

Die Perfectly-Matched-Layer-Randbedingung in  
der Finite-Differenzen-Methode im Frequenzbereich:  
Implementierung und Einsatzbereiche

von Diplom-Ingenieur  
Thorsten Tischler

von der Fakultät IV - Elektrotechnik und Informatik  
der Technischen Universität Berlin  
zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Ingenieurwissenschaften  
– Dr.-Ing. –

genehmigte Dissertation

Promotionsausschuss:

Vorsitzender: Prof. Dr.-Ing. E. Obermeier

Gutachter: Prof. Dr.-Ing. G. Böck

Gutachter: Dr.-Ing. habil. W. Heinrich

Tag der wissenschaftlichen Aussprache: 15. Dezember 2003

Berlin 2004

D 83



## Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Ferdinand-Braun-Institut für Höchstfrequenztechnik (FBH) in Berlin-Adlershof.

Besonders bedanken möchte ich mich bei Herrn Dr.-Ing. habil. Wolfgang Heinrich für seine außerordentlich engagierte fachliche und persönliche Unterstützung während meiner FBH-Zeit.

Prof. Dr.-Ing. Georg Böck, der die Erstellung dieser Arbeit mit Interesse begleitet hat, danke ich für die Gelegenheit zur Promotion.

Für ihre Unterweisungen in die diversen Geheimnisse der Finite-Integrationsprogramme F3D bedanke ich mich bei Dr. Horst Zscheile, Dr. Hoa Huynh, Dr. Marco Kunze und Dr. Warner Bruns.

Für die mathematisch-numerischen Kerne der F3D-Programme sind Dr. Georg Hebermehl und Dipl. Math. Rainer Schlundt (am WIAS-Berlin) verantwortlich. Sie haben hier die PML spezifischen Modifikationen vorgenommen. Bei beiden möchte ich mich für die stets reibunglose Zusammenarbeit bedanken.

Konstruktive Anmerkungen seitens der Programm Anwender am FBH haben geholfen, die Software zu verbessern. Hier bin ich insbesondere Dr. Franz-Josef Schmückle zu Dank verpflichtet. Für die gute Zusammenarbeit in Sachen Sub-mm-Wellen CPW bedanke ich mich bei Dr. Frank Schnieder.

Die mühevollen, aber sicher auch interessante Aufgabe, diese Arbeit Korrektur zu lesen hat Dr. Matthias Rudolph übernommen. Bei ihm und auch bei Dr. Fritz Lenk bedanke ich mich außerdem für ihre persönliche Unterstützung, insbesondere in der heißen Phase der Entstehung dieses Werks.

Berlin im Januar 2004, Thorsten Tischler

## Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit behandelt den Einsatz der Perfectly-Matched-Layer (PML) absorbierenden Randbedingung im Rahmen der Frequenzbereichs-Formulierung der Finiten-Differenzen (FDFD). Mit Hilfe von analytischen Herleitungen werden charakteristische Effekte untersucht und erklärt, insbesondere der Einfluss von PML-Randgebieten auf das Modenspektrum von Wellenleitern. Es zeigt sich, dass durch die Randbedingung künstliche PML-Moden im interessierenden Spektrum auftreten können. Dazu wird ein effektives Kriterium zur Separation der PML- von den physikalischen Moden eingeführt und verifiziert. Diese Ergebnisse sind auch für die Zeitbereichsmethode der Finiten-Differenzen (FDTD) relevant. Mit der implementierten PML-Randbedingung gelingt eine umfassende Charakterisierung rückseitenmetallisierter Kopplanarleitungen (CB-CPW) bis in den Terahertzbereich (1000 GHz). Neben einer genauen Berechnung der geometrischen Dispersion und der Abstrahlungs-Dämpfung erlaubt das vorgestellte Verfahren erstmals eine Analyse der diversen Kopplungseffekte zwischen Grundmoden und höheren Moden.

Bei der Implementation der PML im 3D-Fall wird eine speziell an die integrale FD-Formulierung angepasste Wahl der Leitfähigkeiten für gradierte PML-Ränder verwendet. Dies ermöglicht hervorragende Absorptionsniveaus im Bereich von  $-60$  dB für 5-lagige PML. Neben Strukturen mit Abstrahlung können damit auch dreidimensionale Geometrien großen Querschnitts simuliert werden, ohne dass künstliche Hohlraumresonanzen des finiten Rechengebietes die Resultate verfälschen.

## Abstract

The thesis treats the Perfectly-Matched-Layer (PML) absorbing boundary condition used with the frequency-domain formulation of the Finite-Difference method (FDFD). By means of analytical models, limitations and characteristic PML effects are described, particularly the influence of PML layers on the mode spectrum of waveguide structures. In this case, artificial PML modes are supported, which occur within the spectrum of interest. For this purpose, an effective criterion is presented and verified, which allows separation of physical and artificial modes. These results are relevant for the FDTD method equally. Using the PML boundary condition, an extensive investigation of conductor-backed coplanar-waveguides (CB-CPW) up to terahertz frequencies (1000 GHz) is performed. Besides geometrical dispersion and radiation, the method developed allows an analysis of the coupling effects between CPW and higher-order modes for the first time.

In the 3D case, a modified formulation for conductivity variation within graded PML profiles is applied, which is adapted to the integral formulation of the FD method. Excellent absorption rates in the  $-60$  dB range for 5-layer PMLs are demonstrated. Such PML boundaries allow to simulate radiation effects as well as 3D structures with electrically large cross-sections, which otherwise will be corrupted by artificial modes caused by the finite computational domain.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Bedeutung der em-Simulation von Mikrowellenschaltungen . .	1
1.2	Bedeutung und Anwendung absorbierender Randbedingungen	2
1.3	Ziel und inhaltliche Übersicht der Arbeit . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Absorbierende Randbedingungen</b>	<b>7</b>
2.1	Emulation offener Randbedingungen mit dem Greenschen Theorem . . . . .	10
2.2	Asymptotische Näherung des Fernfeldes mit Differentialopera- toren . . . . .	11
2.3	PML als absorbierende Randbedingung . . . . .	14
2.3.1	Herleitung der PML-Formulierung . . . . .	14
2.3.2	PML in der „split-field“ Formulierung . . . . .	18
2.3.3	PML in der „stretched-coordinates“ Formulierung . .	20
2.3.4	Die uniaxiale PML-Formulierung . . . . .	22
<b>3</b>	<b>Die FDFD-Methode</b>	<b>25</b>
3.1	Diskretisierung . . . . .	27
3.2	Eigenwertberechnungen an den Toren . . . . .	28
3.3	Berechnung der Streumatrix . . . . .	31

---

<b>4</b>	<b>Wellenleiter-Berechnungen mit lateraler PML</b>	<b>35</b>
4.1	Untersuchung eines teilweise gefüllten Hohlleiters . . . . .	38
4.2	Modentrennung mit dem PPP-Kriterium . . . . .	44
4.2.1	Analytische Untersuchungen zum PPP-Kriterium . . .	44
4.2.2	Numerisches Beispiel zum PPP-Kriterium . . . . .	49
4.3	Genauigkeitsgrenzen der PML . . . . .	54
4.3.1	Analytische Untersuchungen zur PML-Genauigkeit . .	54
4.3.2	Numerisches Beispiel zur PML-Genauigkeit . . . . .	60
4.4	Angepasste Eigenwertsuche . . . . .	63
<b>5</b>	<b>Dispersion und Abstrahlung der Koplanarleitung</b>	<b>69</b>
5.1	CPW ohne Rückseitenmetallisierung . . . . .	72
5.1.1	Unendlich ausgedehnte Massemetallisierungen . . . . .	72
5.1.2	Endliche Massemetallisierungen . . . . .	74
5.2	CPW mit Rückseitenmetallisierung . . . . .	77
5.2.1	Einfluss der Substratdicke . . . . .	77
5.2.2	Einfluss der Masse-Metallisierungsbreiten . . . . .	80
5.2.3	Das erweiterte CPW-Modell . . . . .	82
5.2.4	Kopplungseffekte zwischen CPW- und $HM_{mn}$ -Moden	85
5.2.5	Dispersion und Abstrahlung bei W-Band CPW's . . .	88
<b>6</b>	<b>Streumatrix-Berechnungen mit PML</b>	<b>91</b>
6.1	Konvergenz bei 3D-FDFD Berechnungen mit PML . . . . .	94
6.2	Genauigkeitsgrenzen der longitudinalen PML . . . . .	96
6.2.1	Genauigkeitsgrenzen der nicht-gradierten PML . . . .	96

6.2.2	Analytische Berechnung der Restreflexion . . . . .	100
6.2.3	Genauigkeitsgrenzen der gradierten PML . . . . .	103
6.2.4	Analytische Berechnung der Reflexion bei PML's mit gradiertem Leitfähigkeitsprofil . . . . .	105
6.2.5	Verbesserung der Absorption von PML's mit gradier- tem Leitfähigkeitsprofil . . . . .	107
6.3	Berechnung dreidimensionaler Strukturen mit PML-Rändern	110
6.3.1	Geschirmte Mikrostreifenleitung . . . . .	111
6.3.2	Patch-Antenne . . . . .	114
6.3.3	LTCC-Packaging . . . . .	115
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>119</b>

# 1 Einleitung

## 1.1 Bedeutung der em-Simulation von Mikrowellenschaltungen

Wichtige Anwendungsgebiete kommerziell genutzter integrierter Mikrowellenschaltkreise liegen in der Mobil- und Satellitenkommunikation, sowie im Bereich intelligenter Sensorsysteme wie Radaranwendungen für die Automotive Industrie. Die Bedienung solcher Massenmärkte erfordert kostengünstige Herstellungsprozesse. Als Schlüsseltechnologie fungiert hierbei die monolithische Integration von Mikrowellenschaltkreisen (Monolithic Microwave Integrated Circuit, MMIC) auf einem Halbleitersubstrat. MMIC's integrieren, neben den aktiven Komponenten (Transistoren, Dioden), eine Vielzahl passiver Strukturelemente. Hierzu zählen Kapazitäten und Induktivitäten, aber auch diverse Leitungsbauelemente und Filter.

Durch die stetige Miniaturisierung der elektrischen Schaltungen, die dadurch auch bei immer höheren Frequenzen betrieben werden können, wird die sorgfältige Simulation der elektrischen Übertragungseigenschaften passiver Schaltungselemente unabdingbar. Fortschrittliche numerische Verfahren, wie die Finite-Elemente- oder auch die Finite-Differenzen-Methode erlauben hierbei eine vollständige elektromagnetische- (em-) Simulation beliebig gestalteter dreidimensionaler Strukturen. So können bereits in der Designphase der Schaltung unerwünschte Störeffekte wie Übersprechen, die Entstehung von Oberflächenwellen, die Ankopplung unerwünschter Moden oder Abstrahlungseffekte detektiert und beseitigt werden.

Neben der Optimierung von einzelnen passiven Schaltungselementen gewinnt die (Teil-) Simulation hybrider Aufbauten immer mehr an Bedeutung. Als Beispiel sei hier das modulare Design integrierter HF-Module (Multichip Modules, MCM) genannt. Diese Aufgaben stellen, aufgrund ihrer Komplexität, enorme Anforderungen an die Effizienz des verwendeten numerischen Verfahrens.

Da bei integrierten Schaltungen keine nachträgliche Abstimmung der einzelnen Bauelemente möglich ist, wird eine sorgfältige Vorab-Simulation der einzelnen Schaltungselemente unabdingbar. Hierbei können nur wenige rudimentäre Schaltungselemente mit analytischen Methoden beschrieben werden. Die Übertragungseigenschaften komplexer Geometrien lassen sich mit numerischen Verfahren ermitteln. Das rechnergestützte Schaltungsdesign dient somit als Werkzeug zur Kosten- und Zeitersparnis, um mehrfache Prototypen-Design-Läufe zu vermeiden. Es ist deshalb festzustellen, dass die innovative Weiterentwicklung im Bereich der Halbleitertechnologie aufs Engste mit der Verwendung leistungsfähiger em-Simulationwerkzeuge verknüpft ist.

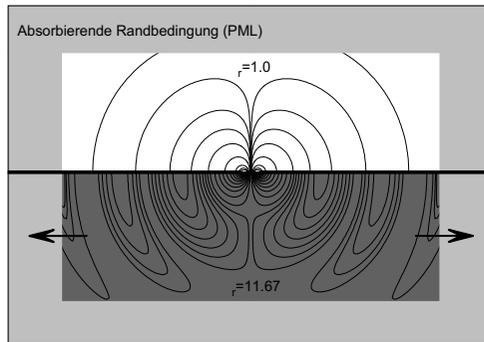
## **1.2 Bedeutung und Anwendung absorbierender Randbedingungen**

Vorraussetzung für die Anwendbarkeit der gängigen Finite-Elemente- oder Finite-Differenzen-Verfahren ist die Vorgabe fest definierter Felder an den Berandungen des finiten Rechengebietes. Klassischerweise werden hier sogenannte elektrische oder magnetische Randbedingungen vorgegeben. Allerdings ist oftmals an den Berandungen eines Rechengebietes keine rein normale (elektrische Wand) oder tangential (magnetische Wand) Ausrichtung der elektrischen Feldstärke zu erwarten. Um trotzdem die elektromagnetische Wechselwirkung der dort allokierten Felder mit dem Raum außerhalb der Berandung präzise nachbilden zu können, werden offene oder auch absorbie-

rende Randbedingungen (Absorbing Boundary Condition, ABC) verwendet, die diesen Außenraum emulieren.

Bei der elektromagnetischen Simulation von Hochfrequenzstrukturen erfüllen absorbierende Ränder zwei wesentliche Aufgaben:

Zum einen ermöglichen sie die Berechnung der Abstrahlung bei Antennen oder durch parasitäre Effekte, wie sie beispielsweise in Form von Leckwellen auf Leitungen auftreten. Der letztgenannte Sachverhalt soll anhand von Bild 1.1 verdeutlicht werden, wo eine Koplanarleitung einen Teil des hochfrequenten Eingangssignals seitlich in das Substrat abstrahlt. Es sind

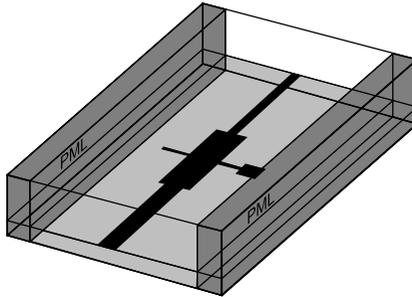


**Abbildung 1.1:** Elektrische Feldlinien einer Koplanarleitung mit unendlicher Masseausdehnung. ABC-Berandungen emulieren die unendliche Ausdehnung der Struktur.

die Feldlinien der Koplanar-mode dargestellt, aufgrund der hohen Signalfrequenz (500 GHz) wird ein wesentlicher Anteil des Eingangssignals seitlich in das Substrat abgestrahlt.

Außerdem können mit ABC's Begrenzungen des Rechengebiets realisiert werden, derart dass die Einflüsse der Berandung auf das elektrische Verhalten der untersuchten Struktur unterdrückt werden. Diesen Aspekt soll die Darstellung 1.2 verdeutlichen. Die dargestellte „Phase-Bridge“ erfordert einen Berechnungsquerschnitt dessen Breite oberhalb der halben Wellenlänge der

Betriebsfrequenz liegt. Die Verwendung von elektrischen oder magnetischen Seitenwänden würde eine Art künstlichen Hohlraumresonator erzeugen, der unerwünschte Rückwirkungen auf das elektrische Übertragungsverhalten des Wellenleiters zur Folge hätte.



**Abbildung 1.2:** Typisches Streuproblem in der Mikrowellentechnik: „Phase-Bridge“ mit Signalzuleitungen. Die Abmessungen der Kurzschluss- und Leerlauf-Stubs liegen im Bereich der halben Länge der Betriebsfrequenz. Die Struktur wird mit seitlichen ABC's berandet.

Zur Generation absorbierender Randbedingungen existieren verschiedene Ansätze. Im Falle der sogenannten offenen Randbedingungen wird ein spezieller Randwertoperator definiert, der den Einfluss der Felder im Außenraum auf die Berandung projiziert. Die Bestimmung eines solchen Operators gestaltet sich jedoch, speziell im Falle rechteckförmiger Berandungen, schwierig. Des weiteren führt die Implementierung solch offener Ränder zu einem stark erhöhten Rechenaufwand bei der Lösung mit numerischen Verfahren, da alle Feldgrößen auf dem Rand miteinander verknüpft werden müssen. Daher hat sich mittlerweile die Verwendung absorbierender Randbedingungen, bei denen die einfallenden Wellen in einem speziellen, verlustbehafteten Gebiet absorbiert werden, durchgesetzt. Dieser Ansatz der Perfectly-Matched-Layer (PML) [1] erweist sich als derzeit (2003) effektivste absorbierende Randbedingung.

## 1.3 Ziel und inhaltliche Übersicht der Arbeit

Ziel dieser Arbeit ist die Untersuchung der Eigenschaften und Grenzen der PML-Randbedingung bei Verwendung im Frequenzbereich, konkret im Rahmen der Finite-Differenzen Frequenzbereichs-Methode (Finite-Differences in Frequency-Domain, FDFD).

Einem einführenden Kapitel 2 über die Entwicklung und Herleitung absorbierender Randbedingungen im Allgemeinen und der verschiedenen PML-Ansätze im Besonderen schließt sich das Kapitel 3 mit einer Erläuterung der Grundlagen der verwendeten FDFD Methode an.

Insbesondere die Verwendung der PML-Randbedingung im Wellenleiter-Fall erweist sich als problemreich. Die laterale PML führt zu unerwarteten Veränderungen im Modenspektrum, was eine angepasste Eigenwertsuche nötig macht. Die Untersuchungen hierzu sind Bestandteil von Kapitel 4. Hier wird auch die Fragestellung gelöst, wie man die physikalischen Moden eines Wellenleiters von den unphysikalischen Moden, verursacht durch das PML berandete Rechengebiet, unterscheiden kann. Ein weiterer Aspekt ist die Genauigkeitsbetrachtung bei Berechnungen mit seitlichen PML's. Im Gegensatz zur, bereits hinlänglich untersuchten, Bestimmung der Dämpfung bei senkrechtem Welleneinfall, werden hier die PML-Eigenschaften bei streifendem Welleneinfall betrachtet.

Die erfolgreiche Implementierung der PML in den Eigenwertlöser, in Verbindung mit einem speziellen Kriterium zur Trennung physikalischer und unphysikalischer Moden, erlaubt eine genaue Untersuchung der Dispersions- und Abstrahlungseigenschaften koplanarer Wellenleiter im Terahertz-Frequenzbereich, dies wird im Kapitel 5 vorgestellt.

Das Kapitel 6 behandelt die Verwendung der PML in Verbindung mit dem dreidimensionalen FDFD-Verfahren zur Streumatrixberechnung. Es zeigt sich, dass die numerische Implementierung der Frequenzbereichs-PML Re-

striktionen hinsichtlich des Reflexionsniveaus aufweist. Diese begrenzte Genauigkeit, im Bereich von maximal  $-40\text{ dB} \dots -50\text{ dB}$ , die auch analytisch nachgewiesen wird, kann durch eine angepasste Berechnung der elektrischen und magnetischen Leitfähigkeiten innerhalb der versetzten Gitterzellen des YEE-Schemas umgangen werden. Durch diese spezielle Leitfähigkeitsberechnung gelingt es, mit 8- bis 10-lagigen, gestuften PML's Reflexionsniveaus besser als  $-80\text{ dB}$  zu erreichen. Dies zeigt die Berechnung praxisrelevanter Strukturen.

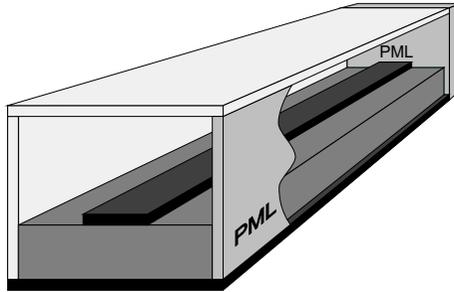
Im abschließenden Kapitel 7 werden die wesentlichen Ergebnisse dieser Arbeit noch einmal zusammengefasst, ergänzt durch einen Ausblick auf noch bestehende Fragestellungen bezüglich der Verwendung der PML mit der FDFD-Methode.

## 2 Absorbierende Randbedingungen

Die Vorgabe genau definierter Bedingungen an den Berandungen eines finiten Rechengebietes ist eine Grundvoraussetzung zur Lösung der ein Wellenleiterproblem beschreibenden, partiellen Differentialgleichung. Üblicherweise werden hier sogenannte elektrische- oder magnetische-Wände angesetzt. Auf diesen Wänden wird das tangentiale  $E$ -Feld, beziehungsweise das tangentiale  $H$ -Feld, gleich Null gesetzt ( $\vec{E}_{\text{tan}} = 0$  bzw.  $\vec{H}_{\text{tan}} = 0$ ), in der Leitungstheorie würde man von Leitungsabschlüssen mit Reflexionsfaktoren  $r = -1$  (Kurzschluss), beziehungsweise  $r = +1$  (Leerlauf) sprechen.

Eine wesentliche Ergänzung zu den erwähnten Randwertvorgaben stellt eine reflexionsfreie Randbedingung dar. Solche Ränder sollen einfallende Wellen absorbieren, man bezeichnet sie als absorbierende Randbedingungen (Absorbing Boundary Condition, ABC) oder auch offene Randbedingungen. Bei der Analogiebetrachtung zur Leitungstheorie würde man von einem angepassten Widerstand sprechen, mit  $r = 0$ . Auf einen solchen Widerstand einfallende Wellen werden terminiert.

Eine effektive ABC ermöglicht einerseits eine Verkleinerung des finiten Rechengebietes, da diese spezielle Berandung die Felder des Wellenleiters idealerweise nicht beeinträchtigt. Des weiteren ist eine ABC Grundvoraussetzung zur Berechnung von Strahlungsfeldern bei Antennen, zur Berechnung hinsichtlich der elektromagnetischen Verträglichkeit (EMV) beliebiger Geräte untereinander oder auch zur Quantisierung parasitärer, durch Leckwellen verursachter, Abstrahlungsverluste (leakage effects) bei Mikrowellenschaltungen.



**Abbildung 2.1:** Mikrostreifenleitung mit longitudinaler und lateraler absorbierender Berandung. Die laterale (seitliche) ABC begrenzt den Wellenleiterquerschnitt, während die longitudinale ABC einfallende Wellen am hinteren Ende der Leitung absorbiert.

Wie in Abbildung 2.1 angedeutet, werden ABC Randbedingungen sowohl an den Enden von Wellenleiterstrukturen als auch an den Seiten verwendet.

Die laterale ABC bei der Beispielstruktur 2.1 erfüllt zwei wichtige Aufgaben: Einerseits ermöglicht sie die Untersuchung von Abstrahlungsverlusten, welche bei höheren Frequenzen die Signalleistung dämpfen. Andererseits erlaubt die absorbierende Randbedingung einen beliebig großen Querschnitt des finiten Rechengebietes, ohne dass durch die Randbedingungen höhere Moden entstehen, die das Wellenleiterverhalten beeinflussen.

Die longitudinale PML wird insbesondere bei der FDTD Methode, also der Finite-Differenzen Methode im Zeitbereich, benötigt, um störende Reflexionen des verwendeten Zeitimpulses an den Wellenleiterenden zu vermeiden.

Prinzipiell lassen sich offene Strukturen mit Integralgleichungsansätzen berechnen, hierbei wird der offene Raum mit dem Ansatz Greenscher Funktionen auf dem Rand des Rechengebietes realisiert. Der entscheidende Nachteil dieses Verfahrens ist jedoch, dass derartige Randelemente jedes weitere äußere Randelement des Rechengebietes beeinflussen. Die schwach besetzte (sparse) Matrix, die eine sehr effektive Berechnung der Gleichungssysteme bei Finite-Differenzen- und Finite-Elemente-Methoden ermöglicht,

wird somit stark besetzt. Daher hat sich bei diesen Methoden, in den letzten Jahren, die Emulation offener Ränder mit Hilfe spezieller, räumlich begrenzter Differentialoperatoren auf den Randelementen und insbesondere die Verwendung spezieller, verlustbehafteter Außengebiete durchgesetzt. Diesen beiden Ansätzen ist gemeinsam, dass die Elementeinträge für Gitterzellen mit ABC-Eigenschaften nur ihre jeweils benachbarten Elemente beeinflussen. Die wichtige Eigenschaft der schwach besetzten Systemmatrix bleibt erhalten.

Im folgenden wird die Entwicklung verschiedener Ansätze zur Generierung absorbierender Ränder nachgezeichnet, wobei sich die Synthese von ABC's in drei verschiedene Ansätze einteilen lässt:

- Lösungsansätze die auf dem Greenschen Theorem beruhen,
- Asymptotische Näherungen des Fernfeldes mit speziellen Differentialoperatoren und
- Ansätze bei denen die einfallenden Wellen in einem speziellen verlustbehafteten Gebiet gedämpft werden.

Die prinzipielle Funktionsweise dieser Methoden wird in den folgenden Abschnitten erläutert und anhand einfacher Beispiele zur Lösung der Wellengleichung für zeitharmonische Signale verdeutlicht. Die sogenannte Perfectly-Matched-Layer (PML) Randbedingung, die derzeit (2003) effektivste ABC, wird in ihren unterschiedlichen Implementierungsansätzen vorgestellt

## 2.1 Emulation offener Randbedingungen mit dem Greenschen Theorem

Die zugrundeliegende Idee ist, die Eigenschaften eines unendlich ausgedehnten Volumens  $V$  außerhalb des finiten Rechengebietes mit Hilfe des Greenschen Theorems

$$\iiint_V [\Delta u w - \Delta w u] dV = \iint_A \left[ \frac{\partial u}{\partial n} w - \frac{\partial w}{\partial n} u \right] dA,$$

auf die Berandung  $A$  dieses Rechengebietes zu projizieren. Während die Variable  $u$  für eine beliebige Feldgröße der Ausgangsdifferentialgleichung steht, kennzeichnet die Variable  $w$  die Greensche-Funktion. Solche Greenschen- oder auch Singularitätsfunktionen existieren für eine Vielzahl partieller Differentialgleichungen in verschiedenen  $n$ -dimensionalen Koordinatensystemen und erlauben eine analytisch exakte Berechnung der Feldgrößen  $u$  auf der Berandung, die dort einen unendlich ausgedehnten Außenraum emulieren. Die Anwendung dieses Ansatzes auf die Helmholtz-Gleichung erlaubt es beispielsweise, ein unendlich ausgedehntes Außenvolumen  $V_a$  auf eine kugelförmige Flächenberandung  $A$  umzurechnen, es gilt

$$\iiint_{V_a} [\nabla^2 w + k^2 w] u dV = \iint_A [u \nabla w - \nabla u w] dA = 0, \quad (2.1)$$

mit  $w = \frac{1}{4\pi r} e^{-jkr}$ .

Die Verwendung dieses Verfahrens mit Finite-Differenzen Methoden erweist sich jedoch als nicht effektiv. Zum einen existieren für die typischerweise rechteckförmigen Begrenzungen von Finite-Differenzen Gittern keine passenden Greenschen-Funktionen. Dieser Problematik könnte man noch mit der Verwendung von Interpolationsansätzen begegnen. Das Hauptproblem bei der Verwendung dieses Verfahrens besteht jedoch darin, dass die ermittelten Randwert-Feldgrößen alle miteinander verknüpft sind. Während bei konventionellen FD- oder auch FEM-Verfahren die Felder aller Gitterzellen nur mit

den Feldgrößen der jeweils benachbarten Zellen verknüpft sind und somit schwach besetzte, diagonaldominante Systemmatrizen entstehen, erhält man bei Green-Theorem basierten Ansätzen stark besetzte Gleichungssysteme die im allgemeinen nicht mit vertretbarem Aufwand zu lösen sind.

## 2.2 Asymptotische Näherung des Fernfeldes mit Differentialoperatoren

Ausgangspunkt dieser Methode zur Erzeugung eines absorbierenden Randes ist die Strahlungsbedingung von Sommerfeld. Diese Bedingung soll hier, ebenfalls am Beispiel der Helmholtz-Gleichung, hergeleitet werden. Setzt man die Greensche Funktion für sphärische Kugelkoordinaten in das Flächenintegral (2.1) der Felder auf der Berandung  $A$  ein, kombiniert mit der Überlegung, dass alle Felder im Unendlichen zu Null werden ( $u(r \rightarrow \infty) = 0$ ), so erhält man

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \iint -\frac{1}{4\pi} e^{-jkr} ([\nabla u + jku] r + u) d\theta d\phi \equiv 0.$$

Damit diese Forderung erfüllt ist, muss gelten:

$$r [\nabla u + jku] \rightarrow 0 \text{ für } r \rightarrow \infty. \quad (2.2)$$

Dies entspricht der Sommerfeldschen Strahlungsbedingung für sphärische Koordinaten bei zeitharmonischen Signalen. Der partielle Differentialoperator

$$L \equiv [\nabla + jk], \quad (2.3)$$

lässt sich auf die Felder radialer Kugelwellen anwenden. Die Feldgrößen dieses Wellentyps sind, im Reihenansatz, gegeben durch

$$u = e^{-jkr} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{p_n(\vartheta, \varphi)}{r^n} = e^{-jkr} \frac{p_1(\vartheta, \varphi)}{r} + e^{-jkr} \frac{p_2(\vartheta, \varphi)}{r^2} + \dots \quad (2.4)$$



entwickelt, der für die zweidimensionale Wellengleichung in kartesischen Koordinaten gegeben ist mit

$$L_{\text{EM}}^{\mp} \equiv \frac{\partial}{\partial x} \mp jk \sqrt{1 - \left( \frac{\partial/\partial y}{jk} \right)^2}. \quad (2.5)$$

Um diesen Operator numerisch effektiv zu implementieren, muss der Wurzel­ausdruck aus (2.5) in eine entsprechende Taylorreihe entwickelt werden.

Eine effektive Implementierung des  $L_{\text{EM}}$  Differential-Operators in zwei- und dreidimensionale Finite-Differenzen Schemata wurde von Mur [4] hergeleitet. Entsprechend der Approximation des Wurzel­ausdrucks aus (2.5) mit den Termen der Taylorreihe spricht man von Mur ABC's erster, beziehungsweise zweiter Ordnung. Eine ausführliche Auflistung der Finite-Differenzen Ausdrücke für die Ableitungen an den verschiedenen Berandungen bei der Implementierung in FDTD-Programme liefert beispielsweise [5].

Es zeigt sich, dass bei analytisch berechenbaren Gebieten mit rotations­symmetrischen Berandungen die  $L_{\text{BT}}$ -Operator basierte ABC sehr gute Absorptionseigenschaften aufweist. Das gilt insbesondere, wenn man einen Operator zweiter oder sogar noch höherer Ordnung implementiert hat. Bei praxis­relevanten Strukturberechnungen muss jedoch der Diskretisierungsfehler mit einbezogen werden. Hierbei zeigt sich, dass die Diskretisierung des Rechengebietes die Absorptionseigenschaften eklatant verschlechtert [6] [7]. Hierfür ist insbesondere die numerische Dispersion, also die Abweichung zwischen der diskret berechneten Wellenzahl  $k_{z,\text{numerisch}}$  und der „richtigen“ Wellenzahl  $k_{z,\text{analytisch}}$  im Kontinuum verantwortlich. Der Einfluss dieser Gitterdispersion ist bei Berechnungen mit ABC-Rändern wesentlich stärker, als numerische Untersuchungen mit diskretisierten Gebieten ohne spezielle Randbedingungen [8] erwarten lassen würden. Das bedeutet, dass man sehr feine Gitter verwenden muss, anderenfalls kann man die ABC beliebig weit von der Streuquelle entfernt anbringen, der Fehler wird immer unakzeptabel hoch sein. Des weiteren ist festzustellen, dass Fehler durch die ABC stark vom Verhältnis

der geometrischen Abmessungen des Berechnungsgebietes zur Wellenlänge abhängen. Tendenziell verschlechtert sich die Wirkung der ABC mit steigendem Verhältnis zwischen Rechengebietsquerschnitt zur Wellenlänge. Dieses Verhalten weisen auch analytisch berechnete Strukturen mit ABC-Rand auf. Erst eine Implementierung eines Differentialoperators höherer Ordnung würde wieder auf eine akzeptable Fehlerordnung führen. Schließlich beeinflussen auch Wellentyp und Einfallswinkel der Welle die Wirkung der ABC.

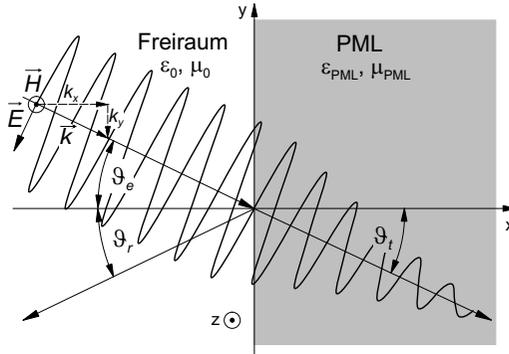
Die hier aufgelisteten Einschränkungen, verbunden mit den zusätzlichen Genauigkeitseinbußen, die sich durch die Abbildung des  $L$ -Operators für rotationssymmetrische Ränder auf beliebig geformte (bei FD-Verfahren auf kartesische) Berandungen ergeben, haben dazu geführt, dass mittlerweile in vielen praxisrelevanten numerischen Verfahren die wesentlich effektivere PML-Randbedingung, zumindest optional, implementiert ist. Diese räumlich ausgedehnte ABC wird im folgenden Abschnitt näher beschrieben.

## 2.3 PML als absorbierende Randbedingung

Die sogenannte Perfectly-Matched-Layer (PML) Formulierung, welche Berenger [1] im Jahr 1984 erstmalig veröffentlichte, stellt die derzeit wohl effektivste absorbierende Randbedingung dar. Herausragende Eigenschaft dieser Formulierung ist die winkel- und frequenzunabhängige Absorption einfallender Wellen.

### 2.3.1 Herleitung der PML-Formulierung

Die PML-Randbedingung funktioniert derart, dass eine auf den PML Rand einfallende Wellenfront die Grenzfläche Freiraum–PML reflexionsfrei passiert. In dem verlustbehafteten PML-Medium wird die Energie der Welle dann absorbiert, vergleiche Abbildung 2.2. An dieser Stelle sei bereits dar-



**Abbildung 2.2:** Einfall einer  $TE_z$ -Welle auf ein ideal absorbierendes PML-Gebiet.

auf hingewiesen, dass bei der numerischen Implementierung der PML gewisse Einschränkungen auftreten. Zum einen ist der Übergang Freiraum – PML nicht völlig reflexionsfrei realisierbar. Zum anderen ist der PML Halbraum nicht unendlich ausgedehnt. An der die PML terminierenden (elektrischen) Wand findet eine Reflexion der durch das verlustbehaftete Material abgedämpften Wellenfront statt. Beide Effekte werden im Rahmen dieser Arbeit qualitativ und quantitativ klassifiziert.

Um die notwendige Anpassung des Wellenwiderstands im verlustbehafteten PML-Gebiet an den Freiraumwellenwiderstand zu gewährleisten muss die Bedingung

$$\frac{\kappa^*}{\mu_0} = \frac{\kappa}{\varepsilon_0} \quad (2.6)$$

erfüllt sein. Es ist also eine künstliche magnetische Leitfähigkeit  $\kappa^*$ , gemäss  $j\omega\mu_{\text{PML}}\vec{H} = j\omega\mu_0\vec{H} + \kappa^*\vec{H}$  zu definieren.

