Kapitel 4

Nahfeldoptik

4.1 Lichtfelder an Oberflächen

4.1.1 Konzepte

(brain storming Carsten)

SNOM = scanning near-field optical microscope

Skizze eines typischen SNOM-Aufbaus: Lichtquelle, Spitze, Probe, Detektor

'Fernfeld' = was in einem weit entfernten Detektor gemessen wird. Typischerweise der Poynting-Vektor an diesem Ort. Meistens eine Intensitätsmessung. Manchmal auch eine Interferenz mit einem Referenz-Strahl. In dem Fall kann man auch eine Phase von gestreutem Licht aufnehmen.

'Nahfeld' = das Feld (Amplitude, Intensität) in der Nähe der Probe. Um das zu messen, 'muss man hineingehen' mit einem kleinen Detektor. In der Praxis: jeder Detektor 'stört' das Nahfeld, weil er als streuendes Objekt das Nahfeld verändert.

Typische kleine Detektoren: Spitzen, und einzelne Emitter wie Quantenpunkte oder Moleküle/Atome. Der 'Detektor' kann als Streuzentrum funktionieren – das Streulicht, das genau von ihm ins Fernfeld geht, muss man dann geeignet trennen. Geht spektral: Moleküle fluoreszieren bei einer anderen Frequenz als das anregende Licht ('Stokes *shift*'). Geht auch experimentell: man moduliert etwa die Position (Abstand) der Spitze und ruft nur den Anteil des Signals im Fernfeld ab, der bei genau dieser Frequenz oszilliert ('*lock in detection*'). In einem SNOM wird gerne der '*tapping mode*' benutzt, wo der Abstand zur Probe moduliert wird.

Lichtquellen: Strahlen aus dem Fernfeld. Starkes Fokussieren (ganz eigene Problematik). Mit einer Faserspitze an die Probe bringen: geführte Moden, eigene Theorie. *Cutoff* limitiert das Signal. Metallisierte Spitze und Oberflächen-Plasmonen zur Beleuchtung: mit Gitter auf der Spitze anregen/konvertieren.

4.1.2 Aperturen, groß vs klein

Leistung, die durch eine Apertur durchtritt: geometrische Optik vs. sub- λ Apertur, $P_{\rm tr} = AI_{\rm in}$

Kirchhoff-Näherung: Feld in der Apertur = einfallendes Feld Bethe-Lösung für kreisförmige Blende



Abschätzung mit Kirchhoff für Dipolmoment, Skalierung für die transmittierte Leistung mit der Fläche und Frequenz:

$$P_{\rm tr} \sim (tA)^2 \omega^4 I_{\rm in} = \frac{t^2 A}{\lambda^4} \underbrace{AI_{\rm in}}_{\text{geom. Opt.}}$$
(4.1)

man beachte die Skalierung relativ zur geometrischen Optik. Gilt natürliche nur für kleine (sub- λ) Aperturen. Ist der Schirm nicht perfekt leitend, geht die dielektrische Funktion in die Oberflächen-Ladung ein. Und natürlich auch die Tatsache, dass das elektrische Feld nicht gleich dem einfallenden Feld ist. (Diese Näherung geht auf Kirchhoff zurück.)



4.1.3 Angular spectrum expansion

Fourier-Entwicklung des Nahfelds

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, z) = \mathbf{E}_{\rm in}(\mathbf{r}, z) + \int d^2k \sum_{\sigma} E_{\sigma}(\mathbf{k}) \mathbf{e}_{\sigma}(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + k_z z)}$$
(4.2)

mit

$$k_z^2 + k^2 = (\omega/c)^2$$
, $\operatorname{Im} k_z \ge 0$, $\operatorname{Re} k_z \ge 0$ (4.3)

Polarisationsvektor (Einheitsvektor)

$$|\mathbf{e}_{\sigma}(\mathbf{k})|^2 = 1, \qquad \mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_{\sigma}(\mathbf{k}) = 0$$
(4.4)

Amplitude für 'nach oben' ($z \ge 0$) gestreutes Licht $E_{\sigma}(\mathbf{k})$. Notation manchmal \mathbf{k}_{\parallel} statt k, weil nur 2D k-Vektor parallel zur Oberfläche. Oder auch K statt k. Das Besondere ist, dass in Gl.(4.2) nur über zwei Komponenten des k-Vektor integriert wird.

