

Lichtstreuung und Partikelcharakterisierung

Neue Methoden zur Simulation der Lichtstreuung



► Dr.-Ing. Thomas Wriedt,
Institut für Werkstofftechnik

Computerprogramme zur Simulation der Lichtstreuung unterstützen die Forschung auf dem Gebiet der optischen Partikelmesstechnik bei der Entwicklung von Methoden zur Charakterisierung der Form von nichtsphärischen Partikeln. Viele dieser Simulationsprogramme sind frei verfügbar. An dieser Stelle werden einige Programme kurz vorgestellt und exemplarisch gezeigt, dass die Lichtstreuung von versinterten Nanopartikelaggregaten simuliert werden kann.

Probleme der Partikelcharakterisierung

In der Partikelmesstechnik haben optische Methoden seit jeher einen festen Platz. Neben den abbildenden Verfahren sind insbesondere in der Nanotechnik die Streulichtverfahren von Interesse.

Nachdem sich die Messtechnik jahrzehntelang darauf beschränkt hat, alle Partikel als kugelförmig zu betrachten und einen äquivalenten Durchmesser zu bestimmen, gerät heutzutage mehr und mehr die genaue Partikelform in den Fokus. Neben der Größe spielt in vielen Fällen auch die Form eine wichtige Rolle bei den anwendungstechnischen Eigenschaften von Partikeln. Dieses stellt die Forschung auf dem Gebiet der optischen Partikelmesstechnik vor neue Herausforderungen. Zur Entwicklung neuartiger Charakterisierungsmethoden muss nicht nur die

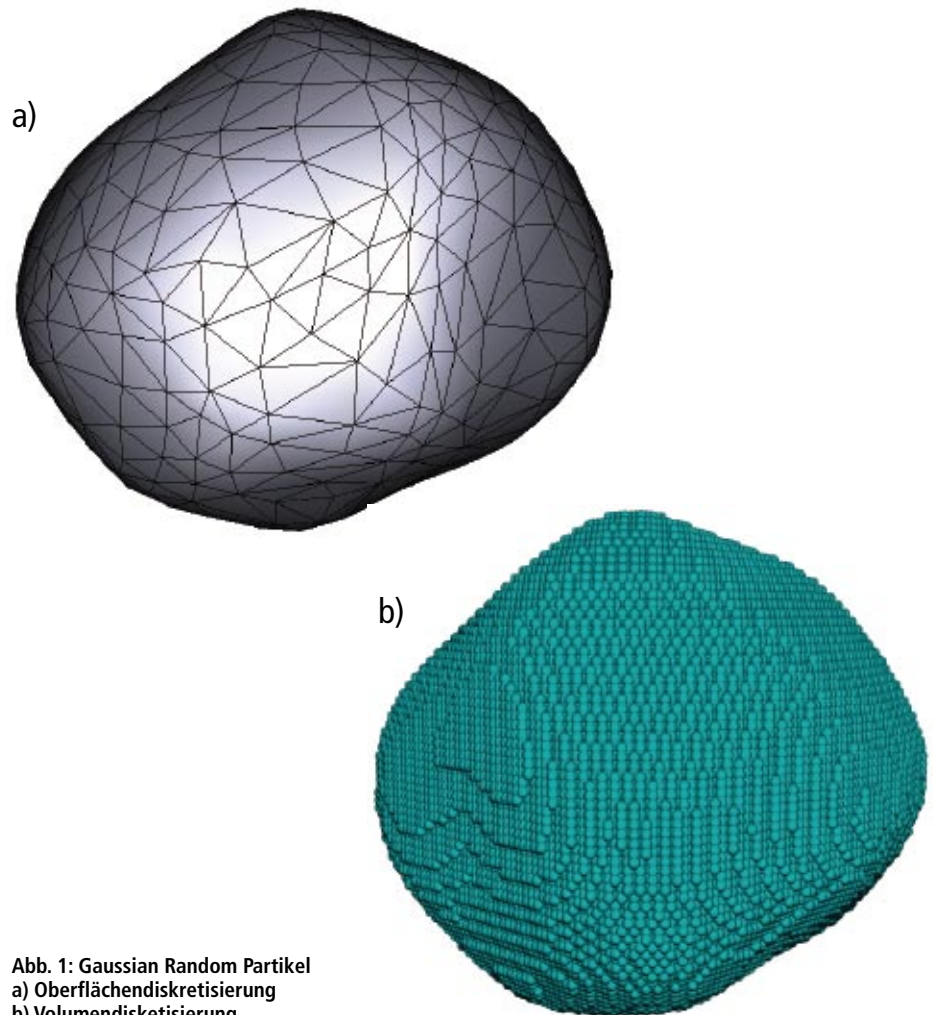


Abb. 1: Gaussian Random Partikel
a) Oberflächendiskretisierung
b) Volumendiskretisierung

