

Performance-Steigerung multispektraler Systeme durch eine analytische Auswahl der Spektralbänder am Beispiel von a-Si:H Photodioden

genehmigte DISSERTATION
zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Ingenieurwissenschaften

vorgelegt von
Dipl.-Inform. Christian Merfort

eingereicht bei der Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät
der Universität Siegen
Siegen 2013

1. Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Markus Böhm

2. Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Madjid Fathi

Tag der mündlichen Prüfung: 16.09.2013

gedruckt auf alterungsbeständigem holz- und säurefreien Papier

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis.....	3
Einleitung	5
abstract	7
1 Motivation	9
1.1 Zielsetzung.....	12
1.2 Stand der Technik.....	14
1.3 Zusammenfassung.....	22
2 Farbsensoren	23
2.1 Das Ausgangsmaterial	25
2.2 Absorptionskoeffizient	27
2.3 Modellierung von a-Si:H Farbsensoren	29
2.4 Störgrößen.....	31
2.5 Zusammenfassung.....	35
3 Farbmeterik	37
3.1 Farbsysteme	38
3.2 Farbmessung	49
3.3 Farbabstandsmessung.....	54
3.4 Zusammenfassung.....	55
4 Die analytische Auswahl der Spektralbänder	57
4.1 Die elektrische und optische Charakterisierung	57
4.2 Vorüberlegungen.....	58
4.3 Das Maß für die externe Separation	63
4.4 Die Auswahl der Spektralbänder mit ΔCL	66
4.5 Grenzen von ΔCL	67
4.6 Die Zugehörigkeitsfunktion μ	68
4.7 Erweiterung von μP	71
4.8 Proof of Concept	72
4.9 Zusammenfassung.....	77
5 Multivariate Analyse.....	79
5.1 Vorgehen	80
5.2 Strukturierung und Gruppierung der Parameter	82

5.3	Multivariate Analyse	83
5.4	Streudiagramme.....	86
5.5	Zusammenfassung.....	92
6	Zusammenfassung	93
7	Anhang.....	99
7.1	Drift-Messung.....	99
7.2	Skalierbarkeit.....	99
7.3	MMCS Multicolor-Sensor	100
7.4	Tabellen	101
8	Symbolverzeichnis	105
8.1	Physikalische Größen	105
8.2	Abkürzungen/Bezeichnungen	108
9	Literatur	111
10	Publikationen im Rahmen dieser Arbeit	115
	Lebenslauf	119
	Danksagung.....	121

Einleitung

Ziel der vorliegenden Dissertation ist die Steigerung der Messgenauigkeit und Performance der zerstörungsfreien Charakterisierung von Materialien anhand des Reflexionsverhaltens. Die Arbeit beschreibt die Entwicklung eines analytischen Verfahrens zur Separation derjenigen spektralen Bänder, die eine hohe Informationsdichte aufweisen. Basis für die Charakterisierung ist das von einem Material reflektierte bzw. absorbierte Licht, das dadurch eine eindeutige spektrale Signatur erhält. Durch die analytische Separation ist es möglich, mit einer minimalen Anzahl an spektralen Bändern vergleichbare Messergebnisse zu erzielen, wie bei den komplexeren hyperspektralen Verfahren. Bei den hyperspektralen Verfahren werden für jede Messung immer mehrere Hundert Bänder aufgenommen, da die Merkmalsextraktion erst nach der Messung auf der Basis von empirisch und probabilistisch gewonnener Informationen erfolgt.

Die Arbeit dokumentiert die verschiedenen Entwicklungsstufen, in denen Parameter definiert und ein Algorithmus zur automatischen Separation implementiert wurde. Den Ausgangspunkt bilden die am Institut entwickelten spannungsgesteuert durchstimmbaren multispektralen Photodioden mit einer dynamisch veränderbaren Informationsdichte pro Pixel. Die mit diesem Detektortyp erzielbaren Ergebnisse lassen sich in Bezug auf die Anzahl der realisierbaren spektralen Bänder nicht mehr mit den gängigen trichromatischen Methoden aus der Farbmeterik analysieren. Ausgehend von der allgemeinen Anforderung an die externe Separation eines Sensors wurde der Parameter ΔCL definiert. Für einen Sensor mit einer beliebigen Anzahl an spektralen Bändern bei einer gegebenen Stoffdatenbank unter einer Beleuchtungsart liefert die Funktion für ΔCL einen Wert zurück, der dimensionsunabhängig ein Maß für die externe Separation ist. Da aber eine hohe externe Separation noch keine Aussage darüber liefert, mit welcher Zuverlässigkeit die Messung erfolgte, wurde in Anlehnung an die Zugehörigkeitsfunktion aus dem Bereich der Fuzzy Mengen der zweite Parameter $\mu(P)$ definiert. Über $\mu(P)$ kann bestimmt werden, mit welcher Wahrscheinlichkeit es sich bei der gemessenen Probe P um ein Material aus der Stoffdatenbank handelt oder ob die Probe unbekannt ist.

Die Entwicklung der Parameter und dem daraus resultierenden analytischen Verfahren wurde begleitet von experimentellen Messungen zur Unterscheidbarkeit von weißlichen Pulverproben. Ein besonderes Augenmerk wurde dabei auf den Aufbau einer Datenbank gelegt, die neben den spektralen Reflexionskurven der Pulverproben auch die spektrale Bestrahlungsstärke diverser realer und Normlichtquellen sowie die spektrale Empfindlichkeit diverser Sensoren beinhaltet. Damit wurde die Möglichkeit eröffnet, neben real gemessenen Werten auch auf simulierte Werte zurückgreifen zu können, welche als Basis für eine breit angelegte multivariate Analyse für das Reengineering der Dioden betrachtet werden sollen.

Besondere Bedeutung erhält die Entwicklung solcher vollständig in Planartechnik gefertigten und durch eine intelligente Auswahl der Bänder optimierten Multispektral-Dioden im Hinblick auf die hyperspektrale Bildgebung für die Fernerkundung, auf das Umweltmonitoring und auf die berüh-

rungslose und zerstörungsfreie Analyse von Materialien. Bei den etablierten hyperspektralen Systemen führt die dem Sensor vorgeschaltete Optik zur spektralen Aufteilung des einfallenden Lichts oft zu unhandlichen und teuren Geräten. Dieser Umstand verhinderte bislang die Verbreitung solcher Meßsysteme. Mit der Implementierung eines analytischen Verfahrens zur Separation derjenigen spektralen Bänder, die eine hohe Informationsdichte aufweisen, konnte ein Verfahren realisiert werden, das ohne weiteres Expertenwissen als Output die beste Kombination an spektralen Bändern liefert. Nicht zuletzt diese Eigenschaft belegt, dass die Reduzierung der spektralen Bänder durch eine intelligente Auswahl den Weg für eine neue Generation von hyperspektralen Systemen mit vielfältigen Anwendungsfeldern ebnet.

abstract

The objective of this present dissertation is to increase the measurement precision and performance of the non-destructive characterization of materials by means of their reflective properties. The paper describes the development of an analytical procedure for separating those specific spectral bands exhibiting a high information density. The basis for such characterization is the light that is reflected or absorbed by a material and which thereby acquires an unequivocal spectral signature. Analytic separation enables similar measurement results to be obtained with a minimal amount of spectral bands as compared to the more complex hyperspectral procedures. As is invariably the case in such hyperspectral procedures, several hundred bands are recorded for each measurement, since characteristic extraction does not take place until after the measurement is taken based on information acquired through empirical and probabilistic means.

The paper documents the various stages of development in which parameters are defined and an algorithm implemented for automatic separation. It all starts with the voltage-tunable multispectral photodiodes that were developed at the institute, which have a dynamically changeable information density per pixel. The results that are obtainable with this detector type with respect to the number of spectral bands that can be achieved cannot be analyzed with current trichromatic methods used in colorimetry. The parameter ΔCL was defined based on the general requirement of the external separation. In the case of a sensor with an arbitrary number of spectral bands for a given database of materials and under a certain type of lighting, the function returns a value for ΔCL that is an independent dimension for external separation. Since, however, even an extremely high degree of separation does not provide any certainty with regard to how reliably the measurement was done, the second parameter $\mu(P)$ was defined according to the membership function from the area of fuzzy sets. $\mu(P)$ can be used to determine with what probability the measured sample P involves a material from the database of materials or whether the sample is unknown.

In tandem with the development of the parameters and the analytic procedures resulting from them were experimental measurements for the purpose of being able to distinguish between whitish powder samples. The process of setting up a database in this regard received special attention, which – along with the powder samples' spectral reflection curves – also involves the spectral irradiance of diverse real and standard light sources as well as the spectral sensitivity of diverse sensors. This allows for the possibility of resorting to simulated values in addition to actually measured values to provide a basis for widely applied, multivariate analysis in order to reengineer the diodes.

Special significance is given to the development of such multispectral diodes that have been produced entirely with planar technology and optimized by shrewdly selecting the bands in conjunction with hyperspectral imaging for remote sensing, environmental monitoring, and touch-free and non-destructive material analysis. In established hyperspectral systems, the optics, which are upstream of the sensor and whose purpose is to spectrally separate the incident light, lead to unwieldy and expensive equipment. This situation has so far prevented such measurement systems from being widely distributed. By implementing an analytic procedure for separating spectral bands that exhibit high

information density, a procedure was able to be devised that – even without expert knowledge – produces the best combination of spectral bands as output. Not least, this property proves that reducing the spectral bands by shrewdly selecting them paves the way for a new generation of hyperspectral systems with a broad range of fields of application.

1 Motivation

Die Gefährdung der Zivilbevölkerung gehört zu den Grunderfahrungen des 21. Jahrhunderts und hat zu einem grundlegenden Paradigmenwechsel hinsichtlich der gesellschaftlichen Akzeptanz des Themas Krieg im Hinterland bzw. Sicherheit im Inneren geführt [Zoc11]. Immer neue Sicherheitsmaßnahmen und Techniken sind kein Allheilmittel zur Befriedigung des tief verwurzelten anthropologischen Sicherheitsbedürfnisses und müssen stets im Kontext einer komplexen Sicherheitskette gesehen werden. Die zentrale Frage bei allen Systemen ist der Grad der Effektivität und damit verbunden die Notwendigkeit gemessen am Zugewinn für die zivile Sicherheit bzw. die Zivilverteidigung. Die Effektivität kann mit folgender Annahme abgeschätzt werden [Lem07]:

$$\text{Effektivität} \stackrel{\text{def.}}{=} \text{Gestaltungsfreiheit bei Sicherheitsmaßnahmen} * \frac{\text{Stellung der Sicherheitsorgane in der Gesellschaft}}{\text{Ressourcen (personell und materiell)}}$$

Der wichtigste Aspekt in dieser Gleichung ist die Akzeptanz von Sicherheitsmaßnahmen sowie der Stellung der Sicherheitsorgane in der Gesellschaft. Die Maxime lautet, dass Sicherheitskontrollen beispielsweise an Flughäfen nicht länger als unbedingt notwendig dauern sollten; von ethischen und gesellschaftlichen Aspekten einmal abgesehen. Viele Flughäfen werden zudem von privaten Betreiber-gesellschaften betrieben, sodass die Durchführung der Sicherheitskontrollen in der Hand privater Firmen liegt, was zu einer Limitierung der Ressourcen beim Personal und den Anschaffungskosten für die Geräte sowie deren Betriebs- und Wartungskosten führt.

Die jüngsten Entwicklungen im Bereich der multispektralen Analyse hatten und haben einen enormen Einfluss auf Systeme für eine zerstörungsfreie optische Charakterisierung von Materialien als Alternative zu den gebräuchlichen chemischen Methoden. Die Anforderung, die an ein solches System gestellt wird, ist, dass in einem möglichst einfachen Schnelltest ein Anfangsverdacht erhärtet werden kann, um eine eingehendere Untersuchung zu rechtfertigen. Die zentrale Aufgabe dieser Systeme ist die Schaffung einer Möglichkeit zur mobilen Probenentnahme sowie die schnelle Detektion und Analyse von Gefahrenstoffen vor Ort.

Vergleicht man hierzu exemplarisch drei etablierte Schnelltestverfahren (siehe Abb. 1), die nicht gerichtsverwertbar sind, sondern nur dazu dienen, einen Anfangsverdacht zu erhärten, dann zeigt sich, sofern die obige Formel berücksichtigt wird, dass die mit Teststreifen durchgeführten rein chemischen Methoden nur mäßig effektiv sind. Ein Grund dafür ist, dass jeweils ein Teil der Probe zerstört und in Lösung gebracht werden muss. Dieser Arbeitsschritt erfordert geschultes Personal. Zusätzlich wird Schutzausrüstung benötigt, da man es im Allgemeinen mit unbekanntem Proben und mit einem ebenfalls unbekanntem Gefährdungspotenzial zu tun hat. Neben dem personellen Aufwand hat die soeben beschriebene Art von Test aus finanzieller Sicht den Nachteil, dass diese nicht wieder verwendet werden können und die Tests nur eine begrenzte Haltbarkeit aufweisen. Jeder dieser Tests

reagiert immer nur sensitiv auf eine Substanz, was zur Folge hat, dass in einem Worst Case Szenario mehrere Tests durchgeführt werden müssten, um eine Probe eindeutig zu bestimmen. Für den praktischen Einsatz ist zudem die 20-minütige Auswertzeit insbesondere für unbescholtene Passagiere nicht hinnehmbar, da im Falle eines negativen Ergebnisses das Ansehen der durchführenden Behörde sowie die Akzeptanzbereitschaft, den Test überhaupt durchführen zu lassen deutlich sinkt. Die Vorteile dieses Verfahrens liegen in der hohen Mobilität und in der eindeutigen Darstellung der Messergebnisse, die eine Fehlinterpretation nahezu ausschließen. Durch den Kontrollstreifen wird zudem angezeigt, ob das Gerät einwandfrei funktioniert hat.

<p style="text-align: center;">chemisch</p>  <p style="text-align: center;">© miprolab</p>	<p style="text-align: center;">chemisch-koloristisch</p>  <p style="text-align: center;">ESA Test [Q: www.laborkliniken.de]</p>	<p style="text-align: center;">spektroskopisch</p>  <p style="text-align: center;">© analyticon</p>
<ul style="list-style-type: none"> • t = 20 min • Probe muss in reduzierter Form vorliegen (Pufferlösung) • keine Wiederverwendbarkeit • begrenzte Haltbarkeit • nur Einzelnachweise • direkter Kontakt mit der Probe 	<ul style="list-style-type: none"> • t = 2 min • Probe muss in flüssiger Form vorliegen • keine Wiederverwendbarkeit • Kombinationsnachweise möglich • Farbumschlag kann mehrdeutig sein 	<ul style="list-style-type: none"> • t = ~ Sekunden • zerstörungsfreie Analyse • große Stoffdatenbank • einfache Handhabung • eindeutige Ergebnisse • hohe Anschaffungskosten

Abbildung 1 Beispiele für drei Möglichkeiten der mobilen Charakterisierung von Gefahrenstoffen

Eine höhere Effektivität bieten die chemisch koloristischen Methoden (siehe Abb. 1, Mitte). Die Ergebnisse liegen nach weniger als 2 Minuten vor und Kombinationsnachweise sind möglich. Aus finanzieller Sicht bieten diese Art von Test Vorteile, da die Teststreifen preiswert sind und eine lange Haltbarkeit aufweisen. Es bleibt aber fest zuhalten, dass wie bei den rein chemischen Tests, ebenfalls geschultes Personal benötigt wird. Zudem kann es, wenn der Farbumschlag nicht eindeutig ist, zu nicht immer eindeutig zu interpretierbaren Testergebnissen kommen.

