_{ijk}^n - \mu_0 \sigma \vec{E} \Big|_{ijk}^n, \quad \left. \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \right|_{ijk}^n = - \text{rot} \vec{E} \Big|_{ijk}^n. \quad (90)$$

möglich. Bestimmte Eigenschaften von Materialien, bzw. fließenden Strömen können gitterpunktorientiert frei vorgegeben werden. Die Randbedingungen sind für ideal reflektierende Geometrien sehr einfach vorzugeben ($\vec{E}_{\text{tangential}} = 0, \vec{B}_{\text{normal}} = 0$). Für offene Randbedingungen wurden eine Vielzahl von Methoden entwickelt, die sich in der Praxis für das jeweilige Problem mehr oder weniger erfolgreich eignen [26]. Oberflächen mit Verlusten können modelliert werden, indem dem Gitterrand ein Wechselstromnetzwerk, daß aus einem Verbraucher und einer anliegenden Spannung $U = Ed$ (E Feldstärke, d Gitterabstand) in der Zelle zugeordnet wird [29].

Eine verbesserte numerische Stabilisierung des FDTD-Verfahrens kann durch die "Staggered Grid" Methode [24] erreicht werden, wobei elektrische und magnetische Feldkomponenten um einen halben Zeitschritt, sowie auf zueinander versetzten räumlichen Gittern berechnet werden. Zeitlich ist dieses Verfahren ein Leap-Frog Schema bei dem zur Berechnung der Komponenten der nächsten Zeitebene Informationen aus zwei vorhergehenden Zeitebenen notwendig sind. Eine zusätzliche Stabilisierung dieses zum Schwingen und zur Gitterdispersion neigenden Verfahrens wird durch zeitliche Interpolation ermöglicht.

Die Stabilität des FDTD-Verfahrens ist über die Courant-Bedingung (hier freie Ausbreitung, hyperbolische Differentialgleichung) gegeben

$$\Delta t < \frac{1}{c \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}} \quad (91)$$

in Übereinstimmung mit der speziellen Relativitätstheorie, daß c die maximale Wirkungsausbreitungsgeschwindigkeit ist. Hohe Gitterauflösungen $\Delta x, \Delta y, \Delta z \rightarrow 0$ haben damit einen sehr kleinen Zeitschritt Δt zur Folge.

Das FDTD-Diskretisierungsschema wird als Grundlage dienen für die Erstellung des THESIS3D-Codes und wird dort im einzelnen beschrieben zur Lösung der zeitabhängigen Temperaturverteilung in keramischen Materialien. Die Courant-Bedingung der dortigen parabolischen Differentialgleichung unterscheidet sich dabei von (91).

3.1.2 Die Transmission Line Matrix (TLM)-Methode

Diese Methode wurde 1971 von Johns et al. [19] veröffentlicht. Sie wurde in der Absicht entwickelt, die Maxwell'schen Gleichungen formal einem Wechselstromnetzwerk nachzubilden und analoge Beziehungen zwischen formalen Spannungen und Stromstärken aufzustellen und

numerisch zu lösen. Da dieses Verfahren im Gegensatz zur FDTD-Methode auf einer Integralformulierung basiert [20], soll etwas näher darauf eingegangen werden.

Das Leitungsnetzwerk läßt sich elementar aufbauen aus Zellen, die aus Knoten (im Zentrum der Zelle) und Toren (zentriert auf der Berandung einer TLM-Zelle sitzend) besteht [21]. Die

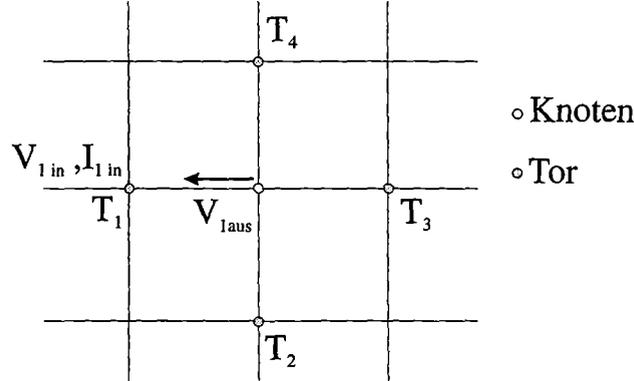


Abbildung 14: Schema einer TLM-Gitterzelle

Leitungsspannungen U und -ströme I an den Knoten n , bzw. um eine Laufzeit τ entferntes Tor G werden als Summen einlaufender und auslaufender (gestreuter) Anteile beschrieben durch

$$U_G(t) = V_{in} + V_{aus} = V_{G\ in}(t) + \sum_j S_G^j V_{j\ in}(t - \tau) \quad (92)$$

$$I_G(t) = I_{in} + I_{aus} = I_{G\ in}(t) - Y \sum_j S_G^j V_{j\ in}(t - \tau) \quad (93)$$

an den Toren sowie

$$U_n(t) = V_{in} + V_{aus} = V_{n\ in}(t - \frac{\tau}{2}) + \sum_j S_n^j V_{j\ in}(t - \frac{\tau}{2}) \quad (94)$$

$$I_n(t) = I_{in} + I_{aus} = I_{n\ in}(t - \frac{\tau}{2}) - Y \sum_j S_n^j V_{j\ in}(t - \frac{\tau}{2}) \quad (95)$$

an den Knoten. Dabei ist Y eine problemspezifische Admittanz und S_i^j eine Streumatrix, deren Wahl konsistenterweise die Maxwellgleichungen erfüllen muß. I_{in} kann aus der Spannung und der Admittanz einfach dargestellt werden als

$$I_{in}(t) = Y V_{in}(t) \quad (96)$$

Dieses durch die Konstruktion in der Zeit schwingungsfähige räumliche Netzwerk muß mit den Maxwellgleichungen in formalen Einklang gebracht werden. Dazu werden die Maxwellgleichungen in der Integralform über das Ampéresche Gesetz

$$\int \vec{H} \cdot d\vec{r} = \iint \vec{j} \cdot d\vec{A} + \frac{\partial}{\partial t} \iiint \vec{D} \cdot d\vec{A} \quad (97)$$

und das Faradayschen Gesetz

$$\int \vec{E} \cdot d\vec{r} = -\frac{\partial}{\partial t} \iint \vec{B} \cdot d\vec{A} \quad (98)$$

diskretisiert. Materialverteilungen können in den Materialgleichungen $\vec{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E}$ und $\vec{B} = \mu_0 \mu_r \vec{H}$ mit spezifisch zu bestimmender Streumatrix modelliert werden. Die dabei entstehenden Differenzgleichungen entsprechen direkt den Ergebnissen aus dem Diskretisierungsschema der FDTD-Methode. Die Feldwerte in einer Zelle werden dann gemäß Abb.14 in ein TLM-Schema mit Spannungen und Stromstärken (92),(93),(94), (95) übersetzt. Für beliebige Material- und Geometrieordnungen gilt primär die Problematik, die entsprechende Streumatrix aufzustellen. Eine für die freie Wellenausbreitung geltende Streumatrix kann beispielsweise hergeleitet werden zu

$$S_n^j = \frac{1}{2} - \delta_n^j \quad (99)$$

mit Zeitschritt τ , Knotenabstand d und Netzwerkadmittanz Y

$$\tau = d \sqrt{\frac{\epsilon_0 \mu_0}{2}} \quad Y = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{2\mu_0}} \quad (100)$$

Wir ersehen aus dieser kurzen Darstellung der integralen TLM-Methode die tiefe Verwandtschaft zur differentiellen FDTD-Methode. Die Diskretisierungsnotwendigkeiten beider Methoden bestimmen sich, was Speicher- und Rechenaufwand darstellen, in ähnlicher Weise.

3.1.3 Die Finite-Integrationsmethode (FIT)

Das kommerzielle Softwareprodukt MAFIA benutzt in seiner Grundlage die Methode der finiten Integrationstechnik. Die Diskretisierung erfolgt in ähnlicher Weise, wie bei der TLM-Methode über die integralen Maxwellgleichungen (97) und (98) [22]. Bei der Modellierung von Randbedingungen ergeben sich letztlich für bestimmte Anwendungen Vorteile, in den Rechenzeit-, Speicher- und Stabilitätsanforderungen (91) sind die Gegebenheiten der FIT-Methode mit der FDTD-Methode praktisch identisch.

3.1.4 Die Finite-Elemente-Methode (FEM)

Die Finite-Elemente-Methode erhält diskrete Gleichungen, indem nicht die Differentialoperatoren, sondern die Approximationsfunktionen in räumliche Abschnitte unterteilt werden. Die Vorteile der FE-Methoden liegen zum einen für die Anwendung in der Möglichkeit, unregelmäßige komplexe Geometrien behandeln zu können, zum anderen in der Eigenschaft, Randwertprobleme (Dirichlet- und Neumannprobleme) automatisch zu erfüllen, sowie eine hohe Genauigkeit durch Anwendung polynomialer Approximationsfunktionen höherer Ordnung

zu erreichen. Nachteilig sind der implizite Charakter der FEM-Gleichungen, was zu einem hohen Rechenaufwand auf einem Knoten führen kann. Dieses ist im allgemeinen bei komplizierten Geometrien der Fall. Als sehr effektiv erweist sich die FE-Methode für elektrostatische Potentialprobleme (Lösung der Poissongleichung). Allgemein gehen FEM-Methoden von dem Prinzip der Fehlerminimierung integraler Erhaltungsgrößen auf Gebieten aus, in denen die physikalischen Größen über Polynomfunktionen approximiert werden. Für die eindimensionale Poissongleichung beispielweise bedeutet dies, das Integral der statischen Energiedichte

$$I = \int_0^L \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)^2 + \rho \Phi \right] dx \quad (101)$$

über ein Minimierungsverfahren zu behandeln. Der einfachste Fall einer Finite-Elemente-Approximation für ρ wäre ein stückweises lineares Polynom. Durch Vorgabe der Randbedingungen und Einteilung in Elemente läßt sich ein konsistentes lineares Gleichungssystem aufstellen, aus dessen Invertierung dann die Lösung des Problems gewonnen werden kann. Zur Lösung der Helmholtzgleichung kann die FE-Methode in dieser Form nicht angewandt werden. Eine Diskretisierung der Helmholtzgleichung über Approximationsfunktionen führt auf die Randwertmethode, deren Ausführung sich um einiges komplizierter gestaltet.

3.1.5 Fortgeschrittene Teilchen- und Geometrie Probleme

Zur Behandlung von elektromagnetischen Teilchenproblemen bedarf es einer dynamischen Kombination von Feld- und Teilchenlösern. Hierbei können die zuvor skizzierten Feldmethoden herangezogen werden.

Für die Teilchendynamik ist beispielsweise die PIC-Methode (Particle in Cell) [29] zur Untersuchung selbstkonsistenter Teilchen-Wellen-Wechselwirkungen anzuführen. Makroteilchen, die als Komponententeilchen eine bestimmte Anzahl wechselwirkender Teilchen repräsentieren, werden zu jedem Zeitschritt auf jeder Zelle in Stromdichten umgerechnet. Damit können die Eigenfelder berechnet werden, und mit den sich ausbreitenden Wellen kombiniert werden. Die resultierenden Felder gehen in die Bewegungsgleichungen der Makroteilchen ein, wobei der Zyklus für den nächsten Zeitschritt beginnt.

Eine weitere Möglichkeit besteht in der Verwendung von hydrodynamischen Codes, wobei Teilchen kollektiv durch Stromdichten plasmaphysikalisch über die Vlasov-Gleichung, die Maxwell'schen Gleichungen und die Navier-Stokes-Gleichung in ihrem Fluß und ihren Feldwechselwirkungen determiniert sind.

Zur Modellierung komplizierter Geometrien wurde das Verfahren der "Randangepaßten Koordinaten" entwickelt [27], [28]. Ein Berechnungsgitter wird hier erzeugt aus der Vorgabe einer Berandungskurve. Dabei verzerrt sich dieses physikalische Gitter. Dieses wird über lineare Transformationen in ein orthogonales logisches Gitter abgebildet, wo die Feldberechnung

stattfindet. Die Feldkomponenten müssen danach wieder in das physikalische Berechnungsgitter der komplizierten Geometrie transformiert werden.

In der Summe der numerischen Notwendigkeiten kann der Rechenaufwand für solche allgemeinen Problemstellungen auch auf heutigen Rechnern als äußerst hoch angesehen werden.

3.1.6 Methode der konformen Abbildung

Dieses ist ein analytisches Verfahren zur Feldberechnung, dessen Anwendungsbereich allerdings Einschränkungen wie Ladungs- und Wirbelfreiheit unterworfen ist. Damit ist es lediglich für statische Feldprobleme bzw. Potentialprobleme in zwei Dimensionen anwendbar. In der komplexen Ebene läßt sich ein komplexes Potential $w(z) = u(x, y) + iv(x, y)$ definieren, $z = x + iy$. Ist dieses Potential analytisch, d.h. $\frac{\partial w}{\partial \bar{z}} = 0$, so gelten auf der ganzen Ebene die Cauchy-Riemannschen Differentialgleichungen. Dieses ist gleichwertig der Laplacegleichung

$$\Delta w = 0 \quad . \quad (102)$$

Die Scharen $u = const.$ und $v = const.$ bilden ein orthogonales Gitter. Diese entsprechen den Äquipotentiallinien und Feldlinien. Über eine Abbildungsfunktion $w(z)$ läßt sich ein Gebiet der w -Ebene, definiert über $u(x,y)$, $v(x,y)$ in die komplexe z -Ebene abbilden. Die Abbildung ist lokal winkelerhaltend, d.h. das Gitter aus Feld- und Äquipotentiallinien ist weiter orthogonal, aber verzerrt. Für die damit vorliegende komplizierte Geometrie lassen sich dann das Potential und die Feldstärkewerte aus der Abbildungsfunktion berechnen.

In der allgemeinen Praxis ist der große Nachteil dieser Methode, daß die Kenntnis der Abbildungsfunktion aus Tabellen gewonnen werden muß und zur vorliegenden Problematik zu passen hat [32].

3.1.7 Methode der Greenschen Funktion

Der Greensche Formalismus ist nur zur Lösung linearer Differentialgleichungen anwendbar. Durch Auffinden der Greenschen Funktion ist prinzipiell unter Berücksichtigung der Randbedingungen die exakte, vollständige Lösung durch Quadratur darstellbar. Die Berechnung der Integrale kann allerdings dann das rechentechnisch entscheidende Problem werden. Das im folgenden Kapitel skizzierte Randwertverfahren macht von diesen Techniken Gebrauch. Gesucht ist eine Lösung des inhomogenen Problems

$$Lf(\vec{x}) = \rho(\vec{x}) \quad , \quad (103)$$

mit L einem beliebigen linearen Differentialoperator und $\rho(\vec{x})$ einer beliebigen Quellfunktion. Für die Greensche Funktion $G(\vec{x}, \vec{x}')$ stellt sich das Problem

$$LG(\vec{x}, \vec{x}') = \delta(\vec{x} - \vec{x}') \quad . \quad (104)$$

Die Freiraumlösung für $f(\vec{x})$ läßt sich dann darstellen mit der Greenschen Funktion durch das Integral

$$f(\vec{x}) = \iiint G(\vec{x}, \vec{x}') \rho(\vec{x}') d\vec{x}' \quad . \quad (105)$$

Dies ist unmittelbar zu sehen durch Anwendung des Operator L und der Definition in (104)

$$Lf(\vec{x}) = L \iiint G(\vec{x}, \vec{x}') \rho(\vec{x}') d\vec{x}' = \iiint \delta(\vec{x} - \vec{x}') \rho(\vec{x}') d\vec{x}' = \rho(\vec{x}) \quad . \quad (106)$$

Randbedingungen gehen ein je nach Differentialgleichungstyp als Dirichlet- (Vorgabe von $f(\vec{x}_s)$), Neumannbedingungen (Vorgabe der Normalenableitung $\frac{\partial}{\partial \vec{n}} f(\vec{x}_s)$) oder auch durch die Notwendigkeit, beides vorzugeben (Cauchy-Randbedingungen). Die vollständige analytische Lösungsdarstellung gibt die Magische Regel [8].

3.1.8 Das Momentenverfahren/Randwertmethode

Das Momentenverfahren ist ein semianalytisches Näherungsverfahren, das sich insbesondere für hohe Frequenzen eignet. Es geht unmittelbar in der allgemeinen Theorie der Greenschen Funktionen aus der Magischen Regel hervor. Im Ansatz sucht das Verfahren stationäre Lösungen von (6),(7) unter der Voraussetzung zeitharmonisch fluktuierender Felder, Stromdichten und Ladungsdichten - eignet sich also für Applikatorberechnungen. Allerdings ist der zu erwartende Rechenaufwand bei der vorliegenden Problemdimensionierung für die Berechnung der Systemmatrix, bei der jedes einzelne Element durch Integration nur zu erhalten ist als sehr speicher- und rechenintensiv einzuschätzen. Zudem ist das Verfahren nur geometriespezifisch einsetzbar: ein allgemeines Programmschema, das eine Vielzahl unterschiedlicher Geometrien verarbeiten kann, ist durch das sehr unterschiedliche Verhalten der Integranden (die bei hohen Frequenzen ein starkes individuelles Schwingungsverhalten zeigen und daher jeweils sehr fein abgetastet werden müssen) schwer zu realisieren, zudem muß die geometrieabhängige Greensche Funktion in ausreichender Genauigkeit für das Problem bekannt sein. Im folgenden sei die skalare Funktionsweise des Verfahren in zwei Dimensionen kurz erklärt. Analog (104) suchen wir in der Ebene die Lösung der Greenschen Funktion für $L = (\Delta + k^2)$. $u(\vec{x})$ sei die gesuchte skalare Lösung unseres Problems

$$\Delta u(\vec{x}) + k^2 u(\vec{x}) = 0 \quad . \quad (107)$$

Der Rand Γ bestimmt mit einer einspeisenden Quelle die Lösung im Inneren \vec{x} der berandeten Geometrie (Applikator). Mit dem Greenschen Theorem sind im zweidimensionalen Rand und inneres Gebiet miteinander verknüpft durch

$$Cu(\vec{x}) = \oint_{\Gamma} u(\vec{x}') \frac{\partial G(\vec{x}, \vec{x}')}{\partial n} - G(\vec{x}, \vec{x}') \frac{\partial u(\vec{x}')}{\partial n} d\vec{x}' \quad . \quad (108)$$

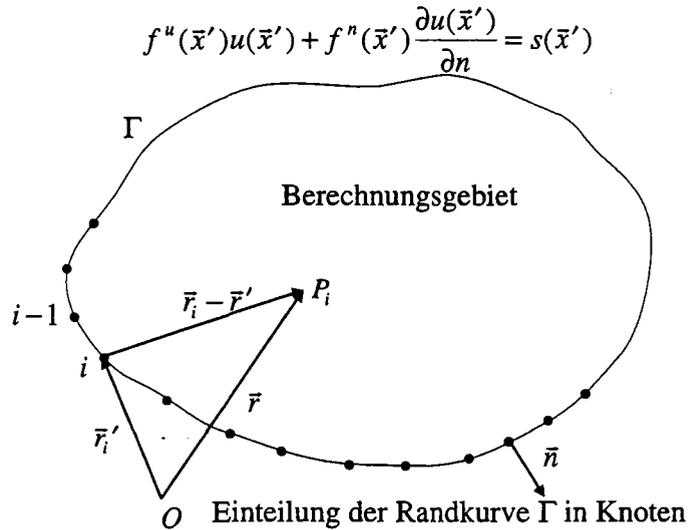


Abbildung 15: Feldberechnung im Punkt P mit der Randwertmethode

C ist auf dem Rand $\frac{1}{2}$ und im Inneren identisch 1. Zur Diskretisierung wird hier die gesuchte Funktion $u(\bar{x}')$ durch geeignete Approximationsfunktionen beispielsweise linear approximiert. Die Funktionswerte liegen dann auf dem entsprechen Knoten (Stützstellen) fest. Zuerst müssen die korrekten Randfelder auf Γ bzw. deren Ableitungen aus dem Einkopplungsfeld und der zu untersuchenden Applikatormode und ihrer Greenschen Funktion mit (108) berechnet werden. Dabei ergibt sich ein lineares Gleichungssystem mit K (Anzahl der Knoten) Gleichungen. Durch Lösen dieses Systems erhält man die passenden, korrekten Randbedingungen (Randströme, Feldverteilungen) auf den Knoten. Damit kann (108) zur Berechnung der Feldverteilung im inneren der berandeten Geometrie und zur Lösung des Gesamtproblems benutzt werden.

Im dreidimensionalen Fall erhöht sich der schon hier sehr beachtliche Rechenaufwand durch die Vergrößerung der Matrizen und den Genauigkeitsanforderungen der Integrale in signifikanter Weise.

3.1.9 Speicher- und Rechenzeitproblematik diskreter Gittermethoden

Nach der Methode von Yee wurde zu Beginn der Dissertation ein eigener FDTD-Code (DELFI-Code, Distribution of ELeCtromagnetic FieLds) erstellt und angewendet, sowie Rechnungen mit dem T3-Modul des kommerziellen MAFIA-Programms vorgenommen. Für die vorliegenden Anforderungen an Größe des Applikators, Art der Einkopplung und hoher Frequenz der Millimeterwellen zeigte sich eine Überdimensionierung der Speicher- und Rechenzeitnotwendigkeiten. Abb. 16 verdeutlicht diese Problematik bildhaft. Die oben dargestellte Applika-

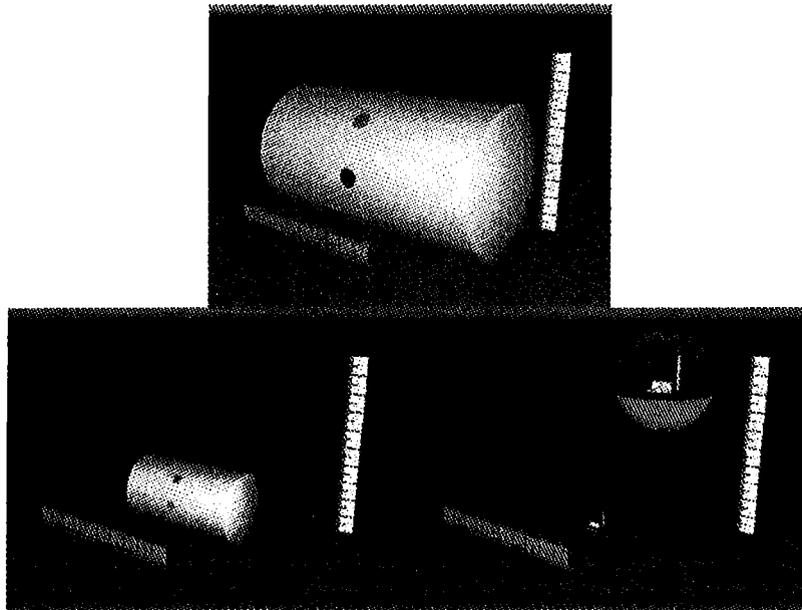


Abbildung 16: FDTD-Applikatorgröße und Speicheranforderungen

torgeometrie dient zur Untersuchung materialprozeßtechnischer Aspekte mit Mikrowellen am Institut für Plasmaforschung (IPF) der Universität Stuttgart. Es handelt sich um einen zylindrischen Applikator der Länge ≈ 1.6 m und einem Radius von ≈ 0.8 m. Es sind 1 m Maßstäbe in der Graphik dargestellt. Für eine Millimeterwellenquelle bei 30 GHz stellt sich für ein Berechnungsgitter eine konvergente Auflösung von $\frac{\lambda}{10} \approx 1$ mm. Die Einkopplungen sind in aller Regel unsymmetrisch, so daß diesbezügliche Annahmen zur Speicherreduktion unrealistische Vereinfachungen im allgemeinen darstellen. Die Gitterdimensionen, wie sie in MAFIA Rechnungen [22],[31] hierfür erforderlich wären, enthalten $800 \times 800 \times 1600 \approx 1024$ Millionen Gitterzellen. Eine numerische Genauigkeit mit Double Precision Variablen (8 Bytes) und 3 Komponenten für das \vec{E} Feld erfordern damit 24 Giga Byte RAM für jeden Rechenschritt. Um eine Reduktion der Speicheranforderungen zu erreichen, wurden Untersuchungen mit herunterskalierten Applikatoren unternommen. Unten links in Abb.16 ist die Vergleichsgröße eines Applikators ersichtlich, der mit MAFIA auf einer gut ausgestatteten Workstation mit 130 MB Speicher bei einer Frequenz von 2.45 GHz gerechnet wurde. Er stellt etwa $\frac{1}{4}$ des Originalvolumens dar. Verschiedene Folgerechnungen bis 60000 Zeitschritte wurden mit MAFIA bei einer angenommenen Dipoleinkopplung vorgenommen. Ein zeitaufgelöstes Pick-Up-Signal, das im Schwerpunkt des Applikators verfolgt wurde, zeigte allerdings keinen eingeschwungenen Zustand bis dahin auf. Da etwa ein Zeitraum von 1-2 Tage für einen solchen Lauf erforderlich ist, wurde diese Methode als ineffizient für weitere Untersuchungen befunden. Ähnliche Anforderungen zeigte der zuvor angesprochene entwickelte dreidimensionale DELFI-Code.

Im Abb.16 (unten rechts) ist bei gleichem Speicheraufwand (130 MB) die reale Vergleichsgröße des zugehörigen Simulationsapplikators für 30 GHz Einstrahlung dargestellt (mit Dezimeter-Maßstäben). Es ist unmittelbar erkennbar, daß von dieser Größe aus keine physikalischen Rückschlüsse auf die reale Feldverteilung gewonnen werden können.

Die folgenden Kapitel wenden sich nun der analytischen Ausarbeitung eines allgemeinen optischen Verfahrens zu, mit dessen Hilfe unter großer Rechenzeit- und Speicherersparnis Applikatoruntersuchungen bei sehr hohen Frequenzen und komplizierten Geometrien durchgeführt werden konnten.

3.2 Kovarianter Formalismus optischer Feldberechnungen

3.2.1 Kovariante wellenoptische Bestimmungsgleichungen

In Kapitel 2 zeigte sich, daß die vektorielle Helmholtzgleichung als Folgerung der Maxwellgleichungen die grundlegende Bestimmungsgleichung für die stationäre Wellenausbreitung ist. Aus ihrer skalaren Form wurde der Übergang zur geometrischen Strahlenoptik nach Sommerfeld et al. dargestellt. Der damit verbundene Begriffsübergang aus einer Felddarstellung in eine Strahlendarstellung kann allerdings nur näherungsweise vollzogen werden und hat a priori für unsere Problematik, Vektorfelder in abgeschlossenen Geometrien zu bestimmen, einige wesentliche Kritikpunkte. Dieses stellt sich insbesondere an die Randwertproblematik, die geometrisch optisch nur für ebene Wellen (Fresnelsche Gleichungen) berechnet worden ist. Wie sich im folgenden zeigt, ist der Strahlbegriff der geometrischen Optik eine immanente physikalische Eigenschaft der Helmholtzgleichung und in ihrer mathematischen Formulierung äquivalent zur ursprünglichen lokalen Feldform. Unser Ziel ist es zunächst darzulegen, allgemeine Bestimmungsgleichungen im Begriffssystem der Optik zu finden.

Um den vektoriellen Abhängigkeiten zu genügen, beschreiben wir die Helmholtzgleichung (24)

$$\Delta \vec{A}(\vec{x}) + k^2(\vec{x})\vec{A}(\vec{x}) = 0 \quad (109)$$

koordinatenunabhängig. Hierzu verwenden wir den Tensorbegriff in drei Dimensionen.

Wir führen die kovarianten Ableitungen

$$T^a_{;n} = T^a_{,n} + \Gamma^a_{nm} T^m \quad (110)$$

$$T_{a;n} = T_{a,n} - \Gamma^m_{an} T_m \quad (111)$$

$$\Gamma^\mu_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} g^{\mu\nu} (g_{\alpha\nu,\beta} + g_{\beta\nu,\alpha} - g_{\alpha\beta,\nu}) \quad (112)$$

ein. Die $\Gamma^\mu_{\alpha\beta}$ sind Christoffelsymbole erster Ordnung und sind explizit über die Metrik des jeweilig vorliegenden dreidimensionalen Raumes bestimmt, die durch den metrischen Tensor $g_{\mu\nu}$ festgelegt ist. Wir werden nun diese fundamentalen Größen aus (24) ableiten. Der damit

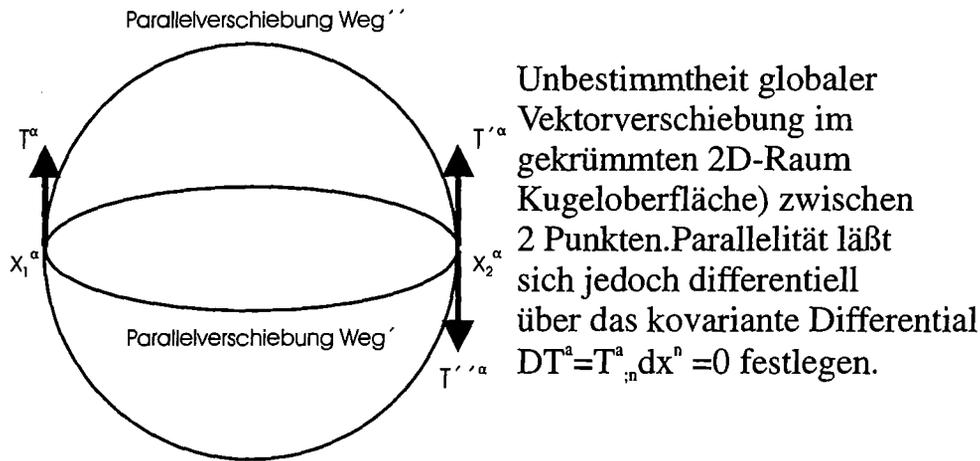


Abbildung 17: Zum kovarianten Differential

erreichte Nutzen einer tensoriellen, koordinatenunabhängigen Beschreibungsweise liegt in einer vollständigen Geometrisierung der lokalen vektoriellen Feldgesetzmäßigkeiten.

T^a sei jetzt ein beliebiger 3 dimensionaler Vektor, mit $'$ wird die kovariante Ableitung bezeichnet, mit $'$ die gewöhnliche partielle Ableitung nach einer Variablen. Die hier bestehende Bedarf, in einem Riemannschen Raum zu arbeiten, erfordert die neue Definition einer (kovarianten) Ableitung, bzw. Parallelverschiebung von Vektoren. Mittels der kovarianten Ableitung ist letztlich der Paralleltransport eines Vektors (z.B. des elektrischen Feldes) von einem Punkt x_1^α zum Punkt x_2^α längs einer Geodäten eindeutig bestimmt [45]. Die Geodäten werden wir später über den Strahlbegriff identifizieren können.

Wir formulieren damit die Helmholtzgleichung kovariant

$$A^{\mu;\nu} + k^2 A^\mu = 0 \quad . \quad (113)$$

Die kovariante Darstellung A^μ entspricht dem physikalischen Vektorpotential $\vec{A}(\vec{x})$. Der kovariante Vektor A_μ folgt dem Zusammenhang $A_\mu = g_{\mu\nu} A^\nu$. Zunächst beschränken wir uns auf permeable, verlustarme ($\sigma \rightarrow 0$) dielektrische Materialien, d.h. $k^2 = \epsilon_r k_0^2$. Das Vektorpotential A^μ wird nun über eine räumliche Transformation in rein optischen Größen ausgedrückt werden. Wir stellen an das stationäre Wellenfeld des Vektorpotentials die Forderung, daß es in jedem Raumpunkt über das Superpositionsprinzip darstellbar ist in einem resultierenden Amplitudenanteil $a^\mu(x^\alpha)$ und einer kohärenten Phase $S(x^\alpha)$:

$$A^\mu(x^\alpha) = a^\mu(x^\alpha) e^{ik_0 S(x^\alpha)} \quad . \quad (114)$$

Wir werden später $S(x^\alpha)$ mit dem Sommerfeldschen Eikonale identifizieren können. An dieser Stelle sei bemerkt, daß der folgende Übergang *nicht* in einem Grenzübergang $k_0 \rightarrow 0$ (82)

stattfindet oder höhere Terme vernachlässigt. Einsetzen in (113) und Koeffizientenvergleich liefert uns direkt (siehe hierzu auch (175))

$$\mathbf{S}'^{\nu}(\mathbf{x}^{\alpha})\mathbf{S}_{;\nu}(\mathbf{x}^{\alpha}) = \epsilon_r(\mathbf{x}^{\alpha}) \quad (115)$$

$$[\mathbf{a}^{\mu}(\mathbf{x}^{\alpha})]_{;\nu} = 0 \quad (116)$$

$$[\mathbf{a}^{\mu}(\mathbf{x}^{\alpha})\mathbf{S}(\mathbf{x}^{\alpha})]_{;\nu} = 0 \quad (117)$$

Aus der Lösung dieser kovarianten Bestimmungsgleichungen in den optischen Begriffen Amplitude und Phase erhalten wir sofort das resultierende Vektorpotential. Gleichung (115), die eine Differentialgleichung erster Ordnung der *skalaren* Phase ist, kann einfach überführt werden in das Ergebnis nach dem Ansatz von Sommerfeld. Dieses ist zu erwarten, da die geometrische Optik eine Lösung der *skalaren* Helmholtzgleichung ist. Dieser Skalar bleibt unter Koordinatentransformationen invariant. Gl. (117) bestimmt die Kopplung der Amplituden- und Phasenfunktionen des Wellenfeldes über a^{μ} , dessen Funktionenklasse aus der Bedingung (116) gegeben ist. Wir wollen an dieser Stelle an die Laplaceschen Differentialgleichungen erinnern ($\Delta L(x, y) = 0$, L ist eine harmonische Funktion) und zusätzlich bemerken, daß die vorliegenden kovarianten Ableitungen 2.Ordnung die krummlinige Verallgemeinerungen des Delta-Operators in drei Dimensionen darstellen. Wir werden im nächsten Kapitel sehen, daß damit verbundene Assoziationen zu konformen Abbildungen naheliegend sind.

3.2.2 Lösung des Eikonals $S(x^{\alpha})$

Zunächst wollen wir die kovariante Eikonalgleichung (115) über die Tensoren 1. Stufe

$$S'^{\mu} = \sqrt{\epsilon_r} t^{\mu} \quad S_{;\mu} = \sqrt{\epsilon_r} t_{\mu} \quad (118)$$

faktorisieren. Der Vektor t^{μ} hat dabei die Eigenschaft, Einheitsvektor ($t_{\mu} t^{\mu} = 1$) zu sein, wie aus seiner Definition

$$t^{\mu} = \frac{S'^{\mu}}{\sqrt{S'^{\nu} S'_{\nu}}} \quad (119)$$

und (115) ersichtlich ist. Das Eikonal $S(\vec{x})$ ist ein Skalarfeld. Damit ist es invariant unter beliebigen Koordinatentransformationen. Daraus folgern wir direkt $S_{;\mu} = S_{,\mu}$. Betrachten wir nun die verallgemeinerte Rotation des Vektors $T_{\mu} := S_{;\mu}$,

$$T_{\mu;\nu} - T_{\nu;\mu} = S_{;\mu;\nu} - S_{;\nu;\mu} = 0 \quad (120)$$

die wegen dieser Eigenschaft verschwindet. Damit können wir das dreidimensionale Integral

$$\iint S_{;\mu;\nu} - S_{;\nu;\mu} dV^{\mu\nu} = \oint S_{;\mu} dx^{\mu} = \oint \sqrt{\epsilon_r} t_{\mu} dx^{\mu} = 0 \quad (121)$$

in ein Linienintegral umwandeln. Wir definieren jetzt das Bogendifferential

$$ds = t_\mu dx^\mu \quad . \quad (122)$$

Bilden wir das Integral I zwischen zwei festgelegten Punkten x_1^α, x_2^α entlang eines zunächst beliebigen Weges, so erhalten wir

$$I = \int_{x_1^\alpha}^{x_2^\alpha} S_{;\mu} dx^\mu = \int_{x_1^\alpha}^{x_2^\alpha} \sqrt{\epsilon_r} ds = \int_{x_1^\alpha}^{x_2^\alpha} \sqrt{G_{mn} \dot{x}^m \dot{x}^n} dt \quad . \quad (123)$$

Diese Parametrisierung in t und die Definition des Betragsquadrats hat $ds'^2 = dx_n dx^n = G_{mn} dx^m dx^n$ zur Folge. Damit definieren wir die Parameterfunktion $L(t)$

$$L(t) = \frac{ds'(t)}{dt} \quad . \quad (124)$$

Wir fordern a priori für den Parameter t , die physikalischen Gegebenheiten durch ein Extremalprinzip korrekt zu beschreiben. Damit wählen wir aus allen denkbaren Wegen zwischen x_1^α und x_2^α einen ausgezeichneten Weg aus. Wir wenden das allgemeine Fermatsche Prinzip für das Integral (123) an unter der Benutzung der Euler-Lagrangeschen Differentialgleichungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^\alpha} - \frac{\partial L}{\partial x^\alpha} = 0 \quad . \quad (125)$$

Nach Einsetzen und Umformen erhalten wir als Ergebnis die Definition der Christoffelsymbole aus der Metrik G_{mn} , sowie eine Differentialgleichung (Anfangswertproblem) für die Phasenpropagation

$$\frac{d^2 x^\nu}{ds^2} + \Gamma_{\alpha\beta}^\nu \frac{dx^\alpha}{ds} \frac{dx^\beta}{ds} = 0 \quad (126)$$

$$\Gamma_{\alpha\beta}^\mu = \frac{1}{2} G^{\mu\nu} (G_{\alpha\nu,\beta} + G_{\beta\nu,\alpha} - G_{\alpha\beta,\nu}) \quad . \quad (127)$$

Gl.(126) ist eine Geodäten-Gleichung. Der optische Strahlbegriff erschließt sich aus der Lösung von (126) für jede Geodäte durch Vorgabe eines Startpunktes des Strahls und der Strahlrichtung. Als fundamentale Ausgangsgröße erhalten wir die Raummetrik $G_{\mu\nu}$ in (126), (127) mit (123) in dem elementaren Zusammenhang

$$G_{\mu\nu}(x^\alpha) = \epsilon_r(x^\alpha) \delta_{\mu\nu} \quad . \quad (128)$$

Die dreidimensionale Raummetrik (128) ist also vollständig durch die Verteilung dielektrischer Materie festgelegt.

Eine sehr wichtige Eigenschaft der Materiemetrik ist, daß $G_{\mu\nu}$ eine diagonale Matrix darstellt, d.h. der Raum ist in jedem Punkt durch ein orthogonales Koordinatensystem darstellbar.

Eine beliebige Koordinatentransformation ist damit lokal winkelerhaltend. In der Tat ist eine metrische Transformation vom Typ

$$G_{\mu\nu}^* = \eta(u_1, u_2, u_3) G_{\mu\nu} \quad (\eta > 0) \quad (129)$$

eine Verallgemeinerung konformer Abbildungen in Riemannschen Räumen. Im Fall der stationären Wellenausbreitung stellt sie die konforme Abbildung eines dreidimensionalen Raumes R auf den Raum R^* dar. Wir zeigen nun die lokale Winkeltreue obiger Transformation unabhängig orthogonaler Koordinatensysteme. Dazu betrachten wir 2 infinitesimale Vektoren $d^1 u^\alpha, d^2 u^\alpha$ am Ort u^α . Wir bilden die Verallgemeinerung des Skalarprodukts

$$d^1 u^\alpha d^2 u_\alpha = |d^1 u^\alpha| |d^2 u_\alpha| \cos(\psi) \quad (130)$$

um den Winkel zwischen beiden Vektoren bestimmen zu können. Mit (129) kürzt sich die metrische Funktion $\eta(u_1, u_2, u_3)$ als Proportionalitätsfaktor unmittelbar weg,

$$\cos(\psi) = \frac{G_{\alpha\beta}^* d^1 u^\alpha d^2 u^\beta}{\sqrt{G_{\gamma\delta}^* d^1 u^\gamma d^1 u^\delta} \sqrt{G_{\sigma\rho}^* d^2 u^\sigma d^2 u^\rho}} \quad (131)$$

so daß der Quotient und damit der Winkel ψ durch die metrische Transformation ungeändert bleiben. Damit können wir allgemein die Transformationsvorschrift (129) als winkelerhaltend, aber nicht längenerhaltend charakterisieren. Inhomogene Dielektrika wirken damit verzerrend auf einfallende elektromagnetische Wellen. Das Phasengitter, aufgespannt durch die Gesamtheit der Geodäten, bleibt lokal unter dem selben Winkel.