Die Herleitung der konstitutiven Parameter für einen perfekt absorbierenden Rand gelingt mit Hilfe des bekannten Ansatzes für TE/TM Wellen, unter Berücksichtigung der Stetigkeitsbedingungen an Grenzflächen. Dies soll hier am Beispiel einer unter dem Winkel  $\vartheta_e$  auf die Grenzfläche Freiraum – PML

einfallenden TE-Welle demonstriert werden. Für die magnetische Feldstärke  $H_z$  der einfallenden, reflektierten und transmittierten TE-Welle, gemäss Abbildung 2.2, gilt

$$\begin{aligned}\vec{H}_e &= \vec{e}_z \cdot H_0 \cdot e^{-jk_0(x \cdot \cos \vartheta_e - y \cdot \sin \vartheta_e)}, \\ \vec{H}_r &= \vec{e}_z \cdot R^{\text{TE}} \cdot H_0 \cdot e^{-jk_0(-x \cdot \cos \vartheta_r - y \cdot \sin \vartheta_r)}, \\ \vec{H}_t &= \vec{e}_z \cdot T^{\text{TE}} \cdot H_0 \cdot e^{-j(k_{x,\text{PML}} \cdot x + k_{y,\text{PML}} \cdot y)},\end{aligned}\quad (2.7)$$

wobei  $R^{\text{TE}}$  und  $T^{\text{TE}}$  den Reflexions- und Transmissionsfaktor der TE-Welle bezeichnen. Mit  $k_0$  wird die Freiraumwellenzahl bezeichnet und mit  $k_{x,y,\text{PML}}$  die Wellenzahlen innerhalb des PML Gebietes. Hierbei muss die Größe  $k_{y,\text{PML}} = k_0 \cdot \sin \vartheta_e$  entsprechen, während für die Ausbreitungskonstante in Dämpfungsrichtung  $k_{x,\text{PML}} = k_0(1 - j\kappa/(\omega\varepsilon_0)) \cdot \cos \vartheta_e$  anzusetzen ist. Über die erste Maxwell-Gleichung ergeben sich aus den Gleichungen (2.7) die  $E_x$ - und  $E_y$ -Komponenten der elektrischen Feldstärke

$$\begin{aligned}\vec{E}_e &= [\vec{e}_x \sin \vartheta_e + \vec{e}_y \cos \vartheta_e] \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} H_0 e^{-jk_0(x \cdot \cos \vartheta_e - y \cdot \sin \vartheta_e)}, \\ \vec{E}_r &= [\vec{e}_x \sin \vartheta_r - \vec{e}_y \cos \vartheta_r] R^{\text{TE}} \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} H_0 e^{-jk_0(-x \cdot \cos \vartheta_r - y \cdot \sin \vartheta_r)}, \\ \vec{E}_t &= \left[ \vec{e}_x \frac{-k_{y,\text{PML}}}{\omega\varepsilon_{x,\text{PML}}} + \vec{e}_y \frac{k_{x,\text{PML}}}{\omega\varepsilon_{y,\text{PML}}} \right] \cdot T^{\text{TE}} H_0 e^{-j(k_{x,\text{PML}} \cdot x + k_{y,\text{PML}} \cdot y)}.\end{aligned}\quad (2.8)$$

Die magnetische Feldstärke besitzt im gesamten Raum nur eine  $z$ -Komponente. Diese Tangentialkomponente muss an der Grenzschicht  $x = 0$  stetig sein. Aus den Gleichungen (2.7) erhält man somit die erste Amplitudenbedingung

$$1 + R^{\text{TE}} = T^{\text{TE}}. \quad (2.9)$$

Die Phasenbedingung aus den Gleichungen (2.7), unter der Annahme das  $k_{y,\text{PML}} = k_0 \cdot \sin \vartheta_e$  ist, lautet

$$\vartheta_e = \vartheta_r = \vartheta_t. \quad (2.10)$$

Des Weiteren muss die Tangentialkomponente der elektrischen Feldstärke, also die  $y$ -Komponente, an der Grenzfläche stetig verlaufen. Man erhält mit den Gleichungen (2.8) eine zweite Amplitudenbedingung

$$\frac{k_x \text{PML}}{\omega \varepsilon_y \text{PML}} T^{\text{TE}} = \cos \vartheta_e \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} (1 - R^{\text{TE}}). \quad (2.11)$$

Mit den beiden Amplitudenbedingungen (2.9), (2.11) und der Phasenbedingung (2.10), folgt für die Reflexion an der Grenzfläche

$$R^{\text{TE}} = \frac{\cos \vartheta_e \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} - \frac{k_x \text{PML}}{\omega \varepsilon_y \text{PML}}}{\cos \vartheta_e \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} + \frac{k_x \text{PML}}{\omega \varepsilon_y \text{PML}}}. \quad (2.12)$$

Setzt man nun für die Ausbreitungskonstante und die Permittivität im PML-Gebiet

$$k_x \text{PML} = k_0 \left(1 - j \frac{\kappa}{\omega \varepsilon_0}\right) \cdot \cos \vartheta_e \quad \text{und} \quad \varepsilon_y \text{PML} = \varepsilon_0 \left(1 - j \frac{\kappa}{\omega \varepsilon_0}\right)$$

an, so folgt, dass die Forderung  $R^{\text{TE}} = 0$  für Gleichung (2.12) für alle Frequenzen und Einfallswinkel erfüllt ist.

Für die Anpassung der Materialeigenschaften im PML-Medium existieren mehrere Ansätze, die darauf beruhen durch die Einführung zusätzlicher Freiheitsgrade beim Aufstellen der Wellengleichung eine Anpassung der komplexen PML-Wellenzahl an die Freiraum-Wellenzahl zu ermöglichen. Bei der PML-Formulierung gemäss [1] wird dies durch eine Aufspaltung einzelner Feldstärken erreicht. Alternativ hierzu kann man diese Feldaufteilung durch die Definition komplexer Raumkoordinaten oder durch die Verwendung anisotroper Materialeigenschaften umgehen. Sowohl die sogenannte „split-field“- , als auch die beiden „un-split“-PML-Formulierungen werden in den folgenden Abschnitten vorgestellt.

### 2.3.2 PML in der „split-field“ Formulierung

Beim ursprünglichen „split-field“ Ansatz von Berenger [1] wird der reflexionsfreie Übergang vom Freiraum in den verlustbehafteten PML-Bereich durch eine Aufspaltung der  $E$ - beziehungsweise der  $H$ -Felder erreicht. Die Wirkungsweise dieses PML-Ansatzes soll hier verdeutlicht werden anhand der TE-Welle, die auf eine in  $x$ -Richtung wirksame PML auftrifft, vergleiche Abbildung 2.2. Das ursprüngliche  $H_z$ -Feld muss bei dieser PML Herleitung in zwei Komponenten zerlegt werden, so dass gilt  $H'_z = H_{zx} + H_{zy}$ . Die Maxwell Gleichungen I und II werden entsprechend modifiziert und man erhält

$$\text{rot } \vec{H} = j\omega\varepsilon_0 \vec{E} + \kappa \vec{E} \Rightarrow \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & 0 & H'_z \end{vmatrix} = j\omega\varepsilon_0 \begin{pmatrix} \left(1 - j\frac{\kappa_x}{\omega\varepsilon_0}\right) E_x \\ \left(1 - j\frac{\kappa_y}{\omega\varepsilon_0}\right) E_y \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial(H_{zx} + H_{zy})}{\partial y} = j\omega\varepsilon_0 \left(1 - j\frac{\kappa_x}{\omega\varepsilon_0}\right) E_x, & (2.13) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial(H_{zx} + H_{zy})}{\partial x} = j\omega\varepsilon_0 \left(1 - j\frac{\kappa_y}{\omega\varepsilon_0}\right) E_y & (2.14) \end{cases}$$

und

$$\text{rot } \vec{E} = -j\omega\mu_0 \vec{H} - \kappa^* \vec{H} \Rightarrow \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E_x & E_y & 0 \end{vmatrix} = j\omega\mu_0 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \left(1 - j\frac{\kappa_z^*}{\omega\mu_0}\right) H'_z \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} -\frac{\partial E_y}{\partial x} = j\omega\mu_0 \left(1 - j\frac{\kappa_x^*}{\omega\mu_0}\right) H_{zx}, & (2.15) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial E_x}{\partial y} = j\omega\mu_0 \left(1 - j\frac{\kappa_y^*}{\omega\mu_0}\right) H_{zy}. & (2.16) \end{cases}$$

Mit den Feldkomponenten

$$\begin{aligned} E_x &= -E_0 \sin \vartheta e^{-j\omega(k_x x + k_y y)}, & E_y &= E_0 \cos \vartheta e^{-j\omega(k_x x + k_y y)}, \\ H_{zx} &= -H_{zx0} e^{-j\omega(k_x x + k_y y)}, & H_{zy} &= H_{zx0} e^{-j\omega(k_x x + k_y y)}, \end{aligned} \quad (2.17)$$

sowie der Annahme, dass die PML nur in  $x$ -Richtung wirksam sein soll, also  $\kappa_y = 0$  ist, folgt für die modifizierten Maxwell Gleichungen (2.13)...(2.16):

$$\varepsilon_0 E_0 \sin \vartheta = k_y (H_{zx0} + H_{zy0}) , \quad (2.18)$$

$$\varepsilon_0 \left( 1 - j \frac{\kappa_x}{\omega \varepsilon_0} \right) E_0 \cos \vartheta = k_x (H_{zx0} + H_{zy0}) , \quad (2.19)$$

$$\mu_0 \left( 1 - j \frac{\kappa_x}{\omega \varepsilon_0} \right) H_{zx0} = k_x E_0 \cos \vartheta , \quad (2.20)$$

$$\mu_0 H_{zy0} = k_y E_0 \sin \vartheta . \quad (2.21)$$

Die Gleichungen (2.20), (2.21) werden nun nach  $H_{zx0}$  beziehungsweise  $H_{zy0}$  aufgelöst und mit (2.18), (2.19) kann man nun gemäss [9] das Verhältnis der Komponenten der Ausbreitungskonstanten im PML Gebiet bilden:

$$\frac{k_y}{k_x} = \frac{\sin \vartheta}{\left( 1 - j \frac{\kappa_x}{\omega \varepsilon_0} \right) \cos \vartheta} . \quad (2.22)$$

Mit dem Verhältnis (2.22) berechnen sich nun mit den Gleichungen (2.18) und (2.19) die Komponenten der Ausbreitungskonstanten zu

$$k_x = \sqrt{\varepsilon_0 \mu_0} \left( 1 - j \frac{\kappa_x}{\omega \varepsilon_0} \right) \cos \vartheta , \quad k_y = \sqrt{\varepsilon_0 \mu_0} \sin \vartheta . \quad (2.23)$$

Für die Feldkomponenten der Wellen, die sich im PML Medium ausbreiten, Gleichungen (2.17), folgt somit

$$\Psi = \Psi_0 \underbrace{e^{-j\omega\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}(x \cos \vartheta + y \sin \vartheta)}}_{\text{Ausbreitung im Freiraum}} \underbrace{e^{\sqrt{\mu_0/\varepsilon_0} \kappa_x x \cos \vartheta}}_{\text{Dämpfung}} , \quad (2.24)$$

wobei die Variable  $\Psi$  stellvertretend für die elektrischen und magnetischen Feldkomponenten  $E_x, E_y, H_{zx}$  und  $H_{zy}$  steht. Die Herleitung für die Wellenausbreitung zweidimensionaler TM-Wellen beziehungsweise für die dreidimensionale Wellenausbreitung erfolgt analog zum hier betrachteten Spezialfall der TE-Welle in der  $x, y$ -Ebene.

Ein Nachteil des split-field Ansatzes ist, dass die Feldkomponenten der Maxwell-Gleichungen aufgespaltet werden müssen. Bei der Implementierung dieser PML in ein numerisches Verfahren hat dieser Ansatz daher eine erhöhte Anzahl zu speichernder Feldgrößen zur Folge. Diesen Nachteil vermeidet die im folgenden Abschnitt vorgestellte PML-Formulierung.

### 2.3.3 PML in der „stretched-coordinates“ Formulierung

Beim sogenannten „stretched-coordinates“ Ansatz [10] [11] werden die Richtungsvektoren  $\vec{e}_x$ ,  $\vec{e}_y$  und  $\vec{e}_z$  mit komplexen Faktoren  $S_x$ ,  $S_y$  und  $S_z$  multipliziert, die Koordinatengrößen werden also um diesen Faktor gestreckt. Durch eine geschickte Wahl dieser Streckfaktoren kann die angestrebte Reflexionsfreiheit garantiert werden, ohne dass eine Aufspaltung der Felder nötig wird. Für den hier betrachteten Fall der TE-Welle, vergleiche Abbildung (2.2), wird die  $x$ -Koordinate durch eine komplexe Raumkoordinate  $x'$  ersetzt, mit

$$x' = x \left( 1 - j \frac{\kappa}{\omega \varepsilon_0} \right). \quad (2.25)$$

Wiederum wird vereinfachend angenommen, dass die PML lediglich in  $x$ -Richtung wirksam sein soll. Dann ergeben sich die ersten beiden Maxwell-Gleichungen unter Berücksichtigung der komplexen Transformation der  $x$ -Koordinate zu

$$\text{rot } \vec{H} = j\omega\varepsilon_0 \vec{E} \quad \Rightarrow \quad \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ \left(1 - j \frac{\kappa}{\omega\varepsilon_0}\right)^{-1} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & 0 & H_z \end{vmatrix} = j\omega\varepsilon_0 \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial H_z}{\partial y} = j\omega\varepsilon_0 E_x, \\ -\frac{\partial H_z}{\partial x} \left( \frac{1}{1 - j \frac{\kappa}{\omega\varepsilon_0}} \right) = j\omega\varepsilon_0 E_y \end{array} \right. \quad (2.26)$$

$$- \frac{\partial H_z}{\partial x} \left( \frac{1}{1 - j \frac{\kappa}{\omega\varepsilon_0}} \right) = j\omega\varepsilon_0 E_y \quad (2.27)$$

und

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{E} = -j\omega\mu_0 \vec{H} &\Rightarrow \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ \left(1 - j\frac{\kappa}{\omega\varepsilon_0}\right)^{-1} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E_x & E_y & 0 \end{vmatrix} = j\omega\mu_0 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ H_z \end{pmatrix} \\ &\Rightarrow \frac{\partial E_y}{\partial x} \left( \frac{1}{1 - j\frac{\kappa}{\omega\varepsilon_0}} \right) - \frac{\partial E_x}{\partial y} = j\omega\mu_0 H_z. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Mit den nun nicht mehr aufgespalteten Feldkomponenten

$$\begin{aligned} E_x &= -E_0 \sin \vartheta e^{-j\omega(k_x x + k_y y)}, & E_y &= E_0 \cos \vartheta e^{-j\omega(k_x x + k_y y)}, \\ H_z &= -H_0 e^{-j\omega(k_x x + k_y y)}, \end{aligned} \quad (2.29)$$

lässt sich wiederum das Verhältnis zwischen den Komponenten der Ausbreitungskonstanten herleiten. Dieses Verhältnis ergibt sich zu

$$\frac{k_y}{k_x} = \frac{\sin \vartheta}{\left(1 - j\frac{\kappa}{\omega\varepsilon_0}\right) \cos \vartheta}, \quad (2.30)$$

es ist also identisch mit dem Ergebnis (2.22) des split-field Ansatzes. Somit wird auch das Ergebnis für die Feldstärken im PML Gebiet identisch zu dem Resultat des split-field Ansatzes, siehe Gleichung (2.24).

Die PML kann also auch implementiert werden, ohne die Felder in Unterkomponenten aufzuteilen. Dies gelingt bei dem hier vorgestellten Ansatz durch eine Multiplikation derjenigen Raumkoordinate welche in Dämpfungsrichtung der PML liegt mit einem komplexen Faktor. Vorteil dieser Formulierung gegenüber dem Berenger-Ansatz ist zum einen der nun wieder reduzierte Speicherbedarf, außerdem bleiben die Original Maxwell-Gleichungen erhalten. Allerdings sind bei der Implementierung des stretched-coordinates Ansatzes die Raumkoordinaten als komplexe Größen anzunehmen, hierfür gibt es keine physikalischen Entsprechungen. Auch die Portierung der komplex gestreckten, kartesischen Koordinaten in andere Koordinatensysteme ge-

staltet sich schwierig. Diese Nachteile umgeht eine weitere, alternative PML-Implementierung, die auf einer geschickten Wahl anisotroper Permittivitäten und Permeabilitäten beruht. Diese PML wird im folgenden Abschnitt vorgestellt.

### 2.3.4 Die uniaxiale PML-Formulierung

Der uniaxialen PML-Formulierung [12] liegt die Einführung eines Diagonal-Tensors mit anisotropen, komplexen Materialeinträgen zugrunde. Ausgehend von den Maxwell-Gleichungen I und II für anisotrope, verlustbehaftete Medien

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{H} &= j\omega\varepsilon [\Lambda] \vec{E} \\ \operatorname{rot} \vec{E} &= -j\omega\mu [\Lambda] \vec{H} \end{aligned} \quad \text{mit} \quad [\Lambda] = \begin{bmatrix} \underline{a} & 0 & 0 \\ 0 & \underline{b} & 0 \\ 0 & 0 & \underline{c} \end{bmatrix},$$

gilt es nun, die Tensoreinträge  $\underline{a}$ ,  $\underline{b}$  und  $\underline{c}$  derart festzulegen, dass beim Übergang Freiraum – PML keine Reflexionen entstehen. Dies gelingt für die  $x$ -gerichtete PML gemäss Abbildung 2.2 mit dem Tensor

$$[\Lambda]_x = \begin{bmatrix} \eta^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & \eta & 0 \\ 0 & 0 & \eta \end{bmatrix}, \quad \text{mit} \quad \eta = 1 - j \frac{\kappa}{\omega\varepsilon_0}. \quad (2.31)$$

Um diesen Ansatz mit den Herleitungen für die split-field und die stretched-coordinates PML vergleichen zu können, ersetzt man

$$\vec{E}' = [\Lambda]^{1/2} \vec{E}, \quad \vec{H}' = [\Lambda]^{1/2} \vec{H} \quad \text{und} \quad \vec{k}' = \frac{1}{\sqrt{\eta}} [\Lambda]^{1/2} \vec{k}.$$

Nun kann man wiederum die Ansatzfunktionen für die isotrope Wellengleichung

$$\begin{aligned} E'_x &= -E_0 \sin \vartheta e^{-j\omega(k'_x x + k'_y y)}, & E'_y &= E_0 \cos \vartheta e^{-j\omega(k'_x x + k'_y y)}, \\ H'_z &= -H_0 e^{-j\omega(k'_x x + k'_y y)}, \end{aligned} \quad (2.32)$$

verwenden. Diese werden in die Maxwell-Gleichungen

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{H}' = j\omega\varepsilon_0 \vec{E}' &\Rightarrow \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & 0 & H'_z \end{vmatrix} = j\omega\varepsilon_0 \begin{pmatrix} E'_x \\ E'_y \\ 0 \end{pmatrix} \\ &\Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial H'_z}{\partial y} = j\omega\varepsilon_0 E'_x, \\ -\frac{\partial H'_z}{\partial x} = j\omega\varepsilon_0 E'_y \end{cases} \end{aligned} \quad (2.33)$$

und

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{E}' = -j\omega\mu_0 \vec{H}' &\Rightarrow \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E'_x & E'_y & 0 \end{vmatrix} = j\omega\mu_0 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ H'_z \end{pmatrix} \\ &\Rightarrow \frac{\partial E'_y}{\partial x} - \frac{\partial E'_x}{\partial y} = j\omega\mu_0 H'_z, \end{aligned} \quad (2.35)$$

eingesetzt und wie bei der Herleitung zur Berenger PML wird hieraus wiederum das Verhältnis der Komponenten der Ausbreitungskonstanten gebildet.

Man erhält

$$\frac{k'_y}{k'_x} = \frac{\sin \vartheta}{\cos \vartheta},$$

beziehungsweise mit

$$k'_y = k_y \quad \text{und} \quad k'_x = \eta^{-1} k_x \Rightarrow \frac{k_y}{k_x} = \frac{\sin \vartheta}{\left(1 - j \frac{\kappa}{\omega\varepsilon_0}\right) \cos \vartheta}.$$

Die Komponenten der Ausbreitungskonstanten sind somit identisch zu denen der beiden zuvor vorgestellten PML Ansätze. Das selbe gilt natürlich auch für die Komponenten der Feldstärken, vergleiche Gleichung (2.24).

Die Vorteile des hier vorgestellten Ansatzes liegen darin begründet, dass er die Maxwell-Gleichungen nicht verändert. Die Implementierung der PML Eigenschaften als anisotrope, komplexe Permittivitäts- beziehungsweise Permeabilitätstensoren erscheint „physikalischer“ als die künstliche Aufspaltung

der Feldkomponenten oder auch die Annahme der Raumkoordinaten als komplexe Größen. Die Implementierung dieses Ansatzes in numerische Software, die bereits komplexe und anisotrope Materialeigenschaften berücksichtigen kann, ist relativ einfach. Hierbei ist lediglich zu beachten, dass auch magnetische Verluste ( $\kappa^*$ ) zu berücksichtigen sind. Außerdem sei noch darauf hingewiesen, dass der Eintrag  $\eta^{-1}$  im uniaxialen PML-Tensor, negative Leitfähigkeitswerte generiert. Die PML wirkt somit in dieser Raumrichtung als aktives Medium<sup>1</sup>. Diese Eigenschaft wurde von [13] auch für die split-field-PML beobachtet.

Die Verwendung der uniaxialen PML, auch in geschichteten oder verlustbehafteten Substraten, sowie die Überlappung von PML's mit verschiedenen Wirkrichtungen ist einfach zu realisieren. Der, beziehungsweise im Falle überlappender PML's, die  $\Lambda$ -Tensoren werden einfach zu den (komplexen)  $\varepsilon$ - und  $\mu$ -Werten des entsprechenden Substrates hinzumultipliziert.

Aufgrund der hier aufgelisteten Vorzüge der uniaxialen PML, wurde diese für die Verwendung mit dem FDFD-Programm F3D gewählt. Die Restriktionen und Besonderheiten, die bei numerischen zweidimensionalen und dreidimensionalen FDFD-Berechnungen mit dieser absorbierenden Randbedingung auftreten, behandeln separate Kapitel.

---

<sup>1</sup>Das kann bei der Modenberechnung zu unphysikalischen Ergebnissen führen. Dieser Aspekt wird im Kapitel 4.3 thematisiert.

### 3 Die FDFD-Methode

Dem Programmpaket „F3D“ des Ferdinand-Braun-Instituts liegt die Technik der Finiten Integration (Finite Integration Technique, FIT), gemäss [14], [15], zugrunde. Dabei werden die Maxwell'schen Gleichungen in Integralform auf die Elementarzelle angewandt. Die Vorteile des FIT-Ansatzes liegen in der direkten Transformation der Maxwell-Gleichungen in entsprechende Gitter-Maxwell-Gleichungen. Die integral formulierten Maxwell-Gleichungen, für zeitharmonische Signale, werden dabei wie folgt diskretisiert:

**Maxwell I** (Durchflutungssatz),      **Maxwell II** (Induktionsgesetz),

$$\oint_{\partial A} \frac{\vec{B}}{[\mu]} d\vec{s} = \iint_A j\omega[\varepsilon]\vec{E}d\vec{A} \qquad \oint_{\partial A} \vec{E}d\vec{s} = - \iint_A j\omega\vec{B}d\vec{A}$$

$$\Rightarrow A^T D_{s/\mu} \vec{b} = j\omega\varepsilon_0\mu_0 D_{A_\mu} \vec{e} \ , \qquad \Rightarrow AD_s \vec{e} = -j\omega D_{A_\mu} \vec{b} \ ,$$

**Maxwell III** (Verschiebungsstromdichte, ohne elektrische Quellen)      **Maxwell IV** (Magnetische Flussdichte)

$$\oiint_{\partial V} [\varepsilon]\vec{E}d\vec{A} = 0 \qquad \oiint_{\partial V} [\mu]\vec{H}d\vec{A} = 0$$

$$\Rightarrow BD_{A_\varepsilon} \vec{e} = 0 \ , \qquad \Rightarrow \tilde{B}D_{A_\mu} \vec{b} = 0 \ .$$

Hierbei enthalten die Vektoren  $\vec{e}$  und  $\vec{b}$  die Komponenten der elektrischen Feldstärke, beziehungsweise der magnetischen Flussdichte, innerhalb der jeweiligen Elementarzelle. Die Diagonal-Matrizen  $D_{s/\mu}$ ,  $D_{A_\mu}$  und  $D_{A_\varepsilon}$  beinhalten Informationen über die Elementarzellengrößen, sowie deren Materialfüllung, während die Matrizen  $A$ ,  $B$  und  $\tilde{B}$  die Eigenschaften der Umlaufintegrale wiedergeben.

Die FIT arbeitet mit integralen Zustandsgrößen. Das heißt, anstelle von elektrischen und magnetischen Feldern wird im Grunde mit integralen Größen, sogenannten elektrischen Gitterspannungen und magnetischen Gitterflüssen, gerechnet. Dieser Ansatz erlaubt eine näherungsfreie Darstellung der Gitter-Maxwell-Gleichungen, es müssen lediglich Näherungen bei der Diskretisierung der Materialgrößen

$$\vec{d} = D_\epsilon \vec{e}, \quad \vec{j} = D_\kappa \vec{e}, \quad \vec{h} = D_\mu^{-1} \vec{b},$$

angenommen werden. Erst bei der abschließenden Umwandlung der berechneten integralen Zustandsgrößen in die entsprechenden Feldwerte müssen die ermittelten Spannungen und Flüsse durch die Gitterabmessungen geteilt werden.

Demgegenüber werden beim klassischen Finite-Differenzen Ansatz zunächst die partiellen Differentialgleichungen im entsprechenden Koordinatensystem hergeleitet und dann diskretisiert. Das resultierende Differenzgleichungssystem stellt somit, in räumlicher Ausdehnung und Materialbelegung, nur eine Näherungslösung dar.

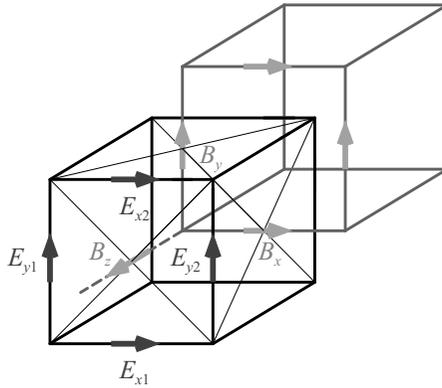
Wie von Weiland [16] nachgewiesen, erfüllt das Gitter-Gleichungssystem dieselben wichtigen analytischen Eigenschaften wie das kontinuierliche Maxwell-Gleichungssystem. So ermöglicht beispielsweise die Vektoridentität  $\text{div } \vec{d} = 0$  eine leichte Detektion nicht physikalischer Lösungen, die bei Eigenwertberechnungen längshomogener Wellenleiter auftreten. Solche Geistermoden („spurious Modes“) entstehen durch das Eliminieren statischer Lösungen, erfüllen dann aber nicht die Forderung, dass die Felder quellenfrei sind. Bei Diskretisierungsmethoden, die diese Vektoridentität nicht implizit erfüllen, wie zum Beispiel bestimmte Formulierungen der Finite-Elemente Methode (FEM), müssen diese Geister-Moden durch mehrfach wiederholte, modifizierte Eigenwertberechnungen detektiert und dann aussortiert werden.

Das Programmpaket F3D basiert auf der Frequenzbereichsformulierung der FIT, um das Streuverhalten ( $S$ -Parameter) beliebig gearteter Wellenleiterstrukturen zu berechnen. Es werden ausschließlich kartesische Gitterzellen mit homogener Materialfüllung innerhalb der jeweiligen Zelle verwendet. Diese Materialien können dielektrische und ohmsche Verluste aufweisen, außerdem sind anisotrope Materialeigenschaften zulässig.

Ein wichtiges Argument für die Verwendung der Frequenzbereichsformulierung ist die differenzierte Erfassung des frequenzabhängigen Verhaltens von Leitfähigkeiten. Des weiteren kann, bei inhomogenen Medien im Strukturquerschnitt, die Modenorthogonalität bei Zeitbereichsverfahren nicht garantiert werden. Dies gilt insbesondere für die Berechnung stark dispersiver Wellenleiter. Bei dem Frequenzbereichsverfahren ist die Orthogonalität aller, in der Streumatrix berücksichtigten Moden sichergestellt. Das erlaubt einerseits eine sichere Trennung der einzelnen Moden und andererseits eine korrekte Berechnung der Koppelwirkungen zwischen den verschiedenen Modentypen. Ein weiterer Nachteil der Zeitbereichsmethode liegt in der Abhängigkeit des Zeitschritts von der kleinsten Diskretisierungsschrittweite, gemäss dem Courant-Stabilitätskriterium. Die bei MMIC-Berechnungen notwendigen, lokal sehr feinen Gitterschrittweiten erzwingen hierbei die Wahl eines sehr kurzen Zeitschritts, was natürlich zu langen Berechnungszeiten führt.

### 3.1 Diskretisierung

Bei der Diskretisierung eines Rechengebietes mit rechteckförmigen Gitterzellen werden die  $x, y, z$ -Komponenten der elektrischen Feldstärke  $\vec{e}$  und der magnetischen Flussdichte  $\vec{b}$  nach dem YEE-Schema [17] angeordnet. Hierbei sind die  $\vec{e}$ -Komponenten an den Kantenmitten des sogenannten primären Gitters platziert, während die  $\vec{b}$ -Komponenten auf den Kantenmitten eines um eine halbe Zellenlänge versetzten sekundären Gitters allokiert werden, sie-



**Abbildung 3.1:** Anordnung der elektrischen Feldstärke  $\vec{e}$  und magnetischen Flussdichte  $\vec{b}$  Komponenten im dualen, kartesischen Gitter

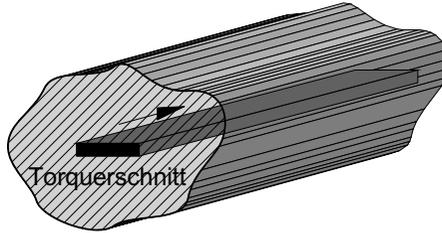
he Abbildung 3.1. Man spricht von einem dualen kartesischen Gitter. Hieraus ergibt sich sofort die diskrete Formulierung der Maxwell-Gleichungen. So gilt beispielsweise für die  $E_z$ -Komponente der zweiten Gitter-Maxwell-Gleichung

$$(E_{x1} - E_{x2}) \Delta x + (E_{y2} - E_{y1}) \Delta y = -j\omega B_z \Delta x \Delta y ,$$

wenn man eine Integralnäherung erster Ordnung verwendet. Die diskreten Formulierungen für die weiteren Feldstärke- und Flussdichtekomponenten ergeben sich analog hierzu.

### 3.2 Eigenwertberechnungen an den Toren

Um die Übertragungseigenschaften einer beliebig gestalteten dreidimensionalen Wellenleiterstruktur berechnen zu können, müssen zunächst die elektrischen Felder an den Toren bekannt sein. Diese Tore kann man als längshomogene Wellenleiterstücke auffassen, siehe Abbildung 3.2, die mit einer dreidimensionalen Diskontinuität elektrisch verknüpft werden. Die Tor-Geometrie wird von der zweidimensionalen Helmholtz-Gleichung beschrieben, die man



**Abbildung 3.2:** Längshomogenes Teilstück eines Wellenleiters. Die Ausbreitungskonstante  $k_z$  und die Feldverteilung  $\vec{e}$  an der Querschnittsfläche ergibt sich aus der Lösung der diskreten Eigenwertgleichung am Torquerschnitt

sich wiederum aus den diskretisierten Maxwell'schen Gleichungen ableitet, siehe [18]. Es ist also ein Eigenwertproblem der Form

$$C\vec{e} = \gamma\vec{e}$$

zu lösen, mit einer schwach besetzten, nicht-symmetrischen Matrix  $C$ , die im Falle verlustbehafteter oder mit PML versehener Torquerschnitte komplexe Einträge besitzt.

Aus den berechneten Eigenwerten  $\gamma$  lassen sich die komplexen Ausbreitungskonstanten  $k_z = \beta - j\alpha$  berechnen. Für ein Tor in der  $x, y$ -Ebene des Rechengebietes gilt

$$\gamma(\Delta z) = e^{-jk_z\Delta z} + e^{jk_z\Delta z} - 2 = -4 \sin^2 \left( k_z \frac{\Delta z}{2} \right).$$

Die Rücktransformation in die Ebene der komplexen Ausbreitungskonstanten ergibt sich zu

$$k_z = \frac{1}{\Delta z} \arcsin \left( \frac{j}{2} \sqrt{\gamma} \right) = \frac{j}{\Delta z} \ln \left( \frac{\gamma}{2} + 1 + \sqrt{\frac{\gamma}{2} \left( \frac{\gamma}{2} + 2 \right)} \right).$$

Mit der Berechnung des zu dem jeweiligen Eigenwert  $k_z$  gehörenden Eigenvektors  $\vec{e}$  erhält man das elektrische Feld der Eigenwellen des Tores.

Es sollen nur die Eigenwerte berechnet werden, die nach der Rücktransformation aus der  $\gamma$ -Ebene in die  $k_z$ -Ebene, den physikalischen Moden des Wellenleiters entsprechen. Diese Wellen sind typischerweise durch eine kleine Dämpfungskonstante  $\alpha$  und eine positive Ausbreitungskonstante  $\beta$  in der Größenordnung  $\beta < \omega(\varepsilon_{\max}\mu_{\max})^{1/2}$  gekennzeichnet, wobei  $\varepsilon_{\max}$  und  $\mu_{\max}$  den maximalen Permittivitäts- beziehungsweise Permeabilitätswerten innerhalb eines inhomogen gefüllten Torquerschnitts entsprechen.

Das verwendete „implicitly restarted Arnoldi iteration“ [19] Verfahren funktioniert bei dem gegebenen Eigenwertproblem nur im inversen Modus numerisch stabil. Das heißt es werden inverse Eigenwerte  $\gamma^{-1}$  der Gleichung

$$C^{-1}\vec{e} = \gamma^{-1}\vec{e}$$

ermittelt. Um die Matrix  $C$  nicht invertieren zu müssen, wird bei jedem Iterationsschritt ein lineares Gleichungssystem gelöst. Zur Lösung dieses Gleichungssystems wird eine direkte Methode, basierend auf dem Gauss-Eliminationsverfahren, angewandt. Die Faktorisierung (LU Dekomposition) der Matrix wurde in den früheren Programmversionen von F3D mit der „sparse“-Bibliothek [20] durchgeführt. Im Zuge der Anpassungen an die besonderen Anforderungen bei der Eigenwertberechnung mit PML-Randbedingungen zeigte sich, dass die Verwendung dieser Bibliothek teilweise zu numerischen Problemen führte, daher wurde zunächst die „umfpack“- [21] [22] [18] und letztlich die „pardiso“-Bibliothek [23] [24] verwendet. Der Vorteil der pardiso Routinen gegenüber umfpack liegen in einem geringeren „fill-in“, also einer geringeren Anzahl von Nicht-Null-Elementen bei der LU-Zerlegung, sowie einer dynamischen Speicherung der Felder.

### 3.3 Berechnung der Streumatrix

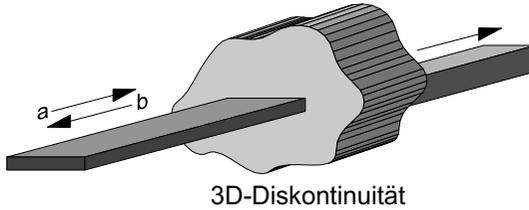
Mit der Berechnung der Eigenvektoren  $\vec{e}$  an den Torflächen sind alle Feldwerte an der Berandung des dreidimensionalen Rechengebietes bekannt. An den Nicht-Torflächen sind elektrische ( $E_{\tan}=0$ ) oder magnetische ( $H_{\tan}=0$ ) Wände festzulegen. Um die elektromagnetischen Felder in den inneren Gitterzellen zu berechnen, lässt sich mit den Gitter-Maxwell-Gleichungen ein dreidimensionales Randwertproblem formulieren. Unter Berücksichtigung der Quellenfreiheit des elektrischen Feldes [25] und Ausnutzung von Symmetrieeigenschaften erhält man die Beziehung

$$\left( A^T D_{s/\mu} D_{A_\mu}^{-1} A D_s - k_0^2 D_{A_\varepsilon} \right) \vec{e} = 0, \quad (3.1)$$

wobei  $k_0 = \omega \sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$  die Freiraumwellenzahl bezeichnet. Der Vektor  $\vec{e}$  fasst die bekannten  $E$ -Feldstärken an den Berandungen und die gesuchten Felder im Inneren der Struktur zusammen. Die Lösung dieses Randwertproblems liefert die Feldstärkekomponenten sämtlicher innerer Gitterzellen. Hieraus lässt sich das Übertragungsverhalten der Gesamtstruktur ermitteln, beschrieben durch die Streumatrix.

Das bei der Berechnung der einzelnen Randwertprobleme (3.1) entstehende lineare Gleichungssystem enthält typischerweise  $10^5 \dots 4 \cdot 10^6$  Unbekannte und wird mit Hilfe verschiedener Vorkonditionierungstechniken effektiv gelöst. Neben der in [25][26] beschriebenen Verwendung des Gradienten des elektrischen Divergenzterms zur Vorkonditionierung, kommen zusätzliche „Independent Set Ordering“- , Jacobi- und SSOR-Vorkonditionierungsmethoden zum Einsatz, bevor das nun optimierte Gleichungssystem mit Hilfe des „Krylov-Subspace“-Verfahrens [27] gelöst wird.

Die Streumatrix  $S$  beschreibt das Verhältnis von Wellenamplituden  $a$ , die eine Transversalebene verlassen und Wellenamplituden  $b$ , die auf diese Ebene einfallen, siehe Abbildung 3.3 und kann aus den  $E$ -Feldern zweier benachbarter Transversalebene auf einem Wellenleiter berechnet werden.



**Abbildung 3.3:** Gesamtstruktur, bestehend aus zwei Wellenleiter, die mit einer beliebig gearteten, dreidimensionalen Diskontinuität verknüpft sind.