Die dritte prinzipielle Möglichkeit der Charakterisierung von Materialien bieten spektroskopische Messmethoden (siehe Abb. 1, rechts). Diese Art der Messung ermöglicht derzeit als einzige Methode eine zerstörungsfreie Analyse bei der die Ergebnisse nach wenigen Sekunden vorliegen, ohne dass mit der Probe hantiert werden muss. Spektroskopische Systeme basieren auf Ramaspektrometern

oder Hyperspektral-Kameras, die mit durchstimbaren Filtern arbeiten. Die Messungen nach der spektralen Methode erfolgen mit einer Auflösung von 10 nm oder darunter. Alle diese spektroskopischen Methoden haben aber gemein, dass die Herstellung teuer und die Geräte meist groß und damit für den mobilen Einsatz nur bedingt geeignet sind. Ein Grund hierfür ist die dem Sensor vorgeschaltete Optik zur spektralen Aufteilung des Lichts. Aktuelle Forschungen in diesem Bereich verfolgen die Entwicklung kompakter oder sogar miniaturisierter hyperspektraler Systeme [Off12].

Grundsätzlich muss immer berücksichtigt werden, dass diese Art der Messung nur dazu dient einen Anfangsverdacht zu erhärten, um die legitime Grundlage für zeitaufwendige und teure Untersuchungen zu schaffen, die gerichtsverwertbar sind. Denn wird bei der Personenkontrolle am Flughafen eine Substanz gemessen, die noch nicht in der Datenbank erfasst wurde, ist zunächst der Besitzer in der Pflicht, glaubhaft zu deklarieren, dass die von ihm mitgeführte Substanz keinen gefährlichen Eingriff in die Luftfahrt darstellt [Gie08]. Man kann im Allgemeinen davon ausgehen, dass eine Substanz, die sich nicht in der Datenbank befindet, potenziell gefährlich, aber auf jeden Fall illegal ist. Wirklich gravierende Informationsverluste entstehen immer dann, wenn eine falsch positive Zuordnung erfolgt, wenn zum Beispiel Drogen so gezielt verändert wurden, dass die spektrale Signatur der von Traubenzucker ähnelt oder wenn durch einen Messfehler die Probe falsch zugeordnet wurde. Da aber die Probe für jedes der spektralen Bänder sequenziell gemessen wird, ist es sehr unwahrscheinlich, dass sich ein Messfehler auch auf die anderen Bänder auswirkt. Damit ist dann zwar eine eindeutige Charakterisierung nicht mehr möglich, aber wir erhalten immerhin die Information, dass es sich um eine nicht charakterisierbare Probe handelt. Nun liegt es im Ermessen des Kontrolleurs, ob er die Messung für eine Fehlmessung hält und diese wiederholt, oder ob er weiterführende chemische oder hyperspektrale Messungen anordnet.

Auch in anderen Anwendungsszenarien spielt die fehlende Eindeutigkeit der Zuordnung keine Rolle, zum Beispiel im Bereich der Kontrollen von Warenflüssen. Weist eines der Produkte eine zu stark abweichende oder unbekannte spektrale Signatur auf, so wird es sich mit aller Wahrscheinlichkeit um eine Anomalie handeln, die auf ein Problem bzw. ein Fehler in der Fertigungskette hinweist.

Die Nachfrage nach preiswerten und kompakten Systemen hat die Entwicklung von intelligenten Photodioden, insbesondere von kontinuierlich durchstimbaren Multispektral-Dioden vorangetrieben. Die erstmals im Jahr 2000 von Rieve et al. am IMT in low cost Planartechnik hergestellten durchstimbaren Multispektral-Dioden [Rie00] kommen ohne zusätzliche Filter aus. Das herausragende Merkmal dieses spektralselektiven Sensortyps besteht in der spannungsgesteuerten spektralen Empfindlichkeit, die es ermöglicht, mit nur einem einzigen Bauelement ein Mehrfarbsignal zu generieren. Die mit diesem Detektortyp erzielbaren Ergebnisse im Bezug auf die Anzahl der realisierbaren spektralen Bänder lassen sich nicht mehr mit den gängigen trichromatischen Methoden aus der Farbmetrik analysieren. Dieser Umstand machte es erforderlich Parameter zu bestimmen, mit denen die optimale Kombination der spektralen Empfindlichkeitskurven (Bänder) analytisch bestimmt werden kann. Kern der Optimierung ist die Anpassung des Meßsystems auf eine Gruppe von Materialien. Damit verliert man zwar oberflächlich betrachtet die Allgemeingültigkeit des Meßsystems, allerdings ist ein geschultes Auge durchaus in der Lage zu entscheiden, ob die zur Messung vorliegende Probe, eher den weißlichen, gelblichen oder gräulichen Proben zugeordnet werden kann. Daraufhin können

die spektralen Bänder „geschickt“ ausgewählt werden, welche eine hohe Informationsdichte bereithalten. Ziel ist es, die für die Messung benötigte Anzahl der Spektralbänder auf einige Wenige zu reduzieren. Im Vordergrund steht die Frage nach der optimalen Kombination. In Anbetracht der Ersparnis gegenüber den vielen Hundert Bändern bei den gängigen Hyperspektralsystemen ist es sogar denkbar, die Messung mehrfach, jeweils optimiert für weißliche, gelbliche bzw. gräuliche automatisiert durchzuführen um den human factor als Unsicherheitsfaktor zu entfernen und um die Effektivität zu steigern. Auf diesem Wege sinken die Anforderungen an das Personal deutlich, was noch zusätzlich an Gewicht gewinnt, wenn man bedenkt, dass nicht immer von optimalen Umgebungsbedingungen bei der Beurteilung auszugehen ist.

1.1 Zielsetzung

Entwickelt werden soll ein analytisches Verfahren zur Separation derjenigen spektralen Bänder, die eine hohe Informationsdichte aufweisen. Auf diese Weise optimierte Sensorsysteme sollen Materialien identifizieren oder zwischen einzelnen Materialien unterscheiden können, die mit traditionellen trichromatischen Verfahren nicht eindeutig unterscheidbar sind. Der Einsatz muss auch in zeitkritischen Anwendungen gewährleistet sein, die einen hohen Durchsatz erfordern. Basis für die Charakterisierung ist das von einem Material reflektierte bzw. absorbierte Licht, das dadurch eine eindeutige spektrale Signatur erhält. Durch die analytische Separation wird es möglich sein mit einer minimalen Anzahl an spektralen Bändern vergleichbare Messergebnisse zu erzielen, wie bei den komplexeren hyperspektralen Verfahren. Bei den hyperspektralen Verfahren werden für jede Messung immer mehrere Hundert Bänder aufgenommen, da die Merkmalsextraktion erst nach der Messung auf der Basis von empirisch und probabilistisch gewonnenen Informationen erfolgt. Werden nur noch einige wenige Spektralbänder verwendet (siehe Abb. 2), lässt sich das Messverfahren deutlich vereinfachen, die Komplexität des Messverfahrens und damit die Ansprüche an die Umgebungsbedingungen sinken.

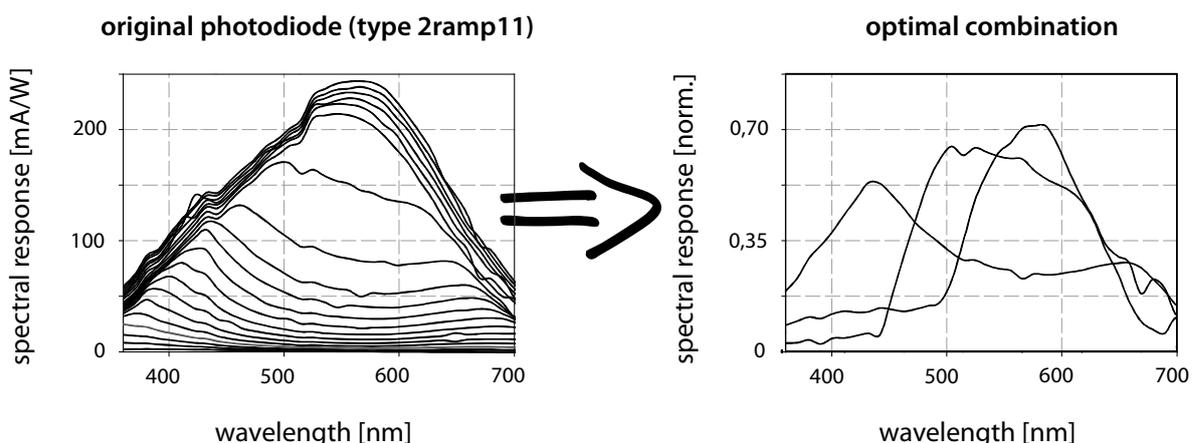


Abbildung 2 Links: gemessene spektrale Empfindlichkeit einer multispektralen Photodiode. Rechts: optimale Kombination der Spektralbänder nach der analytischen Separation

Mit diesen optimierten Sensorsystemen soll Unabhängigkeit von hoch spezialisierten Laborumgebungen geschaffen werden. Die Systeme müssen folglich kompakt, schnell, benutzerfreundlich und kosteneffizient sein. Den Ausgangspunkt für die Evaluation des zu entwickelnden analytischen Verfahrens zur Separation der Spektralbänder bilden die am Institut entwickelten spannungsgesteuert durchstimmbaren multispektralen α -Si:H Photodioden (siehe Abb. 3) mit einer dynamisch veränderbaren Informationsdichte pro Pixel. Mit der Entwicklung kontinuierlich durchstimmbarer Photodioden ist es möglich, mit nur einem vollständig monolithisch integrierten Bauelement eine theoretisch beliebige hohe Anzahl an Spektralbändern zu vermessen.

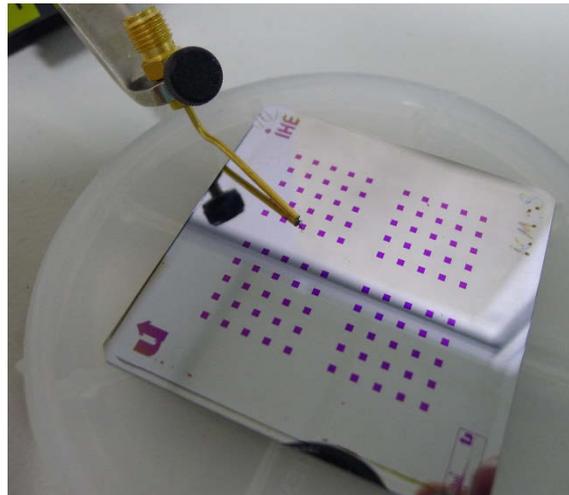


Abbildung 3 Photodiodenarray auf Glassubstrat

Die mit diesem Detektortyp erzielbaren Ergebnisse lassen sich im Bezug auf die Anzahl der realisierbaren spektralen Bänder nicht mehr mit den gängigen trichromatischen Methoden aus der Farbmeterik analysieren. Es wird ein Verfahren benötigt, mit dem diese spezielle Art von multispektralen Sensoren untereinander und mit gängigen Sensoren verglichen und bewertet werden kann. Die klassische analytische Farbmeterik bietet im Allgemeinen nur die Möglichkeit trichromatische Sensorantworten in einem Farbraum darzustellen und damit vergleichbar zu machen. Diese Limitierung beruht auf der Definition des Begriffes von Farbe, auf dem die analytische Farbmeterik beruht: Farbe ist definiert als ein Sinneseindruck, der durch Licht bestimmter Wellenlänge auf der Netzhaut des menschlichen Auges hervorgerufen wird [Ric81].

Zur Entwicklung eines analytischen Verfahrens zur Separation derjenigen spektralen Bänder, die eine hohe Informationsdichte aufweisen, sollen in verschiedenen Entwicklungsstufen neue Parameter definiert und ein Algorithmus zur automatischen Separation entwickelt und implementiert werden. Ausgehend von der allgemeinen Anforderung an die externe Separation soll für einen Sensor mit einer beliebigen Anzahl an spektralen Bändern, bei einer gegebenen Stoffdatenbank, eine Funktion definiert werden, die einen Wert zurückliefert, der dimensionsunabhängig ein Maß für die externe Separation ist. Da aber voraussichtlich eine hohe externe Separation noch keine Aussage darüber liefert, mit welcher Zuverlässigkeit die Messung erfolgt, soll ein weiterer Parameter definiert werden,

um bestimmen zu können, mit welcher Wahrscheinlichkeit es sich bei der gemessenen Probe um bereits spezifiziertes Material aus der Stoffdatenbank handelt oder ob die Probe unbekannt ist. Die optimale Kombination der Spektralbänder ergibt sich aus dem Maximum beider Parameter.

Die Entwicklung neuer Parameter und dem daraus resultierenden analytischen Verfahren soll begleitet werden von experimentellen Messungen zur Unterscheidbarkeit am Beispiel von weißlichen Pulverproben. Ein besonderes Augenmerk wird dabei auf den Aufbau einer Datenbank gelegt, die neben den spektralen Reflexionskurven der Materialien auch die spektrale Bestrahlungsstärke diverser realer und Norm-Lichtquellen sowie die spektrale Empfindlichkeit diverser Sensoren beinhaltet. Um auch einzelne Teile ohne den zeitaufwendigen Prototypenbau testen bzw. vergleichen zu können, wurde damit begonnen, einen multivariaten Datensatz aus fiktiven Messsystemen aufzubauen. Für jedes Meßsystem wurde der jeweils zu erwartende Photostrom berechnet: beruhend auf der physikalischen Definition des Photostroms und den Erfahrungswerten aus realen Messungen einzelner Komponenten aus der Datenbank. Damit wird die Möglichkeit eröffnet, neben real gemessenen Werten von kompletten Meßsystemen auch auf simulierte Werte zurückgreifen zu können, welche als Basis für eine breit angelegte multivariate Analyse für das Reengineering der Photodioden betrachtet werden können. Dies ermöglicht es außerdem, rein fiktive Sensoren noch vor der eigentlichen Fertigung zu evaluieren um die Entwicklungszyklen so effizient wie möglich zu gestalten.

1.2 Stand der Technik

Ausgehend von der Entwicklung der multispektralen Bildtechnik an der RWTH Aachen gab es seit den frühen 80er Jahren Überlegungen zur Verringerung der Anzahl der verwendeten Spektralbänder und zur Miniaturisierung der Sensorsysteme. Betrachtet man die konkurrierenden Ansätze zur Steigerung der Performance, so lassen sich diese wie folgt gruppieren: Die erste Gruppe bilden hardwarenahe Entwicklungen, also die Entwicklung von kompakten durchstimmbaren Systemen bis hin zu vollständig monolithisch integrierten Filterstrukturen zur simultanen Messung aller Spektralbänder. Die zweite Gruppe bilden analytische Ansätze zur nachträglichen Separation der Spektralbänder, dazu gehören strukturerkennende Verfahren wie die Principal Component Analysis (PCA). Die dritte Gruppe bilden dynamische Verfahren zur Vorauswahl geeigneter Spektralbänder, ein etabliertes Verfahren ist die Sequential Floating Forward Selection (SFFS). Die vierte Gruppe bilden Data Mining Algorithmen, zur empirischen Vorauswahl der Spektralbänder über Entscheidungsbäume oder Support Vektor Machines. Die Auswahl der folgenden Beispiele für jede der Gruppen erfolgte aufgrund von aktuell erzielten Forschungsergebnissen oder aufgrund ihrer historischen Bedeutung.