Im Falle von Koordinatenlinien der i, j Richtung (Strahlen) der Materiemetrik gilt für den Winkel γ zwischen diesen die Beziehung

$$\cos \gamma = \frac{G_{ij}}{G_{ii} G_{jj}} \quad \text{nicht summieren, } i \neq j \quad (132)$$

Durch die gefundene Eigenschaft der Existenz diagonalen metrischer Tensoren ist $G_{ij} \sim \delta_{ij}$ und damit folgt $\gamma = \frac{\pi}{2}$. Für die Phasenfronten gilt damit lokal immer, daß sie in jedem Koordinatensystem senkrecht zur Ausbreitungsrichtung des Strahls (Geodäten) stehen.

Wir wollen zuletzt noch zeigen, daß der Vektor t^μ , eingeführt in Gleichung (118), Tangenteneinheitsvektor in jedem Punkt der Geodäte (126) ist. Der Einheitstangentenvektor einer Geodäten ergibt sich allgemein nach $t^\mu = \frac{dx^\mu}{ds}$. Die Relation $t_\alpha t^\alpha = 1$ (zunächst Behauptung) gilt, wenn t^μ tatsächlich diesen Tangenteneinheitsvektor bildet. Wir bilden nun das Skalarprodukt

$$t_\alpha t^\alpha = t_\alpha \frac{dx^\alpha}{ds} = \frac{ds}{ds} = 1 \quad \text{q. e. d.} \quad (133)$$

unter der Benutzung der Beziehung (122).

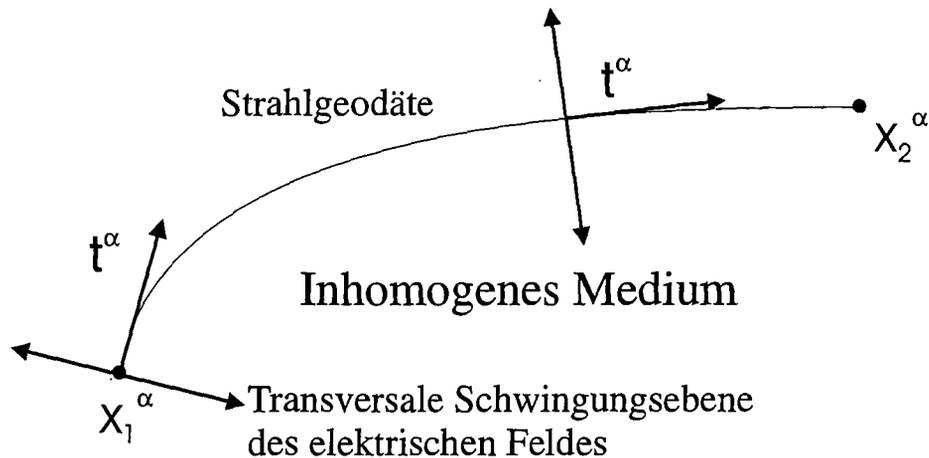


Abbildung 18: Transversaler Feldtransport längs einer Strahlgeodäten

3.2.3 Das lokal sphärische Koordinatensystem

Die Diskussion der Phasengleichung (115) führte in der optischen, geometrisierten Tensordarstellung direkt auf Strahlen (Geodäten), entlang derer ein Phasentransport in einem nicht-euklidischen, von der inhomogenen Verteilung der dielektrischen Materie abhängigen Raum stattfindet. Die Phasenfronten bleiben dabei immer lokal orthogonal zur Strahlausbreitungsrichtung. Bevor wir uns den Amplitudengleichungen (116), (117) zuwenden, sollen folgende Überlegungen auf weitere Eigenschaften der Wellenausbreitung im optischen Bild für das angewandte Raytracing-Verfahren hinarbeiten. Betrachten wir einen beliebigen Punkt in einem isotropen, aber inhomogenen Raum. Dieser Punkt könnte Ausgangspunkt für eine periodische elektromagnetische Feldanregung sein, z.B. eine Punktquelle oder eine ausbreitungsfähige Feldstörung. Wir können von diesem Punkt in den ganzen Raumwinkel 4π gekrümmte Strahlen (Geodäten) abschießen. Dieses ergibt uns unmittelbar ein, im allgemeinen verzerrtes, aber lokal orthogonales Phasengitter, das als ein den Raum aufspannendes Koordinatensystem dient. Jede Koordinatentransformation der Metrik $G_{\mu\nu}$ ist nun aber lokal winkel-, aber nicht längenerhaltend. Wir können daher immer ein lokal sphärisches Koordinatensystem postulieren, daß sich dadurch auszeichnet, den dielektrischen Raum zu entzerren und kugelsymmetrisch aufzuspannen. In gleicher Weise gilt der Umkehrschluß, bei Kenntnis der Feldverteilung einer Punktquelle ohne Materie diese nach einer Transformation in den deformierten Raum direkt berechnen zu können. Mathematisch können wir dies über das Transformationsverhalten von Tensoren 1. Stufe formulieren. Ist eine Koordinatentransformation über den Transformationstensor B^μ_ν bekannt, so erhalten wir die Feldvektoren aus der Vorschrift

$$A'^\mu = B^\mu_\nu A^\nu \quad (134)$$

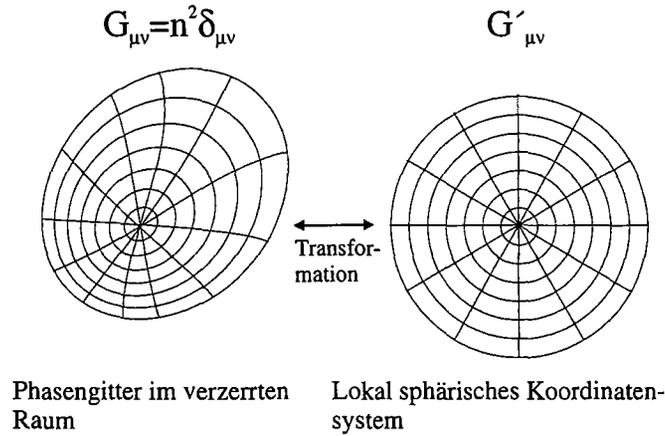


Abbildung 19: Lokale 2D-Transformation in ein sphärisches System

mit $B_{\nu}^{\mu} = \frac{\partial x'^{\mu}}{\partial x^{\nu}}$. Eine solche Transformation ist stets umkehrbar (siehe Anhang 8.5, diskutiert für Flächen).

Wir können also die Geodätenschar im lokal sphärischen System

$$x^{\alpha}(s, p, q) \quad (135)$$

durch den Bogenparameter s und die Scharparameter p, q charakterisieren, deren Angabe (s, p, q) mit gewöhnlichen Kugelkoordinaten zusammenfallen. Die Scharparameter (p, q) spannen dabei die sphärisch gekrümmte Fläche der Wellenfront ($S(\vec{x}) = \text{const.}$) für ein bestimmtes s auf.

3.2.4 Die Amplitudengleichungen

Die geometrisierten, elektromagnetischen Gegebenheiten vereinfachen sich im lokal sphärischen Koordinatensystem sehr. Für den Amplitudenvektor ist die vektorielle Differentialgleichung (117) zu lösen:

$$[a^{\mu}]_{;\nu}^{\nu} = 0 \quad . \quad (136)$$

Wir untersuchen in einem Punkt rotationssymmetrische (Isotropie als Voraussetzung) transversale Felder, d.h. $a^1 = 0$. In Kugelkoordinaten (s, p, q) erhalten wir damit sofort für die transversale Komponente a^T , ($T = 2, 3$)

$$\frac{1}{s^2} \frac{\partial}{\partial s} \left(s^2 \frac{\partial}{\partial s} a^T \right) + \frac{1}{s^2 \sin q} \frac{\partial}{\partial q} \left(\sin q \frac{\partial}{\partial q} a^T \right) = 0 \quad . \quad (137)$$

Die allgemeine Lösung dieser Gleichung erhalten wir zu

$$a^T(s, q) = \sum_{j=0}^{\infty} \left(c_j^T s^j + \frac{a_j^T}{s^{j+1}} \right) P_j(\cos q) \quad , \quad (138)$$

a und c sind Konstanten. Aus der Forderung, daß für $s \rightarrow \infty$ die Komponente von $a^T(s, q) \rightarrow 0$ beschränkt bleibt, erhalten wir die Bedingung $c_j = 0, j \geq 0$. Wir wählen vorerst den einfachsten Fall $j = 0$. Damit ergibt sich der funktionale Zusammenhang

$$a^T(s) = \frac{a^T}{s} \quad (139)$$

Die Phasenlösung im lokal sphärischen System ist trivial, die radialen Geodäten fallen ja nach unserer Definition mit den Koordinaten zusammen. Dieses ist aus der Geodätengleichung ($\frac{dx^2}{ds} = \frac{dx^3}{ds} = 0$) nach Ausschreiben der Summen

$$\frac{d^2 x^1}{ds^2} + \Gamma_{11}^1 \frac{dx^1}{ds} \frac{dx^1}{ds} = 0 \quad (140)$$

sofort ersichtlich ($\Gamma_{11}^1 = 0$, siehe Anhang 8.1), so daß das Eikonale sich zu $S(s) \sim s$ ergibt.

Wir prüfen nun noch nach, daß (139) des lokal sphärischen Koordinatensystems auch Lösung der Gleichung

$$[a^\mu S]_{;\nu} = 0 \quad (141)$$

ist. Dieses ist eine Selbstkonsistenzforderung aus dem differentiellen Bestimmungsgleichungssystem (115), (116), (117). Wir erhalten für den verbliebenen radialen Anteil mit eingesetzter Eikonalfunktion $\sim s$

$$\frac{1}{s^2} \frac{\partial}{\partial s} \left[s^2 \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{a^T}{s} s \right) \right] = 0 \quad , \quad (142)$$

was hiermit gezeigt ist. Damit ist (139) mit $j = 0$ die richtige Wahl und vollständige Lösung im lokal sphärischen Koordinatensystem. Der Zusammenhang (139) erfüllt zudem sogar die skalare Näherungsgleichung (86) aus dem Sommerfeldschen Ansatz.

Diese Lösung ist die strenge mathematische Entsprechung des Huygenschen Prinzips. Eine Feldstörung an einem Punkt hat eine kugelförmige Feldausbreitung in den Raum zur Folge. Im Vorgriff auf die Definition differentieller Wellenfronten und ihrer lokalen Oberflächenkrümmungseigenschaften ist anzumerken, daß $\frac{1}{s} \sim \frac{1}{\sqrt{\rho_1 \rho_2}}$ ist. ρ_1, ρ_2 sind dabei die Hauptkrümmungsradien, die aus den orthogonalen Hauptrichtungen nach einer Hauptachsentransformation hervorgehen. Im Fall des lokal sphärischen Systems fallen $\rho_1 = \rho_2 = s$ zusammen.

3.2.5 Berechnung der fluktuierenden Felder, Energie- und Leistungsdichte

Nach (114) gilt für das Vektorpotential der Zusammenhang $A^\mu(x^\alpha) = a^\mu(x^\alpha) e^{ik_0 S(x^\alpha)}$. Kugelsymmetrische Lösungen der Form (die optische Brechzahl $n = \sqrt{\epsilon_r}$ wird eingeführt)

$$A^T(s, p, q) = \frac{a^T}{s} e^{i(k_0 n s + S_0)} \quad (143)$$

bilden eine exakte Lösung der optischen Bestimmungsgleichungen. Die sich ausbreitende Kugelwelle wird bei Anwesenheit inhomogener Dielektrika Verzerrungen unterworfen. Mathematisch zeigt sich dieses in der Strahlenausbreitung entlang im allgemeinen krummliniger Geodäten durch einen dielektrisch gekrümmten Raum. Die Raumkrümmung ist in zweiter Ordnung direkt aus der Materieverteilung gegeben (siehe Anhang).

Sind nun mehrere Feldanregungen in einem Raumgebiet vorhanden, so ist das über alle Quellen resultierende Vektorfeld zu bilden als Summe aus allen entlang den Strahlen $l = 1 \dots N_{\text{Strahlen}}$ verfolgten Anteilen der einzelnen Strahlenvektorpotentiale

$$A_{res}^{\mu}(x^{\alpha}) = \sum_l a^{\mu}(x_l^{\alpha}) e^{ik_0 S(x_l^{\alpha})} = a_{res}^{\mu}(x^{\alpha}) e^{ik_0 S_{res}(x^{\alpha})} \quad (144)$$

Damit ergibt sich das komplexe elektrische und magnetische Feld an einem Ort \vec{x} in Vektornotation nach (15):

$$\vec{E}(\vec{x}) = i\omega \vec{a}_{res}(\vec{x}) e^{ik_0 S_{res}(\vec{x})} \quad (145)$$

$$\vec{B}(\vec{x}) = e^{ik_0 S_{res}(\vec{x})} \text{rot} \vec{a}_{res} + ik_0 e^{ik_0 S_{res}(\vec{x})} \text{grad} S(\vec{x}) \times \vec{a}_{res}(\vec{x}) \quad (146)$$

Die weiteren relevanten Größen sind ausschließlich aus dem elektrischen Feld zu bestimmen. Wie erhalten über Realteilbildung der komplexen Größen

$$|\Re(\vec{E}(\vec{x}))|^2 = \omega^2 |\vec{a}_{res}(\vec{x})|^2 \sin^2(k_0 S_{res}(\vec{x})) \quad (147)$$

und erkennen, daß selbst mit einem starken $|\vec{a}_{res}(\vec{x})|^2$ bei einer entsprechenden Phasenkonstellation $k_0 S_{res}(\vec{x}) = m\pi, m = 0, 1, \dots$ die zeitlich fluktuierende Energiedichte (31),(33) ein Gebiet mit einem sehr kleinen Wert annehmen kann

$$w_e(\vec{x}) = \frac{1}{2} \epsilon_0 \epsilon_r(\vec{x}) |\Re(\vec{E}(\vec{x}))|^2 \quad (148)$$

Den Poynting-Vektor an einem Ort \vec{x} erhalten wir in den optischen Begriffen der gerichteten Amplitude und skalaren Phase zu

$$\vec{S}(\vec{x}) = \frac{\omega}{2} \text{rot} \vec{a}_{res}(\vec{x}) \times \vec{a}_{res}(\vec{x}) \sin(2k_0 S_{res}(\vec{x})) \quad (149)$$

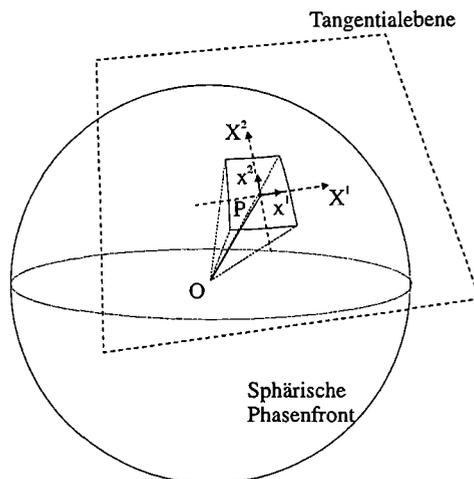
Der an diesem Ort \vec{x} herrschende SAR-Wert (Specific Absorption Rate, mittlere dissipierte Leistungsdichte) zur Jouleschen Heizung in einem verlustbehafteten Material ergibt sich damit aus (36)

$$\text{div} \langle \vec{S}(\vec{x}, t) \rangle = p_{elek}(\vec{x}) = -\frac{1}{2} \sigma(\vec{x}) |\Re(\vec{E}(\vec{x}))|^2 \quad (150)$$

Aus der stationären Phasenverteilung in (147) folgt damit, daß lokal unterschiedliche Heizregionen in einem Material entstehen und sich nachteilige Wärmekeime (Hot-Spots) in der Keramik ausbilden können.

3.2.6 Differentielle Wellenfronten

Die bisherigen Ergebnisse wurden ohne eine Behandlung von Randgebieten und ihren Eigenschaften vorgenommen. Randbedingungen werden Gegenstand des nachfolgenden Kapitels sein. Zunächst wollen wir die Wellenausbreitung einer Punktquelle weiter untersuchen und notwendige Begriffe für die Beschreibung der Wellenfront bereitstellen. Im lokal sphärischen



Im Punkt P einer in O ausgestrahlten differentiellen Wellenfront herrschen lokal flache Verhältnisse wie auf der Tangentialebene

Abbildung 20: Die differentielle Wellenfront

Koordinatensystem lassen sich Wellenfronten

$$W^\mu(s, p, q) = \begin{pmatrix} s \cos p \sin q \\ s \sin p \sin q \\ s \cos q \end{pmatrix} \quad (151)$$

auf Kugeloberflächen $s = const.$ darstellen. Diese Fläche kann durch Koordinaten (p, q) eindeutig festgelegt werden.

Wir definieren nun eine differentielle Wellenfront als ein Oberflächenteilstück einer gesamten (globalen) Wellenfront im Abstand s von der Quelle mit einem in diesem Flächenteilstück zentrierten Strahl (Geodäte). Entlang der Strahltrajektorie ist die Richtung der Feldausbreitung über Parallelverschiebung nach Levi-Civita (Abb. 18) bestimmt. Eine Wellenfront ist im allgemeinen nicht sphärisch gekrümmt; im nächsten Kapitel zeigt sich, daß durch Reflexion und Brechung eine Kugelwelle deformiert wird. Der Strahlvektor t^μ der Geodäten fällt mit dem Einheitsnormalenvektor

$$\vec{n}(p, q) = \frac{\frac{\partial \vec{W}}{\partial p} \times \frac{\partial \vec{W}}{\partial q}}{\left| \frac{\partial \vec{W}}{\partial p} \times \frac{\partial \vec{W}}{\partial q} \right|} = \frac{\partial \vec{W}}{\partial s} = \vec{t} \quad (152)$$

der differentiellen Wellenfront zusammen.

Wir wollen uns nun der unmittelbaren Umgebung des auf der differentiellen Wellenfront zentrierten Flächenpunkts $P_0(s, p_0, q_0)$ zuwenden. Dazu untersuchen wir die metrischen Eigenschaften der Wellenfrontfläche selber (siehe Anhang 8.3-8.6), nicht die des dielektrischen dreidimensionalen Raumes. Wir können im Punkt $P_0(s, p_0, q_0)$ ein lokal ebenes Koordinatensystem jederzeit einführen; dieses erhalten wir durch das Legen einer Tangentialebene an die Fläche in dem Punkt $P_0(s, p_0, q_0)$. Die Approximation läßt sich streng darstellen als [45]

$$g_{ab}(x^\alpha(p_0, q_0)) = \eta_{ab}(P_0) + \frac{1}{2}d_{abcd}(P_0)x^c(p, q)x^d(p, q) + \dots \quad \eta_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} \quad (153)$$

g_{ab} stellt dabei die metrische Beschreibungsform der Wellenfront dar, $x^d(p, q)$ Punkte auf der Wellenfrontfläche entlang p bzw. q . $\eta_{\mu\nu}$ ist die euklidische Metrik des lokal ebenen Systems, also die kartesischen Koordinaten der Tangentialebene, die durch die zugehörigen Tangenten der Wellenfront im Punkt $P_0(s, p_0, q_0)$ aufgespannt wird. Da Fläche und Tangentialebene einander

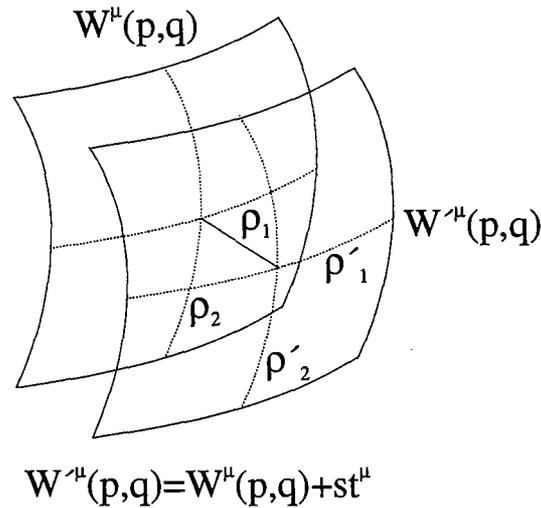


Abbildung 21: Ausbreitung einer differentiellen Wellenfront und ihrer Haupttradien

berühren, weichen die so entstandenen Koordinatenlinien auf der Fläche nur in 2. Ordnung von den Geraden (η_{ab}) der Tangentialebene ab. Das Auffinden der Tangentialebene bedeutet damit, lokal g_{ab} auf Hauptachsen zu transformieren (die Diagonalelemente verschwinden dann, im Punkt P_0 erhalten wir ein orthogonales Koordinatensystem aus Tangentenvektoren). Diese Koordinatenlinien sind ein ausgezeichnetes System auf der Wellenfrontfläche. In diesem System haben die Fundamentalformen der Fläche $W^\mu(p, q)$ eine besonders einfache Gestalt

$$dr^2 = dx_1^2 + dx_2^2 \quad (154)$$

$$-d\vec{n} \cdot d\vec{r} = k_1 dx_1^2 + k_2 dx_2^2 \quad (155)$$

dr^2 ist das Bogenelement auf der Oberfläche, k_1 und k_2 stellen die Hauptkrümmungen dar, wobei zwischen der Krümmung und dem Krümmungsradius der Koordinatenlinien (Frenetsche Formeln) der Zusammenhang

$$k_1 = \frac{1}{\rho_1} \quad k_2 = \frac{1}{\rho_2} \quad (156)$$

gilt. Die invariante Gaußsche Flächenkrümmung K in P_0 erhält man unmittelbar aus

$$K = k_1 k_2 = \frac{1}{\rho_1 \rho_2} \quad (157)$$

Breitet sich die Welle gleichmäßig entlang s aus, so gilt mit (140) aus der Geodätengleichung ($\vec{W}(s) = \vec{x}(s)$) und (152)

$$\frac{d^2 \vec{W}}{ds^2} = \frac{\partial \vec{n}}{\partial s} = 0 \quad (158)$$

Diese Symmetrie führt zur Erhaltung der Hauptrichtungen auf der differentiellen Wellenfront [46] während einer homogenen Wellenausbreitung. Die ursprünglichen Krümmungshaupttradien verhalten sich dabei wie

$$\frac{1}{\rho_1'} = \frac{1}{\rho_1 - s} \quad \frac{1}{\rho_2'} = \frac{1}{\rho_2 - s} \quad (159)$$

Der über eine differentielle Wellenfront transportierte Leistungsfluß läßt sich leicht angeben aus $P'dA' = PdA$. Damit erhalten wir

$$P'(s) = P \frac{\rho_1 \rho_2}{(\rho_1 - s)(\rho_2 - s)} \quad (160)$$

Wir können damit eine differentielle Wellenfront bei homogener Ausbreitung festlegen durch Angabe des Ausbreitungsvektors \vec{t} , durch Angabe der orthogonalen Hauptrichtungen auf der Wellenoberfläche im Punkt $P(s)$, durch Angabe des transversalen Feldvektors, der entlang des Strahls transportiert wird und den auf der Wellenfront in $P(s)$ herrschenden Haupttradien.

3.2.7 Optische Randbedingungen - Die Gullstrandschen und Fresnelschen Gleichungen

Metalle, oder dielektrische Grenzflächen bilden Randbedingungen, die für eine allgemeine optische Feldberechnung lokal an das elektrische Feld gestellt werden müssen. In der geometrischen Optik wurden Gesetzmäßigkeiten für ebene Wellen an ebenen Grenzflächen von Fresnel 1822 aufgestellt. Beer verallgemeinerte diese zu den Fresnel-Beerschen Gleichungen unter Berücksichtigung eines komplexen Brechungsindex um absorptive Vorgänge behandeln zu können. Diese Gleichungen sind unmittelbar für allgemeine Problemstellungen, also Wechselwirkung von Wellen mit "beliebig" gekrümmten Oberflächen (beliebig heißt in diesem Fall,

stetige und differenzierbare Flächen 2. Ordnung) nicht zu verwenden. Vielmehr muß eine Erweiterung dieses Begriffs- und Gleichungssystems vorgenommen werden.

Bei der Wechselwirkung von gekrümmten Wellenfronten mit gekrümmten Rändern findet eine Verzerrung der Wellenfronten für die weitere Ausbreitung statt. Erstmals Gullstrand 1906 [41] führte eine differentialgeometrisch sehr aufwendige Abhandlung durch, die sich dieser Frage zuwandte. Diese Gleichungen konnten 1956 in ihren Konsequenzen von Altrichter und Schäfer bestätigt werden [42]. Lokal kann mit diesem Gleichungssystem und den Fresnel-Beerschen Gleichungen zusammen eine stationäre elektrische Wellenpropagation mit Grenzflächen strahlenoptisch berechnet werden.

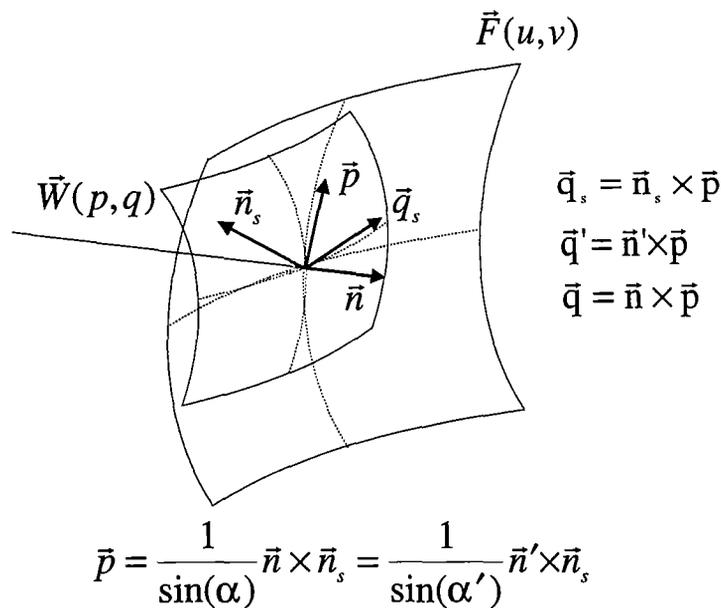


Abbildung 22: Einfall einer differentiellen Wellenfront $\vec{W}(p, q)$ auf eine brechende Oberfläche $\vec{F}(u, v)$. Es wird nur das $\vec{q}_s = \vec{n}_s \times \vec{p}$ -System der Übersichtlichkeit wegen dargestellt.

Brechende Oberfläche: $\vec{W}(p, q)$ sei die einfallende Wellenfront, $\vec{F}(u, v)$ die brechende Fläche und $\vec{W}'(p, q)$ die gebrochene Wellenfront. Es gilt das Gesetz von Snellius für den einfallenden und ausfallenden Strahl

$$n_1 \vec{n} \times \vec{n}_s = n_2 \vec{n}' \times \vec{n}_s \quad . \quad (161)$$

n_1 sei der Brechungsindex von Medium 1, n_2 sei der Brechungsindex von Medium 2, und \vec{n}_s ist der Normaleneinheitsvektor der brechenden Oberfläche. Der Vektor $\vec{p} = \frac{1}{\sin(\alpha)} \vec{n} \times \vec{n}_s$ im Schnittpunkt beider Flächen ist im einfallenden und gebrochenen System invariant. Es lassen sich mit diesem Vektor drei lokale Koordinatensysteme in diesem Punkt aufbauen für das

einfallende System, das System der brechenden Oberfläche und für das ausfallende System (in Abb.22 ist der Übersichtlichkeit wegen nur eines dieser drei Systeme dargestellt)

$$\vec{q} = \vec{n} \times \vec{p} \quad \vec{q}_s = \vec{n}_s \times \vec{p} \quad \vec{q}' = \vec{n}' \times \vec{p} \quad (162)$$

\vec{p} ist dabei Tangente auf allen 3 Oberflächen, \vec{q} ist jeweils tangential im Kontaktpunkt zu einer aus der Einfallsebenen und der entsprechenden Oberfläche gewonnenen Schnittkurve. Aus diesen Bedingungen können Bestimmungsgleichungen für die Transformation der normalen Krümmungsradien der einfallenden Wellenfront differentialgeometrisch hergeleitet werden [41], [42], [43]. Bei der Brechung deformieren (verzerren) sich damit im allgemeinen einfallende Wellenfronten bei der Transmission, bzw. Reflexion unter einer Drehung ihres Systems der Hauptrichtungen. Gullstrand zeigte, daß sich die Normalradien der gebrochenen Wellenfront verhalten wie

$$\frac{1}{\rho'_p} = \frac{n_1}{n_2} \frac{1}{\rho_p} + \left(\cos(\alpha') - \frac{n_1}{n_2} \cos(\alpha) \right) \frac{1}{\rho_{sp}} \quad (163)$$

$$\frac{\cos(\alpha')^2}{\rho'_q} = \frac{n_1}{n_2} \frac{\cos(\alpha)^2}{\rho_q} + \left(\cos(\alpha') - \frac{n_1}{n_2} \cos(\alpha) \right) \frac{1}{\rho_{sq}} \quad (164)$$

Die Winkel α, α' ergeben sich direkt aus dem Brechungsgesetz von Snellius (Einfallswinkel, Ausfallswinkel) und ρ_{sp} und ρ_{sq} stellen die Normalradien der brechenden Oberfläche im System \vec{p}, \vec{q}_s dar, ρ_p und ρ_q die Normalradien der einfallenden Wellenfront im \vec{p}, \vec{q} -System und ρ'_p und ρ'_q die Normalradien der gebrochenen Wellenfront im \vec{p}, \vec{q}' System.

Reflektierende Oberflächen: Dieses Gleichungspaar ergibt sich als Spezialfall aus den Gullstandschen Gleichungen der brechenden Oberfläche. Dabei ist anzusetzen $n_1 = -n_2$ und $\cos(\alpha') = \cos(\alpha)$. Für die Krümmungsradien der Wellenfronten ergeben sich damit lokal einfachere Beziehungen

$$\frac{1}{\rho'_p} = -\frac{1}{\rho_p} + \frac{2 \cos(\alpha)}{\rho_{sp}} \quad (165)$$

$$\frac{\cos(\alpha)}{\rho'_q} = -\frac{\cos(\alpha)}{\rho_q} + \frac{2}{\rho_{sq}} \quad (166)$$

Wir können jetzt in seiner Gesamtheit das Vorgehen bei einer "beliebig" gekrümmten einfallenden Wellenfront und Oberfläche für Brechung und Reflexion angeben. In den Kontaktpunkt der Wellenfront und der Oberfläche legen wir eine Tangentialebene. In der Umgebung des Punktes können wir gemäß den Überlegungen zur Gleichung (153) ein lokal ebenes System einführen. Da die Fehlerordnung erst 2. Ordnung im Raum ist (in der Ordnung der zu lösenden Helmholtzgleichung), geht der Fehler bei im Prinzip unendlich vielen Strahlen gegen

Null. Ein entlang eines Strahls (Geodäten) transportierter Feldvektor wird den Fresnelschen Gleichungen entsprechend behandelt und in einen reflektierten und transmittierten Feldvektor aufgespalten (bei Reflexion an einem Metall findet ein Phasensprung um π statt). Der elektrische Feldvektor muß dabei in Komponenten senkrecht und parallel zur Einfallsebene zerlegt werden. Damit verwenden wir die bekannten Reflexions- und Transmissionskoeffizienten:

Feldkomponente senkrecht zur Einfallsebene:

$$r_{\perp} = \frac{\sin(\alpha' - \alpha)}{\sin(\alpha + \alpha')} \quad (167)$$

$$t_{\perp} = \frac{2 \sin(\alpha') \cos(\alpha)}{\sin(\alpha + \alpha')} \quad (168)$$

Feldkomponente parallel zur Einfallsebene:

$$r_{\parallel} = \frac{\tan(\alpha - \alpha')}{\sin(\alpha + \alpha')} \quad (169)$$

$$t_{\parallel} = \frac{2 \sin(\alpha') \cos(\alpha)}{\sin(\alpha + \alpha') \cos(\alpha - \alpha')} \quad (170)$$

Danach sind in Anwendung der Gullstrandschen Gleichungen die Transformationen der Normalenkrümmungen zu berechnen. Die weitere Strahlausbreitung kann dann mit den Transfergleichungen (159) und den neuen Hauptkrümmungsradien (nach einer Hauptachsentransformation) berechnet werden. Der Betrag $|a^{\mu}|$ des Amplitudenvektors verhält sich dann entlang des Strahls wie

$$|a_{\mu}(s)a^{\mu}(s)| = \frac{|a(0)|}{\sqrt{(\rho_1 - s)(\rho_2 - s)}} \quad (171)$$

3.2.8 Optischer Formalismus verlustbehafteter Materialien

Der bisherig entwickelte optische Formalismus beschrieb Wellenausbreitung in inhomogenen dielektrischen Materialien, deren Leitfähigkeit $\sigma \rightarrow 0$ angesetzt wurde. Wir wollen diesen Formalismus nun so modifizieren, daß auch absorptive Eigenschaften berücksichtigt werden. Wir wenden uns wieder der Gleichung (113) zu

$$A(x^{\alpha})_{;\nu}^{\mu} + k^2(x^{\alpha})A^{\mu}(x^{\alpha}) = 0 \quad (172)$$

und stellen das resultierende Wellenfeld dar als

$$A^{\mu}(x^{\alpha}) = a^{\mu}(x^{\alpha})e^{i\Phi(x^{\alpha})} = a^{\mu}(x^{\alpha})e^{ik(x^{\alpha})S(x^{\alpha})} \quad (173)$$

Die Motivation, hier die resultierende komplexe Phase $\Phi(\vec{x})$ als Produkt

$$k(x^\alpha)S(x^\alpha) = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon^*(x^\alpha)} S(x^\alpha) \quad (174)$$

darzustellen, liegt in dem Bild begründet, in $k(x^\alpha)$ die von außen vorgegebene Materialverteilungsfunktion zu sehen, und in $S(x^\alpha)$ die räumliche Phasenfunktion des hierauf sich einstellenden Wellenfeldes. An dieser Stelle gehen wir, um optische Gleichungen gewinnen zu können, von der Einschränkung aus, daß die räumliche Änderung der Materialparameter innerhalb des Materials klein sind. Dies ist gleichbedeutend mit der Forderung $k_{;\nu} = k^{;\nu} \rightarrow 0$. Einsetzen in die Helmholtzgleichung ergibt den Ausdruck

$$A^{;\nu}_{;\nu} + k^2 A^\mu (1 - S^{;\nu} S_{;\nu}) + ik (A^{;\nu} S_{;\nu} + A^{;\nu}_{;\nu} S^\nu + A^\mu S^{;\nu}_{;\nu}) = 0 \quad (175)$$

Wir erhalten damit, um (175) zu erfüllen, optische Bestimmungsgleichungen des Wellenfeldes für Amplitude und Phase zu

$$S^{;\nu} S_{;\nu} = 1 \quad (176)$$

$$a^{;\nu}_{;\nu} = 0 \quad (177)$$

$$(a^\mu S)^{;\nu}_{;\nu} = 0 \quad (178)$$

Wir erkennen ein analoges Ergebnis zu (115,116,117), das eine Strahlrepräsentation über das Fermatsches Prinzip in gleicher Weise unmittelbar erkennen läßt. Die Strahltrajektorie ist auch hier Lösung der Geodätengleichung, in diesem Ansatz unmittelbar im unverzerrten Raum (lokal sphärisches Koordinatensystem)

$$G_{\mu\nu}(x^\alpha) = \delta_{\mu\nu} \quad (179)$$

Änderungen betreffen die komplexe Wellenzahl, die nun einen lokal absorptiven Charakter im dielektrischen Material trägt. Damit erhalten wir das Ergebnis

$$k^2 = k_0^2 \sqrt{\epsilon'^2 + \frac{\sigma^2}{\omega^2 \epsilon_0^2}} e^{i \arctan \frac{\sigma}{\omega \epsilon_0 \epsilon'}} \quad (180)$$

Für dielektrische Materialien ist sehr σ klein, so daß sich die Formeln vereinfachen lassen zu dem Ergebnis für das Vektorpotential entlang eines Strahls

$$A^\mu(x^\alpha) = a^\mu(x^\alpha) e^{-\frac{k_0 \sigma(x^\alpha)}{2\omega \epsilon_0 \sqrt{\epsilon'(x^\alpha)}} s} e^{ik_0 \sqrt{\epsilon'(x^\alpha)} s} \quad (181)$$

Dieses ist das Lambert-Beersche Absorptionsgesetz. Das weitere Vorgehen zur Feldberechnung ist analog zu den Ergebnissen der vorherigen Kapitel unter Berücksichtigung der exponentiellen Dämpfung längs des Strahls.

3.2.9 Kaustiken und Feldfokussierung

Die Anwendung der Gullstrandschen Gleichungen (22) führt für den Betrag der Amplitude in (171) auf Singularitäten für $s = \rho_1$, bzw. $s = \rho_2$. Wir ersehen sofort aus den Gullstrandschen Gleichungen bei der Brechung einer einfallenden Wellenfront an einer ebenen Oberfläche ($\rho_{sp} \rightarrow \infty, \rho_{sq} \rightarrow \infty$), daß die resultierenden Krümmungsradien der Wellenfront für jede Hauptrichtung lediglich linear gestreckt oder gestaucht werden

$$\frac{1}{\rho'_p} = \frac{n_1}{n_2} \frac{1}{\rho_p}, \quad \frac{\cos(\alpha')^2}{\rho'_q} = \frac{n_1}{n_2} \frac{\cos(\alpha)^2}{\rho_q} \quad (182)$$

aber keine Vorzeichenumkehr der Krümmungsradien für eine divergierende Wellenfront in eine konvergierende stattfinden kann. Diese topologische Fokussierungs-/Defokussierungseigenschaft gekrümmter Oberflächen unterscheidet sich damit wesentlich von der an einer stückweise ebenen Fläche.

Stavroudis [46] zeigte, daß die resultierende Amplitude des ausgedehnten räumlichen Wellenfelds fokussierende Eigenschaften in dieser Umgebung aufweist. Eine Wellenfront breitet sich auf einem Strahl in Richtung \vec{n} über den Parameter s aus.

$$\vec{W}(p, q) = \vec{W}(p_0, q_0) + s\vec{n} \quad (183)$$

Eine kaustische Fläche $\vec{C}(p, q)$ ist die Wellenfrontschar im Abstand $\delta(p, q)$ (p, q ist in Richtung der Hauptrichtungen)

$$\vec{C}(p, q) = \vec{W}(p, q) + \delta(p, q)\vec{n}(p, q) \quad (184)$$

mit der Eigenschaft

$$\vec{n} \cdot \left[\frac{\partial \vec{C}}{\partial p} \times \frac{\partial \vec{C}}{\partial q} \right] = 0 \quad (185)$$

Das heißt, die Tangenten der kaustischen Fläche und der Ausbreitungsvektor \vec{n} von $\vec{W}(p, q)$ sind in einer Ebene. Der Strahl muß damit tangential $\vec{C}(p, q)$ berühren. Die Analysis ergibt, daß dieser Abstand $\delta(p, q)$ genau den Krümmungsradien $s = \rho_1$, bzw. $s = \rho_2$ entspricht. In dieser Singularität findet also eine Anhäufung tangential zusammenlaufender Strahlen statt. Für die vorliegende Appliktorproblematik sind bei zylindrischen und kugelförmigen Geometrien kaustische Strukturen zu erwarten. Da ein Zylinder topologisch eine aufgerollte Ebene ist (also nur einen endlichen Krümmungsradius besitzt), kann gegenüber der Fokussierung einer Kugelfläche auf weniger intensive kaustische Gebiete geschlossen werden. Diese Fokussierungen stören in jedem Fall eine homogene Feldverteilung wesentlich und sollten von vornherein vermieden werden.