Für den denkbar einfachsten Fall, einer Eintor Struktur, bei der der Wellenleiter nur eine einzige Mode führt (siehe Abbildung 3.4) ergeben sich die transversalen  $E$ -Felder zu

$$\vec{E}_t(z) = a e^{-jk_z z} + b e^{+jk_z z}.$$

Aus den, bekannten,  $E$ -Feldern auf den Ebenen  $z = 0$  und  $z = \Delta z$ , kann man nun die Streumatrix berechnen. Es gilt

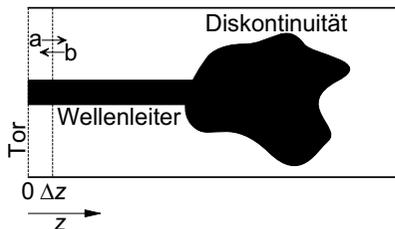
$$\frac{b}{a} = \frac{e^{-jk_z \Delta z} - \frac{E_t(\Delta z)}{E_t(0)}}{\frac{E_t(\Delta z)}{E_t(0)} - e^{jk_z \Delta z}}.$$

Bei Torquerschnitten mit  $m$  ausbreitungsfähigen Moden ergibt sich das transversale  $E$ -Feld aus der Superposition der  $m$  einzelnen Felder, die jeweils mit einem Faktor  $w_l$  zu gewichten sind. Gemäss [28] gilt

$$E_t(z) = \sum_{l=1}^m w_l E_{t,l}(z).$$

Geht man ferner davon aus, dass die zu berechnende Struktur  $p$  verschiedene Tore besitzt, so sind insgesamt  $m_l$  verschiedene Anregungen zu berücksichtigen. Es sind also

$$m_l = \sum_{p'=1}^p m^{(p')}$$



**Abbildung 3.4:** Draufsicht einer Eintorstruktur. Am Tor wird eine Mode mit Wellenamplitude  $a$  vorgegeben. An der Diskontinuität wird diese (teilweise) reflektiert und mit der Amplitude  $b$  auf die Transversalebene  $\Delta z$  zurückgeworfen.

individuelle Randwertprobleme zu lösen. Fasst man nun die berechneten Anregungen der hin- und rücklaufenden Wellen an den verschiedenen Toren zu Vektoren  $\vec{a}_m$  beziehungsweise  $\vec{b}_m$  zusammen, so entsteht eine lineare Matrixgleichung

$$\vec{b}_m = S \cdot \vec{a}_m,$$

deren Lösung die gesuchte Streumatrix  $S$  der berechneten Struktur liefert.



## 4 Wellenleiter-Berechnungen mit lateraler PML

Die Berechnung des Wellenleiter-Problems mit der FDFD-PML Methode erfolgt wie im Kapitel 3.2 beschrieben. Hierbei ist zu beachten, dass durch die Einführung der verlustbehafteten, anisotropen PML-Regionen prinzipiell komplexe Ausbreitungskonstanten  $k_z = \beta - j\alpha$  zu berechnen sind.

Zielsetzung dieses Kapitels ist es, den Einfluss der PML auf das komplexe Eigenwertspektrum der berechneten Struktur zu untersuchen. Mit Hilfe einfacher, analytisch berechenbarer Wellenleiter wird der Einfluss der PML auf das Modenspektrum, sowie die Fähigkeit eine unendliche Raumausdehnung zu emulieren betrachtet. Es zeigt sich, dass durch die PML spezielle Modentypen erzeugt werden. Diese werden im Folgenden als „PML-Moden“ bezeichnet [29] [30]<sup>1</sup> und müssen von den ausbreitungsfähigen Moden des Wellenleiters getrennt werden.

Für alle praktischen Berechnungen ist eine finite Ausdehnung der PML-Randgebiete anzunehmen. Es wird nachgewiesen, dass die endlich ausgedehnten PML-Berandung bestimmte Abweichungen gegenüber einem unendlich ausgedehnten Halbraum aufweist.

Die Berechnung von Strukturen mit PML-Berandungen stellt ferner erhöhte Anforderungen an den Algorithmus zur Eigenwertsuche. Um alle Ausbreitungskonstanten mit einer definierten maximalen Dämpfung  $\alpha$  sicher zu detektieren, muss die Eigenwertebene mit speziellen geometrischen Abbildungsfunktionen abgetastet werden.

---

<sup>1</sup>In der hier zitierten Literatur wird der Begriff „Berenger-Modes“ verwendet.

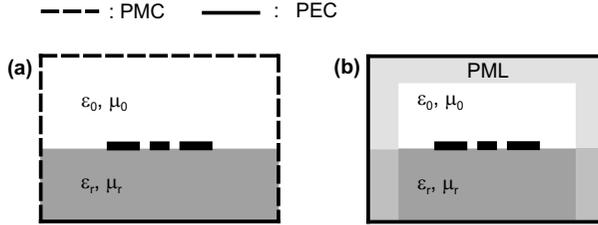
Ergänzende numerische Berechnungen mit FDFD-PML belegen zum einen beispielhaft die Relevanz der analytischen Untersuchungen und Herleitungen, zum anderen verdeutlichen die Beispielrechnungen die Leistungsfähigkeit der Methode bei der Simulation offener Strukturen.

Prinzipiell liefern Wellenleiter-Berechnungen mit der Finite-Differenzen Frequenzbereichsmethode immer eine definierte Anzahl von Eigenwerten. Diese Anzahl hängt ausschließlich von der Diskretisierung ab. Die Unterteilung eines Wellenleiterquerschnitts in  $N = n_x \times n_y$  Gitterzellen liefert  $2N$  Eigenwerte. Für eine Struktur, deren charakteristischen Abmessungen und der Berechnungsquerschnitt hinreichend klein gegenüber der Wellenlänge sind, existieren nur  $(n_l - 1)$  ausbreitungsfähige Moden, wobei  $n_l$  der Anzahl der elektrischen Leiter innerhalb des Querschnitts entsprechen soll. Das FDFD-Verfahren liefert dementsprechend, im verlustlosen Fall,  $(n_l - 1)$  ausbreitungsfähige Moden mit reellem  $k_z = \beta$ , sowie  $N - (n_l - 1)$  evaneszente Moden mit rein imaginärem  $k_z = j\alpha$ .

Welche Auswirkungen das Hinzufügen der PML-Randbedingung auf die 2D-Eigenwertberechnung hat, soll anhand der in Abbildung 4.1 dargestellten Koplanarleitung (Coplanar Waveguide, CPW) diskutiert werden. Zunächst ist festzustellen, dass die gegebene Vier-Leiter-Struktur drei Fundamentalmoden führen kann:

- Den „CPW-Mode“, also den Gegentaktmode zwischen dem mittleren Signalleiter und den außenliegenden koplanaren Massemetallisierungen,
- den „Schlitzleitungs-Mode“, also den Gleichtaktmode zwischen den koplanaren Massemetallisierungen über den Signalleiter hinweg,
- sowie den „Parallelplatten- (PPL-) Mode“, also die Welle im Substrat zwischen den koplanaren Metallisierungen und dem Grundmetall.

Die Berechnung von Abstrahlungseffekten ist mit der Struktur gemäss Abbildung 4.1(a) prinzipiell nicht möglich. Des weiteren müssen die lateralen Abmessungen des finiten Rechengebietes so klein gewählt werden, dass kei-



**Abbildung 4.1:** Koplanarleitung (CPW) mit Grundmetallisierung. Finites Rechengebiet ohne (a), beziehungsweise mit (b) PML Rändern

ne höheren Moden zwischen den elektrischen Leitern und den magnetischen Wänden angeregt werden. Diese Restriktionen vermeidet man mit der Einführung von PML-Rändern, wie in Bild 4.1(b) dargestellt. Für Moden, die lateral Leistung abstrahlen, wirkt die PML als Absorber. Der Imaginärteil der komplexen Ausbreitungskonstante quantifiziert die Abstrahlverluste. Im Falle einer einfachen elektrischen (Perfect Electric Conductor, PEC) oder magnetischen (Perfect Magnetic Conductor, PMC) Berandung ohne PML-Bereiche würde die abgestrahlte Leistung komplett von der Berandung reflektiert, so dass der Eigenvektor verfälscht wird und der Eigenwert der Mode reell bleibt.

Durch die notwendige äußere Berandung des Gesamtquerschnitts mit elektrischen Wänden bleibt die Gesamtzahl der Eigenwerte für die PML-Struktur 4.1(b) identisch mit der Struktur ohne PML 4.1(a), wobei natürlich vorausgesetzt wird, dass die Diskretisierung unverändert bleibt.

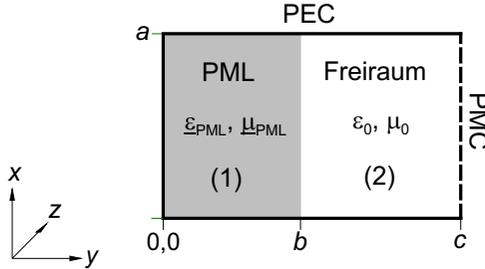
Von besonderem Interesse ist die Frage, inwiefern die PML die unphysikalischen<sup>2</sup> Moden des finiten Rechengebiets beeinflusst, dass heißt: in welchen Teil des komplexen Eigenwertspektrums diese Moden geschoben werden. Dieser Aspekt soll, mit Hilfe einer einfachen, analytisch berechenbaren Struktur, im folgenden Abschnitt untersucht werden.

---

<sup>2</sup>Unphysikalischen Moden: Moden die durch die Diskretisierung oder die Berandung bestimmt sind. Physikalische Moden: Moden der realen Struktur.

## 4.1 Untersuchung eines teilweise gefüllten Hohlleiters

Als Teststruktur zur genaueren Untersuchung dient ein rechteckförmiger Wellenleiter, der teilweise mit PML Material gefüllt ist, vergleiche Abbildung 4.2. Die Region (1) mit  $0 < y \leq b$  sei mit anisotropem, verlustbehaftetem Material gemäss dem PML-Tensor, Gleichung (2.31), gefüllt. Der Bereich



**Abbildung 4.2:** Teilweise PML-gefüllter Rechteckwellenleiter mit den Abmessungen  $a=140$  mm,  $b=80$  mm und  $c=200$  mm.

(2), mit  $b < y \leq c$  ist luftgefüllt. Die rechte Seite ist als magnetische Wand (PMC) ausgeführt, alle übrigen Seitenwände sind elektrische Wände (PEC). Die Ausbreitungscharakteristik der TE- und TM-Wellen in diesem teilgefüllten Wellenleiter ist analytisch berechenbar. Hierzu sind zunächst die Feldkomponenten im Gebiet (1) und im Gebiet (2) getrennt zu ermitteln. Der Separationsansatz für den isotropen Bereich (2) kann der Grundlagenliteratur, beispielsweise [31], entnommen werden, beim Ansatz für den PML gefüllten Bereich (1) sind Eigenwertgleichungen für anisotrop gefüllte Gebiete anzusetzen. Für den betrachteten Fall gilt

$$\begin{aligned} \text{TE-Welle:} \quad & \mu_x k_x^2 + \mu_y k_y^2 = \mu_z (\omega^2 \varepsilon_x \mu_y - k_z^2) , \\ \text{TM-Welle:} \quad & \varepsilon_x k_x^2 + \varepsilon_y k_y^2 = \varepsilon_z (\omega^2 \varepsilon_x \mu_y - k_z^2) . \end{aligned}$$

Mit den vorgegebenen Randbedingungen erhält man die transversalen  $E$ -Feldkomponenten wie in Tabellen 4.1 aufgelistet.

Feldkomponenten im Bereich (1) PML, $0 < y \leq b$	Feldkomponenten im Bereich (2) Freiraum, $b < y < c$
<b>TE-Welle</b>	
$E_x^{(1)} = \frac{-j\omega\mu_0\frac{1}{\eta} \partial H_z^{(1)}}{k_0^2 - k_z^2} \frac{\partial}{\partial y}$	$E_x^{(2)} = \frac{-j\omega\mu_0 \partial H_z^{(2)}}{k_0^2 - k_z^2} \frac{\partial}{\partial y}$
$E_y^{(1)} = \frac{j\omega\mu_0\eta \partial H_z^{(1)}}{k_0^2 - k_z^2} \frac{\partial}{\partial x}$	$E_y^{(2)} = \frac{j\omega\mu_0 \partial H_z^{(2)}}{k_0^2 - k_z^2} \frac{\partial}{\partial x}$
mit	mit
$H_z^{(1)} = a_{\text{TE}}^{(1)} \cos\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \cos\left(k_y^{(1)} y\right)$ $k_z^2 = k_0^2 - \left(\frac{m\pi}{a}\right)^2 - \frac{1}{\eta^2} k_y^{(1)2}$	$H_z^{(2)} = a_{\text{TE}}^{(2)} \cos\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \sin\left(k_y^{(2)} (y - c)\right)$ $k_z^2 = k_0^2 - \left(\frac{m\pi}{a}\right)^2 - k_y^{(2)2}$
<b>TM-Welle</b>	
$E_x^{(1)} = \frac{jk_z \partial E_z^{(1)}}{k_0^2 - k_z^2} \frac{\partial}{\partial x}$	$E_x^{(2)} = \frac{jk_z \partial E_z^{(2)}}{k_0^2 - k_z^2} \frac{\partial}{\partial x}$
$E_y^{(1)} = \frac{jk_z \partial E_z^{(1)}}{k_0^2 - k_z^2} \frac{\partial}{\partial y}$	$E_y^{(2)} = \frac{jk_z \partial E_z^{(2)}}{k_0^2 - k_z^2} \frac{\partial}{\partial y}$
mit	mit
$E_z^{(1)} = a_{\text{TM}}^{(1)} \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \sin\left(k_y^{(1)} y\right)$ $k_z^2 = k_0^2 - \left(\frac{m\pi}{a}\right)^2 - \frac{1}{\eta^2} k_y^{(1)2}$	$E_z^{(2)} = a_{\text{TM}}^{(2)} \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \cos\left(k_y^{(2)} (y - c)\right)$ $k_z^2 = k_0^2 - \left(\frac{m\pi}{a}\right)^2 - k_y^{(2)2}$

**Tabelle 4.1:** Transversale  $E$ -Feldkomponenten der TE- und TM-Wellen im teilweise PML-gefüllten Wellenleiter, gemäss Abbildung 4.2. Die Phasenterme  $e^{jk_z z}$  werden unterdrückt, des weiteren gilt:  $k_z^2 = \omega^2 \mu_0 \varepsilon_0$  und  $\eta = 1 - j \frac{\kappa}{\omega \varepsilon_0}$ .

Ein allgemeiner Ansatz für die Hybridwellen (TE- und TM-Wellen) der geschichteten Struktur, Bild 4.2, führt, unter Berücksichtigung der Stetigkeitsbedingungen für die  $E_{x^-}$ ,  $E_{z^-}$ ,  $H_{x^-}$  und  $H_{z^-}$ -Felder an der Grenzfläche  $y = b$ , auf vier transzendente Gleichungen. Hieraus können die Amplitudenverhältnisse  $a_{\text{TE}}^{(i)}$  und  $a_{\text{TM}}^{(i)}$  ermittelt werden. Es zeigt sich, dass die TE- und TM-Wellen, wie im Falle eines homogenen, isotrop gefüllten Rechteckhohlleiters, entkoppelt sind. Die resultierenden Eigenwertgleichungen für  $k_y$  liefern äquivalente Eigenwerte für beide Wellentypen, das heißt TE- und TM-Wellen sind entartet. Die  $k_y$ -Eigenwerte im PML-Gebiet (1) beziehungsweise im Freiraum (2) sind gegeben zu

$$k_y^{(1)} = \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi}{c} \frac{1 - j\zeta}{1 - j\frac{b}{c}\zeta} \quad \text{bzw.} \quad k_y^{(2)} = \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi}{c} \frac{1}{1 - j\frac{b}{c}\zeta}.$$

Somit ergibt sich die Ausbreitungskonstante des teilweise PML gefüllten Wellenleiters zu

$$k_{z,mn} = \sqrt{\omega^2 \mu_0 \varepsilon_0 - \left( \frac{m\pi}{a} \right)^2 - \frac{\left( n + \frac{1}{2} \right)^2 \left( \frac{\pi}{c} \right)^2}{\left( 1 - j\frac{b}{c}\zeta \right)^2}}, \quad (4.1)$$

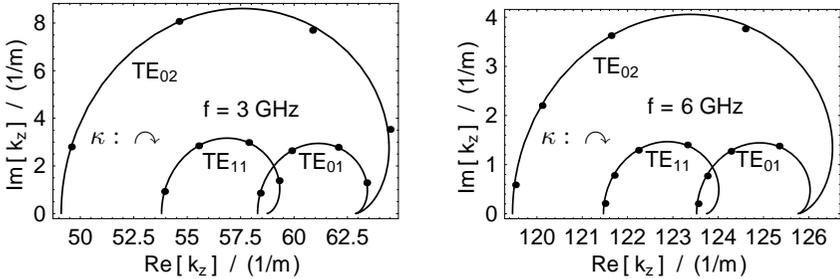
mit  $m = 0, 1, 2, \dots, n = 0, 1, 2, \dots$  und  $\zeta = \frac{\kappa}{\omega \varepsilon_0}$ .

Die analytisch berechnete Ausbreitungskonstante (4.1) erlaubt eine detaillierte Untersuchung der physikalischen- und PML-Moden. Die Struktur aus Abbildung 4.2 würde, bei einer ideal funktionierenden absorbierenden Randbedingung, einer unendlich ausgedehnten Parallelplattenleitung entsprechen. Somit sollten alle Moden  $n \neq 0$ , die ja durch die linke und rechte Berandung erzeugt werden, verschwinden.

Eine erste Erwartung war, dass die PML-Moden  $n \neq 0$  mit abnehmenden nominalen PML Reflexionsfaktor  $r_{\text{th}} = e^{-2b\kappa/(\varepsilon_0 c_0)}$  immer stärker gedämpft werden. Anhand der in Abbildung 4.3 dargestellten Ortskurven der komplexen Ausbreitungskonstante  $k_z$  zeigt sich jedoch, dass die Dämpfung dieser

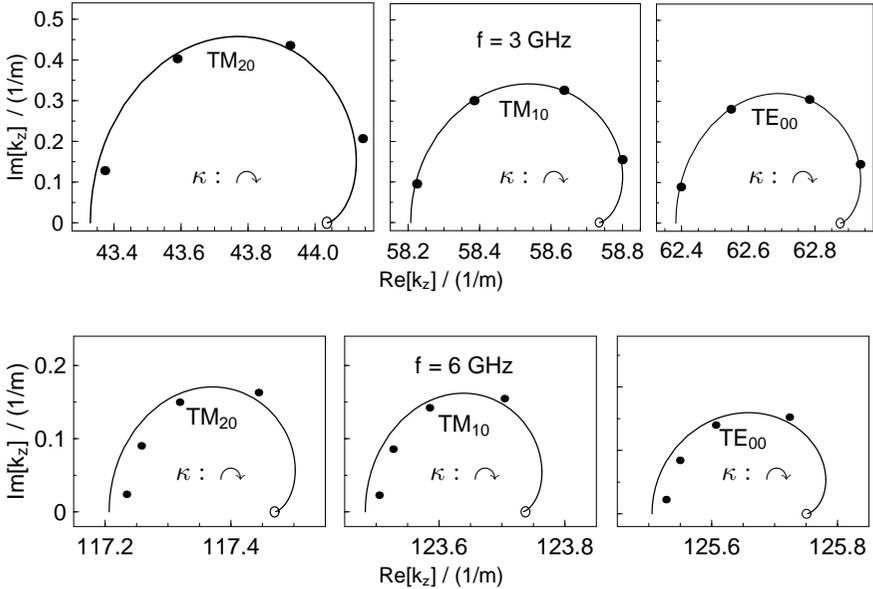
Moden klar begrenzt ist. Es gibt eine maximale Dämpfung für einen mittleren Leitfähigkeitswert  $\kappa$ . Eine weitere Erhöhung der Leitfähigkeiten führt zu geringeren Dämpfungen, für  $\kappa \rightarrow \infty$  erfahren die unphysikalischen PML-Moden keinerlei Dämpfung mehr, man erhält für beliebige  $n$  den gleichen Wert.

Desweiteren ist festzustellen, dass die Dämpfungswerte mit steigender Frequenz  $f$  absinken.



**Abbildung 4.3:** Ortskurven der PML-Moden der Struktur in Bild 4.2 in der komplexen  $k_z$ -Ebene. Aufgetragen sind die  $k_{z,mn}$ -Werte der TE-Wellen gemäss Gleichung (4.1). Der Parameter  $\kappa$  wird von 0 nach  $\infty$  variiert. Es sind die Ortskurven für  $f = 3$  GHz und  $f = 6$  GHz dargestellt. Die Symbole ( $\bullet$ ) kennzeichnen zusätzlich mit F3D numerisch berechnete Werte für  $\kappa = (0.0382, 0.1528, 0.3056$  und  $0.6112)$  S/m, entsprechend  $r_{\text{th}} = (10^{-1}, 10^{-4}, 10^{-8}$  und  $10^{-16})$ .

Auch die physikalischen Moden des Wellenleiters, also die  $\text{TE}_{00}$ -Mode und  $\text{TM}_{m0}$ -Moden, werden durch die Variation der PML-Leitfähigkeit beeinflusst. Dies verdeutlicht die Ortskurvendarstellung in Bild 4.4. Das bedeutet, dass die PML die korrekte Berechnung der Ausbreitungskonstanten der physikalischen Moden (leicht) beeinträchtigt. Erst für sehr hohe Leitfähigkeitswerte  $\kappa$  streben die Ortskurven der Ausbreitungskonstanten auf die exakten  $k_z$ -Werte der idealen Parallelplattenleitung mit einem Plattenabstand von  $a = 140$  mm. Diese Werte sind in der Abbildung 4.4 zusätzlich eingetragen. Die Dämpfung  $\alpha$  der physikalischen Moden ist zwar um ungefähr eine Faktor 20 geringer als



**Abbildung 4.4:** Ortskurven der ausbreitungsfähigen physikalischen Moden der Struktur 4.2 in der komplexen  $k_z$ -Ebene. Der Parameter  $\kappa$  wird von 0 nach  $\infty$  variiert. Es sind die Ortskurven für  $f = 3$  GHz und  $f = 6$  GHz gemäss Formel (4.1) dargestellt. Die Symbole ( $\bullet$ ) kennzeichnen zusätzlich mit F3D numerisch berechnete Werte für  $\kappa = (0.0382, 0.1528, 0.3056$  und  $0.6112)$  S/m, entsprechend  $r_{th} = (10^{-1}, 10^{-4}, 10^{-8}$  und  $10^{-16})$ . Die Symbole ( $\circ$ ) markieren die Ausbreitungskonstante einer idealen Parallelplattenleitung mit Plattenabstand  $a=140$  mm.

die der PML-Moden, sie sinkt aber erst für  $\kappa \rightarrow \infty$  auf den zu erwartenden Wert  $\alpha = \text{Im}[k_z] = 0$ .

Den Ortskurvendarstellungen 4.3 und 4.4 sind numerische F3D-Rechnergebnisse hinzugefügt. Für die Diskretisierung des Wellenleiters wurde ein äquidistantes Gitter mit Zellengrößen von  $\Delta x = \Delta y = 2.5$  mm, entsprechend  $\lambda/20$  bei  $f = 6$  GHz, verwendet. Man erkennt in allen Fällen eine gute Übereinstimmung zwischen den numerischen Ergebnissen und den analytischen Resultaten, gemäss Gleichung 4.1.

Insgesamt lässt sich die Untersuchung der  $\kappa$ -Ortskurven der komplexen Ausbreitungskonstanten  $k_z$  des teilweise PML gefüllten Wellenleiters wie folgt zusammenfassen:

- Die Dämpfung der parasitären PML-Moden ist für alle Leitfähigkeitswerte  $\kappa$  begrenzt. Es existiert ein Dämpfungsmaximum, für mittelgroße  $\kappa$ -Werte, das um ungefähr eine Größenordnung über denen der physikalischen Moden liegt.
- Die PML bewirkt kleinere Abweichungen ( $< 1.5\%$ ) bei der Berechnung der Ausbreitungskonstanten  $\beta$  der physikalischen Moden. Die Abweichungen sind abhängig von der gewählten PML-Leitfähigkeit  $\kappa$ .
- Es existiert eine gute Übereinstimmung zwischen den analytisch berechneten Ausbreitungskonstanten  $k_z$  und den numerisch mit FDFD-PML berechneten Werten.

Insbesondere die limitierte Dämpfung der PML-Moden wirft die Frage auf, wie diese Moden von den physikalischen Moden des Wellenleiters unterschieden werden können. Die Untersuchungen zeigen, dass die Dämpfungswerte  $\alpha$  ungeeignet sind, um beide Modentypen zu separieren. Es wird daher ein Kriterium benötigt, dass im FDFD-PML Algorithmus eine automatisierbare Trennung der Modentypen ermöglicht. Dieses wird im folgenden Unterkapitel vorgestellt.

## 4.2 Modentrennung mit dem PPP-Kriterium

Um eine effektive Trennung zwischen unphysikalischen Moden der PML-Behandlung und physikalischen Moden eines Wellenleiters zu gewährleisten, wurde ein Leistungskriterium entwickelt [32][33], dass im folgenden Abschnitt vorgestellt werden soll.

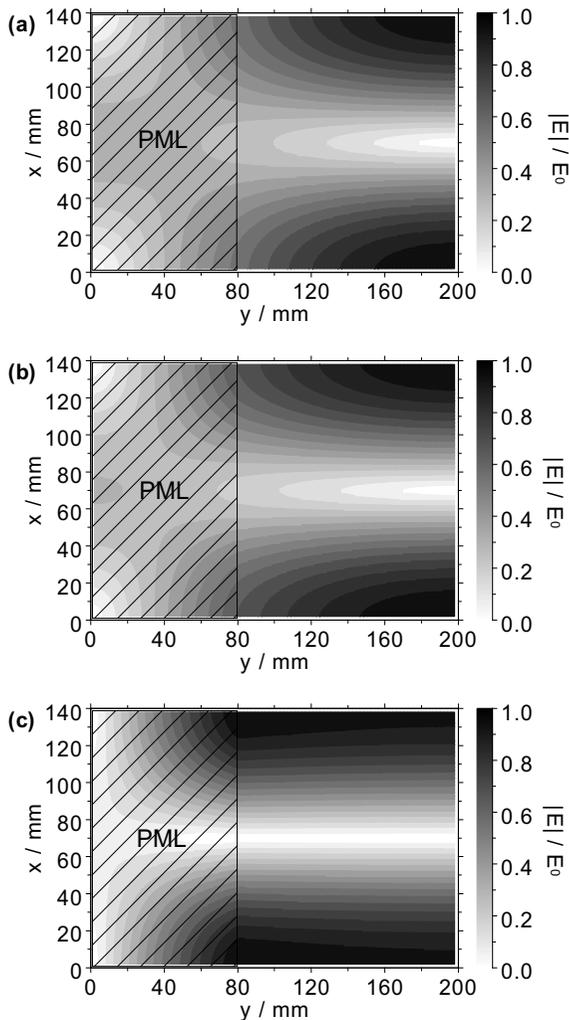
### 4.2.1 Analytische Untersuchungen zum PPP-Kriterium

Die analytisch ermittelten Feldstärken gemäss Tabelle 4.1, erlauben eine weitere systematische Untersuchung der PML. Betrachtet wird zunächst der Einfluss des Leitfähigkeitswertes  $\kappa$  auf die Verteilung des  $|\vec{E}|$ -Feldes im Querschnitt des teilweise PML-gefüllten Wellenleiters gemäss Abbildung 4.1. In den Darstellungen 4.5 und 4.6 ist hierzu der Betrag des elektrischen Feldes  $|\vec{E}|$ , mit  $|\vec{E}| = (E_x E_x^* + E_y E_y^*)^{1/2}$ , für verschiedene Leitfähigkeitswerte  $\kappa$  abgebildet. Es sind die Felder der physikalischen  $TM_{10}$ -Welle sowie der unphysikalischen PML-Welle  $TE_{11}$  dargestellt. Bei den zunächst abgebildeten Feldverteilungen mit  $\kappa = 0$ , Abbildung 4.5(a) beziehungsweise 4.6(a) entspricht die Struktur einem Rechteckhohlleiter mit magnetischer Außenwand auf der rechten Seite. Die Vergrößerung des  $\kappa$ -Wertes wirkt sich folgendermaßen aus: Die Feldverteilung der physikalischen  $TM_{10}$ -Mode nähert sich im Freiraumbereich der Feldverteilung der idealen, höheren Parallelplattenmode an. Gleichzeitig werden die Felder der PML-Mode  $TE_{11}$  verstärkt in den PML Bereich „hineingezogen“. Dieser Effekt lässt sich zur Separation zwischen physikalischen- und PML-Moden ausnutzen. Hierzu wird zunächst der Leistungsfluss durch den PML-Bereich ( $P_{\text{PML}}$ ) und den Freiraumbereich ( $P_{\text{isotropic}}$ ) separat berechnet. Die Poyntingvektoren für diese beiden Bereiche sind gegeben durch

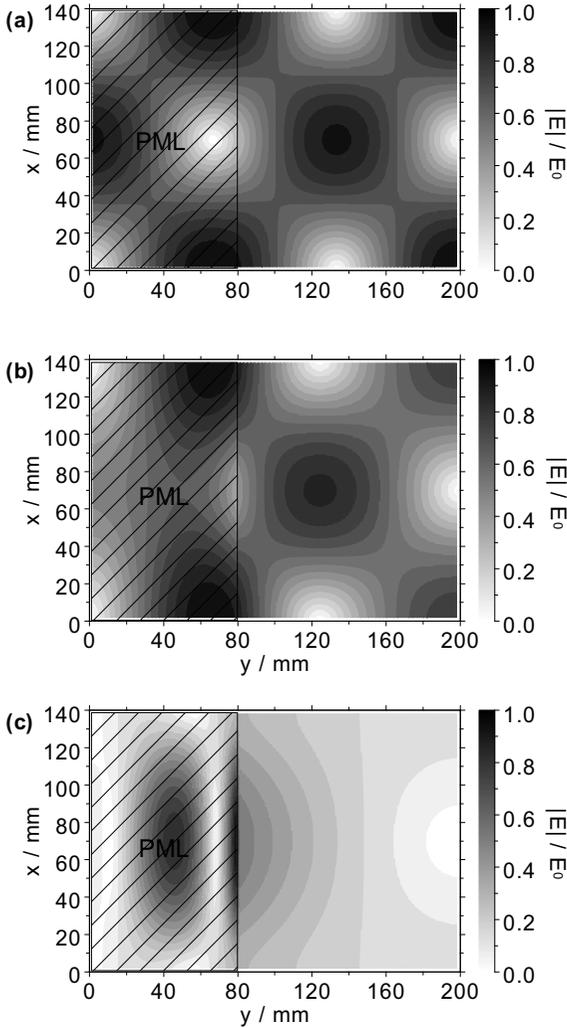
$$P_{\text{PML}} = \int_0^b \int_0^a \left[ E_x^{(1)} H_y^{(1)*} - E_y^{(1)} H_x^{(1)*} \right] dx dy, \quad (4.2)$$

$$P_{\text{isotropic}} = \int_b^c \int_0^a \left[ E_x^{(2)} H_y^{(2)*} - E_y^{(2)} H_x^{(2)*} \right] dx dy, \quad (4.3)$$

mit den  $E$ - und  $H$ -Feldstärken gemäss Tabelle 4.1 und 4.2.



**Abbildung 4.5:**  $|\vec{E}|$ -Feld Plots der physikalischen  $TM_{10}$ -Mode des Rechteckwellenleiters (Abbildung 4.1) bei  $f = 3$  GHz. In den Darstellungen (a), (b) und (c) sind die Betragsfelder für die PML-Leitfähigkeiten  $\kappa = (0.0, 0.1528$  und  $0.6112)$  S/m entsprechend  $r_{th} = (10^0, 10^{-4}$  und  $10^{-16})$  dargestellt. Der Bereich ( $0 < y \leq 80$ ) mm ist PML gefüllt, die restliche Fläche ist luftgefüllt.



**Abbildung 4.6:**  $|\vec{E}|$ -Feld Plots der PML-Mode  $TE_{11}$  des Rechteckwellenleiters (Abbildung 4.1) bei  $f=3$  GHz. In den Darstellungen (a), (b) und (c) sind die Betragsfelder für die Leitfähigkeiten  $\kappa = (0.0, 0.1528 \text{ und } 0.6112) \text{ S/m}$  entsprechend  $r_{th} = (10^0, 10^{-4} \text{ und } 10^{-16})$  dargestellt. Der Bereich ( $0 < y \leq 80$ ) mm ist PML gefüllt, die restliche Fläche ist luftgefüllt.

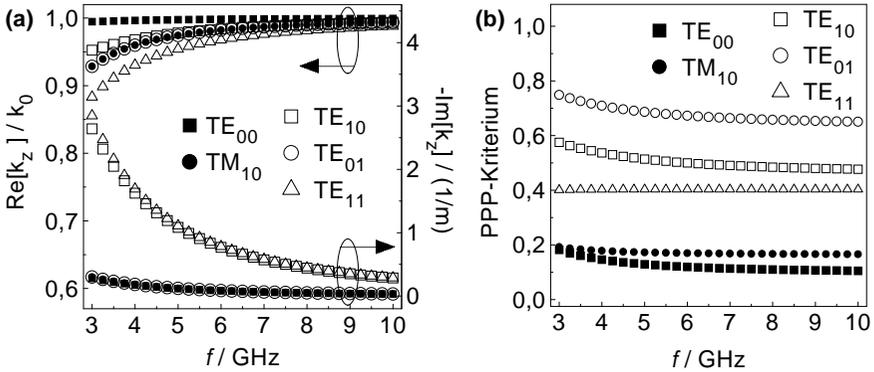
Feldkomponenten im Bereich (1) PML, $0 < y \leq b$	Feldkomponenten im Bereich (2) Freiraum, $b < y < c$
<b>TE-Welle</b>	
$H_x^{(1)} = \frac{-jk_z}{k_0^2 - k_z^2} \frac{\partial H_z^{(1)}}{\partial x}$	$H_x^{(2)} = \frac{-jk_z}{k_0^2 - k_z^2} \frac{\partial H_z^{(2)}}{\partial y}$
$H_y^{(1)} = \frac{-jk_z}{k_0^2 - k_z^2} \frac{\partial H_z^{(1)}}{\partial x}$	$H_y^{(2)} = \frac{-jk_z}{k_0^2 - k_z^2} \frac{\partial H_z^{(2)}}{\partial x}$
<b>TM-Welle</b>	
$H_x^{(1)} = \frac{-j\omega\varepsilon_0}{k_0^2 - k_z^2} \frac{\partial E_z^{(1)}}{\partial y}$	$H_x^{(2)} = \frac{-j\omega\varepsilon_0 \frac{1}{\eta}}{k_0^2 - k_z^2} \frac{\partial E_z^{(2)}}{\partial y}$
$H_y^{(1)} = \frac{-j\omega\varepsilon_0}{k_0^2 - k_z^2} \frac{\partial E_z^{(1)}}{\partial x}$	$H_y^{(2)} = \frac{-j\omega\varepsilon_0 \eta}{k_0^2 - k_z^2} \frac{\partial E_z^{(2)}}{\partial x}$

**Tabelle 4.2:** Transversale  $H$ -Feldkomponenten der TE- und TM-Wellen im teilweise PML gefüllten Wellenleiter, gemäss Abbildung 4.2. Die Größen  $E_z^{(1)}$ ,  $E_z^{(2)}$ ,  $H_z^{(1)}$  und  $H_z^{(2)}$  können der Tabelle 4.1 entnommen werden.

Ein Vergleich der beiden Leistungsflüsse (4.2) und (4.3) liefert ein sehr nützliches Kriterium, um unphysikalische Moden von den physikalischen Moden des Wellenleiters zu trennen. Die Leistungs-Relation wird im Folgenden mit PPP (Power Part in PML) bezeichnet und es gilt

$$PPP = \left| \frac{P_{\text{PML}}}{P_{\text{PML}} + P_{\text{isotropic}}} \right|, \text{ mit } PPP \in [0, 1]. \quad (4.4)$$

Die Effektivität des PPP-Kriteriums zur Modenseparation wird zunächst wiederum am Beispiel des teilweise PML gefüllten Rechteckwellenleiters, Abbildung 4.1, demonstriert. Wie man der Abbildung 4.7(a) entnehmen kann, ist eine Separation zwischen physikalischen- und unphysikalischen-Moden anhand der Ausbreitungskonstanten  $k_z$  problematisch. Im Falle des entarteten



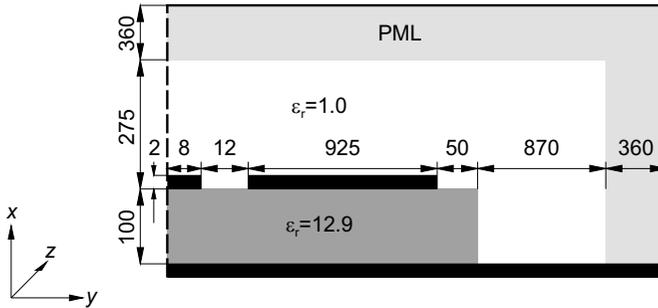
**Abbildung 4.7:** Relative Ausbreitungs- und Dämpfungscharakteristik (a), sowie PPP-Werte (b) verschiedener Moden des Rechteckwellenleiter aus Abbildung 4.1. Dargestellt sind die physikalischen Moden  $\text{TE}_{00}$  und  $\text{TM}_{10}$ , sowie die unphysikalischen  $\text{TE}_{01}$ -,  $\text{TE}_{10}$ - und  $\text{TE}_{11}$ -Mode. Die Leitfähigkeit im PML-Bereich beträgt  $\kappa = 0.1528$ , entsprechend  $r_{\text{th}} = 10^{-4}$ .