Gruppe 1: Multispektrale Aufnahmesysteme

Im Jahre 1974 begann die Entwicklung eines schnellen elektronischen Verfahrens für die Realisierung eines neuartigen spektralen Farbmessgerätes. Konventionelle Spektrophotometer arbeiten mit einer hohen Anzahl von sehr schmalbandigen Abtastwerten. Zielsetzung war es, eine spektrale Abtastung mit möglichst wenigen Abtastwerten, ohne wesentliche Informationsverluste zu realisieren. Dieser Ansatz brachte 1984 das erste kommerzielle Spektrophotometer, den bis heute weiterentwickelten can:scan der Firma CADDON, hervor (siehe Abb. 4).



Abbildung 4 Links Filterrad vor CCD Kamera. Rechts can:scan multispektrales Aufnahmesystem

Die Grundidee basiert auf einer theoretischen Studie, die belegt, dass für die Messung von gedruckten Farben 16 schmalbandige Abtastwerte im VIS-Spektrum in der Praxis ausreichen, um Farbe bzw. deren Remissionsspektrum hinreichend exakt zu beschreiben [Hil07]. Realisiert wird die Separation des von einer Probe im 45° Winkel reflektierten Lichts entweder sequenziell über ein schnelles Filterrad, oder parallel über Glasfaserkabel, die am Ende jeweils mit einem Filter versehen wurden. Eine komplette Messung dauert etwa 60 Sekunden bei einer Auflösung von 1,4 Millionen Bildpunkten. Vorteil dieses Verfahrens ist die Erfassung des gesamten Objektes bis zu einer Schärfentiefe von 15 cm in hoher räumlicher Auflösung, sodass auch großflächige Objekte mit multichromer und extrem unebener Oberflächen gescannt werden können.

Parallel zu photometrischen Systemen, die mit einer verringerten Anzahl von 16 festgelegten Abtastwerten arbeiten, wurde auch die Entwicklung von kontinuierlich durchstimmbaren Spektrophotometern vorangetrieben. Ziel der Weiterentwicklung ist die Steigerung der Messgenauigkeit durch immer feinere Spektralbänder, die nur noch eine Breite von wenigen nm aufweisen mit einer möglichst kontinuierlichen Verteilung über einen breiten Wellenlängenbereich aufweisen, die Erweiterung des Messbereiches in den UV und IR Bereich sowie die Verkürzung der Integrationszeit und die Miniaturisierung des gesamten Meßsystems.

Die aktuell erzielten Fortschritte liegen vor allem im Bereich der Optik zur spektralen Zerlegung des Lichts (siehe Abb. 5). Neben Sensoren mit defraktiver Optik [Sie06] und den gängigen Pushbroom Verfahren mit Bragg Gratings [Rou02] führen insbesondere Flüssigkristall (LCTF) und akusto-optisch durchstimbare Filter (AOTF) zu einer qualitativen Weiterentwicklung dieser Systeme.

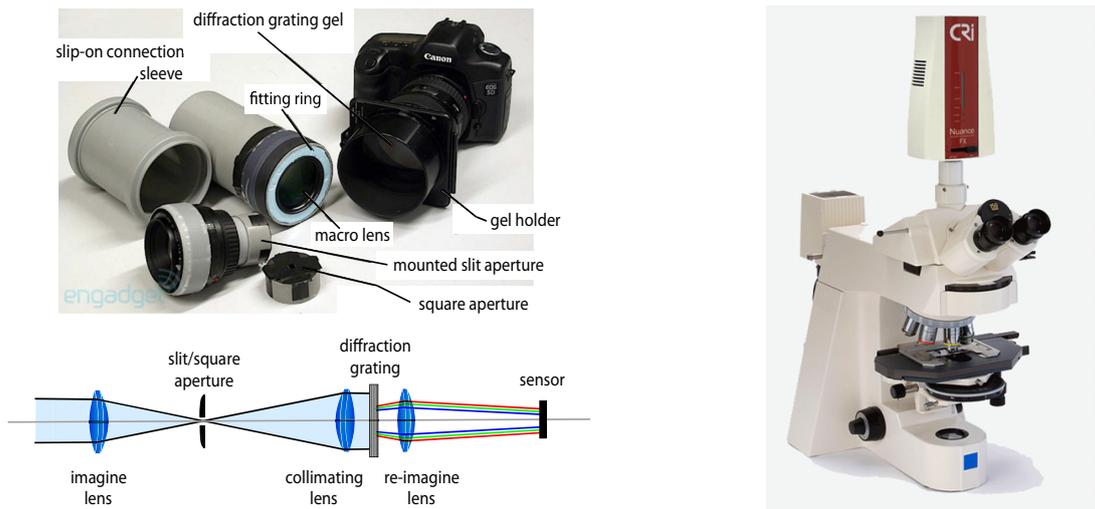


Abbildung 5 Links: Hyperspektral Objektiv mit Gelatine-Diffrationsgitter an Consumer Kamera. Rechts: CRi Nuance II Hyperspektralkamera mit LCFT [Hab12]

Beim Einsatz eines LCTF (Liquid Crystal Tunable Filter) kann das Maximum des Spektrums, das der Filter transmittiert, über eine angelegte Spannung verändert werden. Vorteil ist die Unabhängigkeit von mechanischen Bauteilen [Sch99]. Ein AOTF (Acousto Optical Tunable Filter) hingegen ist ein Kristall, der aus einem Quarz und einem Piezokristall besteht. Durch Anlegen einer Radiofrequenz wird eine Ultraschallwelle erzeugt. Diese Welle wirkt wie ein Brechungsgitter, indem sie Licht einer bestimmten Wellenlänge beugt. Zusätzlich kann die Intensität reguliert werden [Shi03]. Der Einsatz dieser Filter führt zu kompakten Meßsystemen, mit denen schnelle, präzise Messungen mit einer hohen Anzahl von sehr schmalbandigen Spektralbändern möglich sind, zulasten der räumlichen Auflösung.

Die vollständige monolithische Integration eines hyperspektralen Filters auf einen CMOS-Bildsensor so beispielsweise bei den 2012 von der IMEC vorgestellten Prototypen verspricht derzeit das höchste Potenzial [Lam12]. Bei diesem System wurde eine Filterstruktur monolithisch auf einem gängigen Bildsensor integriert. Mit diesem Filter können bis zu 100 Bänder mit einer FWHM von 3-20 nm im Wellenlängenbereich von 560-1000 nm mit bis zu 500 fps realisiert werden (siehe Abb. 6).

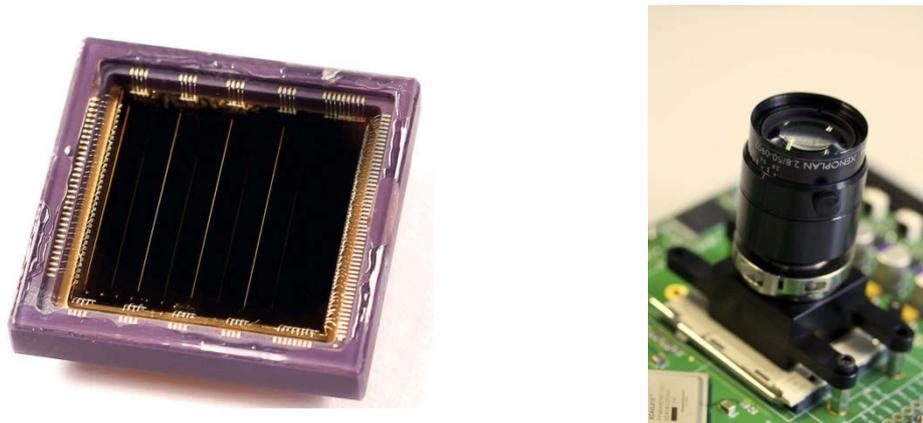


Abbildung 6 Links: Postprozessierter CMOS Bildsensor (CMV 4000) mit monolithisch integrierter Filterstruktur. Rechts: Hyperspektrales Imaging-Modul (IMEC) [Lam12]

Neben monolithisch integrierten Filterstrukturen, deren spektrale Eigenschaften nach dem Postprocessing nicht mehr verändert werden können, wurde parallel an kontinuierlich durchstimmbaren Photodioden geforscht, die ohne zusätzliche Filter auskommen. Die Entwicklung geht unter anderem zurück auf K. Dietrich et al., die 1989 in ihrer Patentschrift „Light Sensitive Superlattice Detector Arrangement with Spectral Sensitivity“ einen lichtempfindlichen Sensor beschrieben, dessen spektrale Empfindlichkeit durch Anlegen einer Spannung variiert werden konnte [Die89]. Die Basis dieser Multispektraldiode bildet ein „superlattice“ Material. Dieses Material wird alternierend aus AlAs und GaAs Schichten aufgebaut. Durch diesen Aufbau war es erstmals möglich, die spektrale Empfindlichkeit nach der Fertigung eines Bauteils über die angelegte Spannung variieren zu können (siehe Abb. 7), allerdings nur in den vom superlattice Material vorgegebenen Schritten.

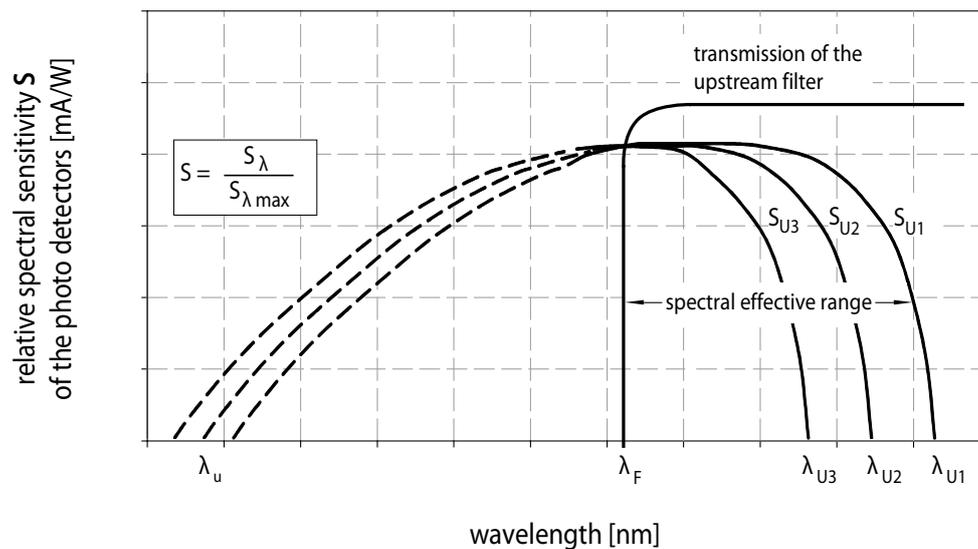


Abbildung 7 Spektrale Empfindlichkeit einer Photodiode nach K. Dietrich [Die89] bei unterschiedlichen Spannungen

Einer der ersten Schritte zur Entwicklung von Photodioden mit kontinuierlicher Durchstimmbarkeit stellen die von P. Rieve et al. entwickelten und 1996 patentierten „Variospektral-Vielfarbdioden“ dar [Böh96]. Die Basis dieser vermutlich ersten variospektral Diode bildet eine Diode aus amorphen Silizium mit ninipininin dotieren Zwischenschichten. Auch bei dieser Diode kann die spektrale Empfindlichkeit nach der Fertigung des Bauteils in feinen Schritten über die angelegte Spannung variiert werden (siehe Abb. 8).

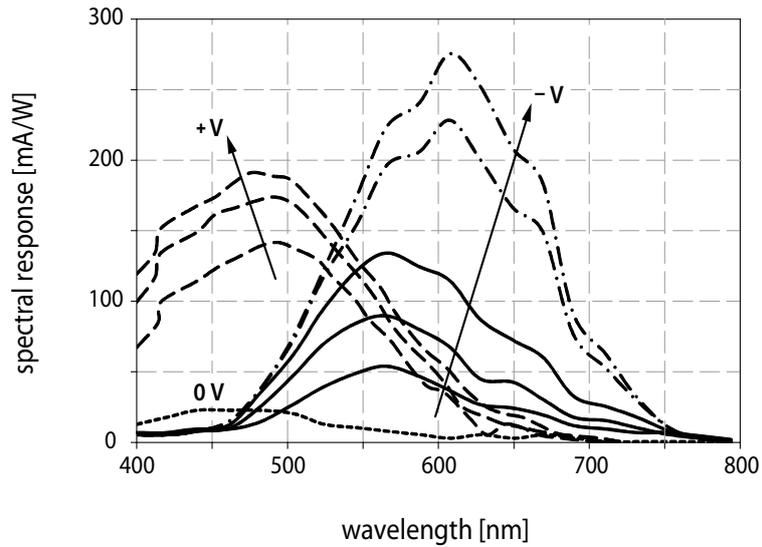


Abbildung 8 Spektrale Empfindlichkeit einer Photodiode nach P. Rieve [Rie00] bei unterschiedlichen Spannungen

Mit der Entwicklung der Variospektral Dioden konnte ein Detektor mit bis zu vier linear unabhängigen Empfindlichkeitsmaxima, die über unterschiedliche Bias-Spannungen angesteuert werden realisiert werden. Insbesondere durch die von A. Bablich erzielten Verbesserungen im Bereich der Dotierung der intrinsischen Schichten durch die Beimischung von German und Methan in einem speziellen Rampenprozess konnte 2012 ein Detektor mit einer nahezu beliebigen Anzahl von Empfindlichkeitsmaxima im VIS-Spektrum vorgestellt werden (siehe Abb. 9).

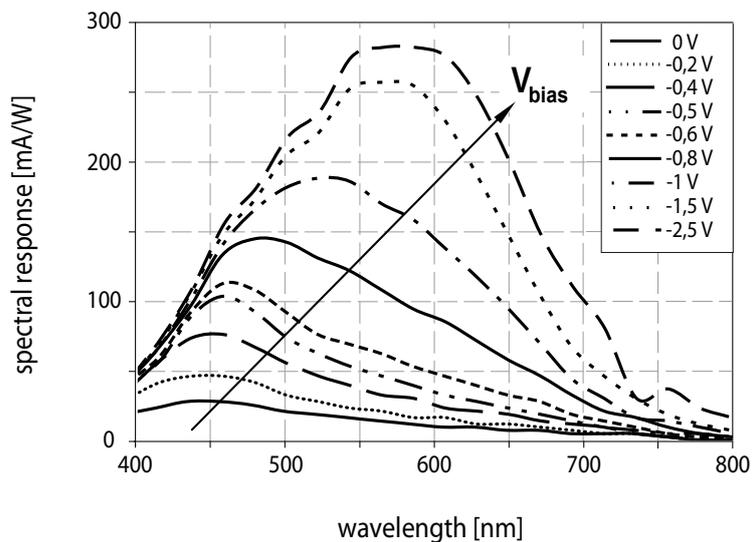


Abbildung 9 Spektrale Empfindlichkeit einer Photodiode nach A. Bablich [Bab12a] bei unterschiedlichen Spannungen

Gruppe 2: Struktur erkennende Verfahren

Messungen nach der spektralen Methode mit multi- oder hyperspektralen Bildsensoren bzw. Sensorsystemen erfolgen meist mit einer Auflösung von 10 nm oder darunter. Diese Messungen sind zeitintensiv und generieren eine große Menge an redundanten Daten. Um mit diesen oder ähnlichen Systemen in zeitkritischen Anwendungsbereichen die Auswertung und Interpretation der gemessenen Daten zu ermöglichen und um die Performance zu steigern wurden analytische Ansätze entwickelt zur nachträglichen Separation der Spektralbänder.

