

FRIEDRICH SCHILLER UNIVERSITÄT JENA

ASTROPHYSIKALISCHES INSTITUT UND
UNIVERSITÄTS-STERNWARTE

MASTERARBEIT

Emission und Transmission von zodiakalen Staubanaloge

von

Robin Schreyer

Matrikelnummer: 188116

Erstgutachter: Herr Prof. Alexander Krivov

Zweitgutachter: Herr Dr. Harald Mutschke

Bearbeitungszeitraum: 05.11.2024 bis 05.05.2025

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
2	Grundlagen	6
2.1	Transmission, Reflexion und Emission	6
2.1.1	Grundlegende Theorie	6
2.1.2	Transmission einer soliden SiO ₂ -Schicht auf einem Platinsubstrat	8
2.1.3	Mie-Theorie	10
2.1.4	Die Python-Bibliothek Smuthie	11
2.2	Modelle für optische Konstanten	12
2.2.1	Lorentz-Oszillator-Modell	12
2.2.2	Brendel-Bormann-Oszillator-Modell	12
2.3	Messverfahren und Messaufbau	14
2.3.1	Fouriertransformations-Infrarotspektrometer	14
2.3.2	Emissionsmessungen	16
2.3.3	Transmissionsmessungen mit der Heizzelle	17
2.3.4	Transmissionsmessungen von KBr-Presslingen	19
3	Proben	20
3.1	Eigenschaften der Proben	20
3.1.1	Amorphes SiO ₂	20
3.1.2	Amorphe Silicatkugeln (Hipresica)	20
3.2	Probenaufbereitung	21
3.2.1	Probenaufbereitung für die Emissions- und Transmissionsmes- sungen auf Platin	21
3.2.2	Probenaufbereitung der KBr-Presslinge	22
4	Messwerte	23
4.1	Mikroskopie	23
4.2	Transmissionsspektren	25
4.3	Emissionsspektren	29

5	Auswertung und Diskussion	30
5.1	Emission und Transmission	30
5.1.1	Korrektur der Emissionsspektren	30
5.1.2	Vergleich der gemessenen Emissions- und Transmissionsspektren	32
5.2	Bestimmung der optischen Konstanten	33
5.2.1	Fitparameter	33
5.2.2	Optische Konstanten	37
5.3	Theoretische Spektren	38
5.3.1	Auswertung der Mikroskopbilder für Smuthi- und solide Schicht-Rechnungen	39
5.3.2	Gemessene vs. berechnete Emissionsspektren	42
5.3.3	Gemessene vs. berechnete Transmissionsspektren	44
5.3.4	Streueffizienz	50
5.4	Vergleich mit anderen Messungen dieser Teilchen	52
6	Zusammenfassung	55
	Abbildungsverzeichnis	57
	Tabellenverzeichnis	61
	Literaturverzeichnis	62
	Danksagung	65
	Anhang	66
	Volumenfüllfaktor	66
	Pythoncode	68
	Brendel-Borman-Oszillator	68
	Emission	70
	Transmission	70
	Fitprogramm optische Konstanten	71
	OpenCV	75

1 Einleitung

Einige spektrale Messungen der Emission von Sternen [1] zeigen, dass in diesen Spektrum nicht nur eine Planckfunktion einer Temperatur ausreicht, um diese Spektren zu charakterisieren. Es werden zur vollständigen Beschreibung weitere Planckkurven bei niedrigeren Temperaturen benötigt [2]. Als Ursache dieser zusätzlichen Emission wird erwärmter Staub um den beobachteten Stern herum angenommen [2]. Der Staub ist Teil einer Trümmerscheibe des Sterns. Wenn die Trümmerscheiben wärmeren Staub innerhalb eines Radius von 10 AE [3] um den Stern besitzen, so wird dieser häufig auch als exozodischer Staub bezeichnet, in Anlehnung an den zodiacalen Staub unseres Sonnensystem.

Beobachtungen des zodiacalen Staubs im sichtbaren Wellenlängenbereich haben ergeben, dass im Wesentlichen nur gestreutes Sonnenlicht gemessen wird. Ab einer Wellenlänge von 5 μm wird die Emission des Staubes im Vergleich zur gestreuten Strahlung des Sterns unterscheidbar [4]. Das Maximum der thermischen Emission des Staubs liegt bei 10 - 20 μm [4]. Durch das Wiensche Verschiebungsgesetz ist es möglich, daraus die Temperatur des Staubes zu ermitteln. Bei Beobachtungen des Staubs um einige Sterne sind Systeme mit besonders heißen exozodiacalem Staub aufgefallen.

Die genaue chemische Zusammensetzung des heißen (exo-)zodiacalen Staubs ist noch unbekannt [5]. Deshalb werden weitere Untersuchungen sowohl mit Teleskopen sowie mit Messungen im Labor benötigt. Genauso wenig ist geklärt, wieso heißer zodiacaler Staub beständig ist oder ob fortlaufend neuer Staub in diesen Mengen produziert wird. In Laboren sind bereits viele Messungen der Emissivität von interstellaren Staubanaloga bei Raumtemperatur und tiefen Temperaturen ($T < 300 \text{ K}$) erfolgt [6]. Die Infrarotemission von Staub bei hohen Temperaturen wurde in Laboren vergleichsweise wenig untersucht. Aufgrund der wenigen Daten zur Emission von Staubanaloga hat die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) einen Projektantrag des Titels "Infrared emission spectroscopy of nanograins in the laboratory for understanding hot exozodiacal dust." am Astrophysikalischem Institut und Universitätssternwarte Jena genehmigt.

Diese Masterarbeit ist als eine Vorbereitung dieses Projektes zu verstehen und verfolgt drei Ziele. Zum einen soll von der messtechnischen Seite herausgearbeitet werden, welche Korrekturen an den gemessenen Spektren durchgeführt werden müssen. Zum anderen muss überprüft werden, wie gut theoretische Berechnungen zu den gemessenen Emissionsmessungen passen. Im Zuge der theoretischen Überprüfung sollen die Emis-

sionsspektren mit Transmissionsspektren der selben Probe verglichen werden. Nach dem Kirchhoffschen Strahlungsgesetz beruht die Emission nur auf Absorption während die Transmission auch Streuung beinhaltet.

Infrarot-Transmission und -Emission von Staubpartikeln (Teilchen im μm -Bereich) ist ein Thema, welches schnell sehr komplex werden kann. Bandenformen sind von vielen Einflüssen abhängig, wie z. B. der Form oder der Agglomeration der Teilchen. Zur leichteren theoretischen Beschreibung werden in dieser Arbeit kugelförmige SiO_2 (Siliziumdioxid) Partikel mit verschiedenen Durchmessern betrachtet. Es ist bekannt, dass SiO_2 aus spektroskopischen Gründen als Stoff für heißen zodiakalen Staub ausgeschlossen werden kann [2]. Jedoch ist SiO_2 in der Laborastrophysik ein bekannter Stoff, welcher bei differenzierten Körpern (wie z. B. Planetoiden oder großen Asteroiden) auftritt. Da SiO_2 auch handelsüblich in Form von kugelförmigen Partikeln erhältlich ist, wurde es schon mehrfach in Transmission und Reflexion untersucht [6],[7]. Durch eine Kooperation mit A. Tamanaei et al. (Japan) liegen Vergleichsdaten in Form von Einzelpartikel-Messungen in Transmission mit einem IR-Mikroskop (am SPring-8 einem Synchrotron in Japan) und in photothermischen Messungen mittels mIRage zu den verwendeten Proben vor [8].

In dieser Arbeit wird zuerst die grundlegende Theorie dargelegt. Danach werden die verwendeten Messaufbauten und Methoden erläutert. Die korrigierten Transmissionsspektren werden zusammen mit den fast vollständig korrigierten Emissionsspektren dargestellt. Die Emissionsspektren werden anschließend vollständig korrigiert und mit den Transmissionsspektren verglichen. Es werden die optischen Konstanten des verwendeten SiO_2 -Materials bestimmt und diese werden zur theoretischen Berechnung der gemessenen Spektren genutzt. Mit den berechneten Spektren können im Vergleich zu den gemessenen Spektren Aussagen über die Genauigkeit der Modelle in Bezug auf die Probe genommen werden. Mittels der Streueffizienten wird ein Verbesserungsansatz beschrieben, der bei der zukünftigen Verwendung der Modelle bei fokussiertem Strahlengang sinnvoll wäre. Und zum Abschluss werden die gemessenen Transmissions- und Emissionsspektren mit Einzelpartikelmessungen dieser Probe verglichen.

2 Grundlagen

2.1 Transmission, Reflexion und Emission

2.1.1 Grundlegende Theorie

Die Ausbreitung einer elektromagnetischen Welle wird durch die Maxwell-Gleichungen beschrieben. Die gekoppelten Differenzialgleichungen zur Beschreibung der Wellen lassen sich aus Energieerhaltung, Erhaltung des magnetischen Flusses und der Lorentzkraft herleiten. Diese Gesetze gelten auch bei dem Grenzübergang der Welle in andere Materialien. In der Optik kann die Energieerhaltung recht einfach über Gleichung 2.1 beschrieben werden

$$R + T + A + S = 1. \quad (2.1)$$

Dabei stehen R , T , A und S für Reflexionsgrad, Transmissionsgrad, Absorptionsgrad und Streuungsanteil (später häufig nur als Reflexion, Transmission, Absorption und Streuung bezeichnet), welche wie folgt aus ihren jeweiligen Intensitäten definiert sind

$$R = \frac{I_R}{I_0}, \quad T = \frac{I_T}{I_0}, \quad A = \frac{I_A}{I_0}, \quad S = \frac{I_S}{I_0}. \quad (2.2)$$

Gleichung 2.1 beschreibt, dass die Summe der Intensitäten der reflektierten, der transmittierten, der absorbierten und der gestreuten Strahlung gleich der Intensität der einfallende Strahlung I_0 sein muss. Die Transmission wird mittels des Lambert-Beersches Gesetzes 2.3 und der Reflektivität R ($R \neq R$) an beiden Grenzflächen berechnet,

$$I_T = I_0 \cdot (1 - R)^2 \cdot e^{-c\varepsilon_\lambda d}, \quad (2.3)$$

wobei c die Stoffmengenkonzentration, ε_λ der Extinktionskoeffizient und d die Dicke der Schicht sind. Anders als die Transmission tritt die Reflexion nur an Grenzflächen mit einer Änderung des Brechungsindex auf (in Gleichung 2.4 ersichtlich). Bei der Reflexion gilt, dass der Einfallswinkel gleich dem Ausfallswinkel ist. Die Reflektivität einer Grenzschicht lässt sich wie folgt berechnen [9]

$$R = \left| \frac{\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} \right|^2. \quad (2.4)$$

Diese Gleichung kann ausführlicher geschrieben werden, wenn der komplexe Brechungsindex \tilde{n}_j ausgeschrieben wird als $\tilde{n}_j = n_j - ik_j$. Dies ist nützlich, da oft in Nachschlagewerken n und k getrennt gelistet sind. So folgt

$$R = \frac{(n_1 - n_2)^2 + (k_1 - k_2)^2}{(n_1 + n_2)^2 + (k_1 + k_2)^2}. \quad (2.5)$$

Anstatt mit dem Extinktionskoeffizient und der Dicke kann die Transmission bei Einzelteilchen auch mittels dem Extinktionsquerschnitt C_{ext} und der bestrahlten Fläche A berechnet werden,

$$T = e^{-\frac{C_{ext}}{A}} = e^{-Q_{ext}}. \quad (2.6)$$

Dabei berechnet sich der Extinktionsquerschnitt C_{ext} als Summe von Absorptionsquerschnitt C_{abs} und Streuquerschnitt C_{sca} über alle Teilchen [10]. Die jeweiligen Querschnitte lassen sich jeweils aus der Extinktionseffizienz Q_{ext} , der Absorptionseffizienz Q_{abs} und der Streueffizienz Q_{sca} als Produkt mit dem geometrischen Querschnitt A der Partikel berechnen. Daraus folgt, dass die Absorption nach 2.1 und 2.6 wie folgt geschrieben werden kann

$$A = 1 - R - (T + S) = (1 - R)^2 - (1 - R)^2 \cdot e^{-(Q_{abs} + Q_{sca})} \cdot e^{Q_{sca}}. \quad (2.7)$$

Bei Bulkmaterialien wird die Transmission T und die Streuung S gleich Null gesetzt, woraus folgt:

$$A = 1 - R \quad (2.8)$$

und bei Pulvern wird die Reflexion R in Richtung Detektor Null gesetzt, woraus hier folgt:

$$A = 1 - e^{-Q_{abs}}. \quad (2.9)$$

Die thermische Emission ist ein gegenläufiger Prozess zur Absorption [11]. Bei Materialien mit Temperaturen über dem absoluten Nullpunkt gibt es einen gewissen temperaturabhängigen Teil an Elektronen, deren thermische Energie größer als ihre Fermi-Energie ist. Diese Elektronen befinden sich also im angeregten Zustand. Angeregte Zustände können über spontane Emission zurück in den energetisch günstigeren Grundzustand zurückfallen. Dabei werden Photonen abgestrahlt, welche dann als Emissionsstrahlung der Materialien gemessen werden kann. Die abgestrahlte Energie führt zu einer Verringerung der thermischen Energie des Materials, was zu einer Temperaturabnahme der Probe führt. Wird diese Energie aus der Umgebung oder durch z. B. einen Heizer wieder zugeführt, so steigt auch die Anzahl an Elektronen im angeregten Zustand wieder.

Die Gleichungen der Emission E beruhen mathematisch auf der Absorption A . So wie die Anzahl an Photonen mit der Eindringtiefe exponentiell abnimmt, so sinkt die Wahrscheinlichkeit, dass es emittierte Photonen aus dem Stoff herauschaffen ohne wieder absorbiert zu werden. Bei gleicher Temperatur kann daher $E = A$ geschrieben werden [9]. Mit $E = A$ folgt aus den Gleichungen 2.9 und 2.8 die folgenden Gleichungen für die Emission

$$E = A = 1 - (T + S) = 1 - e^{-Q_{abs}} \quad \text{und} \quad (2.10)$$

$$E = 1 - R. \quad (2.11)$$

Die Gleichung 2.7 wird in dieser Arbeit verwendet um Transmissionsspektren in Emissionsspektren und umgekehrt umzurechnen.

2.1.2 Transmission einer soliden SiO_2 -Schicht auf einem Platinsubstrat

Wird eine Schicht aus Partikeln so dicht, dass sich mehrere große Agglomerate mit mehren aneinander liegenden Partikeln bilden, dann kann versucht werden, dies als eine solide Schicht mit einer Dicke gleich des Partikeldurchmessers und einem Füllfaktor zu beschreiben. Der Füllfaktor setzt sich zusammen aus der Bedeckung der Probe und dem Volumenfüllfaktor einer (nahezu) zweidimensionalen Schicht. Der Volumenfüllfaktor einer solchen geschlossenen Schicht bestehend aus gleichgroßen kugelförmigen Partikeln beträgt rund 60 % (siehe Anhang).

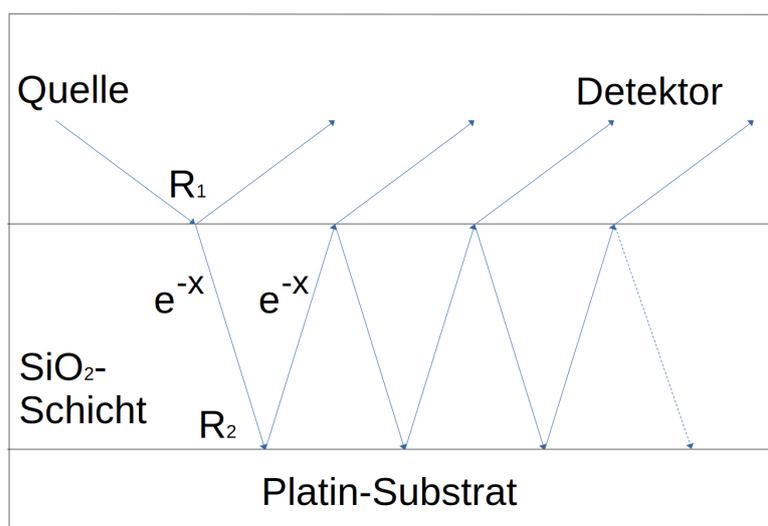


Abbildung 2.1: Strahlengang der Reflexion-/Transmission einer soliden Schicht SiO_2 auf einem Platinsubstrat, welches als Spiegel fungiert.

In Abbildung 2.1 wird der Strahlengang bei einem beschichteten Platinsubstrat gezeigt. Es sind die Reflexionen an den beiden Grenzflächen und die Transmissionen durch die SiO₂-Schicht beschriftet. Das Platinsubstrat übernimmt die Funktion eines Spiegels. Bei Transmission durch die Schicht steht e^{-x} für das Lambert-Beersche Gesetz. In diesem Fall entspricht Folgendes dem Ausdruck x :

$$x = \frac{4\pi}{\lambda} k_{SiO_2} \cdot d \cdot f, \quad (2.12)$$

hierbei sind λ die Wellenlänge, k_{SiO_2} sind die k-Werte der optischen Konstanten der SiO₂-Schicht, f ist der Füllfaktor und d ist Weg des Lichtstrahls durch die Probe ($d = \frac{\text{Schichtdicke}}{\cos(\text{Einfallswinkel})}$, mit $\cos(12^\circ) \approx 1$). Unter der Annahme, dass das Platinsubstrat als ein Spiegel agiert, ist eine Reflexionsmessung eines unbeschichteten Platinsubstrates als eine Referenzmessung zu verstehen. Die Reflexionsmessung eines beschichteten Substrats unterscheidet sich dann hauptsächlich durch die doppelte Transmission durch die SiO₂-Schicht. Unter dieser Annahme kann die Transmission der Schicht als Quotient der Reflexion des beschichteten Substrates durch die Reflexion des Unbeschichteten definiert werden

$$T = \frac{R_{Probe}}{R_{Pt}}. \quad (2.13)$$

Dabei ist R_{Pt} die Reflektivität am unbeschichteten Platin. Zur Bestimmung von R_{Pt} wird Gleichung 2.5 verwendet. Die optischen Konstanten n_{Pt} und k_{Pt} entstammen einer Interpolation von einem Parametermodell von Ordal et al. [12] und für Luft gilt $n_{Luft} = 1$ und $k_{Luft} = 0$. So lässt sich R_{Pt} als

$$R_{Pt} = \frac{(n_{Pt} - 1)^2 + k_{Pt}^2}{(n_{Pt} + 1)^2 + k_{Pt}^2} \quad (2.14)$$

schreiben. R_{Probe} steht für die Summe über alle Strahlen (Abbildung 2.1), die in die Richtung des Detektors gehen

$$R_{Probe} = R_1 + R_2(1 - R_1)^2 e^{-2x} + R_2^2 R_1 (1 - R_1)^2 e^{-4x} + R_2^3 R_1^2 (1 - R_1)^2 e^{-6x} + \dots \quad (2.15)$$

Das kann umgeschrieben werden in

$$R_{Probe} = R_1 + R_2(1 - R_1)^2 e^{-2x} (1 + R_1 R_2 e^{-2x} + R_1^2 R_2^2 e^{-4x} + \dots). \quad (2.16)$$

Durch Ausnutzung der geometrischen Reihe und weiteres Umformen ergibt sich für

R_{Probe} folgende Gleichung

$$R_{Probe} = R_1 + \frac{R_2(1-R_1)^2 e^{-x}}{1-R_1 R_2 e^{-x}}. \quad (2.17)$$

Damit folgt für die Transmission

$$T = \frac{R_1 + \frac{R_2(1-R_1)^2 e^{-x}}{1-R_1 R_2 e^{-x}}}{R_{Pt}}. \quad (2.18)$$

Auch R_1 und R_2 werden über Gleichung 2.5 bestimmt. Die optischen Konstanten für die SiO_2 -Schicht stammen aus Kapitel 5.2.2. Somit folgt

$$R_1 = \frac{(n_{SiO_2} - 1)^2 + k_{SiO_2}^2}{(n_{SiO_2} + 1)^2 + k_{SiO_2}^2} \text{ und} \quad (2.19)$$

$$R_2 = \frac{(n_{SiO_2} - n_{Pt})^2 + (k_{SiO_2} - k_{Pt})^2}{(n_{SiO_2} + n_{Pt})^2 + (k_{SiO_2} + k_{Pt})^2}. \quad (2.20)$$

Vor- und Nachteile dieser Transmissionsmessung werden in Kapitel 2.3.4 beschrieben.

2.1.3 Mie-Theorie

Die Mie-Theorie oder auch Lorenz-Mie-Theorie ist eine Theorie benannt nach Gustav Mie und Ludvig Lorenz von 1908 [13]. Sie beschreibt die Streuung des Lichtes an sphärischen Teilchen, welche vom Durchmesser her in der Größenordnung der Wellenlänge liegen. Es wird bei der Mie-Theorie generell angenommen, dass eine ebene Welle auf ein ideal kugelförmiges Teilchen trifft. Dann werden die einfallende Welle und das gestreute Feld über Kugelflächenfunktionen entwickelt. Mittels Randbedingungen der Kugeloberfläche können die Koeffizienten für des gestreute Feld berechnet werden.

In der Astronomie werden mit der Mie-Theorie überwiegend Streu-, Absorptions- und Extinktionseffizienzen berechnet. Streu- und Extinktionsquerschnitte können als unendliche Reihen dargestellt werden, in der Form

$$C_{ext} = \frac{\lambda^2}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) Re(a_n + b_n), \quad (2.21)$$

$$C_{sca} = \frac{\lambda^2}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)(|a_n|^2 + |b_n|^2). \quad (2.22)$$

Dabei steht n für die n -te Multipolentwicklung, während a_n und b_n für Koeffizienten stehen. Die Koeffizienten sind in Quelle [14] detaillierter beschrieben.

2.1.4 Die Python-Bibliothek Smuthie

Smuthi ist eine Python-Bibliothek, deren Name kurz für ‘scattering by multiple particles in thin-film systems’ steht. Die Bibliothek wurde von Egel et al. entwickelt und 2021 veröffentlicht [15]. Mit dieser Bibliothek kann die Streuung aber auch die Absorption und Extinktion, für einzelne oder mehrere Partikel in einem System dünner Schichten mittels Python berechnet werden. Dabei werden auch Effekte (wie Reflexion oder Streuung) der anderen Schichten auf die Probe berücksichtigt. Smuthi nutzt die T-Matrix-Methode für Einzelteilchen und die Streumatrix-Methode für die Ausbreitung durch das Schichtensystem [16]. Details zu den beiden Matrix-Methoden sind in den Quellen [17] (T-Matrix Methode) und [18] (Streumatrix-Methode) beschrieben.

Die Bibliothek hat auch Limitierungen. Für die Berechnungen müssen die Partikelpositionen explizit angegeben werden. Die Radien der angegebenen Partikel dürfen sich nicht überschneiden, das kann zu Fehlern in der Rechnung führen. Smuthi ist nicht für dicke Schichten geeignet. Das Programm überprüft nicht, ob die eingegebenen Parameter physikalisch Sinn ergeben [16]. Das Programm ist recht rechenintensiv und berechnet jede Wellenlänge einzeln. Es wurden deshalb nur mit einer reduzierten Anzahl an Stützstellen gerechnet. Für das Spektrum von 6 μm bis 25 μm Wellenlänge wurden Stützstellen im Abstand von ca. 0,1 μm gewählt (ca. 0,1 μm , da das Spektrometer in reziproken Zentimetern arbeitet).

2.2 Modelle für optische Konstanten

2.2.1 Lorentz-Oszillator-Modell

Eins der wichtigsten Modelle zur Berechnung von optischen Konstanten im Bereich der Schwingungsanregungen ist das Lorentz-Oszillator-Modell benannt nach H. A. Lorentz [19]. Die optischen Konstanten $\varepsilon = \tilde{n}^2$ werden darin berechnet, indem zur dielektrischen Funktion ε_∞ Lorentz-Oszillatoren addiert werden. Die dielektrische Funktion ε_∞ ist auf Absorptionen bei kürzeren Wellenlängen (höhere Frequenzen bzw. gegen unendlich gehende Frequenzen) zurückzuführen. Die Oszillatoren liegen dabei auf der Resonanzfrequenz der absorbierenden Schwingungsanregung. Diese absorbierenden Schwingungsanregungen werden auch als Banden bezeichnet. Die dielektrische Funktion $\varepsilon(\omega)$ ist definiert als

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \sum_j \frac{\omega_{p,j}^2}{\omega_{OT,j}^2 - \omega^2 - i\gamma_j\omega}. \quad (2.23)$$

Dabei stehen $\omega_{OT,j}$ für die Resonanzfrequenz, γ_j für die Dämpfung und $\omega_{p,j}$ ist ähnlich einer Plasmafrequenz des j-ten Oszillators.

In der Abbildung 2.2 sind die daraus resultierenden Real- und Imaginäranteile der dielektrischen Funktion $\varepsilon(\omega)$ zu sehen. Wenn die Resonanzfrequenz $\omega_{p,j} = 0$ gesetzt wird, so wird es als Drude-Modell bezeichnet.

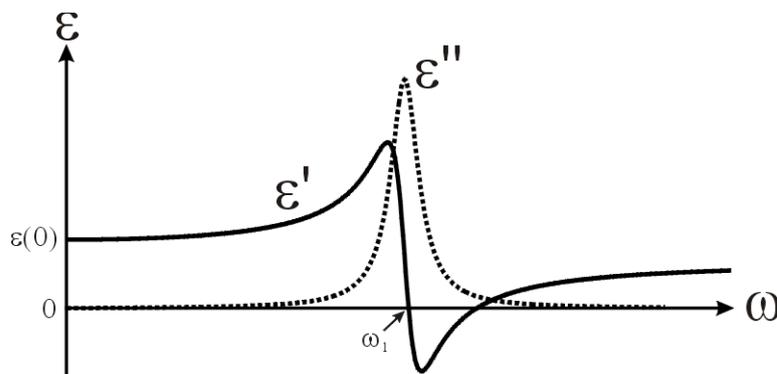


Abbildung 2.2: Realteil ε' und Imaginärteil ε'' der dielektrischen Funktion eines Lorentz-Oszillators [20].