Modenpaares  $\text{TE}_{10}/\text{TM}_{10}$  sind Real- und Imaginärteil der Ausbreitungskonstanten identisch, hier ist eine Separation sogar unmöglich. Aber auch die Dämpfung der weiteren unphysikalischen Moden ( $\text{TE}_{01}$ ,  $\text{TE}_{11}$ ) nähert sich mit steigender Frequenz immer mehr den  $\text{Im}[k_z]$ -Werten der physikalischen Moden ( $\text{TE}_{00}$ ,  $\text{TM}_{11}$ ) an.

Demgegenüber ermöglicht die zusätzliche Berechnung der PPP-Werte für die fünf Moden eine klare Separation, siehe Abbildung 4.7(b). Während die PML-Moden Leistungsanteile von  $\text{PPP} > 40\%$  aufweisen, liegt der PPP-Anteil der physikalischen Wellentypen bei  $10\% \dots 20\%$ . Durch die Definition einer oberen Grenze von beispielsweise  $\text{PPP}_{\text{max}} = 0.3$ , lässt sich ein automatisiertes Aussortieren der unphysikalischen Moden realisieren.

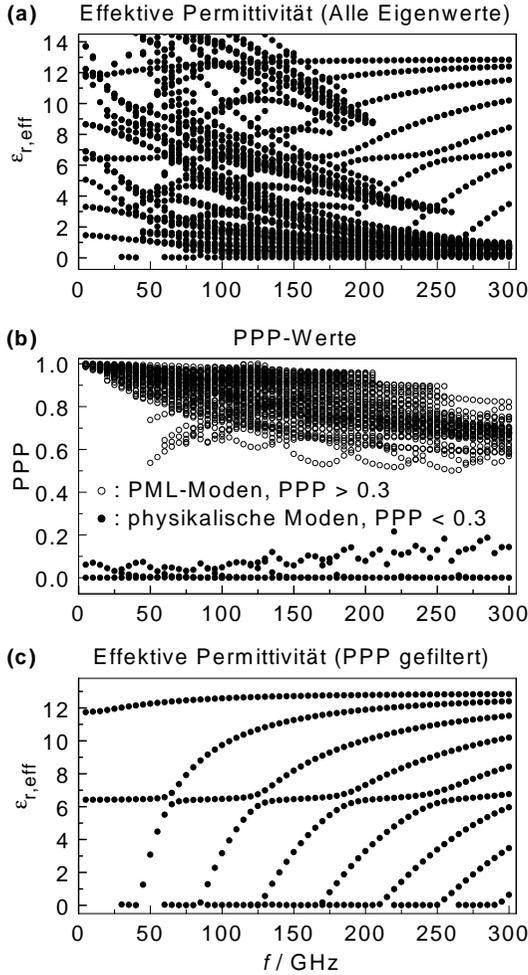
### 4.2.2 Numerisches Beispiel zum PPP-Kriterium

Die Nützlichkeit des vorgestellten Leistungskriteriums soll noch am Beispiel einer komplexeren Struktur veranschaulicht werden. Mit dem FDFD-PML-Eigenwertlöser wird eine CPW-Leitung mit Rückseitenmetallisierung, gemäss Abbildung 4.8, untersucht. Die Übertragungseigenschaften dieser Leitung werden im Frequenzbereich  $1 \dots 300$  GHz berechnet. Durch die relativ breite Massemetallisierung ( $925 \mu\text{m}$ ) treten in Frequenzbereichen oberhalb von  $40$  GHz höhere Moden auf.

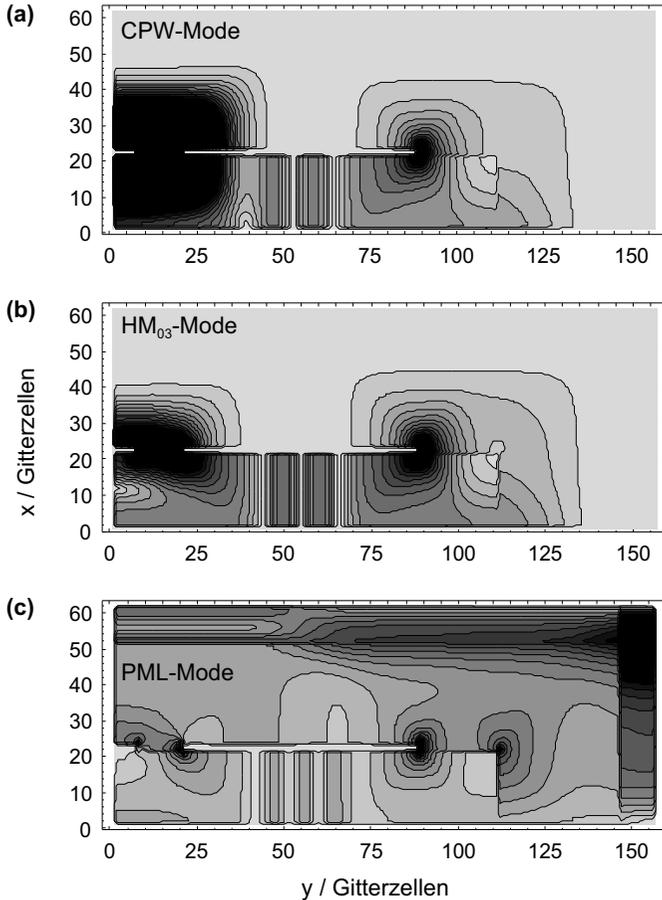


**Abbildung 4.8:** CPW-Geometrie, alle Dimensionen in  $\mu\text{m}$ . Die Struktur wird mit  $62 \times 157$  nichtäquidistanten Gitterzellen diskretisiert. Für den lateralen und den oberen PML-Bereich werden jeweils 10 Gitterzellen verwendet, der nominale PML-Reflexionsfaktor ist zu  $r_{\text{th}} = 0.01$  gewählt.

Eine Betrachtung aller Eigenwerte der Struktur, Abbildung 4.9(a), verdeutlicht die Notwendigkeit eines Selektionskriteriums für physikalische Moden nachdrücklich. Durch die Berechnung der Leistungsrelationen PPP, Abbildung 4.9(b), können die physikalischen Moden der CPW-Leitung jedoch leicht extrahiert werden. Es verbleiben die Eigenwerte der physikalischen CPW- und  $\text{HM}_{0n}$ -Moden, dargestellt in Bild 4.9(c). Die Eigenwerte in den Diagrammen 4.9(a,c) sind in Form der effektiven Permittivität der Moden dargestellt, für die  $\varepsilon_{r, \text{eff}} = (\text{Re}[k_z]/k_0)^2$  gilt.

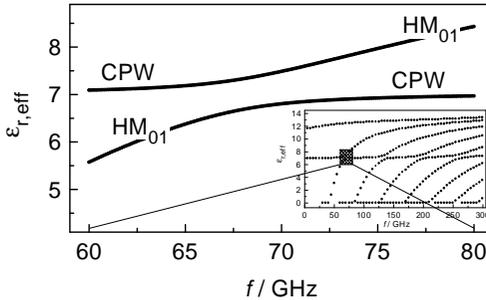


**Abbildung 4.9:** Eigenwerte und Leistungsverteilung für die CPW gemäss Abbildung 4.8. Dargestellt ist zunächst (a) die effektive Permittivität  $\epsilon_{r,\text{eff}}$  über der Frequenz, für alle Eigenwerte innerhalb eines vorgegebenen  $\alpha = \text{Im}[k_z]$ -Streifens. In (b) sind die PPP-Werte aller Moden dargestellt, womit die physikalischen Moden (c) extrahiert werden können.



**Abbildung 4.10:** Konturplots der  $|\vec{E}|$ -Felder der CPW-Struktur, gemäss Abbildung 4.8. Dargestellt sind die Felder der CPW-Mode (a), der höheren Mode  $HM_{03}$  (b), sowie einer typischen PML-Mode (c). Die Felder wurden für die Frequenz  $f=170$  GHz berechnet. Die rechte sowie die obere Berandung ist mit jeweils 10 Gitterzellen PML versehen. Da die Struktur mit einem nichtäquidistantem Gitternetz diskretisiert wurde, sind die Darstellungen nicht maßstabsgerecht.

Im untersuchten Frequenzbereich existieren insgesamt sieben höhere Moden ( $HM_{01} \dots HM_{07}$ ), bedingt durch die breite Massemetallisierung. Die erste höhere Mode tritt bereits bei einer Frequenz von  $f = 40$  GHz auf und beeinflusst im Frequenzbereich von 60 GHz bis 80 GHz die dispersive Ausbreitungscharakteristik der CPW-Mode eklatant. In diesem Bereich tritt das sogenannte „Co-Flow“-Verhalten [34] auf, siehe Abbildung 4.11. Dieses ist dadurch ge-



**Abbildung 4.11:** Effektive Permittivität  $\epsilon_{r, \text{eff}}$  der CPW- und  $HM_{01}$ -Mode. Die Feldverteilungen der beiden Modentypen nähern sich im dargestellten Frequenzbereich immer stärker aneinander an, bis schliesslich ein allmählicher Wechsel zwischen CPW- und  $HM_{01}$ -Mode stattfindet (Co-Flow-Verhalten).

kennzeichnet, dass die Ausbreitungskonstanten von CPW- und  $HM_{01}$ -Mode sich nicht überschneiden, stattdessen findet ein allmählicher Wechsel statt. Die CPW-Mode geht in die  $HM_{01}$ -Mode über, die  $HM_{01}$ -Mode wird zum CPW-Mode, im Übergangsbereich ist keine klare Zuordnung möglich.

Den beschriebenen Annäherungseffekt der Felder von CPW-Mode und der höheren  $HM_{0n}$ -Moden verdeutlicht die Darstellung der  $|\vec{E}|$ -Dichteverteilungen in Abbildung 4.10. Die Darstellungen 4.10(a,b) der Felder bei  $f = 170$  GHz geben das beginnende Co-Flow Verhalten zwischen CPW- und der höheren  $HM_{03}$ -Mode wieder. In der Abbildung 4.10(c) ist zusätzlich die Feldverteilung einer typischen PML Mode bei  $f = 170$  GHz dargestellt. Man erkennt wiederum eine starke Feldakkumulation in den PML-Bereichen,

hier insbesondere in der seitlichen PML. Solche Moden lassen sich gut mit dem PPP-Kriterium herausfiltern.

Das resonante Verhalten dieser Leitung wurde in [35] experimentell und numerisch untersucht. Die numerischen Berechnungen wurden hierbei mit einem 3D-Simulator (HP-HFSS, FE-Methode) vorgenommen. Es wurde das resonante Verhalten der Streumatrix einer längshomogenen CPW berechnet. Im Gegensatz hierzu erlaubt die hier vorgestellte FDFD-PML-Methode eine genaue Untersuchung der Leitung mit Hilfe des zweidimensionalen Eigenwertlösers, ergänzt durch das effektive Modensortierkriterium PPP.

Bezogen auf die betrachtete CPW-Leitung bleibt als Ergebnis dieser Berechnung festzuhalten, dass die Ausdehnung der koplanaren Masseflächen sorgfältig gewählt werden muss. Zu große Masseausdehnungen verursachen höhere horizontale  $HM_{0n}$ -Moden. Diese beeinflussen die Ausbreitungscharakteristik der CPW-Mode und verursachen Mehrmoden-Effekte. Das hier vorgestellte FDFD-PML Verfahren stellt somit eine leistungsfähige Methode zur Optimierung von CPW-Leitungen für Höchstfrequenzanwendungen zur Verfügung.

Dadurch, dass die Ausdehnung des Trägersubstrats der untersuchten CPW endlich gewählt wurde, können keine Leckwellenverluste auftreten. Außerdem verhindert die Wahl eines sehr dünnen Substrats ( $100\ \mu\text{m}$ ) das Auftreten höherer vertikaler  $HM_{m0}$ -Modentypen. Detaillierte Untersuchungen weiterer CPW-Geometrien unter Berücksichtigung solcher Vertikalmodentypen, sowie die Berechnung von Leckwellenverlusten, sind im Kapitel 5 zusammengefasst.

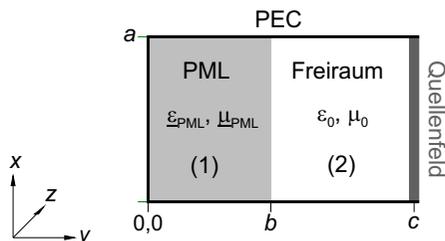
### 4.3 Genauigkeitsgrenzen der PML

In diesem Abschnitt soll untersucht werden, mit welcher Genauigkeit die PML Leckwellenverluste, also die durch die seitliche Abstrahlung verursachte Dämpfung der Leitungswelle, berechnet. Bei der Untersuchung solcher Abstrahlungseffekte kann man unterscheiden zwischen gewollter Leistungsabstrahlung, so zum Beispiel bei sogenannten Leckwellenantennen, die Signalleistung an den umgebenden Freiraum abstrahlen, und parasitären Abstrahlungseffekten. Solche ungewollten Abstrahlverluste treten auf, sobald die Phasenkonstanten  $\beta$  der Substratmoden oder anderer höherer Moden, die Leistung abstrahlen, größer werden als die Phasenkonstante der geführten Welle. Die Berechnung von Abstrahlverlusten bedingt die Verwendung lateraler PML-Berandungen, die für die streifend einfallenden Leckwellen einen unendlich ausgedehnten Freiraum emulieren sollen. Es zeigt sich, dass gewisse Unsicherheiten bei der Quantifizierung der durch Abstrahlung verursachten Dämpfung auftreten.

Ein Berechnungsbeispiel für gewollte Abstrahlung mit einer längshomogenen Mikrostreifenleitungs-Leckwellen-Antenne wird im zweiten Abschnitt dieses Unterkapitels demonstriert. Weitere Untersuchungen bezüglich parasitärer Abstrahlungseffekte bei koplanaren Wellenleitern werden in Kapitel 5 vorgestellt.

#### 4.3.1 Analytische Untersuchungen zur PML-Genauigkeit

Zur genauen Untersuchung der Wirkungsweise lateraler PML-Berandungen wird wiederum eine analytisch berechenbare Rechteckwellenleiter-Struktur herangezogen. An der der PML gegenüberliegenden Berandung bei  $y = c$  wird ein Quellenfeld mit  $E_{x0}(z, x) = E_0 e^{-jk_{zs}z}$  vorgegeben, siehe Abbildung 4.12. Das Quellenfeld simuliert eine in  $z$ -Richtung geführte Welle, die lateral Leistung in den Freiraum verlieren kann, sobald ihre Phasenkonstante



**Abbildung 4.12:** Teilweise PML-gefüllter Rechteckwellenleiter mit den Abmessungen  $a=140$  mm,  $b=80$  mm und  $c=200$  mm. Gegenüber dem PML-Gebiet wird ein Quellenfeld  $E_{x0}$  vorgegeben. Dieses Feld simuliert eine in  $z$ -Richtung geführte Welle, die in  $-y$ -Richtung Leistung abstrahlen kann.

$\beta = \text{Re}[k_{zs}]$  kleiner als die Freiraumwellenzahl  $k_0 = \omega\sqrt{\mu_0\epsilon_0}$  wird. Die PML auf der linken Seite soll eine unendliche Ausdehnung des Freiraumbereichs emulieren.

Für diese Anordnung lassen sich über einen  $\text{TE}_z$ -Wellenansatz die existierenden Feldgrößen  $E_x$ ,  $H_y$  und  $H_z$  analytisch ermitteln. Diese Größen sind in Tabelle 4.3 aufgelistet. Auch für den Fall eines tatsächlich unendlich ausgedehnten Freiraums (dann natürlich ohne PML-Gebiet) können diese Feldwerte ermittelt werden. Sie dienen als Referenz zu den PML-Werten und sind ebenfalls in der Tabelle 4.3 aufgeführt.

Die Relation der Felder  $E_x$  zu  $H_z$  an der Trennfläche zwischen PML und Freiraum,  $y=b$ , liefert die komplexe Impedanz

$$Z_b = \frac{E_x^{(1)}}{H_z^{(1)}} \Big|_{y=b} = \frac{E_x^{(2)}}{H_z^{(2)}} \Big|_{y=b} . \quad (4.5)$$

Diese Impedanz erweist sich als wertvolles Hilfsmittel zur Untersuchung der PML-Eigenschaften. Aus der Betrachtung des Poyntingvektors mit

$$P = \int [E \times H^*] dA = \frac{1}{Z} \int |E|^2 dA$$

ergibt sich, dass der Realteil der Impedanz  $Z = Z_b$  die Wirkleistungsverluste

an Stelle  $y=b$  qualitativ beschreibt. Die Impedanz  $Z_b$ , für den Fall der PML-Berandung beziehungsweise für den Referenzfall des offenen Raumes (Open Space, OS) ergibt sich, gemäss Gleichung (4.5) zu

$$Z_{b,\text{PML}} = j\omega\mu_0 \frac{1}{\sqrt{k_0^2 - k_{zs}^2}} \tan\left(\eta\sqrt{k_0^2 - k_{zs}^2} b\right),$$

$$Z_{b,\text{OS}} = \frac{\omega\mu_0}{\sqrt{k_0^2 - k_{zs}^2}}.$$

Für den Fall  $k_0 > k_{zs}$ , also den Fall, dass die geführte Welle in die PML beziehungsweise in den unendlich ausgedehnten Freiraum abstrahlt, ergeben sich die Realteile der Impedanz zu

$$\text{Re}[Z_{b,\text{PML}}] = \frac{\omega\mu_0}{\sqrt{k_0^2 - k_{zs}^2}} \frac{\sinh\left(\frac{2\kappa}{\omega\varepsilon_0}\sqrt{k_0^2 - k_{zs}^2} b\right)}{\cos\left(2\sqrt{k_0^2 - k_{zs}^2} b\right) + \cosh\left(\frac{2\kappa}{\omega\varepsilon_0}\sqrt{k_0^2 - k_{zs}^2} b\right)},$$

$$\text{Re}[Z_{b,\text{OS}}] = \frac{\omega\mu_0}{\sqrt{k_0^2 - k_{zs}^2}}, \text{ mit } k_0 > k_{zs}.$$
(4.6)

Für den Fall, dass die Freiraum-Wellenzahl kleiner als die Quellfeld-Wellenzahl ist ( $k_0 < k_{zs}$ ), sollte keine Abstrahlung mehr auftreten. Hier ergeben sich die Realteile der Impedanz zu

$$\text{Re}[Z_{b,\text{PML}}] = \frac{\omega\mu_0}{\sqrt{k_{zs}^2 - k_0^2}} \cdot \frac{\sin\left(\frac{2\kappa}{\omega\varepsilon_0}\sqrt{k_{zs}^2 - k_0^2} b\right)}{\cos\left(\frac{2\kappa}{\omega\varepsilon_0}\sqrt{k_{zs}^2 - k_0^2} b\right) + \cosh\left(2\sqrt{k_{zs}^2 - k_0^2} b\right)},$$
(4.7)

$$\text{Re}[Z_{b,\text{OS}}] = 0, \text{ mit } k_0 < k_{zs}, Z_{b,\text{OS}} \text{ ist rein imaginär.}$$

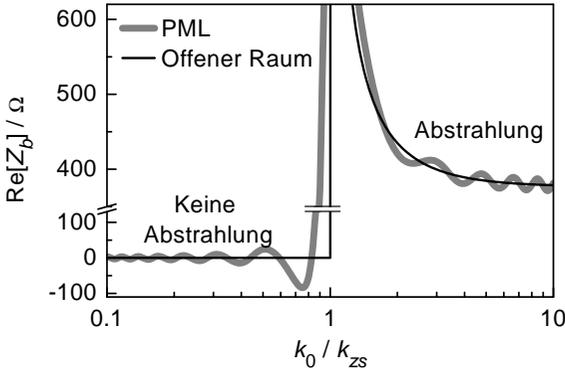
Bei der Betrachtung der Gleichungen (4.7) fällt auf, dass der Realteil der  $Z_{b,\text{PML}}$ -Impedanz erst für sehr weit ausgedehnte PML-Bereiche ( $b \rightarrow \infty$ ) gegen Null strebt. Prinzipiell sind sogar negative Impedanzwerte möglich, die PML wird in diesem Fall als aktives, also verstärkendes, Medium wirken.

Die Unterschiede zwischen PML und einem tatsächlich offenem Freiraum verdeutlicht Abbildung 4.13, die die Impedanzwerte der Gleichungen (4.6)

<b>PML</b>	
Feldkomponenten im Bereich (1) PML, $0 < y \leq b$	Feldkomponenten im Bereich (2) Freiraum, $b < y < c$
$E_x^{(1)} = \frac{-j\omega\frac{\mu_0}{\eta}}{k_0^2 - k_{zs}^2} \frac{\partial H_z^{(1)}}{\partial y}$ $H_y^{(1)} = \frac{-jk_z}{k_0^2 - k_{zs}^2} \frac{\partial H_z^{(1)}}{\partial x}$	$E_x^{(2)} = \frac{-j\omega\mu_0}{k_0^2 - k_{zs}^2} \frac{\partial H_z^{(2)}}{\partial y}$ $H_y^{(2)} = \frac{-jk_z}{k_0^2 - k_{zs}^2} \frac{\partial H_z^{(2)}}{\partial x}$
mit $H_z^{(1)} = a^{(1)} \cos[k_y^{(1)}y] e^{-jk_{zs}z}$ und $\frac{1}{\eta}k_y^{(1)2} = k_0^2 - k_{zs}^2$	$H_z^{(2)} = a^{(1)} \cos[k_y^{(2)}(y - c)] e^{-jk_{zs}z}$ und $k_y^{(2)2} = k_0^2 - k_{zs}^2$
<b>Offener Raum</b>	
Feldkomponenten im Bereich $-\infty < y < c$	
$E_x = \frac{-j\omega\mu_0}{k_0^2 - k_{zs}^2} \frac{\partial H_z}{\partial y}; \quad H_y = \frac{-jk_{zs}}{k_0^2 - k_{zs}^2} \frac{\partial H_z}{\partial y}$	
mit $H_z = -a^{(1)} \frac{k_0^2 - k_{zs}^2}{j\omega\mu_0} e^{-j(k_{zs}z - k_y y)}$ und $k_y^2 = k_0^2 - k_{zs}^2$	

**Tabelle 4.3:** Transversale Feldkomponenten der TE<sub>z</sub>-Welle im teilweise PML gefüllten Wellenleiter gemäss Abbildung 4.12. An der Stelle  $y = c$  wird ein Quellenfeld vorgegeben mit  $k_z = \beta = k_{zs}$ , somit sind  $x$ - und  $z$ -Abhängigkeit a priori bestimmt. Desweiteren gilt:  $k_0^2 = \omega^2\mu_0\varepsilon_0$  und  $\eta = 1 - j\frac{\kappa}{\omega\varepsilon_0}$ .

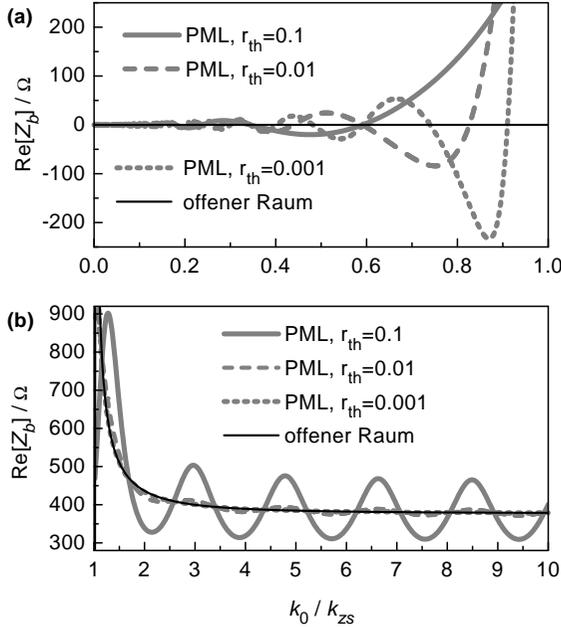
und (4.7) für verschiedene  $k_0/k_{zs}$ -Verhältnisse darstellt. Für die gewählte Ausbreitungskonstante  $k_{zs}$  und die PML-Parameter  $r_{\text{th}}$  und  $b$  ergeben sich deutliche Unterschiede zwischen PML und dem offenen Raum. Die  $Z_{b,\text{PML}}$ -Werte oszillieren um die „richtigen“  $Z_{b,\text{OS}}$ -Werte, auch die erwarteten negativen Dämpfungswerte  $\text{Re}[Z_{b,\text{PML}}] < 0$  im Bereich  $k_0 < k_{zs}$  treten auf.



**Abbildung 4.13:** Feldimpedanz  $Z_b$  an der Grenze zwischen PML und Freiraum ( $y=b$ ). Das Quellenfeld der Struktur 4.12 wird mit  $k_{zs} = 2\pi \cdot 1 \text{ GHz} \sqrt{\mu_0 \epsilon_0}$  festgelegt, die Leitfähigkeit im PML-Bereich beträgt  $\kappa = 0.0764 \text{ S/m}$ , entsprechend  $r_{\text{th}} = 0.01$ . Das PML-Profil ist konstant.

Die Abbildung 4.14 verdeutlicht den Einfluss des PML-Parameters  $r_{\text{th}}$  (nominaler Reflexionsfaktor) auf die Genauigkeit der PML. Höhere Reflexionsfaktoren  $r_{\text{th}}$ , also kleinere PML-Leitfähigkeiten  $\kappa$ , bewirken eine Abschwächung der Ungenauigkeiten im Bereich ohne Abstrahlung  $k_0 < k_{zs}$ , siehe Abbildung 4.14(a). Andererseits verschlechtern diese großen  $r_{\text{th}}$ -Werte die PML-Genauigkeit bei der Quantifizierung der tatsächlichen Abstrahlverluste im Bereich  $k_0 > k_{zs}$ , wie die Abbildung 4.14(b) verdeutlicht.

Für den Fall einer sehr weit ausgedehnten PML ( $b \rightarrow \infty$ ) würden die Abweichungen zwischen  $Z_{b,\text{PML}}$  und  $Z_{b,\text{OS}}$  im Bereich  $k_0 < k_{zs}$  für alle  $r_{\text{th}}$ -Werte verschwinden. Aufgrund der großen Entfernung zwischen Quellenfeld und der die PML terminierenden elektrischen Wand verschwinden für diesen Fall die Einflüsse der evaneszenten Felder, die diese Abweichungen verursachen. Die Abweichungen im Bereich  $k_0 > k_{zs}$  bleiben auch für den Fall sehr großer  $b$ -Werte bestehen, allerdings kann man in diesem Fall sehr kleine  $r_{\text{th}}$ -Werte vorgeben und die Abweichungen somit ebenfalls minimieren.



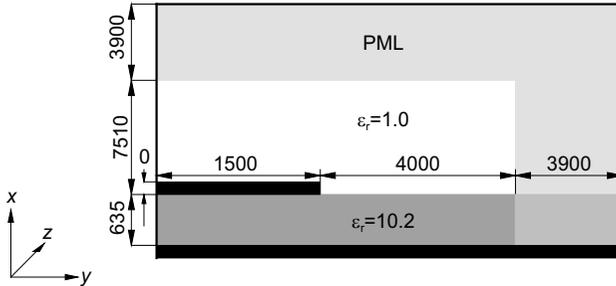
**Abbildung 4.14:** Feldimpedanz  $Z_b$  an der Grenze zwischen PML und Freiraum ( $y=b$ ). Das Quellenfeld der Struktur 4.12 wird mit  $k_{zs} = 2\pi \cdot 1 \text{ GHz} \sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}$  festgelegt. Die Leitfähigkeiten im PML-Bereich variieren mit  $\kappa = (0.0382, 0.0764 \text{ und } 0.01146) \text{ S/m}$ , entsprechend  $r_{th} = (0.1, 0.01 \text{ und } 0.001)$ , das PML-Profil ist konstant. In Abbildung (a) sind Ergebnisse für den Bereich in dem theoretisch keine Abstrahlung möglich ist ( $k_0 < k_{zs}$ ) dargestellt, in Abbildung (b) ist der Bereich mit Abstrahlverlusten ( $k_0 > k_{zs}$ ) dargestellt.

Insgesamt bleibt festzustellen, dass bei PML-Berechnungen gewisse Abweichungen gegenüber einem tatsächlich offenen Raum auftreten. Diese Ungenauigkeit ist auf die endliche Ausdehnung des PML-Bereichs zurückzuführen. Die Differenzen konnten anhand des Rechteckwellenleiters untersucht werden. Die Parameter dieser analytisch berechneten Struktur waren so gewählt, dass die Differenzen zwischen offenem Raum und PML sehr klar sichtbar wurden. Bei praktischen FDFD-PML Berechnungen erweist sich die PML trotzdem als sehr gut funktionierende absorbierende Randbedingung, wie das folgende Berechnungsbeispiel zeigen wird.

### 4.3.2 Numerisches Beispiel zur PML-Genauigkeit

Die Ergebnisse der analytischen Genauigkeitsuntersuchungen sollen hier anhand einer mit FDFD-PML berechneten, praxisrelevanten Struktur verifiziert werden. Es wird eine Mikrostreifenleitungs-Leckwellenantenne berechnet. Bei diesem längshomogenen Antennentyp wird die erste höhere Mode des Streifenleiters zur Leistungsabstrahlung verwendet, [36] [37]. Das funktioniert für Betriebsfrequenzen knapp unterhalb der Grenzfrequenz  $f_{\text{cut-off}}$  dieser Mode.

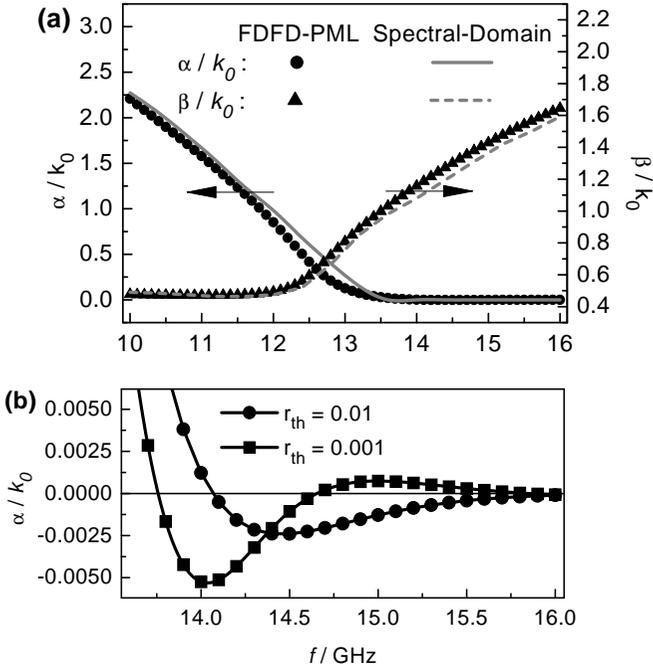
Bei der untersuchten Leckwellenantenne wurde eine Streifenleiterbreite von  $w = 3 \text{ mm}$  gewählt. Die Permittivität des  $0.635 \text{ mm}$  hohen Substrats be-



**Abbildung 4.15:** Geometrie der Leckwellenantenne, alle Abmessungen in  $\mu\text{m}$ . Die linke elektrische Seitenwand dient als Symmetrieebene. Die Struktur wird mit  $38 \times 39$  nichtäquidistanten Gitterzellen diskretisiert. Für den lateralen und den oberen PML-Bereich werden jeweils 10 Gitterzellen verwendet, der nominale PML-Reflexionsfaktor ist zu  $r_{\text{th}} = 0.01$  gewählt, das PML-Profil ist konstant.

trägt  $\varepsilon_r = 10.2$ , vergleiche Abbildung 4.15. Die Grenzfrequenz ist durch das Verhältnis  $\beta/k_0$  festgelegt. Für Phasenkonstanten  $\beta > k_0$  (mit  $k_0 = \omega\sqrt{\mu_0\varepsilon_0}$ ) kann die Antenne keine Leistung mehr in die umgebende Luft abgeben. Für die gewählten Parameter beträgt die Grenzfrequenz  $f_{\text{cut-off}} = 13.5 \text{ GHz}$ .

Die Ergebnisse der numerischen Berechnung mit FDFD-PML sind in der Darstellung 4.16 in Form der relativen Phasen- ( $\beta/k_0$ ) und Dämpfungskonstanten ( $\alpha/k_0$ ) abgebildet. Zusätzlich sind in der Abbildung 4.16(a) noch



**Abbildung 4.16:** Relative Dämpfungskonstante  $\alpha/k_0$  und Phasenkonstante  $\beta/k_0$  der Leckwellenantenne gemäß Abbildung 4.15. Im Diagramm (a) sind die Ergebnisse der FDFD-PML Rechnung, sowie Ergebnisse einer Spectral-Domain Analyse dargestellt. Das Diagramm (b) stellt eine Ausschnitts-Vergrößerung der Dämpfungskonstanten im Frequenzbereich oberhalb von  $f_{\text{cut-off}}$  dar, zusätzlich sind hier Ergebnisse für einen nominalen PML-Reflexionsfaktor  $r_{\text{th}} = 0.001$  eingezeichnet.

Ergebnisse einer Momentenmethode gemäß [38] eingetragen. Hierbei handelt es sich um das Spektralbereichsverfahren, dessen Anwendung zur Berechnung solcher längshomogenen Antennen weit verbreitet ist. Man erkennt eine sehr gute Übereinstimmung der Ergebnisse.

Eine genauere Analyse der relativen Dämpfungskonstanten  $\alpha/k_0$  im Bereich oberhalb der Grenzfrequenz  $f_{\text{cut-off}}$  erlaubt die Darstellung 4.16(b). Hier

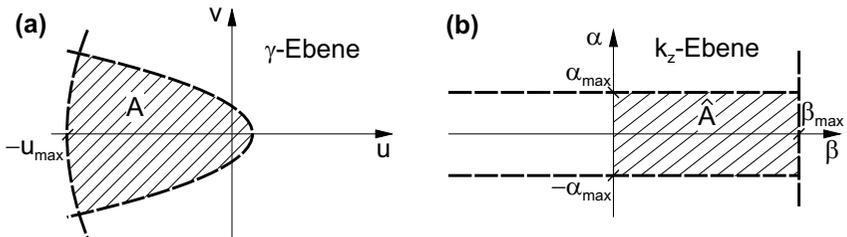
sind zusätzlich noch Ergebnisse für PML-Ränder mit verringertem Reflexionsfaktor  $r_{\text{th}} = 0.001$  dargestellt. Obwohl für den hier dargestellten Frequenzbereich ( $f > 13.5$  GHz) keine Abstrahlung mehr möglich ist, liefert die FDFD-PML Methode geringe Dämpfungswerte. Teilweise sind diese Werte negativ, hier muss die PML als aktives Medium wirken. Diese Resultate spiegeln die vorangegangenen analytischen Untersuchungen am Rechteckwellenleiter mit Quellenfeld wieder. Auch das oszillierende Verhalten der residualen  $\alpha$ -Werte kann beobachtet werden. Ebenfalls in Übereinstimmung mit den analytischen Voruntersuchungen bewirkt eine Verringerung des  $r_{\text{th}}$ -Parameters eine stärkere Ausprägung dieses PML-Fehlers.

Angesichts der, absolut gesehen, sehr geringen Ungenauigkeiten bei der Berechnung der  $\alpha/k_0$ -Werte bleibt insgesamt jedoch festzuhalten, dass sich die FDFD-PML Methode zur Analyse längshomogener Antennenstrukturen gut eignet. Die verbleibenden Ungenauigkeiten bei der Berechnung der  $\alpha$ -Werte sind nicht auf numerische Dispersion oder ähnliche Effekte zurückzuführen. Vielmehr spiegeln sie der PML immanente Einschränkungen zur Emulation des Freiraums wieder. Die Genauigkeitsgrenzen konnten hier analytisch nachgewiesen werden.