Zu den rekursiven Ansätzen zählt der Top Down Generalized Local Discriminant Bases Algorithmus (GLDB-TD) [Sku04]. Bei jedem Rekursionsschritt wird das komplexe n-dimensionale Spektrum in kleinere, weniger komplexe Teilräume gesplittet. Die Abbruchbedingung ist erreicht, wenn eine weitere Teilung keine Steigerung der Diskriminanz liefert. Bei der Diskriminanzanalyse werden die Teilräume auf die signifikante Unterscheidbarkeit der enthaltenen Merkmale geprüft. Der zurückgelieferte Wert ist ein Maß für die Diskriminanz.

Zu einem Vertreter im Bereich der strukturerkennenden Verfahren zählt die Principal Component Analysis (PCA). Ziel ist die möglichst effiziente und performante Auswertung der gemessenen Daten durch die Verringerung der Komplexität auf einige wenige Faktoren. Aufgabe der PCA ist die Entdeckung von Zusammenhängen zwischen den Variablen oder zwischen Objekten. Dabei wird auf alle vom hyperspektralen Meßsystem aufgenommenen Spektralbänder zugegriffen. Über eine Linearkombination wird, ohne dass wesentliche Informationen verloren gehen, eine Vielzahl von Merkmalen, die sich aus den Spektralbändern ergeben, auf einige wenige Faktoren zurückgeführt, die einem maßgeblichen Beitrag zur Varianz liefern. Die Basis für die Zurückführung auf die Faktoren bildet die multivariate Analyse.

Eine Kombination aus Data Mining und maschinellem Lernen bietet die seit 1997 an der Universität Waikato in Neuseeland entwickelte Software Weka 3 (Waikato Environment for Knowledge Analysis). Ziel ist die geeignete Auswahl von Merkmalen, die die spektrale Signatur eines Materials exakt charakterisieren. Durch heuristische Untersuchungen bzw. durch maschinelles Lernen werden Entscheidungsstrategien sog. Entscheidungsbäume generiert. Damit können die für eine eindeutige Erkennung geeigneten Merkmale ermittelt werden. Die Schätzungen erfolgen auf Basis eines möglichst gleichverteilten und umfangreichen Datensatzes.

Im Allgemeinen muss aber davon ausgegangen werden, dass chemisch ähnliche Substanzen auch spektrale Merkmale aufweisen die nicht linear unabhängig sind. Oft sind die Merkmale die eine exakte Charakterisierung ermöglichen würden nur zu einem gewissen Grad in einer Teilmenge bzw. in einer Verzweigung des Entscheidungsbaumes zu finden. Bei sehr ähnlichen Materialien kann ein spektrales Merkmal in unterschiedlichen Ausprägungen in mehreren Materialien dieser Gruppe vorkommen. Insbesondere bei ungenauen Informationen führt dies in der Praxis zu fehlerhaften Zuordnungen.

Gruppe 3: Kontinuierliche Separation

Neben den Verfahren zur nachträglichen Separation der Spektralbänder gibt es auch dynamische Verfahren zur Vorauswahl der Bänder für die jeweils nächste Messung beruhend auf den Erkenntnissen der vorangegangenen Messung. Ein etabliertes Verfahren ist das SFFS (sequential floating forward selection) [Gad12]. Verfahren dieser Art starten mit einem leeren Datensatz. Nach jedem Iterationsschritt erfolgt ein Blick zurück, um zu überprüfen, ob die Zielfunktion gewachsen ist. Ansonsten erfolgt der Abbruch. Angewendet auf die Fragestellung der Auswahl geeigneter spektraler Bänder, würde man also bei jedem Iterationsschritt ein weiteres Band hinzunehmen, solange bis der Informationsgehalt nicht mehr steigt. Ein Problem dieser Vorgehensweise ist, dass man mit hoher Wahrscheinlichkeit in einem lokalen Maximum hängen bleibt, ohne je das globale Maximum zu erreichen. Zudem stellt dieses Verfahren hohe Anforderungen an das Meßsystem, da die Option möglichst viele unterschiedliche Spektralbänder zu messen vorgehalten werden muss, auch wenn im Endeffekt nur einige wenige verwendet werden (siehe Abb. 10).

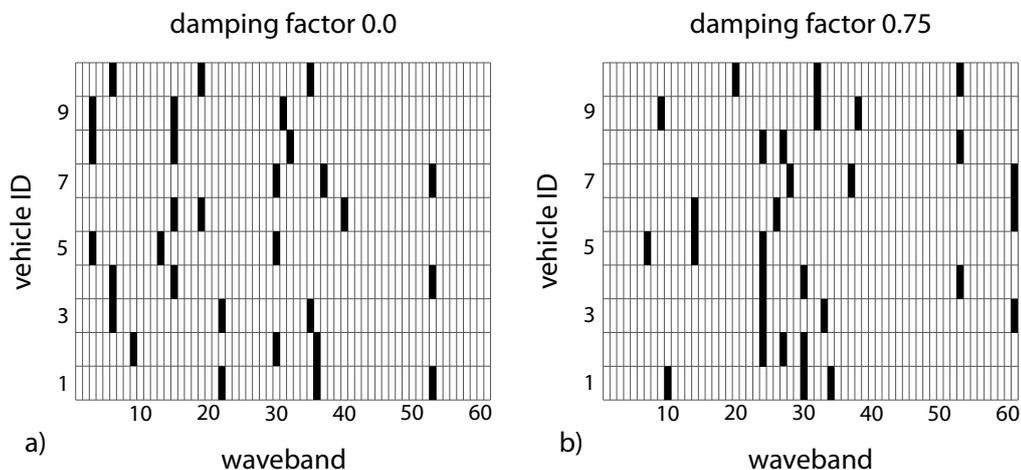


Abbildung 10 In Schwarz die ausgewählten Spektralbänder berechnet aus dem ersten Bild (a) ideal ohne Rauschen und (b) real leicht verrauscht nach S. Gadaletta [Gad12]

Gruppe 4: Separation vor der Messung

Die grundsätzliche Idee bei der Separation der Spektralbänder vor der Messung ist die Anpassung des Meßsystems auf eine vorher definierte Gruppe von Materialien. Legt man eine repräsentative Zahl an experimentellen Messungen zugrunde, lassen sich grundsätzlich alle Verfahren aus dem Bereich der strukturerkennenden Verfahren und Data Mining Algorithmen anwenden. Damit bleibt zwar die Komplexität eines Meßsystems unverändert, je nach messtechnischer Realisierung der Spektralbänder kann aber die Messung beschleunigt werden. Grundsätzlich kann die erhobene Datenmenge deutlich reduziert werden, da nur noch Daten zu einigen wenigen Spektralbändern erhoben werden müssen.

Ein von O. Schwaneberg et al. entwickeltes System zur Hauterkennung basiert auf diesem Ansatz. In einer spektrografischen Studie wurden 275 Personen und 400 Materialien vermessen. Dieser Datensatz wurde analysiert um diejenigen Spektralbänder zu ermitteln, die einen wesentlichen Beitrag zur Varianz liefern [Sch12].

Der eigene prinzipielle Ansatz besteht nun darin, die spektrale Strahlungsleistungsdichte, das Reflexionsverhalten und die spektrale Empfindlichkeit getrennt voneinander zu vermessen. Aus diesen Daten kann der zu erwartende Photostrom, den ein Meßsystem liefern würde, ohne aufwendigen Prototypenbau berechnet werden. Der implementierte Brute-Force Band Selection Algorithmus zur Bestimmung der optimalen Kombination aus Anzahl und Lage der Bänder im Spektrum unter einer Beleuchtungsart basiert neben den Parametern ΔCL , der ein Maß für die externe Separation ist, und $\mu(P)$, welcher ein Maß für die Zuverlässigkeit der Erkennung ist, maßgeblich auf dem so berechneten Photostrom. Derzeit existiert keine Norm zur analytischen Bestimmung einer qualitativ guten spektralen Zerlegung des Farbreizes. Gängige Prüfverfahren beurteilen nur, wie photorealistisch die Realität wiedergegeben werden konnte. Bei dem Erkennen und Klassifizieren von Materialien anhand ihrer koloristischen Eigenschaften geht es hingegen primär um die physikalischen Wechselwirkungen vom eingestrahnten Licht und der Probe. Ziel des Band Selection Algorithmus ist es deshalb, die Kombination von spektralen Bändern unter einer Beleuchtungsart zu berechnen, bei den die meisten Proben unterschieden werden können und die Zuverlässigkeit der Erkennung am höchsten ist.

1.3 Zusammenfassung

Die Entwicklungen im Bereich der multi- und hyperspektralen Systeme haben neue Möglichkeiten der optischen Charakterisierung von Stoffen eröffnet. Insbesondere die schnelle Detektion und Analyse von Gefahrstoffen vor Ort steigert die Konkurrenzfähigkeit dieser Systeme gegenüber gängigen Schnelltestverfahren. Die mit den neuesten durchstimmbaren Sensoren erzielbaren Ergebnisse lassen sich im Bezug auf die Anzahl der realisierbaren spektralen Bänder nicht mehr mit den gängigen trichromatischen Methoden analysieren und in der Folge auch nicht mehr analytisch optimieren. Die Implementierung eines neuartigen analytischen Verfahrens durch eine intelligente Auswahl der spektralen Bänder ebnet den Weg für eine neue Generation von hyperspektralen Systemen mit vielfältigen Anwendungsfeldern.

2 Farbsensoren

Farbsensoren zählen zu den photovoltaischen Bauelementen der Optoelektronik. Bauelemente dieser Gruppe ermöglichen die direkte technische Umwandlung von Sonnenlicht in elektrische Energie, den Photostrom. Das im Kapitel 4 vorgestellte analytische Verfahren zur Separation der Spektralbänder beruht auf den Rückschlüssen, die aus dem gemessenen Photostrom abgeleitet werden können. Das elektrische Verhalten eines Farbsensors bzw. einer lichtempfindlichen Diode wird zum größten Teil durch die Energie $E = h \cdot \nu$ der eingestrahlten Photonen beeinflusst. Zu einem kleinen Teil wird das elektrische Verhalten auch durch Wärme beeinflusst, welches in der Folge zum „Rauschen“ führt.

In diesem Kapitel soll exemplarisch die Physik von Farbsensoren auf Basis von hydrogenisiertem amorphem Silizium (a-Si:H) vorgestellt werden. Das herausragende Merkmal der am Institut gefertigten a-Si:H Photodioden ist, dass die spektrale Empfindlichkeit durch die angelegte Bias Spannung über einen weiten Bereich des VIS-Spektrums geschiftet werden kann, d.h. die Photodioden sind kontinuierlich durchstimmbare (siehe Abb. 11). Diese Art der Realisierung einer durchstimmbaren Multispektraldiode kommt ohne den Einsatz von externen Flüssigkristall Filtern (LCTF) oder akusto-optisch durchstimmbaren Filtern (AOTF) aus.

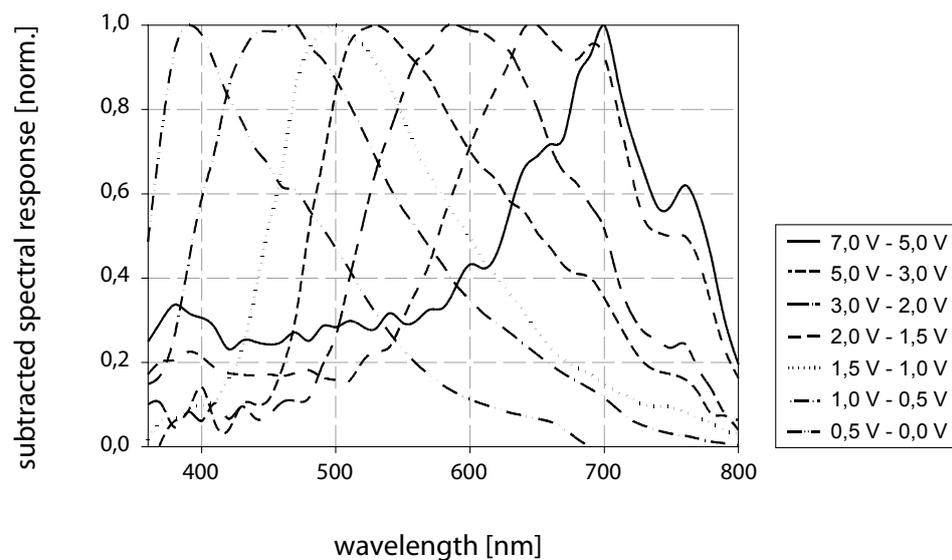


Abbildung 11 Gemessene normalisierte spektrale Empfindlichkeit einer multispektralen Photodiode nach A. Bablich [Bab12a]

Die im Rahmen dieser Arbeit vermessenen a-Si:H basierten Farbsensoren bestehen aus einer Folge von dotierten und undotierten Schichten aus amorphem Silizium (siehe Abb. 12, rechts). a-Si:H Photodioden zählen zu der Gruppe der feldgesteuerten Detektoren, bei diesen wird der Photostrom als Feldstrom aus der Absorptionsschicht extrahiert. Es liegt eine primäre bzw. direkte Photoleitung vor. Nur die innerhalb der absorbierenden Schicht generierten Ladungsträger werden an den Stromfluss weitergegeben, ohne dass von den Kontakten selbst Ladungsträger nachgeliefert werden. Damit handelt es sich um sperrende bzw. blockierende Kontakte.

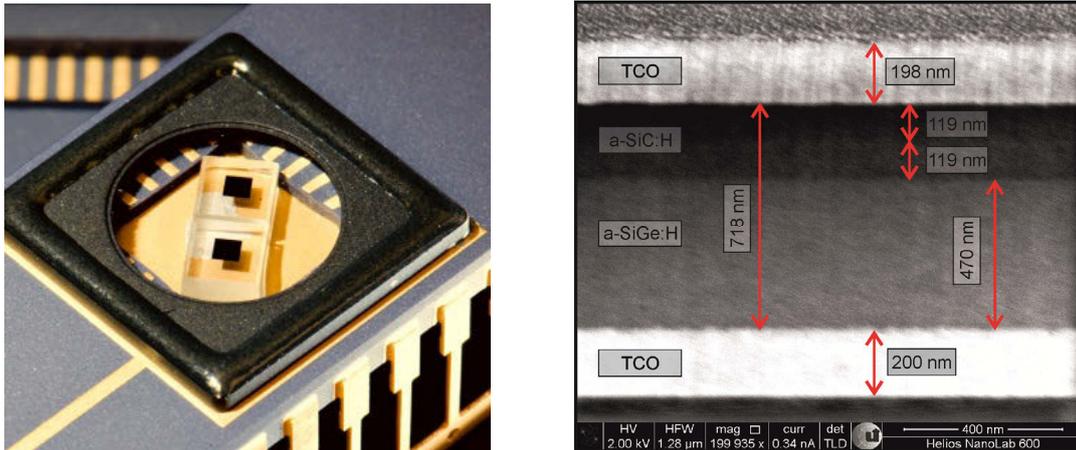


Abbildung 12 Links gehäusete Photodiode auf Glassubstrat, rechts Focus Ion Beam (FIB) Aufnahme nach A. Bablich [Bab12a]

Die einfachste Art der Realisierung einer primären Photoleitung ist der Photostrom einer in Sperrrichtung betriebenen pin-Photodiode (siehe Abb. 13, links). Die generierten Ladungsträger können den Halbleiter nur einmal durchlaufen. Vorteil dieser Detektoren ist die sehr niedrige Dunkelleitfähigkeit und die daraus folgende hohe Dynamik. Jede Diode kann entweder in Durchlass- oder in Sperrrichtung betrieben werden (siehe Abb. 13, rechts). Vorzugsweise wird eine Photodiode in Sperrrichtung betrieben. Uns interessiert nur der Strom (Generation- bzw. Photostrom), der bei einer negativ angelegten Spannung aus der Sperrschicht „herausquillt“ bzw. bei einer positiv angelegten Spannung verschwindet.