3.3 Der MiRa-Code

Der MiRa-Code (MIcrowave RAytracer) wurde zur Auslegung großer hochmodiger Applikatoren bei kleinen Wellenlängen entwickelt. Der vorgestellte kovariante Formalismus stellt dabei die Grundlage für die Auflösung elektromagnetischer Wellenfelder in optische Strahlenfelder dar. Die damit einhergehende geometrisierte Beschreibung elektromagnetischer Wellenausbreitung bietet den Vorteil, komplizierte Applikatorgeometrien und Problemstellungen in der Modellierung auf einfache benutzerfreundliche Weise eingehen zu lassen. Die Applikatoroptimierung wurde dabei unter dem Aspekt der geometrischen Wirkung auf das sich einstellende Wellenfeld untersucht. Die Frage der Anordnung industrieller Keramikchargen in einem Applikator ist dabei nicht berücksichtigt. Nach heutigem Stand ist eine fundierte Bewertung der Anordnung einer keramischen Charge, wie auch das Beladungsverhältnis in einem Applikator Gegenstand weiterer experimenteller und theoretischer Untersuchungen. Dieser Faktor der

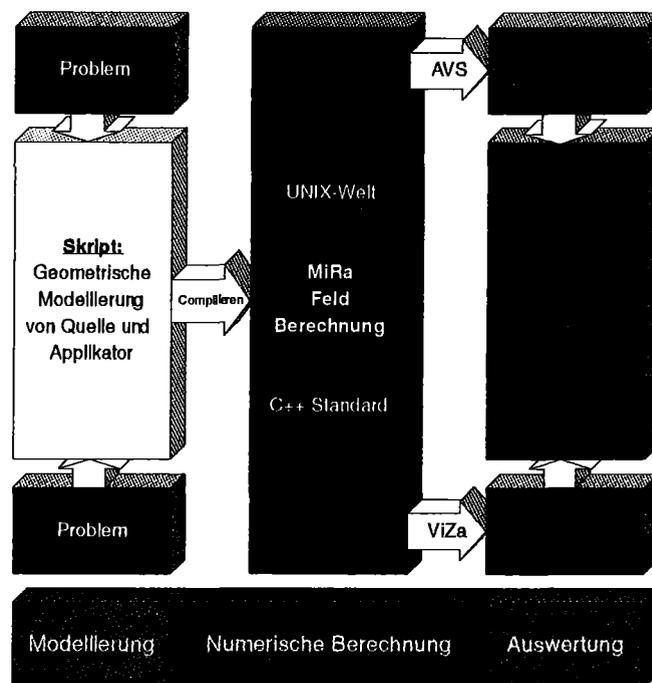


Abbildung 23: Das Simulationskonzept des MiRa-Code

Unkenntnis aber hat weitaus weniger Bedeutung für die Optimierungsfrage, da zum einen keramische Dielektrika für Millimeterwellen sehr transparent sind, zum anderen das Einbringen von Dielektrika das Feld im Applikator zusätzlich durch das größere effektive Volumen die Modendichte erhöht und eine zusätzliche Homogenisierung bedingt. Die Untersuchung leerer Applikatoren stellt damit den "schlimmsten" Fall der Feldbedingungen im Ofen dar. Hier eine optimierte Anordnung zu finden, heißt bei sinnvoller Anordnung einer Charge diese Vorteile

für die Sinterung nutzen zu können.

Zur Definition eines MiRa-Applikatorszenarios wird von einer skriptmäßigen Schnittstelle zwischen dem Anwender und dem Code ausgegangen. Die notwendigen Elemente (geometrische Objekte/Flächen, Strahlenquellen) des Applikators werden hier frei definiert und über einen Compilationszwischenschritt zu einer ablauffähigen Programmdatei zusammengestellt (siehe auch Abb.23). Diese so zusammengestellten Geometrien können, vom Zeitpunkt der Programm-Entwicklung aus gesehen, unvorhersehbar komplex ausfallen. Um diese allgemeinen Anforderungen für Benutzerfreundlichkeit unter dem Aspekt eines flexiblen Software-Engineerings realisieren zu können, wurde von einem objektorientierten Grundprinzip, wie es die Sprache C++ auszeichnet, ausgegangen. Oberflächen, Strahlenquellen, Wellenfronten etc. sind damit kompakte Softwareobjekte (Klassen) mit genau aufeinander abgestimmten Eigenschaften (sogenannten "Memberfunktionen"). Ihre skriptmäßige Zusammenstellung während des Modellierungsschrittes durch den Benutzer bestimmt damit aus ihrer Definition den programmtechnischen Ablauf für die Strahlenverfolgung. Der Hauptkernel des Codes besteht lediglich aus der Schleife

```
for(iq=1;iq<=Strahler.AnzQuellen;iq++)
{
do
{
    SekundaerWellen.Archiv_Reset();
    PrimaerWelle=Strahler.Quelle[iq]->Emittiere();
    Trace(Szene,PrimaerWelle,SekundaerWellen,Statistik,PhotoDetektor);
    while (SekundaerWellen.aktuell<=SekundaerWellen.max)
    {
        SekundaerWelle=SekundaerWellen.Archiv_next();
        Trace(Szene,SekundaerWelle,SekundaerWellen,Statistik,PhotoDetektor);
    };
} while (Strahler.Quelle[iq]->Generator.aktiviert);
}
```

über die Gesamtanzahl der vorgegebenen Strahlenquellen. Von der Strahlenquelle *iq* wird, je nachdem, wie sie vom Benutzer definiert wurde (Dipol, Quasi-Gaußscher Strahl, ebene Welle etc.), eine Primärwelle in einem Strahlenfeld emittiert. Diese wird im Unterprogramm *Trace* mit der definierten Geometrie (Objektklasse *Szene*) den jeweiligen optischen Gesetzen entsprechend wechselwirken. Dabei können *Sekundärwellen* entstehen (z.B. beim Auftreffen auf eine Grenzfläche), die für die weitere Rechnung archiviert werden. Die einzelnen Ereignisse der Wellenfront entlang der Strahlausbreitung werden in einem räumlichen Gitter (Objektklasse

Photodetektor) vektoriell addiert und innerhalb der Voxel zum Schluß statistisch ausgewertet. Eventuell aufgetretene *Sekundärwellen* werden in einer zweiten Schleife ebenfalls als Strahlenfeld verfolgt, solange bis keine Eintragung für die Objektklasse *Sekundärwellen* mehr vorliegt. Sind alle Strahlenfelder einer Quelle generiert, ist die Berechnung der Anteile der Quelle *iq* abgeschlossen. Für die Datenausgabe wird die elektrische Energiedichte aus der komplexen Betragbildung des vektoriellen elektrischen Feldes ausgerechnet (dieses ist eine C⁺⁺-Destruktor Eigenschaft des *Photodetektors* und erfolgt automatisch bei der Speicherfreigabe, somit ist dieser Schritt im "Hauptprogramm" nicht zu sehen).

Die Visualisierung der anfallenden 3D-Simulationsdaten eines Programmlaufs erfordert eine anspruchsvolle Computerunterstützung, um den ausgerechneten Zahlen ein bildhaftes "Leben" einzuhauchen. Hierzu wird das selbstentwickelte Programm VIZA zur zweidimensionalen Visualisierung und Realbildverarbeitung für Videoanimationen benutzt. Die sehr rechenintensive interaktive dreidimensionale Verarbeitung wird mit dem AVS (Advanced Visual System) Programmsystem durchgeführt [54].

4 Ergebnisse zur Applikatorauslegung hochmodiger Millimeterwellenöfen

4.1 Die Messung von stationären Feldverteilungen mit Thermopapier

In einem Applikator stellt sich ein stationäres, zeitlich fluktuierendes elektrisches Wellenfeld $\vec{E}(\vec{x}, t)$ gemäß (16) ein. Die Messung dieser räumlichen Feldverteilung ist dabei ein bisher noch nicht befriedigend gelöstes Problem. Das elektromagnetische Feld sollte dazu, im Idealfall ohne störende Rückwirkung des Meßaufbaus auf das Wellenfeld in eine quantifizierbare Wechselwirkung treten. Eine dissipative Ankopplung des elektrischen Feldes an Materie ist über den SAR-Wert (Specific Absorption Ratio, Gl. 34)

$$\operatorname{div} \langle \vec{S}(\vec{x}, t) \rangle = -\frac{1}{2} \sigma_{eff} |\vec{E}(\vec{x})|^2 \quad (186)$$

gegeben. Die dabei entstehende Joulesche Wärme kann als Meßindikator der lokalen Energiedichte verwendet werden. Zur Messung wurden dabei handelsübliche Papiere für Thermodrucker verwendet, deren temperaturabhängiger Farbumschlag einen Rückschluß auf die Energiedichte zuläßt. Die Verfärbung der Thermopapiers erfolgt, wie Untersuchungen [49] zeigten, auf nichtlineare Weise. Lediglich zweidimensionale Schnitte sind mit dieser Methode möglich, wobei das Thermopapier von Applikatorwand zu Applikatorwand mit einem dünnen Metallklebeband straff gespannt sein muß. Dieser notwendige Zustand ist schwierig zu kontrollieren. Die Verwendung von weiteren Hilfsmitteln zur Befestigung, wie zum einen metallische Rahmen zum Einspannen der Papiere zeigten selbst unmittelbar eine störende Rückwirkung auf die Feldverteilung (Meßverfälschung). Zum anderen bedingt die Verwendung nichtmetallischer Komponenten durch ihr voluminöses Ankopplungsverhalten, daß die Erhitzung dieser Halterung stärker voranschreiten kann als die des dünnen Thermopapiers, was bis zur Zerstörung des Aufbaus führt. Die Erfahrungen zeigten, daß Thermopapiermessungen lediglich einen qualitativen Meßzugang zur Energiedichteverteilung in einem Applikator ermöglichen. Um bestimmte signifikante Strukturen nachzuweisen sind eine ganze Reihe von Thermopapieren unter gleichen Bedingungen zu "belichten" und zu vergleichen. Dabei kommt der Verteilungsdichte der Farbumschläge auf dem Papier, in Abhängigkeit der eingekoppelten Leistung, eine statistische Bedeutung zu. Durch die Verwendung eines Modenrührers zur Feldglättung können allerdings bei einer Messung über einen längeren Zeitraum großräumige SAR-Veränderungen und auch Interferenzstrukturen repräsentativ nachgewiesen werden.

4.2 Simulationen zum GOTS-Applikator mit Dipoleinkopplung

4.2.1 Die Feldverteilung ohne Modenrührer

Die im folgenden diskutierten Ergebnisse zeigen, daß das Wesen der Einstrahlungsquelle das stationäre Wellenfeld in einer geschlossenen Geometrie signifikant vorgibt. Die einfachste, elektromagnetische Strahlenquelle ist der Hertzsche Dipol, mit dem erste Untersuchungen zur Applikatorproblematik über den MiRa-Code durchgeführt wurden. Diese, im Vergleich mit Experimenten dargestellten Ergebnisse zeigen grundlegende Eigenschaften der Wellenfeldverteilungen für die im ITP vorliegende GOTS-Geometrie auf. Die Dipolquelle als Modellpunktstrahler stellt dabei nicht den Anspruch, realistische Gegebenheiten der experimentellen Anordnung im Detail zu repräsentieren. Weitere Rechnungen mit realistischen Einkopplungsmodellen werden im Anschluß mit dem realen apparativen Aufbau und Experimenten, die dem Nachweis signifikanter Strukturen dienen, studiert. Abb. 24 zeigt die Simulationsan-

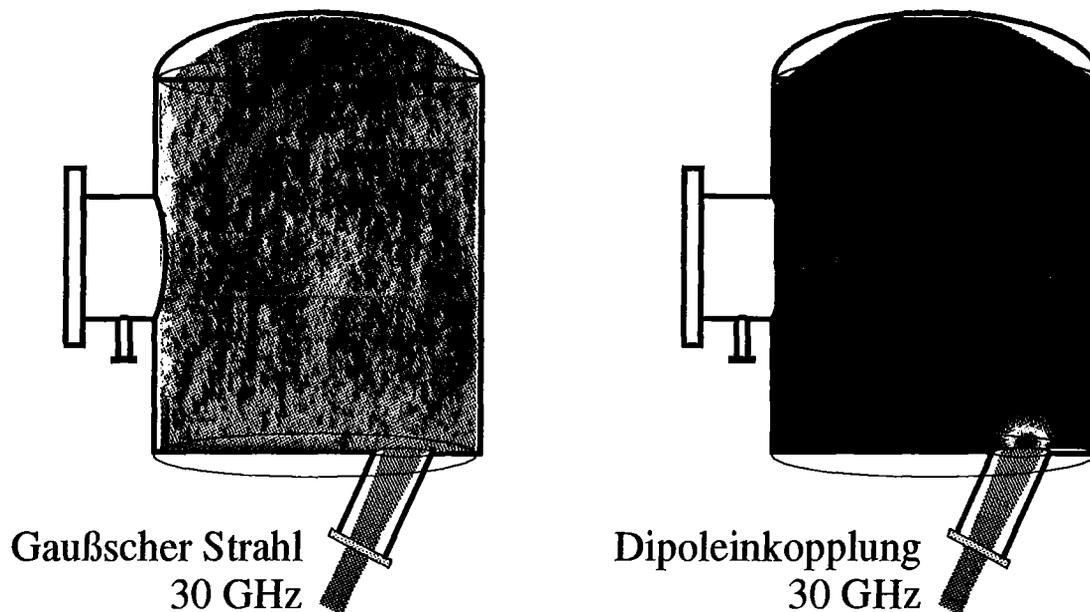


Abbildung 24: Die Thermopapiermessung und MiRa Dipol-Simulation zeigen hohe Feldschwankungen

ordnung des GOTS-Resonators mit einer Dipolstrahlenquelle, deren Polarisationsachse in der Einstrahlungsebene liegt. Der Modenrührer wurde ausgebaut, so daß die Feldverteilung, die durch die feststehende, berandende Geometrie hervorgerufen wird, störungsfrei untersucht werden kann. Die Applikatorbewandung ist verlustbehaftet und mit einem Reflexionsfaktor von 99% vorgegeben.

Eine stark inhomogene Struktur der Energiedichte ist aus der Simulation in Abb. 24 ersicht-

lich. Zu der blasenartig verteilten Interferenzstruktur der stationären Energiedichte kommen strukturierte Feldüberhöhungen hinzu, die durch Fokussierungseigenschaften der äußeren Applikatorgeometrie hervorgerufen werden. Zwei säulenförmige, zylindrische Kaustiken in der linken Bildhälfte von oben nach unten verlaufend, sowie zwei sich nach oben anschließende kaustische Feldüberhöhungen, die durch den sphärisch geformten Deckel hervorgerufen sind, kennzeichnen signifikant die Feldverteilung dieser Anordnung. Das Foto (links) zeigt eine in der dargestellten Simulationsebene gemessene Verteilung mit Thermopapier, allerdings mit dem realen eingekoppelten Gaußschen Strahl der GOTS-Anlage. Die starke Kugelkaustik, in dieser Messung als durchgehende braune Brandspur zu sehen, ist in Form und Lage in direkter Übereinstimmung mit der Simulation. Die in der Simulation ausgebildete zylindrische Kaustik ist im Experiment schwerer nachzuweisen und konnte in Messungen in einer solchen Stärke nicht reproduziert werden; auch konnten nicht die schwächeren Sekundärkaustiken in Experimenten nachgewiesen werden.

Bei dieser Messung zeigte sich zudem die zuvor angesprochene Schwierigkeit, mit einer Thermopapiermessung in repräsentativer Weise Verteilungsstrukturen in ihrer Gesamtheit quantitativ zu erfassen: der einfallende Strahl selber, als ein Gebiet sehr hoher Intensität (an der Stelle des Modelldipols rechts zu finden) konnte selber mit dem Thermopapier nicht aussagekräftig detektiert werden. Es bleibt als Schlußfolgerung, daß die Dipoleinkopplung für Simulationen durch eine realistischere Einstrahlungsmodellierung zu ersetzen ist.

4.2.2 Die mittlere Feldverteilung mit rotierendem Modenrührer

Die folgende Simulationsstudie zeigt den Einfluß eines Modenrührers als Optimierungshilfsmittel für einen Zugewinn an Feldhomogenität am Beispiel der bisher benutzten einfachen Dipoleinkopplung auf. Der Modenrührer wurde für diese Rechnungen als eine flache, reflektierende Metallscheibe modelliert. Dieser Rührer rotiert unter einem Deviationswinkel von $\delta = 7^\circ$ in $N_\Phi = 20$ Schritten von $\Delta\Phi = 18^\circ$ um die zylindrische Rotationsachse. Die dargestellte Energiedichte wurde dann berechnet als der Mittelwert aller einzelnen Rührerstellungen

$$\bar{w}(\vec{x}) = \frac{1}{N_\Phi} \sum_{i=1}^{N_\Phi} w_i(\vec{x}) \quad (187)$$

Das experimentelle Pendant dieser Konfiguration ist ein Thermopapier, das über die gesamte Periode des Rührers von $\Delta t_{Stirr} = 12\text{s}$ den Millimeterwellen exponiert wird. Aus dem Thermopapierfoto in Abb. 25 ist deutlich eine weitaus gleichmäßigere "Ausleuchtung" des Thermopapiers ersichtlich; die blasenartige, körnige Struktur ist verwischt. Eine signifikante Phasenstruktur ist oberhalb des in dieser Messung gut detektierten eingekoppelten Strahles an der rechten Applikatorbewandung zu sehen. Wir erkennen in Simulation und Experiment in Abb. 25 unmittelbar das Verschwinden der gekrümmten Kugelkaustik im Vergleich zu Abb.

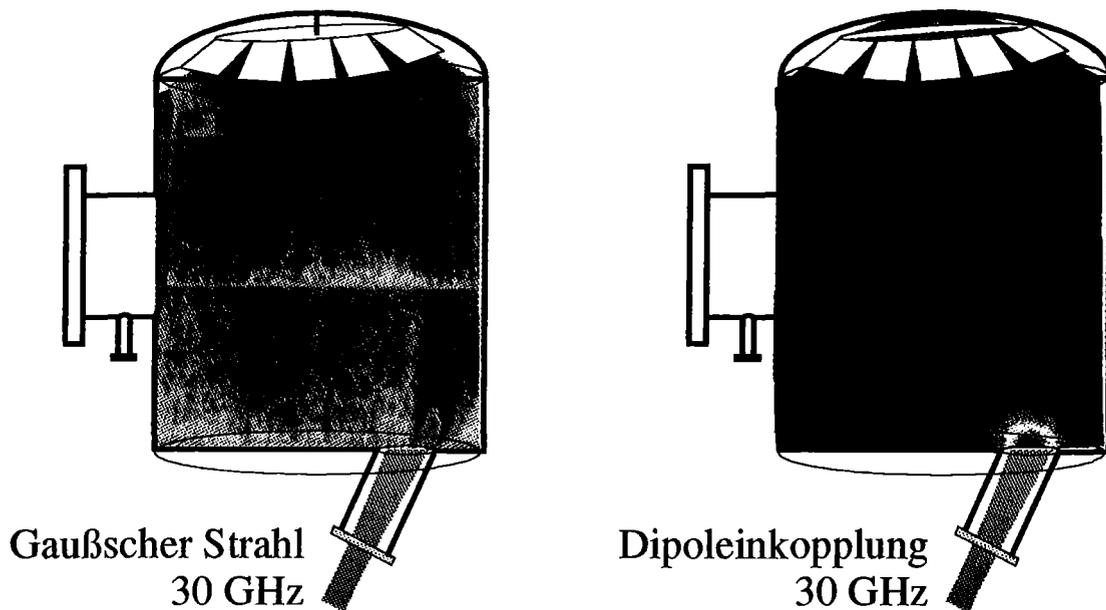


Abbildung 25: Glättung des mittleren Feldes durch einen rotierenden Modenrührer

24. Dies kommt durch die abschirmende Wirkung des Rührers hinsichtlich des sphärisch geformten Deckels. Durch die Modellierung des Rührers als flache Scheibe, die im Gegensatz zu der abgebogenen Lamellenstruktur des realen Rührers den sphärisch gekrümmten Deckel nicht voll abdeckt, bleibt dennoch eine restliche Feldüberhöhung bestehen. Die Simulation zeigt deutlich eine Homogenisierung des Feldes und eine räumliche Aufweitung der berechneten Zylinderkaustiken mit einhergehender Abschwächung.

Simulation und Experiment legen nahe, daß durch die Verwendung eines Modenrührers auf ein weitaus gleichmäßigeres Feld geschlossen werden kann. Dieses pauschale Ergebnis werden wir im folgenden Kapitel allerdings beim GOTS-Applikator in der Anwendung für die keramische Materialverarbeitung aus realistischen Simulationen und experimentalen Ergebnissen relativieren müssen.

4.3 GOTS Applikatoruntersuchungen mit Quasi-Gaußschem Strahl

4.3.1 Die Feldverteilung ohne Modenrührer

Wir wenden uns jetzt den Ergebnissen einer, mit dem Strahlverfahren realistischen Modellierung der GOTS-Gegebenheiten in einer MiRa-Studie zu. Als Strahlungseinkopplung wird diesmal ein Gaußscher Strahl benutzt. Abb. 26 und Abb. 27 zeigen das MiRa-Simulationsergebnis zunächst wieder ohne Verwendung eines Modenrührers. Das Thermopapier in Abb. 26 wurde hier einer geringeren Leistung ausgesetzt als beim vergleichbaren Experiment von Abb. 24.

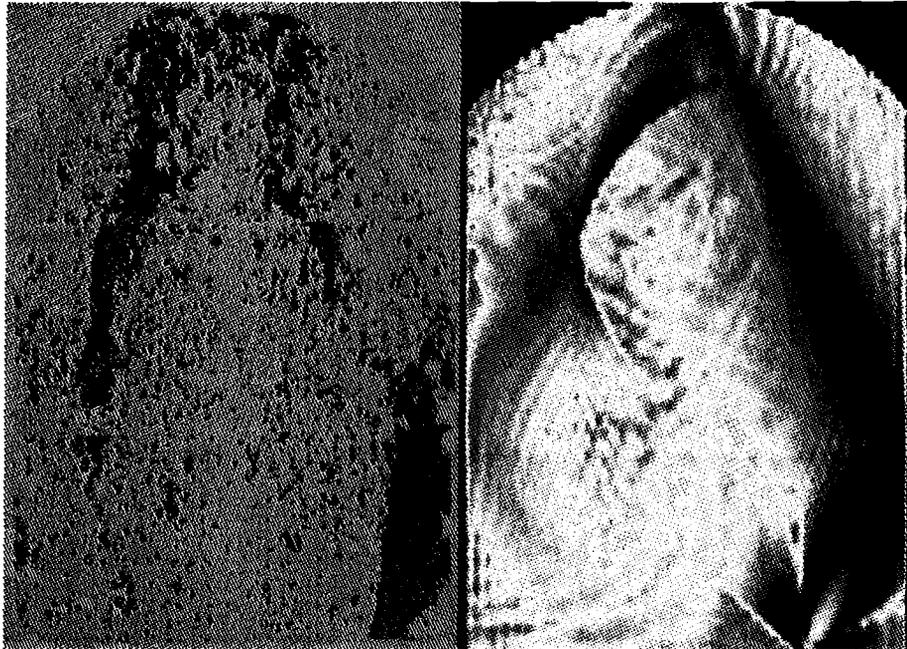


Abbildung 26: Einzelne Messung und MiRa-Simulation

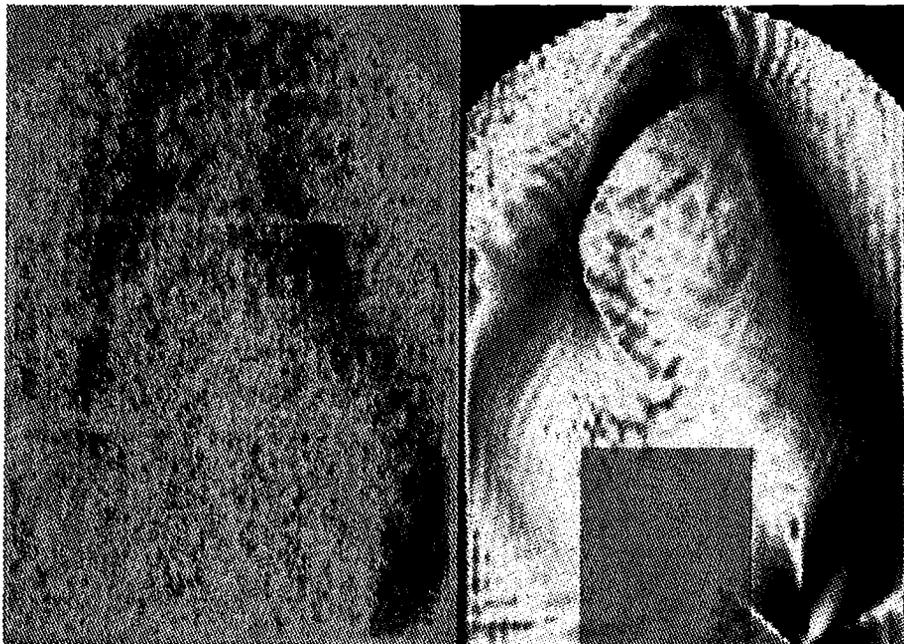
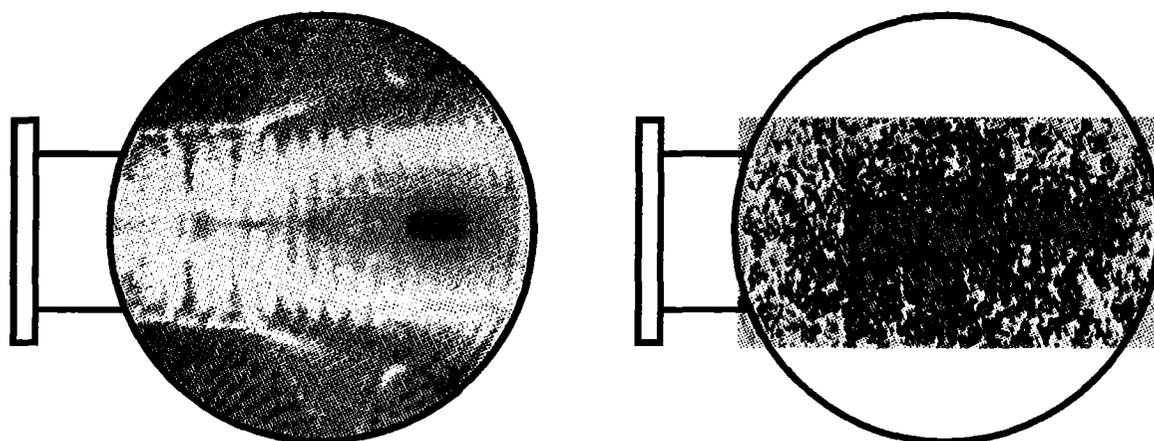


Abbildung 27: Fotografische Überlagerung mehrerer Thermopapiere zum Nachweis der Strahlreflexion. Der definierte Prozeßbereich im Applikator ist grau hervorgehoben.

Betrachten wir zunächst das Foto von Abb. 26. Es zeigt sich wiederum eine körnige Struktur der Feldverteilung mit Regionen starker Feldüberhöhung im Bereich der Kugelkaustik, in der Lage und Form äquivalent zu Abb. 24. Der einkoppelnde Strahl wird im unteren Bereich deutlich aufgelöst (teilweise als Brandstruktur im Thermopapier), eine Reflexion des Strahls ist scheinbar im mittleren Abschnitt des Bildes allerdings nicht mehr erkennbar. Diese Strahlreflexion zeigt dagegen deutlich eine computerunterstützte fotografische Überlagerung von sieben verschiedenen, dem Wellenfeld unter gleichen Bedingungen exponierten Thermopapieren, die einen repräsentativen Nachweis dieser in der Simulation gezeigten Struktur aus dem Experiment her erlaubt. Die Simulation mit dem MiRa-Code zeigt nun im Vergleich zur Modelldipoleinkopplung sehr gute Übereinstimmung. Es sind keine Doppelkaustiken mehr erkennbar. Die Existenz einer Zylinderkaustik aus der Simulation ist nicht unmittelbar ersichtlich. Wie genauere Analysen der Daten zeigten, existiert nach wie vor eine Zylinderkaustik, allerdings hebt sie sich in der Intensität nicht mehr wesentlich von dem Umgebungsfeld ab. Wir werden diese Feststellung bei den Ergebnissen für die Verwendung eines Modenrührers auf bessere Weise erkennen können. Im Querschnittsbild zur zylindrischen Achse (Abb. 28)



MiRa-Feldquerschnitt

Thermopapiermessung

Abbildung 28: Querschnittsfeld im GOTS-Applikator ohne Modenrührer

zeigt sich in Simulation und Messung deutlich eine vom Zentrum nach außen hin abnehmende Energiedichteverteilung, die eine Längsstruktur aufweist. Moden am Rand des Applikators sind damit in geringerem Maße angeregt als Moden in der Nähe der zylindersymmetrischen Achse.

Wir können an dieser Stelle aus Simulation und Experiment zusammenfassen, daß eine homogene Feldverteilung bei dieser äußeren geometrischen Anordnung ohne zusätzliche Hilfsmittel selbst im kleineren räumlichen Maßstab nicht realisiert wird. Eine für die Materialverarbeitung

notwendige näherungsweise homogene Feldbedingung ist daher nur in einem kleinen Teilvolumen des zylindrischen Applikators aufzufinden. Abb. 27 zeigt das definierte, quaderförmige Arbeitsvolumen auf. Dieses entspricht dem vom IAP empfohlenen und selbst verwendeten Prozeßvolumen.

4.3.2 Die mittlere Feldverteilung mit rotierendem Modenrührer

Die Ergebnisse mit dem MiRa-Code, unter der Berücksichtigung eines Modenrührers und Einkopplung eines Gaußschen Strahls zeigen für das mittlere Feld (analog Gleichung (187)) sehr gute Übereinstimmung mit den Thermopapiermessungen. Eine sehr homogene Verteilungsstruktur des Feldes in Simulation und Experiment (Abb. 29) ist über eine Rührerperiode erkennbar. Die beim Thermopapier bei eingeschaltetem Rührer deutlich sichtbare signifikante Phasenstruktur entlang der rechten Applikatorbewandung (Abb. 25 und Abb. 29) zeigt sich in den Simulationen ebenfalls am klarsten für das gemittelte Feld. Bei einzelnen Momentaufnahmen der Rührerstellung (Abb. 31) weist sie eine zerfrantere Struktur auf. Die

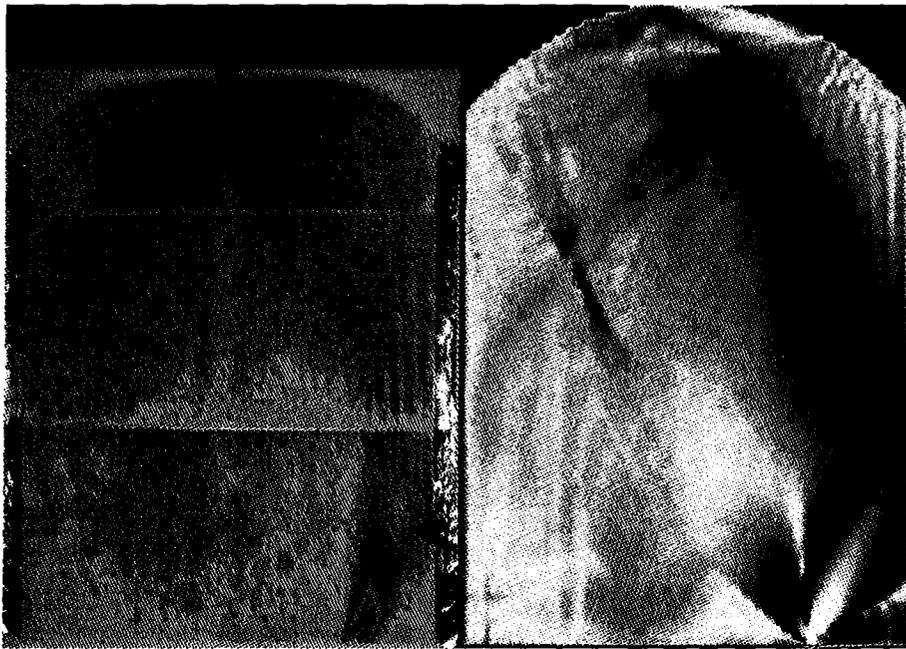


Abbildung 29: Gemitteltes Feld des GOTS-Applikators mit Modenrührer

im Querschnitt (gemitteltes Feld, Abb. 30) sichtbare, vom Achsenzentrum zum Rand hin abfallende Energiedichte ist auf der der Einkopplung abgewandten Seite durch die Verwirbelung des vom Modenrührer reflektierten Strahls stark geglättet. Sie weist eine hantelförmige Struktur auf, die sich von der Einkopplungsseite zur gegenüberliegenden Seite länglich durch den Applikator zieht. Diese Struktur ist deutlich in der dazugehörigen Thermopapiermessung

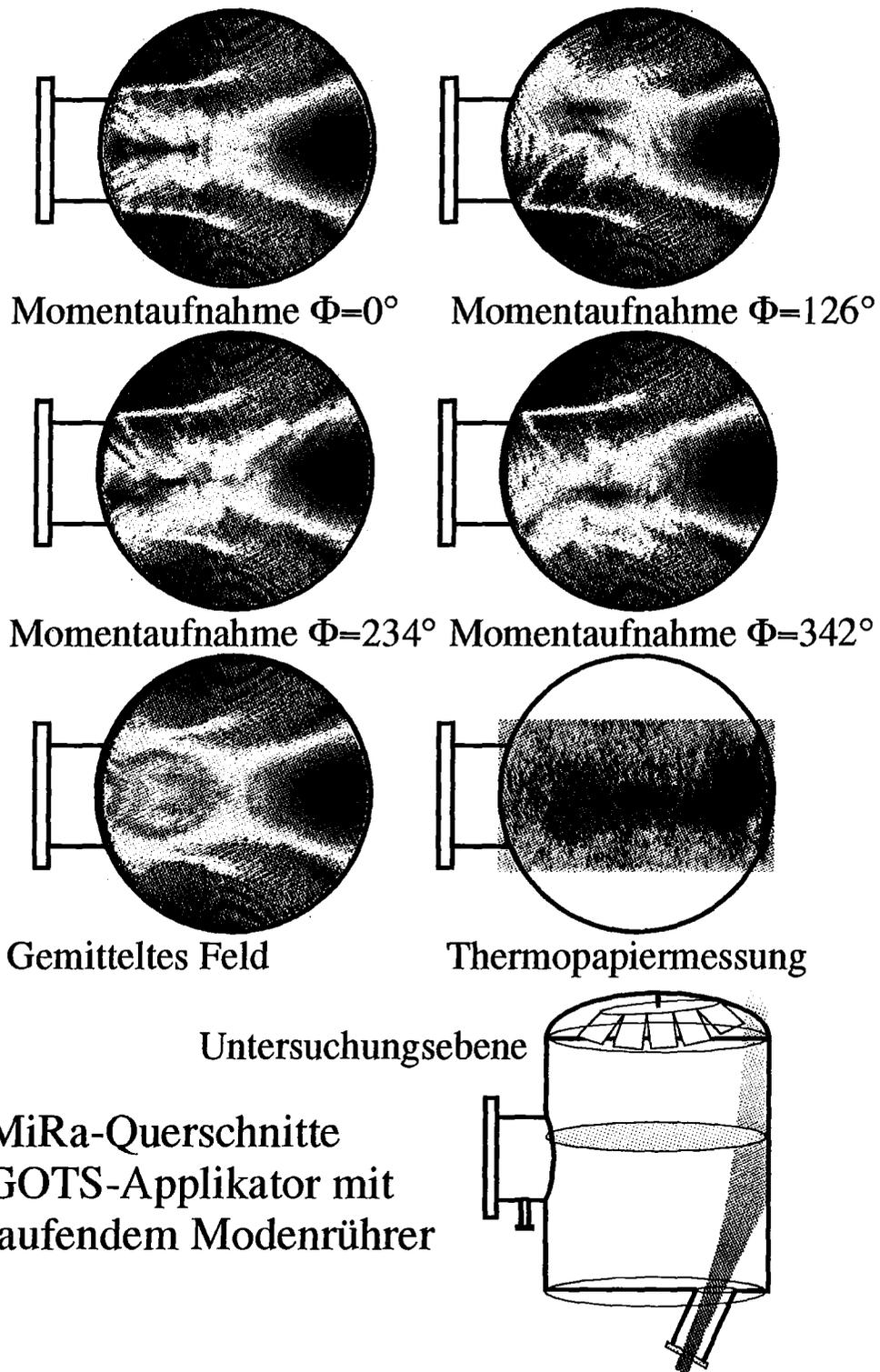
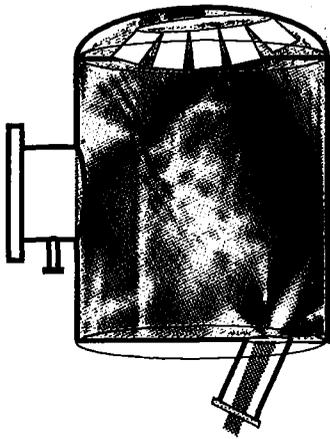
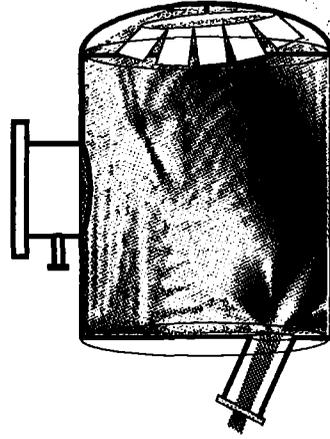


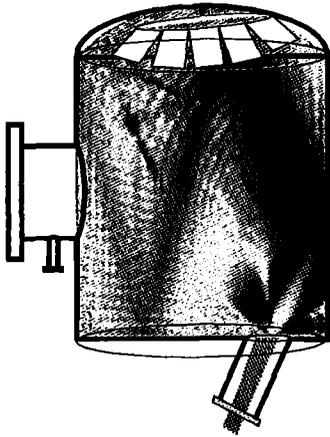
Abbildung 30: Momentaufnahmen der Energiedichte in einer Querschnittsebene



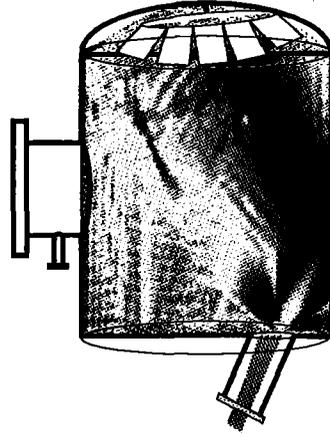
Momentaufnahme $\Phi=0^\circ$



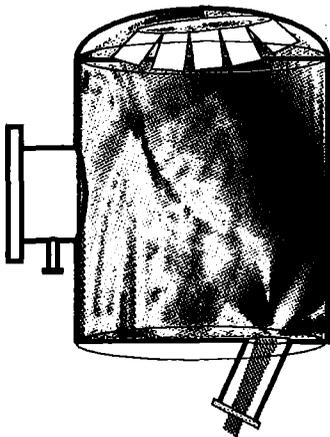
Momentaufnahme $\Phi=126^\circ$



Momentaufnahme $\Phi=180^\circ$



Momentaufnahme $\Phi=234^\circ$



Momentaufnahme $\Phi=342^\circ$

MiRa-Querschnitte
GOTS-Applikator mit
laufendem Modenrührer
in der Einkopplungsebene

Abbildung 31: Momentaufnahmen der Energiedichte in der Einkopplungsebene

in Abb. 30 ersichtlich. Eine leichte Zylinderkaustik, in Abb. 31 im Intensitätsunterschied als säulenförmige Struktur (im linken Drittel) schwer erkennbar, ist durch die bewegte Analyse der berechneten Feldverteilungen aufeinanderfolgender Rührerstellungen deutlicher zu erkennen [52], [53].