Streuung. Typisches Konzept, zum Beispiel Röntgenstreuung: wenn das einfallende Feld einen k-Vektor \mathbf{k}_i hat, dann enthält das gestreute Feld Fourier-Komponenten bei k-Vektoren $\mathbf{k}_i + \mathbf{q}$, wobei \mathbf{q} ein Wellenvektor aus dem *reziproken Raum* der Probe ist. In unserem Fall sind alle diese k-Vektoren 2D (parallel zur Proben-Oberfläche.

• *propagierende* Moden (im Fernfeld detektierbar). Bei einer Streuung an einer Struktur der Probe mit Wellenvektor q

$$k_z \text{ reell}, \qquad |\mathbf{k}_i + \mathbf{q}| < \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$$
 (4.5)

liefert räumliche Auflösung (invers zu maximalem Wert des Gittervektors q) von Ordnung $\mathcal{O}(\lambda)$, genau wie in der traditionellen Mikroskopie. Man kann zeigen, indem man das Integral (4.2) im Fernfeld auswertet, dass der Poynting-Vektor proportional zum Quadrat der Fourier-Amplitude ist

$$\mathbf{S} \sim \hat{\mathbf{n}} \sum_{\sigma} |E_{\sigma}(\mathbf{k})|^2 \tag{4.6}$$

Hier ist angenommen, dass der Detektor kein Polarisationsfilter hat. Die Beobachtungsrichtung (Einheitsvektor $\hat{\mathbf{n}}$) und der k-Vektor hängen zusammen mit:

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{\mathbf{k} + k_z \hat{\mathbf{e}}_z}{\omega/c} \tag{4.7}$$

speziell ist für den Winkel θ relativ zur Normalen: $\sin \theta = ck/\omega$. Diesen Winkel kann man nur für propagierende Moden einführen.

• evaneszent (nur im Nahfeld sichtbar):

$$k_z = i\kappa \text{ imagin}$$
, $|\mathbf{k}_i + \mathbf{q}| > \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$ (4.8)

enthält hohe räumliche Frequenzen und damit hohe Auflösung. Typischerweise ist die Auflösung nur durch den Beobachtungsabstand z begrenzt.

Je nach Abstand z liefert das Abklingen der evaneszenten Wellen ~ $e^{-\kappa z}$ mehr oder weniger Auflösung: *die Propagation von einer strukturierten Oberfläche weg wirkt wie ein Tiefpass-Filter*.

4.1.4 Streuung an Gittern

Rayleigh-Näherung. Die Integralformel (4.2) für das elektrische Feld hat es 'in sich', denn sie kann nicht an allen Stellen des Nahfelds gültig sein. In der Tat nimmt man an, dass für jeden Punkt im k-Raum eine Welle $\exp i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + k_z z)$ vorliegt, die sich 'nach oben', in positive z-Richtung ausbreitet. Für das einfallende Licht gilt das sicherlich nicht – allerdings kann man sich für 'tiefe Gräben' in einer Probe auch vorstellen, dass sich dort andere Wellen nach unten ausbreiten. Ganz zu schweigen von dem Lichtfeld 'unterhalb' der Probe oder im 'Substrat' (wenn dieses denn transparent ist).

Die Annahme, dass der Ansatz des *angular spectrum* das Nahfeld bis an die oberste Grenzfläche der Probe beschreibt, ist also eine Näherung. Sie wurde zuerst von Lord Rayleigh Rayleigh (1907) gemacht und nach ihm benannt. Er hat 1907 die Beugung von Wellen an Gittern berechnet, unter der Annahme, dass die Amplitude der Gitterstrukturen klein gegenüber der Wellenlänge ist.