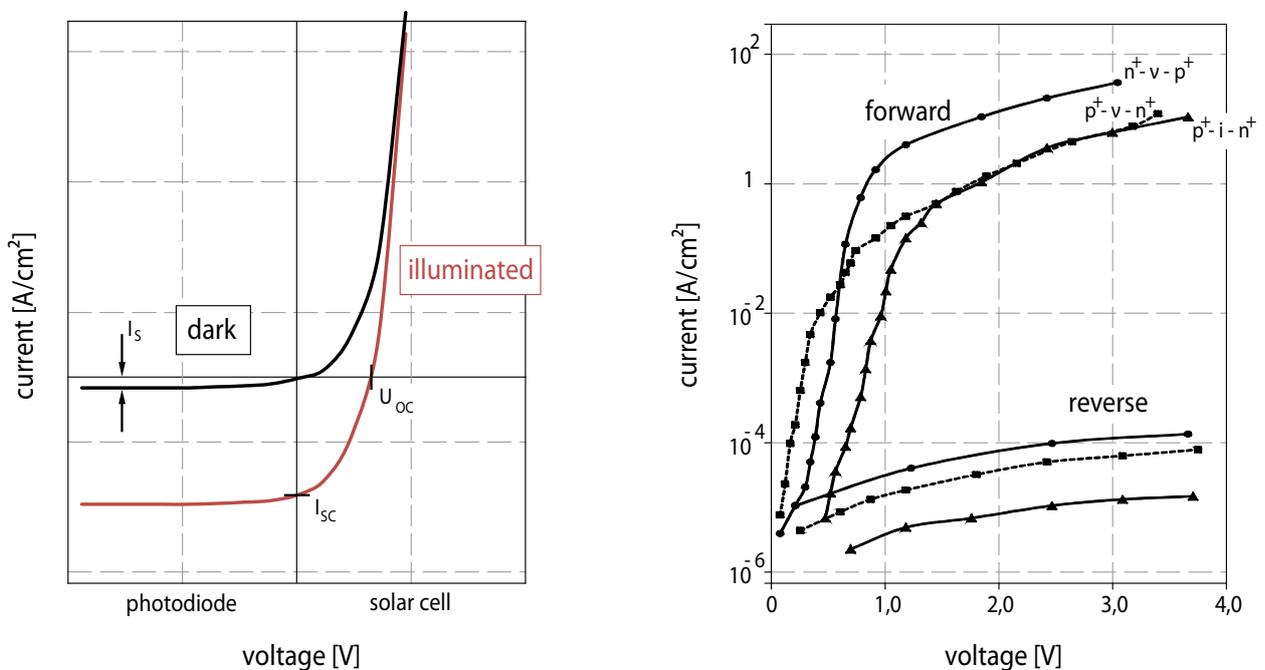


Abbildung 13 Links IU-Kennlinie mit den technisch relevanten Bereichen (Photodiode in Sperrspannung, Solarzelle bei Durchlassspannung) [Böh10], Rechts der Vergleich der für unterschiedliche Dotierungsprofile [Gib80]

2.1 Das Ausgangsmaterial

Das Ausgangsmaterial für die am Institut entwickelten und prozessierten Multispektraldioden ist amorphes, hydrogenisiertes Silizium. Die Herstellung erfolgt mithilfe eines plasmagestützten CVD-Prozesses (PECVD, Plasma Enhanced Chemical Vapour Deposition).

Die Abscheidung beim PECVD-Verfahren beruht auf der Epitaxie. Dabei erfolgt die Zersetzung eines siliziumhaltigen Gases oder Gasgemisches durch die Einwirkung des Plasmas. Das Plasma zerlegt das Ausgangsmaterial Silan in eine Reihe von Radikalen und Ionen ($\text{SiH}_4 \rightarrow \text{Si}^* + \text{H}_4\uparrow$). Es werden freie Si^* Radikale erzeugt, die chemisch stark reaktiv sind. Die so entstandenen Radikale diffundieren in Richtung des Substrates, werden absorbiert und bilden dort einen amorphen Film. Die Dotierung des Halbleitermaterials kann bei dieser Art der Prozessierung durch die Zugabe von Dotiergasen erfolgen. Für die p-Dotierung wird meist Diboran (B_2H_6), für die n-Dotierung wird meist Phosphin (PH_3) dem Silan (SiH_4) beigemischt. Durch Veränderung des Mischungsverhältnisses lässt sich der Grad der Dotierung beeinflussen (siehe Abb. 14, links).

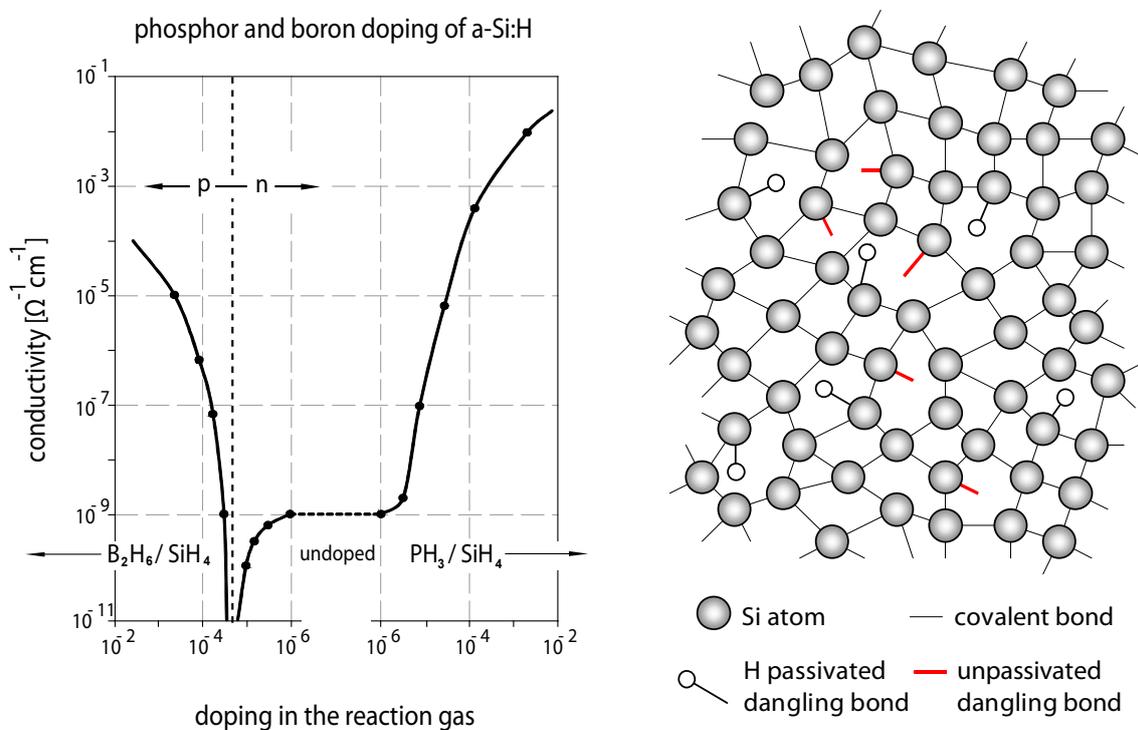


Abbildung 14 Links der Einfluss der Dotierung mit Phosphor und Bor auf die Leitfähigkeit [Spe75], Rechts schematische Darstellung der Atomstruktur von hydrogenisiertem amorphem Silizium [Mer11]

Wird Silizium nach dem PECVD-Verfahren auf einem Trägermaterial (z.B. Glas) abgeschieden, so bildet sich eine sehr unregelmäßige Struktur aus Siliziumatomen. Diese zeichnet sich dadurch aus, dass die regelmäßige Anordnung der Atome in Form einer Gitterstruktur, wie beim kristallinen Festkörper fehlt. Es existiert nur eine Nahordnung, welche der Struktur des kristallinen Siliziums folgt, eine Fernordnung über mehrere Atomabstände hinweg jedoch fehlt (siehe Abb. 14, rechts).

Die unregelmäßige Struktur des amorphen Siliziums führt zu einer Vielzahl an offenen Bindungen, den Dangling Bonds. Jede offene Bindung bildet ein Rekombinationszentrum für die generierten Elektronen-Loch Paare, die das amorphe Silizium in reiner Form als Material für Photodetektoren ungeeignet machen. Die offenen Bindungen müssen zuvor abgesättigt werden, d.h. passiviert werden. Die gängige Methode zur Absättigung der offenen Bindungen bildet die Zugabe von Wasserstoff während der Abscheidung. Durch die Hydrogenisierung des Materials vergrößert sich je nach Wasserstoffkonzentration die Bandlücke ΔW auf bis zu 1,8 eV (siehe Abb. 15).

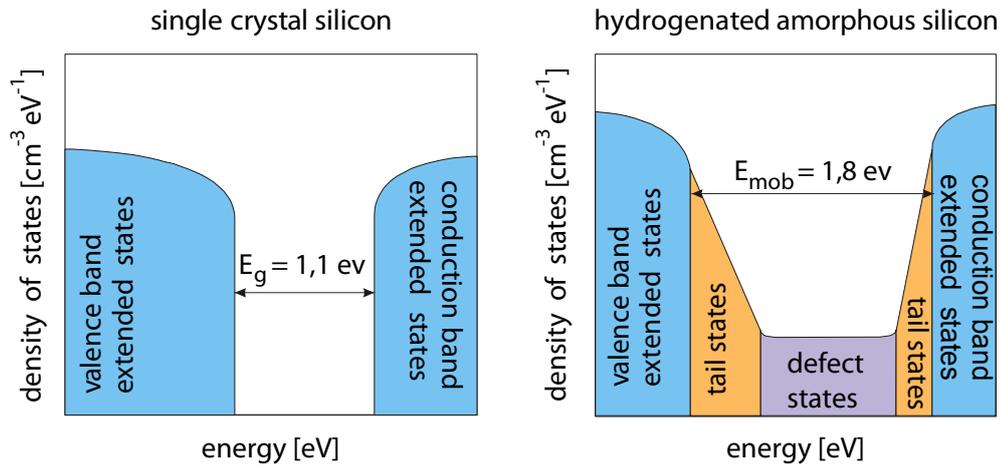


Abbildung 15 Die schematische Darstellung der Verteilung der erlaubten Energiezustände für kristallines Silizium links und für hydrogenisiertes amorphes Silizium rechts [Rie00]

Bei einem Bandabstand von mehr als 1,75 eV kann Licht mit einer Wellenlänge von mehr als 700 nm nicht mehr absorbiert werden. Damit ergibt sich ein theoretisch maximaler Wirkungsgrad von 26 % (siehe Abb. 16).

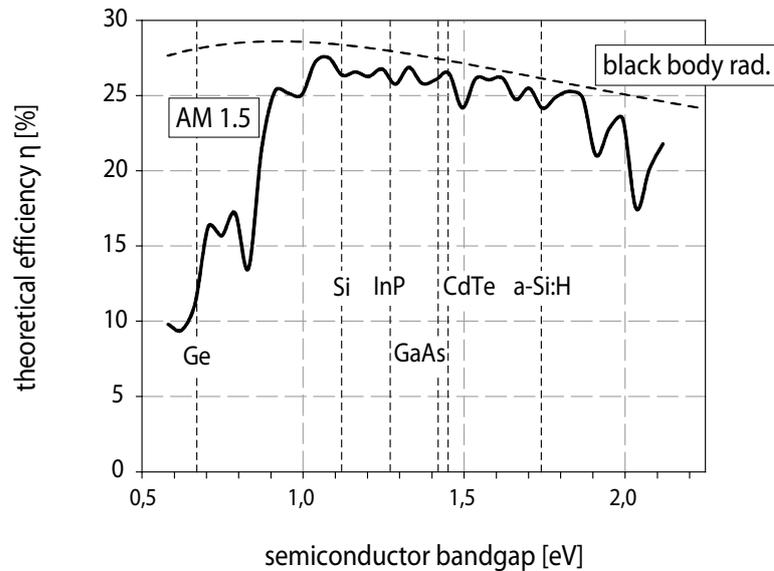


Abbildung 16 Theoretischer Wirkungsgrad in Abhängigkeit des Bandabstandes [Mer11]

Den aktuellen Rekordwirkungsgrad von 10 % für amorphe Silizium Zellen halten die von Bengali et al. 2009 vorgestellten Photodioden [Gre12]. Grund hierfür ist eine hohe Defektdichte des a-Si, welche unter Lichteinfluss nochmals erhöht wird. Ursache für die Degradation unter Lichteinfluss ist der Staebler-Wronski-Effekt [Sta77]. Der unregelmäßige Kristallaufbau des a-Si führt zu teilweise schwachen Si-Si-Kristallbindungen. Diese Kristalldefekte brechen unter Lichteinfluss auf und bilden zusätzliche Dangling-Bonds.

2.2 Absorptionskoeffizient

Farbsensoren auf der Basis von spannungsgesteuert durchstimmbaren a-Si:H Photodioden bieten die Möglichkeit, mit nur einem vollständig monolithisch integrierten Bauelement eine theoretisch unbegrenzte Anzahl an Spektralbändern zu realisieren. Die spektrale Empfindlichkeit kann über die lokale Variation der Ladungsträgersammelregion verändert werden. In welcher Tiefe bzw. in welchem Bereich des Halbleitermaterials diese Region liegt, kann über eine extern angelegte elektrische Spannung beeinflusst werden. Die spektrale Zerlegung des eingestrahlt Lichtes in die Spektralbänder erfolgt durch den Ort der Absorption. Dabei ermöglicht die wellenlängenabhängige Eindringtiefe bzw. Absorption der Photonen im Halbleitermaterial nach dem Gesetz von Lambert-Beer eine energetisch exakte Zuordnung [Bee52]. Ausschlaggebend für den Ort der Absorption ist der Absorptionskoeffizient α . Der spektrale Verlauf des Absorptionskoeffizienten α kann gezielt über die Dotierung beeinflusst werden (siehe Abb. 17). Der Absorptionskoeffizient α gibt das Absorptionsverhalten des jeweiligen Materials an.