2.2.2 Brendel-Bormann-Oszillator-Modell

Ein weiteres Modell zur Berechnung optischer Konstanten ist das Brendel-Bormann-Oszillator-Modell [21]. Dieses Modell geht vom normalen Lorentz-Oszillator-Modell,

mit einer Änderung der Resonanzfrequenz, aus. Die Resonanzfrequenzen liegen in einer Gaußverteilung mit der Breite σ um die absorbierenden Bande.

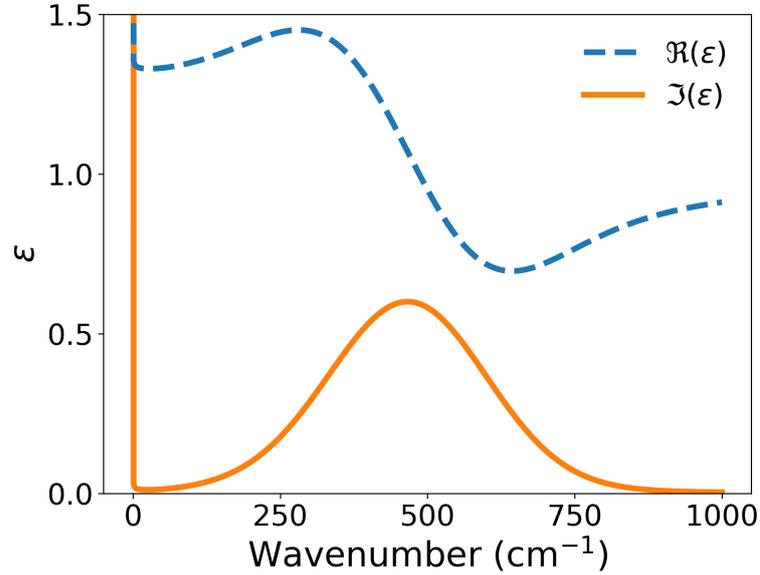


Abbildung 2.3: Realteil und Imaginärteil der dielektrischen Funktion eines Brendel-Bormann-Oszilators. [22]

Bei diesem Modell ist die dielektrische Funktion $\varepsilon(\omega)$ definiert als

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\infty} + \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_j} e^{-\frac{(x-\omega_{0T,j})^2}{2\sigma_j^2}} \frac{\omega_{p,j}^2}{x^2 - \omega^2 - i\gamma_j\omega} dx. \quad (2.24)$$

Zur Berechnung in Python wurde die folgende Näherung verwendet [21]

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\infty} + \sum_j \frac{i\sqrt{\pi}s_j}{2\sqrt{2}\sigma_j a_j(\omega)} \left[w\left(\frac{a_j(\omega) - \omega_{0,j}}{\sqrt{2}\sigma_j}\right) + w\left(\frac{a_j(\omega) + \omega_{0,j}}{\sqrt{2}\sigma_j}\right) \right], \quad (2.25)$$

$$a_j(\omega) = \sqrt{\omega^2 + i\gamma_j\omega}, \quad (2.26)$$

$$w(z) = \text{Faddeeva-Funktion}. \quad (2.27)$$

Dabei bezeichnen s_j die Oszillatorstärke, $\omega_{0,j}$ die Resonanzfrequenz, γ_j die Dämpfung des Oszillators und σ_j ist die Gaußbreite für die Verteilung der Resonanzfrequenz. Die Faddeeva-Funktion ist ein Teil der Näherung des nicht analytisch lösbaren Integrals in Gleichung 2.24.

2.3 Messverfahren und Messaufbau

2.3.1 Fouriertransformations-Infrarotspektrometer

Das Fouriertransformations-Infrarotspektrometer (FTIR-Spektrometer) ist ein Instrument, mit dem Infrarotspektren gemessen werden können. Das Spektrometer ist vom Typ IFS 113v von dem Hersteller Bruker. Das FTIR des AIU-Labors besitzt einen Messbereich vom NIR (Nahinfrarot) bis zum FIR (Ferninfrarot) bzw. von $0,3\mu\text{m}$ bis $100\mu\text{m}$ Wellenlänge. Der Aufbau des FTIR-Spektrometers kann räumlich in vier Sektionen unterteilt werden (siehe Abbildung 2.4). Die vier Sektionen sind die Lampen (blau) und das Interferometer (rot), die Probenkammer (grün) sowie die Detektoren (gelb). Zur Reduzierung von Absorptionen atmosphärischer Gase werden die Messungen unter Vakuum (bei 13 mbar) durchgeführt.

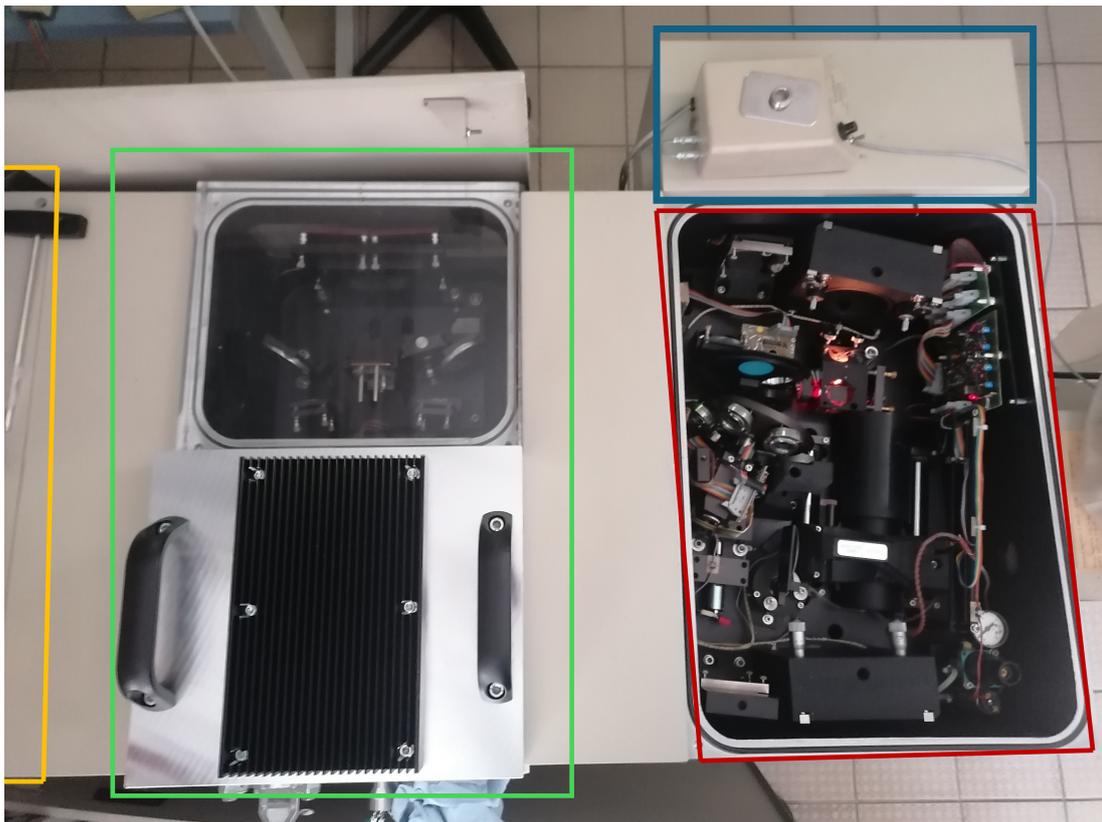


Abbildung 2.4: Das Bild zeigt den Aufbau des FTIR-Spektrometers. Eine detailliertere Beschreibung der einzelnen farbig gekennzeichneten Bereiche ist im Text zu finden.

In dem Bereich der Lampen sind die Lichtquellen des Spektrometers. Für die unterschiedlichen Wellenlängenbereiche des Infraroten gibt es unterschiedliche Quellen, eine

Wolfram-Lampe im Nahinfraroten (NIR), einen Globar im mittleren Infrarot (MIR) und eine Quecksilber-Lampe im Ferninfraroten (FIR).

Vor dem Interferometer befindet sich ein drehbares Filtrerrad. Das Interferometer ist ein Michelson-Interferometer, welches mit Hilfe des Strahlteilers und des sich bewegenden Interferometerspiegels, zeitliche Interferogramme des Lichtes erschafft. Die Strahlengänge sind in Abbildung 2.5 rot eingezeichnet. Die Strahlen kommen von den Lichtquellen und enden am Übergang zur Probenkammer. Bei emittierenden Proben kommen auch Strahlen aus der Probenkammer ins Spektrometer (nicht eingezeichnet). Die Strahlteiler sind auf einem weiteren Rad befestigt, da die unterschiedlichen Wellenlängenbereiche verschiedene Strahlteiler benötigen. Die Strahlteiler, die Filter und die Lichtquellen sind von außen ansteuerbar, so dass sie auch im Vakuum gewechselt werden können.

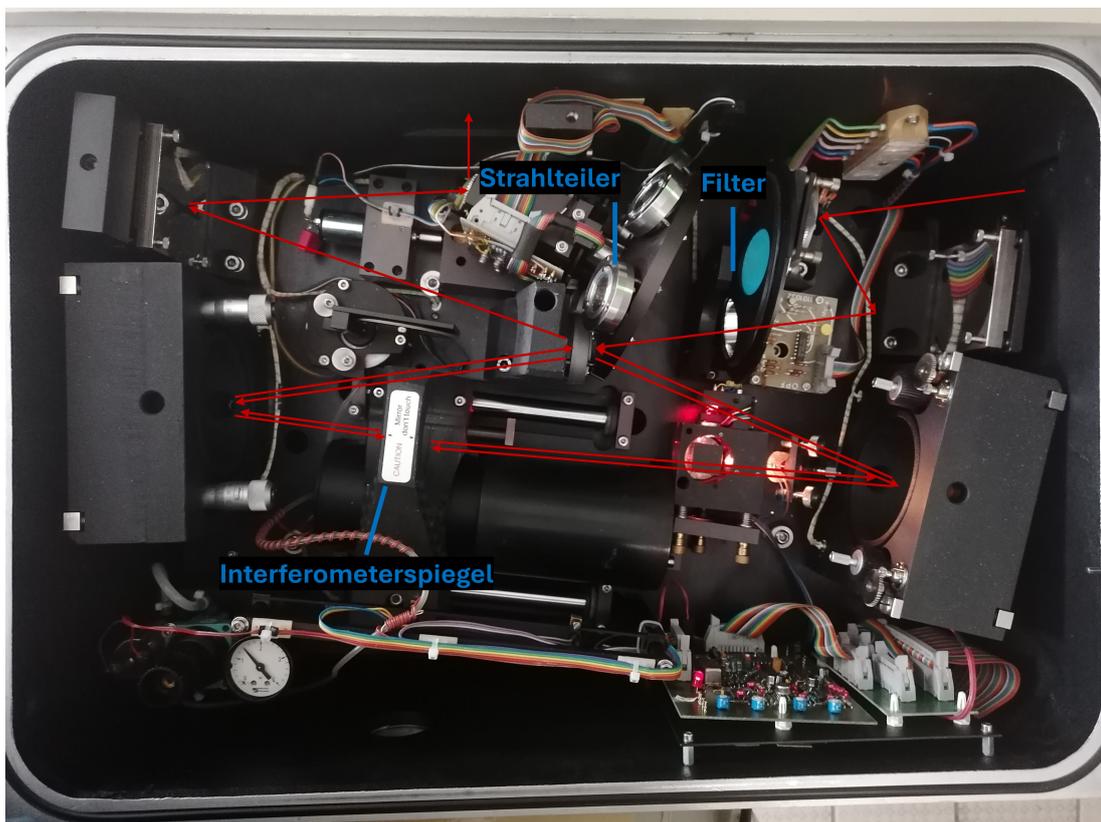


Abbildung 2.5: Das Interferometer, die Filter- und Strahlteilmontage sowie der Strahlengang (rot) sind in dieser Abbildung zu erkennen.

In der Probenkammer gibt es zwei Strahlengänge, welche durch Klappspiegel wählbar sind. In diesem Bereich werden die Messaufbauten für Emissions- und Reflexionsmessungen untergebracht. (Details zu den einzelnen Messaufbauten werden in den Kapiteln

2.3.2, 2.3.3 und 2.3.4 betrachtet.)

In der letzten Sektion des Spektrometers befinden sich die Detektoren, welche in den Spektralbereichen NIR, MIR (mittleres Infrarot) und FIR arbeiten. Es handelt sich um pyroelektrische Detektoren aus deuteriertem Triglycinsulfat. Pyroelektrische Detektoren reagieren auf Temperaturänderungen und nicht auf bestimmte Temperaturniveaus [23]. Die Funktionsweise eines FTIR-Spektrometers ist, dass das Licht der jeweiligen Quelle im Interferometer interferiert. Das zeitliche Interferogramm wird bei Transmissions- und Reflexionsmessungen über die Probe zum Detektor geschickt. Der Detektor erfasst das zeitliche Interferogramm. Durch Fouriertransformation wird daraus das Spektrum erhalten.

2.3.2 Emissionsmessungen

Damit die Intensität der Emission mit dem Spektrometer messbar wird, müssen Proben bei erhöhten Temperaturen untersucht werden. Zum Erhitzen der Probe wird eine "High Temperature High Pressure Cell"(HTHP-Zelle) verwendet. Die HTHP-Zelle stammt von der Firma Specac und kann maximal bis 800°C heizen [24]. Der Heizer besteht aus Incolloy 800HT, einer Nickel-Eisen-Chrom-Legierung. Um die Lebensdauer der Zelle zu schonen und aufgrund der zunehmenden Zeit zum Aufheizen, wurde nur bis zu einer maximalen Temperatur von 627°C (900K) geheizt. Für einen schnelleren Wechsel zwischen Emissions- und Reflexions-(/Transmissions-)Aufbau wird die HTHP-Zelle für Emissionsmessungen auf einen kleinen optischen Tisch geschraubt. Neben der Zelle sind auf diesem Tisch zwei Spiegel zur Fokussierung (Erhöhung der Intensität) und zur Einkopplung ins Spektrometer befestigt. Dieser Tisch mit allen Aufsätzen wird ab jetzt als Emissionseinsatz (ins Spektrometer) bezeichnet. Dieser Einsatz wird in der Probenkammer (siehe Abbildung 2.4 grüner Rahmen) eingebaut.

Der Aufbau und der Strahlengang des Emissionseinsatzes sind in Abbildung 2.6 abgebildet. Da bei Emissionsmessungen die Probe die Rolle der Lichtquelle übernimmt, kommen die anderen Lichtquellen (Abbildung 2.4 blauer Rahmen) nicht zum Einsatz. Der Hohlspiegel sammelt die emittierte Strahlung der Probe und fokussiert diese auf den zweiten Spiegel. Der zweite Spiegel (halber Spiegel) sorgt dafür, dass die Strahlung in den Strahlengang des Spektrometers eingekoppelt wird. Die eingekoppelte Strahlung wird ins Interferometer geleitet. Das daraus entstandene zeitliche Interferogramm muss aus baulichen Gründen (siehe Abbildung 2.4) durch die Probenkammer um zum Detektor zu gelangen. Da das Interferogramm nur über den selben Strahlengang (mit dem die Strahlung ins Interferometer kam) den Detektor erreichen kann, wird deshalb ein Halbspiegel verwendet, um den halben Strahlengang freizulassen.

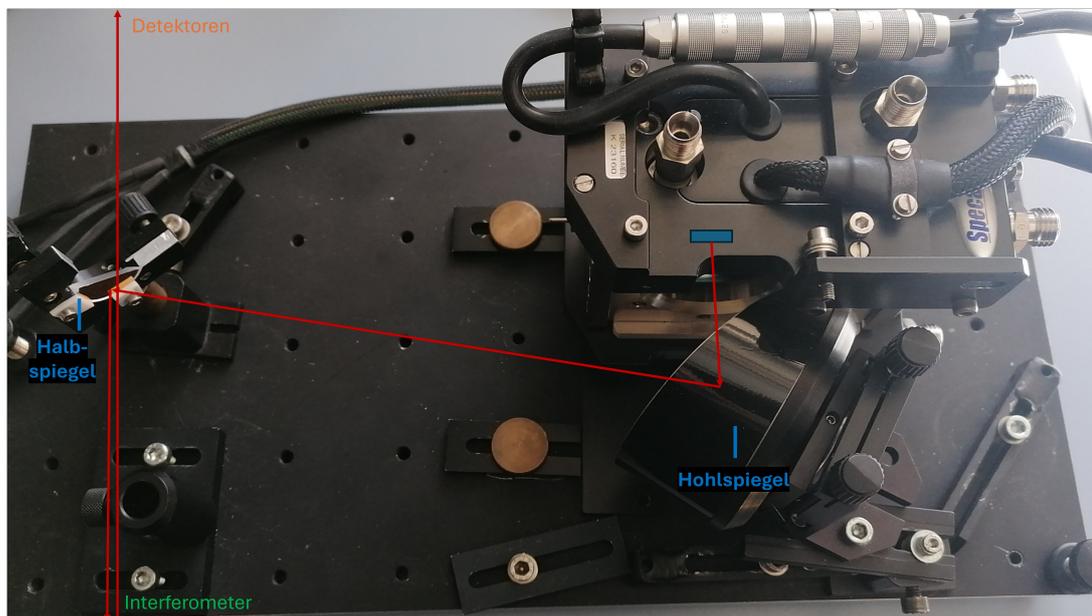


Abbildung 2.6: Der Aufbau des Emissionseinsatzes (Sicht von oben) und der Strahlengang (rot), beginnend bei der Probe (blau) kommen, sind in dieser Abbildung dargestellt. Der Strahl verlässt die Abbildung nach unten in das Interferometer und geht danach wieder am Halbspiegel vorbei zum Detektor.

Da das Interferogramm wieder an dem Halbspiegel vorbeikommt, kann sich die Frage stellen, ob Strahlung zurück zur Probe reflektiert wird. Unter optimaler Justage des Strahlenganges ist dies nicht der Fall. Der halbe Spiegel reflektiert ein Abbild der Probenoberfläche ins Interferometer. Dieses Abbild wird bei jeder Reflexion an der optischen Achse gespiegelt. Durch eine ungrade Anzahl an Reflexionen wird das Abbild der Probe in den freien Teil des Halbspiegels nach dem Durchlaufen des Interferometers projiziert.

2.3.3 Transmissionsmessungen mit der Heizzelle

Für die Transmissionsmessungen wird die Heizzelle auf einen anderen Versuchsaufbau geschraubt ohne die Probe in der Heizzelle zu wechseln. Somit werden Beeinträchtigungen der Probe vermieden. Der Aufbau für die Transmissionsmessung ist ein Reflexionsaufbau (siehe Abbildung 2.7). Damit der Reflexionsaufbau für Transmissionspektren verwendet werden kann, dient das Substrat (Platinscheibe) als Spiegel. Der Einfallswinkel beträgt 12° . Somit verdoppelt sich effektiv die Schichtdicke, durch die die Transmission gemessen wird.

Generell werden bei Transmissionsmessungen zwei Spektren aufgenommen, eine Probenmessung und eine Referenzmessung ohne die Probe. Diese beiden Messungen werden anschließend für das Transmissionsspektrum durcheinander dividiert. Da die Probe bei erhöhten Temperaturen selber Strahlung emittiert (die zum Teil ins Interferometer gelangt und dort ein eigenes Interferogramm erzeugt) muss eine weitere Korrektur erfolgen. Die Interferogramme werden jeweils mit und ohne die Strahlung der Lichtquellen gemessen und anschließend wird das Interferogramm des emittierten Lichtes vom Interferogramm mit Lichtquelle abgezogen. Das dadurch entstandene Interferogramm wird dann mittels Fouriertransformation in ein Spektrum der jeweiligen Messung umgewandelt. Damit werden die Spektren der Probe und der Referenz ermittelt. Der Quotient ($\frac{Probe}{Referenz}$) dieser Spektren ist das Transmissionsspektrum.

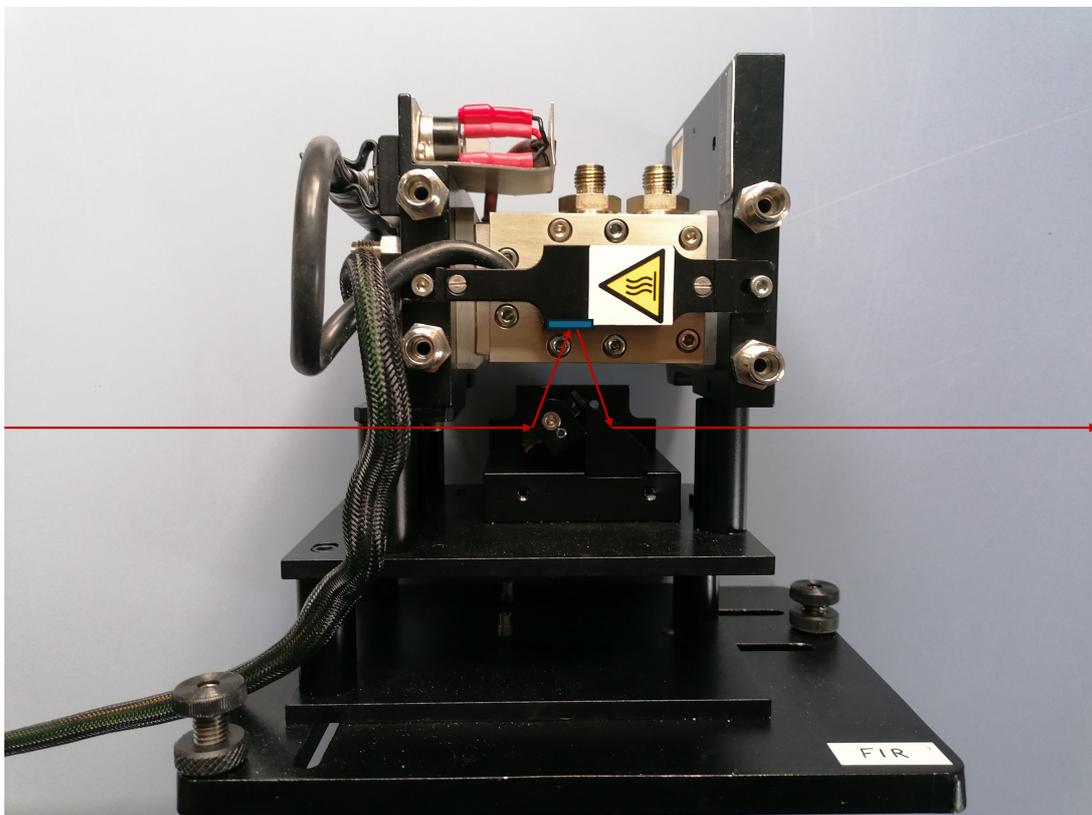


Abbildung 2.7: Der Aufbau des Reflexionseinsatzes (Seitenansicht) und der Strahlengang (rot), wie er auf die Probe (blau) trifft, sind in dieser Abbildung dargestellt.

Die Messung der Transmission im Reflektionsaufbau bringt Vor- und Nachteile mit sich. Der größte Vorteil ist, dass die selbe Probe in Emission und Transmission betrachtet werden kann. Wie in Kapitel 3.2.1 beschrieben, kann das Aufbringen der Probe als Schicht recht unterschiedliche Ergebnisse hervorbringen. Für die Vergleichbarkeit von

Emission und Transmission ist es sinnvoll die selbe Probe zu verwenden. Ein Nachteil ist es, dass keine reine Emission gemessen wird, sondern ein Teil der gemessenen Intensität durch den Reflexionsanteil der Probe verfälscht wird.

2.3.4 Transmissionsmessungen von KBr-Presslingen

Transmissionsmessungen durch Kaliumbromid-Presslinge (KBr-Presslinge) sind in dem Labor im AIU-Jena eine Standardmethode zur Bestimmung von optischen Konstanten [6]. Deshalb werden von den Proben dieser Arbeit bei Raumtemperatur KBr-Presslinge in Transmission gemessen. Der Messaufbau besteht aus einer Halterung, welche die Probe in den Strahlengang in der Probenkammer hält. Durch die genauere Kenntnis der Probenmenge der durchstrahlten Probe sind quantitativere Aussagen zu den optischen Konstanten möglich, als mit der Probe auf dem Platinsubstrat (siehe Kapitel 3.2). Die Partikel werden auch durch eine höhere Verdünnung räumlich voneinander getrennt, was sie für Rechnungen mit Mie-Theorie optimaler macht. Wie in Abschnitt 2.3.3 erwähnt, werden eine Probenmessung und eine Referenzmessung für das Transmissionsspektrum dividiert. Die Probenmessung wird an einem Pressling aus einer KBr-Proben-Mischung und die Referenzmessung an einem reinen KBr-Pressling durchgeführt.

3 Proben

3.1 Eigenschaften der Proben

3.1.1 Amorphes SiO_2

Da diese Arbeit ein Test der messtechnischen Möglichkeiten des Spektrometers ist, wurde sich für einen Stoff entschieden, welcher eher unwahrscheinlich für exozodiacalen Staub ist. SiO_2 ist jedoch ein Stoff, welcher im interstellaren Medium häufig auftritt, weshalb SiO_2 in dem AIU-Labor schon häufiger untersucht wurde und somit ein recht bekannter Stoff im Labor ist.

Amorphes SiO_2 wurde inzwischen von mehreren internationalen Laboren untersucht. Als Ergebnis daraus wurden in verschiedenen Veröffentlichungen [25], [26] (private Kommunikation) sowie in Büchern [7] und Dissertationen [27] optische Konstanten veröffentlicht. In der folgenden Abbildung 3.1 sind aus diesen Quellen entnommene optische Konstanten für den in dieser Arbeit relevanten Wellenlängenbereich dargestellt.