Nehmen wir zur Vereinfachung an, dass wir das Lichtfeld durch ein skalares Feld beschreiben können. Außerdem nehmen wir an, dass das Gitter durch ein räumliches Profil z = h(x) beschrieben wird, dessen Fourier-Transformierte $\tilde{h}(q)$ ist. Dann ist Rayleigh's Lösung für das gestreute Licht (in erster Ordnung im Profil h(x)): man sieht außer der Fourier-Transformierten des Profils $\tilde{h}(q)$ den Nenner, der die Resonanzen der (glatten) Oberfläche bestimmt (ε ist die dielektrische Funktion des Substrats)

$$A_1(q) = i\tilde{h}(q)A_0 \frac{\varepsilon\kappa(\kappa + \kappa_m) + kq(\varepsilon - 1)}{k_{zm}(q) + \varepsilon k_z(q)}$$
(4.9)

Hier sind κ (κ_m) die Zerfallskonstanten der Felder auf der Vakuum- (Medium-)Seite und $k_z(q)$ ($k_{zm}(q)$) die Wellenvektoren für das gestreute Licht mit k-Vektor k + qparallel zur Oberfläche. Das Licht hätte eine Amplitude A_0 auf der glatten Oberfläche. Es ist angenommen, dass die Streuung nur in der Einfallsebene stattfindet (Profil der Oberfläche h(x) nicht von y abhängig): in diesem Fall kann die Komponente E_y des elektrischen Felds als skalares Feld behandelt werden (stetig und differenzierbar an der Grenzfläche).

Polarisation. Eine Rechnung inclusive Polarisation liefert (Agarwal, 1977)

$$\mathbf{E}_{1}(\mathbf{q}) = \mathrm{i}\tilde{h}[\mathbf{q}]A_{0}[k_{zm}(\mathbf{q}) - k_{z}(\mathbf{q})][\mathbf{e}_{0} - \mathbf{k}_{m-}(\mathbf{q})\frac{\mathbf{k}(\mathbf{q})\cdot\mathbf{e}_{0}}{\mathbf{k}(\mathbf{q})\cdot\mathbf{k}_{m-}(\mathbf{q})}]$$
(4.10)

wobei k und k_m die Wellenvektoren in Vakuum und Medium für das gestreute Licht (Wellenvektor verschoben um q in der Ebene) sind. Die Vektor-Amplitude des ungestreuten Lichts wird A_0e_0 geschrieben, und k_{m-} ist das Spiegelbild von k_m (umgekehrtes Vorzeichen für die Komponente normal zur Oberfläche). Hier sieht man, dass für Streuung außerhalb der Einfallsebene eine Mischung der Polarisationen auftreten kann.

Noch ein paar Details mehr … Rayleigh-Theorie für Gitterbeugung (skalar = s-/TE-Polarisation). Kinematik vs. Intensität von Beugungsordnungen. (Prinzip von Beugung: Impulstransfer.) Perfekt leitende, nano-strukturierte Oberfläche.



Ziel: räumliche Fourier-Entwicklung, propagierende vs. evaneszente Moden, Propagation als räumliches Filtern (lokale Detektoren!)

$$\phi(x,z) = e^{i(kx-k_z z)} + r_0 e^{i(kx+k_z z)} + \sum_{n \neq 0} a_n e^{i[(k+ng)x+k_{zn}z]}$$
(4.11)

Randbedingung für perfekt leitendes Gitter (einfachster Fall)

$$\phi(x, h(x)) = 0 \tag{4.12}$$

ergibt mit der Rayleigh-Näherung, d.h. die Entwicklung (4.11) ist in dieser Form bis an die Oberfläche gültig:

$$0 = 1 + r_0 e^{2ik_z h(x)} + \sum_{n \neq 0} a_n e^{ingx} e^{i(k_{zn} + k_z)h(x)}$$
(4.13)

Man beachte, dass hier die Fourier-Transformierte von $e^{2ik_z h(x)}$ statt von h(x) nützlich sein kann. Allerdings ist Gl.(4.13) *nicht* über eine einfache Fourier-Inversion zu lösen (in der Vorlesung falsch gesagt), denn der Index n der Beugungsordnung taucht noch einmal im Exponenten $k_{zn}h(x)$ auf.