Im Experiment, um keramische Pulver mit dieser Anordnung unter Benutzung des Mo-

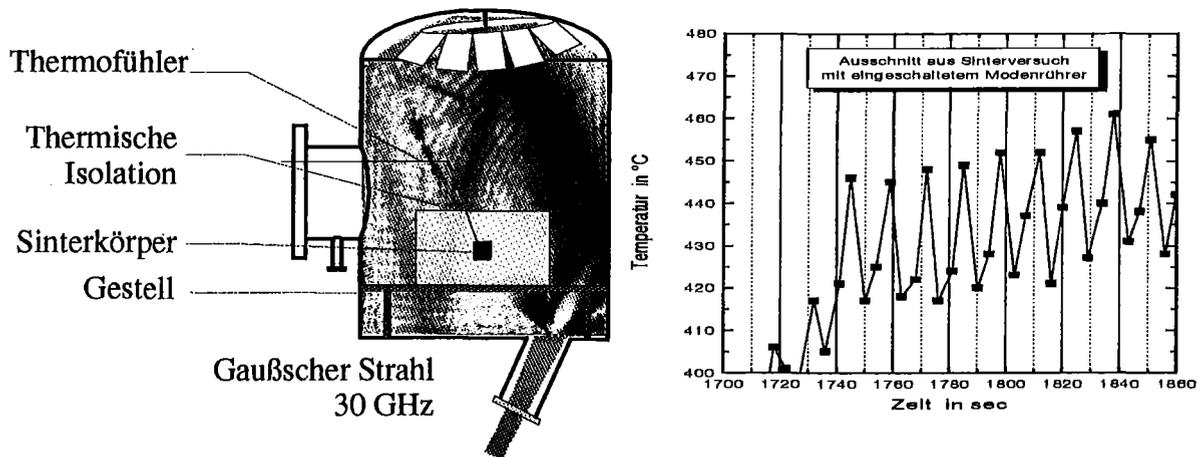


Abbildung 32: Temperaturmessaufbau und Temperaturmessung mit Modenrührer

denrührers und dem damit verbundenen homogenen Feld vermeintlich besser zu Sintern, zeigten sich Probleme wie ungleichmäßige Verdichtung auf, die auf eine inhomogene Erhitzung der Grünkörper zurückzuführen sind. In der Praxis konnte auch mit Modenrührer nur ein eingeschränkter Bereich des Applikatorvolumens zum Sintern einzelner Grünkörper verwendet werden. Das damit verbundene Arbeitsvolumen unterscheidet sich nicht in seinen Dimensionen vom Gebiet, daß ohne Modenrührer festgelegt wurde. Lediglich $\approx 20\%$ des zur Verfügung stehenden Raumes sind nutzbar. Temperaturmessungen an Proben zeigten dann bei verschiedenen Heizexperimenten (Abb. 32) von Keramiken Schwankungen des Temperaturverlaufs, die mit der Umlaufperiode des Rührers korreliert waren. Die vorliegende MiRa-Studie führte zur Aufklärung dieser Phänomenologie und zeigte die Ursache dieser periodisch auftretenden Hot-Spots an den Grünkörpern.

Bedingt durch die Rotation des Rührers wird der auftreffende Strahl nach unten in den Applikator reflektiert und läuft während einer Periode auf einer Kegeloberfläche um. In Abb. 30 sind im Querschnitt verschiedene Momentaufnahmen für den Strahl dargestellt. Man erkennt in den Bildern eine wandernde Feldüberhöhung, die auf einer geschlossenen Bahn umläuft. Im gemittelten Feld ergibt sich aus dem umlaufenden reflektierten Strahl die besagte hantelförmige Feldstruktur. In Abb. 32 ist der Zustand eines direkten Treffers des Strahls auf die Isolation

dargestellt (siehe dazu auch Abb. 31 für $\Phi = 180^\circ$). Es resultieren damit Feldüberhöhungen im Arbeitsbereich, was signifikante Temperaturerhöhungen an der thermischen Isolation, bzw. der Keramik zur Folge hat. Die beabsichtigte Wirkung dieses Hilfsmittels, alleinig die Modenstruktur signifikant zu variieren, zeigt sich damit nicht aus Experiment und Simulation. Vielmehr wirkt er primär als "Amplitudenrührer" für die Feldmittelung, anstatt als Modenrührer.

Abschließend ist für diese, von IAP entwickelte Originalkonfiguration festzuhalten, daß zur Sinterung mehrerer Proben keine ausreichend günstigen Rahmenbedingungen vorliegen. Das Verhältnis $\frac{L}{\lambda} \approx 50$ zeigt in der Dimensionierung des GOTS-Applikators (100 l Volumen) eine Vielzahl anregbarer Moden auf. Die vorliegende Geometrie führt jedoch zu Feldinhomogenitäten und deutlichen Feldgradienten: im Zentrum sind mehr Moden angeregt, zum Rand nimmt die Anregung ab. Dieses Verhalten reduziert das effektive Arbeitsvolumen. Der installierte Rührer bringt, allerdings nur im idealen Mittel, eine wesentliche Verbesserung. Durch die langsame Umlaufperiode jedoch treffen Reflexionsanteile des eingekoppelten Strahls zeitweilig auf die Probe und verursachen schwer kontrollierbare, schädliche Einflüsse auf das Sinterverhalten einer eingebrachten Keramik. So wiesen Proben Risse und Verzerrungen bei der Schrumpfung auf, die weit über den Toleranzen lagen. Für die industrielle Anwendung einer vergleichbar dimensionierten Applikatoranordnung besteht damit ein wesentlicher Bedarf einer gezielten Optimierung.

4.4 Optimierungsstrategien zur Applikatorauslegung

Verschiedene Konfigurationen zur Optimierung hochmodiger Applikatoren können mit dem MiRa-Code untersucht werden. Primär stellt sich dabei das Ziel, die äußere Geometrie des Applikators zunächst ohne Hilfsmittel (wie Modenrührer) derart zu modifizieren, daß ein möglichst großräumig homogenes Arbeitsvolumen im Vergleich zur bestehenden Anlage erreicht wird. Die bisher präsentierten Ergebnisse der zylindersymmetrischen GOTS-Geometrie zeigten die Eigenschaft einer verstärkten Modenanregung im Zentrum des Applikators, eine Neigung Kaustiken zu bilden, sowie die Bildung blasenartiger Interferenzstrukturen und Interferenzschwankungen. Differentiell ist im optischen Strahlenbild die Neigung zur Feldfokussierung durch die intrinsische Topologie der äußeren Geometrie determiniert (163). Die Vermeidung gekrümmter Flächen bedeutet, die Originalgeometrie abschnittsweise durch ebene glatte Flächen zu ersetzen. Diese Aussage stellt für unser Vorgehen einen Grundansatz dar.

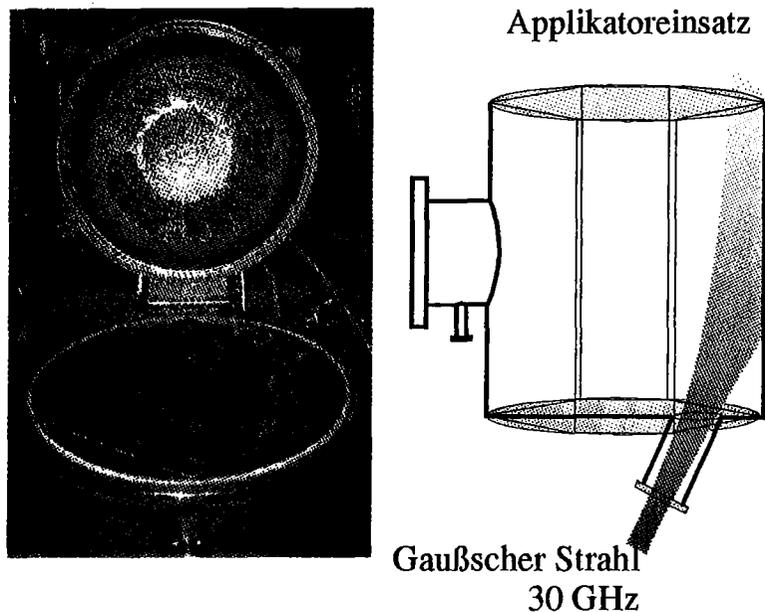


Abbildung 33: Experimenteller Aufbau zur polygonalen Optimierungsstudie

4.4.1 Polygonale Optimierungsstudie

Die im folgenden dargestellte Studie untersucht eine Klasse von Applikatorgeometrien unter Vermeidung von gekrümmten Flächen. Die Abkehr von einer zylindrischen Bewandung (topologisch eine zusammengerollte Ebene mit den Hauptradien $r_1 \rightarrow \infty, r_2 = r_{\text{Zylinder}}$) zu einer topologisch ebenen bedeutet, polygonale Querschnittsgeometrien zu untersuchen. Die Gullstrandschen Gleichungen für die Reflexion (165) lauten dann trivialerweise

$$\frac{1}{\rho'_p} = -\frac{1}{\rho_p} \quad , \quad \frac{1}{\rho'_q} = -\frac{1}{\rho_q} \quad (188)$$

wobei die Hauptkrümmungsradien der abschnittswisen Ebenen ($\rho_{sp} \rightarrow \infty, \rho_{sq} \rightarrow \infty$) divergieren. Eine kaustische Fokussierung ist damit vollständig ausgeschlossen, die reflektierte Wellenfront wird gespiegelt, aber nicht verzerrt.

Zum Austesten eines potentiellen Prototypen wurden diese Querschnitte so gewählt, daß sie in den zylindrischen Querschnitt eingeschrieben sind um eine direkte Anwendung im Experiment über einen einfachen Metalleinsatz im zylindrischen Applikator realisieren zu können. Abb. 33 gibt einen Eindruck vom experimentellen Aufbau.

Die Position, bzw. Art der Einkopplung des Gaußschen Strahls in den Applikator wurde bei dieser Studie unverändert belassen. Für das weitere Vorgehen, um großräumig homogene Bedingungen im Applikator zu erhalten, gehen wir von folgenden Optimierungspostulaten aus:

- Bereitstellung einer möglichst hohen Symmetrie von Einkopplung und Applikatorgeo-

metrie zueinander.

- Vermeidung intrinsisch gekrümmter Oberflächen.
- Verstärkte Anregung von Eigenmoden am Rand des optimierten Applikators.

In Bezug auf die Symmetrieforderungen können wir unmittelbar für polygonale Geometrien ableiten, daß entweder

- der Strahl auf einer Stirnseite zentriert, oder
- der Strahl auf eine Kante zentriert

die äußere Geometrie zu beaufschlagen hat. Eine beliebige Orientierung des polygonalen Querschnitts hätte konsequenterweise Feldgradienten zur Folge. Die symmetrischen Konfigurationen sind in Abb. 38 für unsere Untersuchungen am Beispiel eines hexagonalen Einsatzes dargestellt. Der sphärisch geformte Deckel mit Modenrührer wurde in Simulation und Experiment durch eine einfache metallische Abdeckscheibe ersetzt. Keine weiteren Hilfsmittel, wie Modenrührer oder Diffusoren werden benutzt.

4.4.2 Ergebnisse der Optimierungsstudie

Ergebnisse der MiRa-Berechnungsstudie werden für Polygone mit vier- bis achteckigem Querschnitt bei jeweiliger Kanten- und Wandbeaufschlagung graphisch in Abb. 35 und tabellarisch in Abb. 36 dargestellt. Um einen quantifizierbaren Wert zu erhalten, führen wir den Designparameter

$$\Delta_d = \frac{\sigma_{|E|^2}}{\langle |E|^2 \rangle} \quad (189)$$

ein. $\sigma_{|E|^2}$ ist dabei die Standardabweichung des Mittelwertes $\langle |E|^2 \rangle$. Diese statistischen Werte beziehen sich auf das im originalen zylindrischen GOTS Applikator definierte Arbeitsvolumen. Δ_d ist folglich eine dimensionslose Kennzahl mit der Eigenschaft

$$\text{Idealfall : } \Delta_d \rightarrow 0 \quad (190)$$

für den idealen Applikator, d.h. keine Streuung der Feldstärke, bzw. unendlich hohe Energiedichte. Ein möglichst kleiner Designparameter Δ_d kennzeichnet damit eine signifikante Verbesserung der Feldbedingungen innerhalb des konstant gehaltenen Arbeitsvolumens, d.h. minimale Streuung bei maximaler Energiedichte. In Abb. 35 bzw. Abb.36 ist der Designparameter Δ_d normiert auf den ungünstigsten Fall.

Untersuchen wir zunächst den Fall der Wandbeaufschlagung. Wir erkennen, nach einem leichten Anstieg von Δ_d beim Pentagon, eine stetige Abnahme des Designwertes mit steigender

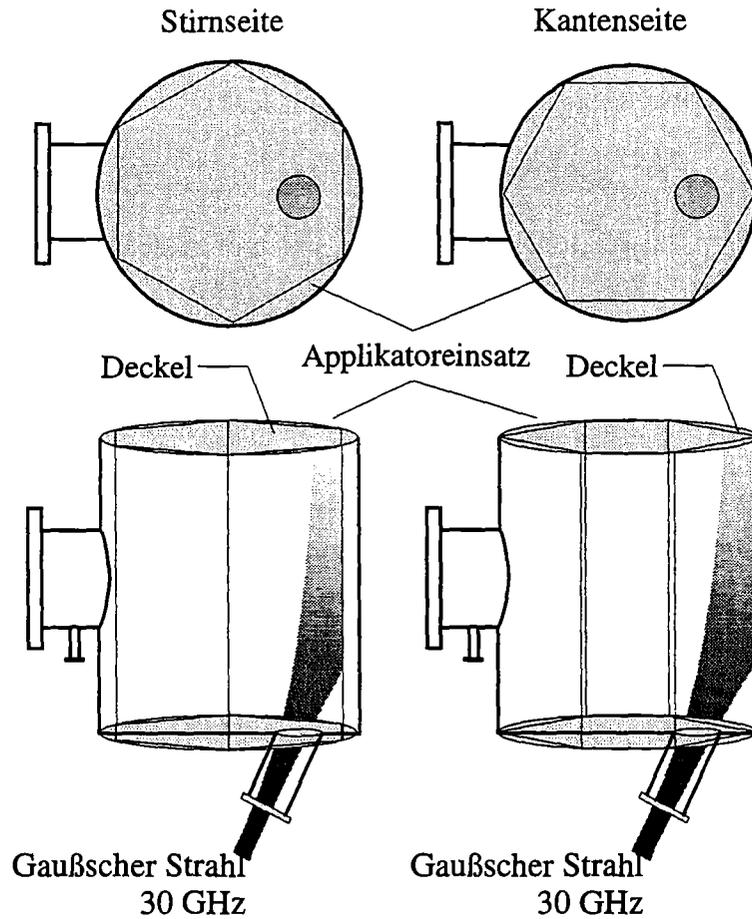


Abbildung 34: Klassifizierungsschema der prismatischen GOTS-Studie

Anzahl der polygonalen Ecken in diesem Fall. Zusätzlich sind die Δ_d -Werte der zylindrischen Originalgeometrie (Kante entspricht dabei Wandbeaufschlagung) angegeben. Der Homogenitätsgewinn eines ideal schnellen Modenrührers kann damit aus diesen Zahlen unmittelbar festgestellt werden. Die Wandbeaufschlagung der Polygone läßt im Verlauf keine Verbesserung gegenüber der zylindrischen Originalgeometrie erkennen. Vielmehr zeigt sich, daß sich mit steigender Polygonzahl die Verhältnismäßigkeiten der Feldhomogenität und Energiedichten des reinen Zylinders angleichen.

Weitaus interessanter verlaufen die Ergebnisse bei der Kantenbeaufschlagung. Auch hier ist zunächst ein Anstieg, diesmal in weitaus stärkerem Maße von Δ_d beim Pentagon gegeben. Beim Vergleich der Werte fällt auf, daß geradzahlige Polygone bei der Kantenbeaufschlagung durch ihre höhere Symmetrie günstiger auf die Feldbedingungen wirken, als ungerade. Gerade und ungerade Polygone laufen in alternierender Weise, d.h. die geraden von einem günstigeren Δ_d und die ungeraden von einem ungünstigerem Δ_d -Wert kommend auf die Grenzeigenschaften

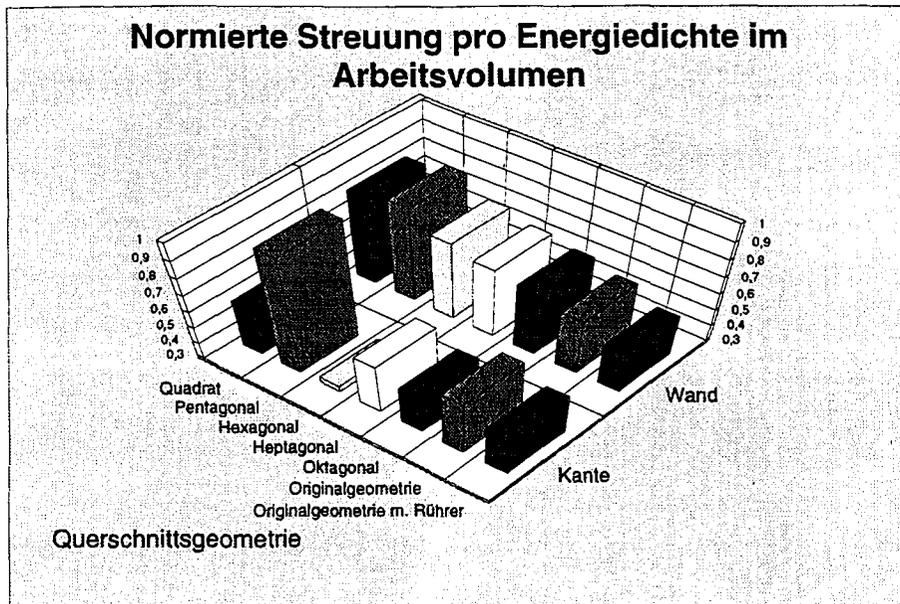


Abbildung 35: Ergebnisse der Geometriestudie im Balkendiagramm

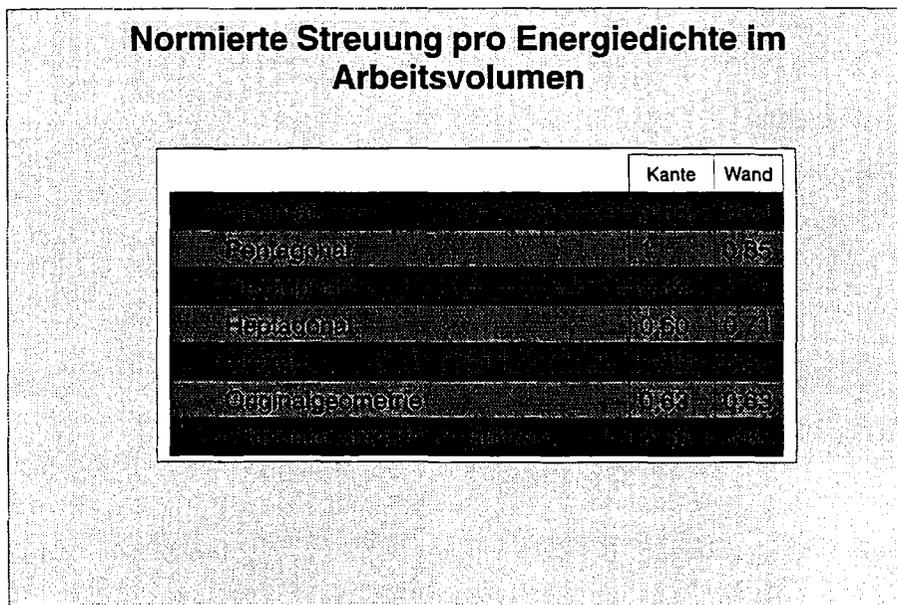


Abbildung 36: Quantitative Optimierungszahlen der Geometriestudie

ten der glatten Zylindergeometrie zu. Ein deutlich ausgeprägtes Minimum von Δ_d ist für eine hexagonale Geometrie erkennbar. Dieser Wert liegt weit unterhalb des Δ_d Wertes, der mit einem idealen Modenrührer im zylindrischen Applikator erreichbar ist. Wir erfüllen mit dieser ausgezeichneten Konfiguration die zuvor aufgestellten Optimierungspostulate am besten.

4.4.3 Untersuchungen zur hexagonalen Geometrie

Die Kantenebenen wirken strahlteilend auf den Primärstrahl. Dieses kommt für die Ausbreitung der geteilten Strahlen beim geradzahligen Hexagon mit seiner Wabenform durch die hohe Symmetrie in der Form zum Tragen, daß der aufgeteilte Primärstrahl an der ebenen Wand entlangläuft, bei der nächsten Kante erneut aufspalten wird und so hinsichtlich des axialen Zentrums sich von außen nach innen schnell verteilt. Damit werden gezielt und hinsichtlich des Applikatorinneren gleichmäßig Moden am Rand des Applikators angeregt. Im

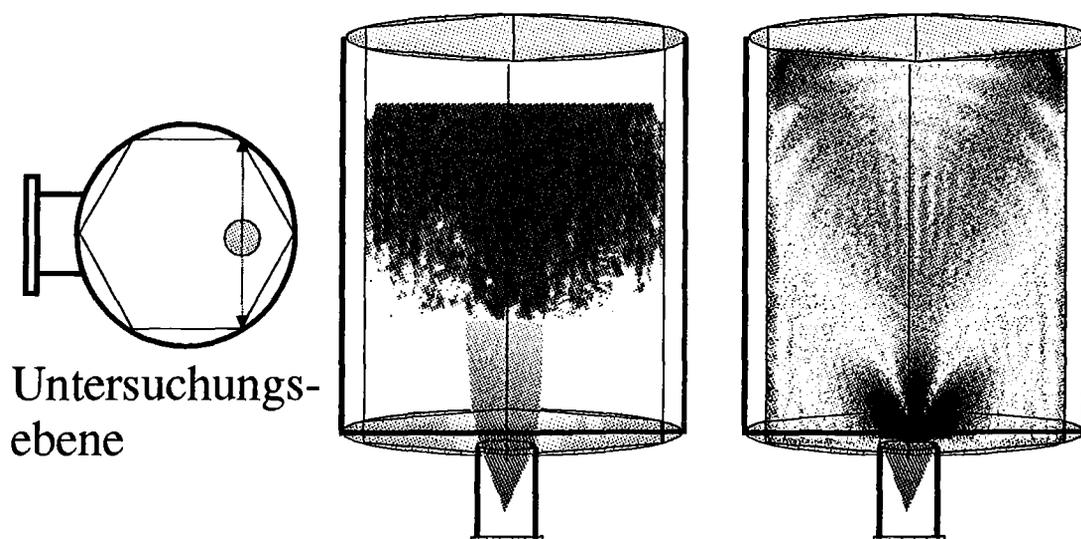


Abbildung 37: Der geteilte Strahl hebt sich vom Hintergrundfeld kaum ab

MiRa-Querschnitt von Abb. 38 können solche aufgeteilte Strahlen höherer Reflexionsordnung als kleine rote Hot-Spots in den Ecken erkannt werden. Die Teilung des Primärstrahls konnte am Thermopapier in Abb. 37 nachgewiesen werden. Der aufgeteilte Sekundärstrahl ist in seiner Intensität auf dem Thermopapier vom Hintergrundfeld kaum noch auflösbar; es sind keine Brandflecken erkennbar. Der in dieser Ebene abgebildete Feldschnitt des MiRa-Codes zeigt sehr gute Übereinstimmung mit der Messung. Das vorliegende Foto wurde über Bildverarbeitungsalgorithmen etwas aufgehellt, um die Reflexionsstrukturen klarer hervortreten zu lassen.

Abb. 38 zeigt zusätzlich Thermopapieraufnahmen im Vergleich zu MiRa-Schnitten der Feld-

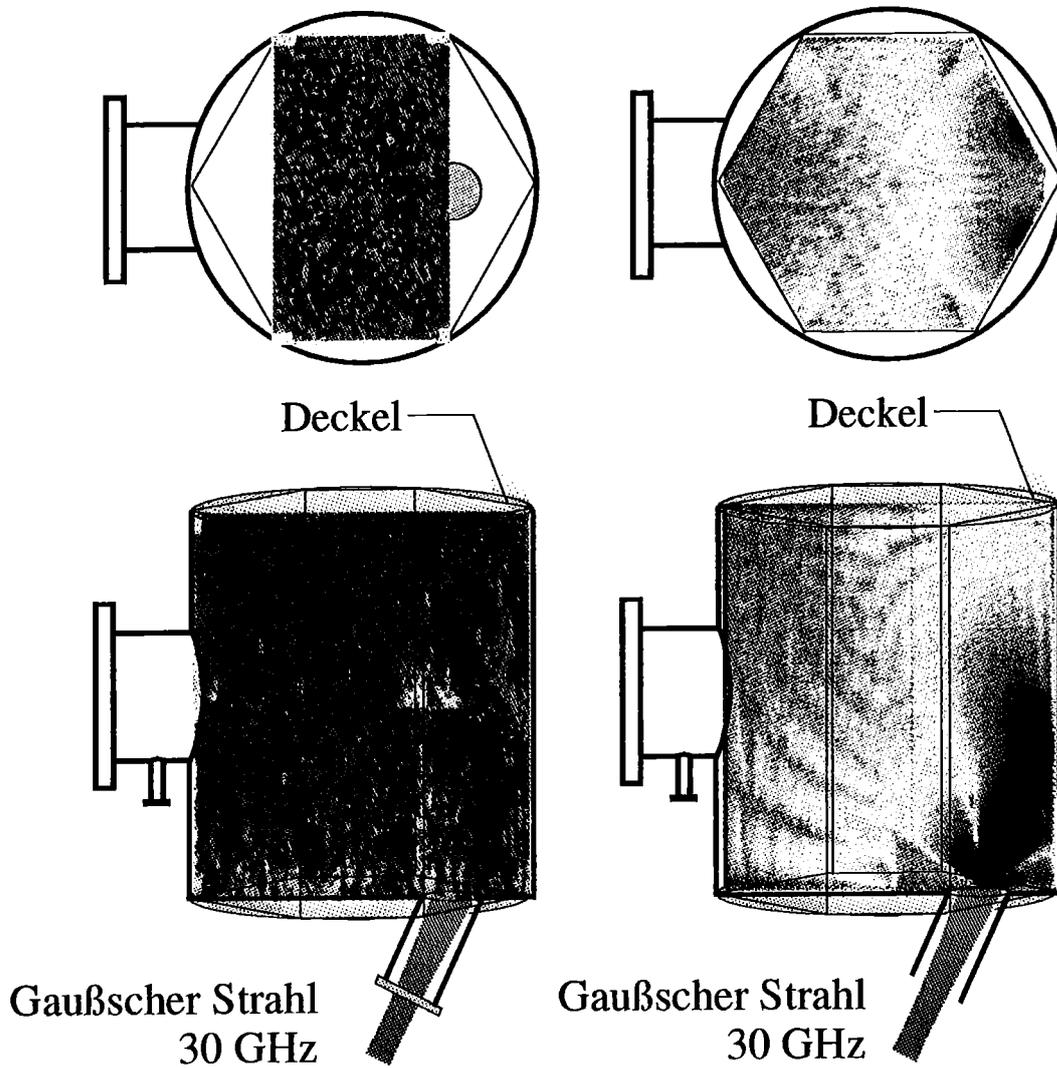


Abbildung 38: Vergleich von Messung und Simulation

verteilung mit einem hexagonalen Einsatz. Die Thermopapiere weisen eine homogen anmutende Schwärzung im gesamten Querschnitt auf, wie sie bisher bei Experimenten ohne Modenrührer nicht zu erhalten waren. Die typisch blasenartige Struktur ist verschwunden. In der dargestellten Querschnittsebene zeigt sich an einem bis zum Anschlag belichteten Thermopapier, daß sich die Dichte der Brandflecken gleichmäßig über das Papier verteilt. Kein Abfall der Energiedichte vom Zentrum zum Rand kann ersehen werden, ebenso wie Fokussierungseffekte; das Feld schließt sich gleichförmig an die Applikatorbewandung an. Damit sind keine signifikanten Schwankungen der Energiedichte aus diesen Messungen erkennbar. Die MiRa-Simulationen zeigen in gleicher Weise eine großräumige, gleichmäßige Feldstruktur auf. Dabei ist zum direkten Vergleich mit der Originalgeometrie auf die Thermopapiermessung in Abb. 28 zu verweisen, die gerade in der hier senkrecht zur Einkopplungsebene gemessenen Orientierung des Thermopapiers einen starken Feldabfall aufwies. Auch sehen wir sofort, daß keine Stehwellenstrukturen wie bei der zylindrischen Geometrie sich ausbilden. Abb. 39 zeigt

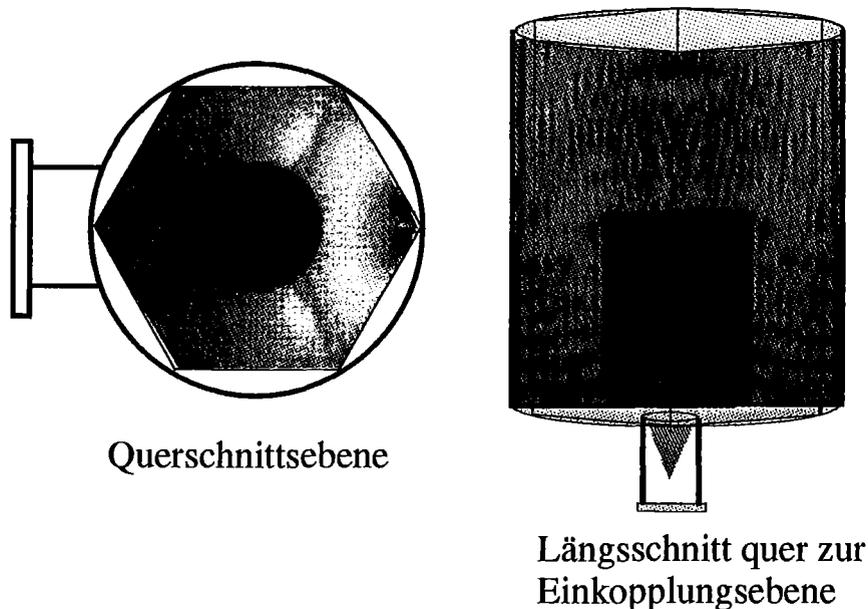


Abbildung 39: Die keramische Beladung im hexagonalen Applikator unterliegt homogenen Feldbedingungen

das Ergebnis für den hexagonalen Applikator, der hier mit einem zylindrischen Al_2O_3 Stapel bei einer höheren Temperatur mit den dielektrischen Parametern $\epsilon' = 4$, $\sigma = 0.04 \frac{\text{S}}{\text{m}}$ beladen ist. Die aus den Auslegungsrechnungen postulierten homogenen Bedingungen zeigen sich in erwarteter Weise für die keramische Beladung.

Die hexagonale Geometrie wird ein Ausgangspunkt für weitere Applikatorentwicklungen zur HF-Materialprozeßtechnik des FZK darstellen.

5 Modellierung der thermischen Sinterdynamik keramischer Werkstoffe mit HF-Wellen

Wir wenden uns nun materialwissenschaftlichen Fragestellungen für die verfahrenstechnische Anwendung von HF-Wellen zu. Um theoretische Untersuchungen zur Temperatur- und Sinterdynamik von Keramiken durchführen zu können, wurde ein weiterer Simulationscode erstellt.

Als Modellwerkstoff für diese Untersuchungen wurde Aluminiumoxid ausgewählt. Dieser stellt den verbreitetsten keramischen Werkstoff dar, über dessen Materialeigenschaften umfassendes Datenmaterial aus Messungen existiert. Zudem besitzt Aluminiumoxid sehr günstige chemische und physikalische Eigenschaften hinsichtlich grundlegender Fragestellungen der Materialprozeßtechnik. Die Eigenschaften dieses Modellmaterials werden in diesem Kapitel diskutiert, sowie die Gesetzmäßigkeiten, die für eine prozeßdynamische Temperaturberechnung in einer Keramik erforderlich sind.

Die elektromagnetische Energieverteilung in Keramiken wird über eine strenge Lösung der Maxwell'schen Gleichungen unter Berücksichtigung der Materialeigenschaften gewonnen. Dabei werden zudem Auswirkungen von Diffusoren, Modenrührern usw. auf die Feldverteilungen in einem keramischen Werkstück diskutiert. Aus den analytischen Ergebnissen und Simulationen können Rückschlüsse auf weitere Notwendigkeiten, den HF-Applikator zu optimieren, gezogen werden.

Es wird in diesem Kapitel auf den theoretischen Kontext von Kapitel 2 aufgebaut.

5.1 Verfahrenstechnische Betrachtungen zum Modellwerkstoff Aluminiumoxid Al_2O_3

Aluminiumoxid ist mengenmäßig der bedeutendste Werkstoff für ingenieurkeramische Anwendungen mit einer breiten wirtschaftlichen Ausgangsbasis [65]. Es existieren mehrere Modifikationen von Aluminiumoxid ($\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, $\beta\text{-Al}_2\text{O}_3$, $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$), von denen das hexagonale $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ die einzige thermodynamische stabile Modifikation ist. In der großtechnischen Produktion wird α -Aluminiumoxid, beispielsweise im Bayer-Verfahren bei steigenden Ansprüchen an seine definierte Reinheit und physikalische Beschaffenheit aus Bauxit (Tonerde) in einem chemischen Extraktionsprozeß gewonnen. Unter $\beta\text{-Al}_2\text{O}_3$ versteht man eine Gruppe von Aluminiumoxiden, die kleine Mengen Fremdionen im Kristallgitter enthalten. $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ (kubisch flächenzentriert) wird aus Aluminiumhydroxiden gewonnen, geht aber bei Temperaturen oberhalb von 1100°C in die $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ Modifikation über. Für unsere Untersuchungen benutzen wir hochreines $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, so daß keine Phasenübergänge für die numerische Modellierung in Betracht gezogen werden müssen.

Herausragende Eigenschaften von Aluminiumoxid sind

- chemische Beständigkeit
- mechanische Festigkeit
- Temperaturbeständigkeit
- Verfügbarkeit und günstiger Preis

Neben Aluminiumoxid sind als wichtigste keramische Rohstoffe Zirkonoxid ZrO_2 , Siliziumcarbid SiC und Siliziumnitrid Si_3N_4 zu nennen. Als Struktur, bzw. Funktionskeramik wird Al_2O_3 beispielsweise eingesetzt für

- Hochspannungsisolatoren
- Substrat für elektronische Bauteile
- Gleitringe, Dichtscheiben
- wärmedämmende Bauteile in der Automobilindustrie
- Zahnimplantate, medizinische Prothesen

Die verfahrenstechnische Umsetzung des reinen pulverförmigen Ausgangsstoffes in ein keramisches Produkt wird durch Sintern erreicht. Konventionell wird dieser Prozeß im industriellen Umfang in großen kontinuierlich betriebenen Tunnelöfen durchgeführt, die mit Gas-, Öl- oder Elektroheizung betrieben werden. Diesen Vorgang [66], bei dem das kristalline Ausgangsmaterial, nachdem es als Grünkörper in seine Werkform gepreßt wurde, unter Wärmebehandlung durch Änderung seiner Mikrostruktur einen zusammenhängenden Festkörper bildet, werden wir unter dem Aspekt des HF-Ankopplungsmechanismus modellieren und untersuchen.

Als allgemeiner Antrieb des Sintervorgangs kann die Verringerung der verfügbaren freien Oberflächenenergie für die Mikrostruktur angesehen werden (siehe Abb. 40). Diese erfolgt unter konkurrierend ablaufenden Verdichtungs- und Kornwachstumsprozessen. Für das Werkstück mit der Ausgangslänge L findet während dem Prozeß ein Sinterschrumpf auf die Länge L' , also eine Volumenkontraktion, statt. Dieser Schrumpfungsprozeß ist die kritischste Phase des Sintervorgangs, da hier bei ungleichmäßiger Kontraktion Materialspannungen und Risse oder gar 'schief' gesinterte Produkte entstehen können.

Phänomenologisch lassen sich drei Stadien des Sinterns unterscheiden:

1. Wachstum der Teilchenkontakte unter Ausbildung sogenannter Sinterbrücken. Die ursprünglichen Teilchen sind noch sichtbar und es tritt nur eine geringe Schwindung auf.

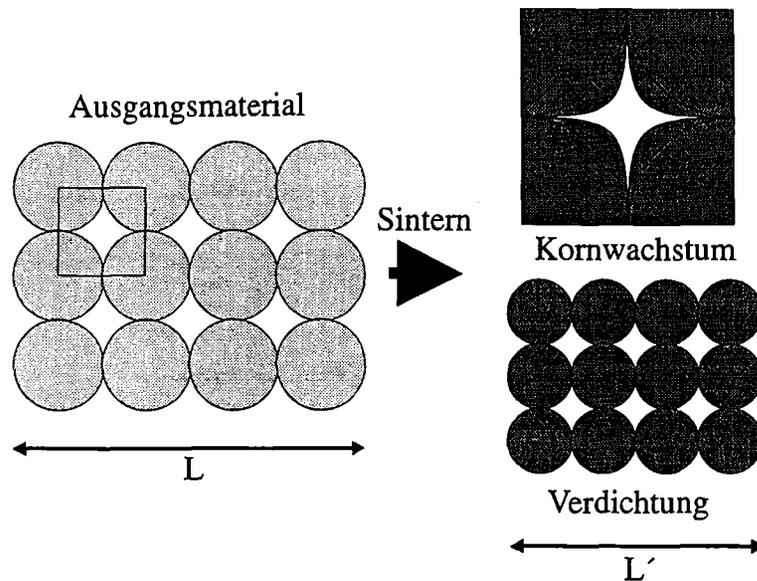


Abbildung 40: Kornwachstum und Verdichtung führen zu einer Verringerung der Oberflächenenergie

2. Ausbildung eines zusammenhängenden Porenskeletts. Die Ausgangsteilchen verlieren ihre Identität. Der Körper schrumpft unter Ausbildung neuer Korngrenzen.
3. Deutliche Schrumpfung und Schließung der Poren. Im Grenzfall erfolgt vollständige Verdichtung.

Der mikroskopische Sintervorgang selber unterliegt der Einflußnahme verschiedener, experimentell schwer zugänglicher mikrostruktureller Parameter (diese werden später in Tab.3 aufgeführt und diskutiert). Im allgemeinen hängt die Schrumpfung von der Art des Werkstoffs, der Korngrößenverteilung des Keramikpulvers, der Dichte des vorgepreßten Grünkörpers und der verfahrensspezifischen Prozeßführung ab. Experimentelle Untersuchungen und theoretische Modellentwicklung zur spezifischen Beeinflussung der kristallinen Mikrostruktur bei der Verwendung von HF-Wellen sind derzeit Gegenstand aktueller Grundlagenforschung [58]. Bislang existiert noch keine eindeutige Theorie für möglicherweise existierende und beobachtete Mikrowelleneffekte. Für unsere Untersuchungen gehen wir von einem phänomenologischen Zugang aus, wobei wir experimentell gewonnene temperaturabhängige Materialdaten zur thermischen Charakterisierung des Materials verwenden. Unser Ziel liegt nun in der Code-Entwicklung zur Simulation des nichtlinearen Aufheizungsprozesses, um Einblick in das Temperaturverhalten HF-verarbeiteter Werkstücke zu erhalten, sowie um Wechselwirkungen thermisch/elektrischer Natur und ihre Einflußnahme auf das Sinterprodukt untersuchen zu können.