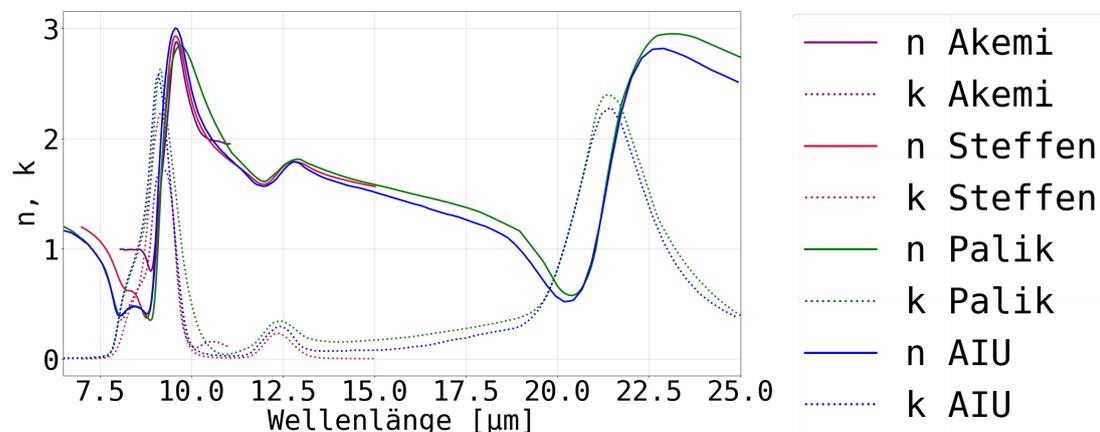


Abbildung 3.1: Die Abbildung zeigt die optischen Konstanten (n , k) für SiO_2 aus den verschiedenen Datensätzen. Die Datensätze stammen von Akemi Tamanai et al. [26], Steffen Wetzels [27], Edward D. Palik [7] und aus der AIU-Datenbank [25].

3.1.2 Amorphe Silicatkugeln (Hipresica)

Um die theoretischen Berechnungen zu vereinfachen wurden amorphe kugelförmige SiO_2 -Partikel als Proben ausgewählt. Die Transmissions- und Reflektionsspektren wur-

den schon mehrfach untersucht [6]. Es gibt eine Kooperation mit Akemi Tamanai von RIKEIX (Japan), welche Einzelpartikel-Messungen an SiO₂-Partikeln am SPring-8 (Japan) und mIRage-Messungen durchgeführt hat.

Um geeignete Probenpartikel zu bestimmen, wurden Produkte von verschiedenen internationalen Herstellern mikroskopisch untersucht. Es wurde sich letztendlich für die Partikel mit der Produktbezeichnung Hipresica von der Firma UEXC Ube Exsymo Inc (Japan) entschieden. Die Hipresica-Partikel sind kugelförmige monodisperse Siliciumdioxidpartikel. Die Partikel werden mit einem Sol-Gel-Verfahren aus Siliciumalkoxid synthetisiert. Ihre eigentliche Verwendung ist, dass sie als Abstandshalter für LCD's (liquid-crystal display, auf deutsch Flüssigkristallanzeige) dienen.

Die Hipresica-Kugeln wurden von Akemi Tamanai beschafft. Die Kugeln mit 3, 4 und 5µm Durchmesser sind nach Angaben von Akemi Tamanai vom Type N□N*, welcher auf dem Datenblatt [28] zu finden ist. Nach dem Datenblatt bestehen die Kugeln unterschiedlicher Größe aus dem selben SiO₂-Material. Die Mikroskopbilder (siehe Abbildungen 4.1, 4.2 und 4.3) zeigen, dass die Abweichung der angegebenen Größe kleiner gleich den angegebenen 10% entsprechen.

3.2 Probenaufbereitung

3.2.1 Probenaufbereitung für die Emissions- und Transmissionsmessungen auf Platin

Da es nur ein geeignetes Platinsubstrat gab, wurden die Silikatkugeln nacheinander für die Messungen in Emission und in Transmission auf die Platinscheibe mit 13 mm Durchmesser aufgebracht. Das Aufbringen der Teilchen erfolgt über eine Emulsion mit Ethanol. In einem kleinen Messbecher wurden in einem Milliliter Ethanol fünf Milligramm SiO₂ gelöst. Aus dieser Lösung werden mit einer Pipette einzelne Tropfen auf das Substrat gegeben. Das Ethanol verdampft und es bleibt im Idealfall eine Schicht an Hipresica-Kugeln auf dem Substrat zurück. Um ein ausreichendes Signal am Detektor zu erhalten, dürfen es nicht zu wenig Partikel auf dem Substrat sein. Zu viele Teilchen sorgen für Häufungen auf dem Substrat, die sich schwerer berechnen lassen. Durch diese zwei Kriterien (nicht zu wenige oder zu viele Kugeln) wurde sich für annähernd eine Monolage an Teilchen entschieden. Das führte dazu, dass jede Probe wiederholt betropft werden musste, da die Dosierung mit der Pipette etwas ungenau ist.

3.2.2 Probenaufbereitung der KBr-Presslinge

Für quantitative Messungen wurden KBr-Presslinge zu jeder Teilchengröße hergestellt. Das SiO_2 -Pulver wird dazu mit KBr in einem Masseverhältnis von 1:500 im Mörser vermischt und es werden 200 mg dieser Mischung in ein zylindrisches Presswerkzeug mit 13 mm Durchmesser gegeben. Das gemischte Pulver wird für 10 Minuten mit einer Kraft von 10 Tonnen und einem Niederdruck von 0,08 bar gepresst. Die Presse ist eine hydraulische Presse vom Hersteller PERKIN-ELMER und ist in Abbildung 3.2 zu sehen. Bei diesen Bedingungen wird das KBr fließend und umschließt die Probe im Pressling.



Abbildung 3.2: Die Abbildung zeigt die Presse für die Presslingsherstellung.

4 Messwerte

4.1 Mikroskopie

Von den Hipresica-Partikeln der verschiedenen Größen werden Mikroskopaufnahmen mit Hilfe des Modells "Axio Scope.A1" von Zeiss durchgeführt. Bei den Messungen wird Auflicht und für die verschiedenen Partikelgrößen unterschiedliche Objektive verwendet. Die 3 μ m- und 4 μ m-Partikel werden mit 20-facher Vergrößerung gemessen während bei den 5 μ m-Partikel zehnfache Vergrößerung verwendet wird. Mit diesen Aufnahmen wird zum einen die Beschichtung des Platinsubstrates (wie in Kapitel 3 beschrieben) und zum anderen die Größenverteilung der Partikel überprüft.

Die Partikel sind wie angegeben kugelförmig und weichen von ihren angegebenen Größen nicht mehr als 10% ab. Die Schichten sind recht gleichmäßig über die gesamte Probe verteilt. Die Bedeckung des Substrats liegt bei schätzungsweise 40 bis 50 Prozent. Vereinzelt sind bei größeren Clustern kleinere Kugeln mit dicker Umrandung auf den Bildern zu erkennen. Dabei handelt es sich um Kugeln, die auf der ersten Schicht aufliegen und somit leicht außerhalb der Fokusebene des Mikroskops liegen.

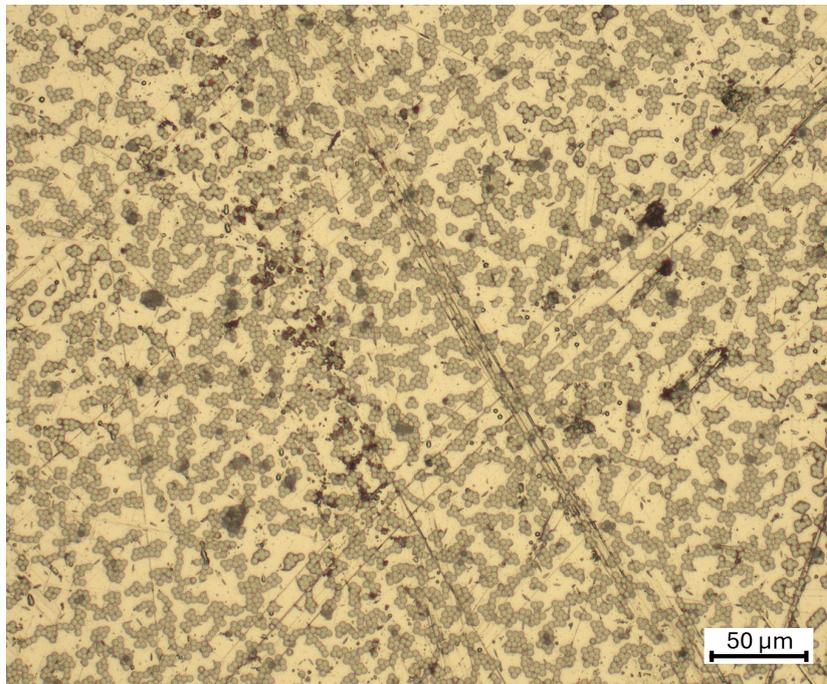


Abbildung 4.1: Mikroskopaufnahme der 3 μ m-Hipresica-Kugeln auf dem Platinsubstrat.

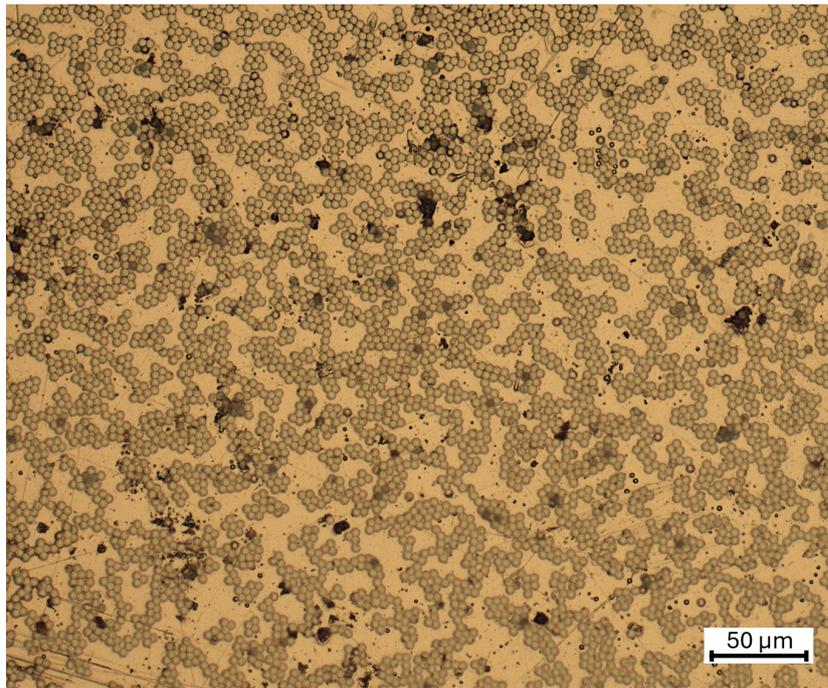


Abbildung 4.2: Mikroskopaufnahme der 4µm-Hipresica-Kugeln auf dem Platinsubstrat.

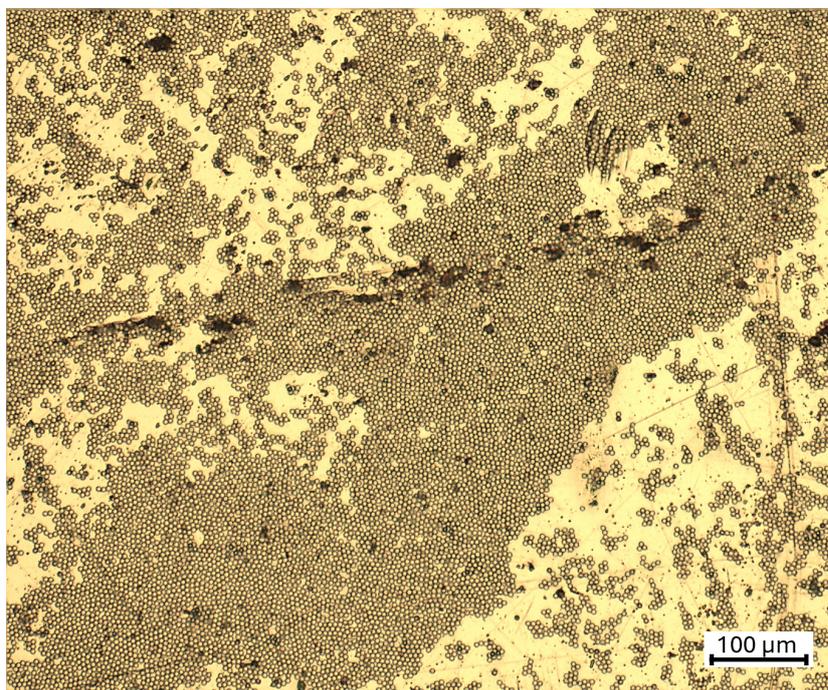


Abbildung 4.3: Mikroskopaufnahme der 5µm-Hipresica-Kugeln auf dem Platinsubstrat.

4.2 Transmissionsspektren

Für die Messungen der Transmissions- und Emissionsspektren werden die selben Proben auf dem Platin-Substrat verwendet. Da die Partikel auf einem nichttransparenten Platinsubstrat liegen, findet die Messung in einem Reflektionsaufbau statt. Aufgrund der limitierten Anzahl an Substraten muss der Aufbau zwischen den Messungen der verschiedenen Kugelgrößen mehrfach zwischen Emissions- und Transmissionsaufbau umgebaut werden. Dem entsprechend mussten sämtliche Korrekturmessungen für jedes Transmissionsspektrum wiederholt werden. Die Spektren werden bei allen Partikelgrößen von 300K bis 900K Probertemperatur in 100K-Schritten gemessen, wobei für ein Spektrum drei verschiedene Messungen erfolgen. Die drei Messungen sind eine Probenmessung, eine Referenzmessung (Platin) und eine Messung des leeren Heizkörpers. Da bei den Transmissionsspektren bei höheren Temperaturen von zwei Strahlungsquellen auszugehen ist (Lichtquelle und erwärmte Probe), muss das Interferogramm entsprechend korrigiert werden. Das bedeutet, dass jede dieser drei Messungen einmal mit und einmal ohne die Lichtquelle gemessen werden muss. Zur Korrektur der Interferogramme wird von dem Interferogramm mit verwendeten Lichtquellen das Interferogramm ohne die Lichtquellen abgezogen. Damit ergibt sich, dass für jedes Transmissionsspektrum insgesamt sechs einzelne Spektren aufgenommen werden.

Es folgt ein Beispiel für die durchgeführten Korrekturen anhand der 500K- und 900K-Messungen der 3 μ m-Partikel. In Abbildung 4.4a sind die unkorrigierten Probenmessungen (Spektrum + Interferogramm) mit und ohne Lichtquellen abgebildet. In Abbildung 4.5a sind die 500K- und 900K-Messung der Proben mit Interferogrammkorrektur dargestellt.

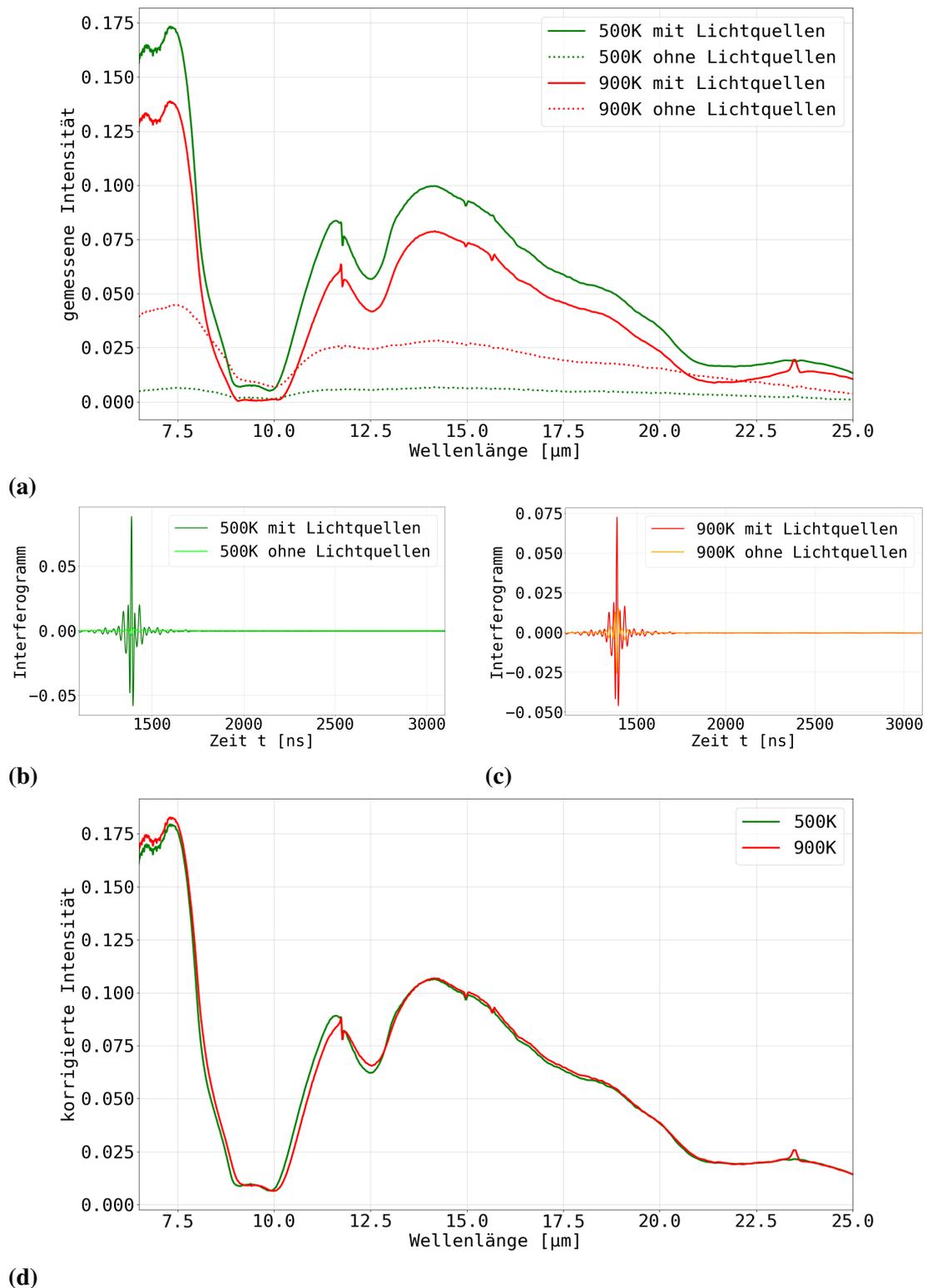
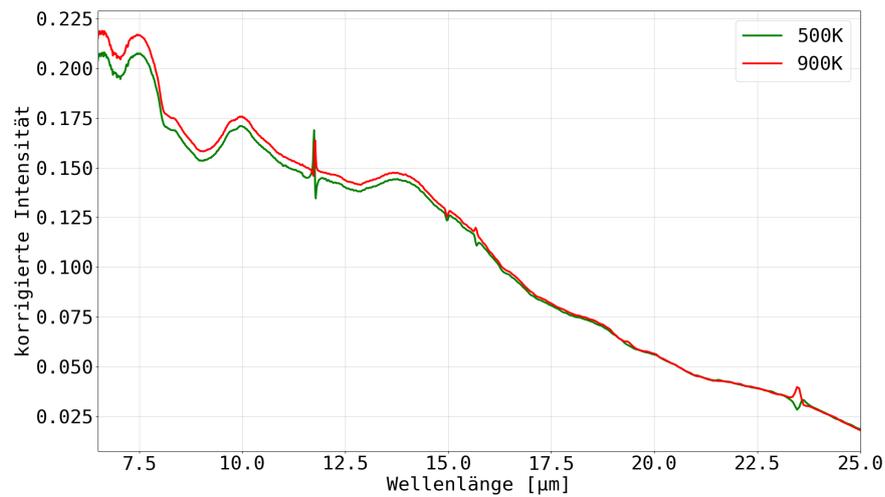
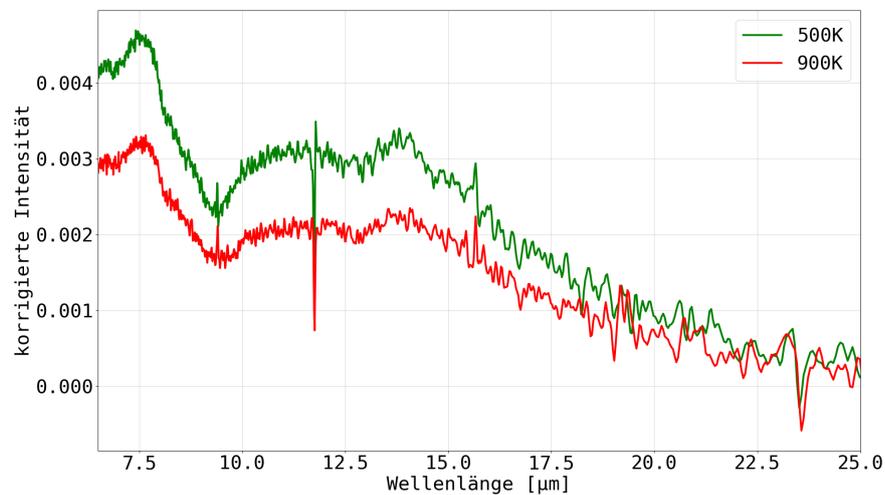


Abbildung 4.4: In Grafik a) sind die unkorrigierten Probenmessungen für 500K und 900K jeweils mit und ohne die Lichtquellen abgebildet. In b) und c) sind die dazu gehörigen Interferogramme, welche für die Korrektur voneinander abgezogen werden müssen, aufgeführt. In d) sind die Interferogramm-korrigierten Proben-Messungen dargestellt.



(a)



(b)

Abbildung 4.5: Die Darstellung zeigt in a) die interferogramm-korrigierten Referenzmessungen und in b) die interferogramm-korrigierten Leer-Messungen.

In Abbildung 4.5 sind die interferogramm-korrigierten Substratmessungen und interferogramm-korrigierten Leer-Messungen (Messung des leeren Heizkörpers) dargestellt. Die drei interferogramm-korrigierten Messungen (Proben-, Substrat = Referenz- und Leer-Messung) werden nach Gleichung 4.1 miteinander verrechnet um das Transmissionsspektrum zu erhalten

$$\text{Transmissionsspektrum} = \frac{\text{Probe} - \text{Leer}}{\text{Referenz} - \text{Leer}}. \quad (4.1)$$

In Abb. 4.6 sind die vollständig korrigierten Transmissionsspektren bei den verschiedenen Temperaturen dargestellt. Zur Vereinheitlichung der Abbildungen der Transmissionmessungen mit denen der Emissionsmessungen wurde das Spektrum bei 300K nicht

mit abgebildet.

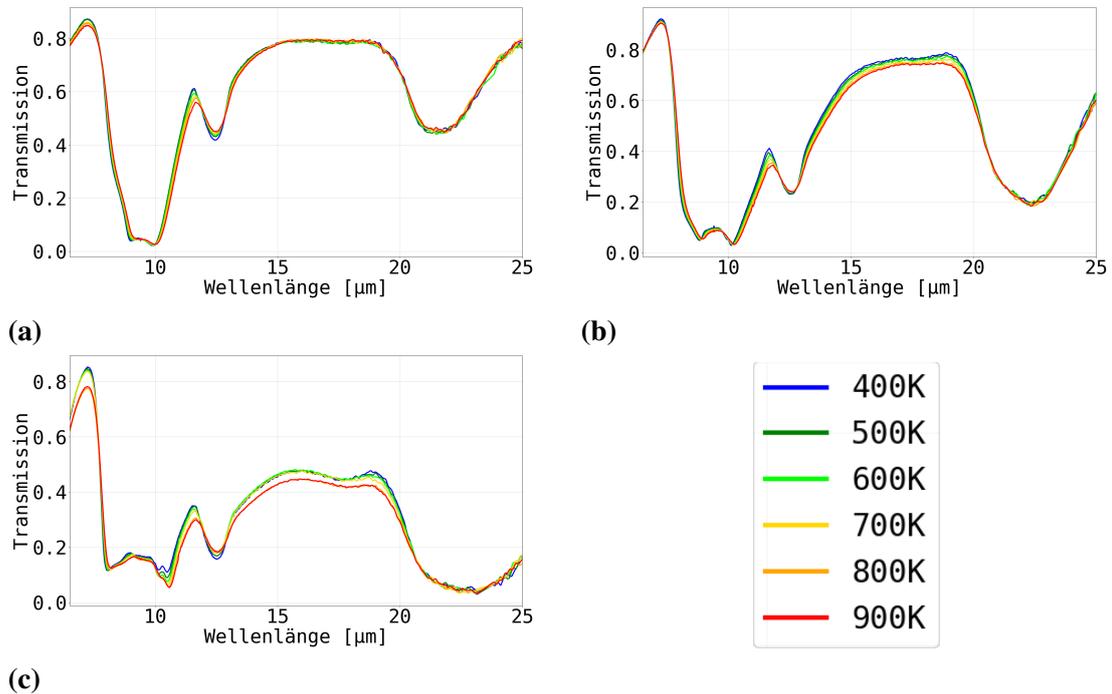


Abbildung 4.6: Die Abbildung zeigt die korrigierten temperaturabhängigen Transmissionmessungen im Reflektionsaufbau für die drei Partikelgrößen (a) 3 μm, b) 4 μm und c) 5 μm Durchmesser).

In dieser Arbeit wurden Transmissionmessungen von KBr-Presslingen mit Hipresica-Partikeln der verschiedenen Größen für die Bestimmung der optischen Konstanten aufgenommen. Der folgende Graph zeigt die jeweiligen Transmissionsspektren der verschiedenen Partikeldurchmesser.