## 4.4 Angepasste Eigenwertsuche

Die Eigenwertberechnungen mit F3D erfolgen prinzipiell wie im Kapitel 3.2 beschrieben. Da die FDFD-PML-Methode jedoch für Eigenwertrechnungen bis in den Submillimeterwellenbereich eingesetzt werden soll, ist eine geschickt strukturierte Eigenwertsuche unumgänglich. Es gilt einerseits alle gesuchten Moden des Wellenleiters sicher zu detektieren und andererseits aus Effizienzgründen das nach Eigenwerten abgesuchte Gebiet möglichst klein zu halten.

Die interessierenden Moden sind durch ein maximales  $\beta$  und  $\alpha$  definiert. Somit ist in der Ebene der Ausbreitungskonstanten ( $k_z$ -Ebene) ein rechteckförmiges Gebiet festzulegen. Diese Gebiet ist in Abbildung 4.17(b) durch die schraffierte Fläche  $\hat{A}$  gekennzeichnet. Alle Eigenwerte, die den Ausbrei-



**Abbildung 4.17:** Die gesuchten Werte in (a) der Ebene der Eigenwerte ( $\gamma$ -Ebene), sowie (b) in der Ebene der komplexen Eigenwerte ( $k_z$ -Ebene).

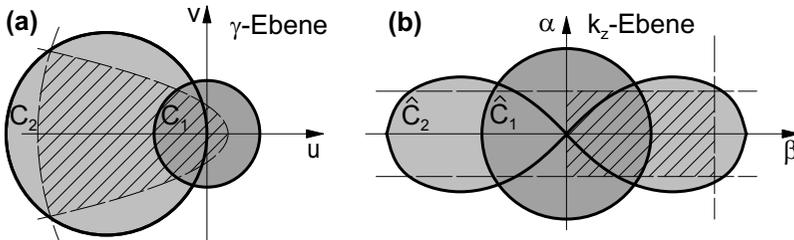
tungskonstanten innerhalb dieses Gebietes entsprechen, müssen gefunden werden. Die Ausdehnung dieses Rechtecks reicht auf der Realteilachse der  $k_z$ -Ebene bis  $\beta_{\max} = \omega(\mu_0\mu_{r,\max}\varepsilon_0\varepsilon_{r,\max})^{1/2}$ , wobei  $\mu_{r,\max}$  und  $\varepsilon_{r,\max}$  den maximalen relativen Permeabilitäts- und Permittivitätswerten im Wellenleiterquerschnitt entsprechen. Auf der Imaginärteilachse ist das rechteckförmige Gebiet  $\hat{A}$  durch einen frei wählbaren maximalen Dämpfungswert  $\alpha_{\max}$  festzulegen. Für viele praxisrelevante Berechnungen hat sich ein Wert von

$\text{Im}[k_z] = 2500 \text{ m}^{-1}$ , entsprechend  $\alpha_{\max} \approx 22 \text{ dB/mm}$  bewährt. Die konforme Abbildung des beschriebenen rechteckförmigen Gebietes  $\hat{A}$  auf die Ebene der Eigenwerte ( $\gamma$ -Ebene) liefert ein Gebiet  $A$ , siehe Abbildung 4.17(a), welches durch die Parabelbögen

$$v = \pm 4 \frac{\Delta z}{2} \beta_{\max} \sqrt{u + 4 \frac{\Delta z^2}{2} \beta_{\max}^2} \quad \text{und} \quad v = \pm 4 \frac{\Delta z}{2} \alpha_{\max} \sqrt{-u + 4 \frac{\Delta z^2}{2} \alpha_{\max}^2}$$

begrenzt ist. Da Eigenwertsuchverfahren im allgemeinen nur die Selektion kreisförmiger Gebiete gestatten, gilt es nun diese Fläche  $A$  möglichst effektiv mit kreisförmigen Gebieten  $C$  abzudecken. Innerhalb der kreisförmigen Gebiete können dann separate Eigenwertprobleme gelöst werden. Entsprechende Verfahren wurden am WIAS<sup>3</sup> entwickelt, [18] [24] [39].

Zunächst wurde ein Zweischrittverfahren implementiert. Im ersten Schritt werden alle Eigenwerte innerhalb eines Kreises  $C_1$  um den Ursprung ( $u=v=0$ ) der  $\gamma$ -Ebene ermittelt, siehe Abbildung 4.18(a). Diese Eigenwerte entspre-



**Abbildung 4.18:** Eigenwertsuche mit dem Zweischrittverfahren. Die konformen Abbildungen der zwei kreisförmigen Gebiete ( $C_1, C_2$ ) der  $\gamma$ -Ebene (a) entsprechen dem Kreisgebiet  $\hat{C}_1$  beziehungsweise der Lemniskate  $\hat{C}_2$  in der  $k_z$ -Ebene (b).

chen den Ausbreitungskonstanten innerhalb des Kreisgebietes  $\hat{C}_1$ , um den Ursprung ( $\beta = \alpha = 0$ ) der  $k_z$ -Ebene, siehe Abbildung 4.18(b). Im zweiten Schritt werden Eigenwerte in einem weiteren kreisförmigen Gebiet  $C_2$  gesucht. Dieser

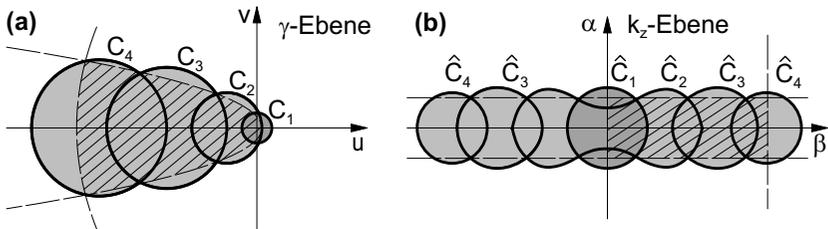
<sup>3</sup>Weierstrass Institute for Applied Analysis and Stochastics, Berlin

$C_2$ -Kreis hat seinen Mittelpunkt auf der  $u$ -Achse der Eigenwertebene, sein Umfang tangiert die  $v$ -Achse. Dieser Kreis muss groß genug gewählt werden, um die schraffierte Fläche zwischen den durch  $\beta_{\max}$  und  $\alpha_{\max}$  definierten Parabelbögen zu überdecken. Die konforme Abbildung des Kreises  $C_2$  auf die Ebene der Ausbreitungskonstanten führt auf die durch

$$(\beta^2 + \alpha^2)^2 - R(\beta^2 - \alpha^2) = 0 \quad (4.8)$$

definierte Lemniskate<sup>4</sup>  $\hat{C}_2$ , siehe Abbildung 4.18(b). Die Größe  $R$  in der Formel (4.8) ist äquivalent zum Radius des Kreises  $C_2$  zu wählen. Die Formel zur Berechnung dieses Radius, sowie weitere Details bezüglich der konformen Abbildung werden ausführlich in [18] beschrieben.

Wie sich bei praktischen Berechnungen mit der FDFD-PML zeigte, ist die Unterteilung der  $\gamma$ -Ebene in nur zwei Teilgebiete oftmals nicht ausreichend. Um eine weitere Verbesserung der Konvergenz bei der Eigenwertsuche zu



**Abbildung 4.19:** Eigenwertsuche mit dem Mehrschrittverfahren. Die konformen Abbildungen der kreisförmigen Gebiete ( $C_1 \dots C_4$ ) der  $\gamma$ -Ebene (a) entsprechen dem Kreisgebiet  $\hat{C}_1$  beziehungsweise den Cassini Kurven  $\hat{C}_2$  bis  $\hat{C}_4$  in der  $k_z$ -Ebene (b).

erzielen, wurde daher ein Mehrschrittverfahren [39] implementiert, derart, dass nun neben dem Ursprungskreis  $C_1$  noch in  $n$  weiteren Kreisgebieten  $C_i$  Eigenwertberechnungen durchgeführt werden, siehe Abbildung 4.19(a).

<sup>4</sup>Ebene algebraische Kurve vierter Ordnung in Form des „ $\infty$ “-Zeichens.

Durch die konforme Abbildung werden die Kreise  $C_i$  mit  $1 < i \leq n$  auf Cassini<sup>5</sup>-Kurven mit

$$(\beta^2 + \alpha^2)^2 - R_1 (\beta^2 - \alpha^2) = R_2 \quad (4.9)$$

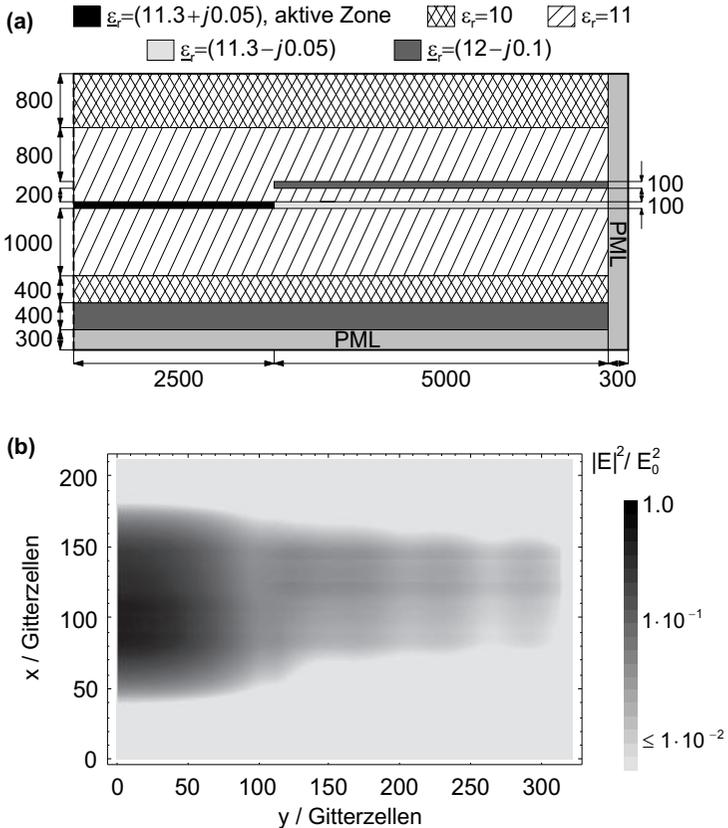
abgebildet. Die Kurven  $\hat{C}_i$  decken das nach Ausbreitungskonstanten zu durchsuchende Gebiet in der  $k_z$ -Ebene vollständig ab, siehe Abbildung 4.19(b). Die Cassini-Kurven können die Form von Ovalen mit Einbuchtung (siehe  $\hat{C}_2$ ) oder von zwei getrennten Ovalen (siehe  $\hat{C}_3$  oder auch  $\hat{C}_4$ ) haben. Auch die im Zweischrittverfahren vorgestellte Lemniskate  $\hat{C}_2$  ist eine Spezialform der Cassini-Kurve mit  $R_2 = 0$ . Weiterführende Erläuterungen bezüglich der Berechnung der Radien  $R_1$  und  $R_2$  in Formel (4.9), sowie eine detaillierte Beschreibung der konformen Abbildungen sind in [39] [40] gegeben.

Als ein extremes Beispiel zur Überprüfung der Effektivität des implementierten Mehrschrittverfahrens dient die Berechnung der Fundamentalmode eines SAS- (Self Aligned Strip) Halbleiterlasers. Die Berechnung des in Abbildung 4.20(a) dargestellten Wellenleiterquerschnitts stellt extreme Anforderungen an den Eigenwertlöser, da ein im Verhältnis zur Wellenlänge sehr großer Querschnitt von  $4100 \times 7800 \text{ nm}^2$  zu diskretisieren ist. Berechnet wird die Ausbreitungskonstante der Fundamentalmode für eine Laserfrequenz von  $f = 300 \text{ THz}$ . Der Querschnitt des Wellenleiters wird hierzu mit  $211 \times 322$  nichtäquidistanten Gitterzellen diskretisiert, wobei die PML-Schichten jeweils 10 Gitterzellen breit sind. Aufgrund der sehr hohen Laserfrequenz entsteht ein sehr schmaler Streifen in der  $k_z$ -Ebene ( $\beta_{\max} = 21\,765\,592 \text{ m}^{-1}$ ,  $\alpha_{\max} = 2\,500 \text{ m}^{-1}$ ) der mit insgesamt 74 Cassini-Kurven nach der Eigenmode abgesehen wird. Nach einer Berechnungszeit von ca. 2.5 h (auf einer XP1000-Workstation, Alpha Prozessor EV67) wird die Ausbreitungskonstante der Fundamentalmode gefunden. Das  $|E|^2$ -Feld dieser Mode, welches näherungs-

---

<sup>5</sup>Ebene Kurve, definiert als „Ort eines Punktes  $M$ , dessen Entfernungen von zwei festen Punkten ein konstantes Produkt haben“. Hergeleitet von Giovanni Domenico Cassini (1625 – 1712)

weise dem Nahfeld des Lasers entspricht, ist in Abbildung 4.20(b) dargestellt. Die erfolgreiche Berechnung dieses Extrembeispiels verdeutlicht die Effektivität der entwickelten Mehrschrittmethode, auch für Eigenwertberechnungen bei höchst komplexen Querschnitten.



**Abbildung 4.20:** Dargestellt sind (a) die Geometrie (alle Abmessungen in nm) und Materialeigenschaften des Wellenleiters (SAS-Laser), und (b) das Nahfeld der berechneten Lasermode. Da die Struktur mit nichthäquidistanten Gitterzellen diskretisiert wurde, ist die Felddarstellung (b) nicht maßstabsgerecht.



## 5 Dispersion und Abstrahlung der Koplanarleitung

In diesem Kapitel sollen die geometrische Dispersion sowie die durch Abstrahlung verursachten Verluste bei koplanaren Wellenleitern bis in den Terahertzbereich (100 . . . 1000 GHz) mit der FDFD-PML-Methode untersucht werden. Die Koplanarleitung ist bei Höchsthfrequenzschaltungen in diesem Frequenzbereich ein bevorzugt verwendeter Leitungstyp, da sie günstige Miniaturisierungsmöglichkeiten unter Beibehaltung der 50-Ohm-Charakteristik bietet.

Die Untersuchungen sind zum einen wichtig für spezielle Terahertzschaltungen. Deren Anwendungsgebiete liegen im Bereich der Radioastronomie, sowie im Bereich der Materiedetektion. Die Terahertzstrahlung eignet sich sehr gut zur Charakterisierung chemischer und biologischer Substanzen, da die Molekülresonanzen diverser organischer und anorganischer Stoffe in diesen Frequenzbereich fallen. Ein weiteres bedeutendes Forschungsgebiet ist die Entwicklung des Terahertzradar [41], als ein bildgebendes System mit hoher räumlicher Auflösung, zur berührungslosen Personenkontrolle in sicherheitsrelevanten Bereichen des öffentlichen Lebens. Zum anderen ist die Kenntnis der Dispersions- und Abstrahlungseigenschaften aber auch wichtig, um parasitäre Effekte bei niedrigen Frequenzen vermeiden zu können.

Beim Betrieb von Hochfrequenzschaltungen spielen die durch Abstrahlung von Signalleistung auftretenden Verluste mit steigender Frequenz eine immer größere Rolle. Die folgenden Untersuchungen zeigen, dass die Abstrahlverluste der Koplanarleitung mindestens mit  $f^3$  ansteigen. Währenddessen steigt die Quantität Skin-Effekt bedingter Verluste (ohmsche Verluste) nur mit  $f^{1/2}$

an, dielektrische Verluste im Substrat steigen nur mit der Frequenz  $f$  an. Es zeigt sich, dass die Auswirkungen der untersuchten Dispersions- und Abstrahlmechanismen nicht erst im Terahertzbereich wirksam werden, sondern bereits im Schaltungsdesign für W-Band-Applikationen (75 . . . 110 GHz) zu berücksichtigen sind.

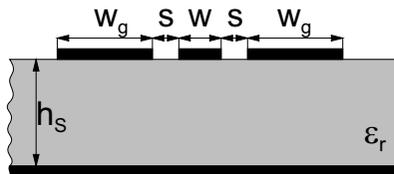
Bisherige Untersuchungen zur Abstrahlung auf koplanaren Wellenleitern beschränkten sich auf qualitative Beschreibungen der als „leakage phenomena“ bezeichneten Effekte [34] [42]. Des weiteren werden in [43] [44] analytische Modelle zur Berechnung der Dispersion und Dämpfung von CPW's vorgestellt, die allerdings vereinfachend eine unendliche Ausdehnung des Substrats sowie der Massemetallisierungen voraussetzen. In [35] [Kapitel 4.2 dieser Arbeit] wird das resonante Dispersionsverhalten der CPW-Mode und der höheren Moden, verursacht durch eine endliche Masseausdehnung, berechnet. Da das Substrat hier jedoch lateral begrenzt ist, existiert keine Abstrahlungsdämpfung.

In [9] [45] werden schließlich Dispersion und Abstrahlung der CPW mit verschiedenen Masseleiterbreiten berechnet. Hierzu wird die FDTD-Methode mit lateraler PML eingesetzt, um die dreidimensionale, längshomogene CPW-Leitung zu berechnen. Die CPW-Mode wird mit einer Feldvorgabe zwischen Mittel- und Masseleiter angeregt. Dann berechnet sich die komplexe Ausbreitungskonstante  $k_z$  aus dem Verhältnis der elektrischen Felder an zwei aufeinanderfolgenden Transversalebene der Leitung. Der Abstand zwischen diesen Ebenen und der Feldanregung ist derart zu wählen, dass sich aus der vorgegebenen, vereinfachten Feldvorgabe das Feld der lateral abstrahlenden CPW-Mode ausgebildet hat. Bei Berechnungen von Koplanarleitungen mit dünnen, grundmetallisierten Substraten besteht hierbei die Gefahr, dass sich CPW- und PPL-Mode nicht sicher voneinander trennen lassen. Zusätzlich benötigt man longitudinale PML's an den Enden der längshomogenen Leitung, um hier Reflexionen und somit Ergebnisverfälschungen durch nachlaufende

Signale zu vermeiden.

Die Berechnung der Leitungseigenschaften mit der FDFD-PML-Methode gestaltet sich einfacher. Hier ergibt sich die komplexe Ausbreitungskonstante  $k_z = \beta - j\alpha$  direkt aus der Lösung der zweidimensionalen Eigenwertberechnung. Ergänzend zu den in [9] vorgestellten Berechnungen der CPW-Eigenschaften im Terahertzbereich erlaubt die hier verwendete Methode eine genaue Analyse der Kopplungseffekte zwischen CPW-Mode und höheren Moden aufgrund der Substratdicke, beziehungsweise der koplaren Metallisierungsbreite. Wegen der strikten Modentrennung bei der Eigenwertlösung eignet sich das Frequenzbereichsverfahren insbesondere für die Berechnung von rückseitenmetallisierten Koplantarleitungen (Conductor-Backed-Coplanar-Waveguide, CB-CPW), der Einfluss verschiedener Substratdicken  $h_S$  kann dediziert ermittelt werden.

Ziel der Berechnungen ist die Erstellung von Design-Regeln zur Gestaltung von Koplantarleitungen bei Höchstfrequenzschaltungen. Mit FDFD-PML werden unterschiedlichste Geometrien der rückseitenmetallisierten Koplantarleitung, siehe Abbildung 5.1, berechnet. Diese Ergebnisse dienen darüber hinaus zur Entwicklung eines Ersatzschaltbild-Modells der CB-CPW, welches die Dispersion und die durch Abstrahlung verursachte Dämpfung möglichst exakt beschreibt [46] [47].



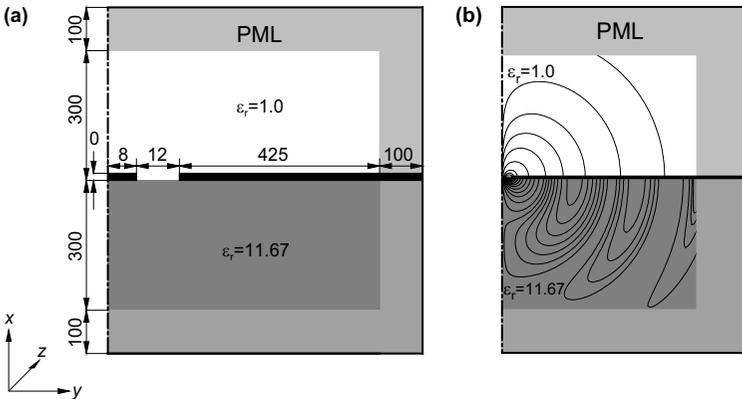
**Abbildung 5.1:** Querschnitt der rückseitenmetallisierten Koplantarleitung (CB-CPW) mit der Mittelleiterbreite  $w$ , den Schlitzbreiten  $s$  und den Masselleiterbreiten  $w_g$ , auf einem Halbleitersubstrat mit Permittivität  $\epsilon_r$  und Dicke  $h_S$ .

## 5.1 CPW ohne Rückseitenmetallisierung

Aufgrund der jeweils unterschiedlichen Randbedingungen für das Ausbreitungsverhalten werden im folgenden die Fälle ohne beziehungsweise mit Rückseitenmetallisierung unterschieden, wobei außerdem die Ausdehnung der koplanaren Massemetallisierungen zu beachten ist.

### 5.1.1 Unendlich ausgedehnte Massemetallisierungen

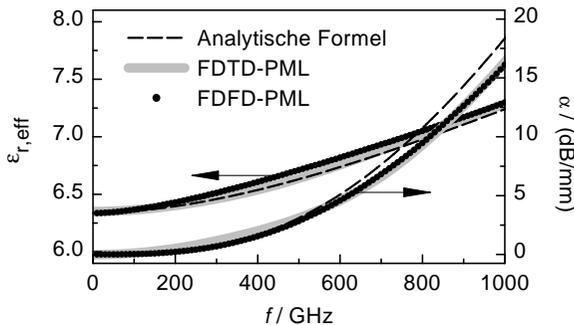
Mit der FDFD-PML Methode wird zunächst eine CPW berechnet, bei der die Substratdicke  $h_S$  und auch die Massebreite  $w_g$  als unendlich ausgedehnt angenommen werden. Die Geometrie der Struktur ist in Abbildung 5.2(a) dargestellt. Berechnet wird eine CPW auf hochohmigem Siliziumsubstrat ( $\epsilon_r = 11.67$ ) mit einer Mittelleiterbreite von  $w = 16\mu\text{m}$  und einem Masse-Masse-Abstand (ground-to-ground spacing) von  $w_{g2g} = w + 2s = 40\mu\text{m}$ . Die



**Abbildung 5.2:** (a) Geometrie der berechneten CPW, alle Abmessungen in  $\mu\text{m}$ . Die linke magnetische Seitenwand dient als Symmetrieebene. Die Struktur wird mit  $94 \times 81$  nichtäquidistanten Gitterzellen diskretisiert, für die PML-Bereiche werden jeweils 10 Gitterzellen verwendet. (b) Feldlinien des  $E$ -Feldes der CPW-Mode für die Frequenz  $f = 500\text{ GHz}$ .

unendlich dünn modellierten Metallisierungen sind als ideal leitend angenommen und auch das dielektrische Halbleitersubstrat wird als verlustfrei angenommen. Somit sind alle auftretenden Verluste ausschließlich durch laterale Abstrahlung verursacht. Aufgrund der unendlichen Substrat-Ausdehnung, emuliert durch PML-Berandungen, verliert die CPW-Mode lateral Leistung. Für diese Abstrahlung existiert keine untere Grenzfrequenz, da im weit ausgedehnten Substrat ein kontinuierliches Wellenspektrum existiert, wodurch Signalanteile der geführten CPW-Mode seitlich ins Substrat abgeführt werden. Die Größe dieser Verluste steigt überproportional mit der Frequenz an. In unteren Frequenzbereichen spielen Abstrahlungsverluste, aufgrund des geringen Masse-Masse-Abstands ( $w_{g2g} = 40 \mu\text{m}$ ), keine bedeutende Rolle, im Frequenzbereich über 300 GHz ist die seitliche Abstrahlung jedoch signifikant wirksam, wie die Feldlinien-Darstellung 5.2(b) verdeutlicht. Die laterale Abstrahlung kann man bei einer Frequenz von  $f = 500$  GHz klar erkennen.

Die Eigenschaften dieser Leitung sind in Abbildung 5.3 zusammengefasst. Neben den FDFD-PML-Ergebnissen für die Dispersion in Form der effektiven



**Abbildung 5.3:** Effektive Permittivität und Dämpfung der CPW gemäss Bild 5.2 als Funktion der Frequenz. Neben den mit F3D (FDFD-PML) berechneten Resultaten sind Ergebnisse eines analytischen Modells [43] und Ergebnisse einer FDTD-Berechnung [9] dargestellt.

ven Permittivität  $\varepsilon_{r,\text{eff}} = \beta^2 / \beta_0^2$  und der Dämpfung  $\alpha$  in dB/mm sind FDTD-Ergebnisse aus [9] und Ergebnisse eines analytischen Näherungs-Modells [43] eingezeichnet. Man erkennt eine gute Übereinstimmung der mit den unterschiedlichen Verfahren ermittelten Resultate. Der Anstieg der Dämpfung mit der Frequenz folgt hierbei einem  $f^3$ -Verhalten.

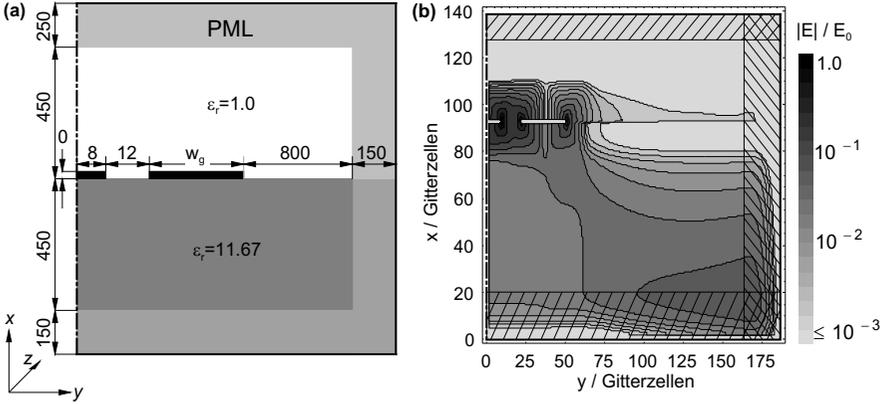
### 5.1.2 Endliche Massemetallisierungen

Auch im Falle finiter Masseleiterbreiten  $w_g$  wird der CPW-Mode immer Leistung in ein unendlich ausgedehntes Substrat verlieren, es existiert keine untere Grenzfrequenz für die Abstrahlung. Zusätzlich sind resonante Effekte, verursacht durch höhere Moden der koplanaren Gesamt-Metallisierungsbreite  $w_{\text{tot}} = w + 2s + 2w_g$  zu erwarten. Gemäss [9] gilt für die bezogene Ausbreitungskonstante dieser Moden  $n$ -ter Ordnung näherungsweise

$$\text{HM}_{0n} : \frac{\beta^{(0n)}}{\beta_0} = \sqrt{\varepsilon_r - \left( \frac{n\pi}{\beta_0 w_{\text{tot}}/2} \right)^2} \quad \text{mit } n = 1, 2, \dots$$

Sie entsprechen also annähernd den höheren Moden einer Mikrostreifenleitung mit Leiterbreite  $w_{\text{tot}}$ .

Um Kopplungseffekte und den Einfluss verschiedener Massebreiten auf das Dispersions- und Dämpfungsverhalten der CPW-Mode zu untersuchen, wurden verschiedene Leitungsstrukturen gemäss Abbildung 5.4(a) berechnet. Die Massebreiten wurden hierbei im Bereich  $w_g = (20 \dots 160) \mu\text{m}$  variiert. Abbildung 5.4(b) veranschaulicht die laterale Abstrahlung der CPW-Mode in das, durch die PML-Berandung emulierte, unendlich ausgedehnte Substrat hinein. Abbildung 5.5 zeigt die Ergebnisse. Sowohl bei den Dispersionskurven, Abbildung 5.5(a), als auch bei den Dämpfungskurven 5.5(b) treten ausgeprägte Maxima auf. Die Grenzfrequenz für das erste Maximum korreliert hierbei erwartungsgemäss mit der Masse-Metallisierungsbreite  $w_g$ . Sie ergibt sich aus dem Schnittpunkt der effektiven Permittivitäten der quasistatischen

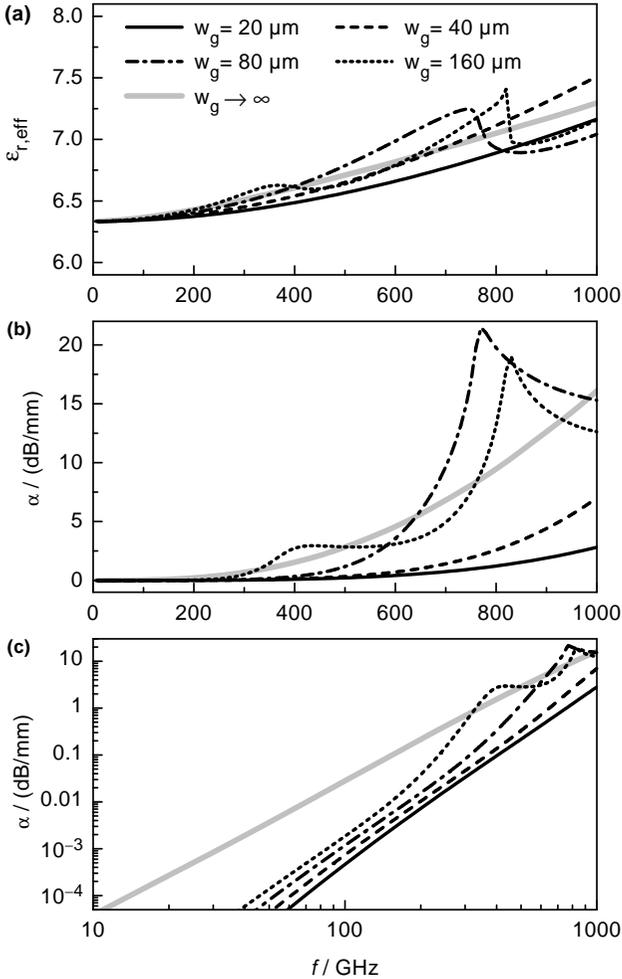


**Abbildung 5.4:** (a) Geometrie der berechneten CPW, alle Abmessungen in  $\mu\text{m}$ . Die Breite der Massemetallisierung wird variiert mit  $w_g = (20, 40, 80 \text{ und } 160) \mu\text{m}$ . Die linke magnetische Wand dient als Symmetrieebene. (b) Feldverteilung der CPW-Mode mit  $w_g = 80 \mu\text{m}$  bei der Frequenz  $f = 850 \text{ GHz}$ . Da mit einem nichtäquidistantem Gitter diskretisiert wurde, ist diese Darstellung nicht maßstabsgerecht.

Näherung für die CPW-Mode ( $\varepsilon_{r,\text{eff},q} = (\varepsilon_r + 1)/2$ ) und der ersten geführten Substratmode ( $\varepsilon_{r,\text{eff},\text{HM}_{01}} = \varepsilon_r - 4\pi^2/(\beta_0 w_{\text{tot}})^2$ ) zu

$$f_{g,w_{\text{tot}}} = \frac{2}{w_{\text{tot}} \sqrt{2\mu_0 \varepsilon_0 (\varepsilon_r - 1)}}. \quad (5.1)$$

Die Darstellung 5.5(c) im doppeltlogarithmischen Maßstab verdeutlicht die Unterschiede im Dämpfungsverhalten in Abhängigkeit von der Masseleiterausdehnung. Grundsätzlich verringert sich die Abstrahlungsdämpfung, je schmäler die Massemetallisierungen  $w_g$  gewählt werden. Im Vergleich mit der unendlich ausgedehnten Metallisierung ( $w_g \rightarrow \infty$ ) tritt hier jedoch ein prinzipieller Unterschied auf: Die Dämpfungskurven für die endlichen Massebreiten weisen eine  $f^4$ - $f^5$ -Charakteristik auf, die von den Kopplungseffekten mit den  $\text{HM}_{0n}$ -Moden merklich beeinflusst wird, währenddessen der Fall mit unendlich ausgedehnten Massemetallisierungen einen  $f^3$ -Verlauf zeigt.



**Abbildung 5.5:** (a) Dispersion und (b, c) Dämpfung der CPW gemäss Bild 5.4 als Funktion der Frequenz (Maßstab linear (a, b), bzw. doppelt-logarithmisch (c)). Die Breite der Massemetallisierungen auf dem unendlich ausgedehnten Substrat ( $h_S \rightarrow \infty$ ) variiert mit  $w_g = (20, 40, 80 \text{ und } 160) \mu\text{m}$ , zusätzlich sind die Ergebnisse für eine unendlich ausgedehnte Massemetallisierung ( $w_g \rightarrow \infty$ ) eingetragen.

## 5.2 CPW mit Rückseitenmetallisierung

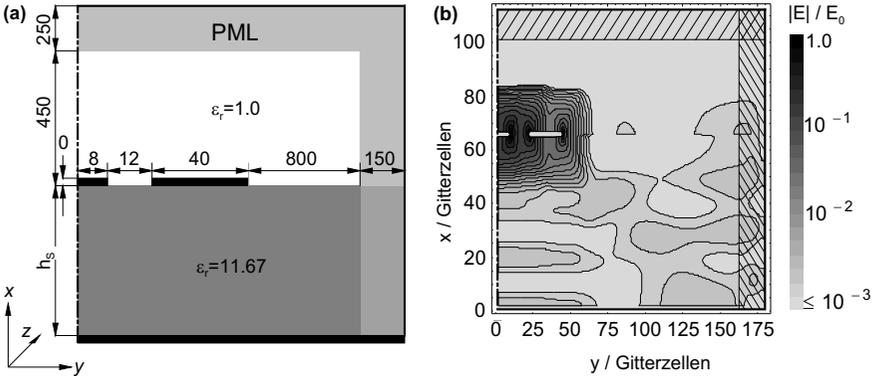
Im Falle der rückseitenmetallisierten Koplanarleitung (CB-CPW) ist eine veränderte Dämpfungscharakteristik für die CPW-Mode zu erwarten. Während im Falle der unendlichen Substratdicke ( $h_S \rightarrow \infty$ ) ein kontinuierliches Substratmoden-Spektrum die Abstrahlverluste bestimmte, ist nun der Fall eines diskreten Spektrums von Oberflächenwellen einer dielektrischen Platte der Dicke  $h_S$  anzunehmen. Eine durch Abstrahlung verursachte Dämpfung ist somit gemäss [47] erst oberhalb einer Grenzfrequenz

$$f_{g,h_S} = \frac{\arctan[\epsilon_r]}{\pi h_S \sqrt{2\mu_0\epsilon_0(\epsilon_r - 1)}} \quad (5.2)$$

möglich. Unterhalb dieser Grenzfrequenz ist die Phasenkonstante  $\beta$  der CPW-Mode größer als die der Oberflächenwelle, somit kann in diesem Frequenzbereich kein lateraler Leistungsverlust durch Kopplung zwischen CPW- und Substratmode auftreten.