5.2 Die Wärmeleitungsgleichung

Die Dissipation hochfrequenter elektromagnetischer Wellen in ionischen Kristallen stellt einen komplexen Wechselwirkungsmechanismus dar (siehe Kapitel 2.5). Die Zeitskala dieses Vorgangs ist vergleichsweise verschwindend klein (instantan) im Verhältnis zum Vorgang der thermischen Wärmeausbreitung im Körper selber. Um für dieses kollektive Festkörpersystem (keramisches Werkstück) numerisch lösbare Gleichungen gewinnen zu können, muß von einer thermodynamischen Beschreibung Gebrauch gemacht werden. Die Realisierung dieses Vorhabens führte zur Entwicklung des dreidimensionalen THESIS3D-Codes (**THE**rmodynamische **S**interungs **S**imulation). Relevante Materialeigenschaften werden in ihrer Tem-

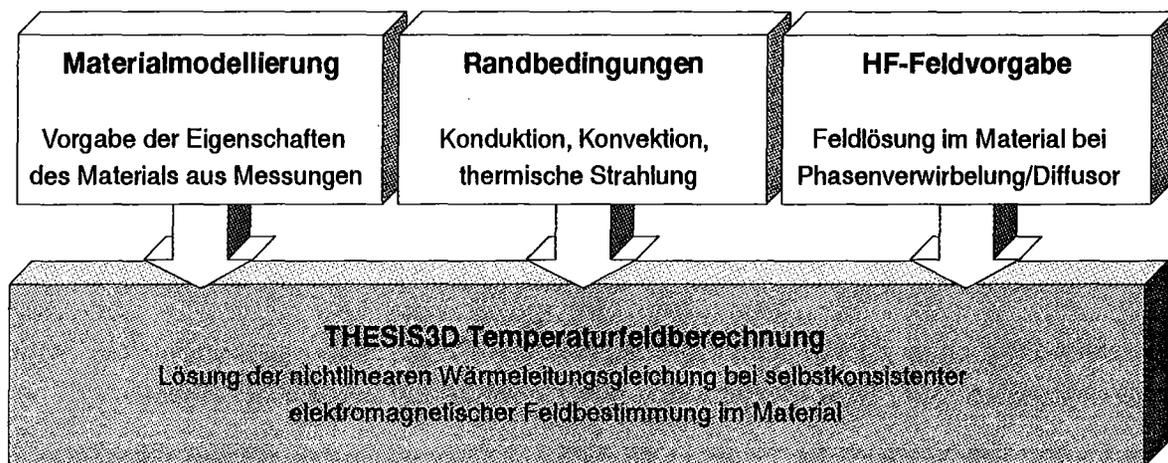


Abbildung 41: Konzeption des THESIS3D-Codes

peraturabhängigkeit für die Modellierung aus experimentellen Messungen herangezogen; die mikroskopische Dynamik, die diese Abhängigkeiten bestimmt wird dabei nicht explizit gelöst. Dieses bedeutet, daß Ionentransport- und Umsetzungsvorgänge, Kornwachstum und Kornabstände in der thermodynamischen Skala selbst nicht in die Modellierung eingehen. Energieerhaltung und Wärmeausbreitung stellen unter diesen Aspekten die grundlegenden physikalischen Gesetzmässigkeiten für das Temperaturproblem in einem materiellen Substrat dar. Der Wärmetransport erfolgt immer von dem heißeren zum kälteren Substratbereich und wird in isotropen Medien in guter Näherung durch das Fouriersche Gesetz

$$\vec{j}_T(\vec{x}, t) = -\sigma_T(\vec{x}, T) \text{ grad } T(\vec{x}, t) \quad (191)$$

bestimmt. $\vec{j}_T(\vec{x}, t)$ ist die Wärmestromdichte und $\sigma_T(\vec{x}, T)$ die thermische Leitfähigkeit, eine temperaturabhängige Materialfunktion, die wir später noch genauer spezifizieren werden. $T(\vec{x}, t)$ repräsentiert das unbekannte zeitabhängige Temperaturfeld in der Keramik selber.

Die Energieerhaltung ist differentiell über die Kontinuitätsgleichung

$$\operatorname{div} \vec{j}_T(\vec{x}, t) + c_V(\vec{x}, T) \rho(\vec{x}, T) \frac{\partial}{\partial t} T(\vec{x}, t) = p_{eff}(\vec{x}, t) \quad (192)$$

gegeben, wobei $p_{eff}(\vec{x}, t)$ eine bilanzierte Leistungsdichte als Quelle, bzw. Senke im Material darstellt. $c_V(\vec{x}, T)$ ist die spezifische temperaturabhängige Wärmekapazität

$$c_V(\vec{x}, T) = \frac{1}{m} \frac{dU}{dT} \quad (193)$$

die der temperaturabhängigen Änderung der inneren Energie des Materials proportional ist (m ist die Masse des Festkörpers). $\rho(\vec{x}, T)$ gibt den temperaturabhängigen Dichteverlauf während des Sinterungsprozesses wieder. Dieses ist, im Bereich der Sintertemperatur und des dort einsetzenden Sinterprozesses, eine sich sprunghaft ändernde Funktion. Wir können anhand dieses Sprungs die Einteilung in einen Niedertemperaturbereich (unterhalb der Sintertemperatur $\rho(\vec{x}, T) = const.$) und einen Hochtemperaturbereich vornehmen.

Durch Einsetzen von (191) in (192) erhalten wir die nichtlineare Wärmeleitungsgleichung

$$c_V(\vec{x}, T) \rho(\vec{x}, T) \frac{\partial}{\partial t} T(\vec{x}, t) - \sigma_T(\vec{x}, T) \Delta T(\vec{x}, t) - \operatorname{grad} \sigma_T(\vec{x}, T) \cdot \operatorname{grad} T(\vec{x}, t) = p_{eff}(\vec{x}, t) \quad (194)$$

die die Bestimmungsgleichung für das gesuchte Temperaturfeld darstellt. Die Größe $\sigma_T(\vec{x}, T)$ ist ebenso eine explizit temperaturabhängige Materialfunktion, die mit der temperaturabhängigen Dichte $\rho(\vec{x}, T)$ korreliert ist. Wir werden diesen Zusammenhang bei der Formulierung eines isotropen Schrumpfungmodells näher aufschlüsseln.

5.3 Die effektive lokale Leistungsdichte $p_{eff}(\vec{x}, t)$

Die an das keramische Werkstück lokal ankoppelnde wirksame Leistungsdichte setzt sich aus verschiedenen Anteilen zusammen. Die physikalisch relevanten Komponenten sind:

$$p_{eff}(\vec{x}, t) = p_{cond}(\vec{x}, t) + p_{conv}(\vec{x}, t) + p_{rad}(\vec{x}, t) + p_{elek}(\vec{x}, t) \quad (195)$$

Zum einen sind dieses Verluste durch Wärmeleitung (Konduktion) $p_{cond} > 0$, wie sie durch den Materialkontakt an den Applikatorboden entstehen können, Verluste durch Wärmestrahlung der heißen Keramik $p_{rad} > 0$ an die Umgebung, Verluste an Wärmeenergie durch Konvektion $p_{conv} > 0$, indem Luftteilchen aufgrund einer Temperaturdifferenz mit der heißen Keramik einen wärmeabführenden Teilchenstrom bilden und Leistungsaufnahme $p_{elek} < 0$ durch elektromagnetische Ankopplung an das stationäre Millimeterwellenfeld (in der elektrodynamischen Zeitskala).

Wird von außen zusätzlich thermisch geheizt (z.B. konventioneller Ofen), so ist $p_{rad} < 0$ und

wirkt im Material als Senke.

Die Leistungsdichte erhalten wir aus der Leistung direkt durch Differentiation

$$p = \frac{dP}{dV} \quad (196)$$

Konduktion

Der Applikatorboden ist wassergekühlt und stellt damit eine isotherme Randbedingung $\dot{T}_{Wand} = const.$ dar. Die über die Fläche dA abgegebene Leistung einer auf dem Boden aufliegenden Keramik erhalten wir aus (64) zu

$$dP_{cond}(\vec{x}, T) = \sigma_{cond} \left. \frac{\partial T(\vec{x}, t)}{\partial z} \right|_{z=z_G} dA \quad (197)$$

mit der Leitfähigkeit σ_{cond} , die den Wärmeübergang beider Medien charakterisiert.

Konvektion

dP_{conv} kann sich zusammensetzen aus

- Naturkonvektion

In einem abgeschlossenen, isotherm berandeten Applikatorsystem setzt zwangsläufig durch den heißen Sinterkörper ein turbulenter Konvektionsstrom ein, der auf die Temperaturentwicklung des Sinterguts rückwirken kann. Diesem kann nur durch Evakuieren des Resonators vorgebeugt werden. Temperaturmessungen an kleinen Sinterkörpern zeigten, daß nach Evakuieren des Applikators lediglich ein geringer Temperaturunterschied an der Keramikoberfläche meßbar war. Für die Temperaturentwicklung im Inneren des Körpers bedeutet dies, daß während des Aufheizvorgangs die Naturkonvektion vernachlässigt werden kann.

- Aufheizen in einem Gasstrom

Diesen Leistungsanteil erhalten wir direkt aus (65)

$$dP_{conv} = -h_{conv}(T_{Gas} - T_{z_G})dA \quad (198)$$

mit h_{conv} , ein den Gasstrom charakterisierender Konvektionsparameter, T_{Gas} der Temperatur des brennenden Stroms und T_{z_G} der Oberflächentemperatur der Keramik.

Thermische Strahlung

Wir gehen von den Idealisierungen in Gleichung (66) für diffuse, graue Wärmestrahlung an der Keramikoberfläche aus. Der abgestrahlte Leistungsanteil dP_{rad} auf der Grenzfläche dA

ergibt sich zu

$$dP_{rad} = -\sigma\epsilon'(T)(T_{zG}^4 - T_{Umg}^4)dA \quad . \quad (199)$$

σ ist die Boltzmannkonstante, $\epsilon'(T)$ die empirisch gewonnene temperaturabhängige Emissivitätsfunktion des Materials. Die $\sim T^4$ Abhängigkeit läßt erwarten, daß thermische Strahlungseffekte erst bei höheren Temperaturen, dann aber in dominierender Weise, den Temperaturverlauf auch im Inneren des Werkstücks prägen.

Ist $T_{Umg} > T_{zG}$ kann der Aufheizungsprozeß konventionell arbeitender Öfen simuliert werden. Zur Verifizierung des entwickelten Codes und der implementierten Randbedingungen wurden Vergleichsrechnungen zu Fast-Firing Experimenten vorgenommen (siehe Kapitel 6). Die Vorgabe dieser Randbedingung ist insbesondere für Untersuchungen zur Hybridtechnologie, also zur Kombination von Mikrowellentechnologie und konventioneller Heiztechnologie von Interesse.

Mikrowellenheizung

Die elektromagnetische Leistungsaufnahme im Volumen dV des keramischen Werkstücks ergibt sich aus (36) zu

$$dP_{elek}(\vec{x}, t) = -\frac{1}{2}\sigma_e(\vec{x}, T)|\vec{E}(\vec{x}, t)|^2 dV \quad . \quad (200)$$

$\sigma_e(\vec{x}, T)$ ist die materialspezifische temperaturabhängige elektrische Leitfähigkeit, die für die Leistungsaufnahme an das elektrische Feld $\vec{E}(\vec{x}, t)$ verantwortlich ist. Dieser Heizmechanismus unterscheidet sich grundlegend von den zuvor vorgestellten Mechanismen darin, daß er der einzige volumetrische Effekt ist. Jeglicher weiterer Energieaustausch findet an der Oberfläche statt.

Die Kenntnis der Verteilung der elektrischen Energiedichte in einer Keramik ist von wesentlicher Bedeutung für eine realistische Simulation der Temperaturdynamik bei Verwendung von HF-Feldern. Wir werden strenge Lösungen der Maxwellgleichungen unter Berücksichtigung verschiedener technischer Hilfsmittel, wie Modenrührer, Diffusoren etc. hierfür verwenden.

5.4 Reaktionskinetik des Sintervorgangs

Zur Charakterisierung und präzisen Beschreibung keramischer Pulver sind eine Vielzahl von Parametern notwendig, die in ausreichender Genauigkeit nur durch aufwendige Experimente und Messungen gewonnen werden können. Das Zusammenwirken dieser charakteristischen Pulvermerkmale wie Gitterstruktur, Reinheit, Beimischungen von Additiven, Korngrößen, Phasenübergängen etc. steuern signifikant das kinetische Sinterverhalten, wobei kleine Unterschiede und Abweichungen dieser Parameter voneinander den Verdichtungsprozeß beim Sintern nachhaltig verändern können.

Hinzu kommt bei der Verwendung von HF-Wellen zur Materialverarbeitung die Berücksich-

Material	Q	$\frac{kJ}{mol \cdot K}$	Art	Referenz
Al ₂ O ₃ (rein)	440		konventionell	[61],[57]
Al ₂ O ₃ (5% TiO ₂)	585		konventionell	[61]
Al ₂ O ₃ (5% ZrO ₂)	730		konventionell	[61]
ZnO	240		konventionell	[57]
ZnO	≈80		Mikrowellen, 2.45 GHz	[57]

Tabelle 2: Aktivierungsenergien verschiedener Pulver

tigung eines potentiellen "Mikrowelleneffektes", der eine Absenkung der Aktivierungsenergie und damit Sintern bei einer niedrigeren Temperatur ermöglichen kann. Eine allgemeine, widerspruchsfreie Theorie des Mikrowelleneffektes [57] letztlich konnte bis zu diesem Zeitpunkt weder in theoretischer, noch experimenteller Arbeit befriedigend gefunden werden [58].

Für eine realistische Modellierung des Sintervorgangs im gesamten Temperaturbereich ist die Kenntnis des Verdichtungsprozesses essentiell. Eine allgemeine, mathematische Beschreibung [62] der kinetischen Verdichtung ist im Modell durch die Gleichung

$$\frac{ds}{dt} = K_0 e^{-\frac{Q}{RT}} s^{-m} \quad (201)$$

gegeben. $s(t)$ kennzeichnet den linearen Schrumpfungsfaktors

$$s(t) = \frac{l(t) - l_0}{l_0}, \quad (202)$$

mit l_0 der Ausgangslänge und $l(t)$ der Länge zum Zeitpunkt t , Q repräsentiert die Aktivierungsenergie des Prozesses. m und K_0 beinhalten die stoffspezifische Art des Sintermechanismus, sowie der vorliegenden kristallinen Struktur. K_0 bedarf in der Darstellung hinsichtlich einer funktionalen Temperaturabhängigkeit vom Sinterungsmechanismus folgender Einteilung [63]

$$K_0 \sim \begin{cases} \textit{konstant} & \text{Viskoser Mechanismus} \\ \frac{1}{T} & \text{Diffusions Mechanismus} \end{cases}$$

Für unsere weiteren Untersuchungen gehen wir von einem Diffusionssinterungsmechanismus aus. Wir erhalten damit eine weitere Unterteilung von K_0 [64], für Diffusion über das Kristallgitter, bzw. die Korngrenzen:

$$K_0 = \begin{cases} \frac{c_K D_b \gamma \Omega \delta}{r^4 RT} & \text{Korngrenzendiffusion} \\ \frac{c_G D_v \gamma \Omega}{r^3 RT} & \text{Gitterdiffusion} \end{cases}$$

Zahlenwerte von c_K, c_G , sowie zugehörigem m für eine jeweilige Kontaktgeometrie der Körner sind in [64] tabelliert. Wir können, für einen Sinterungsvorgang über Gitterdiffusion nun die lineare Schrumpffunktion $s(t)$ über die Differentialgleichung

$$\frac{ds^{m+1}(t)}{dt} = (m+1) \frac{c_G D_v \gamma \Omega}{r^3 R} \frac{e^{-\frac{Q}{RT}}}{T} \quad (203)$$

bestimmen. Die Konstanten können im einzelnen Tab. 3 entnommen werden.

Für Nanopulver (Korngröße < 100 nm) kann aus (203) eine besondere Eigenschaft ersehen

D_b, D_v	Diffusionskonstanten
γ	Oberflächenenergie
Ω	Diffusionsvolumen pro Atom
δ	Breite der Korngrenze
$2r$	Anfänglicher Abstand zweier Körner, Korngröße

Tabelle 3: Mikroskopische Parameter beim Sintermechanismus der Gitterdiffusion

werden werden: Gegenüber konventioneller Pulver (Korngröße im Mikrometerbereich) wächst durch die sehr kleine Korngröße die Schrumpfrate $\sim \frac{1}{r^3}$ stark an. Dieser Umstand hat zur Folge, daß schon bei niedrigeren Temperaturen ein Verdichtungsprozeß stattfindet, bzw. das keramische Material plastisch verformbare Eigenschaften aufweist.

Aus Tab. 2 kann ersehen werden, daß im allgemeinen $Q \gg RT$ gilt. Unter der Voraussetzung einer konstanten Heizrate $\dot{T}(t) = \frac{dT}{dt} = const.$ schreiben wir (203) um zu

$$\frac{ds^{m+1}(T)}{dT} = (m+1) \frac{c_G D_v \gamma \Omega}{r^3 R} \frac{e^{-\frac{Q}{RT}}}{\dot{T}} \quad (204)$$

Die Integration kann im Grenzfall $Q \gg RT$ unter Benutzung der Produktregel ausgeführt werden für einen Heizprozeß mit $\dot{T} = const.$ von T_0 auf die Temperatur T

$$s^{m+1}(T) = s^{m+1}(T_0) + (m+1) \frac{c_G D_v \gamma \Omega}{Q \dot{T} r^3} (T e^{-\frac{Q}{RT}} - T_0 e^{-\frac{Q}{RT_0}}) \quad (205)$$

Die Dichte steht dabei unmittelbar mit der linearen Schrumpfung im Verhältnis

$$\rho(T) = s(T)^{\frac{1}{3}} \rho_0 \quad (206)$$

Wir können damit aus experimentellen Messungen und Daten in guter Näherung den Verlauf der Dichte im Material für ein bestimmtes Sinterexperiment temperaturabhängig für die Modellierung der Schrumpfung im THESIS3D-Code vornehmen. In Abb. 43 ist ein solcher Verlauf der Dichte zu ersehen. Die Kontraktion setzt sprunghaft um die Sintertemperatur, bei Aluminiumoxid um die $\approx 1220^\circ\text{C}$ ein. Wir können aus dem Bild unmittelbar die in Kapitel 5.1 vorgenommene Einteilung in drei Sinterstadien und ihre Dynamik verstehen.

5.5 Das isotrope Schrumpfungmodell des THESIS3D-Codes

Die lineare Schrumpfung bei der Sinterung soll phänomenologisch im Hochtemperaturbereich für die Temperaturdynamik einer Probe berücksichtigt werden. Das Volumen der Probe schrumpft dabei für jede Raumrichtung linear und isotrop nach Gleichung (206) unter der Voraussetzung, daß die Gesamtmasse konstant bleibt.

Um die mittlere Dichte $\rho(\bar{T})$ der Probe im Volumen bestimmen zu können, gehen wir aus von der mittleren Temperatur über alle Gitterzellen

$$\bar{T} = \frac{1}{V} \iiint T(\vec{x}) dV \quad . \quad (207)$$

Aus dieser Dichte erhalten wir die isotrope Schrumpfung

$$s(\bar{T}) = \left(\frac{\rho(\bar{T})}{\rho_0} \right)^3 \quad . \quad (208)$$

Damit können wir eine Kontraktion des äquidistanten Rechengitters mit kleiner werdenden Zellen $\Delta x_{Zelle}(\bar{T})$ vornehmen. Diese Dynamik hat kleiner werdende Zeitschritte zur Folge, die

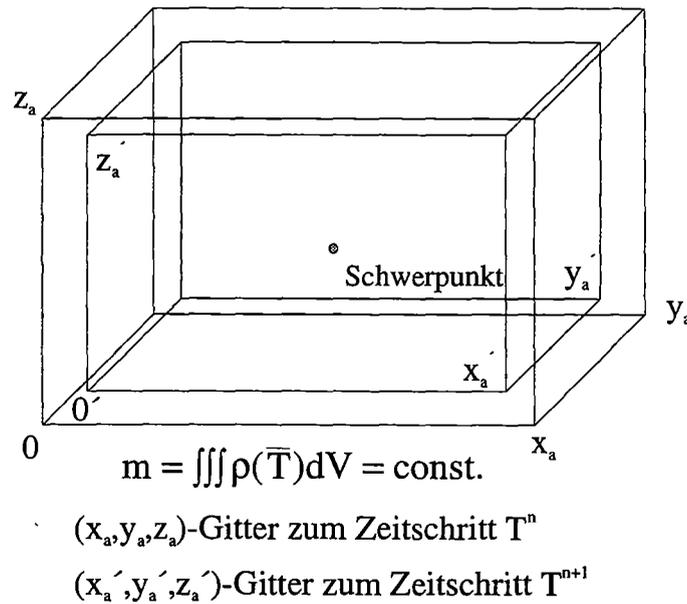


Abbildung 42: Isotrope Schrumpfung um den Schwerpunkt

durch die Courant-Bedingung

$$\Delta x_{Zelle}(\bar{T}) = s(\bar{T}) \Delta x_0 \quad \Delta t(\bar{T}) = \frac{1}{2} \frac{c_V(\bar{T})}{\sigma_T(\bar{T})} \Delta x_{Zelle}(\bar{T})^2 \quad (209)$$

für jeden Zeitschritt neu berechnet werden muß. Zwischen der Wärmeleitfähigkeit $\sigma_T(T)$ und der Dichte $\rho(T)$ besteht der Zusammenhang

$$\sigma_T(T) = \rho(T)c_V(T)\alpha(T) \quad . \quad (210)$$

$\alpha(T)$ ist die thermische Diffusivität [60], eine weitere materialspezifische Funktion, die im Experiment gewonnen werden muß. Da während des Verdichtungsprozesses die Wärmeleitung $\sigma_T(\bar{T})$ stark im Ansteigen begriffen ist und Δx_{Zelle} sich durch die Gitterkontraktion verringert, steigt die Rechenzeit zur Auflösung der temperaturdynamischen Vorgänge im Hochtemperaturbereich stark an.

5.6 Die temperaturabhängigen Materialfunktionen von Al_2O_3

Für Simulationsrechnungen des THESIS3D-Codes mit dem Modellwerkstoff Aluminiumoxid bestimmt folgender "Fingerabdruck" von Materialfunktionen die thermischen/elektrischen Materialeigenschaften:

- Die Permeabilität $\epsilon'(T)$ im Hochtemperaturbereich bei 35 GHz [10].
- Die elektrische Leitfähigkeit $\sigma(T)$ im Hochtemperaturbereich bei 35 GHz [10].
- Die temperaturabhängige Emissivität $\epsilon(T)$ [55].
- Die Wärmekapazität c_V . Da die Änderung der inneren Energie (193) während der Sinterung vernachlässigbar ist, können wir $c_V = 774.9 \frac{\text{J}}{\text{kg K}}$ als konstant ansehen.
- Die temperaturabhängige Dichtefunktion $\rho(T)$ im Material [60].
- Die Diffusivität $\alpha(T)$ der Körner während der Sinterung [60].

Diese sind in Abb. 43 graphisch zusammengestellt. Die dielektrischen Hochtemperaturdaten von Al_2O_3 sind bis etwa 1200°C vermessen worden. Oberhalb dieser Temperatur wurde der Funktionsverlauf für THESIS3D-Simulationen bis 1450°C extrapoliert.

5.7 Numerische Modellierung der Wärmeleitungsgleichung - der zeitabhängige THESIS 3D-Code

Für die numerische Lösung der zeitabhängigen Wärmeleitungsgleichung (194) wurde das Verfahren der Finiten Differenzen ausgewählt. Das folgende numerische Schema bildet den Kern des für die Sintersimulation realisierten THESIS3D-Codes. Für die Berechnung der Temperaturverteilung sind einige phänomenologische thermodynamische Größen wie Wärmeleitfähigkeit $\sigma_T(T)$ und Wärmekapazität $c_V(T)$ in Abhängigkeit der Temperatur vorzumodellieren

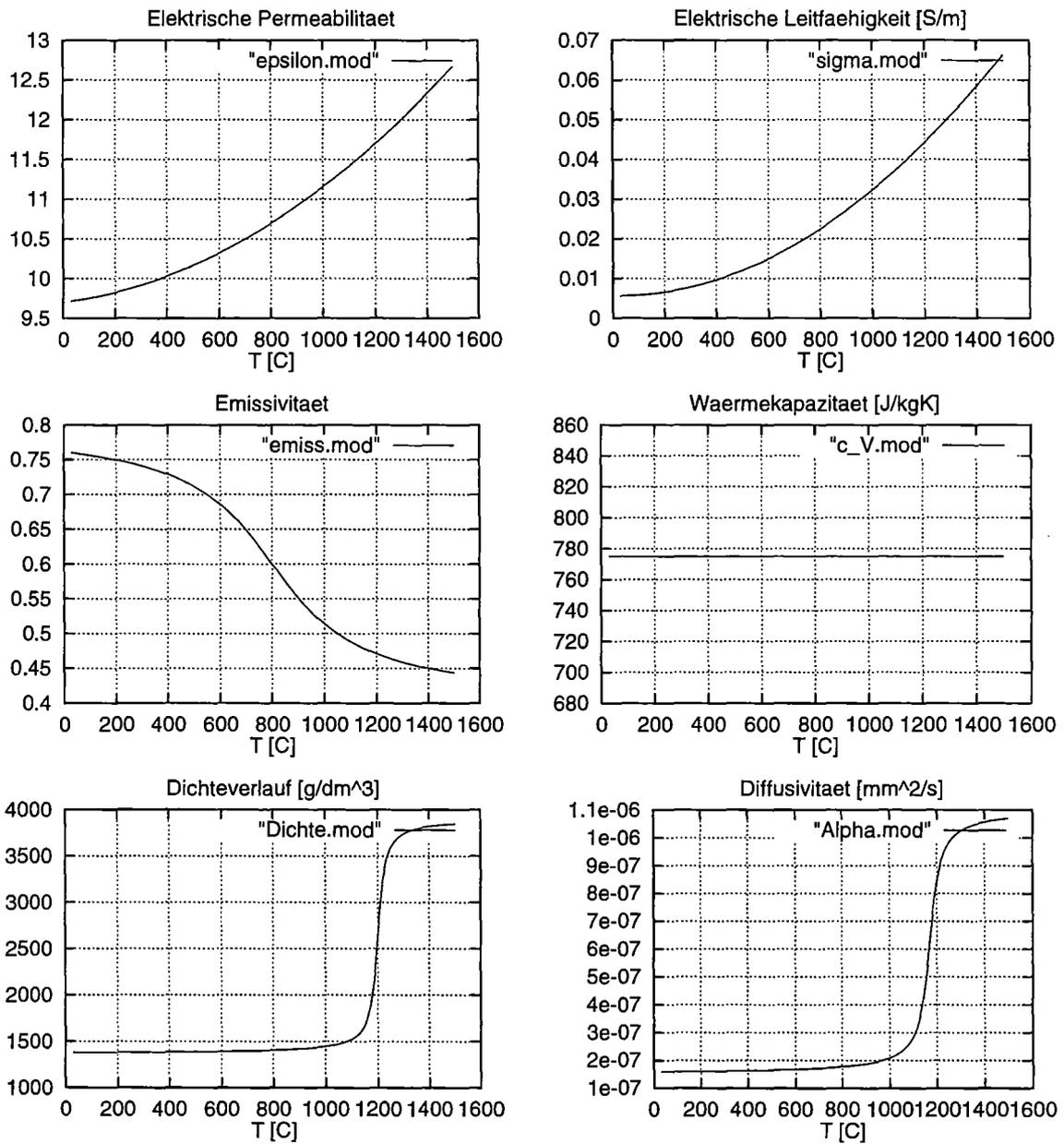


Abbildung 43: Die temperaturabhängigen Modellierungsfunktionen des Werkstoffs Aluminiumoxid [10] [55] [60]

und bei jedem Zeitschritt dem entsprechenden Substratvoxel seinem Temperaturwert entsprechend zuzuordnen. Zur Diskretisierung der Modellgleichungen gehen wir von einem ähnlichen Ansatz, wie dem von Yee aus. Wir nehmen die Diskretisierung einer Gleichung in räumlich zweiter Ordnung aus der Diskretisierung zweier Gleichungen erster Ordnung vor, also von (191) und (192) auf einem versetzten Gitter.

Die Fouriergleichung erfordert lediglich eine räumliche Diskretisierung. Wir erhalten unmittelbar

$$\begin{pmatrix} j_x^n_{i+\frac{1}{2}jk} \\ j_y^n_{ij+\frac{1}{2}k} \\ j_z^n_{ijk+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\sigma_T^n_{i+\frac{1}{2}jk}}{\Delta x} (T_{i+1jk}^n - T_{ijk}^n) \\ -\frac{\sigma_T^n_{ij+\frac{1}{2}k}}{\Delta y} (T_{ij+1k}^n - T_{ijk}^n) \\ -\frac{\sigma_T^n_{ijk+\frac{1}{2}}}{\Delta z} (T_{ijk+1}^n - T_{ijk}^n) \end{pmatrix} . \quad (211)$$

Die thermische Leitfähigkeit $\sigma_{i+\frac{1}{2}jk}^n$ etc. ist eine lokale Größe und wird in Abhängigkeit der an diesem Ort (räumlich interpoliert) herrschenden Temperatur $T_{i+\frac{1}{2}jk}^n$ etc. gemäß (210) bestimmt.

Die Kontinuitätsgleichung dient nun zur zeitlichen Vorwärtsintegration des Temperaturfeldes $T(\vec{x}, t)$. Wir diskretisieren die zeitliche Ableitung an dem räumlichen Gitterpunkt ijk nach dem Schema

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} T(\vec{x}, t) \right|_{ijk}^n = \frac{T_{ijk}^{n+1} - T_{ijk}^{n-1}}{2\Delta t} .$$

Hierbei entsteht in der Ausformulierung ein zeitliches Leapfrog-Schema, wobei der Zeitschritt $(n+1)$ sich über die beiden Zeitebenen (n) und $(n-1)$ ergibt. Leapfrog Schemata neigen zur numerischen Instabilität, zur Glättung führen wir eine zeitliche Interpolation gemäß

$$T_{ijk}^n = \frac{1}{2} (T_{ijk}^{n+1} + T_{ijk}^{n-1}) \quad (212)$$

durch. Wir erhalten damit die Iterationsformel

$$\begin{aligned} T_{ijk}^{n+1} = & T_{ijk}^n + \alpha_x^n_{ijk} \left(j_x^n_{i+\frac{1}{2}jk} - j_x^n_{i-\frac{1}{2}jk} \right) + \\ & \alpha_y^n_{ijk} \left(j_y^n_{ij+\frac{1}{2}k} - j_y^n_{ij-\frac{1}{2}k} \right) + \\ & \alpha_z^n_{ijk} \left(j_z^n_{ijk+\frac{1}{2}} - j_z^n_{ijk-\frac{1}{2}} \right) + \xi_{ijk}^n \Delta t p_{eff\,ijk} \end{aligned} \quad (213)$$

mit

$$\alpha_x^n_{ijk} = -\xi_{ijk}^n \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad \alpha_y^n_{ijk} = -\xi_{ijk}^n \frac{\Delta t}{\Delta y} \quad \alpha_z^n_{ijk} = -\xi_{ijk}^n \frac{\Delta t}{\Delta z} \quad (214)$$

und dem Materialparameter

$$\xi_{ijk}^n = (c_V^n_{ijk} \rho_{ijk}^n)^{-1} . \quad (215)$$

ξ_{ijk}^n und damit auch $\alpha_x^n_{ijk}$ etc. sind lokale Größen, die die thermisch auftretenden Materialinhomogenitäten modellieren. Diese sind abhängig von der lokal herrschenden Temperatur T_{ijk}^n

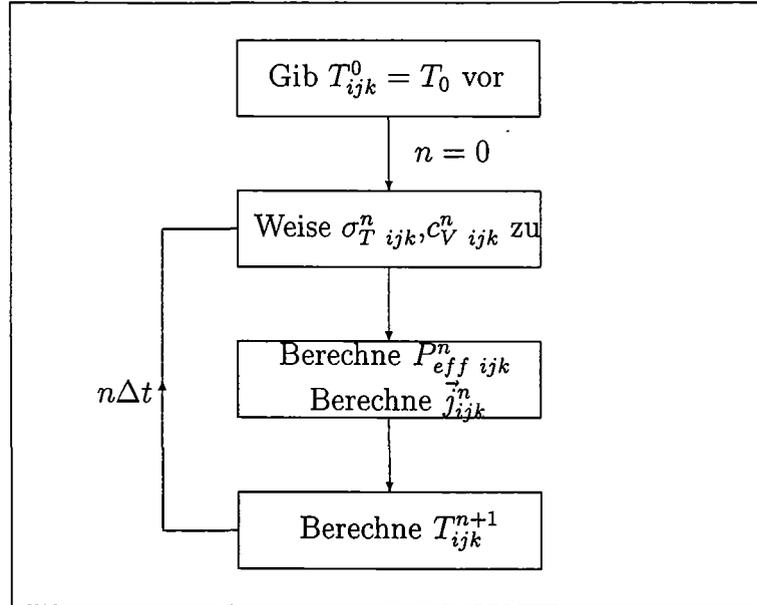


Abbildung 44: Berechnungsschema für das Temperaturfeld in einer Keramik mit dem THESIS3D-Code

und werden aus den vorgegebenen Materialfunktionen durch Interpolation erhalten.

Das diskretisierte Temperaturfeld stellt ein skalares Feld von der Dimension $[N_x \times N_y \times N_z]$ dar. Der Stromdichtevektor muß für jede Komponente unterschiedlich betrachtet werden. Er ist für die jeweilige Richtung um eine Halbzelle räumlich vom Temperaturgitter verschoben. So ist die Dimension des j_x Feldes von der Dimension $[N_x - 1 \times N_y \times N_z]$, von j_y äquivalent $[N_x \times N_y - 1 \times N_z]$ und in gleicher Weise für die z-Komponente.

$p_{eff\ ijk}$ ist die effektiv wirksame Leistungsdichte. Für das Innere des keramischen Körpers geht lediglich das elektromagnetische Feld als Heizmechanismus ein

$$p_{eff\ ijk} = \frac{1}{2} \sigma_{ijk} \vec{E}_{ijk}^2 \quad (216)$$

An den Rändern, Kanten und Ecken müssen jeweils die Bedingungen für thermische Strahlung, Konvektion und Konduktion zellenweise vorgenommen werden

$$p_{eff\ ijk}|_{Rand} = \frac{1}{2} \sigma_{ijk} \vec{E}_{ijk}^2 - \frac{\Delta A}{\Delta V} \epsilon_{ijk} \sigma (T_{ijk}^4 - T_{au\beta en}^4) + h_{konv} (T_{ijk} - T_{au\beta en}) \quad (217)$$

Das Diskretisierungsschema des THESIS3D-Codes wurde explizit für die zeitabhängige Temperatur vorgenommen. Die Zeitschrittweite ist damit direkt nach der Courant-Bedingung mit der räumlichen Gitterauflösung korreliert. Dieses hat allerdings zur Folge, daß bei hohen Auflösungen in der Keramik die Zeitschritte sehr klein werden können, was zu hohen

Rechenzeiten des Codes führen kann. Implizite Verfahren offerieren die Möglichkeit, die Zeitschrittweite zu vergrößern. Es ist allerdings bei diesen Verfahren nicht gewährleistet, daß bei nichtlinearen Problemstellungen der berechnete Lösungszweig des expliziten Verfahrens der tatsächlichen Lösung der Differentialgleichung entspricht.

5.8 Feldlösungen zur selbstkonsistenten Sintersimulation und Prozeßoptimierung für Keramiken

Zur selbstkonsistenten Simulation des HF-Sintervorgangs müssen in jedem Zeitschritt die lokalen elektrischen Felder zum Aufheizen der Keramik bekannt sein. Während des Aufheizvorgangs steigt $\epsilon_r(T)$ im Wert an, was das dielektrische Volumen vergrößert. Der THESIS3D-Code braucht, um im räumlichen Gitter die elektromagnetischen Interferenzstrukturen auflösen zu können, ein feines Gitter. Dieses geht aber mit einem auf quadratische Weise kleiner werdendem Zeitschritt Δt einher. Untersuchungen zeigten, daß die ursprünglich beabsichtigte Kopplung des MiRa-Codes zur Feldberechnung mit dem THESIS3D-Code ernste zeitkritische Probleme aufwirft. Die Nichtlinearität der Wärmeleitungsgleichung reagiert signifikant in Schwankungen der Temperaturwerte, wenn die Aktualisierung der Feldberechnungen aus Rechenzeitgründen nicht in jedem Zeitschritt erfolgen kann. Dieses leistet der MiRa-Feldlöser, etwa $\sim 10^5$ 3D-Feldberechnungen für eine THESIS3D-Simulation durchzuführen, nicht in der erforderlichen Weise. Um in jedem Zeitschritt physikalische Aussagen über die Feldverteilung im Dielektrikum dennoch machen zu können, wurden analytische Feldlösungen, die sehr schnell berechnet werden können, implementiert.

Das Ziel dieser Untersuchungen ist es, Aufschluß über die grundlegenden Gesetzmäßigkeiten der Energiedichte in einer Keramik zu gewinnen. Die Allgemeinheit des Ansatzes ermöglicht die Diskussion über die Verwendung und Auswirkung verschiedener technischer Hilfsmittel, die in der Materialprozeßtechnik mit HF-Wellen in Anwendung gebracht werden können. Wir werden im folgenden Auswirkungen dieser Hilfsmittel auf Feldverteilungen in einzelnen

Hilfsmittel	Wirkung	Aufwand/Kosten
Modenrührer	Variation der Phasenfunktion $S(\vec{x})$ im Applikator	gering
Phasenschieber	Variation der Phasenfunktion $S(\vec{x})$ im Applikator	groß
Drehteller	Variation der Phasenfunktion $S(\vec{x})$ im Applikator	gering
Diffusor	Diffuse Reflexion, Zerstörung der Kohärenz	sehr gering

Tabelle 4: Technische Hilfsmittel zur Materialprozeßtechnik

Keramiken und Chargen untersuchen und auch die Kombination verschiedener Hilfsmittel miteinander quantitativ vergleichen können. Der THESIS3D-Code ist in der Lage, alle die-

se Fälle für die zeitliche und räumliche Temperaturentwicklung in Keramiken berechnen zu können.

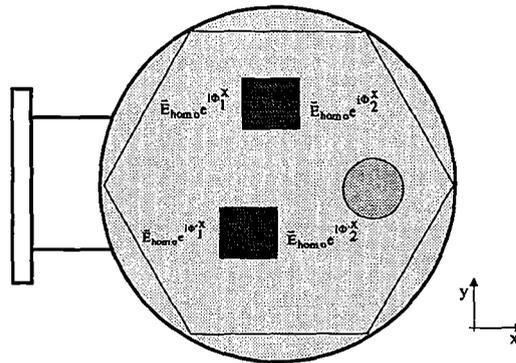
5.8.1 Allgemeine Feldlösung

Wir betrachten einen keramischen Körper mit den Abmessungen x_a, y_a, z_a . Die temperaturabhängigen Materialeigenschaften dieses Körpers charakterisieren wir über seine mittlere Temperatur

$$\bar{T} = \frac{1}{V} \iiint T(\vec{x}) dV \quad (218)$$

mit $\epsilon'(\bar{T}), \sigma(\bar{T})$. Diese sind im folgenden ohne die Temperaturabhängigkeit angegeben.

Dieser Körper ist in einem großen Applikator eingebracht, von dem wir annehmen, daß er einem idealen Applikator sehr nahe kommt. Damit fordern wir die Randbedingung, daß außer-



Für 2 identische Keramiken in einem homogenen Feld fallen im allgemeinen die Phasenrandbedingungen an 2 verschiedenen Orten unterschiedlich aus.

Abbildung 45: Keramiken in einem idealen homogenen Feld

halb der Keramik ein im Mittel ideales homogenes elektrisches Feld vom Betrag $|\vec{E}(\vec{x}_{Rand})| = E_{homo}$ anliegt.

Wir wählen für den dreidimensionalen Fall folgende einfache Modellrandbedingungen:

$$E_x(0, y, z) = E_{homo} e^{i\phi_1^z(y, z)} \quad E_x(x_a, y, z) = E_{homo} e^{i\phi_2^z(y, z)} \quad (219)$$

$$E_y(x, 0, z) = E_{homo} e^{i\phi_1^y(x, z)} \quad E_y(x, y_a, z) = E_{homo} e^{i\phi_2^y(x, z)} \quad (220)$$

$$E_z(x, y, 0) = E_{homo} e^{i\phi_1^z(x, y)} \quad E_z(x, y, z_a) = E_{homo} e^{i\phi_2^z(x, y)} \quad (221)$$

Im Applikator befindet sich eine bestimmte Verteilung der räumlichen Phase $S_{res}(\vec{x})$. Der Phasenfaktor $e^{i\phi_x(y, z)}, e^{i\phi_y(x, z)}, e^{i\phi_z(x, y)}$ in unseren Randbedingungen repräsentiert den im allgemeinen unbekanntem Phasenzustand, der sich an der Oberfläche der eingebrachten Keramik im Applikatorfeld einstellt. Diese Phasenverteilung ist stationär und räumlich kohärent, d.h.

die resultierende Phase steht in einer direkten Abhängigkeit zum Phasenzustand des einkoppelnden Gaußschen Strahls. Ebenso steht damit die Phase an einem Ort einer Oberfläche in einer kohärenten Beziehung zu einem anderen Ort einer anderen Oberfläche der Keramik. Die zeitliche Variation des Phasenzustands im Applikator/Oberfläche kann damit die Wirkung eines Modenrührers, Phasenschiebers oder Drehtellers über die zeitliche Periode Δt_{Stirr} simulieren.