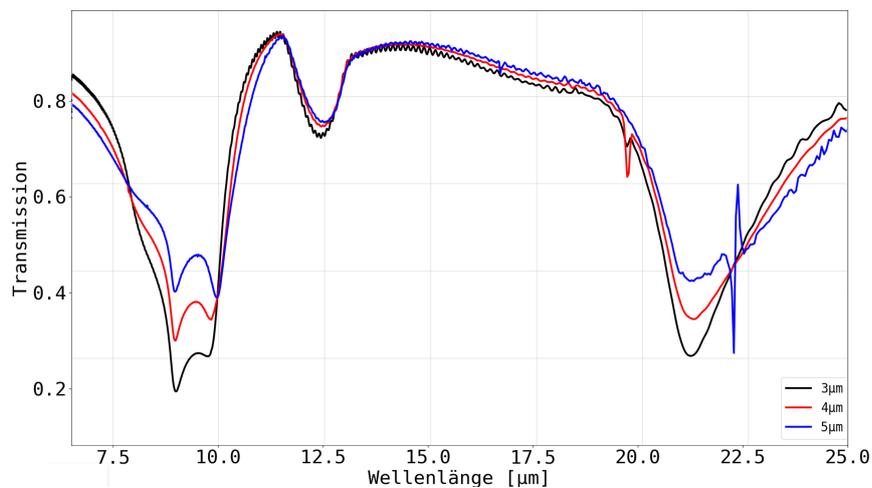


Abbildung 4.7: Die Transmissionsspektren der KBr-Presslinge mit Hipresica-Teilchen für die drei unterschiedlichen Größen.

4.3 Emissionsspektren

Die Aufnahme der Emissionsspektren erfolgte, wie die der Transmissionsspektren von 300K bis 900K in 100K-Schritten. Im Vergleich zu den Transmissionsspektren wird nur zweimal pro Temperatur gemessen. Das Substrat wird einmal mit der Probe und einmal ohne die Probe gemessen. Zur Berechnung der probenspezifischen Emissionsspektren wurde von der emittierten Intensität der Probe die Intensität des Platinsubstrates abgezogen und durch die spektrale Strahlungsdichte der entsprechenden Temperaturen $\left[\frac{W}{m^2 Hz \cdot sr}\right]$ geteilt. Diese Vorgehensweise ist notwendig um eine direkte Vergleichbarkeit der Spektren der unterschiedlichen Temperaturen zu erhalten. In Abbildung 4.8 sind die Emissionsspektren von 400K bis 900K dargestellt. Bei 300K war die Emission zu gering, so dass der Graph bei 300K nur Rauschen darstellen würde.

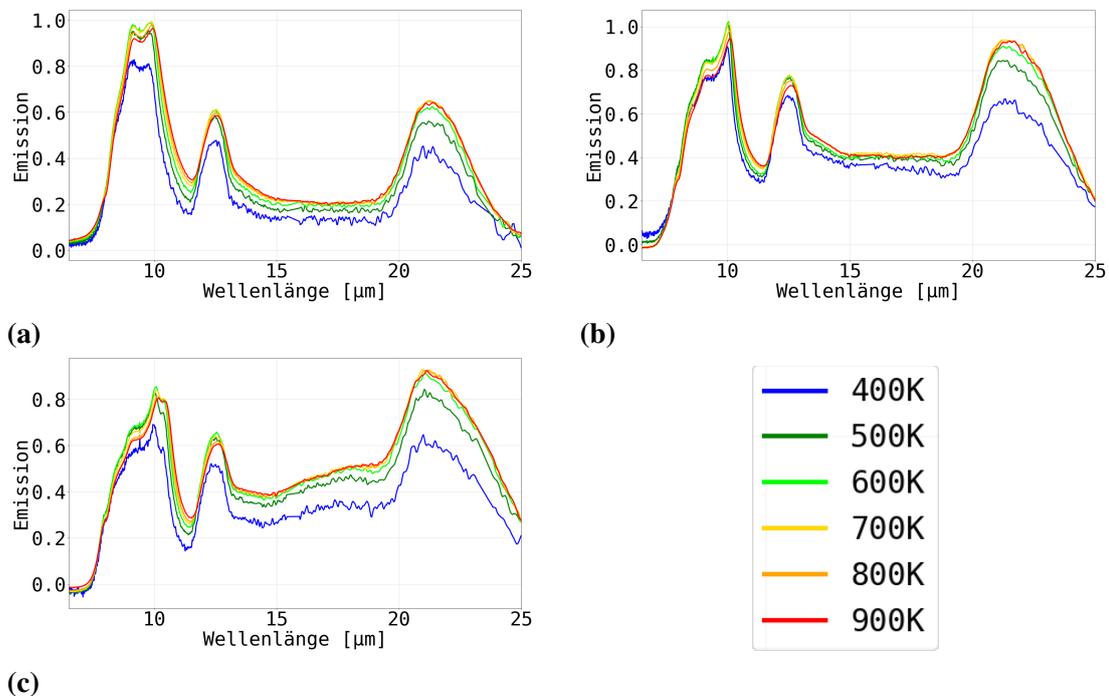


Abbildung 4.8: Die Abbildung zeigt die Emissionsspektren vor einer messgerätspezifischen Korrektur. Die Figuren a), b) und c) zeigen die drei Partikelgrößen (3, 4 und 5 µm Durchmesser).

5 Auswertung und Diskussion

5.1 Emission und Transmission

5.1.1 Korrektur der Emissionsspektren

Die Emissionsspektren aus Abb. 4.8 sind die Spektren, wie sie der Detektor wahrnimmt. Sie enthalten noch einen messgerätspezifischen Fehler. Da es keine Referenzmessung (z. B. von einem Schwarzkörperstrahler) gibt, müssen die Spektren anders korrigiert werden. Dazu wird ein temperatur- und wellenlängenabhängiger Korrekturfaktor verwendet, welcher in einer Bachelorarbeit von Jennifer Gerbeth [29] bestimmt wurde. Sie nutzte mehrere Bulkmaterialien und bestimmte durch die Gleichung 2.11 und eine Mittlung über alle Materialien den notwendigen Korrekturfaktor für die Emissionsmessungen. Dieser Korrekturfaktor beinhaltet unter anderem die Absorptionen von Spiegeln des Spektrometers und die Absorption eines KBr-Fensters vor dem verwendeten Detektor sowie die möglicherweise wellenlängenabhängige Detektorempfindlichkeit. Der Korrekturfaktor ist nur eine Näherung und enthält noch minimale Reste der stoffspezifischen Strukturen der Bulkmaterialien (mehr dazu siehe Bachelorarbeit [29]).

In Abbildung 5.1 werden zwei unterschiedliche Varianten der Korrektur dargestellt. In der linken Spalte sind die temperaturabhängigen Korrekturfaktoren verwendet worden. In der Rechten wurde für die temperaturabhängigen Messungen nur die Korrekturfunktion von 900 K verwendet. Der Faktor bei 900 K wurde gewählt, da er von den Korrekturfaktoren die geringsten Reste stoffspezifischer Strukturen der Bulkmaterialien enthielt.

Die Transmissionsspektren (Abb. 4.6) weisen keine große Temperaturabhängigkeit auf. Die korrigierte Emission in der linken Spalte von Abbildung 5.1 weist im Vergleich eine zu starke Temperaturabhängigkeit auf. Die rechte Spalte verfügt über eine zur Transmission eher passende Temperaturabhängigkeit bei höheren Temperaturen. Auf den ersten Blick zeigt die rechte Seite der Unterabbildungen keine einheitliche Temperaturabhängigkeit. Diese Unterabbildungen weisen eine maximale Intensität der Emissivität in den Banden bei 600K oder 700K und fallen sowohl zu niedrigeren als auch zu höheren Temperaturen hin ab. Der Abfall in Richtung der niedrigen Temperaturen lässt sich mit der Empfindlichkeit des Detektors erklären. Bei niedrigen Temperaturen war die gemessene Intensität am unteren Ende der Detektorempfindlichkeit. Ein weiterer Indikator, dass die

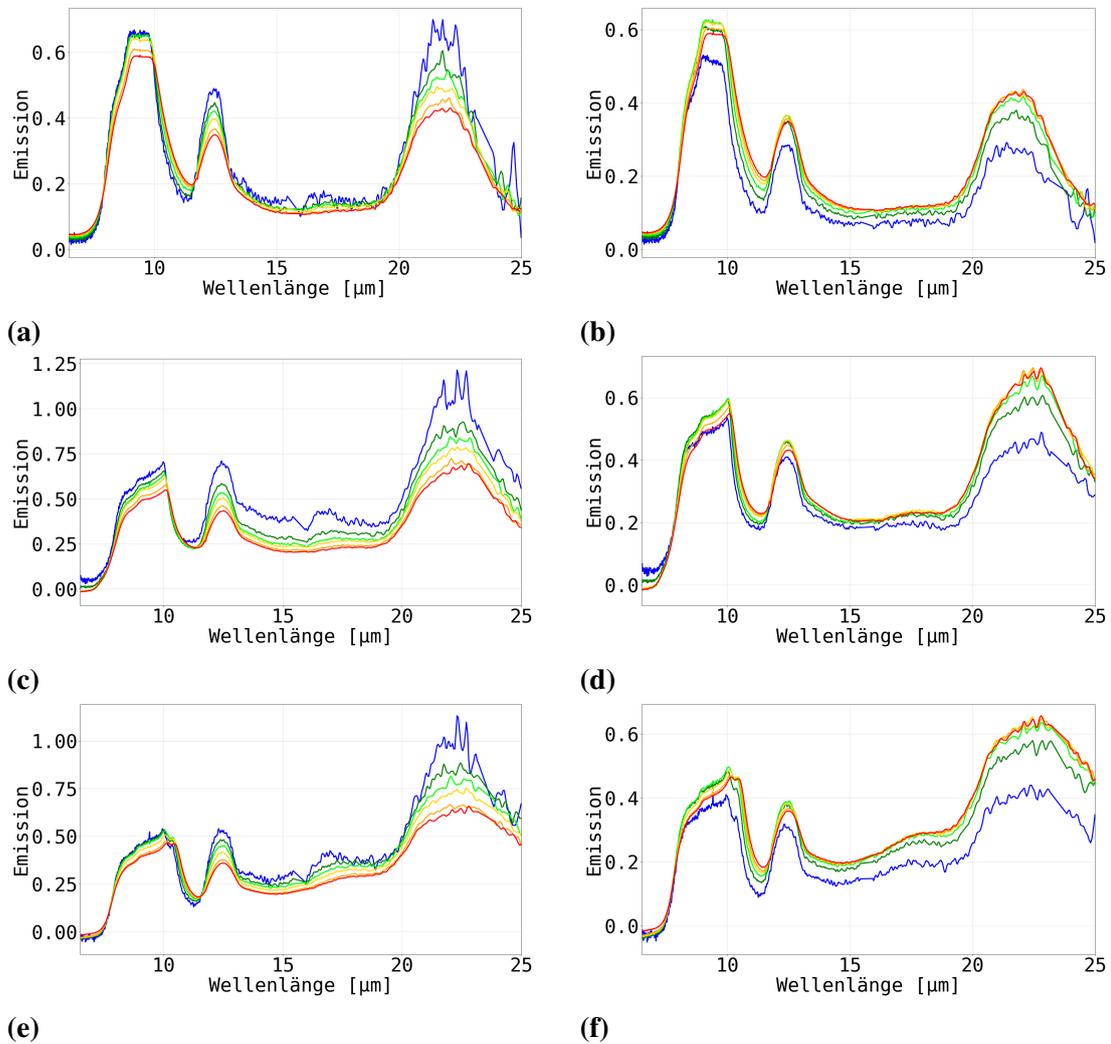


Abbildung 5.1: Die Abbildung zeigt die korrigierten Emissionsspektren der drei Partikelgrößen. Die Farben der Graphen repräsentieren die selben Temperaturen wie in Abb. 4.8. Die linke Spalte (a, c, e) verwendet die temperaturabhängigen Korrekturfaktoren. Die rechte Spalte (b, d, f) verwendet für alle Temperaturen den 900K-Korrekturfaktor. Die drei Partikelgrößen sind jeweils untereinander abgebildet und die verschiedenen Farben der Graphen stehen für die einzelnen Temperaturen von 400K (blau) bis 900K (rot).

Messung am unteren Ende des detektierbaren Bereiches liegt, ist das schlechter werdende Signal-Rausch-Verhältnis der 500K- und 400K-Spektren. Die 300K-Messung war nicht mehr detektierbar. Der leichte Abfall der Emission hin zu höheren Temperaturen passt zu der leicht steigenden Transmission (Abfall der Absorption) in Abbildung 4.6. In dieser Arbeit werden die korrigierten Emissionsspektren mit dem einheitlichen Korrekturfaktor bei 900K (rechte Spalte Abb. 5.1) für die weitere Auswertung verwendet. Die meisten Vergleiche werden mit den Messung bei 700K durchgeführt, da 700K die niedrigste Temperatur ist, bei der der pyroelektrische Detektor genügend thermische Veränderung wahrnehmen kann.

5.1.2 Vergleich der gemessenen Emissions- und Transmissionsspektren

Die Transmission kann durch eine Umstellung der Formel 2.10 in eine Art Emission, welche Streuung enthält, umgerechnet werden

$$E + S = 1 - T. \quad (5.1)$$

In der Abbildung 5.2 sind die Emissionsspektren und die umgerechneten Transmissionsspektren abgebildet. Die gemessenen Transmissionsspektren liegen im Allgemeinen über den gemessenen Emissionsspektren, so wie es die Theorie vorhersieht. Die Emission wird nur aus dem Absorptionsquerschnitt berechnet, während bei der Transmission mit dem Extinktionsquerschnitt (Absorptionsquerschnitt + Streuquerschnitt) gerechnet wird. Daraus lässt sich ableiten, dass die Differenz des Transmissions- und Emissionsspektren repräsentativ für die Streuverluste steht. Diese Differenz und der Vergleich mit Theoriewerten wird in Kapitel 5.3.4 genauer beschrieben.

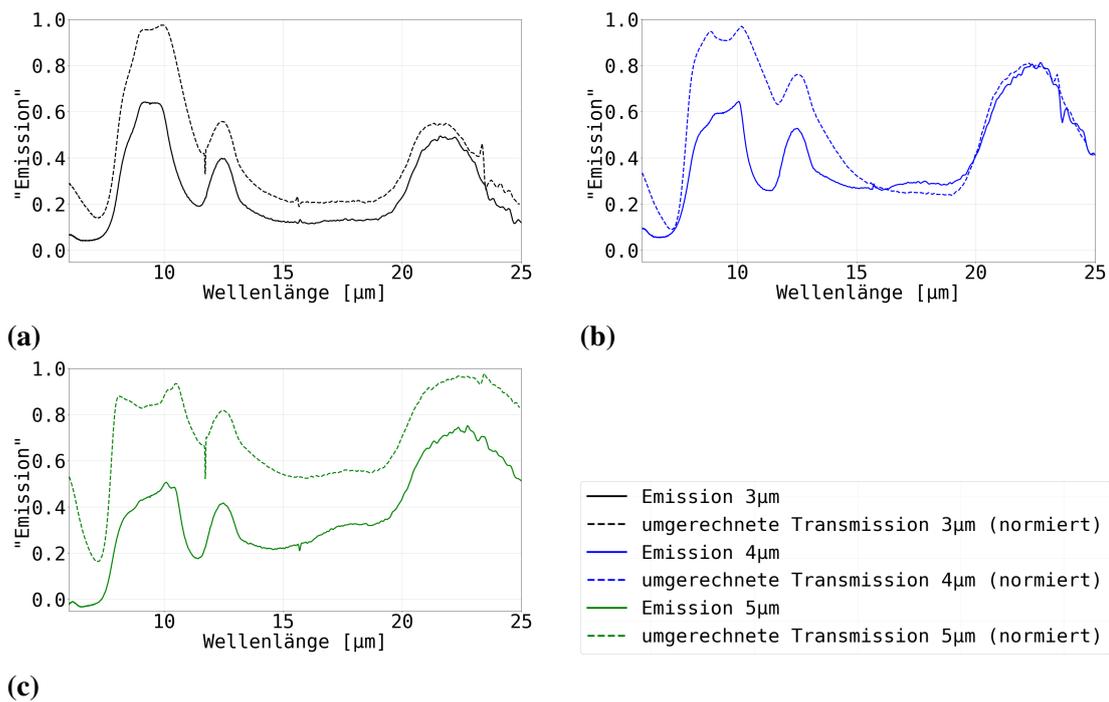


Abbildung 5.2: Die Abbildung zeigt die Emissionsspektren und die zur Emission umgerechneten Transmissionsspektren bei 700K.

5.2 Bestimmung der optischen Konstanten

5.2.1 Fitparameter

Zur Bestimmung der optischen Konstanten wird ein Modell mit Brendel-Bormann-Oszillartor nach Kapitel 2.3.1 verwendet. Im finalen Fit sind neun dieser Oszillatoren verwendet. Die optischen Konstanten der AIU-Datenbank [6] sind ebenfalls in den Fit eingegangen. Der Einfluss der optischen Konstanten auf den Fit ist jedoch um den Faktor 1000 verringert (siehe Anhang: Pythoncode-Fit). Diese Konstanten werden verwendet um als eine Art Vorlage zu dienen und die Fitparameter etwas einzuschränken. Die Transmission der drei Partikelgrößen wird berechnet, indem mit der Mie-Theorie aus diesem Modell optischer Konstanten Extinktions- und Streuquerschnitte und anschließend über Gleichung 2.6 die jeweilige Transmission berechnet werden. Diese Transmission der drei Partikelgrößen werden an die drei KBr-Transmissionsspektren gleichzeitig angefitet. Die Mie-Theorie ist hier ausreichend, da die Partikel räumlich einen größeren Abstand zueinander haben, als bei den zweidimensionalen Schichten auf dem Platinsubstrat. Die Smuthi-Bibliothek würde die Positionen der Hipresica-Teilchen im Pressling benötigen und ist auch von der Rechenzeit nicht für Fits geeignet.

Jeder der Oszillatoren verfügt über vier Parameter, die Stärke, die Dämpfung des Oszillators, die mittlere Position und eine Gaußbreite der Position. Nach dem Modell von S. Wetzel [27] sind die Dämpfungen bei Raumtemperatur konstant bei einem Wert von vier reziproken Zentimetern festgesetzt. Die anderen Parameter der Oszillatoren sind für den Fit als freie Parameter angesetzt. Ihre Anfangswerte liegen in der Nähe der Parameter, wie sie von S. Wetzel [27] verwendet wurden. Es gibt außer den Oszillatorparametern noch weitere Parameter von Bedeutung. Einer dieser Parameter ist ϵ_∞ mit einem Startwert von zwei. Ein weiterer Parameter, welcher im Pythoncode (siehe Anhang) nur als y bezeichnet wird, gibt an, welcher Anteil der Streuverluste tatsächlich verloren gehen, da es sich um einen fokussierten Strahlengang handelt und Vorwärtsstreuung teilweise eingefangen wird. Die ersten Fitdurchgänge mit fünf Oszillatoren zeigten, dass der Wert nahe eins liegt, weshalb dieser Parameter aus Zeitgründen auf 0.98 festgesetzt wird, seit dem die Oszillatoranzahl erhöht wurde.

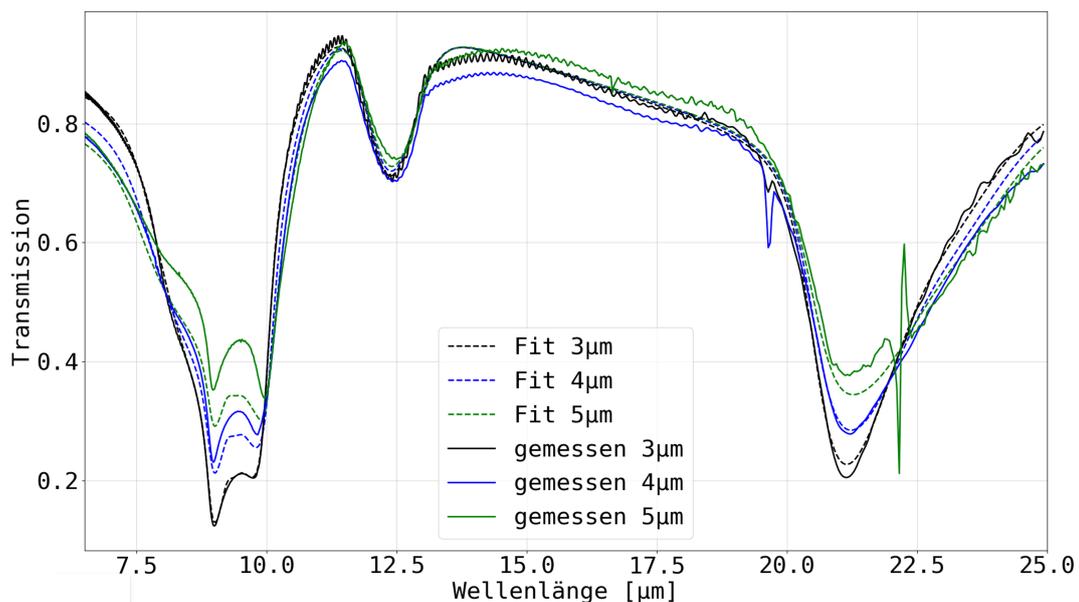


Abbildung 5.3: Die angefitzten Spektren der KBr-Presslinge.

Tabelle 5.1: Tabelle der resultierenden Fitparameter (Werte ohne Fehler sind fixiert).

Oszillator/ Parametergruppierung	Parameter	Wert \pm absoluter Fehler	prozentualer Fehler [%]
Oszillator 1	Breite σ	1600 \pm 27000	1700
	Wellenzahl	1200 \pm 4400	365
	Stärke	210 \pm 710	330
	Dämpfung γ	4	
Oszillator 2	Breite σ	86,0 \pm 2,7	3,1
	Wellenzahl	1116,0 \pm 3,6	0,32
	Stärke	285,0 \pm 9,2	3,2
	Dämpfung γ	4	
Oszillator 3	Breite σ	10,5 \pm 1,3	12
	Wellenzahl	1101,75 \pm 0,76	0,07
	Stärke	162 \pm 15	9,4
	Dämpfung γ	4	
Oszillator 4	Breite σ	28,1 \pm 2,1	7,5
	Wellenzahl	1066,2 \pm 2,8	0,26
	Stärke	270 \pm 14	5,2
	Dämpfung γ	4	
Oszillator 5	Breite σ	14,43 \pm 0,73	5,1
	Wellenzahl	1025,11 \pm 0,78	0,08
	Stärke	163,2 \pm 6,8	4,2
	Dämpfung γ	4	
Oszillator 6	Breite σ	25,7 \pm 1,2	4,6
	Wellenzahl	807,0 \pm 1,1	0,13
	Stärke	105,2 \pm 3,0	2,8
	Dämpfung γ	4	
Oszillator 7	Breite σ	12,4 \pm 1,9	15
	Wellenzahl	463,5 \pm 1,5	0,33
	Stärke	135 \pm 37	27
	Dämpfung γ	4	
Oszillator 8	Breite σ	19,6 \pm 7,6	39
	Wellenzahl	440 \pm 14	3,2
	Stärke	122 \pm 51	42
	Dämpfung γ	4	
Oszillator 9	Breite σ	168 \pm 49	29
	Wellenzahl	421 \pm 77	18
	Stärke	201 \pm 57	28
	Dämpfung γ	4	
andere Parameter	ε_{∞}	2.009 \pm 0.076	3.8
	y	0.98	

In Abbildung 5.3 ist der beste Fit dargestellt. Der Fit passt gut zu den gemessenen Spektren, besonders an die 3 μ m-Partikel passt er sehr gut, während in der 9 μ m- bis 10 μ m-Bande mit zunehmender Teilchengröße (3 μ m, 4 μ m, 5 μ m) der Fit mehr abweicht. Die Absorption im Fit ist da etwas stärker als die gemessene Absorption, wodurch die Graphen der gefitteten Transmission niedriger liegen als die Graphen der gemessenen Transmission.

Die neun Oszillatoren lassen sich in vier Gruppierungen unterteilen. Die erste Gruppierung besteht nur aus dem ersten Oszillator und bewirkt einen Untergrund. Die große Gaußbreite (zehnmal größer als die zweitgrößte Breite) bewirkt einen flachen Untergrund bei kürzeren Wellenlängen. Die Wirkung dieses Oszillators ist kaum ersichtlich, aber der Fit bevorzugt diesen Oszillator, ohne ihn würde der Fit einen anderen Oszillator da hin legen. Da der Einfluss des ersten Oszillators kaum ersichtlich ist, ist der große Fehler ($Fehler > 3 * Wert$) kaum relevant.

Die zweite Gruppierung besteht aus Oszillatoren zwei bis fünf. Diese vier Oszillatoren werden der Beschreibung der 9 μ m-Bande zugeordnet. Der sechste Oszillator reicht allein aus, um die 12,5 μ m-Bande ausreichend zu beschreiben. Die letzten drei Oszillatoren charakterisieren als die dritte Gruppierung, die 21/22 μ m-Bande. In den Gruppierungen, die jeweils eine Bande beschreiben, sind die Fehler nicht so groß, wie die Fehler des Untergrundes (der ersten Gruppierung). In den einzelnen Gruppierungen bzw. in den einzelnen Banden, beschrieben durch mehrere Oszillatoren, sind die Oszillatoren voneinander abhängig. Alle Fehler der Oszillatoren zwei bis neun, die größer als 5% sind, sind auf diese Abhängigkeit zurückzuführen.

5.2.2 Optische Konstanten

Aus den Fitparametern aus Tabelle 5.1 lassen sich die folgenden optischen Konstanten berechnen (siehe Abb. 5.4).