Lord Rayleigh löst dieses Problem, indem er eine Reihenentwicklung für kleines $k_z h(x) \ll 1$ ansetzt:

$$0 = \phi^{(0)}(x,0) + \partial_z \phi^{(0)}(x,0)h(x) + \phi^{(1)}(x,0) + \dots$$
(4.14)

Dies liefert nach einer kleinen Rechnung:

$$r_0 = -1 + 2ik_z \tilde{h}_0 + 2k_z \sum_n k_{zn} |\tilde{h}_n|^2$$
(4.15)

$$a_n = 2ik_z \tilde{h}_n, \qquad n \neq 0 \tag{4.16}$$

wobei die h_n die Fourier-Koeffizienten des Gitterprofils sind und wir für die spekuläre Reflexion bis zur zweiten Ordnung gerechnet haben. Verkürzt zusammengefasst: *Die Amplituden der Gitterbeugung sind die Fourier-Koeffizienten des Gitterprofils*. Freilich gehen andere Größen wie die Wellenlänge und der Einfallswinkel $k_z = (2\pi/\lambda) \cos \theta_{\rm in}$ immer noch ein.

Diskussion. In Gl.(4.11), propagierende vs. evaneszente Moden. Propagation als räumliches Filtern (lokale Detektoren!).

• propagierend (im Fernfeld detektierbar):

$$k_{zn} \operatorname{reell}, \qquad |k+ng| < \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$$
 (4.17)

liefert räumliche Auflösung (invers zu maximalem Wert des Gittervektors ng) von Ordnung $\mathcal{O}(\lambda)$, genau wie in der traditionellen Mikroskopie.

• evaneszent (nur im Nahfeld sichtbar):

$$k_{zn} = i\kappa_n \operatorname{imagin}\ddot{a} r, \qquad |k + ng| > \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$$
 (4.18)

enthält hohe räumliche Frequenzen und damit hohe Auflösung. Typischerweise ist die Auflösung nur durch den Beobachtungsabstand z begrenzt.

Je nach Abstand z liefert das Abklingen der evaneszenten Wellen ~ $e^{-\kappa_n z}$ mehr oder weniger Auflösung: *die Propagation von einer strukturierten Oberfläche weg wirkt wie ein Tiefpass-Filter*.

Optimale Methode, um das Nahfeld ohne räumliches Verschmieren zu detektieren: Fluoreszenz eines Moleküls anregen. Die Absorptionsrate ist proportional zur elektrischen Feldintensität $|\nabla \phi(\mathbf{x}_M)|^2$ am Ort \mathbf{x}_M des Moleküls. Das Molekül relaxiert nach der Absorption in einen anderen Zustand und emittiert Fluoreszenz bei einer anderen (rotverschobenen) Frequenz. Dadurch kann man die direkte Streuung und das Licht vom Molekül spektral trennen.

So ein Molekül wird gerne auf eine Spitze "geklebt", um es genau zu positionieren. Man macht häufig die Annahme, die Spitze verzerrt nicht die Feldverteilung im Vergleich zu der Oberfläche allein. Das nennt man die Näherung eines "passiven Detektors".

Verallgemeinerungen. "Eigenfunktionen der Oberfläche" beugen: strahlende Verluste von Plasmonen (Wood-Anomalie?) – siehe Übungsblatt 06.

Lösung für das gestreute Licht (in erster Ordnung im Profil h(x)): man sieht außer der Fourier-Transformierten des Profils h[q] den Nenner, der die Resonanzen der (glatten) Oberfläche bestimmt:

$$A_1(q) = i\tilde{h}[q]A_0 \frac{\varepsilon\kappa(\kappa + \kappa_m) + kq(\varepsilon - 1)}{k_{zm}(q) + \varepsilon k_z(q)}$$
(4.19)

Hier sind κ (κ_m) die Zerfallskonstanten der Felder auf der Vakuum- (Medium-)Seite und $k_z(q)$ ($k_{zm}(q)$) die Wellenvektoren für das gestreute Licht mit k-Vektor k + qparallel zur Oberfläche. Das Licht hätte eine Amplitude A_0 auf der glatten Oberfläche. Es ist angenommen, dass die Streuung nur in der Einfallsebene stattfindet (Profil der Oberfläche h(x) nicht von y abhängig).