In kartesischen Koordinaten entkoppelt die Helmholtzgleichung für jede Komponente

$$\Delta \vec{E} + k^2 \vec{E} = 0 \quad . \quad (222)$$

Wir können eine komplexe Lösung ansetzen als

$$\vec{E}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} A_x e^{i\vec{k}\vec{x}} + B_x e^{-i\vec{k}\vec{x}} \\ A_y e^{i\vec{k}\vec{x}} + B_y e^{-i\vec{k}\vec{x}} \\ A_z e^{i\vec{k}\vec{x}} + B_z e^{-i\vec{k}\vec{x}} \end{pmatrix} \quad . \quad (223)$$

Für die Koeffizienten A_x, B_x usw. lassen sich mit den Randbedingungen lineare Gleichungssysteme aufstellen und lösen. Das elektrische Feld erhalten wir zuletzt aus $\vec{E}(\vec{x}) = \Re [\vec{E}(\vec{x})]$. Wir betrachten hier stellvertretend für alle Komponenten die x-Komponente. Wir erhalten nach einer längeren Rechnung, unter Verwendung folgender zweckmäßiger Abkürzungen

$$k_x = \beta + i\delta \quad \bar{n}^2 = \sqrt{\epsilon'^2 + \frac{\sigma^2}{\omega^2 \epsilon_0^2}} \quad (224)$$

$$\beta = k_0 \bar{n} \cos\left(\frac{1}{2} \arctan \frac{\sigma}{\omega \epsilon_0 \epsilon_r}\right) \quad \delta = k_0 \bar{n} \sin\left(\frac{1}{2} \arctan \frac{\sigma}{\omega \epsilon_0 \epsilon_r}\right) \quad (225)$$

$$\mu_a^x = E_{homo} \frac{\cos(\beta x_a) \sinh(\delta x_a)}{2 \cos^2(\beta x_a) \sinh^2(\delta x_a) + 2 \sin^2(\beta x_a) \cosh^2(\delta x_a)} \quad (226)$$

$$\nu^{x+}(\vec{x}, \Phi_2^x) = \cos(\beta x + \Phi_2^x(y, z)) e^{-\delta x} \quad (227)$$

$$\nu^{x-}(\vec{x}, \Phi_2^x) = \cos(\beta x - \Phi_2^x(y, z)) e^{\delta x} \quad (228)$$

$$\xi_a^{x+}(\vec{x}, \Phi_1^x) = \cos(\beta(x - x_a) + \Phi_1^x) e^{-\delta(x - x_a)} \quad (229)$$

$$\xi_a^{x-}(\vec{x}, \Phi_1^x) = \cos(\beta(x - x_a) - \Phi_1^x) e^{\delta(x - x_a)} \quad (230)$$

$$\zeta_a^x = E_{homo} \frac{\sin(\beta x_a) \cosh(\delta x_a)}{2 \cos^2(\beta x_a) \sinh^2(\delta x_a) + 2 \sin^2(\beta x_a) \cosh^2(\delta x_a)} \quad (231)$$

$$\iota_a^{x+}(\vec{x}, \Phi_1^x) = \sin(\beta(x - x_a) + \Phi_1^x) e^{-\delta(x - x_a)} \quad (232)$$

$$\iota_a^{x-}(\vec{x}, \Phi_1^x) = \sin(\beta(x - x_a) - \Phi_1^x) e^{\delta(x - x_a)} \quad (233)$$

$$\chi^{x+}(\vec{x}, \Phi_2^x) = \sin(\beta x + \Phi_2^x(y, z)) e^{-\delta x} \quad (234)$$

$$\chi^{x-}(\vec{x}, \Phi_2^x) = \sin(\beta x - \Phi_2^x(y, z)) e^{\delta x} \quad (235)$$

die exakte Lösung für die x-Komponente des elektrischen Feldes

$$E_x(\vec{x}, \Phi_1^x, \Phi_2^x) = \mu_a^x [\xi_a^{x+}(\vec{x}, \Phi_1^x) - \xi_a^{x-}(\vec{x}, \Phi_1^x) - \nu^{x+}(\vec{x}, \Phi_2^x) + \nu^{x-}(\vec{x}, \Phi_2^x)] \quad (236)$$

$$- \zeta_a^x [\iota_a^{x+}(\vec{x}, \Phi_1^x) + \iota_a^{x-}(\vec{x}, \Phi_1^x) - \chi^{x+}(\vec{x}, \Phi_2^x) - \chi^{x-}(\vec{x}, \Phi_2^x)] \quad (237)$$

Wir bilden nach einer Substitution für die y und z -Komponente die Vektoren

$$\vec{\mu}_a(\vec{x}, \vec{\Phi}_1, \vec{\Phi}_2) = \begin{pmatrix} \mu_a^x [\zeta_a^{x+}(\vec{x}, \Phi_1^x) - \zeta_a^{x-}(\vec{x}, \Phi_1^x) - \nu^{x+}(\vec{x}, \Phi_2^x) + \nu^{x-}(\vec{x}, \Phi_2^x)] \\ \mu_a^y [\zeta_a^{y+}(\vec{x}, \Phi_1^y) - \zeta_a^{y-}(\vec{x}, \Phi_1^y) - \nu^{y+}(\vec{x}, \Phi_2^y) + \nu^{y-}(\vec{x}, \Phi_2^y)] \\ \mu_a^z [\zeta_a^{z+}(\vec{x}, \Phi_1^z) - \zeta_a^{z-}(\vec{x}, \Phi_1^z) - \nu^{z+}(\vec{x}, \Phi_2^z) + \nu^{z-}(\vec{x}, \Phi_2^z)] \end{pmatrix} \quad (238)$$

und

$$\vec{\zeta}_a(\vec{x}, \vec{\Phi}_1, \vec{\Phi}_2) = \begin{pmatrix} \zeta_a^x [\iota_a^{x+}(\vec{x}, \Phi_1^x) + \iota_a^{x-}(\vec{x}, \Phi_1^x) - \chi^{x+}(\vec{x}, \Phi_2^x) - \chi^{x-}(\vec{x}, \Phi_2^x)] \\ \zeta_a^y [\iota_a^{y+}(\vec{x}, \Phi_1^y) + \iota_a^{y-}(\vec{x}, \Phi_1^y) - \chi^{y+}(\vec{x}, \Phi_2^y) - \chi^{y-}(\vec{x}, \Phi_2^y)] \\ \zeta_a^z [\iota_a^{z+}(\vec{x}, \Phi_1^z) + \iota_a^{z-}(\vec{x}, \Phi_1^z) - \chi^{z+}(\vec{x}, \Phi_2^z) - \chi^{z-}(\vec{x}, \Phi_2^z)] \end{pmatrix} \quad (239)$$

Damit berechnet sich das elektrische Feld in der Keramik zu

$$\vec{E}(\vec{x}, \vec{\Phi}_1, \vec{\Phi}_2) = \vec{\mu}_a(\vec{x}, \vec{\Phi}_1, \vec{\Phi}_2) - \vec{\zeta}_a(\vec{x}, \vec{\Phi}_1, \vec{\Phi}_2) \quad (240)$$

Ohne weitere Voraussetzungen oder Forderungen an die Phasenrandbedingungen $\vec{\Phi}_1, \vec{\Phi}_2$ erkennen wir aus diesem Ergebnis und den Gleichungen (227)-(230) bzw. (232)-(235), daß eine stationäre Interferenzverteilung des elektrischen Feldes in der Keramik herrscht. Die Keramik

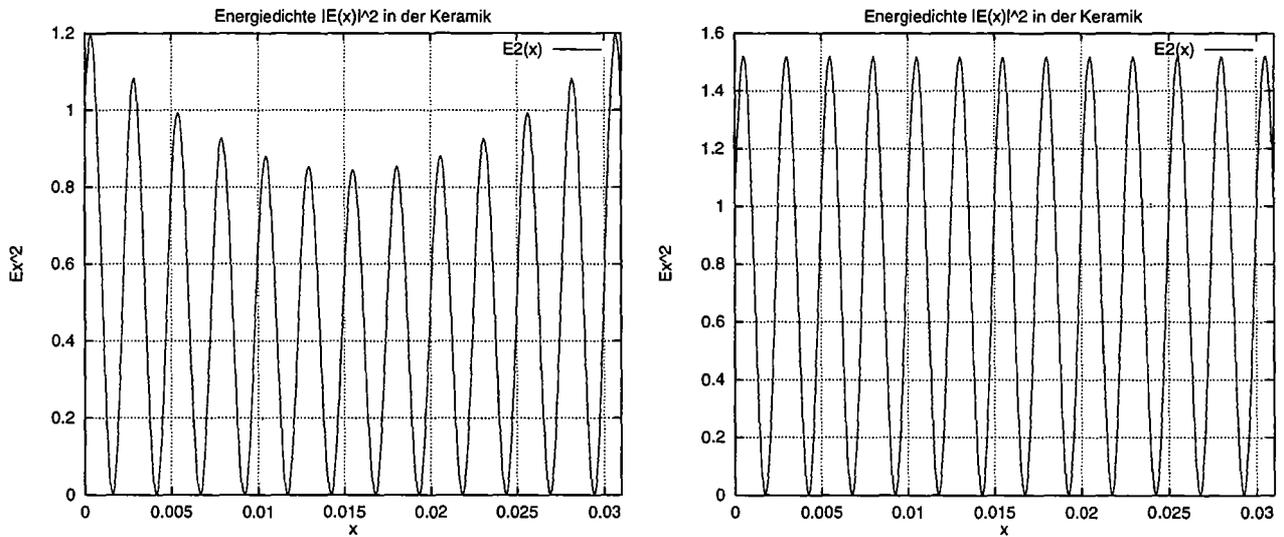


Abbildung 46: Energiedichte in einer Keramik für $\epsilon' = 4$, $\sigma = 0,4 \frac{S}{m}$ bzw. $\sigma = 0,04 \frac{S}{m}$

verhält sich selbst wie ein permeabler Resonator, wobei die Feldstärke in Abhängigkeit der Leitfähigkeit σ vom Rand zum Zentrum abfällt.

Wir wollen diese Gegebenheiten zum einen der analytischen Einfachheit halber, zum anderen um die Einzeleffekte leichter trennen zu können im folgenden (Abb. 46) für eindimensionale

Fälle diskutieren. Im dreidimensionalen Fall überlagern sich für jede Richtung die Energiedichten, was im allgemeinen zu einer glättenden Wirkung und weniger ausgeprägten Fluktuationen der räumlichen Energiedichteverteilung in der Keramik führt.

Wir betrachten die Feldlösung $E_x(x)$ für eine Keramik der Ausdehnung $x_a = 3.1$ cm, an die ein Einheitsfeld bei 30 GHz angelegt ist ($\Phi_1 = 0, \Phi_2 = 0, E_{homo} = 1$). Ein kubischer Grünkörper dieser Ausmaße wird im nächsten Kapitel durch Simulation und Experiment untersucht. Die Leitfähigkeit sei hier $\sigma = 0.4 \frac{S}{m}$, $\sigma = 0.04 \frac{S}{m}$ und die Permeabilität $\epsilon' = 4$. zeigt die Energiedichte für beide Leitfähigkeiten, die sich innerhalb der Keramik ausbildet. Wir erkennen im eindimensionalen Fall Knoten der Energiedichte und Amplitudenmaxima durchgängig vom linken zum rechten Rand. Bei stärkerer Absorption $\sigma = 0.4 \frac{S}{m}$ wird das Feld aus der Keramik herausgedrängt. Die resultierende Interferenzstruktur in der Keramik kann, trotz den äußeren homogenen Feldbedingungen, zu einer unterschiedlichen Ausbildung von Hot-Spots führen. Der lokale SAR-Wert im allgemeinen dreidimensionalen Fall berechnet sich unmittelbar durch Skalarproduktbildung

$$\text{div } \langle \vec{S}(\vec{x}, t) \rangle = -\frac{1}{2} \sigma_{eff} \left[\vec{\mu}_a(\vec{x}, \vec{\Phi}_1, \vec{\Phi}_2)^2 - 2\vec{\mu}_a(\vec{x}, \vec{\Phi}_1, \vec{\Phi}_2) \cdot \vec{\zeta}_a(\vec{x}, \vec{\Phi}_1, \vec{\Phi}_2) + \vec{\zeta}_a(\vec{x}, \vec{\Phi}_1, \vec{\Phi}_2)^2 \right] \quad (241)$$

Die im gesamten Werkstück wirkende mittlere Heizleistung erhalten wir damit (34) zu

$$P_{Joule} = \frac{1}{2} \sigma_{eff}(\bar{T}) \int_0^{x_a} \int_0^{y_a} \int_0^{z_a} |\vec{E}(\vec{x})|^2 dx dy dz = c_V m_{Keramik} \dot{\bar{T}} \quad (242)$$

Damit können wir unmittelbar die momentane mittlere Heizrate der Keramik berechnen.

5.9 Optimierung der Prozeßbedingungen für keramische Werkstücke

Mit dem MiRa-Code wurden intensive Untersuchungen zur Bereitstellung eines homogenen Feldes durch eine äußere Applikatorgeometrie unternommen. Eine ideale Feldverteilung allerdings $|\vec{E}(\vec{x}_{Rand})| = E_{homo}$ hat nach den Ergebnissen des vorherigen Abschnitts keineswegs eine gleichmäßige Feldstruktur innerhalb der Keramik zur Folge. Wir wollen nun verschiedene weitere technische Hilfsmittel zur Optimierung der Feldverteilungen in ihren Auswirkungen untersuchen und diskutieren.

5.9.1 Hilfsmittel zur periodischen Phasenverwirbelung

Die Wirkung eines Modenrührer, Phasenschieber oder Drehteller in einem Applikator mit homogenem Feld liegt in der Variation der an den Oberflächen der Keramik anliegenden Phasen. Wir wollen nun die mittlere elektrische Energiedichte aus den Ergebnissen (224 - 235) unter Verwendung eines solchen Hilfsmittels ausrechnen. Wir diskutieren wiederum den eindimensionalen Fall und die dort herrschenden Effekte, die Übertragung in den dreidimensionalen

Fall ist nach (240) gegeben. Dabei soll nocheinmal betont werden, daß im allgemeinen im dreidimensionalen Fall die hier aufgezeigten Einzeleffekte weniger stark durch die Überlagerung der beiden anderen Feldkomponenten auftreten können.

Wir stellen $E_x^2(x)$ dar als

$$E_x^2(x, \Phi_1, \Phi_2) = \Gamma_{\xi\nu}(x, \Phi_1, \Phi_2) + \Gamma_{\nu\chi}(x, \Phi_1, \Phi_2) + \Gamma_{\xi\nu\chi}(x, \Phi_1, \Phi_2) \quad . \quad (243)$$

Wir lassen der Übersichtlichkeit wegen bei μ_a^x usw. die Kennzeichnung für x weg, also schreiben nur noch μ_a etc.

Damit ist

$$\Gamma_{\xi\nu}(x, \Phi_1, \Phi_2) = \mu_a^2(\xi_a^{+2}(x, \Phi_1) - 2\xi_a^+(x, \Phi_1)\xi_a^-(x, \Phi_1) + \xi_a^{-2}(x, \Phi_1) + 2(-\xi_a^+(x, \Phi_1)\nu^+(x, \Phi_2) + \xi_a^+(x, \Phi_1)\nu^-(x, \Phi_2) + \xi_a^-(x, \Phi_1)\nu^+(x, \Phi_2) - \xi_a^-(x, \Phi_1)\nu^-(x, \Phi_2)) + \nu^{+2}(x, \Phi_2) - 2\nu^+(x, \Phi_2)\nu^-(x, \Phi_2) + \nu^{-2}(x, \Phi_2)) \quad (244)$$

$$\nu^{+2}(x, \Phi_2) - 2\nu^+(x, \Phi_2)\nu^-(x, \Phi_2) + \nu^{-2}(x, \Phi_2)) \quad (245)$$

und

$$\Gamma_{\nu\chi}(x, \Phi_1, \Phi_2) = \zeta_a^2(\iota_a^{+2}(x, \Phi_1) + 2\iota_a^+(x, \Phi_1)\iota_a^-(x, \Phi_1) + \iota_a^{-2}(x, \Phi_1) + 2(-\iota_a^+(x, \Phi_1)\chi^+(x, \Phi_2) - \iota_a^+(x, \Phi_1)\chi^-(x, \Phi_2) - \iota_a^-(x, \Phi_1)\chi^+(x, \Phi_2) - \iota_a^-(x, \Phi_1)\chi^-(x, \Phi_2)) + \chi^{+2}(x, \Phi_2) + 2\chi^+(x, \Phi_2)\chi^-(x, \Phi_2) + \chi^{-2}(x, \Phi_2)) \quad (246)$$

$$\chi^{+2}(x, \Phi_2) + 2\chi^+(x, \Phi_2)\chi^-(x, \Phi_2) + \chi^{-2}(x, \Phi_2)) \quad (247)$$

sowie

$$\Gamma_{\xi\nu\chi}(x, \Phi_1, \Phi_2) = 2\mu_a\zeta_a(-\xi_a^+(x, \Phi_1)\iota_a^+(x, \Phi_1) - \xi_a^+(x, \Phi_1)\iota_a^-(x, \Phi_1) + \xi_a^+(x, \Phi_1)\chi_a^+(x, \Phi_2) + \xi_a^+(x, \Phi_1)\chi_a^-(x, \Phi_2) + \xi_a^-(x, \Phi_1)\iota_a^+(x, \Phi_1) + \xi_a^-(x, \Phi_1)\iota_a^-(x, \Phi_1) - \xi_a^-(x, \Phi_1)\chi_a^+(x, \Phi_2) - \xi_a^-(x, \Phi_1)\chi_a^-(x, \Phi_2) + \nu^+(x, \Phi_2)\iota_a^+(x, \Phi_1) + \nu^+(x, \Phi_2)\iota_a^-(x, \Phi_1) - \nu^+(x, \Phi_2)\chi^+(x, \Phi_2) - \nu^+(x, \Phi_2)\chi^-(x, \Phi_2) - \nu^-(x, \Phi_2)\iota_a^+(x, \Phi_1) - \nu^-(x, \Phi_2)\iota_a^-(x, \Phi_1) + \nu^-(x, \Phi_2)\chi^+(x, \Phi_2) + \nu^-(x, \Phi_2)\chi^-(x, \Phi_2)) \quad (248)$$

Der Modenrührer, Phasenschieber oder Drehteller ändert nichts an dem Zustand, daß die Phasenbedingungen im Applikator, bzw. der Keramikoberfläche kohärent determiniert sind. Dadurch besteht zwischen Φ_1 und Φ_2 ein uns unbekannter, aber konstanter Phasenunterschied von $\Delta\Phi$. Wir können folgende Zuweisungen vornehmen

$$\Phi_1 = \Phi \quad \Phi_2 = \Phi + \Delta\Phi \quad . \quad (249)$$

Der Modenrührer, Phasenschieber oder Drehteller variiert nun Φ periodisch von $0 \dots 2\pi$. Damit ergibt sich das mittlere Feld aus dem Integral

$$\langle |E^2(x, \Delta\Phi)| \rangle_{\bar{\Phi}} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} E^2(x, \Delta\Phi, \Phi) d\Phi \quad . \quad (250)$$

Die Integration von

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \Gamma_{\xi\nu\chi}(x, \Delta\Phi, \Phi) d\Phi = 0 \quad (251)$$

leistet keinen Beitrag, die beiden anderen Anteile ergeben schließlich gleiche funktionale Abhängigkeiten, so daß wir zu dem Endergebnis

$$\begin{aligned} \langle |E^2(x, \Delta\Phi)| \rangle_{\bar{\Phi}} = & (\mu_a^2 + \zeta_a^2) (\cosh(2\delta(x - x_a)) + \cosh(2\delta x) - \\ & \cos(2\beta(x - x_a)) - \cos(2\beta x) - \\ & e^{-\delta(2x-x_a)} \cos(\beta x_a + \Delta\Phi) + e^{\delta(2x-x_a)} \cos(\beta x_a - \Delta\Phi) + \\ & e^{\delta x_a} \cos(\beta(2x - x_a) - \Delta\Phi) + e^{-\delta x_a} \cos(\beta(2x - x_a) + \Delta\Phi)) \end{aligned} \quad (252)$$

Die gesamte Energie in unserer eindimensionalen Keramik erhalten wir damit zu

$$\langle W(\Delta\Phi) \rangle_{\bar{\Phi}} = \frac{1}{2} \epsilon' \int_0^{x_a} \langle |E^2(x, \Delta\Phi)| \rangle_{\bar{\Phi}} dx \quad (253)$$

ebenso wie die dissipierte Leistung

$$\langle P(\Delta\Phi) \rangle_{\bar{\Phi}} = \frac{1}{2} \sigma \int_0^{x_a} \langle |E^2(x, \Delta\Phi)| \rangle_{\bar{\Phi}} dx \quad . \quad (254)$$

Eine räumliche Integration führt für die Leistung beispielsweise zu dem Ergebnis

$$\begin{aligned} \langle P(\Delta\Phi) \rangle_{\bar{\Phi}} = & \frac{1}{2} \sigma (\mu_a^2 + \zeta_a^2) \left(\frac{1}{2} \frac{e^{4\delta x_a} - 1}{e^{2\delta x_a} \delta} - \frac{\sin(2\beta x_a)}{\beta} - \right. \\ & \left. 2 \frac{\sinh(\delta x_a)}{\delta} \cos(\beta x_a + \Delta\Phi) + 2 \cosh(\delta x_a) \frac{\sin(\beta x_a)}{\beta} \cos(\Delta\Phi) \right) \end{aligned} \quad (255)$$

Dieses Ergebnis kann unmittelbar auf die in der Keramik deponierte Energie von (253) übertragen werden. Gleichung (255) erlaubt auf einfache Weise, aus einer vorgegebenen Leistung, bzw. Heizrate nach (242) die Feldverteilung und Energiedichte in einer Keramik, abhängig von $\sigma(\bar{T})$ und $\epsilon'(\bar{T})$ bei laufendem Modenrührer, Drehteller oder Phasenschieber auszurechnen.

Wir wenden nun den Auswirkungen der Moden-, bzw. Phasenverwirbelung für die deponierte elektrische Energiedichte in einer Keramik zu. Abb. 47 zeigt uns das Resultat im Vergleich mit Abb. 46 ohne weitere Hilfsmittel. Wir erkennen sofort, daß im Fall der stärkeren Absorption

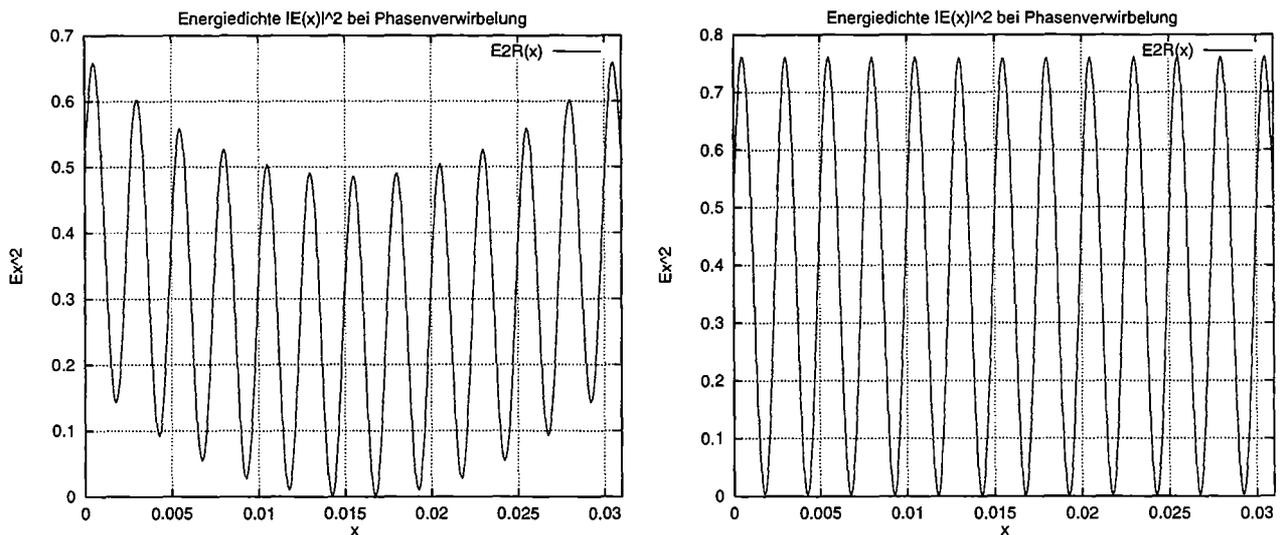


Abbildung 47: Mittlere Energiedichte in einer Keramik für $\epsilon' = 4$, $\sigma = 0.4 \frac{S}{m}$, bzw. $\sigma = 0.04 \frac{S}{m}$ bei Phasenverwirbelung

ein Unterschied am Rand der Keramik zu sehen ist. Das stationäre Feld ist angehoben im Randbereich, es existieren keine Nulldurchgänge mehr. Die Minima/Maxima-Verteilung im Zentrum der Keramik aber wird von der verwirbelten Phase nicht weiter verändert. Für kleinere Absorptionwerte ist der Effekt des Modenrührers auf die innere Feldverteilung ohne wesentlichen Einfluß.

Der Effekt der Phasenresonanz

Wir untersuchen nun den Zusammenhang der mittleren Leistung und der Phase $\Delta\Phi$ in (255). Wir stellen diesen Zusammenhang, um die Verhältnismäßigkeiten besser durchschauen zu können, für eine Keramik der Länge $x_a = 4$ cm, dar. Dieses ist bei 30 GHz mit $\epsilon' = 4$ eine resonante Länge (Im nichtresonanten Fall verschiebt sich die sich ergebende Leistungskurve lediglich entlang der $\Delta\Phi$ -Achse in Abb. 48). Die zugehörige Leistungsfunktion über $\Delta\Phi$ ist umseitig in Abb. 48 aufgetragen. Diese weist für $\Delta = \pi$ ein Maximum auf. Dieses Ergebnis stellt bei der Verwendung eines Modenrührers eine Instabilität dar:

Gehen wir zunächst von einem Körper aus, der in einem Applikator mit homogenem Feld eingebracht wird. Ist die Keramik klein, wird sich der Betrag des äußeren Feldes unwesentlich ändern. Die Phasenverteilung selber ist eine unbekannte Funktion; das Platzieren der Keramik an verschiedene Orte kann $\Delta\Phi$ als Randbedingung für diesen Körper unterschiedlich gestalten. Wir folgern, daß eine phasenabhängige Ankopplung an das homogene Feld beste-

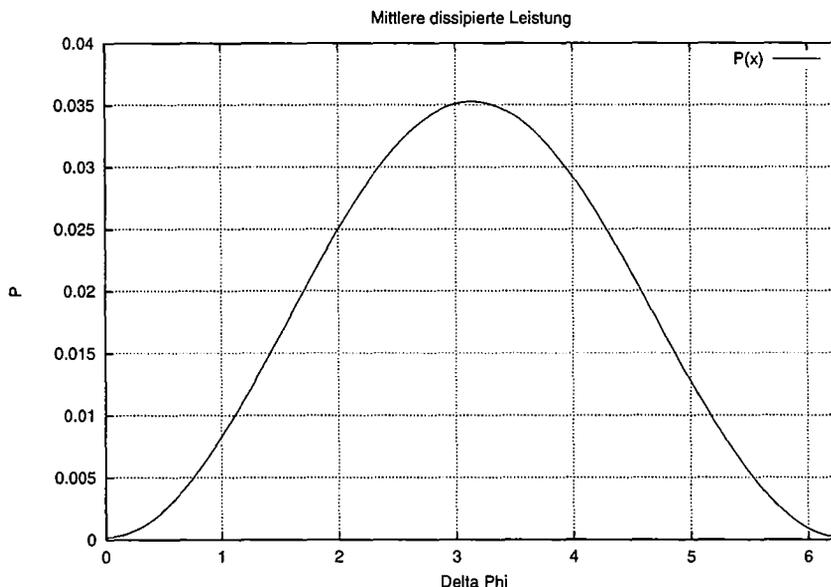


Abbildung 48: Leistungsaufnahme bei vorgegebenem äußerem Feld und Phasenzustand $\Delta\Phi$

hen kann. Dieses ist für eine einzelne Keramik weniger problematisch, als für eine Charge. Betrachten wir eine solche Ansammlung von Grünkörpern in einem homogenen Feld, so kann sich für jeden Körper die Randbedingung für $\Delta\Phi$ voneinander unterscheiden. Damit koppeln verschiedene Keramiken in der Charge unterschiedlich an das HF-Feld an; eine gleichmäßige Sinterung ist damit nicht notwendiger und hinreichenderweise bei der Verwendung eines Modenrührers gewährleistet. Im folgenden werden wir Gegebenheiten untersuchen, die diesem Umstand entgegenwirken können.

5.9.2 Die Kombination Modenrührer und Diffusor

Wir untersuchen nun die Kombination verschiedener Hilfsmittel und ihre Auswirkung auf die Feldverteilung im inneren einer Keramik. Ein Diffusor hat die Wirkung, den kohärenten Phasenbezug eines Wellenfeldes zu zerstören. Zusätzlich haben wir einen Modenrührer im Applikator eingebaut. Wir betrachten wiederum (243)

$$E_x^2(x, \Phi_1, \Phi_2) = \Gamma_{\xi\nu}(x, \Phi_1, \Phi_2) + \Gamma_{\nu\chi}(x, \Phi_1, \Phi_2) + \Gamma_{\xi\nu\chi}(x, \Phi_1, \Phi_2) \quad (256)$$

Die Kohärenz der Randbedingungen der beiden gegenüberliegenden Seiten der Keramik sei nun vollständig zerstört. Damit liegt an der einen Seite irgendein Zustand Φ_1 vor, und an der anderen Seite ein Zustand Φ_2 . Damit erhalten wir, wenn ein Modenrührer die jeweiligen

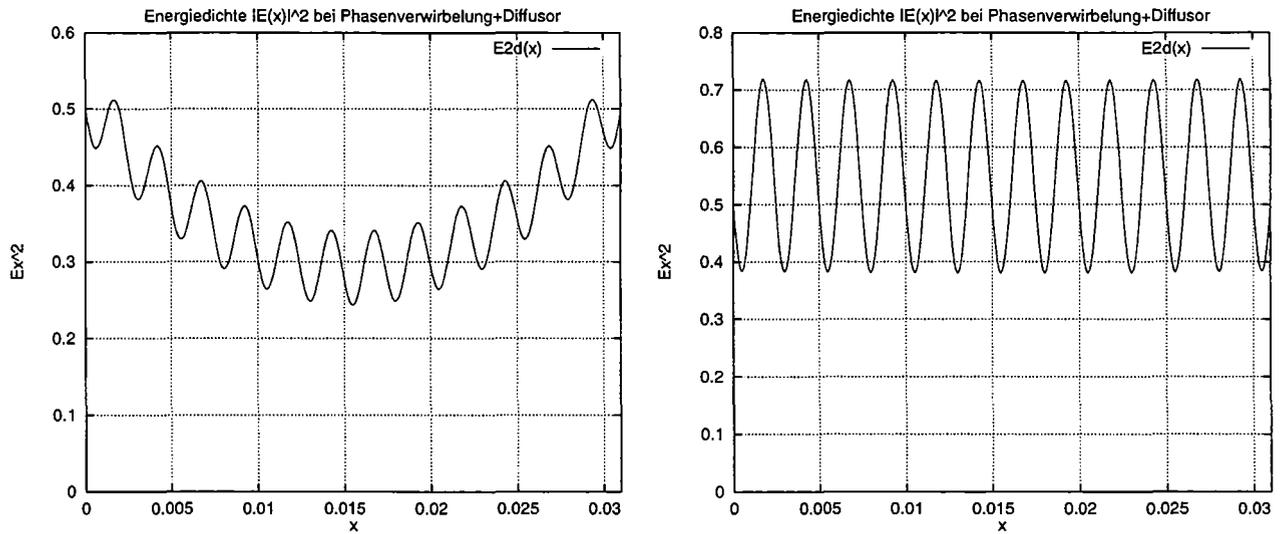


Abbildung 49: Mittlere Energiedichte in einer Keramik für $\epsilon' = 4$, $\sigma = 0.4 \frac{S}{m}$, bzw. $\sigma = 0.04 \frac{S}{m}$ bei Phasenverwirbelung und Diffusor. Es ist eine starke Homogenisierung des Feldes in der Keramik zu sehen.

Phasen unabhängig verwirbelt, das mittlere Feld aus der Beziehung

$$\langle |E^2(x)| \rangle_{\bar{\Phi}_1, \bar{\Phi}_2} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} E^2(x, \Phi_1, \Phi_2) d\Phi_1 d\Phi_2 \quad (257)$$

Die mittelnden Integrationen gestaltet sich nun anders als beim kohärenten Fall. Integrale der Form

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \xi_a^+(x, \Phi_1) \chi_a^+(x, \Phi_2) d\Phi_1 d\Phi_2, \quad \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \nu^+(x, \Phi_2) \iota_a^+(x, \Phi_1) d\Phi_1 d\Phi_2 \quad etc. \quad (258)$$

verschwinden. Ebenso hebt sich wiederum der Integralkomplex

$$\frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \Gamma_{\xi\nu\chi}(x, \Phi_1, \Phi_2) d\Phi_1 d\Phi_2 = 0 \quad (259)$$

weg. Das Endergebnis gestaltet sich letztlich einfacher in den funktionalen Abhängigkeiten. Wir erhalten, nun nur noch abhängig vom Ort, den Geometrie- und Materialvorgaben

$$\langle |E^2(x)| \rangle_{\bar{\Phi}_1, \bar{\Phi}_2} = (\mu_a^2 + \zeta_a^2) (\cosh(2\delta(x - x_a)) + \cosh(2\delta x) - \cos(2\beta(x - x_a)) - \cos(2\beta x)) \quad (260)$$

Abb. 49 zeigt den Einfluß der Kombination aus Kohärenzzerstörung und Phasenverwirbelung auf. Ein Einfluß ist nun deutlich auch im Inneren der Keramik zu ersehen. Eine konstante wirksame Energiedichte, die über den ganzen Bereich leichten periodischen Schwankungen unterworfen ist, ist zu erkennen. Auch für kleine Leitfähigkeiten zeigt sich nun ein signifikanter Einfluß auf die Feldstruktur. Es bilden sich keine Knoten mehr aus, die Feldglättung ist von hoher Qualität in der Keramik. Die Möglichkeit, Hot-Spots in Bereichen hoher Amplitude im Material auszubilden, ist deutlich reduziert. Zu Abb. 49 sind Abb. 47 für die Feldstruktur mit Phasenverwirbelung (ohne Diffusor) und Abb. 46 ohne weitere Hilfsmittel direkt zu vergleichen.

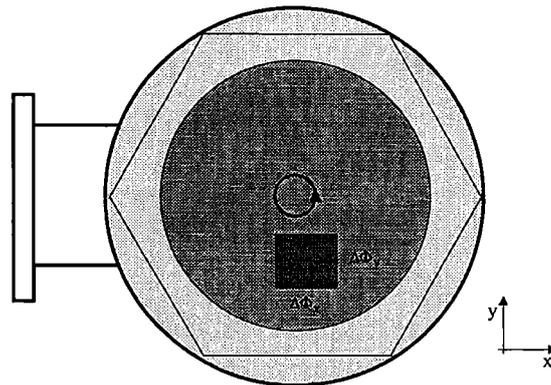
Zusätzlich kann für eine Charge das zuvor bei Verwendung reiner Phasenverwirbelung aufgetretene Phänomen der Phasenresonanz nicht auftreten, da der kohärente Phasenzug $\Delta\Phi$ zerstört wurde. Dieses hat eine gleichmäßige Ankopplung an ein äußeres homogenes elektrisches Feld für verschiedene Körper zur Folge. Wir ersehen dieses direkt aus der Leistung

$$\langle P \rangle_{\bar{\Phi}_1, \bar{\Phi}_2} = \frac{1}{2} \sigma \int_0^{x_a} \langle |E^2(x, \Delta\Phi)| \rangle_{\bar{\Phi}_1, \bar{\Phi}_2} dx \quad (261)$$

die wir ausschließlich aus geometrischen und materialspezifischen Angaben (neben der ein-koppelnden Frequenz) berechnen können

$$\langle P \rangle_{\bar{\Phi}_1, \bar{\Phi}_2} = \frac{1}{2} \sigma (\mu_a^2 + \zeta_a^2) \left(\frac{1}{2} \frac{e^{4\delta x_a} - 1}{e^{2\delta x_a} \delta} - \frac{\sin(2\beta x_a)}{\beta} \right) \quad (262)$$

5.9.3 Die Kombination Modenrührer und Drehteller



Der Phasenunterschied $\Delta\Phi$ in jedem Punkt an den Oberflächen der Keramik durchläuft während eines Umdarfs im Idealfall alle Werte von $0..2\pi$.

Abbildung 50: Variation der Phasenunterschiede $\Delta\Phi$ beim Drehteller im homogenen Feld

Eine weitere Kombinationsmöglichkeit mit Modenrührer liegt darin, die sich bislang fest an einem Ort befindende Keramik periodisch durch das stationäre, aber phasenverwirbelte Feld

zu bewegen. Diese Anordnung realisiert sich durch einen Drehteller, auf dem die Probe auf einer Kreisbahn durch den Applikator rotiert. In diesem Fall liegt für jeden Ort eine andere, kohärente Randbedingung der Phasendifferenz $\Delta\Phi$ vor, die, nachdem der Weg geschlossen wurde, im Idealfall eine Variation aller Werte zwischen $0..2\pi$ angenommen hat. Wir können das mittlere Feld berechnen aus

$$\langle |E^2(x)| \rangle_{\bar{\Phi}\Delta\bar{\Phi}} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \langle |E^2(x, \Delta\Phi)| \rangle_{\bar{\Phi}} d\Delta\Phi \quad . \quad (263)$$

Die Integration von (252) gestaltet sich hier recht einfach. Wir erhalten ein Ergebnis, das interessanterweise unmittelbar mit dem Ergebnis der Kombination Modenrührer mit Diffusor in Gleichung (260) übereinstimmt

$$\langle |E^2(x)| \rangle_{\bar{\Phi}\Delta\bar{\Phi}} = \langle |E^2(x)| \rangle_{\bar{\Phi}_1\bar{\Phi}_2} \quad . \quad (264)$$

Ebensolches gilt damit für die Leistungsbeziehung

$$\langle P \rangle_{\bar{\Phi}\Delta\bar{\Phi}} = \langle P \rangle_{\bar{\Phi}_1\bar{\Phi}_2} \quad . \quad (265)$$

5.10 Konzeption eines optimierten HF-Applikators

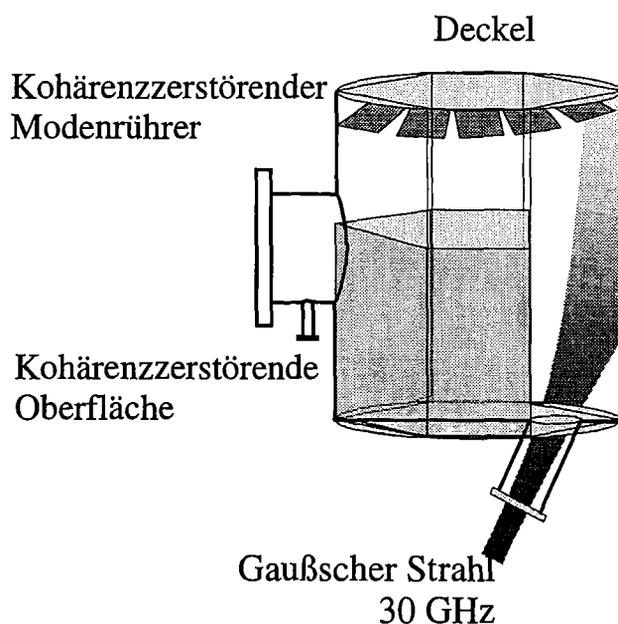


Abbildung 51: Konzept eines amplituden- und phasenoptimierten HF-Applikators

In diesem Kapitel wurde gezeigt, daß es verschiedene technische Möglichkeiten gibt, die Feldverteilung im Inneren einer Keramik gemäß dem Ergebnis von Gleichung (260) zu beeinflussen. Im wesentlichen stellt sich für einen großen hochmodigen Applikator im räumlichen

Fall die Ausbildung von Knoten im Dielektrikum durch die Überlagerung vieler Moden weniger stark dar, als es aus den eindimensionalen Betrachtungen hervorgeht. Der Gewinn für die Qualitätssicherung durch die Bereitstellung gleichwertiger Bedingungen für eine Charge durch die Modenrührer/Diffusor-Kombination, die eine von den äußeren Bedingungen unabhängige Homogenisierung des Feldes in den Keramiken selbst ermöglicht, kann auf einfache Weise realisiert werden. Abb. 51 zeigt eine Konzeption, die eine Optimierung hinsichtlich der Amplitude im Applikator, gewonnen aus dem MiRa-Code und hinsichtlich der Phasenbedingungen, die in diesem Kapitel untersucht wurden, miteinander vereinigt. Die Zerstörung der Kohärenz mit Phasenverwirbelung wird durch einen diffus rotierenden Modenrührer, bzw. im Prozeßbereich angebrachte streuende Oberflächen gewährleistet.