### 5.2.1 Einfluss der Substratdicke

Um die oben aufgeführten Überlegungen bezüglich der Verlustmechanismen bei der CB-CPW zu verifizieren, wurden mit FDFD-PML koplanare Leitungen auf verschiedenen hohen Substraten berechnet. Die geometrischen Abmessungen der untersuchten Strukturen sind der Abbildung 5.6(a) zu entnehmen. Die Substratdicke wird mit  $h_S = 200 \mu\text{m}$ ,  $400 \mu\text{m}$  und  $600 \mu\text{m}$  variiert. In Abbildung 5.6(b) ist die  $E$ -Feldverteilung der CPW-Mode bei  $f = 500 \text{ GHz}$  dargestellt. Man erkennt hier sowohl die laterale Abstrahlung in das Substrat, als auch die Kopplung zwischen CPW-Mode und der zweiten höheren Mode der PPL ( $\text{HM}_{20}$ ). Die  $\text{HM}_{m0}$ -Moden sind als höhere Moden der Parallelplattenleitung (PPL) zwischen den koplanaren Leitern und der Grundmetallisierung

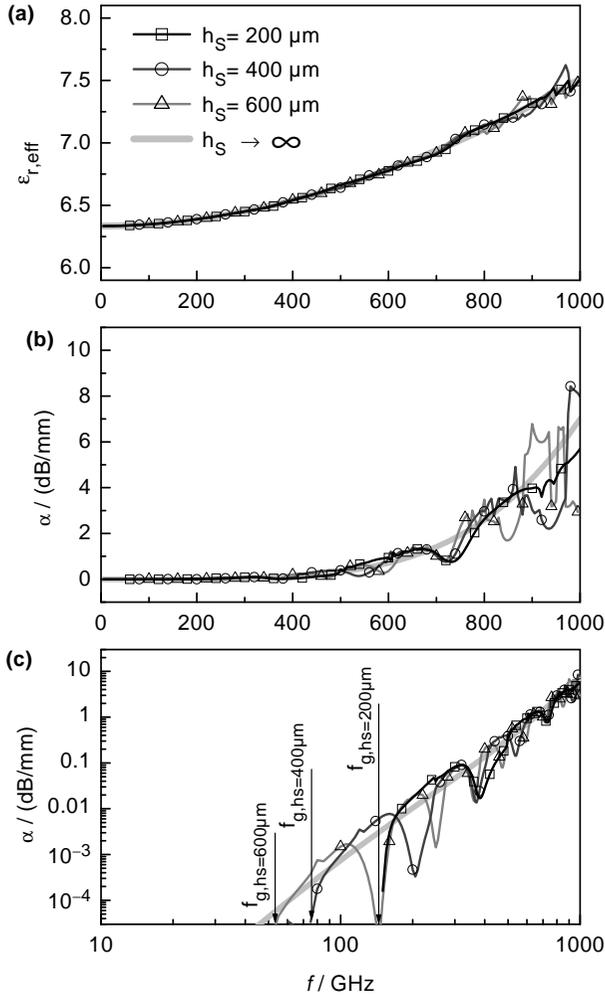


**Abbildung 5.6:** (a) Geometrie der berechneten CPW, alle Abmessungen in  $\mu\text{m}$ . Die Substratdicke wird variiert mit  $h_S = (600, 400 \text{ und } 200) \mu\text{m}$ . (b) Feldverteilung der CPW-Mode mit  $h_S = 400 \mu\text{m}$  bei der Frequenz  $f = 500 \text{ GHz}$ . Da mit einem nichtäquidistantem Gitter diskretisiert wurde, ist diese Darstellung nicht maßstabsgerecht.

zu verstehen, für ihre bezogenen Ausbreitungskonstanten gilt

$$\text{HM}_{m0} : \frac{\beta^{(m0)}}{\beta_0} = \sqrt{\epsilon_r - \left(\frac{m\pi}{\beta_0 h_S}\right)^2} \quad \text{mit } m = 1, 2, \dots$$

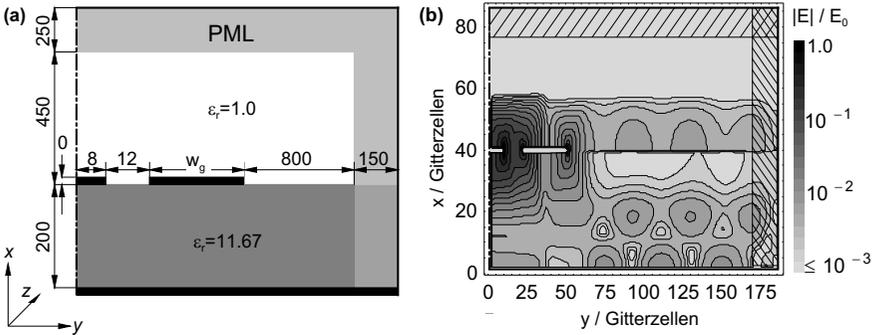
Die Kurvenverläufe der berechneten Dispersion und Dämpfung in den Abbildungen 5.7(a) und (b) zeigen, dass die Substratdicke quasi keinen Einfluss auf das Dispersions- und Dämpfungsverhalten der CPW hat. Die berechneten Werte bewegen sich um die Kurven für die CPW auf einem unendlich ausgedehnten Substrat ( $h_S \rightarrow \infty$ ). Eine genauere Untersuchung der Dämpfungscharakteristik erlaubt die doppeltlogarithmische  $\alpha$ -Darstellung 5.7(c). Man erkennt eine gute Übereinstimmung der mit der Formel (5.2) postulierten Grenzfrequenzen und den FDFD-PML-Resultaten. Unterhalb der Grenzfrequenz ist die Dämpfung, im Rahmen der PML-Genauigkeit, vergleichbar Kapitel 4.3, gleich Null. Oberhalb dieser Grenzfrequenz steigt die Dämpfung zunächst mit einer  $f^5$ -Charakteristik an und zeigt dann ausgeprägte resonante Effekte, verursacht durch die Kopplung mit höheren  $\text{HM}_{mn}$ -Moden.



**Abbildung 5.7:** (a) Dispersion und (b,c) Dämpfung der CPW gemäss Bild 5.6 über der Frequenz. Die Substratdicke variiert mit  $h_S = (600, 400 \text{ und } 200) \mu\text{m}$ . Die Massebreite beträgt  $w_g = 40 \mu\text{m}$ . Zusätzlich sind die Ergebnisse für das unendlich ausgedehnte Substrat ( $h_S \rightarrow \infty$ ) eingetragen. Die Grenzfrequenzen für die Abstrahlung gemäss Formel (5.2) betragen  $f_{g,h_S} = (51, 77 \text{ und } 153)$  GHz

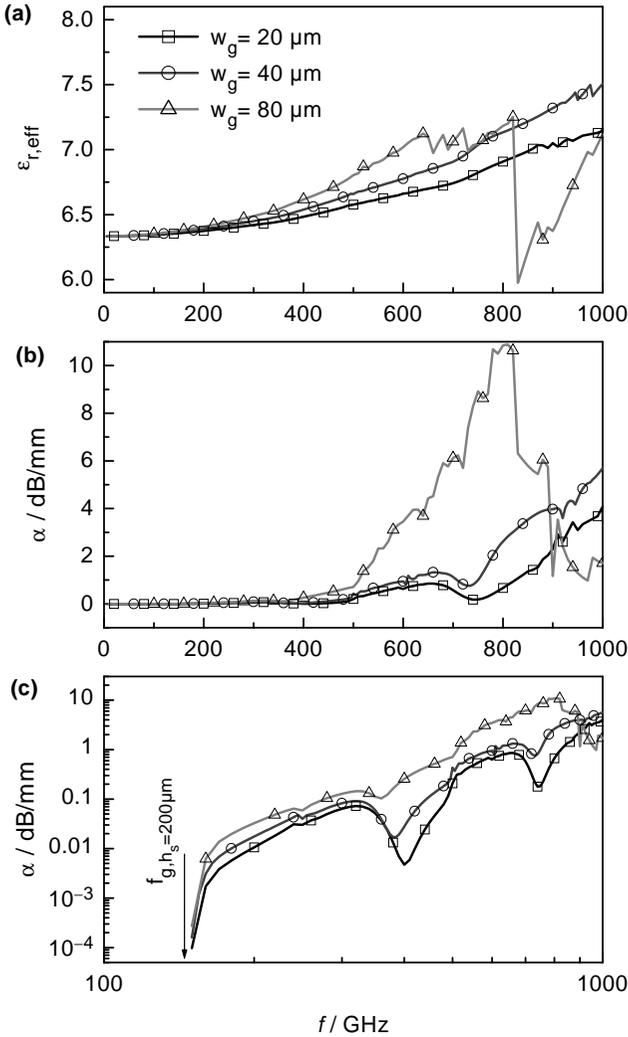
### 5.2.2 Einfluss der Masse-Metallisierungsbreiten

Der Einfluss verschiedener Massebreiten  $w_g$  wird auf einem relativ dünnen Halbleitersubstrat mit  $h_S = 200\mu\text{m}$  untersucht, vergleiche Abbildung 5.8(a). Wie in der  $E$ -Feld-Darstellung 5.8(b) für  $f = 500\text{ GHz}$  zu erkennen ist wird nun die Kopplung zwischen CPW- und  $\text{HM}_{10}$ -Mode sichtbar. Wiederum erkennt man den lateralen Leistungsverlust, gekennzeichnet durch die  $E$ -Felder der CPW-Mode, die bis in die seitliche PML-Berandung hineinragen.



**Abbildung 5.8:** (a) Geometrie der berechneten CPW, alle Abmessungen in  $\mu\text{m}$ . Die Breite der Massemetallisierung wird variiert mit  $w_g = (20, 40 \text{ und } 80)\mu\text{m}$ . (b) Feldverteilung der CPW-Mode mit  $w_g = 80\mu\text{m}$  bei der Frequenz  $f = 500\text{ GHz}$  dargestellt. Da mit einem nichttäquidistantem Gitter diskretisiert wurde, ist diese Darstellung nicht maßstabsgerecht.

In den Abbildungen 5.9(a)-(c) wird das Dispersions- und Dämpfungsverhalten der CB-CPW für verschiedene Massebreiten  $w_g$  dargestellt. Prinzipiell verhält sich die CB-CPW ähnlich wie die CPW auf dem unendlich hohen Substrat, vergleiche Abbildungen 5.5(a)-(b), das heißt, Dispersion und Dämpfung nehmen mit steigender Massebreite zu. Der doppeltlogarithmischen Darstellung 5.9(c) kann man entnehmen, dass die Grenzfrequenz  $f_{g,h_S}$  unabhängig von der Massebreite  $w_g$  ist. Sie wird gemäss Formel 5.2 ausschließlich von der Substratdicke  $h_S$  und der Permittivität  $\epsilon_r$  bestimmt.



**Abbildung 5.9:** (a) Effektive Permittivität und Dämpfung (b,c) der CPW gemäss Bild 5.8 als Funktion der Frequenz. Die Breite der Massemetallisierungen auf dem  $200 \mu\text{m}$  dicken Substrat variiert mit  $w_g = (20, 40 \text{ und } 80) \mu\text{m}$ .

### 5.2.3 Das erweiterte CPW-Modell

Ein Hauptziel der umfassenden Analyse verschiedenster Geometrien der CB-CPW mit der FDFD-PML-Methode war die Generierung eines Leitungsersatzschaltbild-Modells (ESB-Modell), das Dispersion und Dämpfung der CPW-Mode bis in den Submillimeterwellenbereich hinein erfasst. Grundlage hierfür war ein bereits bestehendes ESB-Modell [48], das den Einfluss von Leiterverlusten und endlichen Leiterdicken berücksichtigt. Dieses Modell soll nun auch die Abstrahlungseffekte möglichst genau nachbilden. ESB-Modelle lassen sich einfach in gängige Mikrowellen-Entwurfsprogramme integrieren und ermöglichen somit eine zweckmäßige Leitungsdimensionierung beim Entwurf integrierter HF-Schaltungen.

Die Untersuchung einer Vielzahl unterschiedlicher CPW-Leitungen ergab, dass die effektive Permittivität  $\varepsilon_{r,\text{eff}}$  der Koplanarwelle praktisch unabhängig von der Substratdicke  $h_S$  ist. Es zeigte sich, dass  $\varepsilon_{r,\text{eff}}$  ausschließlich von dem Verhältnis zwischen Masseleiterabstand und Gesamtmetallisierungsbreite  $w_{g2g}/w_{\text{tot}}$ , sowie von der Frequenz abhängt. Die Frequenzabhängigkeit wird auf die Grenzfrequenz  $f_{g,w_{\text{tot}}}$ , siehe Gleichung 5.1, normiert. Auf Grundlage der FDFD-PML Resultate konnte ermittelt werden, dass die Formel

$$\varepsilon_{r,\text{eff}} = \varepsilon_{r,\text{eff,qs}} \left[ 1 + \left( \sqrt{\frac{\varepsilon_r}{\varepsilon_{r,\text{eff,q}}}} - 1 \right) p \left( \frac{f}{f_{g,w_{\text{tot}}}} \right)^2 \right]$$

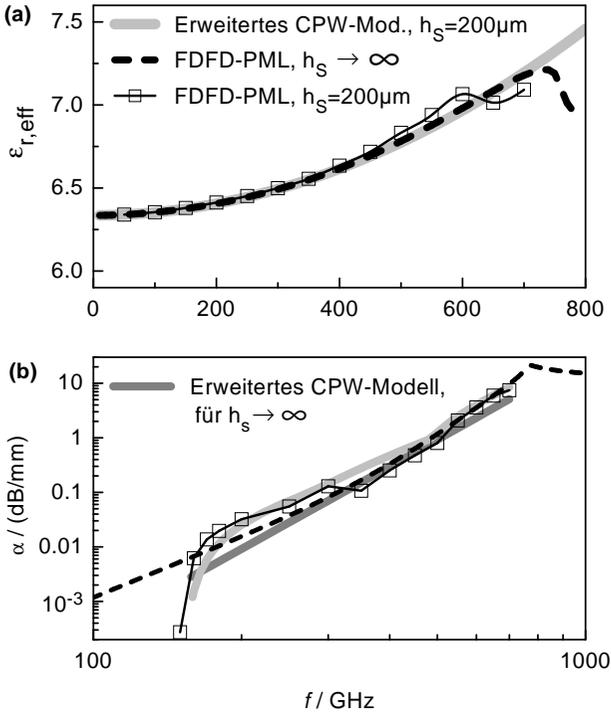
mit dem Faktor

$$p = \frac{2.86465 \left( \frac{w_{g2g}}{w_{\text{tot}}} \right)^2}{0.15075 + \frac{w_{g2g}}{w_{\text{tot}}}}$$

die Dispersion der CPW, auch für hohe Frequenzbereiche, sehr genau beschreibt. Für die relative Permittivität  $\varepsilon_{r,\text{eff,qs}}$  ist der quasistatische Wert, bei Bedarf unter Berücksichtigung endlicher Leitfähigkeiten der Metallisierung, einzusetzen. Die Permittivität  $\varepsilon_{r,\text{eff,q}}$  entspricht der quasistatischen Näherung für die ideale CPW mit  $\varepsilon_{r,\text{eff,q}} = (\varepsilon_r + 1)/2$ .

Die Näherungsformel für die Abstrahlungs-Dämpfung wird über einen analytischen, feldtheoretischen Ansatz hergeleitet, der in [47] ausführlich beschrieben wird. Die Dämpfung wird hierbei in Form einer Verlustleistung formuliert und kann somit effektiv in das ESB implementiert werden. Für den Fall finiter Substratdicken, wo ja ein diskretes Spektrum von Oberflächenwellen der dielektrischen Platte das Dämpfungsverhalten bestimmt, benötigt man zur Berechnung der Verlustleistung eine Eigenwertsuche, die über einen Orthogonalreihenansatz realisiert wurde. Diese Eigenwertsuche wurde ebenfalls in das ESB implementiert und läuft dort automatisiert ab. Die Dämpfungsformeln für infinite und finite Substratdicken begründen sich ausschließlich aus physikalischen (Näherungs-) Ansätzen, für ihre Herleitung wurde keine Parameteranpassung mit Hilfe von FDFD-Resultaten verwendet.

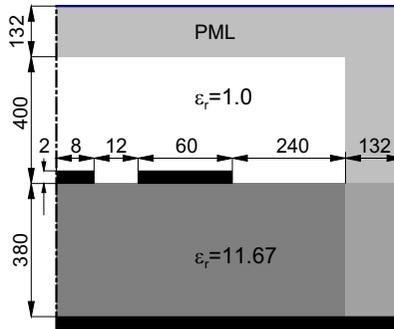
In den Abbildungen 5.10(a, b) sind die Ergebnisse der FDFD-PML-Berechnung sowie die Werte der ESB-Näherungen für Dispersion und Dämpfung dargestellt. Man erkennt eine gute Übereinstimmung zwischen den numerisch berechneten Werten und dem ESB-Modell. Die Gültigkeit des Modells endet im Bereich der ersten lateralen oder vertikalen Resonanz. Die Kopplungseffekte zwischen CPW- und  $HM_{mn}$ -Moden werden nicht erfasst.



**Abbildung 5.10:** (a) Effektive Permittivität und (b) Dämpfung der CPW mit der Substratdicke  $h_S = 200 \mu\text{m}$ , bzw.  $h_S \rightarrow \infty$ . Die Masseleiter sind  $w_g = 80 \mu\text{m}$  breit, die Mittelleiterbreite ist  $w = 16 \mu\text{m}$ , der Ground-to-Ground Abstand beträgt  $w_{g2g} = 40 \mu\text{m}$ .

### 5.2.4 Kopplungseffekte zwischen CPW- und $HM_{mn}$ -Moden

Mit der folgenden Untersuchung sollen die Kopplungseffekte zwischen CPW-Mode und den höheren Moden der Substratdicke ( $HM_{m0}$ ) beziehungsweise der koplanaren Metallisierungsbreite ( $HM_{0n}$ ) genauer untersucht werden. Hierzu wird eine CB-CPW-Leitungsstruktur gemäss Abbildung 5.11 berechnet. Auf der Leitung sind zunächst nur die Parallelplattenmode (PPL)

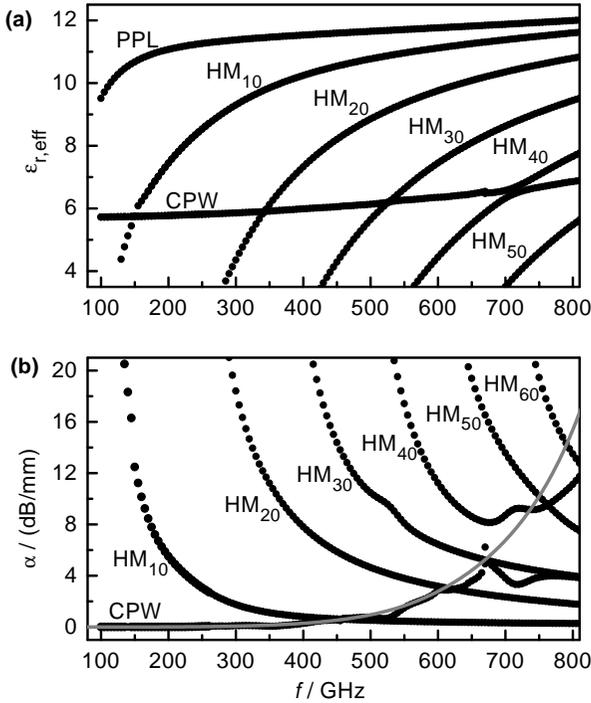


**Abbildung 5.11:** Geometrie der berechneten CPW, alle Abmessungen in  $\mu\text{m}$ .

und die Koplanarleitungsmode (CPW) ausbreitungsfähig, vergleiche Abbildung 5.12(a). In höheren Frequenzbereichen, etwa ab 120 GHz, breiten sich höhere Moden mit

$$HM_{mn} : \frac{\beta^{(mn)}}{\beta_0} = \sqrt{\varepsilon_r - \left(\frac{m\pi}{\beta_0 h_S}\right)^2 - \left(\frac{n\pi}{\beta_0 w_{\text{tot}}/2}\right)^2} \quad \text{mit } m, n = 1, 2, \dots$$

aus. Diese Formel ist natürlich nur für Frequenzen gültig, bei denen noch keine Kopplung auftritt. Eine numerische Berechnung der komplexen Ausbreitungskonstanten aller ausbreitungsfähigen Moden mit FDFD-PML ergibt das in Darstellung 5.12 dargestellte Dispersions- und Dämpfungsverhalten. Die Darstellung 5.12(b) verdeutlicht, dass die höheren Moden zunächst eine sehr hohe Dämpfung aufweisen, so dass keine Kopplungseffekte zwischen  $HM_{mn}$ -Mode und CPW-Mode auftreten. Dies zeigt der kontinuierliche Verlauf der



**Abbildung 5.12:** (a) Effektive Permittivität und (b, c) Dämpfung aller Moden der CB-CPW gemäss Bild 5.6 über der Frequenz. Zusätzlich sind die Ergebnisse für die Dämpfung dieser CPW-Leitung ohne Rückseitenmetallisierung ( $h_S \rightarrow \infty$ ) eingetragen (graue Linie).

Dispersions- und der Dämpfungskurve der CPW-Mode, für Frequenzen bis etwa 450 GHz. Die  $\text{HM}_{10}$ - und  $\text{HM}_{20}$ -Moden beeinflussen die CPW-Mode kaum. In den höheren Frequenzbereichen, wo die CPW-Mode bereits stärker gedämpft ist, treten verstärkte Kopplungseffekte auf. Bereits die  $\text{HM}_{30}$ -Mode hat einen sichtbaren Einfluss auf den Dämpfungsverlauf. In dem Frequenzbereich, wo sich die  $\beta/\beta_0$ -Kurven von  $\text{HM}_{40}$ - und CPW-Mode annähern, treten signifikante Kopplungseffekte auf, die Kurven zeigen das bereits in Kapitel 4.2.2 beschriebene Co-Flow-Verhalten, bei dem die Eigenschaften von

CPW- und HM-Mode allmählich ineinander übergehen.

Notwendige Bedingung für das Auftreten von Kopplungseffekten ist somit, dass sowohl Phasen- als auch Dämpfungskonstante der beteiligten Moden in etwa übereinstimmen. Bei der im Kapitel 4.2.2 berechneten CB-CPW war ein „freischwebendes“ Substrat vorgegeben, somit ist die Dämpfung aller ausbreitungsfähigen Moden gleich Null, daher tritt hier auch bei jeder Annäherung von CPW- und  $HM_{mn}$ -Moden das Co-Flow-Verhalten auf.

Die Phasenkonstante der PPL-Mode hat immer den höchsten Wert aller ausbreitungsfähigen Moden, daher tritt sie nie in Wechselwirkung mit höheren Moden, einschließlich der Substratmoden. Aus diesem Grund ist sie auch für alle Frequenzen ungedämpft, sofern man nur durch Abstrahlung verursachte Dämpfungen berücksichtigt.

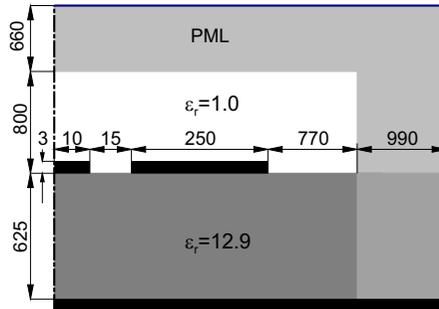
Aus den oben aufgelisteten Überlegungen lässt sich nicht die Schlussfolgerung ziehen, dass die untersuchte CPW-Leitung bis in einen Frequenzbereich von 450 GHz hinein betrieben werden kann, weil die ersten höheren Moden die CPW-Welle auf der längshomogenen Leitung nicht beeinflussen. Stattdessen ist zu bedenken, dass bei nicht längshomogenen Leitungen alle höheren Moden bei jeder Diskontinuität angeregt werden und parasitäre Effekte innerhalb der Schaltung verursachen. Als Design-Regel für die Dimensionierung koplanarer Leitungen ist somit, gemäss [46]

$$\text{Max} \{h_S, w_{\text{tot}}/2\} \leq \frac{1}{f_{\text{max}} \sqrt{2\mu_0 \varepsilon_0 (\varepsilon_r - 1)}}, \quad (5.3)$$

für eine vorgesehene maximale Betriebsfrequenz  $f_{\text{max}}$  der Schaltung einzuhalten.

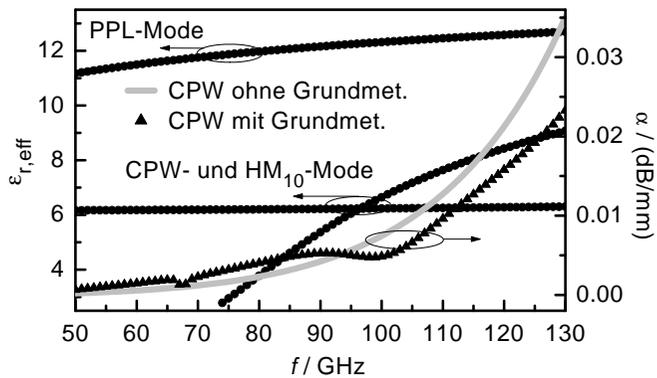
### 5.2.5 Dispersion und Abstrahlung bei W-Band CPW's

Die bisherigen Untersuchungen konzentrierten sich auf den für die klassische Mikrowellentechnik etwas „exotischen“ Submillimeterwellen-Frequenzbereich. Die ermittelten Resultate sind aber durchaus auch für das Schaltungsdesign im W-Band-Frequenzbereich, (75...110) GHz, relevant, wie die Berechnung einer typischen CB-CPW-Geometrie auf einem nicht abgedünnten GaAs-Substrat ( $h_S = 625 \mu\text{m}$ ) zeigt. Die Geometriedaten



**Abbildung 5.13:** Geometrie der berechneten CPW, alle Abmessungen in  $\mu\text{m}$ .

können der Abbildung 5.13 entnommen werden, in 5.14 sind effektive Permittivität und Dämpfung der ausbreitungsfähigen Moden eingezeichnet. Man erkennt, dass im untersuchten Frequenzbereich eine höhere Mode  $\text{HM}_{10}$  aufgrund der relativ hohen Substratdicke auftritt, die das Dämpfungsverhalten der Leitung resonant beeinflusst. Gemäss der mit der Formel 5.3 definierten Design-Regel muss das Substrat mindestens auf  $550 \mu\text{m}$  abgedünnt werden, um den Einfluss dieser höheren Mode auf die CPW-Mode bis 110 GHz sicher zu unterdrücken. Will man die Existenz ausbreitungsfähiger Substratmoden vermeiden, so darf gemäss Gleichung 5.2 sogar eine Dicke von  $266 \mu\text{m}$  nicht überschritten werden.



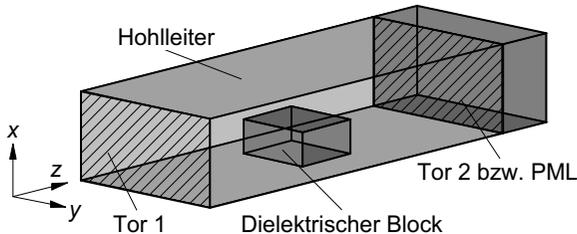
**Abbildung 5.14:** Effektive Permittivität (CPW-, PPL- und HM<sub>10</sub>-Mode) und Dämpfung (CPW- und HM<sub>10</sub>-Mode) der CB-CPW, gemäss Bild 5.13. Zusätzlich sind die Ergebnisse für die Dämpfung der CPW-Mode auf einem unendlich dicken Substrat ( $h_S \rightarrow \infty$ ) eingetragen.



## 6 Streumatrix-Berechnungen mit PML

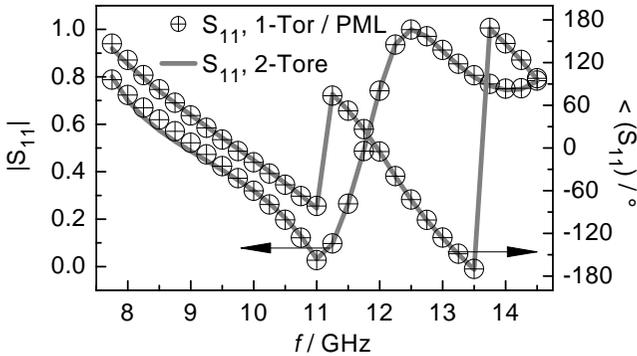
Die PML wurde in das im Kapitel 3.3 beschriebene FDFD-Verfahren zur Lösung dreidimensionaler Randwertprobleme implementiert. Hierzu werden die komplexen Materialeinträge der anisotropen PML-Formulierung in das lineare Gleichungssystem des FD-Schemas integriert. Dies ermöglicht die Berechnung der Übertragungseigenschaften beliebig gearteter dreidimensionaler Wellenleiter-Strukturen unter Verwendung absorbierender Randbedingungen an den seitlichen oder den longitudinalen Begrenzungen des diskretisierten Rechengebietes.

Zur Verifikation des 3D-FDFD-PML-Programms wird die Streumatrix ( $S$ -Matrix) eines Hohlleiters mit rechteckigem Querschnitt ( $10 \times 20 \text{ mm}^2$ ) berechnet. Auf der Unterseite dieses Wellenleiters wird ein dielektrischer Block mit dem Volumen  $3.99 \times 8.88 \times 8.0 \text{ mm}^3$  eingebracht, siehe Abbildung 6.1.



**Abbildung 6.1:** Rechteckiger Hohlleiter mit dem Querschnitt  $10 \times 20 \text{ mm}^2$ , gefüllt mit einem dielektrischen Block mit dem Volumen  $3.99 \times 8.88 \times 8.0 \text{ mm}^3$ . Die relative Permittivität dieses Blocks ist  $\epsilon_r = 6.0$ . Die Struktur wird mit  $11 \times 18 \times 24$  Gitterzellen diskretisiert, bei der 1-Tor/PML-Struktur kommen noch 5 PML-Schichten in  $z$ -Richtung hinzu.

Die Eingangsreflexion dieser Struktur lässt sich auf zwei unterschiedliche Arten ermitteln. Einerseits kann man die Anordnung als 1-Tor-Struktur berechnen. In diesem Fall ist das hintere Ende des Wellenleiters mit einer longitudinalen PML zu versehen, die in  $z$ -Richtung absorbierend wirkt. Andererseits kann man statt der PML ein weiteres Tor einfügen und erhält, in diesem Fall, eine ideale, verlustfreie Terminierung des Wellenleiters. Die



**Abbildung 6.2:** Eingangsreflexion  $S_{11}$  des Hohlleiters aus Abbildung 6.1 als Funktion der Frequenz. Der Wellenleiter wurde mit 3D-FDFD, entweder als 2-Tor-Struktur oder als 1-Tor-Struktur mit longitudinaler PML berechnet.

berechneten Eingangsreflexionen ( $S_{11}$ ) dieser beiden Anordnungen stellt Abbildung 6.2 dar. Man erkennt eine gute Übereinstimmung zwischen den PML- und den 2-Tor-Resultaten. Die Betrags- und Phasenwerte von  $S_{11}$  stimmen auch sehr gut mit Berechnungsergebnissen gemäss [49] überein, wo die gleiche 1-Tor/PML-Struktur mit einem FEM-Verfahren berechnet wurde.

Bei der Berechnung dieser Teststruktur gab es verschiedene Auffälligkeiten: Zum einen erhöhte sich bei Verwendung der longitudinalen PML die Anzahl benötigter Iterationen zur Lösung des linearen Gleichungssystems im Vergleich zur 2-Tor-Lösung. Dies liegt daran, dass die speziellen Materialeigenschaften der PML-Formulierung prinzipiell zu einer Systemmatrix

---

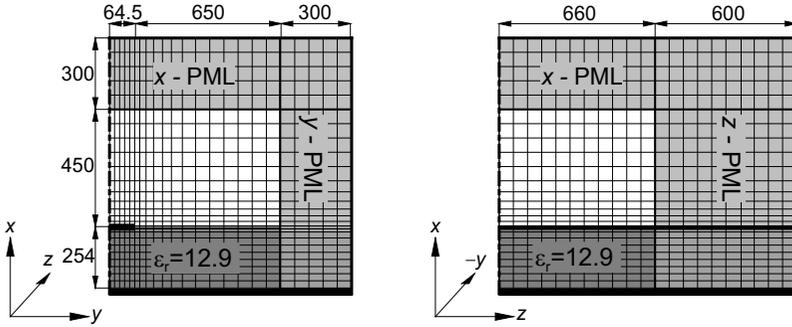
mit komplexwertigen, und zusätzlich anisotropen Einträgen führt. Insbesondere die stark unterschiedlichen Beträge der Matrixelemente führen zu einer verschlechterten Konvergenz bei der iterativen Lösung des Gleichungssystems. Bei dem beschriebenen, niedrigdimensional diskretisierten Hohlleiter-Beispiel mit nur einer PML-Berandung wirkt sich das noch relativ moderat aus. Die Anzahl benötigter Iterationen stieg lediglich um einen Faktor von ca. 2.5 an. Im Falle hochdimensionaler Systemmatrizen verbunden mit mehreren, sich überlappenden PML's ergibt sich jedoch eine außergewöhnlich starke Verschlechterung der Konvergenz, was im nachfolgenden Unterkapitel beschrieben wird.

Anschließend wird der Aspekt untersucht, wie effektiv die Dämpfung der longitudinalen PML bei Verwendung mit der Frequenzbereichsmethode der Finiten-Differenzen ist. Die Betrachtung der Resonanzfrequenz des berechneten, inhomogenen Hohlleiters, die bei 11 GHz ( $S_{11}(f = 11 \text{ GHz}) = 0$ ) liegt, zeigte, dass nur bei Verwendung der 2-Tor-Struktur jegliche Eingangsreflexion verschwindet. Bei der Rechnung mit der longitudinalen PML verbleibt eine gewisse Restreflexion die auch bei Verwendung sehr vieler PML-Schichten nie kleiner als ca.  $-50 \text{ dB}$  wird. Da dieser Effekt auch bei der Untersuchung diverser TEM-Wellenleiter beobachtet wurde, werden in einem gesonderten Unterkapitel die Genauigkeitsgrenzen der PML nachgewiesen und eine Möglichkeit, die PML-Effektivität deutlich zu verbessern, vorgestellt.

Abschließende Berechnungsbeispiele beschreiben die Einsatzmöglichkeiten des 3D-FDFD-PML-Verfahrens und beweisen seine Effizienz.

## 6.1 Konvergenz bei 3D-FDFD Berechnungen mit PML

In diesem Abschnitt soll der Einfluss von PML-Berandungen auf die Konvergenz des dreidimensionalen FDFD-Gleichungslösers untersucht werden. Hierzu wird eine längshomogene Mikrostreifenleitung mit unterschiedlichen PML-Konfigurationen berechnet. Der Quasi-TEM-Wellenleiter wird mit einem nichtäquidistantem Gitternetz ( $27 \times 24 \times 21$  Gitterzellen) diskretisiert, siehe Abbildung 6.3. Die jeweils äußersten Berandungen bestehen im Falle



**Abbildung 6.3:** Geometrie und Diskretisierung der längshomogenen Mikrostreifenleitung, alle Längenangaben in  $\mu\text{m}$ . Die Kantenlänge der größten Gitterzelle beträgt  $\Delta_{\text{max}} = 60 \mu\text{m}$ , was bei  $f_{\text{max}} = 100 \text{ GHz}$  einer Wellenlängenauflösung von  $\Delta_{\text{max}} = \lambda_{\text{min}}/14$  entspricht. Der Streifenleiter wird mit einer Dicke von  $0 \mu\text{m}$  modelliert, er ist zur besseren Übersicht dicker dargestellt.

der  $x, z$ -Symmetrieebene aus einer magnetischen Wand, sonst werden überall elektrische Außenwände vorgegeben. Den elektrischen Wänden werden sukzessive PML-Gebiete vorangestellt, wobei die longitudinale  $z$ -PML 10 Schichten breit gewählt wurde, während die lateralen  $x, y$ -PML's jeweils 5 Schichten breit sind.

In einer ersten Untersuchung wird die Struktur zunächst ohne PML-Gebiete berechnet, dann wird die longitudinale  $z$ -PML hinzugefügt und schließlich wird die Anordnung mit allen drei PML Gebieten berechnet.

Die drei Gebiete überlappen sich hierbei. Für alle PML's werden konstante Leitfähigkeiten entsprechend  $r_{\text{th}} = 0.01$  vorgegeben. Die Tabelle 6.1 listet die Anzahl benötigter Iterationsschritte, die der verwendete Gleichungslöser zur Berechnung der verschiedenen Anordnungen benötigt, auf.

$f$ / GHz	ohne PML			$z$ -PML			$x, y, z$ -PML, überlappend		
	10	30	100	10	30	100	10	30	100
Iterat.	46	49	91	438	544	544	15 983	32 643	> 1 000 000
$ S_{11} $	1.0	1.0	1.0	0.0078	0.0074	0.0038	0.0078	0.0075	–

**Tabelle 6.1:** Zur Konvergenz des linearen Gleichungslösers bei Verwendung von PML-Berandungen. Die Rechnung für die überlappende  $xyz$ -PML bei  $f = 100$  GHz wurde nach 999 999 Iterationsschritten abgebrochen, das Residuum betrug hier immer noch  $10^{-4}$ .

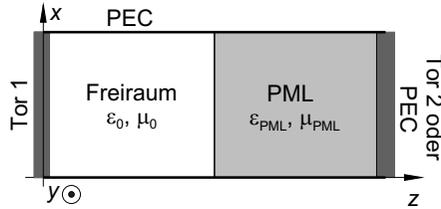
Es ist zu erkennen, dass die überlappende PML die Anzahl der benötigten Iterationen sprunghaft ansteigen lässt. Berechnet man dieselbe Struktur und verzichtet auf überlappende PML-Bereiche, so sinkt die Iterationszahl wieder auf Werte die auch bei der einfachen  $z$ -PML Berechnung erreicht werden, wie Tabelle 6.2 zeigt.

$f$ / GHz	$x, y, z$ -PML, nicht überlappend		
	10	30	100
Iterationen	498	441	621
$ S_{11} $	0.0057	0.0020	0.0029

**Tabelle 6.2:** Zur Konvergenz des linearen Gleichungslösers bei Verwendung von PML-Berandungen. Die verschiedenen PML-Bereiche überlappen sich nicht. Die  $z$ -PML füllt den gesamten, hinteren Berechnungsquerschnitt aus, die  $x$ - und  $y$ -PML schließen bündig mit diesem Bereich ab. Die  $y$ -PML füllt den Bereich zwischen unterer und oberer Berandung aus, daran schließt sich die  $x$ -PML an.