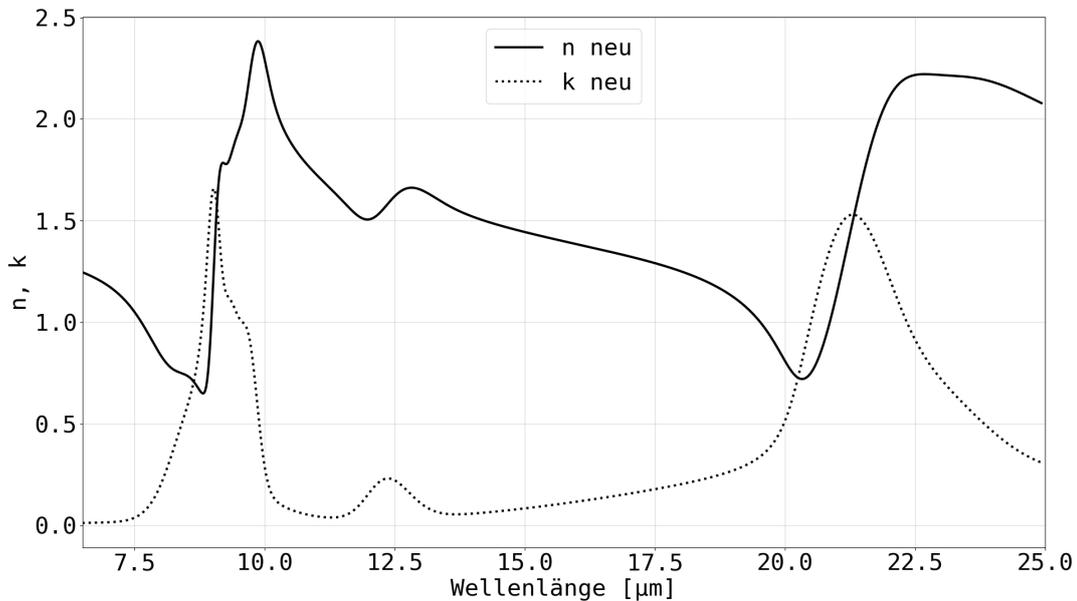


Abbildung 5.4: Die aus dem Fit resultierenden optischen Konstanten.

Die neuen optischen Konstanten passen grob zu den anderen Datensätzen (siehe Abbildung 5.5). Bei genauerer Betrachtung gibt es deutliche Unterschiede zwischen den neuen und den alten optischen Konstanten. Die neuen n - und k - Werte liegen in der 21/22 μm Bande niedriger als bei den Datensätzen von Palik et al. und der AIU-Datenbank. Der deutlichste Unterschied ist bei der 9-10 μm Bande zu erkennen. Die neuen n -Werte haben ein viel flacheres (erstes) Maximum bei 9 μm , wo die alten ihr Hauptmaxima haben. Nach dem keinen Maxima der neuen n -Werte steigen sie langsam bis zu ihrem absoluten Maximum bei 10 μm an. Eine kürzere und umgangssprachlichere Beschreibung der Bande wäre, dass der Graph (Abbildung 5.5) so aussieht, als wäre das Maxima der anderen Datensätzen "abgeschnitten" wurden. Auch die k -Werte weisen Unterschiede auf, das Maximum bei 9 μm liegt niedriger und ist schmaler. Dafür weist diese Bande eine langwellige Schulter bis 10 μm auf. Auch die k -Werte der 21/22 μm -Bande liegen niedriger.

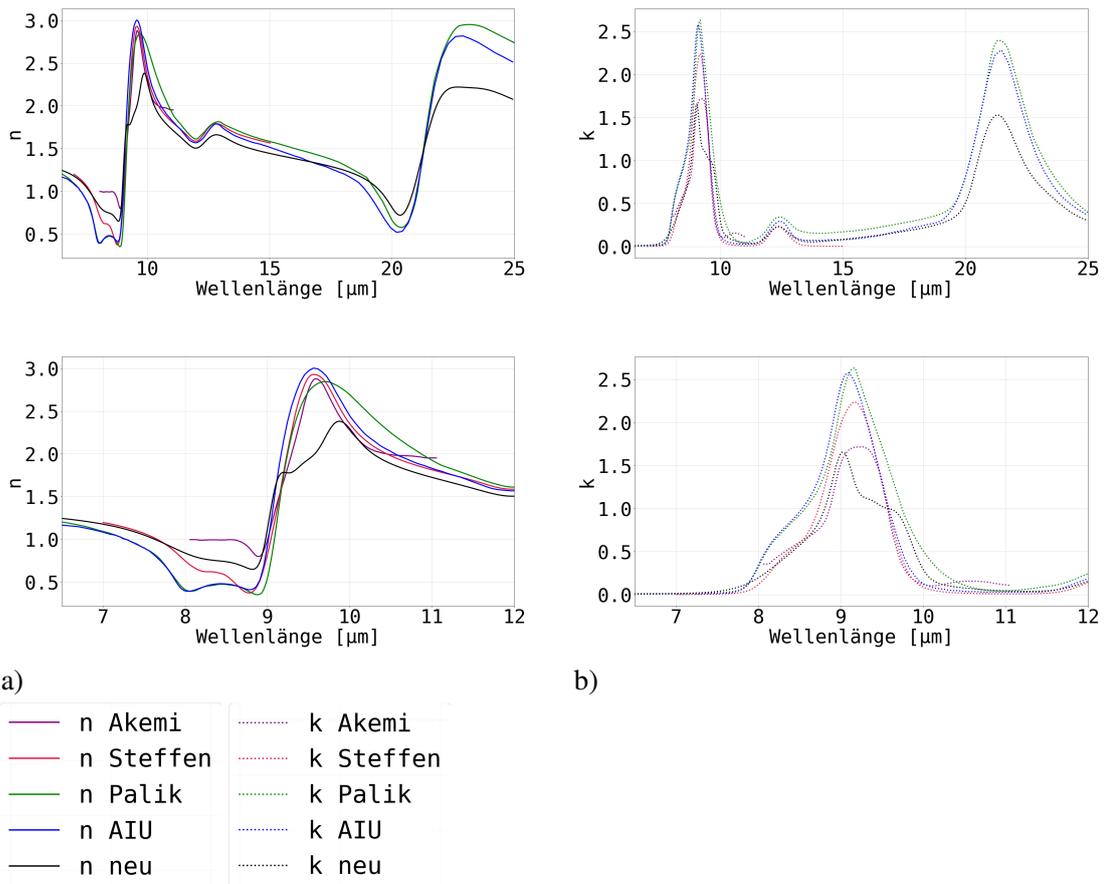


Abbildung 5.5: Die Abbildung zeigt die n und k Werte der verschiedenen Datensätze im Vergleich zu den neuen optischen Konstanten (n, k). Die Datensätze stammen von Akemi Tamanei et al. [26], Steffen Wetzler [27], Edward D. Palik [7] und aus der AIU-Datenbank [25].

5.3 Theoretische Spektren

Zur Berechnung von Transmission und Emission aus den optischen Konstanten wurden drei verschiedene Modelle bzw. Pythonskripte verwendet. Bei Mie-Theorie und Smuthi wurden zuerst die Absorptions-, Streu- und Extinktionsquerschnitte berechnet und über die Gleichung 2.10 in Transmissions- und Emissionsspektren umgerechnet. Aus diesen Rechnungen geht hervor, dass die Streuquerschnitte der Smuthi-Rechnung im Vergleich mit den Messdaten viel zu groß sind. Aufgrund der hohen Winkelgenauigkeit von Smuthi zählt Smuthi sämtliche Vorwärtsstreuungen als Streuverlust während der fokussierte Strahlengang des Spektrometers einen Großteil der Vorwärtsstreuung einfängt. Der Streuquerschnitt wurde deshalb um einen Faktor Zehn reduziert, um die berechnete

Transmission in die Größenordnung der Gemessenen zu bekommen.

Für die Annahme eines Modells einer soliden Schicht wurde zuerst der Füllfaktor berechnet. Die dichteste Kugelpackung einer 2D-Schicht liegt bei rund 60% und die Mikroskopbilder in Abb. 4.1 zeigen die Belegung des Substrates. Der Füllfaktor ist das Produkt von der dichtesten Kugelpackung und der Belegung des Substrates. (Belegung und Füllfaktor werden in Kapitel 5.3.1 bestimmt). Mit diesem Füllfaktor und den optischen Konstanten der Kugeln und vom Platin wurde mit den Gleichungen 2.18, 2.14, 2.19 und 2.20 die Transmission der Schicht (mit Platin als Spiegel) berechnet. Aus $E = 1 - T$ wurde dann die Emission berechnet. Die aus den optischen Konstanten (bei Raumtemperatur) berechneten Transmissions- und Emissionsspektren werden immer mit dem gemessenen Spektrum bei 700K verglichen. Aufgrund des Temperaturunterschiedes werden deshalb die Spektren an der langwelligen Seite der Banden immer abweichen. Es werden deshalb die gemessenen Spektren von 700K für den Vergleich verwendet, da es das kühlsste Emissionsspektrum ist, was problemlos messbar ist (Vergleich Abbildung 5.1 rechte Spalte).

5.3.1 Auswertung der Mikroskopbilder für Smuthi- und solide Schicht-Rechnungen

Zur Auswertung der Mikroskopbilder wird die Python-Bibliothek OpenCV [30] verwendet. Mit dieser Bibliothek wurde in dieser Arbeit ein Pythonprogramm (siehe Anhang) geschrieben, welches Kreise in Bildern finden kann und diese grün markiert in den Mikroskopbildern einzeichnet. Je nach verwendeten Suchparametern findet die Bibliothek unterschiedlich viele Kreise. Die Suchparameter sind Kontrast, minimale und maximale Pixelgröße des Radius sowie der minimale Abstand der Kreismittelpunkte. Da ohne einen Mindestabstand zwei Kreise pro Partikel gefunden werden (ein Kreis beim inneren Übergang von weiß zu schwarz und einen zweiten beim äußeren Übergang von schwarz nach weiß), wird ein Mindestabstand von zwei Radien gewählt. In den Abbildungen 5.6, 5.7 und 5.8 sind die Durchläufe mit den meisten gefundenen Kreisen (welche real sind) abgebildet.

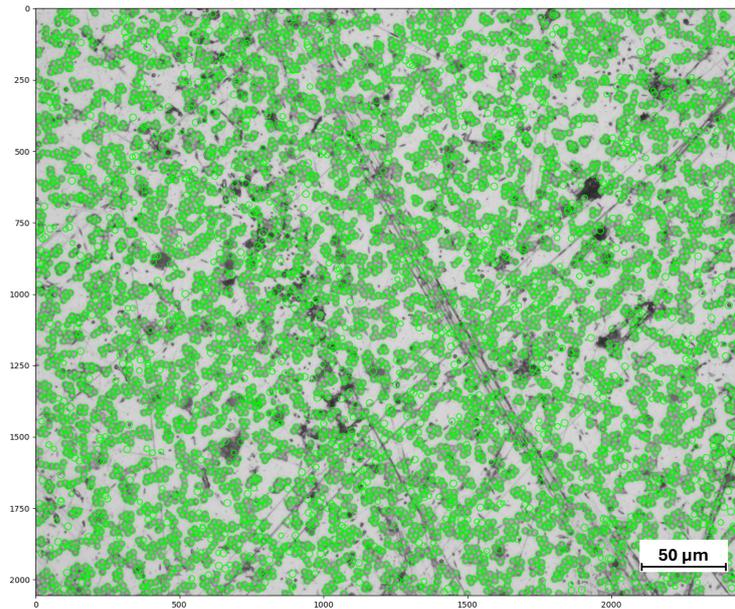


Abbildung 5.6: Partikel-Findung mittels OpenCV-Pythonlibrary auf der Mikroskopaufnahme der 3µm-Hipresica-Kugeln auf dem Platinsubstrat. Die grünen Kreise entsprechen den gefundenen Hipresica-Kugeln.

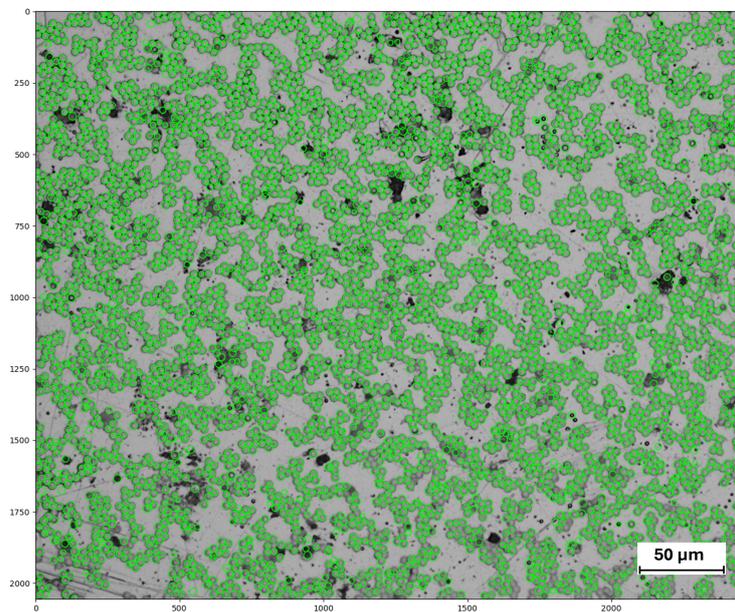


Abbildung 5.7: Partikel-Findung mittels OpenCV-Pythonlibrary auf der Mikroskopaufnahme der 4µm-Hipresica-Kugeln auf dem Platinsubstrat. Die grünen Kreise entsprechen den gefundenen Hipresica-Kugeln.

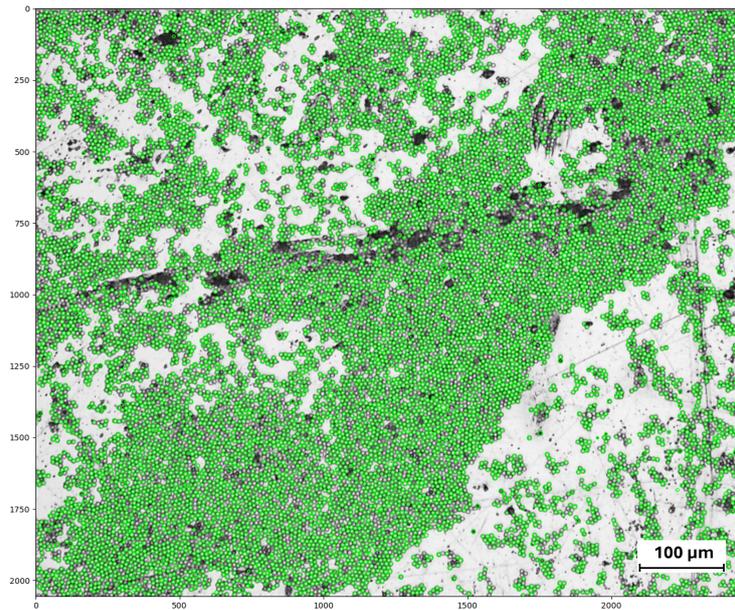


Abbildung 5.8: Partikel-Findung mittels OpenCV-Pythonlibrary auf der Mikroskopaufnahme der 5µm-Hipresica-Kugeln auf dem Platinsubstrat. Die grünen Kreise entsprechen den gefundenen Hipresica-Kugeln.

Geschätzt sind etwa 95% bis 98% der Hipresica-Partikel von OpenCV gefunden worden. Bei genauerer Betrachtung der Abbildungen fällt auf, dass es grüne Kreise an Stellen gibt, wo kein Partikel liegt. Diese Kreise treten selten auf, was zu weniger als ein Prozent aller gefundenen Kreise korrespondiert. OpenCV gibt an, wie viele Kreise es in den abgebildeten Aufnahmen gefunden hat (Anzahl n_{Kreise}). Es sind 5523 3µm-Kugeln, 4722 4µm-Kugeln und 12344 5µm-Kugeln gefunden worden. Daraus lässt sich die abgedeckte Fläche $A_{bedeckt}$ mit den Kreisradien (Radien der Hipresica-Kugeln) r wie folgt berechnen

$$A_{bedeckt} = n_{Kreise} \cdot 2\pi r^2. \quad (5.2)$$

Die betrachtete Substratfläche lässt sich mit Hilfe des Maßstabes als ein Rechteck berechnen. Wenn die abgedeckte Fläche durch die Substratfläche geteilt wird, ergibt sich aus den Mikroskopbildern für die 3µm-, die 4µm- und die 5µm-Kugeln 30%, 42% und 47% als Bedeckung. Unter der Annahme, dass die Kugeln gleichmäßig verteilt sind, folgt daraus ein Füllfaktor von 18%, 25,2% und 28,2% für die jeweiligen Partikelgrößen.

Für die Smuthi-Rechnungen sind die Positionen der Kugeln wichtig. OpenCV gibt die Pixelkoordinaten der Mittelpunkte der gefundenen Kreise an. Diese müssen über den Maßstab in Mikrometer umgerechnet werden. Von der Vielzahl an Kreisen pro Bild wird jeweils nur ein Ausschnitt mit 50 bis 60 Kugeln aus Zeitgründen für die Smuthi-

Rechnung verwendet. OpenCV nutzt kartesische Koordinaten für die Pixelkoordinaten mit (0,0) in der linken oberen Ecke der Bilder. Für die Smuthi-Rechnungen ist ein Koordinatenursprung in der Mitte der Bilder besser, weshalb noch eine Korrektur des Koordinatenursprungs und somit der Kugel-Positionen erfolgt.

5.3.2 Gemessene vs. berechnete Emissionsspektren

Für das Berechnen der theoretischen Emissionsspektren mit Mie und Smuthi wurde der Absorptionsquerschnitt (keine Streuung) verwendet. Aus einem Vergleich der in lila gefärbten Graphen in den Abbildungen 5.9 und 5.10, welche der reinen Mie-Rechnung und reinen Smuthi-Rechnung entsprechen, geht hervor, dass die Smuthi-Rechnung von der Bandenform besser zur 9 μ m-Bande der gemessenen Spektren passt. Bei 3 μ m Kugeldurchmesser sehen die Mie- und die Smuthi-Rechnungen recht ähnlich aus. Erst mit größer werdendem Durchmesser wird es leichter ersichtlich, dass Smuthi besser zu der 9 μ m-Bande passt. Auch die Smuthi-Rechnung weist Abweichungen zum gemessenen Spektrum auf. Besonders die 21/22 μ m-Bande weicht von der Berechnung ab (berechnete Intensität zu niedrig). Ein Grund für diese Differenz kann an der Limitierung der Mie-Theorie und der Smuthi-Bibliothek liegen. Die Mie-Theorie berechnet nur einzeln liegende Partikel und keine Anhäufungen von mehreren Teilchen. Für Smuthi ist angegeben [16], dass Berührungen der Kugeln zu Fehlern in der Rechnung führen können. Die Mikroskopaufnahmen (Kapitel 4.1 zeigen, dass sich viele der Kugeln berühren. Unter der Annahme, dass ein Großteil des Unterschiedes von den sich berührenden Kugeln stammt, wurde ein Modell einer soliden SiO₂-Schicht gewählt. In diesem Modell wird die Schicht mit einer Schichtdicke gleich dem Durchmesser der Kugeln und mit dem oben beschriebenen Füllfaktoren angenommen. In den Abbildungen 5.9 und 5.10 zeigen die roten Graphen die Spektren aus dieser Rechnung einer soliden Schicht (in beiden Abbildungen ist der gleiche rote Graph abgebildet). Die roten Graphen können die 21/22 μ m-Bande besser beschreiben, als die Smuthi- oder Mie-Rechnungen. Dafür kann die solide Schichten-Rechnung die 9 μ m-Bande nicht gut wiedergegeben. Da alle drei Modelle nicht zu 100% passen, wurden auch Mittlungen der Modelle von Mie mit solider Schicht und von Smuthi mit solider Schicht berechnet, nach den Formeln

$$Spektrum = y[\%] \cdot Mie + (100\% - y[\%]) \cdot solideSchicht \quad \text{und} \quad (5.3)$$

$$Spektrum = y[\%] \cdot Smuthi + (100\% - y[\%]) \cdot solideSchicht. \quad (5.4)$$

Das y aus der Gleichung läuft dabei von 0% bis 100% in 10% Schritten. Die verschiedenen Verhältnisse sind in den Abbildungen 5.9 und 5.10 mit den unterschiedlichen Farben dargestellt. Die Beschreibung der passenden Modelle für die jeweilige Bande ist, dass die 9 μm -Bande eher mit Mie oder noch besser mit Smuthi beschrieben wird, während die 21/22 μm -Bande durch das Modell der soliden Schicht besser reproduziert wird. Die langwelligeren Flanken der 9 μm -Bande und der 12,5 μm -Bande werden durch keines der Modelle passend beschrieben. Die gemessene Emission bei 700K liegt da höher als die aus den optischen Konstanten bei Raumtemperatur berechnete. Die Differenz liegt an der Temperaturabhängigkeit der Banden, welche auch gut in Abbildung 5.1 bei diesen Flanken ersichtlich ist. Im Zwischenraum der 12,5 μm -Bande und der 21/22 μm -Bande verläuft das Spektrum recht flach und eben, was besser mit Mie und Smuthi beschrieben wird, da die solide Schicht einen leichten Anstieg vorhersagen würde.

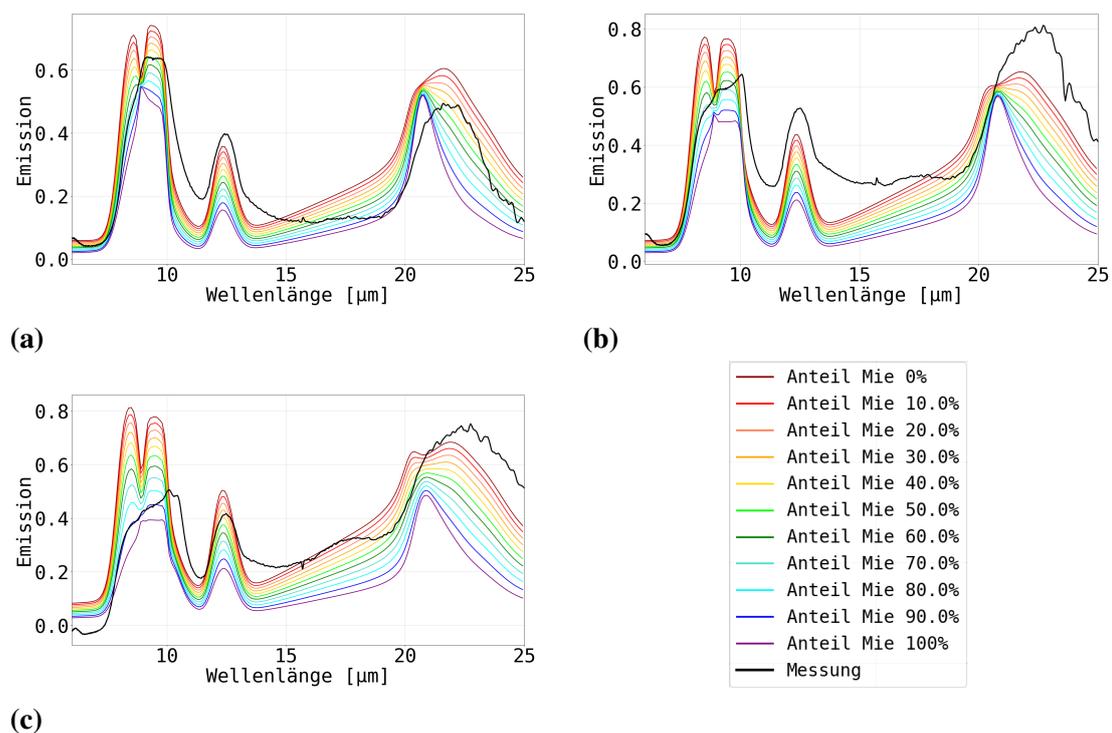


Abbildung 5.9: Vergleich der Emissionsmessung mit Mie-Rechnungen, welche mit Rechnungen der soliden SiO_2 -Schicht in verschiedenen Verhältnissen gemittelt werden. Die Unterabbildungen enthalten jeweils die Messung und die theoretisch berechneten Spektren für die verschiedenen Partikelgrößen (a) 3 μm , b) 4 μm , c) 5 μm Durchmesser).

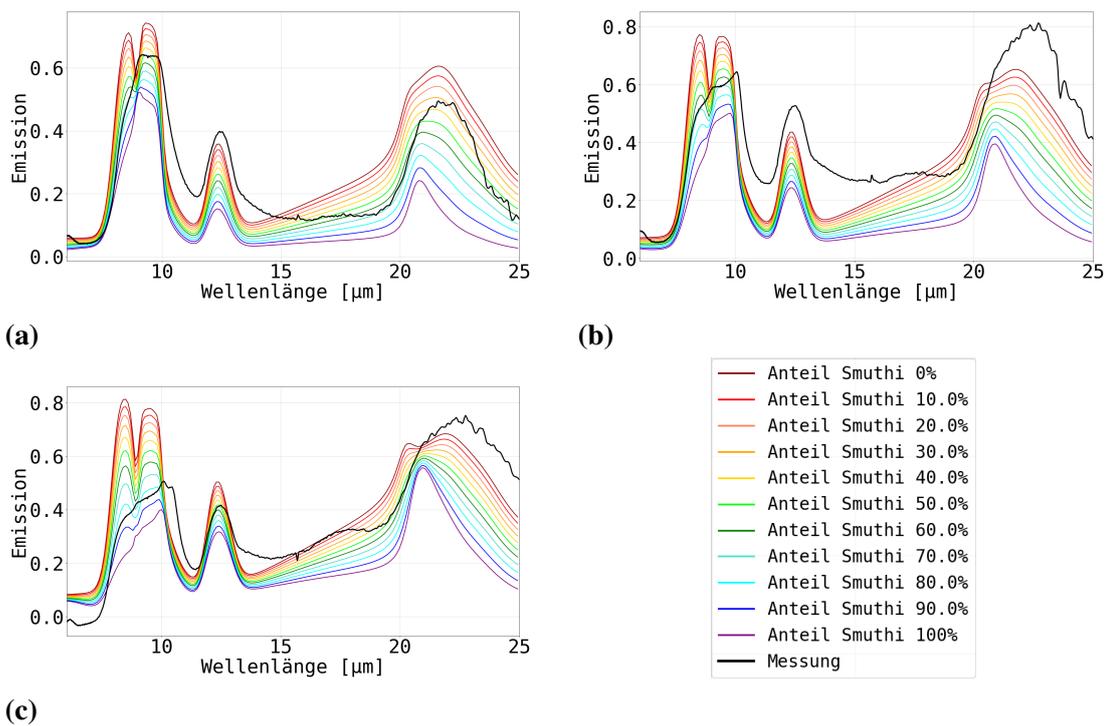


Abbildung 5.10: Vergleich der Emissionsmessung mit Smuthi-Rechnungen, welche mit Rechnungen der soliden SiO₂-Schicht in verschiedenen Verhältnissen gemittelt werden. Die Unterabbildungen enthalten jeweils die Messung und die theoretisch berechneten Spektren für die verschiedenen Partikelgrößen (a) 3 μm, b) 4 μm, c) 5 μm Durchmesser).