Eine Rechnung inclusive Polarisation liefert (Agarwal, 1977)

$$\mathbf{E}_{1}(\mathbf{q}) = \mathrm{i}\tilde{h}[\mathbf{q}]A_{0}[k_{zm}(\mathbf{q}) - k_{z}(\mathbf{q})][\mathbf{e}_{0} - \mathbf{k}_{m-}(\mathbf{q})\frac{\mathbf{k}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{e}_{0}}{\mathbf{k}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{k}_{m-}(\mathbf{q})}]$$
(4.20)

wobei k und k_m die Wellenvektoren in Vakuum und Medium für das gestreute Licht (Wellenvektor verschoben um q in der Ebene) sind. Die Vektor-Amplitude des ungestreuten Lichts wird $A_0 e_0$ geschrieben, und k_{m-} ist das Spiegelbild von k_m (umgekehrtes Vorzeichen für die Komponente normal zur Oberfläche). Hier sieht man, dass für Streuung außerhalb der Einfallsebene eine Mischung der Polarisationen auftreten kann.

4.1.5 Beispiel: resonante Transmission

... aus der Arbeit von Marquier & al. (2005). Metallfilm mit sub- λ Spalten, beleuchtet von "unten". Gefragt ist nach der Transmission. Erste Experimente mit deutlich größeren Werten als erwartet (Theorie von Bethe) in der Gruppe von Ebbesen (Übersichtsartikel von Garcia-Vidal & al. (2010)).



Diskussion der Transmission in der $k_{\parallel}\omega$ -Ebene. Resonanzen der Struktur: Oberflächen-Plasmonen, in die erste Brillouin-Zone zurückgefaltet, und "*cavity modes*", die im Spalt lokalisiert sind, etwa eine halbe Wellenlänge zwischen Ober- und Unterkante des Films. (Ein Beispiel für eine Verletzung der Hypothese von Rayleigh.) Unter geeigneten Bedingungen wird so eine Resonanz angeregt und strahlt dann auch auf der "anderen Seite", also in Transmission, ab. Interessant: diese Moden haben typischerweise auch Absorption, weil sie auch Feldverteilung im Metall haben. Analyse des "Charakters" der resonanten Mode: Feldenergie im Spalt vs Feldenergie oberhalb der metallischen Teile des Films. Als Funktion von k_{\parallel} (also des Einfallswinkels θ) kann sich der Charakter von "*cavity mode*" nach "plasmonische Mode" ändern.

"Eigenfunktionen der Oberfläche" beugen: strahlende Verluste von Plasmonen (Wood-Anomalie?)

Feld eines Dipols (nicht-retardiert): Abstand und lateral Auflösung, lorentzförmiges Profil (Synge: zwei Punktquellen)

Wiederholung Huyghens-Prinzip: Green'sche Funktion (skalar, vektoriell)

$$[\nabla^{2} + (\omega/c)^{2}]\phi = 0 \qquad (4.21)$$
$$[\nabla^{2} + (\omega/c)^{2}]G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\varepsilon_{0}^{-1}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$
$$\nabla \cdot (\phi\nabla G - G\nabla\phi) = -\varepsilon_{0}^{-1}\phi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$
$$\int \mathbf{d}\mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot [\phi(\mathbf{r}')\nabla'G - G(\mathbf{r}', \mathbf{r})\nabla'\phi] = -\varepsilon_{0}^{-1}\phi(\mathbf{r}) \qquad (4.22)$$

Strahlung einer (oszillierenden!) Punktladung

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|/c}}{4\pi\varepsilon_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$
(4.23)

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},\omega) = \frac{\omega^2 e^{\mathbf{i}\omega r/c}}{4\pi\varepsilon_0 c^2 r} \left\{ (\mathbf{d} - 3\hat{\mathbf{r}}(\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{d})) \left(\frac{-1}{(\omega r/c)^2} + \frac{\mathbf{i}}{\omega r/c}\right) + \mathbf{d} - \hat{\mathbf{r}}(\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{d}) \right\}$$

= $\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{0},\omega) \cdot \mathbf{d}(\omega)$ (4.24)

Variante: metallische Blende mit mehreren Löchern. Kopplung untereinander durch Plasmonen (ganz anders als im Doppelspalt!). Diskussion um resonante Transmission.