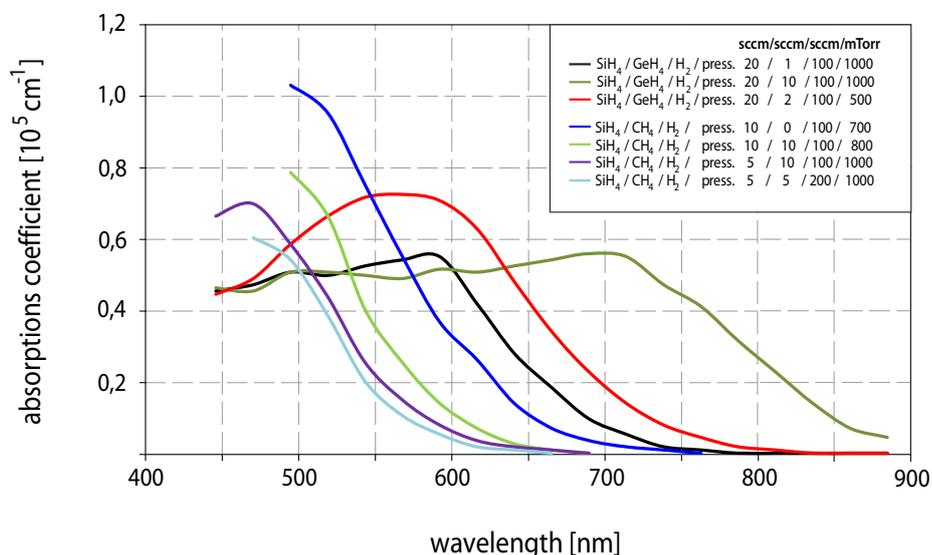


Abbildung 17 Absorptionskoeffizient als Funktion der Wellenlänge für verschiedene Materialien [Böh10]

Nach dem Lambert-Beerschen-Gesetz ist die Abnahme der Intensität $I(x)$ im Intervall $[x, x + \Delta x]$, bezogen auf die Intervalllänge Δx , proportional zur Intensität. Der Absorptionskoeffizient α ist hierbei die Proportionalitätskonstante. Durch Integration des Intensitätsverlaufes von der Oberfläche des Halbleiters bis zur Eindringtiefe x folgt: $I(x) = I_0 \cdot e^{-\alpha \cdot x}$, wobei $I_0 = h\nu \cdot N_{ph}$ [Wcm^{-2}], und der Photonenstromdichte N_{ph} [$cm^{-2}s^{-1}$]. Aus der Gleichung für die Intensität ergibt sich für die Eindringtiefe l , dass die Strahlungsintensität mit e^{-1} abnimmt, daraus folgt $l = 1/\alpha$. Kurzwellige „blaue“ Strahlung dringt nur wenige Nanometer in das a-Si Material ein. Mit steigender Wellenlänge bis hin zum „rotem“ Bereich des VIS-Spektrums können Eindringtiefen von bis zu 1 Mikrometer erreicht werden. Aus der Eindringtiefe kann deshalb auf die Wellenlänge des eingestrahlichten Lichtes geschlossen werden.

Über die Variation der Bias-Spannung kann nun der Bereich der Ladungsträger-Sammelregion im Halbleiter beeinflusst werden. Für eine Spannung U_1 befindet sich zum Beispiel die Absorptionszone nahe der Oberfläche des Halbleiters in Sättigung. Die Feldstärke über den tieferen Schichten ist dabei so niedrig, dass diese Bereiche fast keinen Beitrag zum Photostrom liefern. Mit steigender Spannung erhöht sich auch die Feldstärke, sodass Ladungsträger, die in tieferen Schichten generiert worden sind, gesammelt werden können (siehe Abb. 18). Sättigung wird immer dann erreicht, wenn die Driftlänge der Ladungsträger ausreicht, um ein Elektron bis ins n-Gebiet zu befördern und von dort zum Minuspol der Photodiode. Die Driftlänge L_d der Ladungsträger kann über die angelegte Spannung variiert werden, es gilt die Beziehung $L_d = \mu \cdot \tau \cdot \vec{E}$. Wird Sättigung erreicht, gelangen sämtliche Ladungsträger zu den Kontakten. Unterhalb dieser Schwelle, d.h. wenn die Driftlänge kleiner als die zu durchquerende Schicht ist, rekombinieren die Ladungsträger vorzeitig und liefern keinen Beitrag zum Photostrom.

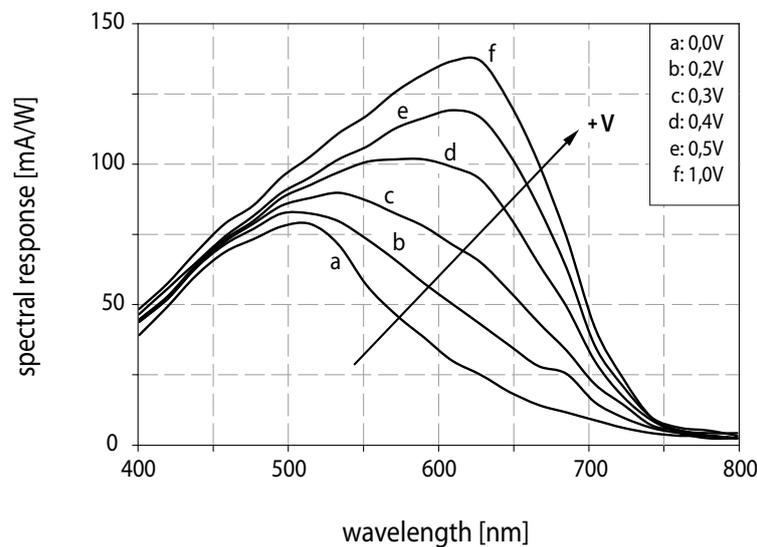


Abbildung 18 Variation der Driftlänge in a-Si:H über die angelegte Spannung (Feldstärke) [Böh10]

2.3 Modellierung von a-Si:H Farbsensoren

Durch geeignetes Bandgapengineering kann der Ort im Halbleiter, in dem Strahlung einer bestimmten Wellenlänge absorbiert wird, prozesstechnisch bestimmt werden. Die Steuerung des Bandabstandes und damit des Absorptionskoeffizienten erfolgt durch Dotierung des Siliziums mit Kohlenstoff oder Germanium. Die Carbonierung des p-Gebietes, also die Dotierung mit Kohlenstoff vergrößert zum Beispiel die Bandlücke auf 2eV. Als Folge weist die nun a-SiC:H Schicht eine hohe Transparenz für den VIS-Bereich des elektromagnetischen Spektrums auf. Für die Zerlegung des auftretenden Lichts in die Spektralbänder muss auch die Driftlänge designed werden. Über die Driftlänge wird die maximale Tiefe im Halbleiter festgelegt, aus der noch die durch Photonen generierten Ladungsträger gesammelt werden können, um zum Photostrom beitragen zu können.

Für die Modellierung/Optimierung kann eine Vielzahl von Parametern herangezogen werden. Zu den relevanten Parametern bei der Prozessierung zählen unter anderem der Kammerdruck, die Substrattemperatur, die Gaszusammensetzung, die Plasmaleistung. Damit ergibt sich eine Vielzahl von Variationsmöglichkeiten, die für eine Optimierung einzelner Schichten oder des gesamten Mehrschichtsystems herangezogen werden können (siehe Abb. 19).

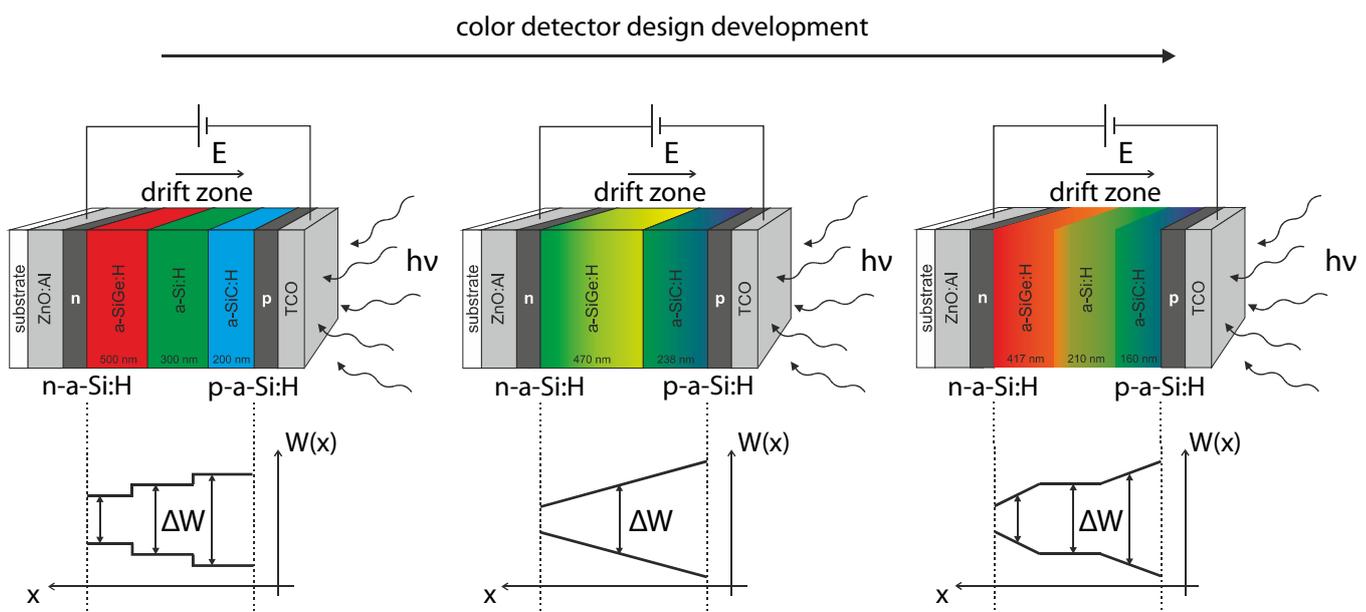


Abbildung 19 Architektur der Schichten mit unterschiedlichen Abscheidungsparametern und den daraus resultierenden Bandlückenstrukturen, die für Farbsensoren entwickelt wurden nach A. Bablich [Bab12a]

Die Optimierung derartiger Bauelemente erfordert eine sorgfältige numerische Modellierung und Simulation, verbunden mit umfangreichen Parameterstudien. Bekannte Parameterstudien aus der Literatur und Softwaretools für die numerische Simulation von 1D Halbleiterschichten und Grenzflächen wie die vom Helmholtz Zentrum Berlin entwickelte Software AFORS-HET (automat for simulation of heterostructures) können lediglich Anhaltspunkte für die Entwicklung liefern, da die Übertragbarkeit der Ergebnisse infolge von anlagenspezifischen Effekten nicht möglich ist. Aufgrund der komplexen Zusammenhänge und der hohen Zahl an Variationsmöglichkeiten ergibt sich die Notwendigkeit

von Beschränkungen bei der Variation der Parameter. So orientieren sich der Prozessdruck (500 mTorr), die Substrattemperatur (300 °C) und die Plasmaleistung (5 Watt bei 13,5 MHz) an Schicht- und Bauelementoptimierungen, die den Arbeiten von J. Schulte und M. Wagner entnommen wurden [Sch96, Wag96].

Die Prozessierung eigener Photodioden war kein Bestandteil der vorliegenden Arbeit. Für die verwendeten Erkenntnisse aus den experimentellen Untersuchungen wurde auf die geleisteten Vorarbeiten von P. Rieve und A. Bablich zurückgegriffen [Rie00, Bab12b]. Wenngleich die vorliegende Arbeit ihren Schwerpunkt auf dem analytischen Gebiet hat, so sollen im Folgenden einige grundlegende Aspekte hinsichtlich der elektrischen und optischen Charakterisierung von Photodioden vorgestellt werden. Die wichtigsten Charakterisierungsgrößen sind der Dunkel- und Photostrom sowie die daraus abgeleitete spektrale Empfindlichkeit und der Quantenwirkungsgrad.

Der von einer Photodiode gemessene Wert für die Photostromdichte j , die auf einem kapazitiven Bauteil aufintegriert werden kann, hängt von der spektralen Empfindlichkeit $S_{abs}(\lambda)$ der Photodiode, dem Reflexionsverhalten $r(\lambda)$ der beleuchteten Oberfläche und der spektralen Strahlungsleistungsdichte $E(\lambda)$ ab.

$$j = \int_{\lambda} E(\lambda) \cdot r(\lambda) \cdot S_{abs}(\lambda) d\lambda \quad \left[\frac{A}{cm^2} \right] \quad (2.1)$$

Die elektrische Charakterisierung der Bauelemente erfolgt über die Messung der IU-Kennlinie (siehe Abb. 20). Gemessen werden der Hell- und der Dunkelstrom im Bereich von -5 bis 2 V; gemäß gängiger Standards bei AM1,5, 1000 W/m² und 25 °C [Gre12].

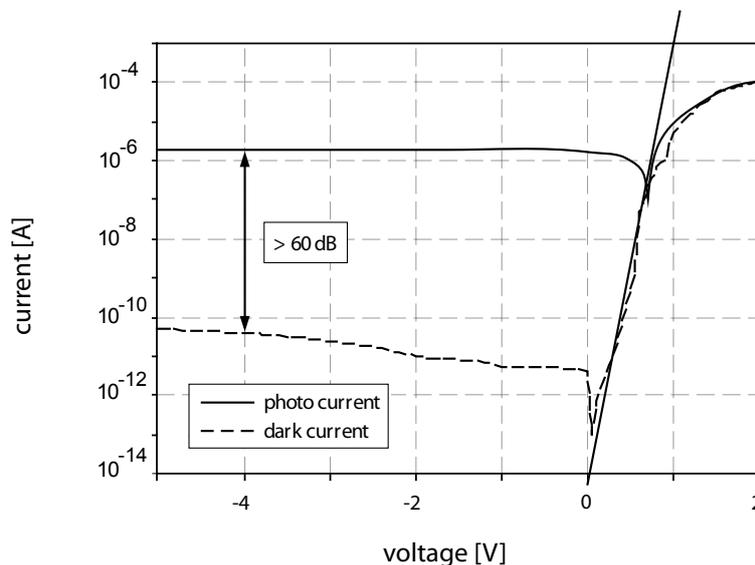


Abbildung 20 Gemessene IU Kennlinie einer Photodiode

Aus der Differenz lässt sich die Dynamik bestimmen. Typischerweise liegt diese für Photodioden aus amorphem Silizium im Bereich von 60-80 dB. Eine hohe Dynamik ist wichtig für ein gutes Signal-Rauschverhalten der Photodiode. Ein weiteres wichtiges Merkmal ist der in Abbildung 20 durch eine angelegte Gerade gekennzeichnete Bereich im Durchlassbetrieb der Photodiode. Die Steigung n ist ein Maß für die Defektdichte des Halbleitermaterials.

$$n = \frac{q \cdot U_{thermisch}}{k \cdot T} * \frac{1}{\ln \left| \frac{\Delta y}{\Delta x} \right|} \quad (2.2)$$

Die optische Charakterisierung erfolgt durch die Messung der spektralen Empfindlichkeit. Dabei wird die Photodiode über einen Wellenlängenbereich von 300-1050 nm monochromatisch beleuchtet und der Photostrom gemessen. Aus den Werten für die spektrale Empfindlichkeit kann der Quantenwirkungsgrad η_Q bestimmt werden.

$$\eta_Q = \frac{h \cdot c}{q} * \frac{1}{\lambda} * S_{abs}(\lambda) \quad (2.3)$$

2.4 Störgrößen

Der Photostrom, den eine Photodiode generiert, ist meist mehr oder weniger mit Rauschen beaufschlagt. Die Qualität des Signals setzt sich aus verschiedenen Störgrößen zusammen, dem Rauschen im Halbleiter, dem Rauschen der integrierten Schaltkreise und dem Rauschen der Lichtquelle. Jeder der Rauschanteile führt zur Schwächung des Signals. Die drei wichtigsten Rauschursachen im Halbleiter sind das Schrotrauschen, thermisches Rauschen und 1/f-Rauschen. Weitere Ursachen für das Rauschen sind Photonenrauschen, welches durch die inhomogene Emission einer Lichtquelle verursacht wird, sowie das Auslese-, das Verstärker-, das Reset- und das Quantisierungsrauschen der integrierten Schaltkreise, das Überschussrauschen des Sperr- und des Durchlassdunkelstromes sowie der dielektrische Verlustfaktor.