5.3.3 Gemessene vs. berechnete Transmissionspektren

Aus den selben Modellen (Mie, Smuthi und solide Schicht) wurden die theoretischen Transmissionspektren über Gleichung 2.6 berechnet. Der größte Unterschied zwischen der Berechnung der Transmission und der Emission ist, dass anstatt des Absorptionquerschnittes mit dem Extinktionsquerschnitt gerechnet wird, welcher den Absorptionquerschnitt beinhaltet und zusätzlich die Streuung berücksichtigt. Die Abbildungen 5.11 und 5.12 zeigen in Anlehnung an die Abbildungen des letzten Kapitels die berechneten Transmissionspektren mit "Mie und der soliden Schicht" und "Smuthi und der soliden Schicht". Die Darstellungen bestätigen, dass die 21/22 μm-Bande, wie bei der Emission mit der soliden Schicht, besser beschrieben werden, als mit der Mie- oder Smuthi-Berechnung. Bei der 9 μm-Bande sind Mie und Smuthi prinzipiell besser zur Beschreibung des Doppelpeaks geeignet. Bei der 9 μm-Bande scheint allerdings die Rechnung der soliden Schicht die Mie-Rechnung wunderbar zu ergänzen. Besonders bei den 5 μm-Kugeln passt die Rechnung der soliden Schicht sehr gut zum ersten Absorptionsmaxima bei ca. 8 μm (siehe Abbildung 5.11c). Bei Smuthi wird die solide

Schichtrechnung nicht unbedingt benötigt um die 8 μ m passender zu beschreiben. Bei Betrachtung der gemessenen Graphen in Abbildungen 5.12b und 5.12c scheint Smuthi rechnerische Probleme zwischen den Transmissionsminima der 9 μ m-Bande zu haben (Transmissionsminima sind bei den 4 μ m-Partikeln bei 9 μ m und 10 μ m und bei den 5 μ m-Partikeln sind sie bei 8 μ m und 10 μ m Wellenlänge). Smuthi verbindet diese Minima zu einem breiten Minimum, während die Mie-Rechnung die Trennung der Minima passender beschreibt. Die Mie-Rechnung liegt jedoch generell etwas zu hoch, um das Spektrum gut wiederzugeben. Das größte Problem bei Smuthi ist, dass es die Streuung intern zu hoch aufgelöst berechnet.

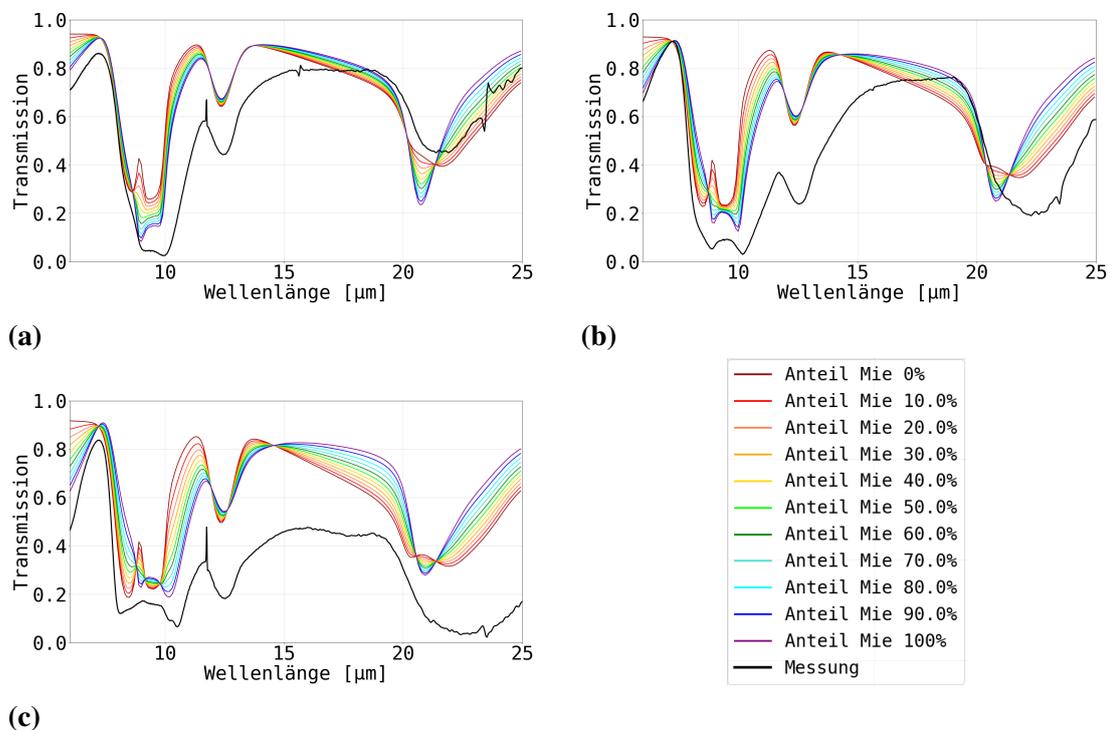


Abbildung 5.11: Vergleich der Transmissionsmessung mit Mie-Rechnungen, welche mit Rechnungen der soliden SiO₂-Schicht in verschiedenen Verhältnissen gemittelt werden. Die Unterabbildungen enthalten jeweils die Messung und die theoretisch berechneten Spektren für die verschiedenen Partikelgrößen (a) 3 μ m, b) 4 μ m, c) 5 μ m Durchmesser).

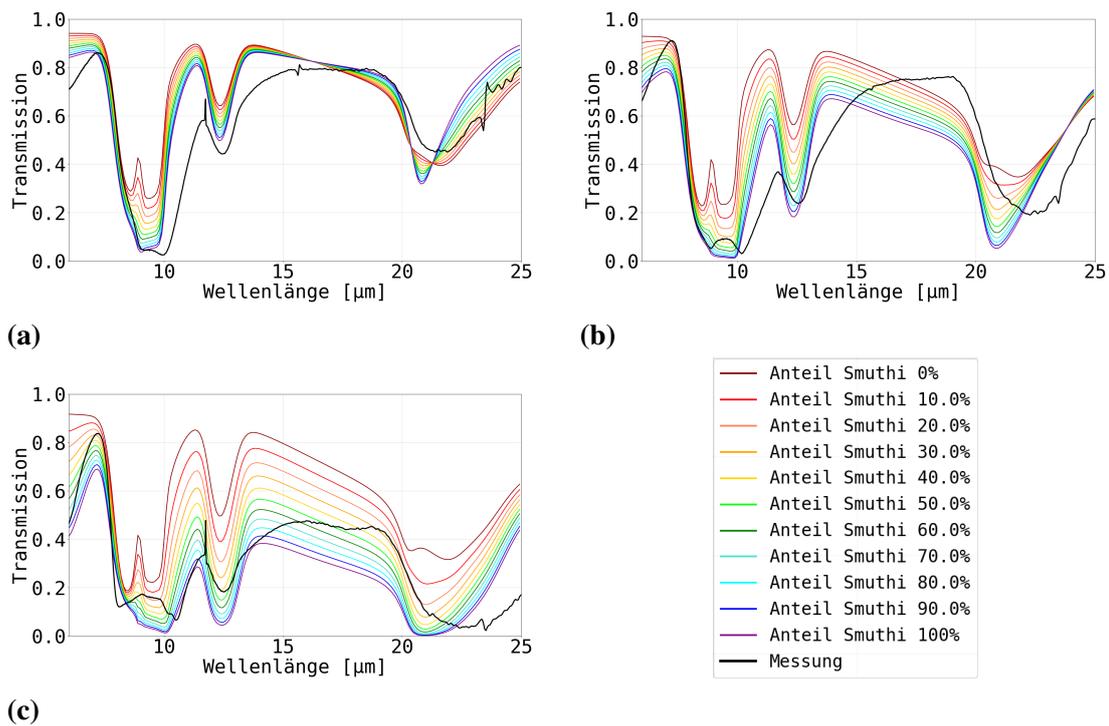


Abbildung 5.12: Vergleich der Transmissionsmessung mit Smuthi-Rechnungen, welche mit Rechnungen der soliden SiO₂-Schicht in verschiedenen Verhältnissen gemittelt werden. Die Unterabbildungen enthalten jeweils die Messung und die theoretisch berechneten Spektren für die verschiedenen Partikelgrößen (a) 3 μm, b) 4 μm, c) 5 μm Durchmesser).

Das Spektrometer verwendet einen fokussierten Strahlengang mit einem Öffnungswinkel von rund 12° (Öffnungswinkel = 2 × Winkel zwischen optischer Achse und maximalen Öffnung). Das führt dazu, dass das Spektrometer einen Großteil der Vorwärtsstreuung einfängt. Dieser Streuanteil kann deshalb nicht als verlorene Intensität angesehen werden. Smuthi sieht diese Vorwärtsstreuung als Verluste, weshalb der von Smuthi berechnete Streuquerschnitt reduziert werden musste. Aus zeitlichen Gründen wurde das in dieser Arbeit durch einen für alle Wellenlängen konstanten Faktor von 0,1 umgesetzt. In der Realität müsste für jede Wellenlänge der Faktor bestimmt werden. Im nächsten Absatz wird beschrieben, wie der wellenlängenabhängige Korrekturfaktor bestimmt werden kann, was jedoch aus zeitlichen Gründen nicht Gegenstand dieser Arbeit ist.

Smuthi kann die Streuung winkelabhängig graphisch darstellen (siehe Abbildung 5.13). Der Einfallswinkel auf die Probe beträgt 12°, deshalb befindet sich auch das Maximum der Vorwärtsstreuung auf einen Polarwinkel von 12°. Es wird in Abb. 5.13 links das Streuminimum vor der 9 μm-Bande ($\lambda < 8 \mu\text{m}$) und in Abb. 5.13 rechts das Streumaximum der 9 μm-Bande für die drei Partikelgrößen abgebildet.

Um den Korrekturfaktor der Streuung für jede Wellenlänge zu bestimmen, muss berechnet werden, welcher Prozentsatz der Streuung in Richtung des Detektors geht. Dazu muss bei jeder Wellenlänge zuerst die gesamte Streuung (Sreuung in alle Richtungen) berechnet werden. Dafür müsste die Abbildung ausgelesen werden und über alle Winkel des Halbraumes die Intensitäten integriert werden. Anschließend muss über alle Winkel integriert werden, die nicht in Richtung des Detektors gehen. Wird jetzt die Streuung ohne Vorwärtsstreuung durch die gesamte Streuung dividiert, so ergibt sich der wellenlängenabhängige Korrekturfaktor. Die graphische Auswertung würde für diese Arbeit zu viel Zeit benötigen. Eine andere Möglichkeit statt der graphischen Auswertung wäre in einer Weiterführung dieser Arbeit herauszufinden, wie Smuthi dazu gebracht werden kann, eine Art von Wertetabelle statt der Graphik ausgeben zu lassen. Dann könnte über die Werte dieser Tabelle integriert werden.

Es folgt ein Beispiel, wie diese Korrekturfaktor-Berechnung in stark vereinfachter Form aussehen kann. Smuthi gibt zu jedem Polarwinkel einen über alle Azimutwinkel gemittelten Wert aus. Mit dem Einfallswinkel von 12° bei unserem Aufbau sorgt eine Mittelung über alle Azimutwinkel zu einer Verfälschung. Wenn beispielsweise der Einfallswinkel senkrecht zur Oberfläche ist, dann können die über den Azimutwinkel gemittelten Werte verwendet werden. Diese vereinfachte Korrektur wurde für wenige ausgewählte Wellenlängen aller Partikelgrößen durchgeführt. Dazu muss jeder der gemittelten Werte $\tilde{I}(\theta)$ mit dem entsprechenden infinitesimalen Ringsegment $A_{Ring}(\theta)$ multipliziert und dann über alle Polarwinkel addiert werden

$$I_{ges} = \sum_{\theta} A_{Ring}(\theta) \cdot \tilde{I}(\theta). \quad (5.5)$$

Das selbe Verfahren findet für die Intensität der Streuung ohne Vorwärtsstreuung I_{ohne} statt, mit dem Unterschied, dass nicht über alle Winkel summiert werden muss

$$I_{ohne} = \sum_{\theta > 6^\circ} A_{Ring}(\theta) \cdot \tilde{I}(\theta). \quad (5.6)$$

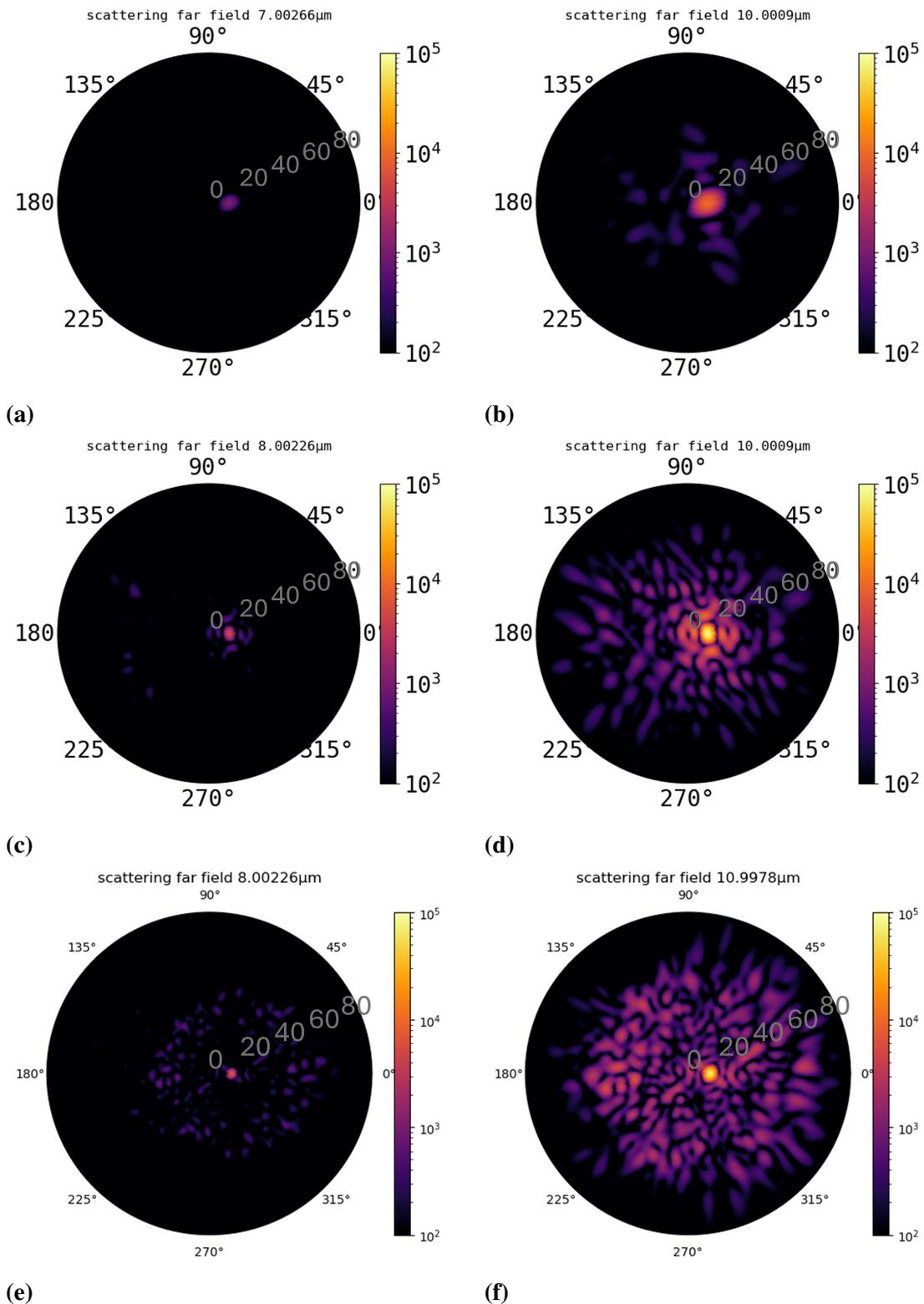


Abbildung 5.13: Die winkelaufgelöste Streuung für 12° Einfallswinkel berechnet mit Smuthi. Die Abbildung zeigt zwei Fälle. Zum einen zeigt es die Abbildungen mit der niedrigsten Streuung vor der $9\mu\text{m}$ -Bande in a), c), e) für die verschiedenen Kugelgrößen und zum anderen die jeweiligen berechneten Streumaxima in der Bande in b), d), f) für die angegebenen Kugelgrößen.

In der Abbildung 5.14 sind die vereinfachten Korrekturfaktoren für wenige Wellenlängen dargestellt. Es ist klar in den Graphen erkennbar, dass die Korrekturfaktoren größenabhängig von den Partikeln und auch wellenlängenabhängig sind. Der Korrekturfaktor ist bei den 3 μm -Kugeln am größten und steigt sichtlich mit der Wellenlänge an. Das bedeutet, dass wie erwartet die kleinen Kugeln besser streuen als die größeren und auch mit steigender Wellenlänge im Vergleich zur Partikelgröße. Bei der Partikelgröße von 4 μm und 5 μm liegt der Faktor zwischen 0,25 und 0,35, weshalb statt den 0,1 (Abb. 5.12) ein Faktor von 0,3 in Abbildung 5.15 verwendet wurde. Der Streuanteil ist mit diesem Faktor jedoch zu groß, weshalb sich die Transmission verringert. Die berechnete Transmission liegt somit niedriger als die Gemessene, wie in Abbildung 5.15 ersichtlich. Der Faktor würde wahrscheinlich fallen, wenn der Einfallswinkel von 12° berücksichtigt werden würde. Bei dem Einfallswinkel würde der Strahl auf mehr Partikel treffen, wodurch sich die Chance erhöht, dass der Strahl gestreut wird.

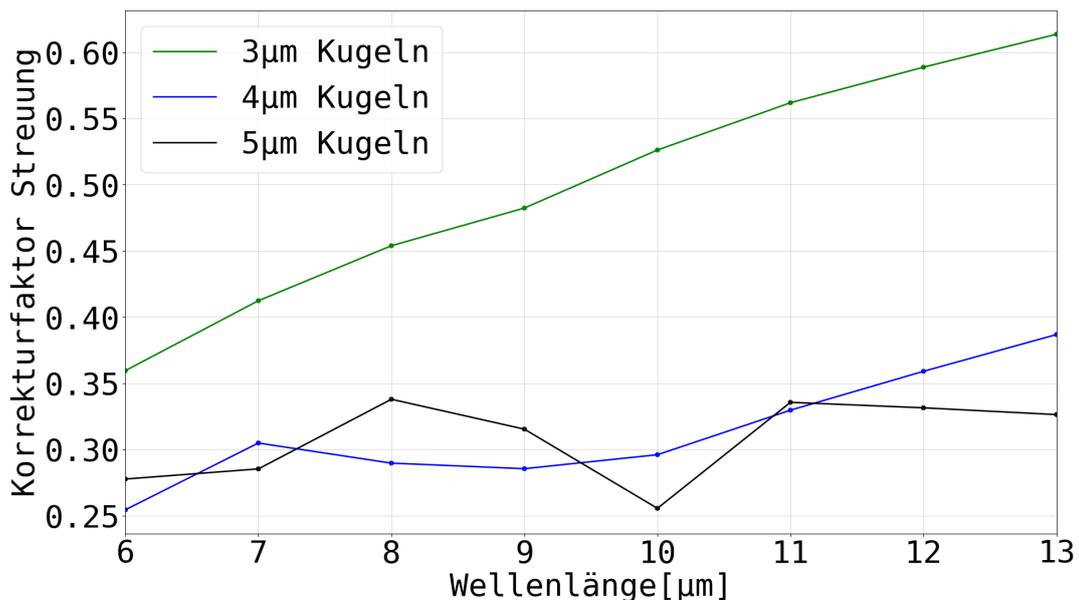


Abbildung 5.14: Vereinfachte Korrekturfaktoren ausgewählter Wellenlängen für die Vorwärtsstreuung von Smuthi.

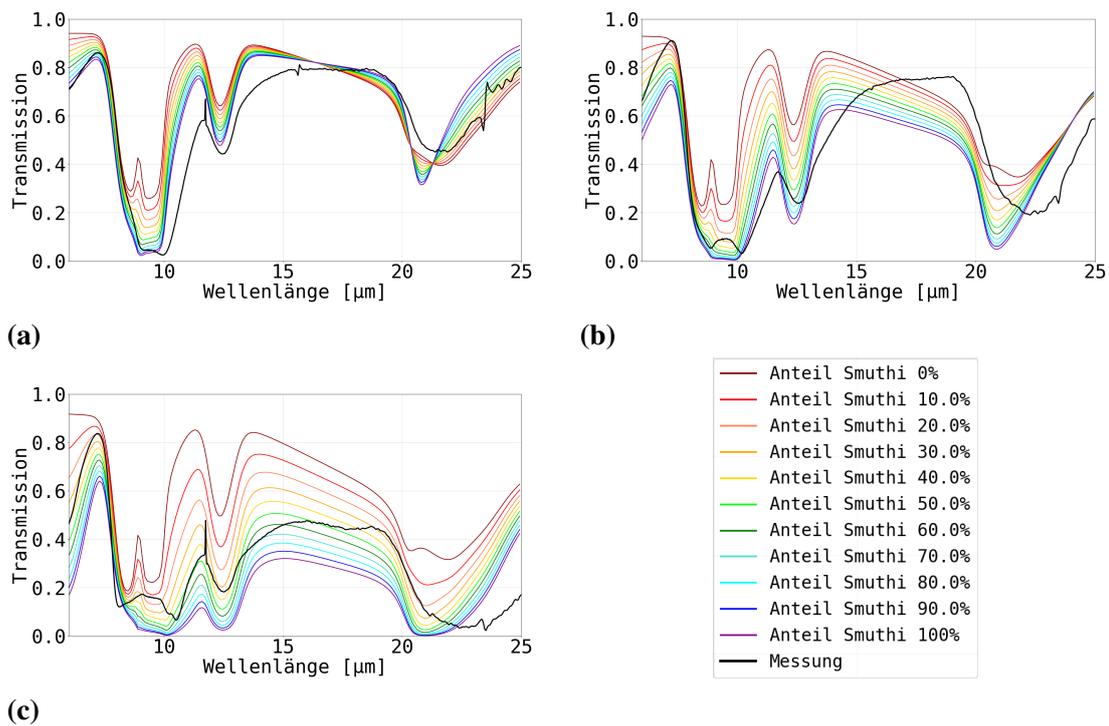


Abbildung 5.15: Vergleich der Transmissionsmessung mit Smuthi-Rechnungen, in welchen die Streuung mit einem Faktor von 0,3 statt 0,1 korrigiert wurden. Die Unterabbildungen enthalten jeweils die Messung und die theoretisch berechneten Spektren für die verschiedenen Partikelgrößen (a) 3 μm, b) 4 μm, c) 5 μm Durchmesser).

5.3.4 Streueffizienz

Wenn die Emission nach Formel 2.10 in ein Transmissionsspektrum umgerechnet und anschließend wie bei Transmissionsspektren der negative natürliche Logarithmus darauf angewendet wird, dann ergibt sich die Absorptionseffizienz. Wird der negative natürliche Logarithmus auch auf das gemessene Transmissionsspektrum angewendet, dann kommt dabei die Extinktionseffizienz heraus. Die Absorptionseffizienz kann von der Extinktionseffizienz abgezogen werden und die Streueffizienz bleibt zurück. Diese Streueffizienz kann mit den theoretisch berechneten Werten (von Mie und Smuthi) verglichen werden. Die Streueffizienz Q_{sca} wird von dem verwendeten Mie-Programm direkt ausgegeben. Die Streueffizienz von Smuthi muss aus dem ausgegebenen Streuquerschnitt berechnet werden, indem durch den geometrischen Querschnitt (Querschnitt einer Kugel mal Anzahl der Kugeln) dividiert wird.

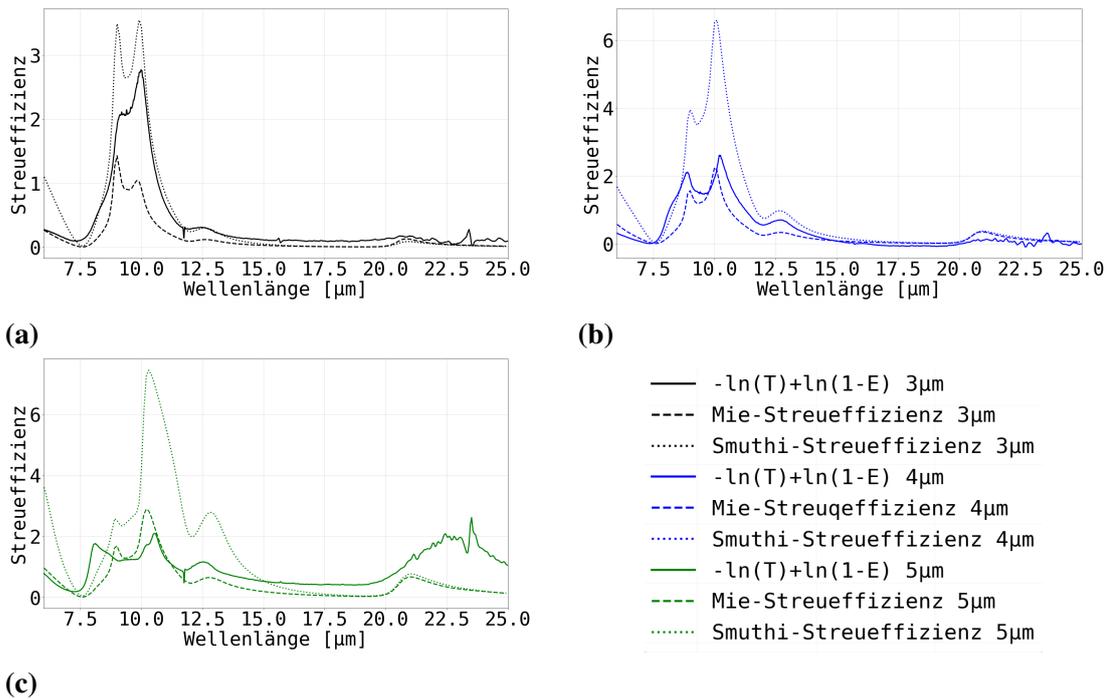


Abbildung 5.16: Die Streueffizienzen, die aus den gemessenen 700K-Spektren berechnet wurden im Vergleich zu den Theoriewerten von Mie und Smuthi (Raumtemperatur). Die verschiedenen Farben beziehen sich auf die drei Partikelgrößen.