## 6.2 Genauigkeitsgrenzen der longitudinalen PML

Um die erwähnten Genauigkeitsrestriktionen der longitudinalen PML zu studieren, wird eine denkbar einfache TEM-Wellenleiteranordnung untersucht, bestehend aus einer luftgefüllten Parallelplattenleitung (PPL), deren rückwärtiger Bereich mit PML-Schichten versehen wird, vergleiche Abbildung 6.4. Der PML-Bereich kann mit einem zweiten Tor terminiert werden oder, wie ei-



**Abbildung 6.4:** Teststruktur zur Untersuchung des residualen Reflexionsfehlers  $|S_{11}|$  bei Verwendung von PML's mit konstanten Leitfähigkeiten. Der hintere Bereich wird mit PML-Material versehen, dieser Bereich wird entweder mit einem zweiten Tor oder einer elektrischen Wand abgeschlossen.

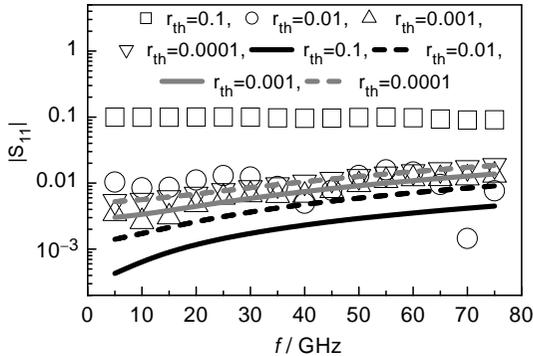
gentlich üblich, mit einer elektrischen Rückwand (PEC). Bei dieser einfachen Anordnung existieren nur eindimensionale Feldstärkekomponenten ( $\vec{E} \rightarrow E_x$  und  $\vec{H} \rightarrow H_y$ ), somit sind jegliche Diskretisierungsfehler in  $x, y$ -Richtung ausgeschlossen. Die Fähigkeit des longitudinal dämpfend wirkenden PML-Gebietes, die senkrecht einfallenden  $TEM_z$ -Wellen zu absorbieren, lässt sich mit dieser Anordnung systematisch analysieren [50].

### 6.2.1 Genauigkeitsgrenzen der nicht-gradierten PML

Im Folgenden wird das Absorptionsvermögen von PML-Bereichen mit konstantem Leitfähigkeitsprofil ( $p = 0$ ) untersucht. Hierzu wird die PPL mit einem äquidistantem Gitternetz bestehend aus  $12 \times 22 \times 21$  Gitterzellen diskretisiert. Die Unterteilung in  $x$ - und  $y$ -Richtung ist für die Berechnung un-

wesentlich, die  $z$ -Diskretisierung wird mit 0.3 mm langen Gitterzellen realisiert, was einer Auflösung von  $\lambda_{\min}/13$  bei einer maximalen Frequenz von  $f = 75$  GHz entspricht. Es wird eine PML mit 16 Schichten verwendet, somit ist der PML-Bereich 4.8 mm dick.

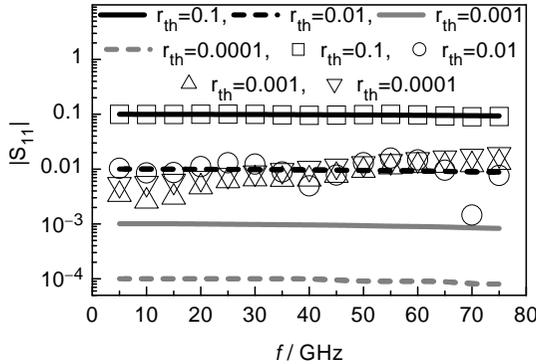
Um Reflexionen, die aus der finiten Ausdehnung der PML resultieren, zu eliminieren, wird zunächst der 2-Tor-Fall betrachtet, das heißt, am hinteren Ende der PML wird ein zweites Tor vorgegeben, somit ist die Struktur dort garantiert reflexionsfrei abgeschlossen. Da die Wellenimpedanz im PML-Bereich  $Z_{\text{PML}} = (\mu_{\text{PML}}/\varepsilon_{\text{PML}})^{1/2}$  identisch gleich der Freiraumimpedanz  $Z_0 = (\mu_0/\varepsilon_0)^{1/2}$  ist, sollte bei dieser Anordnung eigentlich  $S_{11} = 0$  für alle Frequenzen  $f$  und PML-Reflexionsfaktoren  $r_{\text{th}}$  gelten. Wie man den Ergebnissen der 3D-FDFD-PML-Berechnung mit zwei Toren, in Abbildung 6.5 durch Linien dargestellt, entnehmen kann, entstehen trotzdem Reflexionen, die mit steigender Frequenz und niedrigeren  $r_{\text{th}}$ -Vorgaben anwachsen. Sie liegen in der Größenordnung  $|S_{11}| = 10^{-4} \dots 10^{-2}$ , entsprechend  $-80 \dots -40$  dB.



**Abbildung 6.5:** Betrag der Eingangsreflexion  $S_{11}$  des teilweise PML gefüllten Wellenleiters, Abbildung 6.4, als Funktion der Frequenz. Dargestellt sind die Ergebnisse für den 1-Tor- und den 2-Tor-Fall bei verschiedenen nominalen Reflexions-Koeffizienten  $r_{\text{th}}$ . Mit den Linien wird der 2-Tor-Fall gekennzeichnet, die Symbole bezeichnen den 1-Tor-Fall, wobei die PML mit einer elektrischen Wand terminiert wird ( $n_{\text{PML}} = 16$ ,  $\Delta z = 0.3$  mm).

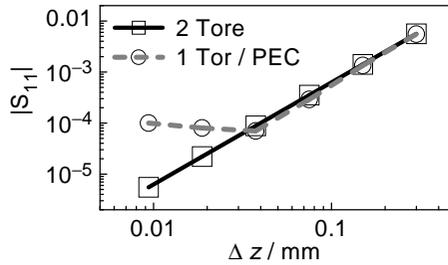
Für den Fall, dass die PML mit einer elektrischen Wand terminiert wird, entstehen zusätzliche Reflexionen, entsprechend dem voreingestellten  $r_{\text{th}}$ -Wert. Die Resultate hierfür sind in der Abbildung 6.5 mit Symbolen dargestellt. Man erkennt, dass die verwendete PML mit konstantem Leitfähigkeitsprofil  $p$  Absorptionsniveaus von höchstens  $-50$  dB erreichen kann.

Diese Ergebnisse legen die Vermutung nahe, dass die beobachteten Reflexionen aus dem Übergang zwischen Freiraum und PML resultieren. Daher wird in einem weiteren Schritt die 1-Tor/PML-Anordnung nochmals berechnet, wobei nun die gesamte Parallelplattenleitung mit PML-Material ausgefüllt wird. Die Ergebnisse hierfür sind in Abbildung 6.6 mit Linien dargestellt, zum Vergleich sind auch hier die Symbole für die Berechnung der nur teilgefüllten PPL eingetragen. Man erkennt, dass bei der vollständig gefüllten Leitung die voreingestellten  $r_{\text{th}}$ -Werte ( $10^{-2} \dots 10^{-4}$ ) für alle Frequenzen erreicht werden. Somit ist klar, dass die beobachteten Limitierungen der Absorptionsfähigkeit auf den Übergang Freiraum–PML zurückzuführen sind.



**Abbildung 6.6:** Betrag der Eingangsreflexion  $S_{11}$  des PML gefüllten Wellenleiters als Funktion der Frequenz. Dargestellt sind die Ergebnisse für den 1-Tor-Fall bei verschiedenen nominalen Reflexions-Koeffizienten  $r_{\text{th}}$ . Mit den Linien wird der Fall einer vollständig mit PML gefüllten PPL gekennzeichnet, die Symbole bezeichnen den Fall des teilweise PML gefüllten Wellenleiters. Für beide Fälle gilt  $n_{\text{PML}}=16$ ,  $\Delta z = 0.3$  mm.

Die einzige Möglichkeit, räumlich begrenzte, nicht-gradiente PML-Gebiete mit einer möglichst hohen Absorptionsfähigkeit zu versehen, liegt somit in der Verfeinerung der Diskretisierung am Übergang zwischen Berechnungsgebiet und PML-Berandung. Für den Fall der hier berechneten PPL wurde daher die ursprüngliche Diskretisierung von  $\Delta z = 0.3 \text{ mm}$  sukzessive verfeinert. Die entsprechenden Ergebnisse sind in Abbildung 6.7 dargestellt. Es



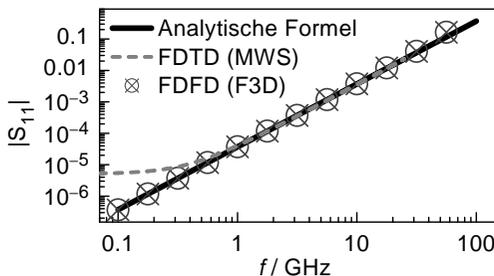
**Abbildung 6.7:** Betrag der Eingangsreflexion  $S_{11}$  des teilweise PML gefüllten Wellenleiters, Abb. 6.4, als Funktion der Gitterzellengröße  $\Delta z$  (doppelt-logarithmische Darstellung). Eingezeichnet sind die Ergebnisse für den 1-Tor und den 2-Tor-Fall ( $r_{\text{th}} = 10^{-4}$ ,  $f = 10 \text{ GHz}$ , Dicke des PML Gebietes  $d = \text{konstant}$ , d.h.  $n_{\text{PML}}$  wird entsprechend angepasst).

ist zu erkennen, dass erst für eine Gittergröße von  $\Delta z = 0.04 \text{ mm}$  (entsprechend  $\lambda_{\text{min}}/100$ ) das voreingestellte Reflexionsniveau von  $r_{\text{th}} = 10^{-4}$  erreicht wird. Ebenfalls berechnet wird die 2-Tor-Anordnung, man erkennt, dass die residualen Eingangsreflexionen  $|S_{11}|$  mit  $(\Delta z)^2$  skalieren.

Abschließend sei darauf hingewiesen, dass eine derartige lokale Verfeinerung im Bereich der PML-Berandungen für praktische Strukturberechnungen nicht praktikabel ist. Zum einen erhöhen die zusätzlichen Gitterverfeinerungen in relativ weiter Entfernung zur interessierenden 3D-Diskontinuität die Dimension des Gitters unnötig, außerdem ist man bestrebt, die Entfernung zwischen Diskontinuität und der äußersten PEC-Berandung groß zu halten, damit evaneszente Moden möglichst vollständig abklingen.

### 6.2.2 Analytische Berechnung der Restreflexion

Da die residualen Reflexionen auf den Übergang Freiraum–PML zurückgeführt werden konnten, wird dieser im Folgenden genauer untersucht. Durch das versetzte Gitter des Finite-Differenzen-Schemas gemäss YEE sind die elektrischen und magnetischen Feldgrößen um jeweils  $1/2$  Gitterzelle versetzt angeordnet. Hieraus resultiert ein Übergangsbereich der Breite  $\Delta z/2$ , in dem der Wellenwiderstand ungleich der Freiraumwellenlänge ist. Dieser Bereich muss für die beobachteten Eingangsreflexionen verantwortlich sein. Diese Problematik ergibt sich generell bei FD-Verfahren, die auf dem YEE-Gitter aufbauen. Um das zu verdeutlichen, wird zunächst wiederum die PPL-Struktur berechnet, die nun, anstatt des PML-Bereichs, teilweise mit einem verlustlosen Substrat der Permittivität und Permeabilität  $\varepsilon_r = \mu_r = 4$  gefüllt wird. Da die Wellenwiderstände somit im Vakuum und im Substrat identisch sind ( $Z_r = Z_0$ ), lassen sich die Eingangsreflexionen  $|S_{11}|$  wiederum ausschließlich auf den Übergangsbereich zurückführen. Die Abbildung 6.8 zeigt Ergebnisse der FDFD-, sowie der FDTD-Methode. Sowohl das Frequenzbereichs- als auch das Zeitbereichsverfahren zeigt über einen weiten Frequenzbereich



**Abbildung 6.8:** Betrag der Eingangsreflexion  $S_{11}$  des teilweise mit Substrat ( $\varepsilon_r = \mu_r = 4$ ) gefüllten Wellenleiters als Funktion der Frequenz. Neben den numerisch mit F3D (FDFD) und Microwave Studio (FDTD) berechneten Ergebnissen sind Resultate gemäss der Formel (6.1) eingezeichnet.

hinweg einen Restfehler, der quadratisch von der Frequenz abhängt. Diesen Restfehler beschreibt die empirisch ermittelte Formel

$$S_{11} = \left| \frac{1}{4} \omega^2 \mu_0 \varepsilon_0 \left( \frac{\Delta z}{2} \right)^2 (\varepsilon_r^2 - 1) \right| \quad (6.1)$$

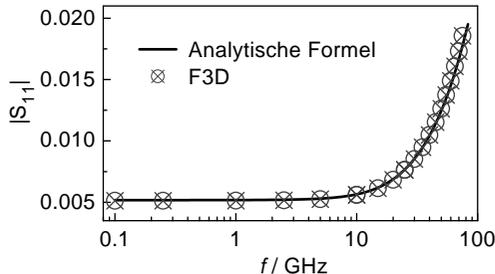
mit hervorragender Genauigkeit, wie Abbildung 6.8 ebenfalls zeigt.

Ersetzt man die reellwertigen Permittivitäts- und Permeabilitätswerte des Substrats wieder durch die komplexen  $\varepsilon_{\text{PML}}$ - und  $\mu_{\text{PML}}$ -Werte, so lässt sich das residuale  $|S_{11}|$  durch die Formel

$$S_{11} = \frac{1}{4} \left( \frac{\Delta z}{2} \right)^2 \left| \frac{\mu_0}{\varepsilon_0} \kappa^2 + j \omega \mu_0 2 \kappa \right| \quad (6.2)$$

beschreiben. Wie Abbildung 6.9 zeigt, wird hierdurch die Frequenzabhängigkeit der Reflexionen  $|S_{11}|$ , die bei numerischen FDFD-Berechnungen auftritt, sehr genau beschrieben.

Da das zur Verfügung stehende kommerzielle FDTD-Programm „Micro-wave-Studio“ [51] keine Berechnungen mit konstantem PML-Profil erlaubt, fehlen in diesem Diagramm die Ergebnisse der Zeitbereichsmethode. Allerdings steht zu erwarten, dass das FDTD-Verfahren hier ebenfalls ähnliche Ergebnisse wie F3D produziert.

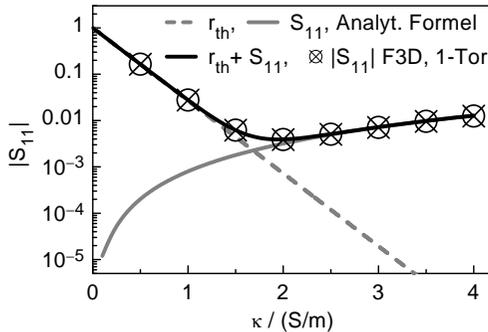


**Abbildung 6.9:** Betrag der Eingangsreflexion  $S_{11}$  des teilweise PML gefüllten Wellenleiters, Abb. 6.4, als Funktion der Frequenz. Neben den numerischen F3D Ergebnissen, sind Resultate gemäss der Formel (6.2) eingezeichnet ( $r_{\text{th}} = 10^{-4}$ ,  $n_{\text{PML}} = 16$ ,  $\Delta z = 0.3$  mm, 2-Tore).

Für den praxisrelevanten Fall einer finiten PML, die von einer elektrischen Wand terminiert wird, erhält man somit eine zu erwartende Restreflexion, die sich aus der vorzugebenden nominalen Reflexion

$$r_{\text{th}} = e^{-\frac{2d\kappa}{\varepsilon_0 c_0}}$$

und der Reflexion am Übergang gemäss Formel (6.2) zusammensetzt. Die Addition dieser beiden Größen ermöglicht eine analytische Bestimmung des  $|S_{11}|$ -Restfehlers, mit der die Wirksamkeit der PML mit konstantem Profil mit hervorragender Genauigkeit vorherbestimmt werden kann, wie Abbildung 6.10 zeigt.



**Abbildung 6.10:** Betrag der Eingangsreflexion  $S_{11}$  des teilweise PML gefüllten Wellenleiters, Abb. 6.4, als Funktion der PML-Leitfähigkeit  $\kappa$ . Eingezeichnet sind die nominale Reflexion der PML  $r_{\text{th}}$ , die Reflexion am Übergang  $S_{11}$  gemäss Formel (6.2), die Summe aus diesen beiden Reflexionen, sowie Ergebnisse der numerischen Berechnung mit F3D ( $f = 1 \text{ GHz}$ ,  $n_{\text{PML}} = 16$ ,  $\Delta z = 0.3 \text{ mm}$ ).

Durch eine geschickte Vorgabe des  $r_{\text{th}}$ -Wertes lässt sich somit das Gesamtreflexionsniveau

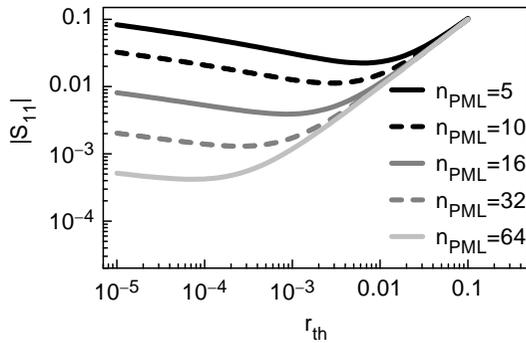
$$|S_{11,\text{PML,residual}}| = r_{\text{th}} + S_{11,\text{Formel}} \quad (6.3)$$

optimieren. Die Formel 6.3 lässt sich derart umstellen, dass die Gesamtreflexion nur noch als Funktion der Anzahl verwendeter PML-Schichten  $n_{\text{PML}}$

ausgedrückt wird. Es gilt

$$|S_{11,\text{PML,residual}}| = r_{\text{th}} + \frac{1}{16} \left| \frac{1}{4} \left( \frac{\ln[1/r_{\text{th}}]}{n_{\text{PML}}} + j2\pi \left( \frac{\Delta z}{\lambda} \right) \frac{\ln[1/r_{\text{th}}]}{n_{\text{PML}}} \right) \right|. \quad (6.4)$$

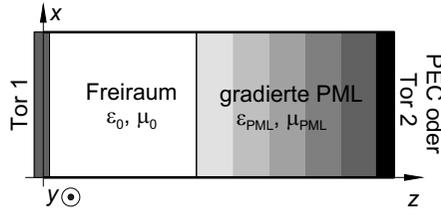
Somit lässt sich im voraus ermitteln, wie viele PML-Schichten benötigt werden, um ein gewünschtes Reflexionsniveau zu erreichen, vergleiche hierzu Abbildung 6.11.



**Abbildung 6.11:** Betrag der Eingangsreflexion  $S_{11}$  des teilweise PML gefüllten Wellenleiters, Abb. 6.4, als Funktion des PML-Reflexions-Koeffizienten  $r_{\text{th}}$ , für verschieden viele PML-Schichten  $n_{\text{PML}}$ , gemäss der Formel (6.4). Für das Verhältnis Diskretisierung zu Wellenlänge gilt  $\Delta z/\lambda = 1/250$ .

### 6.2.3 Genauigkeitsgrenzen der gradierten PML

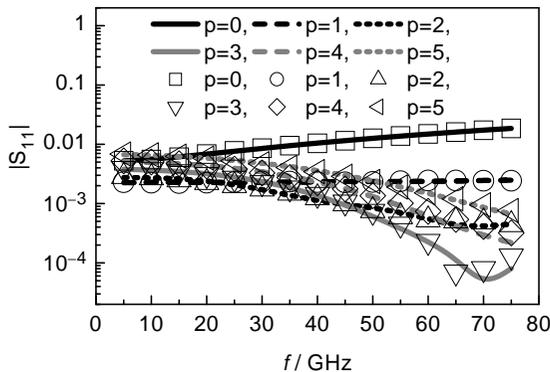
Eine Möglichkeit, die Absorptionsfähigkeit der PML zu verbessern, besteht in der Verwendung von abgestuften Leitfähigkeiten innerhalb des PML-Bereichs. Solche gradierten PML's wurden in zahlreichen Veröffentlichungen bezüglich der PML-Implementierung in FDTD-Methoden vorgestellt, beispielsweise in [52]. Daher soll nun der Einfluss verschiedener Leitfähigkeitsprofile  $p$  bei Verwendung der PML mit dem FDFD-Verfahren untersucht



**Abbildung 6.12:** Teststruktur zur Untersuchung der Reflexion  $|S_{11}|$  bei Verwendung von PML's mit abgestuften Leitfähigkeiten. Der hintere Bereich wird mit PML-Material versehen, dieser Bereich wird entweder mit einem zweiten Tor oder einer elektrischen Wand abgeschlossen.

werden. Hierzu wird wiederum der PPL-Wellenleiter betrachtet, der jetzt mit einer abgestuften PML teilweise gefüllt ist, vergleiche Abbildung 6.12.

In der Abbildung 6.13 sind Ergebnisse für verschiedene Profile  $p$  eingezeichnet, beginnend mit einem konstanten Leitfähigkeitsprofil  $p = 0$  bis hin zu einer  $p = 5$ -Abstufung. Der nominale Reflexionskoeffizient wird festgelegt



**Abbildung 6.13:** Betrag der Eingangsreflexion  $S_{11}$  des teilweise PML gefüllten Wellenleiters, Abb. 6.12, als Funktion der Frequenz  $f$ . Dargestellt sind die Ergebnisse für den 1-Tor-Fall (Symbole) bzw. den 2-Tor-Fall (Linien) mit verschiedenen Leitfähigkeitsprofilen  $p$  ( $r_{th} = 10^{-4}$ ,  $\Delta z = 0.3\text{mm}$ ).

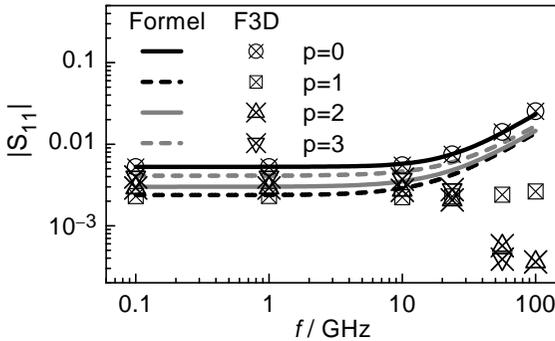
zu  $r_{\text{th}} = 10^{-4}$ , somit gibt es keine signifikanten Unterschiede zwischen den 1-Tor-Resultaten, dargestellt mit den Symbolen und dem 2-Tor-Fall, dargestellt durch Linien. Eine genaue Betrachtung der Ergebnisse liefert die Erkenntnis, dass ein Profil mit  $p = 3$  die beste Absorptionsfähigkeit aufweist. Allerdings ist auch festzustellen, dass die Verwendung von abgestuften Leitfähigkeiten nur eine moderate Verbesserung des Absorptionsvermögens über den untersuchten Frequenzbereich hinweg ermöglicht. Offensichtlich treten wiederum zusätzliche Reflexionen auf, an dem Übergang zwischen Freiraum und der ersten PML-Schicht, sowie den weiteren Übergängen zwischen den einzelnen PML-Schichten verschiedener Leitfähigkeit.

#### 6.2.4 Analytische Berechnung der Reflexion bei PML's mit gradiertem Leitfähigkeitsprofil

Die empirisch ermittelte Formel 6.2 zur Bestimmung der Übergangsreflexion bei konstanten PML-Bereichen lässt sich auch auf die Summe von Übergängen, die bei der Verwendung von gradierten PML's zu betrachten ist, anwenden. Zusätzlich sind hier die Dämpfungen des eintreffenden Signals innerhalb der verschiedenen Schichten zu berücksichtigen. Hieraus resultiert dann die Formel

$$S_{11} = \sum_{i=0}^{n_{\text{PML}}-1} \left( \prod_{k=1}^i e^{-\sqrt{\mu_0/\varepsilon_0} \kappa_k 2\Delta z_k} \right) \frac{1}{4} \left( \frac{\Delta z_i}{2} \right)^2 \cdot \left| \frac{\mu_0}{\varepsilon_0} (\kappa_{i+1}^2 - \kappa_i^2) - 2\omega^2 \mu_0 \varepsilon_0 + j\omega \mu_0 2(\kappa_{i+1} - \kappa_i) \right|, \quad (6.5)$$

für PML-Übergänge mit unterschiedlichen Leitfähigkeiten in den verschiedenen Schichten  $i$ . Numerische Berechnungen mit verschiedenen PML Profilen, beginnend mit einer konstanten PML ( $p=0$ ) bis hin zu einem  $p=3$ -Profil zeigen, dass die analytische Formel 6.5 das Reflexionsniveau gradiertter PML's für niedrige Frequenzen sehr gut nachbildet, siehe Abbildung 6.14.



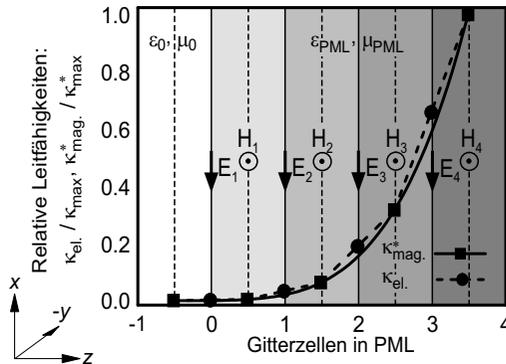
**Abbildung 6.14:** Betrag der Eingangsreflexion  $S_{11}$  des teilweise PML gefüllten Wellenleiters, Abb. 6.12. Neben den numerischen F3D-Ergebnissen sind Resultate gemäss der Formel (6.5) eingezeichnet ( $r_{\text{th}} = 10^{-4}$ ,  $n_{\text{PML}} = 16$ ,  $\Delta z = 0.3$  mm, 1-Tor).

Für höhere Frequenzen ergeben sich Abweichungen zwischen den mit der Formel (6.5) berechneten analytischen Werten und den numerischen F3D-Resultaten. Dies ist vermutlich auf die zusätzliche Dämpfung zurückzuführen, die die eintreffende Welle durch Kopplungseffekte erfährt. An jedem Übergang zwischen den individuellen PML-Schichten werden bestimmte Anteile der eintreffenden Welle zurückreflektiert und koppeln wiederum mit der eintreffenden Welle. Dies führt zu dem beobachteten, resonanten Verlauf der Dämpfung für Profile mit  $p \neq 0$ .

Es ist festzustellen, dass durch eine sorgfältige Auswahl des PML-Profiles  $p$  eine verbesserte Absorptionsfähigkeit der PML erreicht werden kann. Allerdings ist die zu erwartende Gesamtdämpfung der FDFD-PML deutlich schlechter als in der Literatur angegebene Dämpfungswerte bei FDTD-Verfahren mit PML-Rändern. Hier wurden für verschiedene TEM-Wellenleiter, mit 8...10-Schichten PML breitbandig Dämpfungsniveaus besser als  $-80$  dB berechnet. Wodurch die Differenzen zwischen den FDTD-Werten und dem FDFD-Programm F3D zustande kommen, erklärt der folgende Abschnitt.

### 6.2.5 Verbesserung der Absorption von PML's mit gradiertem Leitfähigkeitsprofil

Standardmäßig werden bei F3D, wie bei allen FD-Verfahren die auf der integralen Differenzen-Formulierung basieren, bei der Berechnung der  $\vec{D}$ -Felder Mittelwertbildungen der Permittivitäten zweier benachbarter Gitterzellen vorgenommen. Es gilt  $\bar{\epsilon} = (\epsilon_i + \epsilon_{i+1})/2$ . Hierdurch wird, bei einfach geschichteten Medien, der durch das versetzte YEE-Gitter verursachte Fehler minimiert. Wenn nun jedoch, wie im Falle der gradierten PML, ein ortsabhängiges Leitfähigkeitsprofil mit einigen diskreten, aufeinanderfolgenden Schichten berechnet werden soll, ist diese Mittelwertbildung nicht optimal. Das verdeutlicht Abbildung 6.15 für einen PML-Bereich mit  $p=4$ -Profil und  $n_{\text{PML}}=4$  Schichten. Obwohl die Abweichungen zwischen den diskreten Mittelwerten  $\bar{\kappa}_{\text{el.}}$  und der kontinuierlichen Leitfähigkeitskurve für das  $p=4$ -Profil gering ausfallen, wird sich zeigen, dass genau diese Abweichungen für die beobachtete Limitierung des Absorptionsvermögens gradiertener PML's verantwortlich sind.



**Abbildung 6.15:** Relative elektrische und magnetische Leitfähigkeiten in Abhängigkeit von der PML-Gitterzelle  $n_{i,\text{PML}}$ . Die durchgezogene Linie entspricht dem  $p=4$ -Profil. Die magnetischen Leitfähigkeitswerte  $\kappa_{\text{mag.}}^*$  liegen exakt auf dieser Linie, während die Strichlinie die Mittelwerte für  $\kappa_{\text{el.}}$  andeutet.

Anstatt die standardmäßige Berechnung der Leitfähigkeiten für gradierte PML's, gegeben mit

$$\kappa_{\text{el.}} = \kappa_{\text{max}} \left( \frac{n_{i,\text{PML}} - 0.5}{n_{\text{PML}}} \right)^p \quad \text{und} \quad \kappa_{\text{mag.}}^* = \kappa_{\text{max}}^* \left( \frac{n_{i,\text{PML}}}{n_{\text{PML}}} \right)^p$$

wobei

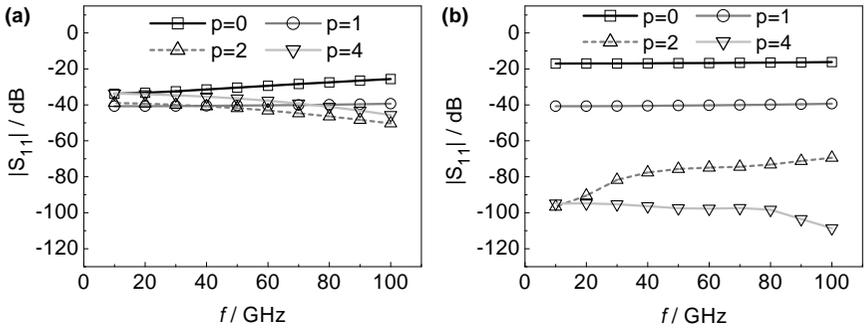
$$\kappa_{\text{max}} = \frac{(p+1)\varepsilon_0 c_0}{2n_{\text{PML}}\Delta z} \ln \left[ \frac{1}{r_{\text{th}}} \right] \quad \text{und} \quad \kappa_{\text{max}}^* = \frac{\mu_0}{\varepsilon_0} \kappa_{\text{max}} \quad \text{ist,}$$

zu verwenden, kann man die elektrischen Leitfähigkeitswerte rekursiv zu

$$\kappa_{\text{el.}}(n_{i,\text{PML}}) = 2\kappa_{\text{max}} \left( \frac{n_{i,\text{PML}} - 0.5}{n_{\text{PML}}\Delta z} \right)^p - \kappa_{\text{el.}}(n_{i-1,\text{PML}}) \quad (6.6)$$

berechnen. Mit dieser Wahl der  $\kappa_{\text{el.}}$ -Werte liegen die resultierenden elektrischen Leitfähigkeitswerte nach der Mittelwertbildung exakt auf der Kurve für das  $p=4$ -Profil, ohne dass eine Modifikation des grundlegenden FD-Schemas vorgenommen werden muss.

Die Auswirkungen dieser angepassten  $\kappa$ -Berechnung soll zunächst wiederum anhand der teilweise PML gefüllten PPL, gemäss Abbildung 6.12 verdeutlicht werden. Die Parallelplattenleitung wird hierzu mit einer PML die nur noch aus 8 Schichten besteht teilgefüllt. Die Ergebnisse für verschiedene Profilierungen, ermittelt mit der nicht angepassten  $\kappa_{\text{el.}}$ -Berechnung sind in der Abbildung 6.16(a) dargestellt. Man erkennt, dass für keines der verwendeten Profile Absorptionsraten besser als  $-50$  dB erzielt werden können. Anders sieht das bei den Ergebnissen mit der angepassten  $\kappa_{\text{el.}}$ -Berechnung, Abbildung 6.16(b), aus. Für konstante PML-Profile verschlechtert sich das erreichbare Reflexionsniveau. Das war zu erwarten, da ja die eigentlich sinnvolle Mittelwertbildung beim Übergang zwischen zwei Materialschichten durch die rekursive  $\kappa_{\text{el.}}$ -Berechnung ausgeschaltet wird. Für konstante Profile sind die Werte beider Berechnungen identisch. Verwendet man ein Profil zweiter oder vierter Ordnung ermöglicht die gradierte PML nun jedoch Dämpfungsniveaus besser  $-75$  dB, beziehungsweise besser als  $-95$  dB über den gesamten Frequenzbereich hinweg.



**Abbildung 6.16:** Betrag der Eingangsreflexion  $S_{11}$  in dB, des teilweise PML gefüllten Wellenleiters, Abb. 6.12, als Funktion der Frequenz. Ergebnissen (a) der FDFD-PML mit linearer Mittelwertbildung für die  $\kappa_{el}$ -Werte, sowie Ergebnisse (b) für die rekursive  $\kappa_{el}$ -Berechnung gemäss Formel 6.6 ( $r_{th} = 10^{-4}$ ,  $n_{PML} = 8$ ,  $\Delta z = 0.3$  mm, 1-Tor).

Die Verwendung der rekursiven  $\kappa_{el}$ -Berechnung ermöglicht also eine eklatante Verbesserung der Absorptionseigenschaften gradierter PML's. Mit einem acht Schichten umfassenden PML-Bereich können breitbandig Dämpfungen besser als  $-80$  dB realisiert werden. Soll dennoch mit einer konstanten PML gerechnet werden, sollte man statt der rekursiven  $\kappa$ -Berechnung wiederum die Mittelwertbildung verwenden, hiermit können Reflexionsniveaus von ca.  $-40$  dB erreicht werden. Das die vorgestellte rekursive Leitfähigkeitsberechnung auch bei Wellenleitern mit inhomogenen Torquerschnitten sehr wirksam ist, zeigt der folgende Abschnitt.

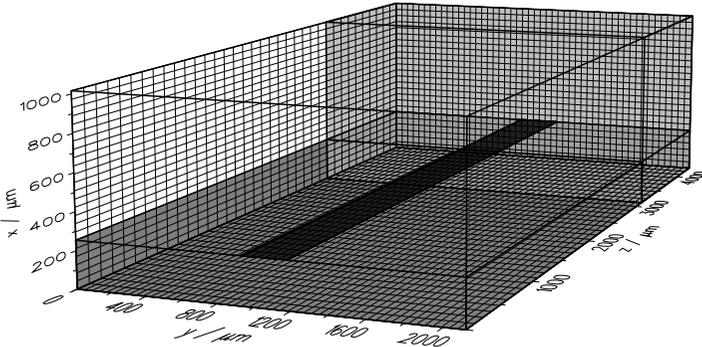
### 6.3 Berechnung dreidimensionaler Strukturen mit PML-Rändern

Die folgenden Berechnungen sollen die Wirksamkeit der modifizierten Leitfähigkeitsberechnung auch für inhomogene Leitungsquerschnitte nachweisen. Des weiteren soll die Effizienz des FDFD-PML-Verfahrens bei der Berechnung der Übertragungseigenschaften dreidimensionaler Strukturen verdeutlicht werden. Hierzu werden folgende Strukturen betrachtet:

- PML als Wellenleiterabschluss. Dieses Beispiel dient als weitere Referenz, um die Effektivität der modifizierten Leitfähigkeitsberechnung nachzuweisen.
- Abstrahlung einer Patch-Antenne. Diese Struktur verlangt den Einsatz von PML-Berandungen in allen drei Raumrichtungen. Sie dient als wichtiges Testbeispiel für die Funktion der PML, da hier Wellen unter verschiedensten Einfallswinkeln auf die Berandungen auftreffen.
- Berechnung eines typischen Packaging-Problems. Bei der Optimierung eines LTCC-Übergangs müssen laterale PML's verwendet werden, um parasitäre Resonanzen des breiten Berechnungsgebietes zu unterdrücken.