6 Simulation des Verarbeitungsprozesses mit Millimeterwellen

Die Temperaturentwicklung in Keramiken, die thermische Dynamik der Materialfunktionen sowie die Diskussion von elektrothermischen Effekten (Hot-Spot Bildung) werden anhand von THESIS3D-Simulationen untersucht und in ihren Ergebnissen diskutiert. Die notwendige Unterscheidung verschiedener Phasen für den thermischen Heizprozeß wird aufgezeigt. Verschiedene Experimente dienen zum Vergleich mit THESIS3D-Simulationenvorhersagen. Es zeigt sich, daß hohe Temperaturgradienten mit der HF-Materialprozeßtechnik innerhalb von keramischen Körpern zu erwarten sind. Hierfür können, in Abhängigkeit der vorgegebenen Heizleistung (Heizrate) verschiedene Gründe vorliegen, die eine erfolgreiche Sinterung des Werkstücks verhindern können. Verschiedene Methoden, diese Gradientenbildung zu reduzieren, bzw. zu unterdrücken werden aufgezeigt. Die im vorigen Kapitel offengelegte Konzeption eines optimierten Applikatorsystems mit einer Phasenverwirbelungs-Diffusor-Kombination wird unter dem Aspekt eines sehr hohen Produktionsdurchsatzes (Bereitstellung sehr hoher Heizraten) und der Vermeidung elektrothermisch gebildeter Hot-Spots diskutiert.

6.1 Konventionelles Sintern mit der Fast-Firing Methode

Wir wollen uns zunächst einem sehr schnellen konventionellen Sinterungsverfahren, daß heißt ohne HF-Wellenunterstützung, zuwenden. Die Fast-Firing Methode sintert keramische Werkkörper thermisch über einen elektrisch vorgeheizten Ofen hoher Temperatur. Das Aufheizen des Materials verläuft dabei über reine Wärmeleitung von der Oberfläche zum Zentrum, wobei extrem hohe Heizraten unter konventionellen Gesichtspunkten erzeugt werden können. Dieses Verfahren legt für die Simulation mit dem THESIS3D-Code die Randbedingung

$$T_{\text{außen}} = \text{konstant} \quad T_{\text{außen}} > T_{\text{Material}} \quad (266)$$

fest.

Experimentelle Ergebnisse von Temperaturmessungen mit dieser konventionellen Methode wurden an der Universität Hamburg-Harburg gewonnen [68]. Zur Verifikation und zum Vergleich der Verarbeitung mit HF-Wellen wurden THESIS3D-Simulationen durchgeführt.

Eine Aluminiumoxid-Probe homogener Anfangstemperatur $T_0 = 30^\circ\text{C}$, $V = 6.5 \text{ cm}^3$ mit einer Ausgangsdichte von 55% der theoretischen Dichte (THD), wird in einen Ofen, der auf einer konstanten Temperatur mit $T_{\text{außen}} = 1050^\circ\text{C}$ gehalten wird, eingebracht. Die aufgezeigten Modellierungsdaten stammen aus [68], bzw. [69].

Abb.52 zeigt eine sehr gute Übereinstimmung von Messdaten der Zentraltemperatur der aufgeheizten Probe und einer THESIS3D-Simulation. Die thermische Anfangsheizleistung P_{therm} ,

mit der die Probe beaufschlagt wird, liegt bei $\approx 236\text{W}$. Wir erkennen aus dem Verlauf der Zentraltemperatur in Abb.52, daß die thermische Leitung von der Oberfläche zum Zentrum in der Keramik erst nach etwa 20s einen erkennbaren Temperaturanstieg zur Folge hat. Die Grenz-

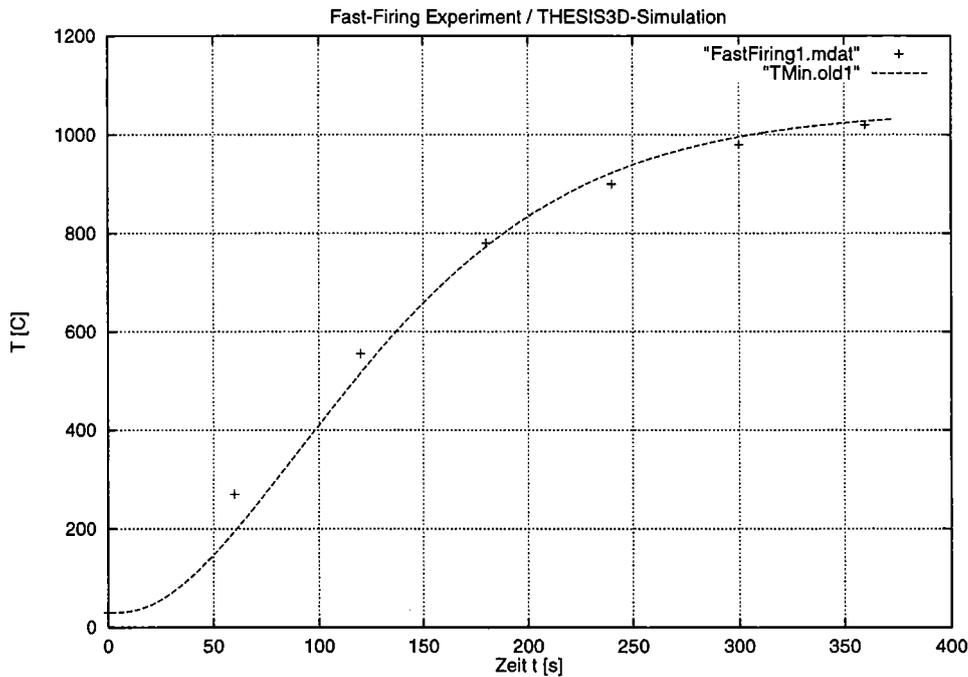


Abbildung 52: Vergleich eines Fast-Firing Experiments mit der THESIS3D-Simulation

temperatur der gesamten Probe, die mit der konventionellen Fast-Firing Methode erreicht werden kann, entspricht in einfacher Weise der Temperatur des an der Oberfläche vorgegebenen thermischen Strahlungsfeldes. Die Probe liegt dann im thermischen Gleichgewicht vor. Dieses wird bei diesem Experiment nach etwa 300s durch thermische Leitung in der Probe erreicht.

Abb.53 zeigt in weiteren Grafiken die Dynamik dieses Experiments auf. Sehr hohe Temperaturdifferenzen bilden sich aus. Die Oberflächentemperatur erreicht nach etwa 50s eine Temperatur von 1000°C . Der maximale Temperaturunterschied, der sich in der Keramik ausbildet zwischen heißer Oberfläche und kaltem Zentrum beträgt 900°C . Durch Wärmeleitung reduziert sich diese Differenz im thermischen Gleichgewicht auf Null.

Betrachten wir die Entwicklung der mittleren Temperatur

$$\bar{T}(t) = \frac{1}{V} \iiint T(\vec{x}, t) dV \quad (267)$$

der Probe (in Abb.53 Grafik oben links, "Temp.dat"). Wir können aus der Grafik entnehmen, daß etwa 250s notwendig sind, um eine mittlere Temperatur der Probe von 1000 Grad zu

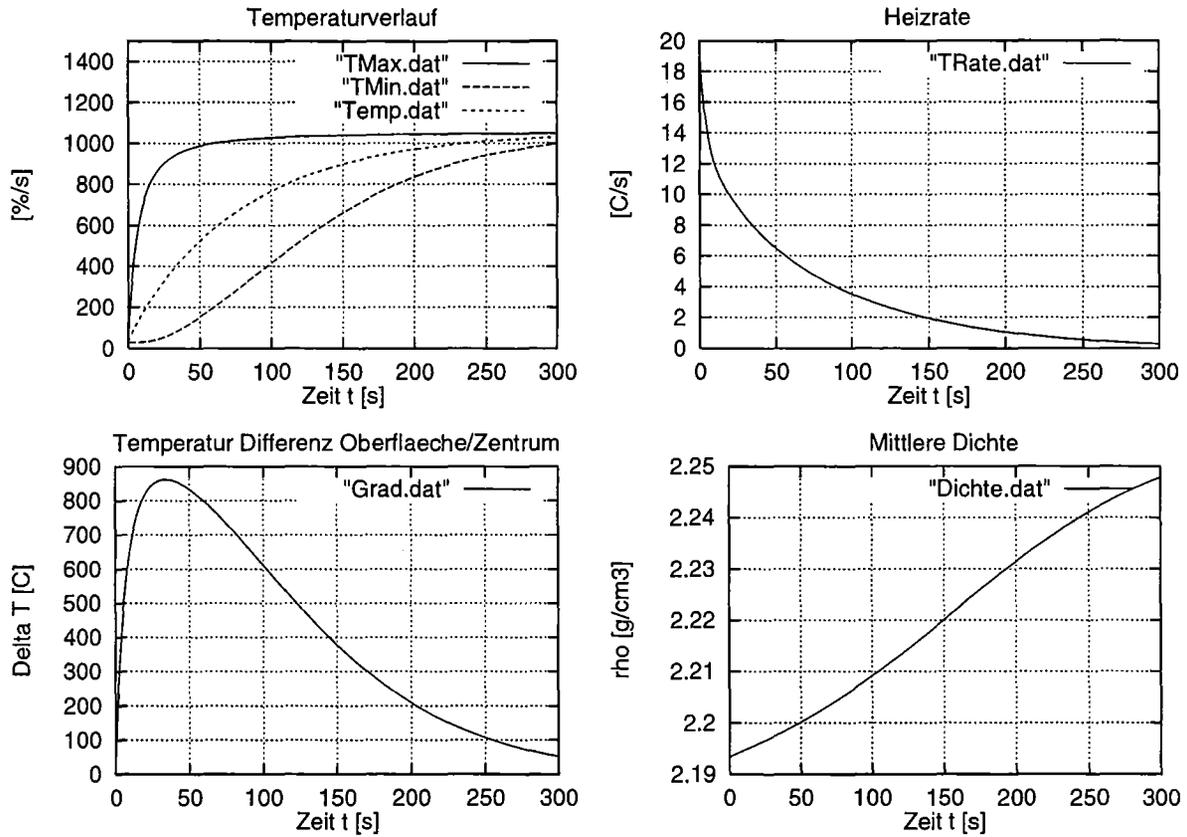


Abbildung 53: Das temperaturdynamische Verhalten der Fast-Firing Probe aus der THESIS3D-Simulation

erreichen. Die Heizrate der Probe

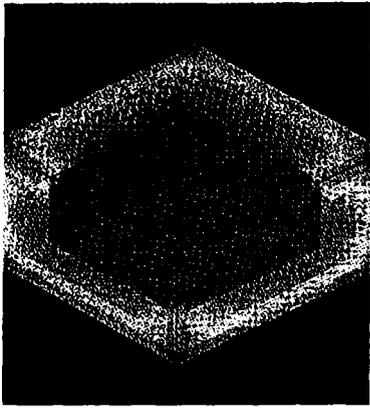
$$\dot{T}(t) = \frac{d\bar{T}(t)}{dt} \quad (268)$$

liegt anfänglich bei einem sehr hohen Wert von $20 \frac{C}{s}$ und fällt mit zunehmender Wärmeabstrahlung an den Oberflächen der Keramik für den thermischen Gleichgewichtszustand auf Null ab.

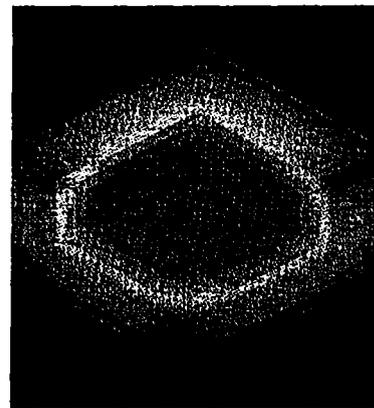
Die Verdichtung der Probe beim Sintern setzt zuerst an der Oberfläche ein und setzt sich dann zum Zentrum hin fort. Wir können das Verdichtungsverhalten der Probe aus dem Verlauf der räumlich gemittelten Dichte

$$\bar{\rho}(t) = \frac{1}{V} \iiint \rho(\vec{x}, t) dV \quad (269)$$

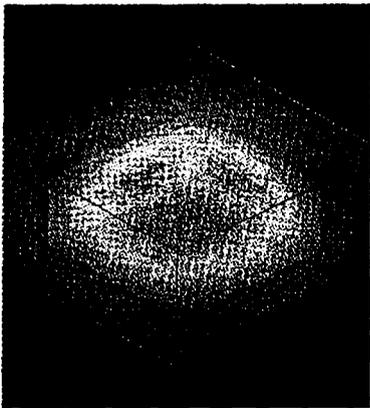
entnehmen. Wir stellen fest, daß kein stärkerer Verdichtungseffekt eingesetzt hat. Das vorgegebene Temperaturstrahlungsfeld von $1050^{\circ}C$ bei diesem Experiment liegt unterhalb der Sintertemperatur üblicher Aluminiumoxidkeramiken. Das Endvolumen der angesinterten Probe weist lediglich eine Kontraktion um $\approx 2.8\%$ in der Simulation auf. Für eine den gesamten



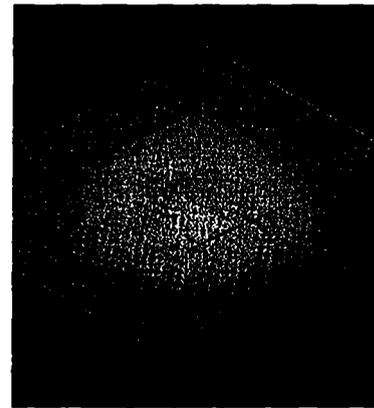
$t=40s$



$t=90s$



$t=140s$



$t=190s$



$t=240s$



$t=290s$

Abbildung 54: Typische Temperaturfeldverteilung in einer konventionell geheizten Keramik

Körper umfassende Verdichtung müßte \bar{T} , die mittlere Temperatur der Probe, auf mindestens 1200°C im thermischen Gleichgewicht gesteigert werden.

Abb.54 erlaubt für bestimmte Zeitschritte einen Blick auf die räumliche Verteilung des Temperaturfeldes in der Aluminiumoxidkeramik. Wir erkennen die typische Ausbildung des konventionellen Temperaturprofils in der Probe, am Rand heiß und innen kühler. Kanten und Ränder nehmen dabei am meisten Leistung des vorgegebenen thermischen Strahlungsfeldes auf, sind also am heißesten. Im thermischen Gleichgewicht liegen dann vollständig homogene Temperaturbedingungen im gesamten keramischen Körper vor.

6.2 Ein THESIS3D-Vergleichsexperiment mit HF-Wellen

Die folgenden Ergebnisse zeigen die grundlegenden Unterschiede zwischen konventionellen Materialverarbeitungsprozessen und dem Gebrauch von HF-Wellen auf. Sie wurden aus einem virtuellen THESIS3D-Computereperiment gewonnen.

Wir wollen eine keramische Probe, wie sie zuvor beim Fast-Firing Experiment verwendet wurde, bei gleicher vorgegebener Leistung verarbeiten, nun allerdings ausschließlich unter der Verwendung einer Hochfrequenzheizung. Abb.55 zeigt hier den zeitabhängigen Verlauf

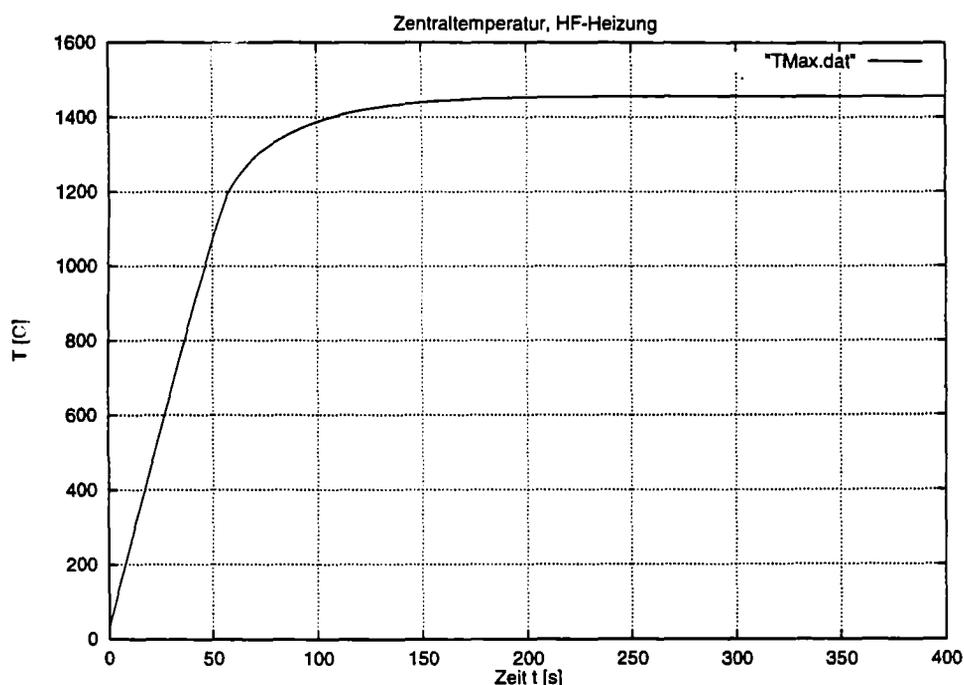


Abbildung 55: Zentraltemperaturentwicklung der Fast-Firing Probe bei Verwendung von HF-Wellen

der Zentraltemperatur. Wir erkennen einen sehr harten, instantan einsetzenden Tempera-

turanstieg wieder. Nach knapp 50s beträgt die Temperatur in der Keramik schon mehr als 1000°C. Die Grenztemperatur für die Probe im thermischen Gleichgewicht liegt verglichen mit dem Fast-Firing Experiment bei über 1400°C. Die HF-Welle koppelt trägheitslos an das Werkstück im gesamten Volumen an. Damit erhitzt sich der ganze Körper des Werkstücks in der Anfangsphase in gleicher Weise. Dies zeigt in Abb.56 eine Betrachtung der Tempera-

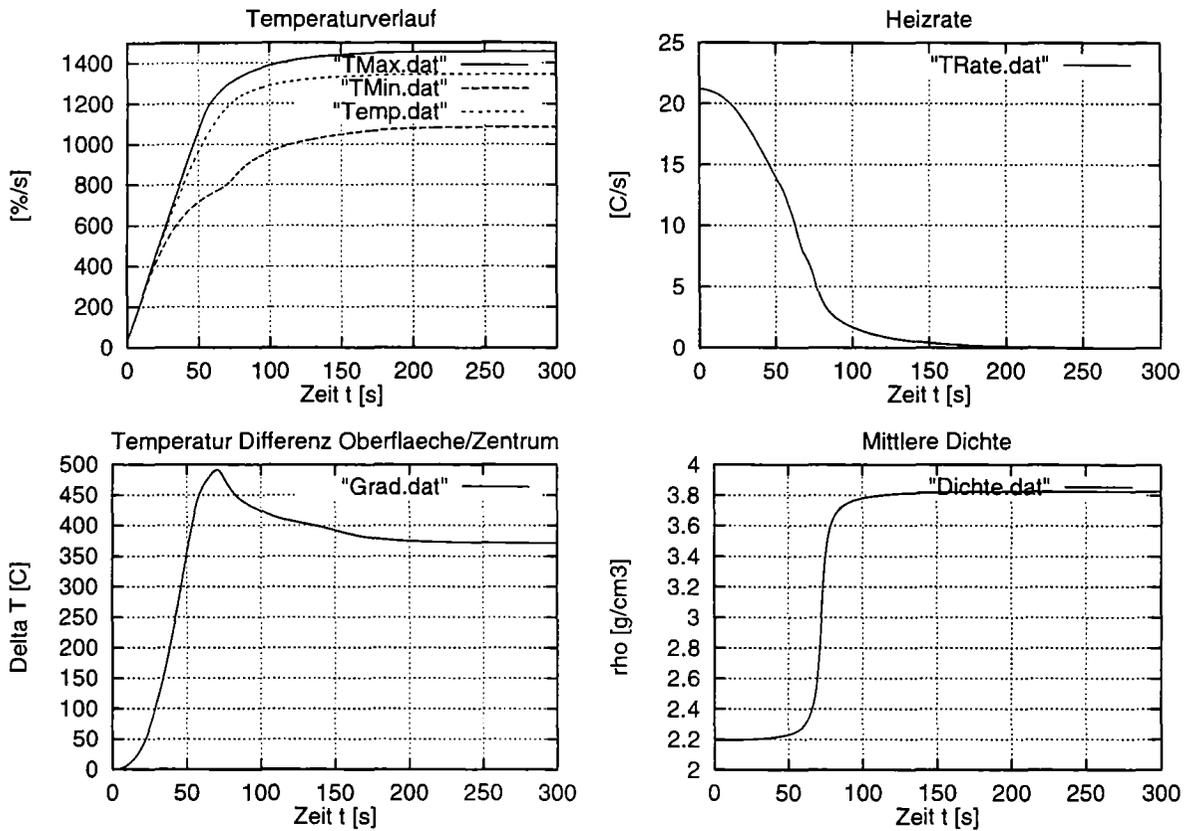
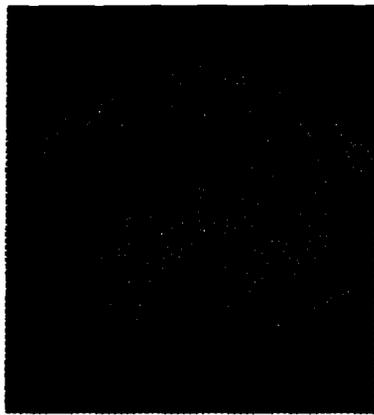


Abbildung 56: THESIS3D-Simulation mit Mikrowellen bei gleicher aufgewendeter Leistung wie beim Fast-Firing Experiment

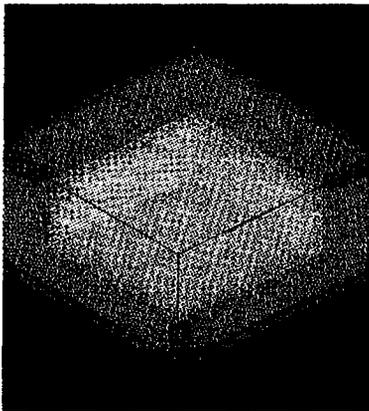
turverlaufskurven. Es sind die maximale Temperatur (hier also die Zentraltemperatur), die über die Probe räumlich gemittelte Temperatur $\bar{T}(t)$ und die minimale Temperatur (bei HF-Wellen Verwendung befindet sich diese an der Oberfläche) dargestellt. Wir sehen, daß erst bei Temperaturen um 200°C-400°C größere Temperaturgradienten im Material entstehen. Die dabei auftretenden Gradienten liegen deutlich niedriger als beim konventionellen Experiment. Allerdings bekommen wir im stationären Gleichgewichtsfall die Ausbildung eines räumlichen Temperaturgradientenplateaus. Dieses stellt sich durch die thermische Abstrahlung an der Oberfläche der Keramik ein, so daß wir einen heißen Kern mit einer kühleren Oberfläche erhalten.



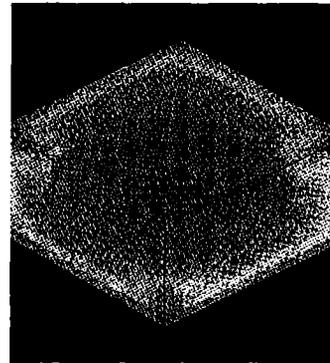
t=10s



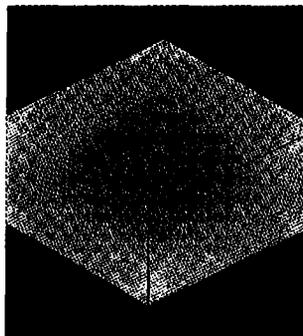
t=30s



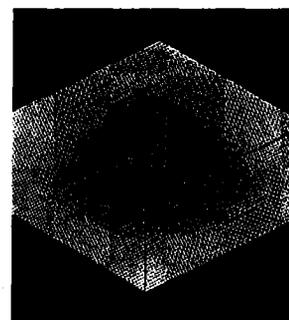
t=50s



t=70s



t=90s



t=110s

Abbildung 57: Temperaturentwicklung in einer mit einem homogenen HF-Feld erhitzten Keramik

Betrachten wir nun das Verdichtungsverhalten dieser Probe, so stellen wir fest, daß das Material einen sehr hohen Verdichtungsgrad aufweist. Nach etwa 70s überstieg die mittlere Proben-temperatur $\bar{T}(t)$ einen Wert von 1200°C und eine Sinterung mit Kontraktion des Werkstücks setzte ein. Es ergab sich in der Simulation eine Kontraktion um 42% vom Ausgangsvolumen. Diese Verdichtung umfaßt also nahezu den ganzen Körper, bis auf die kältere Oberflächenschicht. Dieses können wir aus den Temperaturverlaufskurven im stationären Zustand entnehmen: Der Abstand von \bar{T} zum Maximalwert der Temperatur (Zentrum) ist geringer, als der Abstand zum Minimalwert in einer Ecke. Damit liegt der Hauptanteil der Werte des räumlichen Temperaturfeldes in der Keramik näher zum Maximalwert verteilt und damit oberhalb der Sintertemperatur vor. Die Ecken des Werkstücks befinden sich damit noch in einer ungesinterten Phase.

Wir können das Verhalten, bei gleicher Leistung mit HF-Heizung auf wesentlich höhere Temperaturen zu kommen damit erklären, daß die HF-Leistung im gesamten Volumen ankoppelt, und nur durch langsamen thermischen Transport an der wärmeabstrahlenden Oberfläche abgeführt werden kann. Damit wird im Inneren der Keramik in gleicher Zeit eine höhere Temperatur erreicht. Wir können diese Beschleunigung an der mittleren Temperatur $\bar{T}(t) = 1000^\circ\text{C}$ bemessen. Mit Fast-Firing waren zum Erreichen dieser Temperatur etwa 250s notwendig, mit HF-Wellen erhöht sich die voluminöse Heizrate um einen Faktor 5-6.

Abb.57 erlaubt einen Blick in die räumliche Temperaturverteilung der Keramik während des Sinterprozesses. Wir ersehen unmittelbar einen dem konventionellen Temperaturverlauf entgegengesetztes Verhalten: aus dem Zustand gleichmäßiger Anfangstemperatur stellt sich im Endzustand ein inverses Temperaturprofil ein, d.h. im Kern heiß, am Rand kälter. Die Ecken sind hier deutlich als die Orte geringster Temperatur zu erkennen.

6.3 Simulation eines Heizexperiments am GOTS-Applikator

Im folgenden werden wir die Gültigkeit der THESIS3D-Rechnungen auch für den HF-Heizmechanismus der Überprüfung durch ein Experiment unterziehen. Die Untersuchung wurde im zylindrischen GOTS-Originalapplikator mit Modenrührer vorgenommen, wobei üblicherweise Heizraten von $1^\circ \dots 2^\circ\text{C}$ pro Sekunde verwendet werden.

Die untersuchte Al_2O_3 Probe war würfelförmig mit einer Kantenlänge von $d \approx 3.1\text{cm}$. Das entspricht einem Volumen $\approx 30\text{ cm}^3$, die Anfangsdichte wurde zu $\approx 1.4 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$ gemessen. Der Anfangstemperaturzustand der Probe waren isotherme $T_0 = 30^\circ\text{C}$. Die Probe war nicht thermisch isoliert, wurde also direkt dem HF-Feld bei einer Leistung von $P_{elec} \approx 72\text{W}$ ausgesetzt. Abb.58 zeigt auch für den HF-Fall sehr gute Übereinstimmung der Simulation mit experimentellen Daten. Bei diesen Leistungsverhältnissen konnte die Probe nicht auf Sinterbedingungen gebracht werden, es konnte weder im Experiment noch in der Simulation eine nennenswerte Verdichtung festgestellt werden. Die Probe zeigt schon ab $600^\circ \dots 650^\circ\text{C}$ den Übergang zum

stationären Gleichgewichtszustand. In weiteren Experimenten konnten die typischen Gradi-

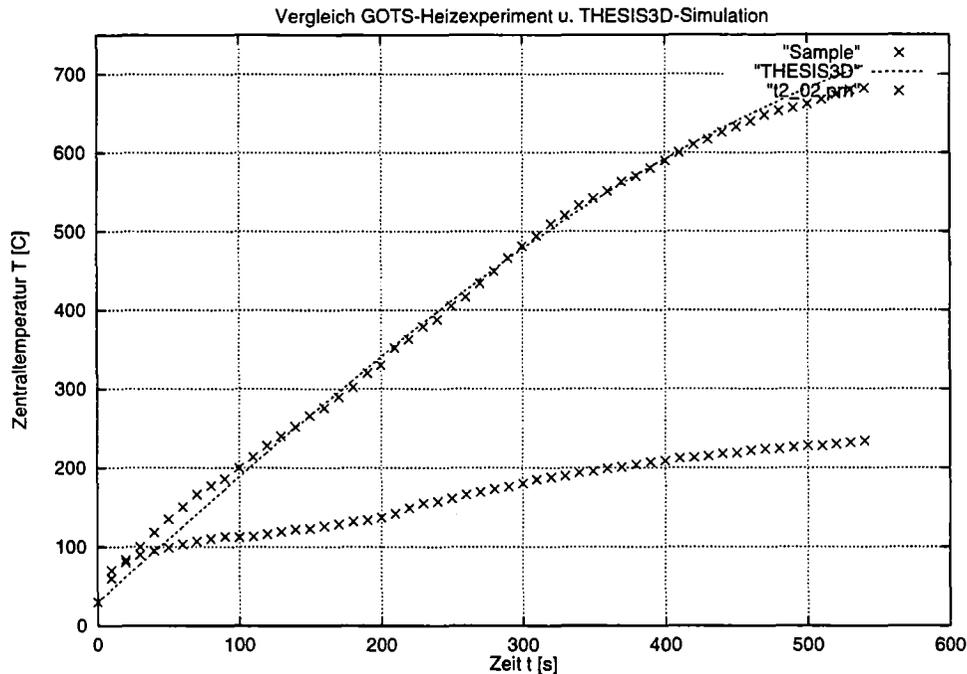


Abbildung 58: Zentraltemperaturentwicklung einer Aluminiumoxidkeramik im GOTS-Applikator und THESIS3D-Simulation

enten beim HF-Heizen von 500° . . . 600°C, wie sie der THESIS3D-Code zwischen heißem Kern und kühlerer Oberfläche vorhersagt werden, bestätigt werden. In Abb.58 ist eine Meßkurve der an einem Punkt der Oberfläche aufgenommenen Temperatur für diese Probe aufgetragen.

6.4 Selbstkonsistente Simulation und elektrothermische Effekte

Wir betrachten nun die anfängliche Heizphase einer keramischen Probe genauer und gehen weiterhin von dem würfelförmigen keramischen Grünkörper von 3.1cm Kantenlänge, wie er im vorigen GOTS-Experiment verwendet wurde, aus. Die Keramik wurde einer elektromagnetischen Heizleistung von 30W ausgesetzt. Die Heizrate liegt damit für diesen Körper bei etwa 1°C pro Sekunde. Es wurde für den THESIS3D-Code die Feldlösung der Kombination Modenrührer+Diffusor (260) verwendet. Wir können die Temperaturentwicklung der ersten 200s Abb.59 entnehmen. Bei dieser hohen Zeitauflösung erkennen wir, daß sich Temperaturunterschiede im Material auch in der Anfangsphase schon ausbilden. Diese sind zurückzuführen auf das Heizmuster, daß durch die inhomogene räumliche Feldverteilung in der Keramik gegeben ist. Es bilden sich an den Orten verstärkter Feldstärke höhere Temperaturwerte aus, an den

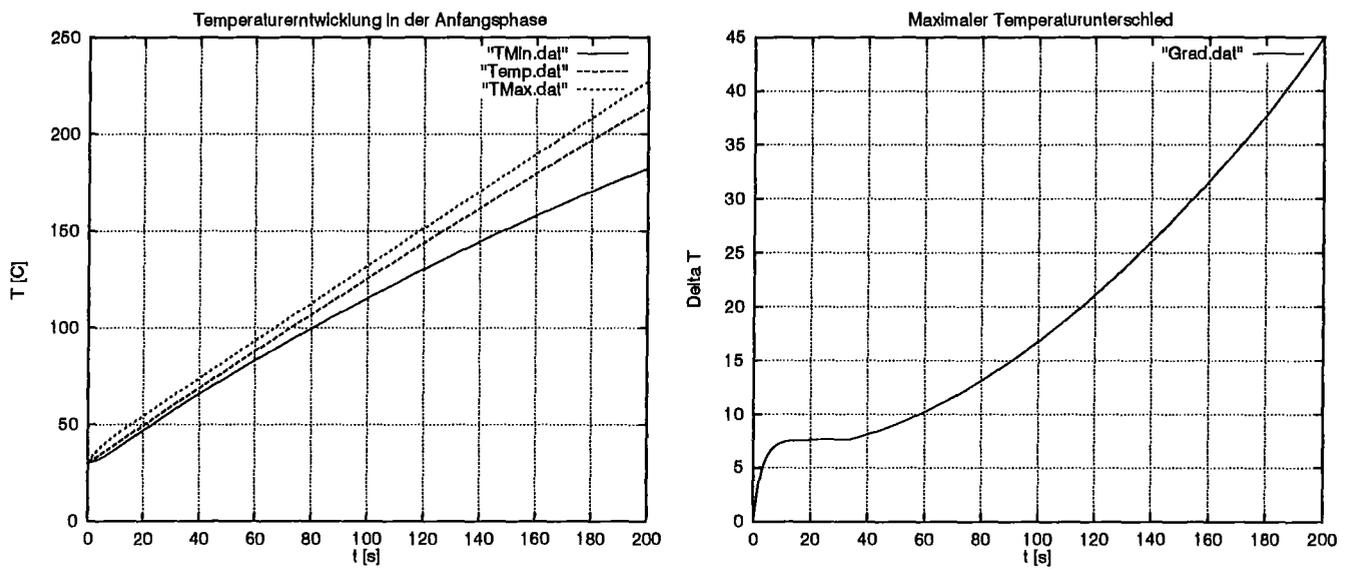


Abbildung 59: Ausbilden von Temperaturschwankungen in der Anfangsphase des Heizens im Körper

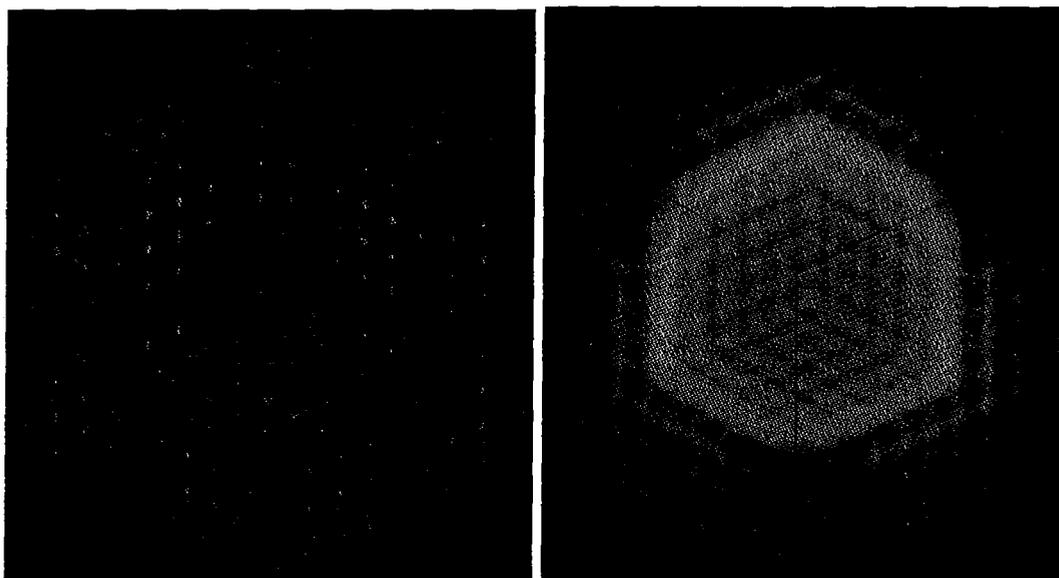


Abbildung 60: Thermische Diffusion von Hot-Spots in einer Keramik

umliegenden Orten niedriger Feldstärke ist die Temperatur geringer. Diese unterschiedlichen Temperaturdifferenzen bleiben knapp 40s konstant. Danach wird an den Kanten verstärkt thermische Strahlung abgegeben, so daß diese Punkte dem Temperaturverlauf im Inneren immer langsamer folgen, und so Temperaturgradienten am Rand sich im Vergleich stark ausprägen. Die räumliche Analyse in der Keramik zeigt, daß Temperaturschwankungen aufgrund der Feldverteilung in einer Umgebung um einen heißeren Punkt in der Anfangsphase in der Keramik bei etwa maximal 4-5 Grad liegen. Wir erkennen hier das Ausbilden von Hot-Spots, die allerdings bei den vorliegenden Bedingungen keinen Schaden während des Verarbeitungsprozesses anrichten können, da die Schwankungen der Feldstärke, bzw. der Temperatur innerhalb der Keramik hinreichend klein ausfallen.

Abb.60 zeigt die räumliche Verteilung der Temperatur in der Keramik nach $t = 38s$ und zu einem späteren Zeitpunkt von $t = 200s$. Wir erkennen das Feldmuster in dem Temperaturfeld wieder. Nach 200s, mit zunehmender Wärmeabstrahlung und thermischer Leitung treten die Temperaturdifferenzen aufgrund von Feldschwankungen hinter die Differenzen der thermischen Effekte zurück. Die Hot-Spots verschmelzen durch thermische Diffusion.