Die Bandenform von Mie und Smuthi passen in etwa zu der Form der Bandenform der Messung, aber es gibt auch auffallende Unterschiede. Bei der 3µm-Partikelgröße sagen Smuthi und Mie bei 8,9µm ein starkes Maximum voraus, welches in der Messung nur sehr schwach auftritt. Die Smuthi-Streueffizienzen liegen über den Gemessenen. Wie in Kapitel 5.3.2 beschrieben, kann das wieder auf die eingefangene Vorwärtsstreuung der Partikel zurückgeführt werden. Vor allem bei den 5µm-Partikeln fällt auf, dass die kurzwellige Flanke und das daran geknüpfte Maximum nicht vollständig mit Mie und Smuthi erklärt werden kann. In der Abbildung 5.16 ist gut zu erkennen, dass die Streuung der 21/22µm-Banden gegen sehr kleine Werte geht, was bedeutet, dass diese Bande in den Transmissionsspektren hauptsächlich von Absorption abhängt.

5.4 Vergleich mit anderen Messungen dieser Teilchen

Unsere Kooperationspartnerin Frau Dr. Akemi Tamanoi hat ihre noch unveröffentlichten Messungen [8] an den Hipresica-Partikeln für diese Diskussion zur Verfügung gestellt. Die Messungen fanden an einzelnen Partikeln mit einer IR-Mikroskop-Anordnung in Transmission am SPring-8 (Synchrotron in Japan) sowie mit sogenannten mIRage-Messungen ebenfalls in Japan statt. MIRage-Messungen verwenden einen photothermischen Effekt. Die Probe wird mit einem in der Wellenlänge einstellbaren und gepulsten MIR-Laser bestrahlt. Diese Bestrahlung löst eine photothermische Reaktion der Oberfläche der Probe aus. Die Reaktion der Oberfläche wird mit einem Laser im sichtbaren Wellenlängenbereich untersucht [31]. In den folgenden Abbildungen werden die Emissions- und Transmissionsmessungen dieser Arbeit mit den Spektren von Akemi Tamanei et al. und mit den Rechnungen von Mie und Smuthi (mit den optischen Konstanten dieser Arbeit) verglichen.

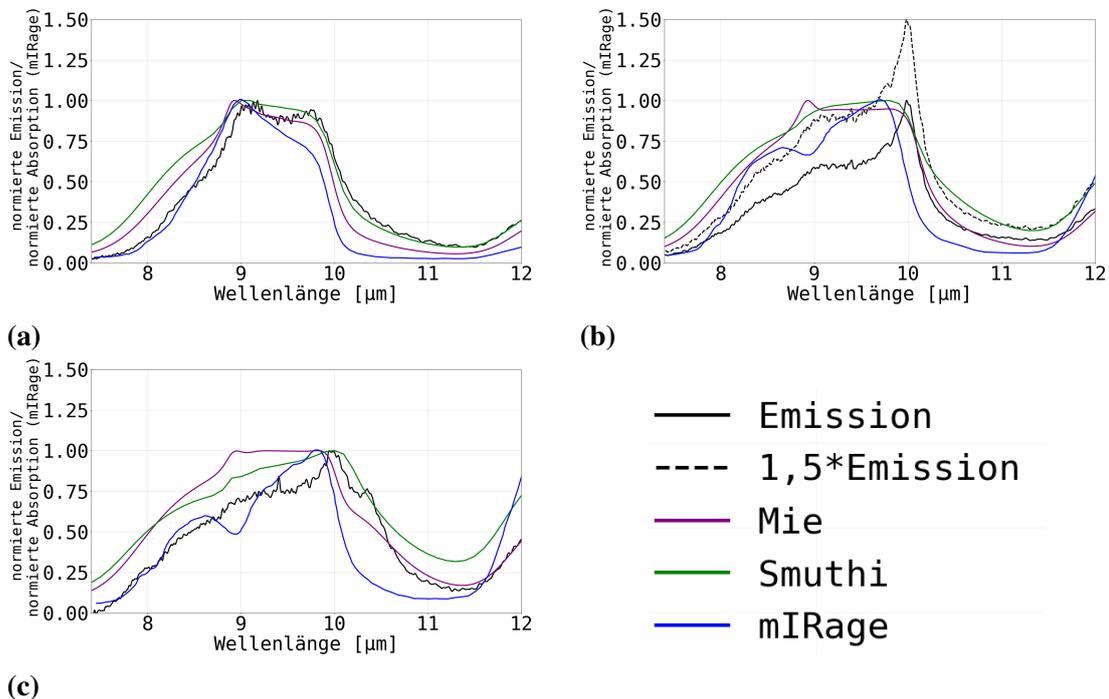


Abbildung 5.17: Vergleich der Emissionsspektren mit Messungen mittels mIRage. Die Messungen und Rechnungen in dieser Abbildung werden normiert auf ihr jeweiliges Maximum dargestellt. Die Unterabbildungen zeigen die Spektren der einzelnen Größenordnung der Partikel (a) 3µm, b) 4µm und c) 5µm).

Die mIRage-Spektren lassen sich von ihrer Bandenform her mit den Emissionsmessungen vergleichen. Daher ist davon auszugehen, dass die theoretische Beschreibung des Messprinzips von mIRage-Messungen eher auf der Absorption beruht. In Abbildung 5.17 sind die mIRage-Messungen zusammen mit den in dieser Arbeit gemessenen und mit den aus Mie und Smuthi berechneten Emissionsspektren abgebildet. Da die mIRage-Messungen von Tamanai et al. auf ihre Maxima der 9 μ m-Bande normiert sind, wurden auch die gemessenen und berechneten Emissionsspektren auf ihr Maximum der 9 μ m-Bande normiert. Die Spektren verhalten sich nach der Normierung auf ihr Maximum recht ähnlich. Die gemessene Emission der 4 μ m-Kugeln weist eine Besonderheit auf. Ein sehr stark ausgeprägtes Maximum bei 10 μ m Wellenlänge ist aufgrund unbekannter Ursachen nicht genauer erklärbar. Da das Spektrum auf dieses erhöhte Maximum normiert ist, führt die Multiplikation mit einem Faktor von 1,5 zu einer besseren Vergleichbarkeit des gesamten Spektrums (siehe schwarz gestrichelter Graph in Abbildung 5.17b). Dieses Maximum und das Nebenmaximum der 5 μ m-Kugeln bei 10,3 μ m sind in den mIRage-Spektren nicht vorhanden. Ein weiterer interessanter Unterschied ist, dass in den mIRage-Messungen bei den 4 μ m- und 5 μ m-Kugeln bei 9 μ m Wellenlänge sich ein Minimum befindet, während alle Messungen und Rechnungen dieser Arbeit eher ein Maximum aufweisen.

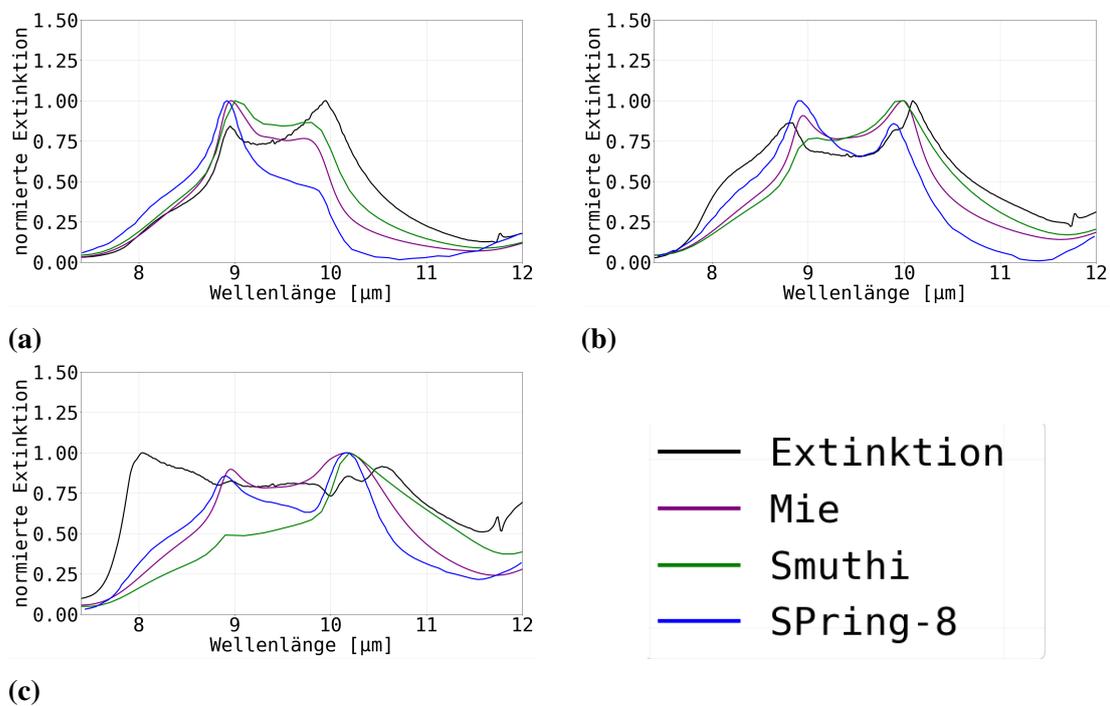


Abbildung 5.18: Vergleich der Transmissionsmessungen mit Messungen am SPring-8.

Die Transmissionsmessungen am SPring-8 werden in Abbildung 5.18 in Form von Extinktionsspektren mit den in dieser Arbeit gemessenen Transmissionsmessungen und den von Mie und Smuthi berechneten Extinktionseffizienzen verglichen. Die Transmissionsmessung wird wieder über den negativen Logarithmus in ein Extinktionsspektrum umgerechnet, was der Extinktionseffizienz entspricht. Wie die mIRage-Messungen sind die Extinktionsspektren von Tamanai et al. auf das Maximum der Bande normiert, weshalb auch die Ergebnisse dieser Arbeit auf ihr Maximum der Bande normiert werden. Die im wesentlichen gut passenden Spektren weisen zwei Anomalien auf. Eine dieser Ausnahmen ist in Abbildung 5.18a zu sehen. Die Messung der 3 μm -Partikel am SPring-8 weist kein zweites starkes Maximum bei 10 μm Wellenlänge auf. Das könnte wie beim AIU-Spektrometer an eingefangener Vorwärtsstreuung durch einen noch stärker fokussierten Strahlengang im IR-Mikroskop liegen. Die andere Ausnahme ist in Abb. 5.18c erkennbar, bei dem gemessenen Transmissionsspektrum der 5 μm -Hipresica-Kugeln. Bei diesem Spektrum gibt es eine sehr deutliche kurzwellige Schulter mit einem Maximum bei 8 μm . Bei den 4 μm -Partikeln gibt es nur leichte Anzeichen einer kurzwelligen Schulter in 5.18b. Diese kurzwellige Schulter lässt sich in den theoretischen Modellen (Mie und Smuthi) und der Einzelteilchen-Messung am SPring-8 nicht nachweisen. In Kapitel 5.3.3 wurde bei den Mie-Rechnungen mit der soliden Schicht gezeigt, dass sich diese Schulter mit der soliden Schicht erklärbar ist. Diese Schulter ist also als ein Agglomerations-/Formeffekt der zweidimensionalen Schicht an SiO₂-Partikeln zu verstehen und tritt somit nicht in den Einzelteilchenmessungen auf.

6 Zusammenfassung

Eines der anfänglichen Ziele dieser Arbeit war es zu bestimmen, welche Korrekturen an den gemessenen Emissions- und Transmissionsspektren bei erhöhten Temperaturen angewendet werden müssen. Bei den Korrekturen der Emissionsspektren handelt es sich dabei überwiegend um die von Jennifer Gerbeth erstmals gefundenen temperaturabhängigen Gerätefunktionen des Spektrometers. In dieser Arbeit wurde diskutiert wie diese auf das gemessene Emissionsspektrum der Partikel angewendet werden müssen. Bei den Transmissionsmessungen werden auch etliche Korrekturen durchgeführt, da jedes Spektrum aus sechs Einzelmessungen besteht.

Außerdem sollten die gemessenen Spektren durch Berechnungen theoretisch beschrieben werden. Dazu wurden zuerst aus KBr-Transmissionsmessungen über einen Fit die optischen Konstanten bestimmt. Aus diesen optischen Konstanten wurde über Mie-Theorie und die Smuthi-Pythonbibliothek die Extinktions- und die Streueffizienzen berechnet. Aus diesen Effizienzen ließen sich dann Vergleichsspektren für die Emissions- und Transmissionsspektren bestimmt. Im betrachteten Wellenlängenbereich von $6,5 \mu\text{m}$ bis $25 \mu\text{m}$ hat sich ergeben, dass die Mie- und die Smuthi-Rechnungen von den drei Banden im Bereich die $9\mu\text{m}$ -Bande und die $12,5\mu\text{m}$ -Bande relativ gut beschreiben. Von den beiden Modellen liegt das Vergleichsspektrum von Smuthi näher an dem Gemessenen, als das von der Mie-Rechnung. Für die $21/22\mu\text{m}$ -Bande (vorallem die langwellige Flanke) wird eine zugerings Emission und Absorption von beiden Modellen berechnet. Durch die Einführung eines Modells einer soliden SiO_2 -Schicht lässt sich die $21/22\mu\text{m}$ -Bande besser beschreiben. Die solide Schicht ist jedoch nicht geeignet um die $9\mu\text{m}$ -Bande zu modellieren, weshalb Mischungen der Modelle dargestellt wurden. Auch durch Mischung der Modelle lässt sich das gemessene Spektrum bei 700K nicht vollständig beschreiben. Ein Teil der Diskrepanz lässt sich durch die Temperaturabhängigkeit der Spektren erklären. Um die Temperaturabhängigkeit der optischen Konstanten zu bestimmen, wird jedoch zuerst ein wirklich gut passender Fit an das Spektrum benötigt. Die momentane Berechnung durch eine Mischung von Mie und Smuthi mit dem Modell einer soliden Schicht ist für so einen Fit noch unzureichend. Bei der $9\mu\text{m}$ -Bande fällt bei der Smuthi-Rechnung auf, dass die von Smuthi berechnete Streuung zu stark ist. Diese im Vergleich zur Messung zu starke Streuung entsteht durch den fokussierten Spektrometerstrahlengang, der einen Großteil der Intensität der Vorwärtsstreuung einfängt, welche nicht als verlorene Intensität betrachtet werden kann.

Es wird anhand eines vereinfachten Beispiels aufgeführt, wie die Streuung korrigiert werden kann, was in ausführlicher Form für diese Arbeit zu viel Zeit in Anspruch nehmen würde. Hier können fortführende Rechnungen in späteren Arbeiten angesetzt werden.

Abschließend werden die Einzelteilchenspektren der Kooperationspartner (Tamanai et al.) mit den Emissions- und Transmissionsspektren dieser Arbeit und den Mie- und Smuthi-Rechnungen verglichen. Bei dem Vergleich der Spektren sind Agglomerations-effekte mit zunehmender Kugelgröße aufgefallen. In den Transmissionsspektren von Tamanai et al., gemessen mittels eines IR-Mikroskopes am SPring-8, sind ebenfalls Effekte eines fokussierten Strahlengangs nachweisbar. Die reduzierten Streuverluste (durch den fokussierten Strahlengang/großer Öffnungswinkel) scheint besonders das Bandenmaximum der kleineren ($3\mu\text{m}$) Kugeln bei $10\mu\text{m}$ Wellenlänge zu beeinflussen.

Abbildungsverzeichnis

2.1	Strahlengang der Reflexion-/Transmission einer soliden Schicht SiO_2 auf einem Platinsubstrat, welches als Spiegel fungiert.	8
2.2	Realteil ϵ' und Imaginärteil ϵ'' der dielektrischen Funktion eines Lorentz-Oszilators [20].	12
2.3	Realteil und Imaginärteil der dielektrischen Funktion eines Brendel-Bormann-Oszilators. [22]	13
2.4	Das Bild zeigt den Aufbau des FTIR-Spektrometers. Eine detailliertere Beschreibung der einzelnen farblich gekennzeichneten Bereiche ist im Text zu finden.	14
2.5	Das Interferometer, die Filter- und Strahlteilermontierung sowie der Strahlengang (rot) sind in dieser Abbildung zu erkennen.	15
2.6	Der Aufbau des Emissionseinsatzes (Sicht von oben) und der Strahlengang (rot), beginnend bei der Probe (blau) kommen, sind in dieser Abbildung dargestellt. Der Strahl verlässt die Abbildung nach unten in das Interferometer und geht danach wieder am Halbspiegel vorbei zum Detektor.	17
2.7	Der Aufbau des Reflexionseinsatzes (Seitenansicht) und der Strahlengang (rot), wie er auf die Probe (blau) trifft, sind in dieser Abbildung dargestellt.	18
3.1	Die Abbildung zeigt die optischen Konstanten (n , k) für SiO_2 aus den verschiedenen Datensätzen. Die Datensätze stammen von Akemi Tamanai et al. [26], Steffen Wetzel [27], Edward D. Palik [7] und aus der AIU-Datenbank [25].	20
3.2	Die Abbildung zeigt die Presse für die Presslingsherstellung.	22
4.1	Mikroskopaufnahme der $3\mu\text{m}$ -Hipresica-Kugeln auf dem Platinsubstrat.	23
4.2	Mikroskopaufnahme der $4\mu\text{m}$ -Hipresica-Kugeln auf dem Platinsubstrat.	24
4.3	Mikroskopaufnahme der $5\mu\text{m}$ -Hipresica-Kugeln auf dem Platinsubstrat.	24

4.4	In Grafik a) sind die unkorrigierten Probenmessungen für 500K und 900K jeweils mit und ohne die Lichtquellen abgebildet. In b) und c) sind die dazu gehörigen Interferogramme, welche für die Korrektur voneinander abgezogen werden müssen, aufgeführt. In d) sind die Interferogramm-korrigierten Proben-Messungen dargestellt.	26
4.5	Die Darstellung zeigt in a) die interferogramm-korrigierten Referenzmessungen und in b) die interferogramm-korrigierten Leer-Messungen.	27
4.6	Die Abbildung zeigt die korrigierten temperaturabhängigen Transmissionmessungen im Reflektionsaufbau für die drei Partikelgrößen (a) 3 μm , b) 4 μm und c) 5 μm Durchmesser).	28
4.7	Die Transmissionsspektren der KBr-Presslinge mit Hipresica-Teilchen für die drei unterschiedlichen Größen.	28
4.8	Die Abbildung zeigt die Emissionsspektren vor einer messgerätspezifischen Korrektur. Die Figuren a), b) und c) zeigen die drei Partikelgrößen (3, 4 und 5 μm Durchmesser).	29
5.1	Die Abbildung zeigt die korrigierten Emissionsspektren der drei Partikelgrößen. Die Farben der Graphen repräsentieren die selben Temperaturen wie in Abb. 4.8. Die linke Spalte (a, c, e) verwendet die temperaturabhängigen Korrekturfaktoren. Die rechte Spalte (b, d, f) verwendet für alle Temperaturen den 900K-Korrekturfaktor. Die drei Partikelgrößen sind jeweils untereinander abgebildet und die verschiedenen Farben der Graphen stehen für die einzelnen Temperaturen von 400K (blau) bis 900K (rot).	31
5.2	Die Abbildung zeigt die Emissionsspektren und die zur Emission umgerechneten Transmissionsspektren bei 700K.	33
5.3	Die angefitteten Spektren der KBr-Presslinge.	34
5.4	Die aus dem Fit resultierenden optischen Konstanten.	37
5.5	Die Abbildung zeigt die n und k Werte der verschiedenen Datensätze im Vergleich zu den neuen optischen Konstanten (n,k). Die Datensätze stammen von Akemi Tamanei et al. [26], Steffen Wetzel [27], Edward D. Palik [7] und aus der AIU-Datenbank [25].	38
5.6	Partikel-Findung mittels OpenCV-Pythonlibrary auf der Mikroskopaufnahme der 3 μm -Hipresica-Kugeln auf dem Platinsubstrat. Die grünen Kreise entsprechen den gefundenen Hipresica-Kugeln.	40

5.7	Partikel-Findung mittels OpenCV-Pythonlibrary auf der Mikroskopaufnahme der 4µm-Hipresica-Kugeln auf dem Platinsubstrat. Die grünen Kreise entsprechen den gefundenen Hipresica-Kugeln.	40
5.8	Partikel-Findung mittels OpenCV-Pythonlibrary auf der Mikroskopaufnahme der 5µm-Hipresica-Kugeln auf dem Platinsubstrat. Die grünen Kreise entsprechen den gefundenen Hipresica-Kugeln.	41
5.9	Vergleich der Emissionsmessung mit Mie-Rechnungen, welche mit Rechnungen der soliden SiO ₂ -Schicht in verschiedenen Verhältnissen gemittelt werden. Die Unterabbildungen enthalten jeweils die Messung und die theoretisch berechneten Spektren für die verschiedenen Partikelgrößen (a) 3µm, b) 4µm, c) 5µm Durchmesser).	43
5.10	Vergleich der Emissionsmessung mit Smuthi-Rechnungen, welche mit Rechnungen der soliden SiO ₂ -Schicht in verschiedenen Verhältnissen gemittelt werden. Die Unterabbildungen enthalten jeweils die Messung und die theoretisch berechneten Spektren für die verschiedenen Partikelgrößen (a) 3µm, b) 4µm, c) 5µm Durchmesser).	44
5.11	Vergleich der Transmissionsmessung mit Mie-Rechnungen, welche mit Rechnungen der soliden SiO ₂ -Schicht in verschiedenen Verhältnissen gemittelt werden. Die Unterabbildungen enthalten jeweils die Messung und die theoretisch berechneten Spektren für die verschiedenen Partikelgrößen (a) 3µm, b) 4µm, c) 5µm Durchmesser).	45
5.12	Vergleich der Transmissionsmessung mit Smuthi-Rechnungen, welche mit Rechnungen der soliden SiO ₂ -Schicht in verschiedenen Verhältnissen gemittelt werden. Die Unterabbildungen enthalten jeweils die Messung und die theoretisch berechneten Spektren für die verschiedenen Partikelgrößen (a) 3µm, b) 4µm, c) 5µm Durchmesser).	46
5.13	Die winkelaufgelöste Streuung für 12° Einfallswinkel berechnet mit Smuthi. Die Abbildung zeigt zwei Fälle. Zum einen zeigt es die Abbildungen mit der niedrigsten Streuung vor der 9µm-Bande in a), c), e) für die verschiedenen Kugelgrößen und zum anderen die jeweiligen berechneten Streumaxima in der Bande in b), d), f) für die angegebenen Kugelgrößen.	48
5.14	Vereinfachte Korrekturfaktoren ausgewählter Wellenlängen für die Vorwärtsstreuung von Smuthi.	49

5.15	Vergleich der Transmissionsmessung mit Smuthi-Rechnungen, in welchen die Streuung mit einem Faktor von 0,3 statt 0,1 korrigiert wurden. Die Unterabbildungen enthalten jeweils die Messung und die theoretisch berechneten Spektren für die verschiedenen Partikelgrößen (a) 3 μ m, b) 4 μ m, c) 5 μ m Durchmesser).	50
5.16	Die Streueffizienzen, die aus den gemessenen 700K-Spektren berechnet wurden im Vergleich zu den Theoriewerten von Mie und Smuthi (Raumtemperatur). Die verschiedenen Farben beziehen sich auf die drei Partikelgrößen.	51
5.17	Vergleich der Emissionsspektren mit Messungen mittels mIRage. Die Messungen und Rechnungen in dieser Abbildung werden normiert auf ihr jeweiliges Maximum dargestellt. Die Unterabbildungen zeigen die Spektren der einzelnen Größenordnung der Partikel (a) 3 μ m, b) 4 μ m und c) 5 μ m).	52
5.18	Vergleich der Transmissionsmessungen mit Messungen am SPring-8. .	53

Tabellenverzeichnis

5.1	Tabelle der resultierenden Fitparameter (Werte ohne Fehler sind fixiert).	35
-----	---	----

Literaturverzeichnis

- [1] A. Bonsor, Jean-Charles Augereau, Olivier Absil, Sean Raymond, Steve Ertel, and P. Thébault. Latest results from the exozodi project. *European Planetary Science Congress, London, UK*, page 198, 09 2013.
- [2] Florian Kirchschrager, Sebastian Wolf, Alexander V. Krivov, Harald Mutschke, and Robert Brunngräber. Constraints on the structure of hot exozodiacal dust belts. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 467(2):1614–1626, 01 2017. ISSN 0035-8711. doi: 10.1093/mnras/stx202. URL <https://doi.org/10.1093/mnras/stx202>.
- [3] Wikipedia. Debris disk — Wikipedia, the free encyclopedia. https://en.wikipedia.org/wiki/Debris_disk.
- [4] Harald Krüger and Eberhard Grün. Chapter 29 - dust in the solar system. In Tilman Spohn, Doris Breuer, and Torrence V. Johnson, editors, *Encyclopedia of the Solar System (Third Edition)*, page 657–682. Elsevier, Boston, third edition edition, 2014. ISBN 978-0-12-415845-0. doi: 10.1016/B978-0-12-415845-0.00029-3.
- [5] Florian Kirchschrager, Steve Ertel, Sebastian Wolf, Alexis Matter, and Alexander V Krivov. First I band detection of hot exozodiacal dust with vlti/matisse. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society: Letters*, 499(1):L47–L52, September 2020. ISSN 1745-3933. doi: 10.1093/mnrasl/slaa156.
- [6] Laboratory Astrophysics Group of the AIU Jena. Database of optical constants for cosmic dust, 2016. URL <https://www2.astro.uni-jena.de/Laboratory/OCDB/>.
- [7] EDWARD D. PALIK. In EDWARD D. PALIK, editor, *Handbook of Optical Constants of Solids*, volume 1. Academic Press, Boston, 1985. ISBN 978-0-08-054721-3. doi: 10.1016/B978-0-08-054721-3.50005-8.
- [8] A. Tamanai et al. 2026, in preparation.
- [9] M. Bass et al. *Handbook of Optics: Fundamentals, techniques, and design*, 2. Ed. Handbook of Optics. McGraw-Hill, 1995. ISBN 9780070477407.