Variante: Reziprozität = Punktquelle und Abstrahlung ins Fernfeld, Interferenzen und räumliche Auflösung (direkte Inversion?).

Variante: Störungstheorie in dielektrischem Profil? – einfachster Fall, wo Inversion halbwegs möglich ist.

4.2 Streuung an Nano-Objekten

Mie-Streuung, Wirkungsquerschnitt, Polarisierbarkeit, durchstimmbare Resonanz. Für ein sub- λ Partikel eingebettet in ein Medium mit ε_0 ist die Polarisierbarkeit

$$\alpha = 4\pi\varepsilon_0 a^3 \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\varepsilon + 2\varepsilon_0} \tag{4.25}$$

wobe
i ε die dialektische Funktion des Partikels im Inneren
ist.

Unterscheiden zwischen Extinktion und Absorption: Extinktion = Licht geht aus einfallendem Strahl verloren und 'fehlt' in Vorwärtsrichtung. Absorption = Lichtenergie verbleibt im Medium/Streuer (und wird dort etwa in Wärme umgesetzt). Differenz zwischen den beiden: Streuung = Licht taucht in anderer Richtung auf.

Die entsprechenden Wirkungsquerschnitte findet man bei Bohren & Huffman (1998):

$$C_{\text{ext}} = k \operatorname{Im} \alpha = \pi a^2 4x \operatorname{Im} \left\{ \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\varepsilon + 2\varepsilon_0} \right\}$$
(4.26)

$$C_{\rm abs} = \frac{k^4}{6\pi} |\alpha|^2 = \pi a^2 \frac{8x^4}{3} \left| \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\varepsilon + 2\varepsilon_0} \right|^2 \tag{4.27}$$

$$x = ka \tag{4.28}$$

Im optischen Spektralbereich schätzt man daraus ab, dass Streuung für Nano-Kugeln mit a < 20 nm vernachlässigt werden kann.

Literaturverzeichnis

- G. S. Agarwal (1977). Interaction of electromagnetic waves at rough dielectric surfaces, *Phys. Rev. B* **15**, 2371–83.
- C. Bohren & D. Huffman (1998). *Absorption and scattering of light by small particles*. Wiley Science Paperback Series. John Wiley & Sons, Inc., New York, USA.
- F. J. Garcia-Vidal, L. Martin-Moreno, T. W. Ebbesen & L. Kuipers (2010). Light passing through subwavelength apertures, *Rev. Mod. Phys.* 82, 729–87.
- F. Marquier, J.-J. Greffet, S. Collin, F. Pardo & J. L. Pelouard (2005). Resonant transmission through a metallic film due to coupled modes, *Opt. Express* **13** (1), 70–76.
- L. Rayleigh (1907). On the dynamical theory of gratings, *Proc. R. Soc. London A* **79**, 399–416.

Kapitel 5

Numerische Methoden

5.1 Überblick

Zeit-Domäne vs Frequenz-Raum

Diskretisierung von Volumen oder Grenzflächen

Modale Methoden: Felder in Moden (oder Multipole) entwickeln

'top down': Objekte mit stückweise konstanten, lokalen Eigenschaften, etwa $\varepsilon(\omega)$, identisch zu makroskopischen Körpern. Bei elementaren Würfeln von etwa $(0.8 \text{ nm})^3$ sicherlich fragwürdig.

'bottom up': dicht an der Elektronendynamik (typisch für Metalle). Methode aus der theoretischen Chemie: zeitabhängige Dichtefunktional-Theorie (TD DFT). Ist auf Strukturen $\leq 2 \text{ nm}$ begrenzt. Eine weitere 'nm Lücke', hier methodisch.