### 6.3.1 Geschirmte Mikrostreifenleitung

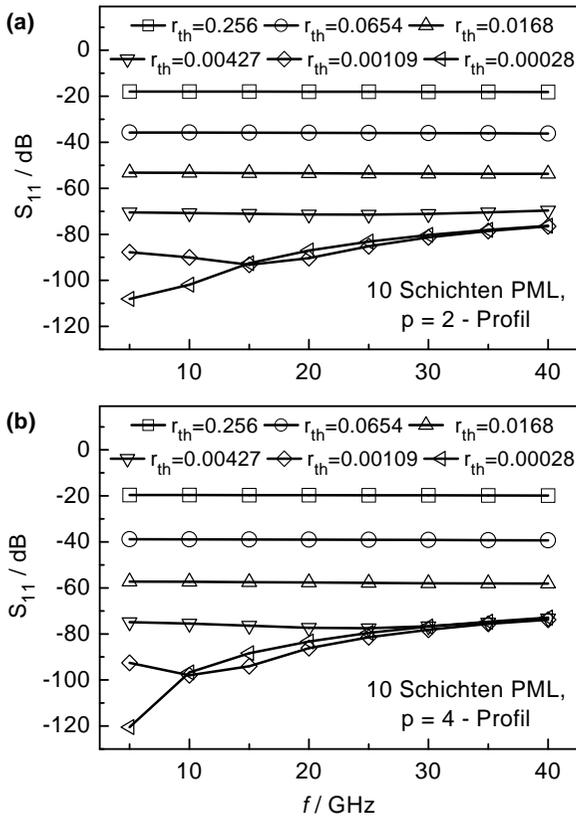
Um die verbesserte Absorptionsfähigkeit der modifizierten Berechnung der PML-Leitfähigkeiten auch für Wellenleiter mit inhomogenem Leiterquerschnitt nachzuweisen, wird die Eingangsreflexion  $S_{11}$  einer Microstrip-Mode berechnet. Die längshomogene, mit einer elektrischen Schirmung versehe-



**Abbildung 6.17:** Diskretisierung der geschirmten Mikrostreifenleitung. Die Breite des Streifenleiters ist 0.254 mm, das Substrat ( $\epsilon_r = 2.2$ ) ist 0.254 mm dick. Die Struktur wird mit  $26 \times 52 \times 36$  äquidistanten Quadern diskretisiert, wobei  $\Delta z = 0.12$  mm (entsprechend  $\lambda/40$  @ 40 GHz) ist.

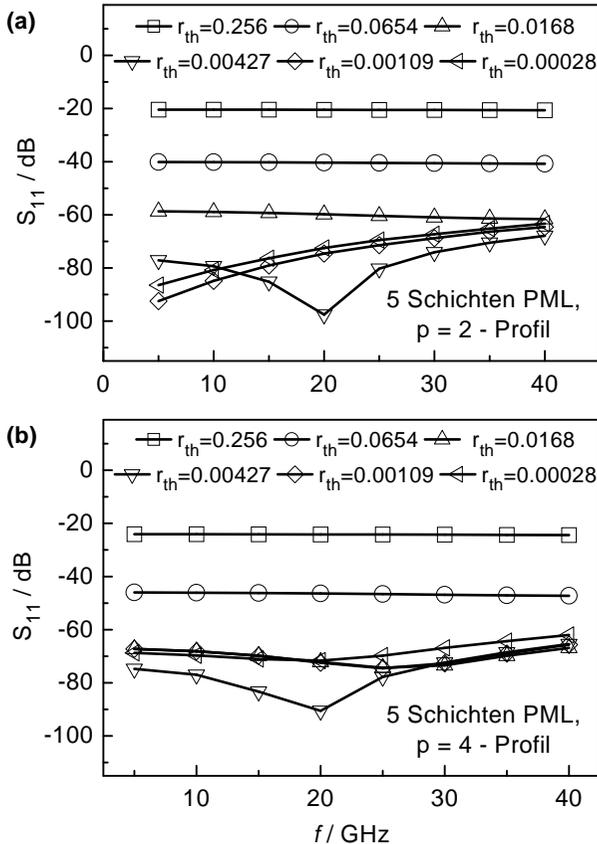
ne Mikrostreifenleitung wird mit einem PML-Rand terminiert, siehe Abbildung 6.17. Die Dimensionen, Substratpermittivität und Diskretisierung dieser Struktur entspricht denen aus [52], wo diese Leitung mit der FDTD-Methode berechnet wird. Zunächst wird eine 10-lagige longitudinale PML verwendet. Die Ergebnisse hinsichtlich der Dämpfungseigenschaften der PML mit gradiertem Profil sind Abbildung 6.18 zu entnehmen. Sowohl mit dem quadratischen ( $p=2$ ) Profil, Abbildung 6.18(a), als auch mit dem  $p=4$ -Profil, Abbildung 6.18(b) werden breitbandig Absorptionsniveaus besser als 80 dB erreicht. Für niedrige Frequenzen erreicht das  $p=4$ -Profil sogar die nominalen  $r_{\text{th}}$ -Reflexionswerte bis 120 dB. Diese sehr guten Ergebnisse lassen den

Schluss zu, dass mit der modifizierten Leitfähigkeitsberechnung auch mit sehr wenigen PML-Schichten hohe Absorptionsraten erzielt werden können. Wie die Abbildungen 6.19(a) und (b) zeigen, genügt bereits eine 5-lagige PML,



**Abbildung 6.18:** Betrag der Eingangsreflexion  $S_{11}$  der geschirmten Mikrostreifenleitung, siehe Abbildung 6.17, als Funktion der Frequenz. Die längshomogene Leitung wird mit einer 10-lagigen PML mit (a) quadratischem, bzw. (b)  $p = 4$ -Profil terminiert. Die nominalen PML-Reflexionskoeffizienten  $r_{th}$  sind derart gewählt, dass sie, für den inhomogenen Wellenleiterquerschnitt, in etwa Reflexionsniveaus von  $(-20, -40, -60, -80, -100$  und  $-120)$  dB entsprechen.

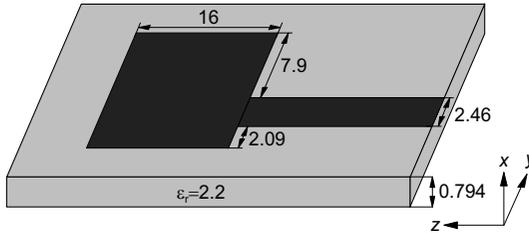
um breitbandig Absorptionen besser als 65 dB zu erzielen, was für praxisrelevante Berechnungen mehr als ausreichend ist. F3D-Berechnungen verschiedener weiterer Streifen- und Koplanarleitungen, auch mit nichtäquidistanten Diskretisierungen, bestätigten diese guten Absorptionsraten.



**Abbildung 6.19:** Betrag der Eingangsreflexion  $S_{11}$  der geschirmten Mikrostreifenleitung, siehe Abbildung 6.17. Die längshomogene Leitung wird mit einer 5-lagigen PML mit (a) quadratischem, bzw. (b)  $p=4$ -Profil terminiert.

### 6.3.2 Patch-Antenne

Hier werden Ergebnisse der FDFD-PML Berechnung einer Patch-Antenne mit Mikrostreifenzuleitung vorgestellt. Die geometrischen Abmessungen des Antennenpatches sowie der Zuleitung können Abbildung 6.20 entnommen werden. Die Struktur wird mit insgesamt vier verschiedenen PML-Rändern

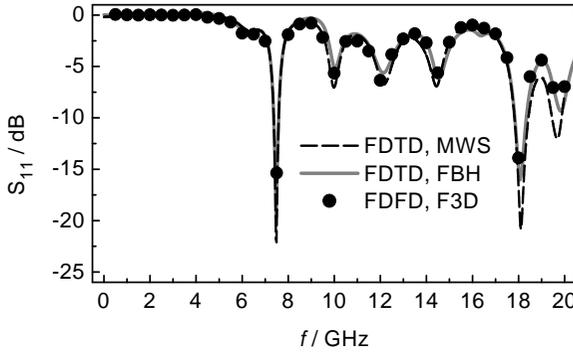


**Abbildung 6.20:** Geometrie der berechneten Patch-Antenne, alle Abmessungen in mm. Die Struktur wird mit  $28 \times 74 \times 116$  äquidistanten Quadern diskretisiert, wobei  $\Delta x = 0.265$  mm,  $\Delta y = 0.389$  mm und  $\Delta z = 0.4$  mm ist.

versehen, wobei die verschiedenen PML-Berandungen sich nicht überlappen<sup>1</sup>. Die rückwärtige, longitudinale PML bedeckt den gesamten Querschnitt, die lateralen PML's werden bis zur oberen Berandung durchgezogen, während die obere PML jeweils nur bis zum Beginn der lateralen und longitudinalen PML's reicht. Es werden jeweils 10-lagige PML-Bereiche mit einem Leitfähigkeitsprofil von  $p = 4$  eingesetzt. Die Berechnungszeiten für die Eingangsreflexion dieser Antenne lagen, frequenzabhängig, bei ca. 2...8 h (auf einer XP1000-Workstation).

Die Ergebnisse für die Eingangsreflexion  $S_{11}$  werden in Abbildung 6.21 aufgelistet. Zusätzlich sind hier FDTD-Ergebnisse gemäss dem in [9] vorgestellten Programm, sowie mit Microwave Studio [51] berechnete Ergebnisse

<sup>1</sup>Berechnungen dieser Struktur mit sich überlappenden PML's wurden nach jeweils 100 000 Iterationsschritten abgebrochen. Der Gleichungslöser zeigte hierbei keinerlei Konvergenz (Residuum  $> 0.4$ ).



**Abbildung 6.21:** Betrag der Eingangsreflexion  $S_{11}$  der Patch-Antenne gemäss Abbildung 6.20 als Funktion der Frequenz. Neben den FDFD-PML Resultaten sind Ergebnisse der Antennenberechnung mit FDTD-Methoden gemäss [9] und [51] aufgeführt.

eingetragen. Man erkennt eine sehr gute Übereinstimmung der mit den verschiedenen Methoden berechneten Resultate.

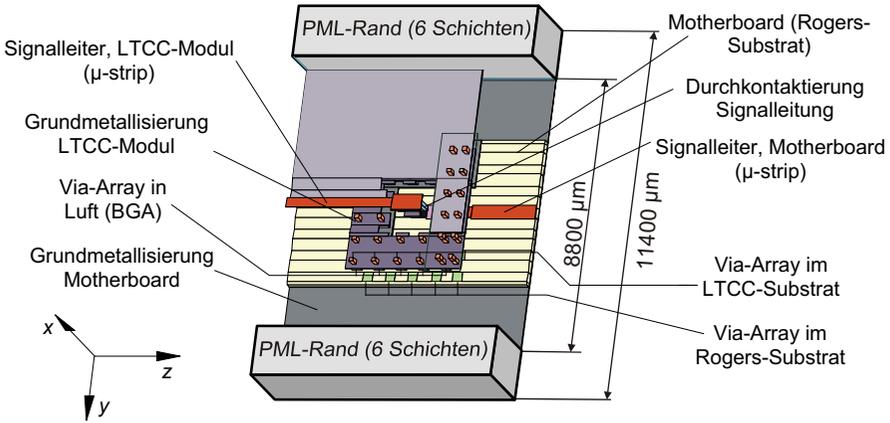
Prinzipiell lassen sich solche Antennen effektiver mit Zeitbereichsverfahren analysieren, da die Auflösung der einzelnen Resonanzen der Eingangsreflexion eine sehr feine Frequenz-Schrittweite (und somit eine lange Rechenzeit) beim FDFD-Verfahren erfordert. Dessen ungeachtet hat hier das FDFD-PML Programm seine grundsätzliche Eignung zur Berechnung von Patch-Antennen bewiesen.

### 6.3.3 LTCC-Packaging

Im Folgenden soll die Verwendung von FDFD-PML als Design-Werkzeug bei der Optimierung von Packaging-Lösungen demonstriert werden. Mit dem Programmpaket F3D werden die Übertragungseigenschaften eines LTCC<sup>2</sup>-Übergangs für SMD<sup>3</sup>-Techniken berechnet. Der untersuchte Übergang, siehe

<sup>2</sup>Low Temperature Cofired Ceramics, keramisches Trägersubstrat für HF-Schaltungen.

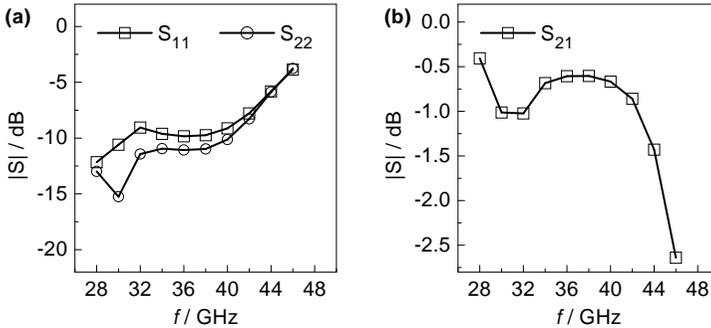
<sup>3</sup>Surface Mounted Device, Oberflächenmontiertes Bauelement oder Schaltungsmodul.



**Abbildung 6.22:** 3D-Ansicht des berechneten LTCC-Übergangs. Die Struktur wird mit  $99 \times 68 \times 125$  nichtäquidistanten Quadern diskretisiert. Auf der  $x, z$ -Ebene, in der Mitte der Streifenleitungen, wird eine magnetische Wand als Symmetrieebene definiert.

Abbildung 6.22, ist Bestandteil eines Modulträgers für Satellitenkommunikations-Systeme, die bei ca. 40 GHz betrieben werden. Die Signalleitung auf dem Motherboard ist auf das oben montierte LTCC-Modul zu führen. Sowohl auf dem Motherboard als auch auf dem darüber liegenden LTCC-Modul sind die Schaltungen in Mikrostreifenleitungs-Technik realisiert. Die großflächigen Massemetallisierungen werden mit matrixförmig angeordneten, metallischen Kontaktierungen, sogenannten Via-Arrays, miteinander verbunden. Die Via-Arrays in den Substraten und dem luftgefüllten Raum zwischen Motherboard und LTCC-Modul sind jeweils gegeneinander versetzt angeordnet.

Ziel der F3D-Berechnungen war die Optimierung der Signal- und Masse-Durchkontaktierungen um einerseits eine geringe Einfügedämpfung zwischen der Streifenleitung auf dem Motherboard und dem darauf montierten Modul zu erhalten. Andererseits müssen auch parasitäre PPL-Moden zwischen den Grundmetallisierungsebenen unterdrückt werden. Dies geschieht durch eine Optimierung des Via-Array-Designs [53].



**Abbildung 6.23:** Betrag der Reflexionen (a) und der Einfügedämpfung (b) des LTCC-Übergangs gemäss Abbildung 6.22 als Funktion der Frequenz  $f$ . Die Kurven beschreiben die Übertragungseigenschaften des noch nicht optimierten Übergangs.

Die untersuchte Struktur bedingt den Einsatz lateraler PML-Berandungen, die den Einfluss unphysikalischer Moden des großen Berechnungsquerschnitts unterdrücken. Wegen ihres symmetrischen Aufbaus muss nur die halbierte Struktur berechnet werden, eine magnetische Wand durch die Mittelebene der Signalleitungen dient als Symmetrieebene. Die Struktur wird mit 841 500 Gitterzellen diskretisiert, wobei die äussersten sechs  $y$ -Schichten mit der PML-Berandung versehen werden. Es wird ein nichtäquidistantes Gitter verwendet, die Diskretisierung variiert zwischen  $\Delta_{\min} = 2 \mu\text{m}$  und  $\Delta_{\max} = 220 \mu\text{m}$ . Die Ergebnisse der F3D-Simulation des nicht optimierten Übergangs sind in Abbildung 6.23 dargestellt. Die F3D-Simulation dieses Übergangs benötigt pro Frequenzpunkt ungefähr 18h Rechenzeit (auf einer XP1000-Workstation, Alpha Prozessor EV67) bei einem Speicherbedarf von ca. 1.9 GByte.

Durch verschiedene Maßnahmen gelingt es, die Einfügedämpfung um 0.5 dB zu verringern und gleichzeitig die Reflexionen an den Eingängen um weitere 10...15 dB abzusenken. Diese Resultate verdeutlichen, dass die FDFD-PML-Methode sich als wertvolles Design-Werkzeug bei der Entwicklung fortschrittlicher Packaging-Techniken bewährt hat.



## 7 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die absorbierende Randbedingung Perfectly-Matched-Layer in ihrer uniaxialen Formulierung bei Verwendung mit der Frequenzbereichsmethode der Finiten-Differenzen (FDFD) untersucht. Die FDFD-PML-Methode wird dabei für Wellenleiter- und Streumatrixberechnungen eingesetzt. Bestehende Genauigkeitsgrenzen, die der PML-Formulierung immanent sind, werden durch analytische Berechnungen nachgewiesen. Diese vertiefen das Verständnis für verschiedene Auffälligkeiten beim Einsatz der PML mit numerischen Frequenzbereichsverfahren. Die gewonnenen Erkenntnisse sind auch beim Einsatz der PML mit Zeitbereichsverfahren (FDTD) relevant.

Ein wichtiger Aspekt, der in dieser Arbeit erstmals betrachtet wurde, ist der Einfluss der PML-Berandung auf das Modenspektrum eines Wellenleiters. Die Untersuchungen zeigen, dass durch die PML-Randbedingungen zusätzliche Moden im interessierenden Spektralbereich entstehen, die nicht anhand ihrer Dämpfung identifiziert werden können. Um eine sichere Separation dieser Moden von den gesuchten, realen Moden des Wellenleiters zu ermöglichen, wird ein Kriterium entwickelt, das eine zuverlässige Trennung der verschiedenen Modentypen erlaubt. Die Funktionsweise des Kriteriums wird anhand eines analytisch berechneten Wellenleiters erläutert. Seine Eignung, eine sichere Modentrennung auch bei höchsten Frequenzen zu gewährleisten, wird mit der numerischen Berechnung verschiedener koplanarer Wellenleiter bewiesen.

Analytische Untersuchungen zeigen weiterhin, dass mit endlich ausgedehnten PML-Gebieten nur eine begrenzt genaue Simulation unendlich aus-

gedehnter Bereiche möglich ist. Aufgrund der speziellen Definition der PML-Permittivitäts- und Permeabilitäts-Tensoren kann die PML als aktives Medium wirken, sodass einfallende Wellen sogar eine leichte Verstärkung erfahren. Diese Erkenntnisse bestätigen numerische Wellenleiter-Berechnungen. Die beobachteten Genauigkeits-Restriktionen sind auch für FDTD-Berechnungen mit lateralen PML's gültig.

Insgesamt kann gezeigt werden, dass die PML-Randbedingung in Verbindung mit dem Moden-Trennungs-Kriterium ein sehr effektives Werkzeug zur FDFD-Analyse von Abstrahlungseffekten bei Wellenleitern darstellt.

Dies demonstriert eine detaillierte Analyse der geometrischen Dispersions- und Abstrahlungseffekte auf Koplanarleitungen. Die verwendete Frequenzbereichsmethode erlaubt hierbei aufgrund der exakten Modentrennung eine genaue Berechnung der Ausbreitungskonstanten, auch auf sehr dünnen Substraten mit Rückseitenmetallisierung. Die verschiedenen Abstrahlungsmechanismen und Kopplungseffekte zwischen Grundmode und höheren Moden werden analysiert. Diese Effekte, die bereits beim Schaltungsdesign für W-Band Applikationen berücksichtigt werden müssen, werden bis in den Terahertzbereich quantifiziert.

Bei der Nutzung der PML-Randbedingung in dreidimensionalen Strukturen steht die Analyse der mit PML erreichbaren Absorptionsraten im Vordergrund der Untersuchungen. Die durch die Feldanordnung im YEE-Gitter verursachten Ungenauigkeiten werden mit einer analytischen Formulierung beschrieben. Es wird gezeigt, dass Details bei der Formulierung der Materialkonstanten im Gitter innerhalb der PML-Bereiche einen entscheidenden Einfluss auf die erreichbare Genauigkeit haben. So lassen sich mit der standardmäßigen Definition der elektrischen und magnetischen Verlustgrößen auch mit gradierten Leitfähigkeiten keine Absorptionsniveaus besser als 40...50 dB erreichen. Durch eine modifizierte, an das Leitfähigkeitsprofil angepasste Berechnung der ortsabhängigen elektrischen und magnetischen

---

Leitfähigkeiten gelingt eine starke Verbesserung der PML-Absorptionsfähigkeit. Ohne eine Veränderung am FD-Schema vornehmen zu müssen, können dadurch bereits mit 5-lagigen PML's breitbandig Dämpfungsniveaus besser als 60 dB erreicht werden. Auch hier sind die gewonnenen Erkenntnisse direkt anwendbar auf FDTD-Programme, die die integrale Formulierung des Finite-Differenzen Schemas verwenden.

Ein wichtiger Aspekt für den Einsatz der PML im 3D-Fall ist die Numerik. Die PML-Formulierung erfordert stark anisotrope Materialeinträge in die Systemmatrix zur Lösung des dreidimensionalen Randwertproblems. Hierdurch verschlechtert sich die numerische Kondition dieser Matrix, was eine teilweise drastisch verringerte Konvergenzgeschwindigkeit des iterativen Lösungsverfahrens zur Folge hat. Dies gilt insbesondere für den Fall, wenn sich PML's mit verschiedenen Wirkrichtungen überlappen, beispielsweise an den Ecken und Kanten von PML-Berandungen. Bei FDTD-Verfahren führt diese starke Anisotropie zu verlängerten Abklingzeiten, also einer erhöhten Anzahl von Zeitschritten, unter Umständen kommt es zu Instabilitäten bei der Lösung des Differenzen-Gleichungs-Systems mit dem Leapfrog-Algorithmus. Es wird gezeigt, dass der Verzicht auf solche überlappenden PML-Gebiete eine signifikante Verbesserung der Konvergenzeigenschaften bewirkt. Die FDFD-Berechnung einer Patch-Antenne verdeutlicht, dass auch ohne die Definition von Überlappungsgebieten hinreichend genaue Berechnungen der Streueigenschaften möglich sind.

Das vorgestellte FDFD-PML Verfahren beweist seine Effektivität auch bei der Berechnung von Strukturen der Millimeterwellen-Aufbautechnik, so zum Beispiel bei der Optimierung von Chip-Übergängen. Die Verwendung lateraler PML-Berandungen ermöglicht hier die Berechnung der Übertragungseigenschaften komplexer Strukturen, ohne dass künstliche Hohlraumresonanzen des finiten Rechengebietes die Resultate verfälschen.

Zukünftige Arbeiten an der FDFD-PML-Methode sollten sich zunächst

mit der Verbesserung der Konvergenz bei der Lösung des linearen Gleichungssystems beschäftigen. Hier könnten einerseits modifizierte PML-Formulierungen die starken Anisotropien, die bei überlappenden PML-Gebieten auftreten entschärfen, andererseits sind Verbesserungen auf der mathematisch-numerischen Seite mit Hilfe speziell angepasster Vorkonditionierer oder auch durch die Nutzung sogenannter algebraischer Mehrgitterverfahren denkbar.

Ein weiterer Aspekt verdient Beachtung: Zusätzlich zu den in dieser Arbeit ausführlich untersuchten PML-bedingten Modeneffekten bei der Berechnung von Wellenleitern, können auch im 3D-Fall laterale PML-Ränder das Resonanzspektrum beeinflussen. Unter bestimmten Umständen werden spezielle PML-Moden von den physikalischen Moden der Struktur angeregt, was zu Verfälschungen der Ergebnisse führen kann. Eine genaue Untersuchung dieser dreidimensionalen PML-Modeneffekte, die bisher in der Literatur überhaupt nicht erwähnt werden, sowie die Entwicklung geeigneter Gegenmaßnahmen sollte Gegenstand zukünftiger Untersuchungen sein.

Insgesamt bleibt festzuhalten, dass die PML auch mit dem FDFD-Verfahren sehr erfolgreich zur Berechnung einer Vielzahl von Wellenleiter- und Streuproblemen eingesetzt werden kann. Wichtige Eigenschaften wie die Erhaltung der Modenorthogonalität bei der Eigenwellenanalyse, die winkelunabhängige Dämpfung einfallender Wellen und hohe Absorptionsraten zeichnen die PML gegenüber anderen absorbierenden Randbedingungen aus. Gleichzeitig beinhaltet die PML-Formulierung jedoch verschiedene Nebeneffekte und Beschränkungen, denen bisher nur wenig Aufmerksamkeit geschenkt wurde, die aber für die praktische Nutzbarkeit von großer Bedeutung sind. Zu diesen Themen liefert die vorliegende Arbeit wesentliche Beiträge.

## Literaturverzeichnis

- [1] J.-P. BERENGER, „A Perfectly Matched Layer for the Absorption of Electromagnetic Waves,“ *J. Comput. Physics*, vol. 114, 185 – 200, Okt. 1994.
- [2] A. BAYLISS, E. TURKEL, „Radiation Boundary Conditions for Wave-Like Equations,“ *Comm. Pure Appl. Math.*, vol. 23, 707 – 725, 1980.
- [3] B. ENQUIST, A. MAJDA, „Absorbing Boundary Condition for the Numerical Simulation of Waves,“ *Mathematics of Computation*, vol. 31, 629 – 651, 1977.
- [4] G. MUR, „Absorbing Boundary Conditions for the Finite-Difference Approximation of the Time-Domain Electromagnetic Field Equations,“ *IEEE Trans. Electromagnetic Compatibility*, vol. 23, 377 – 382, 1981.
- [5] A. TAFLOVE, *Computational Electrodynamics - The Finite-Difference Time-Domain Method*. Artech House, Boston, 1995.
- [6] T. G. MOORE, J. G. BLASCHAK, A. TAFLOVE, G. A. KRIEGMANN, „Theory and Application of Radiation Boundary Operators,“ *IEEE Trans. Antennas and Propagation*, vol. 36, 1797 – 1812, Dez. 1988.
- [7] D. B. MEADE, G. W. SLADE, A. F. PETERSON, K. J. WEBB, „Comparison of Local Radiation Boundary Conditions for the Scalar Helmholtz Equation with General Boundary Shapes,“ *IEEE Trans. Antennas and Propagation*, vol. 43, 6 – 10, Jan. 1995.

- [8] R. LEE, A. C. CANGELLARIS, „A Study of Discretization Error in the Finite Element Approximation of Wave Solutions,“ *IEEE Trans. Antennas and Propagation*, vol. 40, 542 – 549, Mai 1992.
- [9] N. H. HUYNH, *Verbesserung der Effizienz der FDTD-Methode für die Analyse von koplanaren MMICs*. Dissertation TU Berlin, 2000. [http://edocs.tu-berlin.de/diss/2000/huynh\\_ngoc.pdf](http://edocs.tu-berlin.de/diss/2000/huynh_ngoc.pdf).
- [10] W. C. CHEW, W. H. WEEDON, „A 3D Perfectly Matched Medium from Modified Maxwell’s Equations with Stretched Coordinates,“ *Microwave and Optical Technology Letters*, vol. 7, 599 – 604, Sept. 1994.
- [11] C. M. RAPPAPORT, „Perfectly Matched Absorbing Boundary Conditions based on Anisotropic Lossy Mapping of Space,“ *Microwave and Guided Wave Letters*, vol. 5, 90 – 92, März 1995.
- [12] Z. S. SACKS, D. K. KINGSLAND, R. LEE, „A Perfectly Matched Anisotropic Absorber for Use as an Absorbing Boundary Condition,“ *IEEE Trans. Antennas and Propagation*, vol. 43, 1460 – 1463, Dez. 1995.
- [13] R. MITTRA, „A New Look at the Perfectly Matched Layer (PML) Concept for the Reflectionless Absorption of Electromagnetic Waves,“ *Microwave and Guided Wave Letters*, vol. 5, 84 – 86, März 1995.
- [14] T. WEILAND, „Eine Methode zur Lösung der Maxwell’schen Gleichungen für sechskomponentige Felder auf diskreter Basis,“ *Archiv für Elektronik und Übertragung (AEÜ)*, vol. 31, Nr. 3, 116 – 120, 1977.
- [15] T. WEILAND, „On the Unique Numerical Solution of Maxwellian Eigenvalue Problems in Three Dimensions,“ *Particle Accelerators*, vol. 17, 227 – 242, 1985.
- [16] T. WEILAND, „Elektromagnetisches CAD, Rechnergestützte Methoden zur Berechnung von Felder,“ *Skriptum zur Vorlesung Feldtheorie 2*.

- 
- [17] K. S. YEE, „Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell’s Equations in Isotropic Media,“ *IEEE Trans. Antennas and Propagation*, vol. 14, Nr. 5, 302 – 307, 1966.
- [18] G. HEBERMEHL, F.-K. HÜBNER, R. SCHLUNDT, T. TISCHLER, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, „On the Computation of Eigen Modes for Lossy Microwave Transmission Lines Including Perfectly Matched Layer Boundary Conditions,“ *The International Journal for Computation and Mathematics in Electrical and Electronic Engineering, COMPEL*, vol. 20, Nr. 4, 948 – 964, 2001.
- [19] R. B. LEHOUCQ, „Analysis and Implementation of an Implicitly Restarted Arnoldi Iteration,“ *Rice University, Department of Computational and Applied Mathematics, Technical Report*, vol. 13, 1 – 135, 1995.
- [20] SPARSE, „Algebraische Programmbibliothek zur Lösung linearer Gleichungssysteme,“ <http://www.netlib.org/sparse/index.html>.
- [21] UMFPACK, „Algebraische Programmbibliothek zur Lösung linearer Gleichungssysteme,“ <http://www.netlib.org/linalg/>.
- [22] T. A. DAVIS, I. S. DUFF, „A Combined Unifrontal/Multifrontal Method for Unsymmetric Sparse Matrices,“ *University of Florida, Technical Report*, vol. 16, 1 – 18, 1997.
- [23] O. SCHENK, K. GÄRTNER, „Two-Level Dynamic Scheduling in PARDISO: Improved Scalability on Shared Memory Multiprocessing Systems,“ *Parallel Computing*, vol. 28, 187 – 197, 2002.
- [24] G. HEBERMEHL, F.-K. HÜBNER, R. SCHLUNDT, T. TISCHLER, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, „Numerical techniques in the simulation of microwave and laser structures including PML,“ *Proceedings of the 10th International IGTE Symposium on Numerical Field Calculation in Electrical Engineering*, 1 – 13, 2002.

- [25] K. BEILENHOFF, W. HEINRICH, H. L. HARTNAGEL, „Improved Finite-Difference Formulation in Frequency Domain for Three-Dimensional Scattering Problems,“ *IEEE Trans. on Microwave Theory and Techniques*, vol. 40, 540 – 546, März 1992.
- [26] K. BEILENHOFF, *Simulation und Modellierung von Leitungsdiskontinuitäten und -Verzweigungen für monolithisch integrierte Mikrowellenschaltungen*. Dissertation, TH Darmstadt, 1995.
- [27] R. W. FREUND, W. MALHOTRA, „A Block-QMR Algorithm for Non-Hermitian Linear Systems with Multiple Right-Hand Sides,“ *Linear Algebra and Its Applications*, vol. 254, 119 – 157, 1997.
- [28] A. CHRIST, *Streumatrixberechnung mit dreidimensionalen Finite-Differenzen für Mikrowellen-Chip-Verbindungen und deren CAD-Modelle*. Dissertation, TH Darmstadt, 1988.
- [29] H. DERUDDER, F. OLYSLAGER, D. DE ZUTTER, „An Efficient Series Expansion for the 2D Green’s Function of a Microstrip Substrate Using Perfectly Matched Layers,“ *Microwave and Guided Wave Letters*, vol. 9, 505 – 507, Dez. 1999.
- [30] H. ROGIER, D. DE ZUTTER, „Berenger and Leaky Modes in Microstrip Substrates Terminated by a Perfectly Matched Layer,“ *IEEE Trans. on Microwave Theory and Techniques*, vol. 49, 712 – 715, April 2001.
- [31] R. E. COLLIN, *Field Theory of Guided Waves*. IEEE Press, Piscataway NJ, 1991.
- [32] T. TISCHLER, W. HEINRICH, „The Perfectly Matched Layer As Lateral Boundary in Finite-Difference Transmission-Line Analysis,“ *IEEE International Microwave Symposium Digest*, vol. 1, 121 – 124, 2000.

- 
- [33] T. TISCHLER, W. HEINRICH, „The Perfectly Matched Layer As Lateral Boundary in Finite-Difference Transmission-Line Analysis,“ *IEEE Trans. on Microwave Theory and Techniques*, vol. 48, 2249 – 2253, Dez. 2000.
- [34] H. SHIGESAWA, M. TSUJI, A. A. OLINER, „Conductor-Backed Slot Line and Coplanar Waveguide: Dangers and Full-Wave Analyses,“ *IEEE International Microwave Symposium Digest, Vol. 1*, 199 – 202, 1988.
- [35] W. H. HAYDL, „Resonance Phenomena and Power Loss in Conductor-Backed Coplanar Structures,“ *Microwave and Guided Wave Letters*, vol. 20, 514 – 516, Dez. 2000.
- [36] A. A. OLINER, K. S. LEE, „The Nature of the Leakage from Higher-Order Modes on Microstrip Line,“ *IEEE International Microwave Symposium Digest, Vol. 1*, 57 – 60, 1986.
- [37] A. A. OLINER, „Leakage from Higher Modes on Microstrip Line with Application to Antenna,“ *Radio Science*, vol. 22, Nr. 6, 907 – 912, 1987.
- [38] Y.-D. LIN, J.-W. SHEEN, C.-K.. C. TZUANG, „Analysis and Design of Feeding Structures for Microstrip Leaky Wave Antenna,“ *IEEE Trans. on Microwave Theory and Techniques*, vol. 44, 1540 – 1547, Sep. 1996.
- [39] G. HEBERMEHL, F.-K. HÜBNER, R. SCHLUNDT, T. TISCHLER, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, „Numerical Simulation of Lossy Microwave Transmission Lines Including PML,“ *Scientific Computing in Electrical Engineering, Lecture Notes*, 267 – 275, Springer Verlag, 2001.
- [40] G. HEBERMEHL, F.-K. HÜBNER, R. SCHLUNDT, T. TISCHLER, H. ZSCHEILE, W. HEINRICH, „Perfectly Matched Layers in Transmission Lines, Numerical Mathematics and Advanced Applications,“ *ENUMATH 2001*, 281 – 290, Springer Verlag, 2003.

- [41] D. M. SHEEN, D. L. McMAKIN, T. E. HALL, „Three-Dimensional Millimeter-Wave Imaging for Concealed Weapon Detection,“ *IEEE Trans. on Microwave Theory and Techniques*, vol. 49, 1581 – 1592, Sep. 2001.
- [42] H. SHIGESAWA, M. TSUJI, A. A. OLINER, „A New Mode-Coupling Effect on Coplanar Waveguides of Finite Thickness,“ *IEEE International Microwave Symposium Digest, Vol. 3*, 1063 – 1066, 1990.
- [43] M. Y. FRANKEL, S. GUPTA, J. A. VALDMANIS, G. A. MOUROU, „Terahertz Attenuation and Dispersion Characteristics of Coplanar Transmission Lines,“ *IEEE Trans. on Microwave Theory and Techniques*, vol. 39, 910 – 915, Juni 1991.
- [44] D. B. RUTLEDGE, D. P. NEIKIRK, D. P. KASILINGAM, *Millimeter Components and Techniques*, vol. 10. Academic Press, New York, 1983. Infrared and Millimeter Wave Waves.
- [45] N. H. HUYNH, W. HEINRICH, „FDTD Analysis of Sub-Millimeter Wave CPW with Finite-Width Ground Metalization,“ *Microwave and Guided Wave Letters*, vol. 7, 414 – 416, Dez. 1997.
- [46] W. HEINRICH, F. SCHNIEDER, T. TISCHLER, „Dispersion and Radiation Characteristics of Conductor-Backed CPW with Finite Ground Width,“ *IEEE International Microwave Symposium Digest*, vol. 3, 1663 – 1666, 2000.
- [47] F. SCHNIEDER, T. TISCHLER, W. HEINRICH, „Modeling Dispersion and Radiation Characteristics of Conductor-Backed CPW with Finite Ground Width,“ *IEEE Trans. on Microwave Theory and Techniques*, vol. 51, 137 – 143, Jan. 2003.

- 
- [48] W. HEINRICH, „Quasi-TEM Description of MMIC Coplanar Lines Including Conductor-Loss Effects,“ *IEEE Trans. on Microwave Theory and Techniques*, vol. 41, 45 – 52, Jan. 1993.
- [49] M. R. LYONS, A. C. POLYCARPOU, C. A. BALANIS, „On the Accuracy of Perfectly Matched Layers using a Finite Element Formulation,“ *IEEE International Microwave Symposium Digest*, vol. 1, 205 – 208, 1996.
- [50] T. TISCHLER, W. HEINRICH, „Accuracy Limitations of Perfectly Matched Layers in 3D Finite-Difference Frequency-Domain Method,“ *IEEE International Microwave Symposium Digest*, vol. 3, 1885 – 1888, 2002.
- [51] COMPUTER SIMULATION TECHNOLOGY (CST), *Microwave Studio V4.1*. <http://www.cst.com>.
- [52] S. D. GEDNEY, „An Anisotropic Perfectly Matched Layer-Absorbing Medium for the Truncation of FDTD Lattices,“ *IEEE Trans. Antennas and Propagation*, vol. 44, 1630 – 1639, Dez. 1996.
- [53] T. TISCHLER, M. RUDOLPH, A. KILK, W. HEINRICH, „Via Arrays for Grounding in Multilayer Packaging – Frequency Limits and Design Rules,“ *IEEE International Microwave Symposium Digest*, vol. 2, 1147 – 1150, 2003.