- [10] Bruce Hapke. *Theory of Reflectance and Emittance Spectroscopy*. Cambridge University Press, 2. Ed., 2012.
- [11] R. Goody and H. Hu. Radiative transfer | absorption and thermal emission. In James R. Holton, editor, *Encyclopedia of Atmospheric Sciences*, page 1863–1871. Academic Press, Oxford, 2003. ISBN 978-0-12-227090-1. doi: 10.1016/B0-12-227090-8/00337-7.
- [12] M. A. Ordal, Robert J. Bell, R. W. Alexander, L. L. Long, and M. R. Querry. Optical properties of fourteen metals in the infrared and far infrared: Al, co, cu, au, fe, pb, mo, ni, pd, pt, ag, ti, v, and w. *Appl. Opt.*, 24(24):4493–4499, Dec 1985. doi: 10.1364/AO.24.004493. URL <https://opg.optica.org/ao/abstract.cfm?URI=ao-24-24-4493>.
- [13] Gustav Mie. Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen. *Annalen der Physik*, 330(3):377–445, 1908. ISSN 1521-3889. doi: 10.1002/andp.19083300302. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/andp.19083300302>.
_eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/andp.19083300302>.
- [14] David W. Hahn. Light scattering theory. *Department of Mechanical and Aerospace Engineering, University of Florida*, 18, July 2009.
- [15] Amos Egel, Krzysztof M. Czajkowski, Dominik Theobald, Konstantin Ladutenko, Alexey S. Kuznetsov, and Lorenzo Pattelli. Smuthi: A python package for the simulation of light scattering by multiple particles near or between planar interfaces. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 273:107846, 2021. ISSN 0022-4073. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2021.107846>.
- [16] URL https://smuthi.readthedocs.io/en/latest/_source/01%20about/about_smuthi.html.
- [17] P.C. Waterman. Matrix formulation of electromagnetic scattering. *Proceedings of the IEEE*, 53(8):805–812, 1965. doi: 10.1109/PROC.1965.4058.
- [18] C. Altman and K. Suchy. *Reciprocity, Spatial Mapping and Time Reversal in Electromagnetics*. Developments in Electromagnetic Theory and Applications. Springer Netherlands, 1991. ISBN 9780792313397. URL <https://books.google.de/books?id=bQmQil-dMBUC>.

- [19] H.A. Lorentz. The theory of electrons and its applications to the phenomena of light and radiant heat. 1916.
- [20] Lorentz-Oszillator. *Wikipedia*. URL <https://de.wikipedia.org/wiki/Lorentz-Oszillator>.
- [21] Aleksandar D. Rakić, Aleksandra B. Djurišić, Jovan M. Elazar, and Marian L. Majewski. Optical properties of metallic films for vertical-cavity optoelectronic devices. *Appl. Opt.*, 37(22):5271–5283, Aug 1998. doi: 10.1364/AO.37.005271. URL <https://opg.optica.org/ao/abstract.cfm?URI=ao-37-22-5271>.
- [22] Brendel-Bormann-Oszillator. *Wikipedia*. URL https://en.wikipedia.org/wiki/Brendel-Bormann_oscillator_model.
- [23] *Front Matter*, page i–xxi. John Wiley & Sons, Ltd, 2011. ISBN 9780470976913. doi: 10.1002/9780470976913.fmatter. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/9780470976913.fmatter>.
- [24] Specac. URL <https://specac.com/product/ftir-spectrometer-accessories/high-temperature-high-pressure-hthp-cell/>.
- [25] T. Henning and H. Mutschke. Low-temperature infrared properties of cosmic dust analogues. *A&A*, 327:743–754, November 1997.
- [26] Tamanai, Akemi, Vogt, Jochen, Huck, Christian, Mick, Uwe, Zimmermann, Sören, Tazaki, Ryo, Mutschke, Harald, and Pucci, Annemarie. Experimental verification of agglomeration effects in infrared spectra on micron-sized particles. *A&A*, 619: A110, 2018. doi: 10.1051/0004-6361/201833119.
- [27] S. Wetzel. *Infrarotspektroskopische Untersuchung von Siliziumoxiden, Silikaten, deren Wechselwirkung mit Metallinselfilmen sowie Dampfdruckmessungen an Siliziummonoxid*. PhD thesis, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2012.
- [28] UEXC. URL <https://ube-exsymo.co.jp/en/products/hipresica.html>.
- [29] Jennifer Gerbeth. Bachelorarbeit - Experimenteller Vergleich der IR-Reflektivität und Emissivität verschiedener ein- und polykristalliner Oberflächen bei Temperaturen bis 900K, 2025.
- [30] URL <https://opencv.org/>.
- [31] URL <https://www.photothermal.com/products/mirage/>.

Danksagung

Zuerst gebührt mein Dank Herrn Dr. Harald Mutschke, der meine Masterarbeit betreut und begutachtet hat, nachdem er auch schon meine Bachelorarbeit betreute. Mein Dank gilt auch Herrn Professor Dr. Alexander Krivov, der so freundlich war, als Erstgutachter einzuspringen und sich die Zeit genommen hat, diese Arbeit zu lesen und zu begutachten. Auch bei Frau Dr. Akemi Tamanai möchte ich mich für ihre Kooperation und das Bereitstellen der gemessenen Proben bedanken.

Ich danke dem Astrophysikalischen Institut für das Ermöglichen eines konstruktiven Arbeitsumfeldes. Auch Herrn Jürgen Weiprecht möchte ich danken für seine Hilfe bei rechentechnischen Problemen und Konflikten verschiedener Python-Bibliotheken.

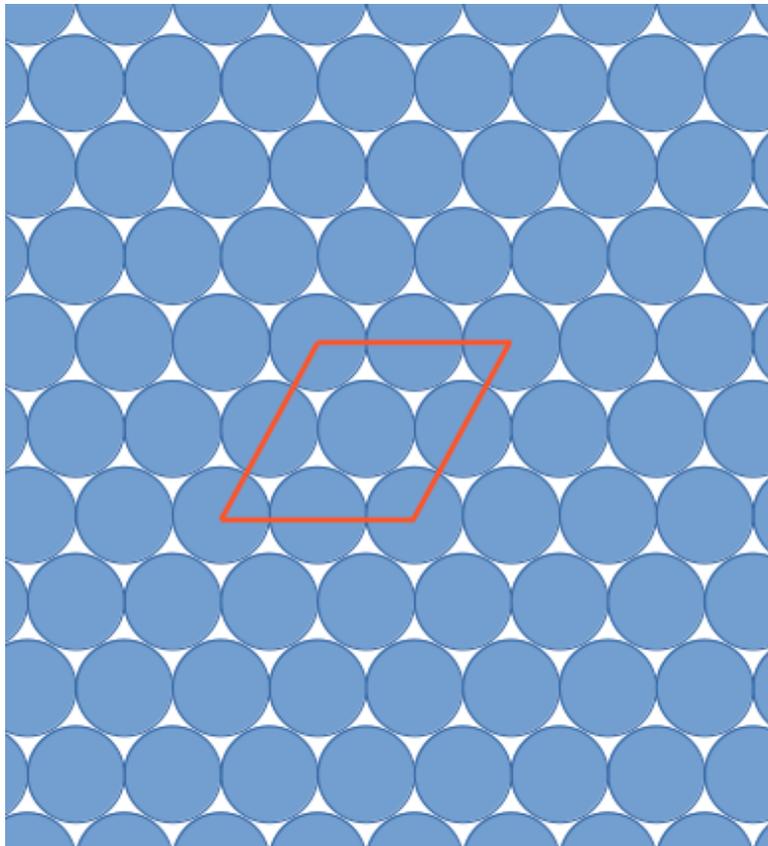
Allen weiteren Kollegen und Kolleginnen die während meiner Masterarbeit in der Laborastrogruppe gearbeitet haben und immer mit Rat und Tat geholfen haben, möchte ich außerdem meinen Dank aussprechen.

An dieser Stelle möchte ich mich weiterhin bei all denjenigen bedanken, die mich während der Anfertigung meiner Masterarbeit unterstützt und motiviert haben. Abschließend möchte ich mich bei meinen Eltern bedanken, die mir helfend beiseite standen und diese Arbeit Korrektur gelesen haben.

Anhang

Volumenfüllfaktor

Der Volumenfüllfaktor einer zweidimensionalen Schicht an Kugeln lässt sich aus zwei "Teil"-Volumen berechnen. Das erste Volumen beinhaltet das betrachtete Schichtsegment. Das hier verwendete Schichtsegment ist graphisch in der folgenden Abbildung in orange(/rot) dargestellt.



Die Abbildung bildet eine ideale zweidimensionale Schicht an Kugeln ab. Das orange Parallelogramm zeigt die Grundfläche des gewählten Segmentes zur Bestimmung des Füllfaktors.

Dieses orange Parallelogramm repräsentiert die Grundfläche des 3D-Schichtsegmentes. Das Volumen des gesamten Schichtsegmentes lässt sich wie folgt berechnen

$$V_{Segment} = 4R \cdot 4R \sin(60^\circ) \cdot 2R = 32 \sin(60^\circ) R^3.$$

Dabei sind die Seiten des Parallelogramms vier Kugelradien R lang und die Schichtdicke entspricht dem Kugeldurchmesser ($2R$).

Das zweite benötigte Volumen ist das Volumen der in diesem Segment liegenden Kugeln. Dazu wird die Anzahl an Kugeln n_{Kugeln} im Segment benötigt

$$n_{Kugeln} = 1 \cdot \text{vollständige Kugel} + 4 \cdot \text{halbe Kugeln} + 2 \cdot \text{drittel Kugeln} + 2 \cdot \text{sechstel Kugeln} \\ = 4.$$

Daraus folgt für das Volumen der Kugeln im Segment

$$V_{Kugeln} = n_{Kugeln} \cdot \frac{4}{3} \pi R^3 = \frac{16}{3} \pi R^3.$$

Diese zwei Volumen müssen durcheinander dividiert werden, um den Füllfaktor zu bestimmen

$$f = \frac{V_{Kugeln}}{V_{Segment}} = \frac{\frac{16}{3} \pi R^3}{32R^3 \sin(60^\circ)} = \frac{\pi}{6 \sin(60^\circ)} \approx 60\%.$$

Pythoncodes

Brendel-Borman-Oszillator

```
def Diel_Fkt(rcm, eps_inf, sigma_L, om_L, f_L, gamma_L, sigma_L2, om_L2, f_L2,
            gamma_L2, sigma_L3, om_L3, f_L3, gamma_L3, sigma_L4, om_L4, f_L4,
            gamma_L4, sigma_L5, om_L5, f_L5, gamma_L5, numb, delta, sigma_L6,
            om_L6, f_L6, gamma_L6, sigma_L7, om_L7, f_L7, gamma_L7, sigma_L8,
            om_L8, f_L8, gamma_L8, sigma_L9, om_L9, f_L9, gamma_L9):
    #Einladen der Fitparameter
```

```
eps_L = (1j*np.sqrt(np.pi)*f_L**2*eps_inf)/(2*np.sqrt(2)*sigma_L*np.sqrt(rcm
    **2+1j*gamma_L*rcm))*(special.wofz((np.sqrt(rcm**2+1j*gamma_L*rcm)-
    om_L)/(np.sqrt(2)*sigma_L))+special.wofz((np.sqrt(rcm**2+1j*gamma_L*
    rcm)+om_L)/(np.sqrt(2)*sigma_L)))
```

```
eps_L2 = (1j*np.sqrt(np.pi)*f_L2**2*eps_inf)/(2*np.sqrt(2)*sigma_L2*np.sqrt(rcm
    **2+1j*gamma_L2*rcm))*(special.wofz((np.sqrt(rcm**2+1j*gamma_L2*rcm)-
    om_L2)/(np.sqrt(2)*sigma_L2))+special.wofz((np.sqrt(rcm**2+1j*gamma_L2*
    rcm)+om_L2)/(np.sqrt(2)*sigma_L2)))
```

```
eps_L3 = (1j*np.sqrt(np.pi)*f_L3**2*eps_inf)/(2*np.sqrt(2)*sigma_L3*np.sqrt(rcm
    **2+1j*gamma_L3*rcm))*(special.wofz((np.sqrt(rcm**2+1j*gamma_L3*rcm)-
    om_L3)/(np.sqrt(2)*sigma_L3))+special.wofz((np.sqrt(rcm**2+1j*gamma_L3*
    rcm)+om_L3)/(np.sqrt(2)*sigma_L3)))
```

```
eps_L4 = (1j*np.sqrt(np.pi)*f_L4**2*eps_inf)/(2*np.sqrt(2)*sigma_L4*np.sqrt(rcm
    **2+1j*gamma_L4*rcm))*(special.wofz((np.sqrt(rcm**2+1j*gamma_L4*rcm)-
    om_L4)/(np.sqrt(2)*sigma_L4))+special.wofz((np.sqrt(rcm**2+1j*gamma_L4*
    rcm)+om_L4)/(np.sqrt(2)*sigma_L4)))
```

```
eps_L5 = (1j*np.sqrt(np.pi)*f_L5**2*eps_inf)/(2*np.sqrt(2)*sigma_L5*np.sqrt(rcm
    **2+1j*gamma_L5*rcm))*(special.wofz((np.sqrt(rcm**2+1j*gamma_L5*rcm)-
    om_L5)/(np.sqrt(2)*sigma_L5))+special.wofz((np.sqrt(rcm**2+1j*gamma_L5*
    rcm)+om_L5)/(np.sqrt(2)*sigma_L5)))
```

```
eps_L6 = (1j*np.sqrt(np.pi)*f_L6**2*eps_inf)/(2*np.sqrt(2)*sigma_L6*np.sqrt(rcm
**2+1j*gamma_L6*rcm))*(special.wofz((np.sqrt(rcm**2+1j*gamma_L6*rcm)-
om_L6)/(np.sqrt(2)*sigma_L6))+special.wofz((np.sqrt(rcm**2+1j*gamma_L6*
rcm)+om_L6)/(np.sqrt(2)*sigma_L6)))
```

```
eps_L7 = (1j*np.sqrt(np.pi)*f_L7**2*eps_inf)/(2*np.sqrt(2)*sigma_L7*np.sqrt(rcm
**2+1j*gamma_L7*rcm))*(special.wofz((np.sqrt(rcm**2+1j*gamma_L7*rcm)-
om_L7)/(np.sqrt(2)*sigma_L7))+special.wofz((np.sqrt(rcm**2+1j*gamma_L7*
rcm)+om_L7)/(np.sqrt(2)*sigma_L7)))
```

```
eps_L8 = (1j*np.sqrt(np.pi)*f_L8**2*eps_inf)/(2*np.sqrt(2)*sigma_L8*np.sqrt(rcm
**2+1j*gamma_L8*rcm))*(special.wofz((np.sqrt(rcm**2+1j*gamma_L8*rcm)-
om_L8)/(np.sqrt(2)*sigma_L8))+special.wofz((np.sqrt(rcm**2+1j*gamma_L8*
rcm)+om_L8)/(np.sqrt(2)*sigma_L8)))
```

```
eps_L9 = (1j*np.sqrt(np.pi)*f_L9**2*eps_inf)/(2*np.sqrt(2)*sigma_L9*np.sqrt(rcm
**2+1j*gamma_L9*rcm))*(special.wofz((np.sqrt(rcm**2+1j*gamma_L9*rcm)-
om_L9)/(np.sqrt(2)*sigma_L9))+special.wofz((np.sqrt(rcm**2+1j*gamma_L9*
rcm)+om_L9)/(np.sqrt(2)*sigma_L9)))
```

```
eps = eps_inf+eps_L+eps_L2+eps_L3+eps_L4+eps_L5+eps_L6+eps_L7+eps_L8+eps_L9
```

```
return eps
```

Emission

Mie:

```
def emission(eps_eff, x, c_, radius):
    import numpy as np
    m = np.sqrt(eps_eff)
    m = np.real(m)-1j*np.imag(m)
    qext, qsca, c, d = miepython.mie(m, x)
    qabs = qext-qsca
    emission = 1-np.exp(-c_*qabs)
    return(emission, qext, qsca)
```

Smuthi:

```
def emission2(ecs345, scs345, radius, anzahl_kugeln):
    emission2 = list()
    for i in range(len(ecs345)):
        qabs = (ecs345[i]-scs345[i])*1e6/(radius[i]**2*np.pi*anzahl_kugeln[i])
        emission2.append(1-np.exp(-c_[i]*qabs))
    emission2 = np.array(emission2)
    return(emission2)
```

Transmission

Mie:

```
def transmission_reflektiv_Theorie2(eps_eff, x, y, radius):
    import numpy as np
    import miepython

    eps = eps_eff
    m = np.sqrt(eps)
    m = np.real(m)-1j*np.imag(m)
    transmission = list()

    for i in range(len(x)):
        qext2_2_1, qsca2_2_1, c, d = miepython.mie(m, x[i]) *2
        qabs2_2 = qext2_2_1-qsca2_2_1
```

```

qext2_2 = np.array(qabs2_2)+y[i]*np.array(qsca2_2_1)
transmission.append(np.array(np.exp(-qext2_2/(radius[i]*10**(-4)*2*4/3)*3*
10**(-4))))
return(transmission)

```

Smuthi:

```

def transmission_reflektiv_Theorie(ecs345, scs345, x, y, radius):
    transmission = list()
    for i in range(len(x)):
        transmission.append((np.exp(-(ecs345[i]-scs345[i]+y[i]*scs345[i])*1e6/
(1.5**2*np.pi*anzahl_kugeln[i]))/(radius[i]*10**(-4)*2*4/3)*3*10**(-4)))
    transmission = np.array(transmission)
    return(transmission)

```

Fitprogramm optische Konstanten

```

def residual(params, WZ, x, Thipresica, start, radius, wavelength7, n_au_inter,
k_au_inter, hipresicaemission, epskbr, Thipresica2, pt, leer):

```

```

Sigma_L= params['Breite_Lorentz']
Omega_L = params['ResFreq_Lorentz']
Strength_L = params['Strength_Lorentz']
Gamma_L = params['Gamma_Lorentz']

```

```

Sigma_L2= params['Breite_Lorentz2']
Omega_L2 = params['ResFreq_Lorentz2']
Strength_L2 = params['Strength_Lorentz2']
Gamma_L2 = params['Gamma_Lorentz2']

```

```

Sigma_L3= params['Breite_Lorentz3']
Omega_L3 = params['ResFreq_Lorentz3']
Strength_L3 = params['Strength_Lorentz3']
Gamma_L3 = params['Gamma_Lorentz3']

```

Sigma_L4= params['Breite_Lorentz4']
Omega_L4 = params['ResFreq_Lorentz4']
Strength_L4 = params['Strength_Lorentz4']
Gamma_L4 = params['Gamma_Lorentz4']

Sigma_L5= params['Breite_Lorentz5']
Omega_L5 = params['ResFreq_Lorentz5']
Strength_L5 = params['Strength_Lorentz5']
Gamma_L5 = params['Gamma_Lorentz5']

y = params['y']
delta = params['delta']

Sigma_L6= params['Breite_Lorentz6']
Omega_L6 = params['ResFreq_Lorentz6']
Strength_L6 = params['Strength_Lorentz6']
Gamma_L6 = params['Gamma_Lorentz6']

Sigma_L7= params['Breite_Lorentz7']
Omega_L7 = params['ResFreq_Lorentz7']
Strength_L7 = params['Strength_Lorentz7']
Gamma_L7 = params['Gamma_Lorentz7']

Sigma_L8= params['Breite_Lorentz8']
Omega_L8 = params['ResFreq_Lorentz8']
Strength_L8 = params['Strength_Lorentz8']
Gamma_L8 = params['Gamma_Lorentz8']

Sigma_L9= params['Breite_Lorentz9']
Omega_L9 = params['ResFreq_Lorentz9']
Strength_L9 = params['Strength_Lorentz9']
Gamma_L9 = params['Gamma_Lorentz9']

eps_inf = params['Epsilon_inf']

```

eps_eff2=Diel_Fkt(rcm=WZ,
    eps_inf=eps_inf,
    sigma_L=Sigma_L,
    om_L=Omega_L,
    f_L=Strength_L,
    gamma_L=Gamma_L,
    sigma_L2=Sigma_L2,
    om_L2=Omega_L2,
    f_L2=Strength_L2,
    gamma_L2=Gamma_L2,
    sigma_L3=Sigma_L3,
    om_L3=Omega_L3,
    f_L3=Strength_L3,
    gamma_L3=Gamma_L3,
    sigma_L4=Sigma_L4,
    om_L4=Omega_L4,
    f_L4=Strength_L4,
    gamma_L4=Gamma_L4,
    sigma_L5=Sigma_L5,
    om_L5=Omega_L5,
    f_L5=Strength_L5,
    gamma_L5=Gamma_L5,
    numb=len(WZ),
    delta=delta,
    start=start,
    sigma_L6=Sigma_L6,
    om_L6=Omega_L6,
    f_L6=Strength_L6,
    gamma_L6=Gamma_L6,
    sigma_L7=Sigma_L7,
    om_L7=Omega_L7,
    f_L7=Strength_L7,
    gamma_L7=Gamma_L7,
    sigma_L8=Sigma_L8,
    om_L8=Omega_L8,
    f_L8=Strength_L8,

```

```

gamma_L8=Gamma_L8,
sigma_L9=Sigma_L9,
om_L9=Omega_L9,
f_L9=Strength_L9,
gamma_L9=Gamma_L9)

```

```
c_=(c1,c2,c3)
```

```
Emission_Sim=emission(eps_eff2,x,c_[1],radius)
```

```
Transmission_Sim1 = transmission_kbr(eps_eff2, x,y, radius,epskbr)
```

```
Transmission_Sim2 = transmission_reflektiv_Theorie(eps_eff2, x,y, radius)
```

```
#Ahipresica3µm = -np.log(Thipresica3µm[5067])
```

```
#Transmission_Sim=list()
```

```
E=((Emission_Sim[0]-hipresicaemission[0]),(Emission_Sim[1]-hipresicaemission[1]),
(Emission_Sim[2]-hipresicaemission[2]))
```

```
trans=((Transmission_Sim1[0]-Thipresica[0][4500:5808])/Thipresica[0][4500:5808],
(Transmission_Sim1[1]-Thipresica[1][4500:5808])/Thipresica[1][4500:5808],
(Transmission_Sim1[2]-Thipresica[2][4500:5808])/Thipresica[2][4500:5808])
```

```
trans2=((Transmission_Sim2[0]-Thipresica2[0][4500:5808])/Thipresica2[0][4500:5808],
(Transmission_Sim2[1]-Thipresica2[1][4500:5808])/Thipresica2[1][4500:5808],
(Transmission_Sim2[2]-Thipresica2[2][4500:5808])/Thipresica2[2][4500:5808])
```

```
eps3=np.array(n_aidu_inter)**2-np.array(k_aidu_inter)**2+1j*2*np.array(n_aidu_inter)*
np.array(k_aidu_inter)
```

```
return abs(E[0])*hipresicaemission[0]+abs(E[1])*hipresicaemission[1]+abs(E[2])*
hipresicaemission[2] # 0.000001*abs(eps_eff2-eps3)+(abs(trans[0])+abs(trans[1])+
abs(trans[2]))
```

```

out = minimize(residual, params,method='basinhopping', args=(WZ,x, Thipresi-
ca,
start,radius,wavelength7,n_aidu_inter,k_aidu_inter,hipresicaemission,epskbr,Thipresica2,pt,

```

```

leer,hipresica_Dia))

i=0
para_values=np.zeros(len(params))

for name, param in out.params.items():

    para_values[i]=param.value
    i=i+1

```

OpenCV

```

import cv2 as cv
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

img = cv.imread('/astro/robin/Desktop/Mikroskopbilder/Hipresica 3µm auf Platin(mit
Ethanol) Probe 3 Bild 2.png', cv.IMREAD_GRAYSCALE)
assert img is not None, "file could not be read, check with os.path.exists()"
img = cv.medianBlur(img,5)
cimg = cv.cvtColor(img,cv.COLOR_GRAY2BGR)

circles = cv.HoughCircles(img,cv.HOUGH_GRADIENT,1,12,param1=15,param2=13.5,
minRadius=7,maxRadius=13)

circles = np.uint16(np.around(circles))
for i in circles[0,:]:
    # draw the outer circle
    cv.circle(cimg,(i[0],i[1]),i[2],(0,255,0),2)

plt.ion()
parameters = 'xtick.labelsize': 20,
            'ytick.labelsize': 20
plt.rcParams.update(parameters)

```

```
plt.rcParams['font.family'] = 'monospace'  
# , 'Liberation Mono' 'Consolas' 'Andale Mono' , ]  
plt.rcParams['font.monospace'] = ['DejaVu Sans Mono', 'monospace']  
plt.rcParams.update(parameters)  
fig, ax = plt.subplots(layout='constrained')
```

```
plt.imshow(img)  
plt.imshow(cimg)
```

```
ax.set_xscale('linear')  
ax.set_yscale('linear')  
ax.grid(which="major", alpha=0.5)  
ax.grid(which="minor", alpha=0.25)
```

```
ax.set_xlabel('x Position in Pixel', fontsize=20)  
ax.set_ylabel('y Position in Pixel', fontsize=20)  
ax.set_title('Position Hipresica 3 $\mu$ m', fontsize=30)  
#ax.legend(fontsize=20, loc='upper right')
```

```
plt.grid(True)  
plt.tight_layout()  
plt.show()
```