5.2 FDTD

'Intuitiv' zu verstehen, relativ einfach zu programmieren, deswegen seit 1985 zunehmend populär (Zitate auf Wikipedia).

Diskretisierte Fassung der Maxwell-Gleichungen. Etwa

$$\partial_t B_x = -(\nabla \times \mathbf{E})_x = \partial_z E_y - \partial_y E_z \tag{5.1}$$

führt mit Differenzenquotienten in Δt und Δz auf

$$B_x(t+\Delta t) = B_x(t) + \frac{\Delta t}{\Delta z} \left(E_y(z+\Delta z) - E_y(z) \right) - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(E_z(y+\Delta y) - E_z(y) \right)$$
(5.2)

In der Praxis haben sich versetzte (*staggered*) Gitter bewährt: berechne B für Zeitpunkte $t_n, t_n + \Delta t, \ldots$ und E für dazwischen liegende Zeitpunkte $t_n - \Delta t/2, t_n + \Delta/2, \ldots$ Genauso mit örtlichen Variablen verfahren: ineinander verschachelte kubische Gitter ('Yee-Zelle') für magnetische und elektrische Felder.

Bild aus Wikipedia

Quellen: Ströme $\mathbf{j}(\mathbf{x}_i, t_n)$ (etwa für elektrotechnische Anwendungen, weniger in der Optik) und einfallende Felder auf den Randwerten des räumlichen Gitters.

5.3 Integral-Gleichungen

Formulierung der Feldgleichungen, wo das Feld nur auf den streuenden Objekten gesucht wird. Vorteil: keine Diskretisierung des Raums 'bis ins Unendliche'. Vorteil: es wird im Frequenzraum gearbeitet, jede beliebige Dispersion $\varepsilon(\omega)$ is erlaubt. Formulierungen existieren als Volumen-Integral und als Oberflächen-Integral. Hier zur Vereinfachung die Volumen-Integral-Gleichung, ohne Polarisation.

Streuende Objekte tauchen in der Wellengleichung in der dielektrischen Funktion auf. Bilde Differenz zu 'Referenzmedium' mit ε_0 und finde

$$\nabla^2 E + k^2 E = -k^2 (\varepsilon(\mathbf{r}) - \varepsilon_0) E = -k^2 \Delta \varepsilon(\mathbf{r}) E$$
(5.3)

Die rechte Seite als 'Quellterm' interpretieren. Vorteil: ist nur $\neq 0$ dort, wo die Streuer sitzen. Löse diese Gleichung mit Hilfe einer Green'schen Funktion $G(\mathbf{r})$. Diese Funktion liefert das Strahlungsfeld einer Punktquelle und damit:

$$E(\mathbf{r}) = E_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + k^2 \int d^3 r' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Delta \varepsilon(\mathbf{r}') E(\mathbf{r}')$$
(5.4)

Das Integral als Riemann-Summe schreiben und numerisch als Anwendung einer Matrix auf den 'Vektor' $E(\mathbf{r}_n)$ von Feld-Werten an diskreten Punkten \mathbf{r}_n implementieren. Alternativ: Feld $E(\mathbf{r})$ in einfache Funktionen ('finite Elemente') auf einem Gitter entwickeln und das Integral als Kopplung zwischen finiten Elementen auswerten. Liefert auch eine Matrix-Gleichung, die mit Standard-Methoden gelöst wird:

$$\sum_{m} \left(\delta_{nm} - G_{nm} \right) E(\mathbf{r}_m) = E_{\text{ext}}(\mathbf{r}_n)$$
(5.5)

Die erneute Auswertung der Integralgleichung (5.4), jetzt für Punkte r außerhalb der Streuer, etwa im Fernfeld, liefert das Feld dort. Die Green'sche Funktion kann dort als Kugel-Welle entwickelt werden, so dass am Ende eine Art Fourier-Integral(-Summe) über das Feld auf den Streuern entsteht.