Drastischer stellt sich die Situation bei sehr hohen Heizraten dar. Wir betrachten das gleiche

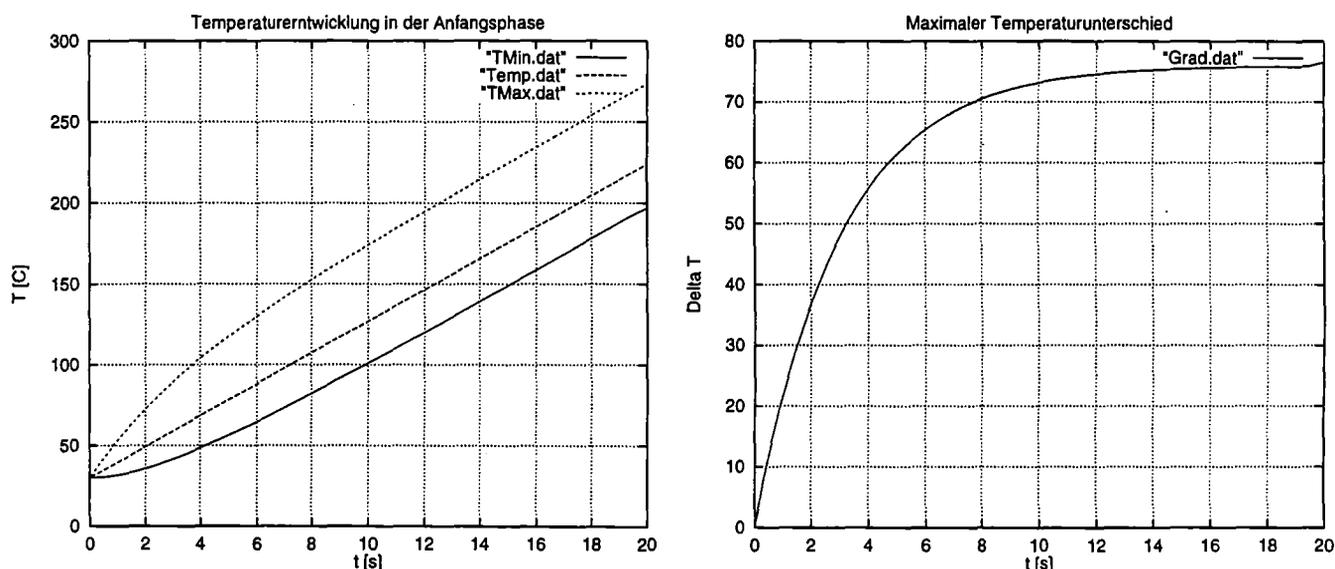


Abbildung 61: Bei hohen Heizraten bilden sich verstärkt Hot-Spots im Material

Experiment, diesmal aber bei einer zehnmal so hohen Heizrate für die gleiche Probe. Es bauen sich hier nach 14s-15s Temperaturunterschiede in der Keramik schon von 80°C auf. Es besteht für die weitere Sinterung weniger Zeit, die verschieden heißen Bereiche durch thermische

Diffusion anzugleichen. In dieser Phase können in der Probe durch Hot-Spot Bildung Keime für spätere Risse und das Auseinanderfallen der Probe durch eine inhomogene Kontraktion des Körpers entstehen.

Wir können daraus schließen, daß für vorgegebene Heizraten von Keramiken mit HF-Wellen eine natürliche Grenze besteht. Sobald lokale Feldüberhöhungen stärker heizen, als thermisch ein Ausgleichungsprozeß unterschiedlicher Temperaturbereiche erfolgen kann, werden lokale Inhomogenitäten der Dichte im gesamten Material schädliche Materialspannungen hervorrufen.

Die Verwendung der Phasenverwirbelungs/Diffusor Kombination verringert, wie in Kapitel 5 gezeigt wurde, die Bildung dieser elektrothermischen Feldschwankungen in einer Keramik erheblich. Damit sind in einem optimierten Applikator ein kontrollierbarer erhöhter Produktionsdurchsatz bei gesteigerten Heizraten möglich, wobei eine geringere Neigung zur Hot-Spot Bildung in den Werkstücken besteht.

7 Zusammenfassung, Schlußfolgerungen und Ausblick

Die Materialprozeßtechnik mit hochfrequenten elektromagnetischen Wellen bietet interessante innovative Anreize für die materialverarbeitende Industrie hinsichtlich zukünftiger Märkte. Neuartige Heiz- und Aufwärmverfahren mit Millimeterwellen eignen sich insbesondere für großtechnische Anwendungen, nicht nur bei keramischen Materialien unter hohen Qualitäts- und Produktionsdurchsatzanforderungen. Die Komplexität dieser Technologie und der Anspruch, neue Öfen und Komponenten durch Optimierung der Vorteile der HF-Prozeßtechnik in die bestehende industrielle Produktion einzuführen, erfordert ein hohes Entwicklungspotential.

In dieser Arbeit wurden erstmalig mit Simulationen zentrale Problemstellungen der HF-Prozeßtechnik, wie die Auslegung großer hochmodiger Applikatoren, die Bereitstellung großräumig homogener Feldverteilungen, die Auswirkung verschiedener technischer Hilfsmittel wie Modenrührer, Drehteller und Diffusoren auf die Feldverteilung im Applikator, bzw. der Keramik und die selbstkonsistente Temperaturdynamik in einer Probe systematisch untersucht und Konzepte zur Optimierung gewonnen.

Ergebniskonfigurationen aus Rechnungen wurden in Experimenten realisiert und mit den Simulationen verglichen. Es zeigten sich sehr gute Übereinstimmungen mit den theoretisch gewonnenen Vorhersagen.

Zur Feldberechnung in großen Applikatoren bei kleiner Wellenlänge wurde ein Programm, basierend auf optischen Begriffen erstellt. Anhand eines kovarianten Formalismus wird eine vollständige Geometrisierung der stationären Wellenausbreitung und der Feldberechnung erreicht. Die abgeleiteten, kovarianten Bestimmungsgleichungen stellen eine äquivalente geometrisierte Beschreibung der feldtheoretischen vektoriellen Helmholtzgleichung dar. Diese erweiternde Darstellung der physikalischen Optik löst ein elektromagnetisches Wellenfeld in ein Strahlenfeld auf. Damit können im Kalkül aus einzelnen Strahlen und ihren Gesetzmäßigkeiten bei beliebigen Materieverteilungen die Felder in geschlossenen, gekrümmten Geometrien berechnet werden. Für zukünftige Anwendungen sind Untersuchungen zur Modellierung weiterer komplexer Einstrahlungsquellen erforderlich.

Für die Temperatur- und Sinterdynamik wurde ein dreidimensionaler Code erstellt. Temperaturabhängige Materialeigenschaften wurden aus empirischen Messungen modelliert. Die Untersuchungen wurden für den Modellwerkstoff Aluminiumoxid vorgenommen. Die bedeutende Rolle thermischer Effekte, wie Temperaturstrahlung und Ausbildung hoher Temperaturgradienten mit einhergehender inhomogener Dichteverteilung im Material wurden aufgezeigt und im Experiment gemessen.

Die in der thermischen Aufheizzeitskala wirksamen Phänomene während der Sinterung wurden anhand signifikanter Simulationsbeispiele dokumentiert. Es bleibt als Schlußfolgerung,

daß eine Kombination der HF-Prozeßtechnik mit bestehender konventioneller Heiztechnologie die Ausbildung eines inversen Temperaturprofils im Material mit einhergehenden hohen thermischen Gradienten an den Oberflächen reduzieren kann.

Zur Feldhomogenisierung in keramischen Werkstücken wurde gezeigt, daß nur eine Kombination verschiedener technischer Hilfsmittel unmittelbar im gesamten Werkstück einen feldglättenden Einfluß besitzt. Prinzipiell ist im allgemeinen keine vollständig homogene Feldverteilung mit den hier diskutierten Hilfsmitteln in Dielektrika zu erreichen. Zu hohe Heizraten führen zur Ausbildung von elektrothermischen Hot-Spots im Werkstück und letztlich inhomogenen Keimen bei der Verdichtung. Diese Verhältnismäßigkeiten konnten anhand selbstkonsistenter Sintersimulationen aufgezeigt werden.

Die Herstellung neuartiger Werkstoffe (wie nanokristalline Materialien) in optimierten Applikatoren bieten für zukünftige Untersuchungen in der HF-Prozeßtechnik ein sehr vielversprechendes Aufgabengebiet. Dieses erfordert für den bestehenden THESIS3D-Code neuartige, lokale Modelle des Sinter- und Verdichtungsverhaltens in enger experimenteller materialwissenschaftlicher Kopplung.

Verfahrenstechnische Untersuchungen zum Prozeßablauf in Hybridanlagen und ihre physikalische sowie betriebswirtschaftliche Effizienzbewertung im Vergleich zum rein konventionellen, bzw. elektromagnetischen Verfahren stellen einen weiteren interessanten zukünftigen Forschungsschwerpunkt dar.

8 Anhang

8.1 Die Christoffelsymbole bei Kugelsymmetrie (s,p,q)

$$\Gamma_{22}^1 = -s \quad \Gamma_{33}^1 = -s \sin^2 p \quad (270)$$

$$\Gamma_{12}^2 = \Gamma_{21}^2 = \frac{1}{s} \quad \Gamma_{33}^2 = -\sin p \cos p \quad (271)$$

$$\Gamma_{13}^3 = \Gamma_{31}^3 = \frac{1}{s} \quad \Gamma_{23}^3 = \Gamma_{32}^3 = \cot p \quad (272)$$

Alle anderen $\Gamma_{\mu\nu}^\alpha$ sind identisch 0. Die Christoffelsymbole sind, den isotropen Anforderungen genügend, vom Azimut q unabhängig.

8.2 Dielektrisch gekrümmter Raum

Aus den bisherigen Überlegungen ergibt sich, daß eine Materieverteilung $\epsilon_r(\vec{x})$ den Raum durch eine stationäre Metrik $G_{\mu\nu}$ lokal und global kennzeichnet. Der Raum selbst übernimmt in diesem Bild eine physikalische Körperhaftigkeit indem dieser die Ausbreitung und Verformung der Wellen bzw. Felder vollständig determiniert. Wir wollen in diesem Kapitel ein koordinatenunabhängiges Maß für die im allgemeinen damit einhergehende Krümmung des Raumes herleiten und diskutieren.

Die Ausbreitung elektromagnetischer Wellen ergibt sich aus den Geodätengleichungen (126)

$$\frac{d^2 x^\nu}{ds^2} + \Gamma_{\alpha\beta}^\nu \frac{dx^\alpha}{ds} \frac{dx^\beta}{ds} = 0 \quad (273)$$

wobei der Raum über die ersten Ableitungen der Metrik mittels $\Gamma_{\alpha\beta}^\nu$ auf die ersten und zweiten Ableitungen der Strahltrajektorien wirkt. Bisher wurden die Christoffelsymbole $\Gamma_{\alpha\beta}^\nu$ nicht angegeben. Explizit können wir $\Gamma_{\alpha\beta}^\nu$ im System orthogonaler pseudokartesischer Koordinaten x^α bestimmen (d.h. die kontravarianten Komponenten x^α fallen mit den gewöhnlichen kartesischen vektoriellen Komponenten zusammen). Dieser Kunstgriff erlaubt uns zunächst einen einfachen Berechnungsansatz für die gefragten Größen. Es gelten die Identitäten

$$G_{\mu\nu} = n^2 \delta_{\mu\nu} \quad (274)$$

$$G_{\alpha\nu} G^{\nu\mu} = \delta_\alpha^\mu \quad (275)$$

$$x_\alpha = n^2 x^\alpha \quad (276)$$

$$G^{\mu\nu} \delta_{\alpha\nu} = \frac{1}{n^2} \delta_\alpha^\mu \quad (277)$$

$$G_{\mu\nu} \delta^{\alpha\nu} = n^2 \delta_\mu^\alpha \quad (278)$$

In pseudokartesischen Koordinaten lauten die Christoffelsymbole

$$\Gamma_{\alpha\beta}^\mu = \frac{1}{n} \left(n_{,\beta} \delta_\alpha^\mu + n_{,\alpha} \delta_\beta^\mu - n^{,\mu} G_{\alpha\beta} \right) \quad (279)$$

Die Christoffelsymbole selbst stellen keine Tensoren dar und transformieren sich auf eine komplizierte Art in andere Koordinatensysteme gemäß

$$\Gamma_{\alpha'\beta'}^{\mu'} = B_{\mu'}^{\mu} B_{\alpha'}^{\alpha} B_{\beta'}^{\beta} \Gamma_{\alpha\beta}^{\mu} - B_{\alpha,\beta}^{\mu'} B_{\alpha'}^{\alpha} B_{\beta'}^{\beta} \quad (280)$$

mit $B_{\alpha'}^{\alpha}$ als Transformationsgesetz der Koordinatendifferentiale. Die Metrik transformiert nach der Vorschrift

$$G_{\mu'\nu'} = G_{\mu\nu} B_{\mu'}^{\mu} B_{\nu'}^{\nu} \quad . \quad (281)$$

Die optische Weglänge des Strahls ist invariant und gehorcht der Bedingung

$$ds'^2 = G_{\mu'\nu'} dx^{\mu'} dx^{\nu'} = G_{\mu\nu} dx^{\mu} dx^{\nu} = ds^2 \quad . \quad (282)$$

Wir wollen nun direkte Aussagen über die Deformation des Raumes und der damit verbundenen Deformation von Wellenfronten bei beliebiger Materieverteilung gewinnen. Wir berechnen hierzu in unserem pseudokartesischen Koordinatensystem den Krümmungstensor $R_{\alpha\beta s}^{\mu}$, der der expliziten Vorschrift

$$R_{\alpha\beta s}^{\mu} = \Gamma_{\alpha s, \beta}^{\mu} - \Gamma_{\alpha\beta, s}^{\mu} + \Gamma_{\kappa, \beta}^{\mu} \Gamma_{\alpha s}^{\kappa} - \Gamma_{\kappa, s}^{\mu} \Gamma_{\alpha\beta}^{\kappa} \quad (283)$$

genügt. Eine längere Rechnung ergibt explizit in pseudokartesischen Koordinaten

$$R_{\alpha\beta s}^{\mu} = \frac{1}{n} \left(n_{,s}^{\mu} G_{\alpha\beta} - n_{,\beta}^{\mu} G_{\alpha s} \right) \quad . \quad (284)$$

Um zu einem invarianten lokalen Maß der Raumdeformation (Raumkrümmung) durch die Materieverteilung zu gelangen, wollen wir hieraus den Krümmungsskalar R berechnen. Hierzu benötigen wir den Ricci-Tensor, den wir durch Verjüngung des Krümmungstensors gemäß

$$R_{\alpha s} = R_{\alpha\mu s}^{\mu} = \frac{1}{n} \left(n_{,\alpha, s} - n_{,\mu}^{\mu} G_{\alpha s} \right) \quad (285)$$

erhalten. Damit bekommen wir den Krümmungsskalar R nach folgender Rechenvorschrift

$$R = R_{\mu}^{\mu} = G^{\mu\nu} R_{\mu\nu} = -\frac{2}{n} n_{,\mu}^{\mu} \quad . \quad (286)$$

Da dieser Skalar invariant unter jeder Transformation sein muß, können wir das Ergebnis koordinatenunabhängig sofort verallgemeinern zu

$$\mathbf{R} = -\frac{2}{\mathbf{n}} \mathbf{n}_{;\mu}^{\mu} \quad . \quad (287)$$

Wir ersehen daraus (287), daß die lokale Krümmung des Raumes ein Effekt zweiter Ordnung der Materieverteilungsfunktion ist.

8.3 Gekrümmte Flächen

Eine beliebige Fläche im dreidimensionalen Raum ist eine zweidimensionale Mannigfaltigkeit, kann also über zwei Variablen dargestellt werden. u, v seien geeignete Variablen zu einer Parametrisierung der Fläche:

$$\vec{x}(u, v) = \begin{pmatrix} x(u, v) \\ y(u, v) \\ z(u, v) \end{pmatrix} . \quad (288)$$

Die durch u bzw. v festgelegten Kurven bei gleichzeitigem Festhalten des jeweils anderen Parameters beschreiben dabei die krummlinigen Koordinatenlinien der Fläche.

Wir greifen nun einen beliebigen Punkt P_0 auf der Fläche mit den Koordinaten (u_0, v_0) heraus. Die Tangentenvektoren längs der krummlinigen Koordinatenlinien in diesem Punkt erhalten wir durch Differentiation nach den Parametern u bzw. v :

$$\vec{t}_u = \frac{\partial \vec{r}}{\partial u} \quad , \quad \vec{t}_v = \frac{\partial \vec{r}}{\partial v} . \quad (289)$$

Der Einheitsnormalenvektor bezüglich der Fläche in P_0 ergibt sich daraus unmittelbar zu

$$\hat{n} = \frac{\vec{t}_u \times \vec{t}_v}{|\vec{t}_u \times \vec{t}_v|} . \quad (290)$$

Die Vektoren $\hat{t}_u, \hat{t}_v, \hat{n}$ spannen ein begleitendes Dreibein auf der parametrisierten Fläche auf.

8.4 Metrische Eigenschaften einer Fläche

Wir wollen uns nun den lokalen, intrinsischen Eigenschaften einer Fläche zuwenden. Wir können aus dem Differential

$$d\vec{r} = \vec{t}_u du + \vec{t}_v dv \quad (291)$$

das Differential der Bogenlänge ds^2 leicht bestimmen aus

$$ds^2 = d\vec{r} \cdot d\vec{r} = \vec{t}_u^2 du^2 + 2\vec{t}_u \cdot \vec{t}_v dudv + \vec{t}_v^2 dv^2 . \quad (292)$$

Wir können letzteres auffassen als Matrixmultiplikation, wenn wir (Tensorschreibweise) den Vektor x^μ einführen mit $x^1 = u$ und $x^2 = v$ nach

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu \quad (293)$$

Die Matrix $g_{\mu\nu}$ ist der metrische Tensor, im allgemeinen eine Funktion der Koordinaten u, v , und beinhaltet die lokalen Eigenschaften der Fläche im betrachteten Punkt. Wir können $g_{\mu\nu}$ sofort ablesen:

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} \vec{t}_u^2 & \vec{t}_u \cdot \vec{t}_v \\ \vec{t}_u \cdot \vec{t}_v & \vec{t}_v^2 \end{pmatrix} \quad (294)$$

Man erkennt unmittelbar die Symmetrieeigenschaft des metrischen Tensors $g_{\mu\nu} = g_{\nu\mu}$, sowie, daß im Falle orthogonal gewählter krummliniger Koordinaten $g_{\mu\nu}$ diagonal ist, da in diesem Falle das Skalarprodukt der Tangentenvektoren $\vec{t}_u \cdot \vec{t}_v = 0$ ist. Ist $g = \det g_{\mu\nu}$, dann erhält man die kontravarianten Komponenten $g^{\mu\nu}$

$$g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} \frac{g_{22}}{g} & -\frac{g_{21}}{g} \\ -\frac{g_{12}}{g} & \frac{g_{11}}{g} \end{pmatrix} . \quad (295)$$

Dieses ist direkt aus der Orthogonalitätseigenschaft von $g_{\mu\nu}$ ersichtlich

$$g_{\mu\alpha} g^{\alpha\nu} = \delta_\mu^\nu . \quad (296)$$

Wie schon angedeutet ist die (u, v) -Parametrisierung für die Oberfläche nicht die einzig gültige. Vielmehr können wir eine andere Koordinatendarstellung x'^μ wählen. Als Koordinatentransformationen sind alle Transformationen zugelassen, die einen eindeutigen Zusammenhang gewährleisten:

$$x'^\mu = x'^\mu(x^\nu) . \quad (297)$$

Die Differentiale transformieren sich damit nach

$$dx'^\mu = A_\nu^\mu dx^\nu \quad (298)$$

mit

$$A_\nu^\mu = \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu} . \quad (299)$$

Eine solche Koordinatentransformation ist stets eindeutig umkehrbar:

$$A_\alpha^\nu A_\mu^\alpha = \delta_\mu^\nu . \quad (300)$$

Die Differentiale transformieren sich also, das Bogenelement ds^2 stellt dagegen eine Invariante dar $ds'^2 = ds^2$. Auch der metrische Tensor unterliegt bei einer Koordinatentransformation einem Darstellungswechsel

$$g'_{\mu\nu} = g_{\alpha\beta} A_\mu^\alpha A_\nu^\beta . \quad (301)$$

Für g gilt

$$g' = (\det A_\nu^\mu)^2 g . \quad (302)$$

$\det A_\nu^\mu$ stellt dabei die Jacobi-Determinante der Transformation dar. Die bisherig gemachten Überlegungen aus (292), der 1. Fundamentalform der Fläche, waren alle 1. Ordnung in den Ableitungen.

8.5 Innere Geometrie und Krümmung

Sind Flächen gekrümmt, so zeigt sich dieses durch abweichende Eigenschaften von der euklidischen Geometrie. Beispielsweise beläuft sich die Winkelsumme eines Dreiecks auf einer gekrümmten Fläche im allgemeinen nicht auf 180 Grad. Zur einer weiteren formalen Beschreibung müssen wir an dieser Stelle Christoffelsymbole

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{\mu} = \frac{1}{2}g^{\mu\nu}(g_{\alpha\nu,\beta} + g_{\beta\nu,\alpha} - g_{\alpha\beta,\nu}) \quad (303)$$

eingeführen. Man erkennt, daß in $\Gamma_{\alpha\beta}^{\mu}$ die ersten Ableitungen des metrischen Tensors eingehen. Man kann aus den Christoffelsymbolen den Krümmungstensor R_{msq}^r gewinnen

$$R_{msq}^r = \Gamma_{mq,s}^r - \Gamma_{ms,q}^r + \Gamma_{ns}^r\Gamma_{mq}^n + \Gamma_{nq}^r\Gamma_{ms}^n \quad (304)$$

Man ersieht hieraus sofort die zweiten Ableitungen des metrischen Tensors. Durch Verjüngung (Gleichsetzen und summieren zweier Indices) eines Tensors höherer Stufe erhält man einen Tensor um 1 Stufe erniedigt:

$$R_{mq} = R_{maq}^a \quad (305)$$

R_{mq} nennt sich hierbei der Ricci-Tensor. Auch dieser läßt sich verjüngen

$$R = R_m^m \quad (306)$$

zum sogenannten Krümmungsskalar. Auf einer zweidimensionalen Fläche läßt sich zeigen, daß der Krümmungstensor nur eine wesentliche Komponente, den Krümmungsskalar besitzt:

$$R_{\mu\beta\nu}^{\alpha} = R(\delta_{\beta}^{\alpha}g_{\mu\nu} - \delta_{\nu}^{\alpha}g_{\mu\beta}) \quad (307)$$

Der Krümmungsskalar R läßt sich mit dem Krümmungsradius, bzw. der Krümmung K identifizieren

$$K = \frac{1}{R^2} \quad (308)$$

Im zweidimensionalen Fall läßt sich K explizit angeben (Gaußsche Flächenkrümmung, Theorema egregium)

$$K = \frac{1}{2g_{11}g_{22}} \left[-\frac{\partial^2 g_{11}}{\partial(x^2)^2} - \frac{\partial^2 g_{22}}{\partial(x^1)^2} + \frac{1}{2g_{11}} \left(\frac{\partial g_{11}}{\partial x^1} \frac{\partial g_{22}}{\partial x^1} + \left(\frac{\partial g_{11}}{\partial x^2} \right)^2 \right) + \frac{1}{2g_{22}} \left(\frac{\partial g_{11}}{\partial x^2} \frac{\partial g_{22}}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial g_{22}}{\partial x^1} \right)^2 \right) \right] \quad (309)$$

Die Gaußsche Krümmung läßt sich damit alleine durch die ersten und zweiten Ableitungen der Metrik ausdrücken. Damit ist dies eine Eigenschaft der inneren Flächengeometrie; sie kann allein durch Messungen auf der Fläche ohne Berücksichtigungen des umgebenden Raumes bestimmt werden.

8.6 Die Hauptkrümmungen einer Fläche

Die Gleichung (292) (1. Fundamentalform) ist 1. Ordnung. Krümmungseigenschaften sind bei zweidimensionalen Flächen durch Ableitungen 2. Ordnung gegeben (309). Dieses wird in der 2. Fundamentalform wiedergegeben. Analog zum Bogenelement ist diese gegeben durch die Form

$$-d\vec{N} \cdot d\vec{r} = b_{\alpha\beta} dx^\alpha dx^\beta \quad . \quad (310)$$

$b_{\alpha\beta}$ spielt hierbei einen Pseudotensor, d.h. er transformiert sich bei Koordinatentransformationen vorzeichenbehaftet, nach

$$b'_{\mu\nu} = \epsilon b_{\alpha\beta} A_\mu^\alpha A_\nu^\beta \quad . \quad (311)$$

ϵ ist hierbei das Vorzeichen der Jakobi-Determinante. Für $b_{\mu\nu}$ findet man

$$b_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} \vec{r}_{uu} \cdot \vec{N} & \vec{r}_{uv} \cdot \vec{N} \\ \vec{r}_{uv} \cdot \vec{N} & \vec{r}_{vv} \cdot \vec{N} \end{pmatrix} \quad . \quad (312)$$

Wir können analog zu g die Determinante b definieren

$$b := \det(b_{\mu\nu}) \quad , \quad (313)$$

deren Transformationsverhalten analog zu (302) ist.

Wir wollen uns nun einem beliebigen Flächenpunkt P_0 zuwenden. Wir können in diesem Punkt ein lokal ebenes System jederzeit einführen; dieses wird durch Legen einer Tangentialebene an die Fläche in dem Punkt P_0 erreicht. Die Approximation läßt sich darstellen als

$$g_{\mu\nu}(x^\alpha) = \eta_{\mu\nu}(P_0) + \frac{1}{2} d_{\mu\nu\alpha\beta}(P_0) x^\alpha x^\beta + \dots \quad (314)$$

Dabei ist $\eta_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu}$ (kartesische Koordinaten der Tangentialebene). Da Fläche und Tangentialebene einander berühren, weichen die so entstandenen Koordinatenlinien auf der Fläche nur in 2. Ordnung von den Geraden ($\eta_{\mu\nu}$) der Ebene ab. Das Auffinden der Tangentialebene bedeutet lokal $g_{\mu\nu}$ auf Hauptachsen zu transformieren (die Diagonalelemente verschwinden, lokal erhalten wir ein orthogonales Koordinatensystem). Diese Koordinatenlinien sind also ein ausgezeichnetes System auf der Fläche. In diesem System haben die Fundamentalformen eine besonders einfache Gestalt

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 \quad (315)$$

$$-d\vec{N} \cdot d\vec{r} = k_1 dx^2 + k_2 dy^2 \quad (316)$$

k_1, k_2 stellen hierbei die Hauptkrümmungen dar, wobei zwischen Krümmung und Krümmungsradius der Koordinatenlinien (Frenetsche Formeln) der Zusammenhang

$$k_1 = \frac{1}{R_1} \quad k_2 = \frac{1}{R_2} \quad (317)$$

gilt. Die invariante Gaußsche Krümmung K in P_0 erhält man unmittelbar aus

$$K = k_1 k_2 = \frac{1}{R_1 R_2} \quad (318)$$

In einem beliebigen (gedrehten, schiefwinkligen) Koordinatensystem auf der Fläche ist K gegeben durch

$$K = \frac{b}{g} = \frac{R_{1212}}{g} \quad (319)$$

d.h. dem Quotienten der Determinanten der metrischen Fundamentaltensoren. Das K invariant sein muß, erkennt man sofort aus dem Herausfallen der Jacobi-Determinante.

Weiterhin ist der Zusammenhang des begleitenden Dreibeins \vec{e}_α und seiner Änderung längs beliebiger Koordinatenlinien u^β zur Herleitung der Gullstrandschen Gleichungen (163) von großer Bedeutung. Diese sind im **Satz von Gauß und Weingarten**

$$\frac{\partial \vec{e}_\alpha}{\partial u^\beta} = \Gamma_{\alpha\beta}^\sigma \vec{e}_\sigma + b_{\alpha\beta} \vec{N} \quad (320)$$

$$\frac{\partial \vec{N}}{\partial u^\alpha} = -g^{\sigma\gamma} b_{\gamma\alpha} \vec{e}_\sigma \quad (321)$$

mathematisch festgelegt.

Literatur

- [1] Yu.V. Bykov, A.G. Ereemeev, V.A. Flyagin, V.V. Kaurov, A.N. Kuftin, A.G. Luchinin, O.V.Malygin, I. Plotnikov, V.E. Zapelov, L.Feher, M. Kuntze, G. Link, M. Thumm, "Gyrotron Installation For Millimeter-Wave Processing Of Materials", Proc. Vakuumelektronik und Displays, ITG Fachtagung 2.-3. Mai, Garmisch-Partenkirchen,1995, 103-108
- [2] Yu.V. Bykov, A.G. Ereemeev, V.A. Flyagin, V.V. Kaurov, A.N. Kuftin, A.G. Luchinin, O.V.Malygin, I. Plotnikov, V.E. Zapelov, L.Feher, M. Kuntze, G. Link, M. Thumm, "Gyrotron System for Millimeter-Wave Processing of Materials", Proc. 8th Microwave and Optronics (Miop'95), 1995, May 30-June 1, Stuttgart Sindelfingen, Germany, 321-325
- [3] M. Popp, J. Hoffman, Forschungszentrum Karlsruhe Nachrichten 4/95, 1995, 195-201
- [4] Ed. Ernest C. Okress, "Microwave Power Engineering", Vol 2., Academic Press, 1968
- [5] A.C.Metaxas , R.J.Meredith "Industrial Microwave Heating", IEE Power Engineering Series 4, Peregrinus Ltd., 1988, ISBN 0909048893
- [6] M. Thumm, Wissenschaftliche Berichte, Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 5564, April 1995, und Update FZKA 5728, 1996
- [7] BMBF-Verbundprojekt,"Werkstoff- und Technologieentwicklung zum Mikrowellensintern von Hochleistungskeramik"
- [8] G. Barton, "Elements of Green's Functions and Propagation", Oxford Science Publications, ISBN 0-19-851998-2, 345
- [9] V.E. Jenas, C.J. Malarkey, M.F. Iskander,O. Audrade, S. Bringhurst, "Dielectric Property Measurement of Ceramic Bodies", Ceramic Transaction Vol.36, Microwaves: Theory and application in materials processing II, Ed. David E. Clark, Waym R. Tinga, Joseph R. Laia, 1993, 493-502
- [10] Editor William B. Westphal, "Dielectric Constant and Loss Data", Report Number AFML-TR-740-250, Part III, June' 80
- [11] R. Heidinger, G. Link, The temperature dependence of the permittivity in high power and broadband mm-wave window materials, Proceedings of the 6th Russian-German Meeting on ECRH and Gyrotrons, 1994, 271-292
- [12] G. Link, Private Mitteilung
- [13] J. D. Jackson, "Klassische Elektrodynamik", Verlag W. de Gruyter, 1982

- [14] K. Kopitzki, "Einführung in die Festkörperphysik", Teubner Studienbücher, 1986
- [15] G. Link, "Frequenz- und Temperaturabhängigkeit der mm-Wellen-Absorption in ionischen Einkristallen", Dissertation, Fakultät für Physik, Universität Karlsruhe, 1993
- [16] A. Sommerfeld, "Optik", Verlag Harri Deutsch, ISBN 3-87144-377-8, 180
- [17] Prof. H. Stephani, Private Mitteilung, Universität Leipzig
- [18] Allen Taflove "Computational Electrodynamics - The Finite-Difference Time-Domain", Artech House, 1995, ISBN 0-89006-792-9
- [19] P.B.Johns, R.L.Beurle, "Numerical Solution of 2-dimensional scattering problems using a Transmission-Lines Matrix", Proc.Inst.Electr.Eng. 118,1971, 1203-1208
- [20] W.J.R. Hoefler, "The Transmission-Line Matrix (TLM) Method", Numerical Techniques for Microwave and Millimeter-Wave Passive Structures, T. Itoh Ed., John Wiley & Sons, New York 1989
- [21] W.J.R. Hoefler, "Progress and Critical Issues in Time Domain Electromagnetic Modeling with TLM", Proc. Latsis Symposium on Computational Electromagnetics, September 19-21 th, Zürich 1995, 39-56
- [22] T. Barts, "Maxwell's Grid Equations", Frequenz 44,1990, 9
- [23] K.S.Yee, "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media", IEEE Trans. Antennas Propagation, Vol- AP-14, no. 5, May 1966, 302-307
- [24] C.Taylor, Dong-Hoa Lam, Th. Shumpert, "Electromagnetic Pulse Scattering in Time-Varying Inhomogeneous Media", IEEE Transactions on Antennas and Propagation, Vol. AP-17/5, 1969
- [25] L. Feher, "Ausbreitung von Ionenstrahlen in der Driftsektion der B(Applied)-Diode für die Leichtenanlage KALIF", Diplomarbeit, Forschungszentrum Karlsruhe (HDI), Universität Karlsruhe, 1993, 91
- [26] D. Givoli, "Non-reflecting Boundary Conditions", Journal Of Computational Physics 94, 1991, 1-29
- [27] J.F. Thompson, Z.U.A. Warsi, "Boundary-Fitted Coordinate Systems for Numerical Solution of Partial Differential Equations-A Review", Journal of Computational Physics 47, 1992, 1-108

- [28] S. Illy, Forschungszentrum Karlsruhe, Unveröffentlichter Bericht, April 1996
- [29] R. W. Hockney, J.W. Eastwood, "Computer Simulation using Particles", Mc Graw Hill Book Company
- [30] V.A. Borovikov, B.Ye. Kinber, "Geometrical theory of diffraction", IEEE Waves Series 37, ISBN 0-85296-830-2
- [31] A. Wien, "Ein Beitrag zur Analyse von quasi-optischen Wellentypwandlern in Hochleistungsgyrotrons", Dissertation, Institut für Höchsthfrequenztechnik und Elektronik, Universität Karlsruhe, 1995
- [32] G. Strassacker, P. Strassacker, "Analytische und numerische Methoden der Feldberechnung", B.G. Teubner, Stuttgart, 1993
- [33] J. Amanatides, A. Woo, "A Fast Voxel Traversal Algorithm for Ray Tracing", Eurographics'87, Ed. Marechal, 3
- [34] Yu A. Kravtsov, Yu I. Orlov, "Caustics, Catastrophes and Wave Fields", Springer Verlag, ISBN 3-540-56587-6, 1993
- [35] Dieter J. Cichon, "Strahlenoptische Modellierung der Wellenausbreitung in urbanen Mikro- und Pikofunkzellen", Dissertation, Institut für Höchsthfrequenztechnik und Elektronik, Universität Karlsruhe, 1994
- [36] L.Feher, G.Link, M.Thumm, "Microwave Raytracing in Large Overmoded Industrial Resonators", Proc. Meeting American Ceramic Society'95, Microwaves: Theory and Application in Materials Processing III Symposium, Cincinnati, April 30 - May 3, 1995, 159
- [37] Jork Bretting, "Technische Röhren - Grundlagen, Funktionen, Anwendung", Hüthig Buch Verlag Heidelberg, 1991, ISBN 3-7785-1645-0
- [38] L.Feher, M. Thumm, "Numerische Bestimmung von Feldverteilungen für die Materialprozeßtechnik mit Millimeterwellen", Proc. Klausurtagung Mikrowelleneinsatz in den Materialwissenschaften, der chemischen Verfahrenstechnik und in der Festkörperchemie, Dortmund, 2.-3. November, 1995, 3
- [39] L.Feher, G.Link, M.Thumm, "Ray Tracing Calculations for Large Overmoded Millimeter Wave Resonators for Industrial Applications", Proc. 7th Joint Russian-German Meeting on ECRH and Gyrotrons, Karlsruhe, Stuttgart, Garching, 1995, 213-218
- [40] A. Sommerfeld, "Optik", Verlag Harri Deutsch, ISBN 3-87144-3778, 180

- [41] A.Gullstrand, Svenska Svetensk. Handl.41, 1906, 1
- [42] O.Altrichter,G. Schäfer, Optik 13/6,1956, 241-253
- [43] J.A. Kneisly, "Local Curvature of Wavefronts in an Optical System", Journal of the Optical Society of America 54/2, 1963, 229-235
- [44] L.Feher, G.Link, M.Thumm, Proc. Latsis Symposium on Computational Electromagnetics, September 19-21 th, Zürich 1995, 236-241
- [45] H. Stephani, "Allgemeine Relativitätstheorie", Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1991
- [46] O.N. Stavroudis, "The Optics of Rays, Wavefronts, and Caustics", Academic Press, New York and London, 1972
- [47] Richard P. Feynman , "QED - The Strange Theory of Light and Matter" , Princeton Science Library,1985, ISBN 069024170
- [48] N. Dotzek, "Direkte numerische Simulation turbulenter Naturkonvektion in 2D und 3D", Diplomarbeit, Forschungszentrum Karlsruhe (IMK), Universität Karlsruhe, 1993, 171-174
- [49] B. Jödicke, A. Möbius, H. Stickel, "Thermopaper Mode Diagnostics for Gyrotrons", Primärbericht, Kernforschungszentrum Karlsruhe, April 1987
- [50] R. Böhme, C. Schultheiß, G. Schumacher, V.V. Ivanov, Y.A. Kotov, KfK Nachrichten 3/93, 1993, 151-157
- [51] L. Feher, G. Link, M. Thumm, "The MiRa/THESIS3D-Code Package for Resonator Design and Modeling of Millimeter-Wave Material Processing", Proc. MRS Spring Meeting, Symposium Microwave Processing of Materials V, San Francisco April 8-12, 1996, 363-368
- [52] L. Feher, G. Link, M. Thumm, Videopräsentation, 48 th Scottish Universities Summer School in Physics, Generation and Application of High Power Microwaves, University of St. Andrews, August 18th-31st, 1996
- [53] L. Feher, G. Link, M. Thumm, <http://www.fzk.de>, Homepage ITP, Dezember, 1996
- [54] L. Feher, M. Thumm, "Numerische Modellierung für die industrielle Materialverarbeitung mit Millimeterwellen", Forschungszentrum Karlsruhe Nachrichten 3/4-96,215-223
- [55] R. Spiegel, "Wärmeübertragung durch Strahlung, Vol.1", Springer Verlag 1988

- [56] R. Spiegel, "Wärmeübertragung durch Strahlung, Vol.2", Springer Verlag 1988
- [57] D.Dadon, L.P.Martin, M.Rosen, A.Birmann, D.Gershon, J.P.Calame, B.Levush, Y.Carmel, "Temperature and Porosity Gradients Developed During Non-isothermal Microwave Processing of Zinc Oxide", Proc. MRS Spring Meeting, Symposium Microwave Processing of Materials V, San Francisco April 8-12, 1996, 579-584
- [58] K.I.Rybakov, V.E.Semenov, Physical Review B, 52, 1995, 3030-3033
- [59] D. Lynn Johnson, "New Method of Obtaining Volume, Grain-Boundary, and Surface Diffusion Coefficients from Sintering Data", Journal of Applied Physics 40, 1969, 192-200
- [60] F. Raether, G. Müller, "New In Situ Measuring Methods For The Optimization Of Sintering Processes", ECERS 95, Fourth Euro Ceramics Vol. 2, Faenza (Italy), 1995, 103-112
- [61] Jenqdaw Wang, Rishi Raj, "Estimate of the Activation Energies for Boundary Diffusion from Rate-Controlled Sintering of Pure Alumina, and Alumina Doped with Zirconia or Titania", Journal American Ceramic Society, 73, 1990, 1172-75
- [62] W.S.Young, I.B. Cutler, "Initial Sintering with Constant Rates of Heating", Journal American Ceramic Society, 53, 1970, 659-663
- [63] J.L.Woolfrey, M.J. Bannister, "Nonisothermal Techniques for Studying Initial-Stage Sintering", Journal American Ceramic Society, 55, 1970, 390-394
- [64] M.J.Bannister, "Shape Sensitivity of Initial Sintering Equations", Journal American Ceramic Society, 51, 1968, 548-553
- [65] R.Feige, G.Winkhaus, "Aluminiumoxid-Rohstoff für Ingenieurkeramik", Metall 40/6, 1986, 598-605
- [66] N.J.Shaw, "Densification and Coarsening During Solid State Sintering of Ceramics: A Review of the Models", Powder Metallurgy International Vol.21, 3, 1989, 16-21
- [67] J.P. Calame, A.Birman, Y.Carmel, D.Gershon, B.Levush, "A dielectric mixing law for porous ceramics based on fractal boundaries", J. Appl. Physics 80(7), October 1996, 1-7
- [68] D.E.Garcia, R.Janssen, N.Claussen, "Fast Firing: Sintering Under Thermal Gradients", ECERS 95, Fourth Euro Ceramics Vol. 2, Faenza (Italy), 1995, 113-120
- [69] Dr.Daniel E. Garcia, Private Mitteilung, Advanced Ceramics Group, Technische Universität Hamburg Harburg, August 1996