Das Schrotrauschen ist begründet in der unterschiedlichen Transitzeit von Elektronen und Löchern im Halbleitermaterial. Die generierten Ladungsträger überqueren die Sperrschicht regellos, darin ähneln sie den Schrotkugeln einer Schrotflinte. Diese von W. Schottky, erstmals 1918 erstmals beschriebene Störgröße wird aufgrund der Analogie zur Schrotflinte Schrotrauschen genannt [Sch18]. Nach Schottky ist das mittlere Rauschstromquadrat $\overline{i_{sh}^2}$ proportional zur Bandbreite B der Messstrecke und zum mittleren Strom $|I|$, der sich wiederum aus dem Photostrom $|I_{ph}|$, dem Hintergrundstrom $|I_b|$ und dem Dunkelstrom $|I_d|$ zusammensetzt.

$$\overline{i_{sh}^2} = 2e \cdot |I| \cdot B \quad (2.4)$$

Das thermische Rauschen ist begründet in der brownischen Molekularbewegung. Die Gitterschwingungen im Halbleitermaterial nehmen mit steigender Temperatur zu, als Folge kommt es zur Fluktuation der elektromagnetischen Energie des Systems, welche als elektrisches Rauschen gemessen wird.

Nach W. Nyquist ist das mittlere Rauschstromquadrat $\overline{i_{th}^2}$ proportional zum Widerstand R zwischen den Kontakten und der Bandbreite B der Messstrecke [Nyq28].

$$\overline{i_{th}^2} = \frac{4kT}{R} \cdot B \quad (2.5)$$

Das 1/f-Rauschen ist begründet in der Relaxationszeit τ der Ladungsträger. Als Folge der permanenten Generation und Rekombination von Ladungsträgerpaaren im Halbleiter ergibt sich eine statistisch schwankende Konzentration an Ladungsträgern. Dies führt aufgrund der Proportionalität zwischen der Leitfähigkeit und der Beweglichkeit der Ladungsträger zur Fluktuation bei der Leitfähigkeit. Die Rauschleistungsdichte ist dabei proportional zu 1/f.

Das Photonenrauschen ist bedingt durch die Anzahl an Photonen, die pro Zeitintervall von einer Lichtquelle emittiert werden. Da diese Zahl nur im zeitlichen Mittel konstant ist, kommt es zum Photonenrauschen. Besonders ausgeprägt ist dieses Verhalten bei künstlichen Lichtquellen, die nicht thermischer Natur sind (siehe Abb. 21). Insbesondere bei der schnellen Mehrfachbelichtung für unterschiedliche Bias-Spannungen mit Integrationszeiten im Mikrosekunden Bereich können große Differenzen bei der Bestrahlungsstärke die Folge sein.

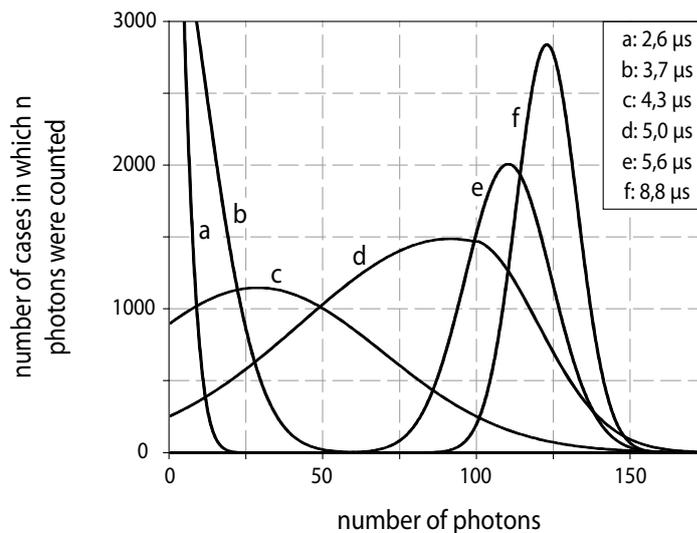


Abbildung 21 Gemessene Photonverteilung. Aufgetragen ist die Zahl Z der Fälle, in denen n Photonen registriert wurden, für verschiedene Zeiten nach dem Einschalten [Arr67]

Der Verlauf dieser Verteilung entspricht näherungsweise einer Poisson-Verteilung. Damit gilt für die mittlere quadratische Streuung der Photonenzahl [Pau99]:

$$\Delta n^2 \equiv \overline{(n - \bar{n})^2} \quad (2.6)$$

Über das von F. Blecher et al. entwickelte Rauschersatzschaltbild von Detektor und Verstärkern kann das Systemrauschen und der einzelnen Komponenten näherungsweise berechnet werden.

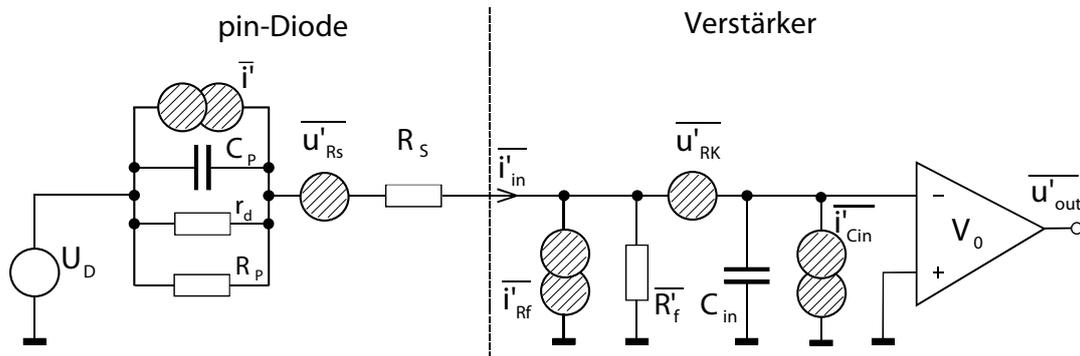


Abbildung 22 Rauschersatzschaltbild von Detektor und Verstärker nach F. Blecher [Ble02]

Rauschkomponenten bei Beleuchtung:

$$\sum_i \overline{u_i^2} = \underbrace{\frac{e(|2I_s + I_D| + |I_F|)t_{int}}{C_{int}^2}}_{\text{Schrotrauschen}} + \underbrace{\frac{t_{int}^2}{C_{int}^2} \left(\frac{c_S I_D^{2\beta_S}}{A^{2\beta_S-1}} + \frac{c_F I_F^{2\beta_F}}{A^{2\beta_F-1}} \right) \ln(10) (ND_{1/f} + 0,4)}_{1/f\text{-Rauschen}} \quad (2.7)$$

$$+ \underbrace{\frac{kT}{C_{int}} \tan(\delta_{int}) \frac{4\ln(10)}{\pi} (0,25 + ND_\delta)}_{\text{Dielektrisches Rauschen}} + \underbrace{\frac{kT}{C_{int}} \frac{2t_{int}}{R_P C_{int}} + \frac{kT}{C_{int}} \frac{C_P \tau_S}{C_i \tau_L}}_{\text{therm. Rauschen von } R_P \text{ und } R_S} + \underbrace{\frac{kT}{C_{int}} (1 + \Gamma)}_{\text{Resetrauschen}}$$

Rauschkomponenten im Dunkeln:

$$\sum_j \overline{u_j^2} = \underbrace{\frac{e|2I_s + I_D|t_{int}}{C_{int}^2}}_{\text{Schrotrauschen}} + \underbrace{\frac{t_{int}^2}{C_{int}^2} \frac{c_S I_D^{2\beta_S}}{A^{2\beta_S-1}} \ln(10) (ND_{1/f} + 0,4)}_{1/f\text{-Rauschen}} + \underbrace{\frac{kT}{C_{int}} \tan(\delta_{int}) \frac{4\ln(10)}{\pi} (0,25 + ND_\delta)}_{\text{Dielektrisches Rauschen}} \quad (2.8)$$

$$+ \underbrace{\frac{kT}{C_{int}} \frac{2t_{int}}{R_P C_{int}} + \frac{kT}{C_{int}} \frac{C_P \tau_S}{C_i \tau_L}}_{\text{therm. Rauschen von } R_P \text{ und } R_S} + \underbrace{\frac{kT}{C_{int}} (1 + \Gamma)}_{\text{Resetrauschen}}$$

Dynamikbereich und das Signalrauschverhältnis:

$$DR = 10 \cdot \log \frac{U_F^2}{\sum_j \overline{u_j^2}} \quad SNR = 10 \cdot \log \frac{U_F^2}{\sum_i \overline{u_i^2}} \quad (2.9)$$

mit $U_F = \frac{I_F t_{int}}{C_{int}}$

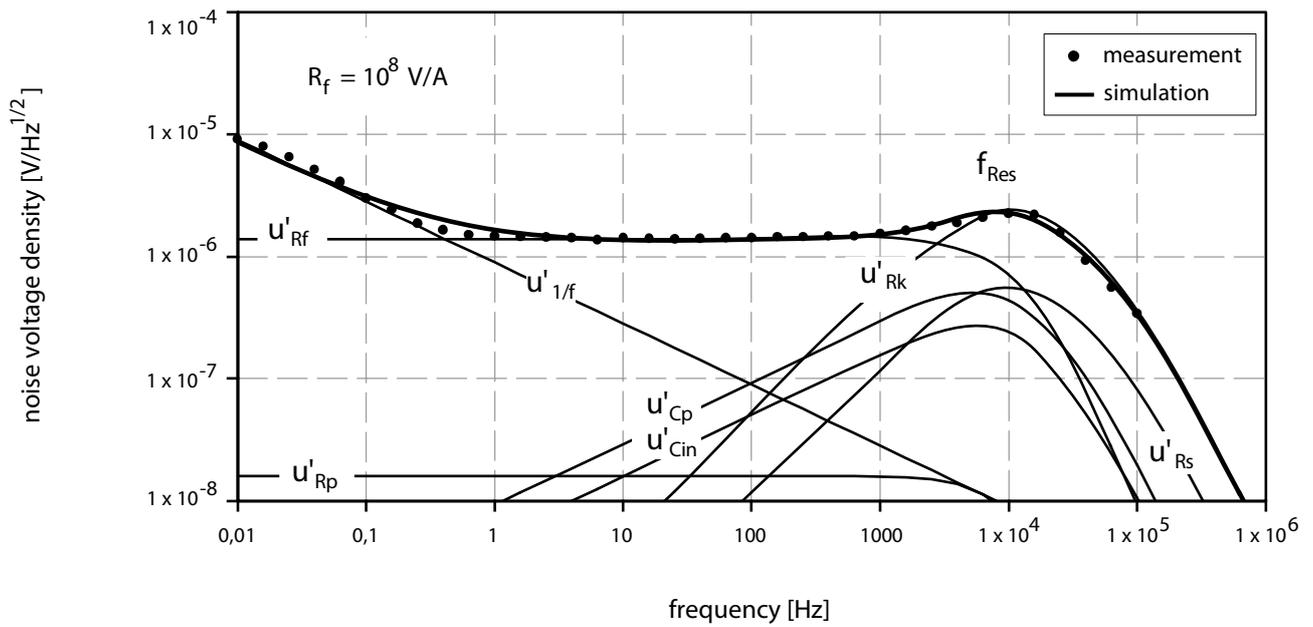


Abbildung 23 Berechnetes Systemrauschen im Gleichgewicht am Ausgang des Verstärkers und seine Komponenten im Vergleich zu gemessenen Systemrauschen nach F. Blecher [Ble02]

2.5 Zusammenfassung

Als optischer Detektor kommt eine Vielzahl von Dünnschichtbauelementen in Frage. Aufgrund der spezifischen Anforderungen, die das im ersten Kapitel beschriebene Anwendungsszenario der optischen Charakterisierung von Materialien an eine Photodiode stellt, scheinen die durchstimmbaren auf amorphem Silizium basierenden Multispektraldioden in Bezug auf die Anzahl der mit einem Bauteil realisierenden Spektralbänder und das transiente Verhalten prädestiniert zu sein. Ohne auf weitere Details eingehen zu wollen, kann daher festgehalten werden, dass spannungsgesteuert durchstimmbare Photodioden eine bevorzugte Anwendungsform für die im weiteren Verlauf dieser Arbeit untersuchten Farbsensoren sind.

3 Farbmetrik

Die kolorimetrische Reflexionsmessung an lichtundurchlässigen Substanzen bildet die Grundlage für die Charakterisierung von Materialien anhand des Reflexionsverhaltens. Bei kolorimetrischen Messungen handelt es sich nicht um absolute Messungen, sondern um relative Messungen unter Verwendung von Vergleichssubstanzen bzw. genormten Proben. Bei dieser Art der Messung geht es weniger um die photorealistische Wiedergabe der Realität, sondern um das Erkennen bzw. Klassifizieren von Materialien. Die kolorimetrischen Eigenschaften eines Materials führen zu einer subtraktiven Veränderung des eingestrahlichten Lichtes [Kub31] (siehe Abb. 24). Jedes Material weist ein eindeutiges Reflexionsverhalten auf, wonach das Muster, was mit auftreffenden Photonen geschieht, gleich bleibt. Nur Prozesse auf molekularer Ebene können Änderungen herbeiführen (z. B. oxidiertes Silber) [Lan70]. Das spektrale Verhalten eines Materials kann deshalb ähnlich einem Fingerabdruck bewertet werden.

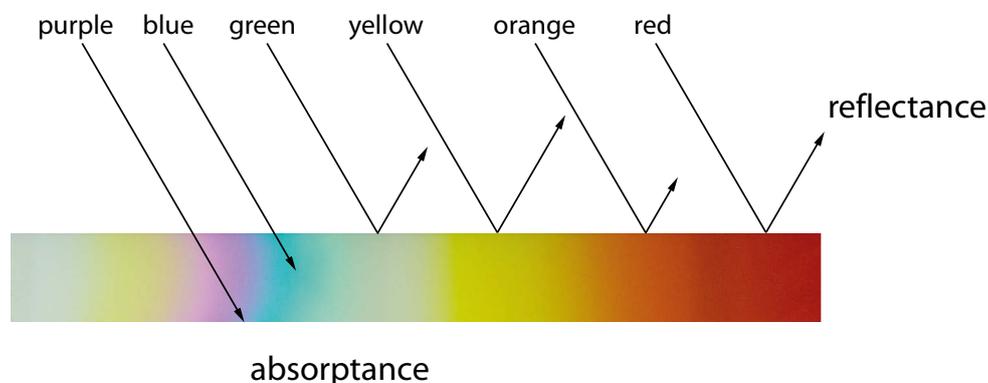


Abbildung 24 Jedes Material absorbiert ein Teil des Lichtes eine Lichtquelle, das reflektierte Licht enthält die Farbinformation [Kon98]

Die Farbmetrik bildet die wissenschaftliche Grundlage der Maßbeziehung von Farben untereinander. Durch die Gesetze der Farbmetrik ist es möglich, Farbe quantitativ zu erfassen und mathematisch beschreibbar zu machen. Damit wird eine Möglichkeit für die exakte Beschreibung von Farbe, genauer gesagt deren Erscheinung, geschaffen und es ist möglich, Farbe zu reproduzieren. Farbe ist keine physikalische Größe, sondern beruht auf der Physiologie des menschlichen Auges [Hel67]. Die Farbmessung ist demnach der Versuch, die menschliche Farbempfindung objektiv zu messen in Zahlen zu erfassen und jeder Farbe einen Ort in einem Farbraum bzw. Farbsystem zuzuordnen zu können. Ziel ist es, Farbe bzw. die koloristische Eigenschaft eines Materials durch Zahlenwerte quantitativ zu beschreiben: also die exakte Beschreibung der Ursache, die einen Farbreiz verursacht. Als Farbreiz gilt jegliche Strahlung, die durch unmittelbare Reizung der Netzhaut eine Farbempfindung hervorruft, unabhängig davon, ob es sich um Lichtquellen- oder Probenwahrnehmung handelt (DIN 5033-1). Die Farbreizfunktion $\Phi(\lambda)$ fasst zwei Größen zusammen, die Strahlungsfunktion $S(\lambda)$ und den Remissionsfaktor $\beta(\lambda)$, es gilt:

$$\Phi(\lambda) = S(\lambda) * \beta(\lambda) \quad (3.1)$$

Demnach ist der Einfluss der Lichtquelle ebenso groß wie der der Oberfläche eines Materials, d. h. für einen Vergleich zwischen der gemessenen Farbe und der Vergleichssubstanz muss die Beleuchtungsart vorher festgelegt werden.