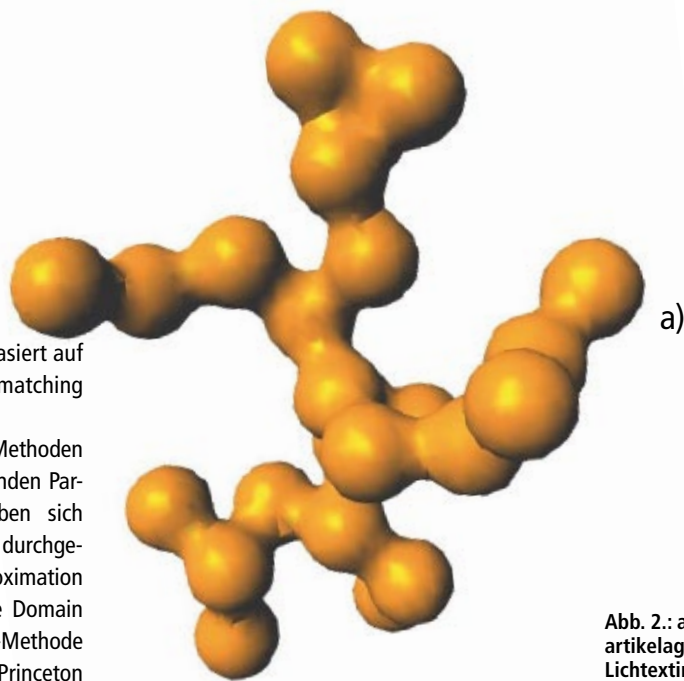
Lichtstreuung an einer Kugel simuliert werden können, sondern auch die Streuung an Partikel, die nichtsphärisch sind. Im Folgenden soll ein kleiner Überblick über zur Verfügung stehende Methoden und Programme gegeben werden [1]. Nähere Informationen finden sich in dem zitierten Artikel und auf der Internetseite ScattPort [2], die als Informationsportal zum Thema Lichtstreuung mit Unterstützung der Deutschen Forschungsgemeinschaft von der Arbeitsgruppe betrieben wird.

Simulationsmethoden

Es ist nicht einfach, einen Überblick über die entwickelten und zur Verfügung stehenden Methoden zu behalten. Für den Zweck dieses Arti-

kels sollen die Methoden in oberflächen- und volumenbasierende Methoden eingeteilt werden.

Bei den oberflächenbasierenden Methoden muss nur die Oberfläche eines streuenden Partikels beschrieben und diskretisiert werden. Die Berechnung des Streufeldes erfolgt dann analog der Mietheorie als Reihenentwicklung von sphärischen Wellenfunktionen. Die verbreitetsten Programme beruhen auf der T-Matrix Methode oder deren Weiterentwicklung. Beispiele hierfür sind die T-Matrix Programme von Mishchenko (NASA Goddard Institute for Space Studies) und die Nullfeldmethode mit diskreten Quellen (NFM-DS), die am IWT in Bremen entwickelt wurde. Das Multiple Multipole Programm (MMP) der ETH Zürich (Institut für Feld-



theorie und Höchstfrequenztechnik) basiert auf einer Weiterentwicklung der Pointmatching Methode.

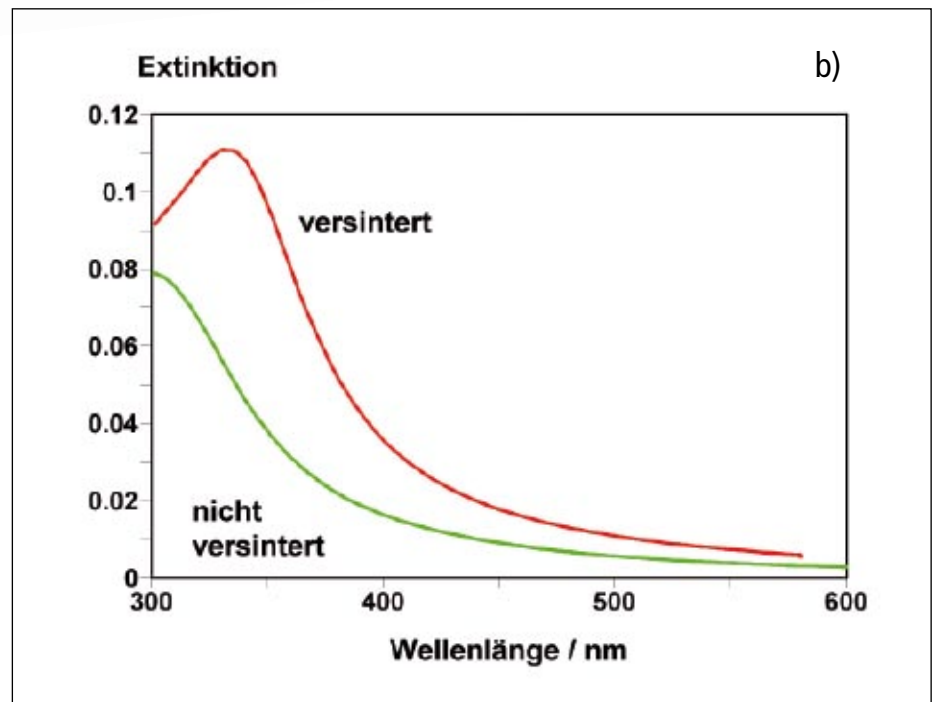
Bei den volumenbasierenden Methoden muss das ganze Volumen eines streuenden Partikels diskretisiert werden. Hier haben sich hauptsächlich Computerprogramme durchgesetzt, die auf der diskreten Dipolapproximation (DDA) oder der Finite Difference Time Domain Methode (FDTD) beruhen. Bei der DDA-Methode gibt es Programmentwicklungen der Princeton University (Dept. of Astrophysical Sciences, DDS-CAT) und der Universität Amsterdam (Informatics Institute, AmsterdamDDA (ADDA)). Des Weiteren gibt es eine Vielzahl von freien und kommerziellen Programmen, die auf der FDTD Methode beruhen.

Die unterschiedliche Diskretisierung der Partikelform ist in Abb. 1 am Beispiel eines Gaussian Random Partikels dargestellt. Der Rechenaufwand ist bei den Volumendiskretisierungsmethoden höher. Allerdings kann mit diesen Methoden auch die Lichtstreuung von konkaven Partikeln und inhomogenen Partikeln simuliert werden, was bei den Oberflächenmethoden in der Regel nicht der Fall ist.

Beispielrechnung

Um das Potenzial von verfügbaren Simulationsprogrammen zu demonstrieren, soll an dieser Stelle die Simulation der Lichtstreuung eines versinterten TiO₂ Nanopartikelaggregates vorgestellt werden. Da Versinterung die mechanische Stabilität eines Aggregates erhöht, besteht ein Interesse, diese messtechnisch zu erfassen. Zur Generierung des Ausgangsaggregates auf dem Computer wurde ein Diffusion Limited Aggregation (DLA) Algorithmus verwendet. Weiterhin ist eine Methode zur Reproduktion des Versinterungsprozesses notwendig, um die gewünschten versinterten Aggregate auf dem Computer zu produzieren.

Die morphologische Umwandlung eines Aggregates bei der Sinterung wird durch die Minimierung der freien Energie durch Reduktion der Oberfläche getrieben. Zur Modellierung dieses Prozesses wurde eine phänomenologische Methode basierend auf dem Metaball-Algorithmus eingesetzt. Für die beispielhafte Berechnung wurden die folgenden Parameter verwendet: Der Radius des Primärpartikels beträgt $r = 25$ nm, die fraktale Dimension ist $D_f = 1.8$ und die Anzahl der Primärpartikel ist $N = 24$. Die Form des



so generierten versinterten Aggregates ist in Abbildung 2a dargestellt.

Der Verlauf des Extinktionsspektrums wurde mit dem Programm DDSCAT simuliert und ist in Abbildung 2b dargestellt. Man erkennt eine deutliche Verschiebung des Maximums im Spektrum gegenüber dem des nicht versinterten Aggregates bei gleich bleibender Partikelmasse.

Fazit

Eine Anzahl von Programmen zur Simulation der Lichtstreuung an nicht-sphärischen Partikeln steht frei zur Verfügung und kann sinnvoll zur Bearbeitung von Forschungsfragenstellungen auf dem Gebiet der optischen Partikelmesstechnik eingesetzt werden.

Abb. 2.: a) Model eines versinterten TiO₂ Nanopartikelaggregates. b) Simulation der spektralen Lichtextinktion dieses Aggregates (orientierungsgemittelt)

Literatur

- [1] Wriedt, T.: Light scattering theories and computer codes. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 110, 833–843 (2009)
- [2] Wriedt T.: ScattPort, Light Scattering Information portal. <http://www.scattport.org>.

KONTAKT

Dr.-Ing. Thomas Wriedt
 Institut für Werkstofftechnik
 Bremen
 Tel.: 0421-2182507
 Fax: 0421-2185378
 thw@iwt.uni-bremen.de
www.iwt-bremen.de/verfahrenstechnik/pulver-und-partikelmesstechnik.html