3.1 Farbsysteme

Für die Charakterisierung von Materialien werden den für ein Material charakteristischen koloristischen Eigenschaften Farbwerte zugeordnet, die als Koordinaten in einem Farbsystem aufzufassen sind (siehe Abb. 25). Aus der Lage der gemessenen Probe in einem Farbsystem können somit Rückschlüsse auf die koloristischen Eigenschaften eines Stoffes gewonnen werden. Unter Verwendung von Vergleichssubstanzen bzw. genormter Proben erfolgt die Charakterisierung von Materialien z. B. über die Maximum-Likelihood-Methode [Hel08].

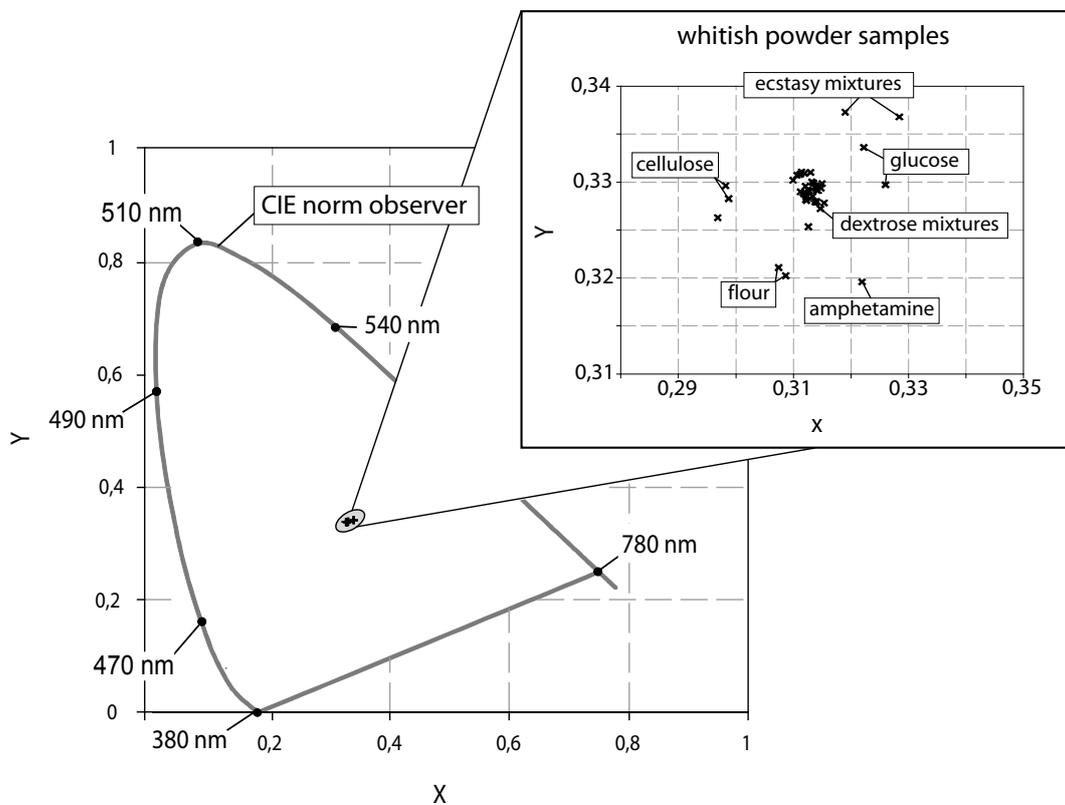


Abbildung 25 Beispiel für die Lage von gemessenen Proben an der CIE-Normfarbtafel, der ovale Kreis markiert die Position von weißlichen Pulverproben im CIE-L*a*b*-Farbsystem

Für eine exakte Charakterisierung von Materialien durch die Messung des Reflexionsverhaltens wird ein technisches, analytisches System benötigt, mit dem Farbe als messbares Phänomen beschrieben werden kann. Das System sollte die Möglichkeit bieten Farbe zu systematisieren, d. h. es sollte eine lineare, gleichabständige Ordnung nach Helligkeit, Sättigung oder dem Buntton gewährleisten. Farbsysteme bieten die Möglichkeit der Ordnung bzw. Gruppierung anhand von Ähnlichkeiten. Dabei werden Beziehungen und Unterschiede erkennbar, die z. B. auf chemisch benachbarte Materialien schließen lassen. Je nach verwendetem Farbsystem können psychologische Sachverhalte, wie die menschliche Farbempfindung oder physikalisch definierte Reize (Licht bestimmter Wellenlänge) oder Körperfarben (Pigmente) analysiert werden.

Die für technische Anwendungen bedeutendsten Farbsysteme sind das von der Internationalen Beleuchtungskommission (CIE) spezifizierte CIE-Normfarbsystem und das von A. H. Munsell entwickelte Munsell-Farbsystem. Daneben existiert eine große Fülle an unterschiedlichen Farbsystemen angefangen bei Präsystemen griechischer Wissenschaftler der Antike Pythagoras, Aristoteles und Platon. Die Intention dieser Präsysteme war die Verknüpfung von Beobachtungen in der Natur mit eindeutigen Farbnamen. Spätere, auf Farbsammlungen beruhende Farbsysteme bilden die Grundlage für die Entwicklung der heute gebräuchlichen Farbsysteme. Neben den rein technischen Systemen existieren eine Reihe von Metasystemen mit astrologischen Verbindungen, so wie Farbsysteme für religiöse bzw. liturgische Farben. In der Literatur sind aktuell mehr als 70 Farbsysteme verzeichnet [Sil98].

Farbsprachen

Die trivialste Möglichkeit, Farbe zu ordnen bildet die Berlin-Kay-Hypothese [Ber69]. Dieser Versuch der universalsprachlichen Erfassung unterscheidet zwischen fokalen und nicht fokalen Farben, beruhend auf 98 untersuchten Sprachen. Zu den fokalen Farben zählen z. B. im Deutschen 11 Grundfarben Schwarz, Weiß, Rot, Grün, Gelb, Blau, Grau, Orange, Lila, Rosa, Braun. Zu den nicht fokalen Farben zählen alle Mischfarben, ergänzt durch evolutionsbedingte Entitäten, wie Himmelblau oder Grasgrün. 1976 wurde von K. L. Kelly die universelle Farbsprache (UCL) basierend auf der ISCC-NBS Methode spezifiziert [Kel76]. Mit dieser Farbsprache ist es möglich, Farbe entweder mit Farbnamen oder mit höherer Genauigkeit in Zahlen angelehnt an das Munsell-System in 6 Stufen zu beschreiben (siehe Abb. 26).

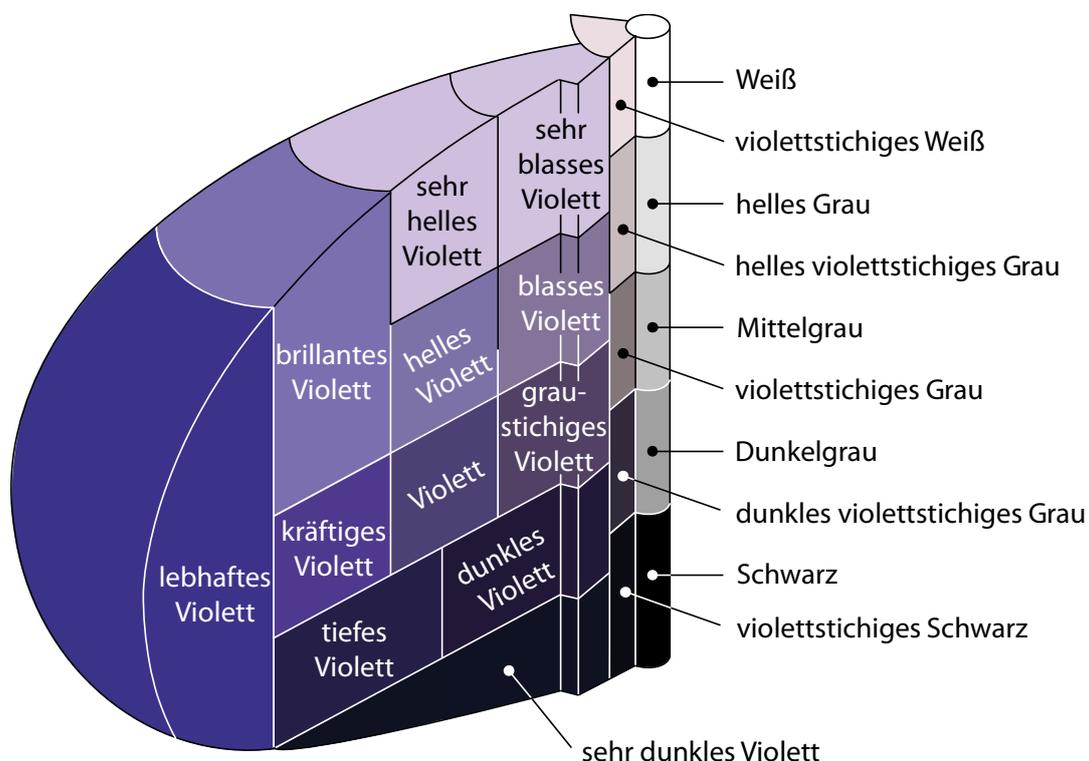


Abbildung 26 Beispiel für die dreidimensionale Darstellung der ISCC-NBS Farbnamenkarte für Violett. Sie zeigt die Blockstruktur, die eine eindeutige Bezeichnung für jeden Bereich des Farbraums ermöglicht [Bil93]

Farbsammlungen

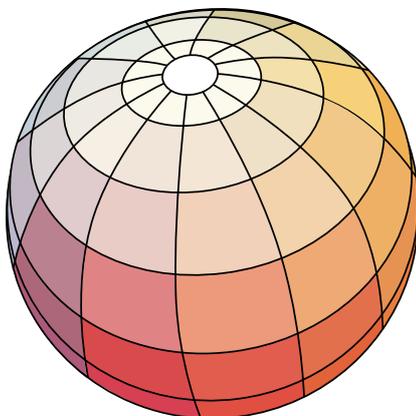
Eine physikalische Möglichkeit, Farbe zu ordnen bildet die systematische Mischung von hochgesättigten Farbmitteln zur Herstellung farbiger Proben [Mae30]. Vorteil dieser Ordnung ist, dass zwischen den Farben interpoliert werden kann, um Zwischenwerte zu erzeugen. Die systematische Mischung der Farbmittel beruht dabei auf Farbmischregeln. Gesetze zur Mischung von Farbe, wie z. B. von Kubelka und Munk, ermöglichen die Vorausberechnung von Farben [Kub31]. Ein bekanntes Beispiel für eine Farbsammlung, die in der Praxis heute noch Anwendung findet, bilden die 1927 spezifizierten RAL-Farbmusterkarten vom Reichsausschuss für Lieferbedingungen (RAL), dem heutigen Institut für Gütesicherung und Kennzeichnung, bei dem jeder Farbe eine vierstellige Nummer zugeordnet wurde. Das Aussehen der Farbproben von Farbsammlungen, die auf angemischten Farbmitteln beruhen, ist nur eingeschränkt allgemeingültig. Es hängt ab von der Oberflächenstruktur des Materials, auf die diese aufgebracht wurden. Rückschlüsse darüber, wie Farbproben, die auf mattes Papier aufgebracht wurden, auf hell glänzenden Oberflächen wirken, sind nicht möglich. Zudem weisen Farbsammlungen aufgrund von Alterungsprozessen nur eine begrenzte Haltbarkeit auf.

Einige frühe Farbsysteme, wie die 1810 vorgestellte Farbkugel von P. O. Runge [Run10] oder der von A. H. Munsell vorgestellte Farbatlas [Mun07], basieren auf realen Farbproben. Beide Systeme zählen zu den ersten räumlichen Modellen mit drei Freiheitsgraden in Kugel- bzw. Zylinderform. Die 3-dimensionale Darstellung von Farbe ergibt sich aus der Annahme, dass Farbe entsprechend den Grassmannschen Gesetzen mit nur drei Größen eindeutig bestimmt werden kann: Farbton, Helligkeit und Sättigung [Gra53]. Diese Annahme bildet bis heute die Grundlage für das gegenwärtig gebräuchliche CIE-System.

Die Farbkugel nach Runge

Philipp Otto Runge war ein Maler und Schriftsteller der Romantik, der im regen Austausch mit Johann Wolfgang von Goethe stand [Sch08]. Goethe hatte einige Jahre zuvor selbst ein zweidimensionales Farbsystem vorgestellt, den Farbkreis [Goe10]. Bei der Farbkugel nach Runge (siehe Abb. 27) sind in der Mitte um den Äquator die gesättigten Buntfarben angeordnet, wohingegen die Erdachse von hell nach dunkel verläuft. Vertikale Schnitte enthalten jeweils alle Farben einer Farbart.

Ansicht des weissen Pols



Ansicht des schwarzen Pols

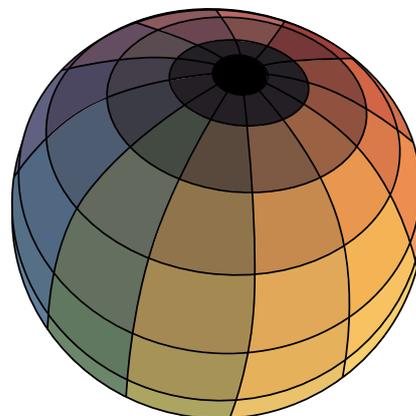


Abbildung 27 Farbkugel nach Phillip Otto Runge [Run10]

Runge platziert die reinen Farben im gleichen Abstand zu Schwarz und Weiß, damit entlang der Kugeloberfläche eine perfekte Symmetrie herrscht. Er berücksichtigt aber nicht die unterschiedliche Hellempfindlichkeit des Auges für unterschiedliche Farben; die Farbe Gelb erscheint z. B. heller als Rot. Spätere Modelle wie die 1916 von W. Ostwald vorgestellte Farbfibel ordnen die Farbe deshalb entsprechend Ihrer Empfindung an [Ost17]. Bei dem Farbsystem nach Ostwald beruht die Abstufung auf dem Weber-Fechner-Gesetz [Wys00]. Dieses psychophysische Grundgesetz stellt einen Bezug zwischen der Empfindung E und dem physikalischen Reiz R her, es gilt:

$$E(R) = k \cdot \ln \frac{R}{R_0} \quad (3.2)$$

Wobei R_0 der Schwellwert für einen Farbreiz ist. Mit diesem Gesetz ist es möglich, Empfindungen objektiv miteinander zu vergleichen.

Der Munsell Farbatlas

Albert Henry Munsell war ebenfalls Maler und Kunstlehrer, in seinem 1915 vorgestellten Farbatlas erfolgte die Organisation der Farbproben unter der Berücksichtigung der Farbempfindung (siehe Abb. 28). Ziel war die empfindungsgemäße Gleichabständigkeit. Das Munsell-System ist nicht nur eine Farbsammlung nahezu gleichabständiger Farbproben, sondern auch ein mathematisches Farbsystem, mit dessen Koordinaten sich alle vorkommenden Farben beschreiben lassen.

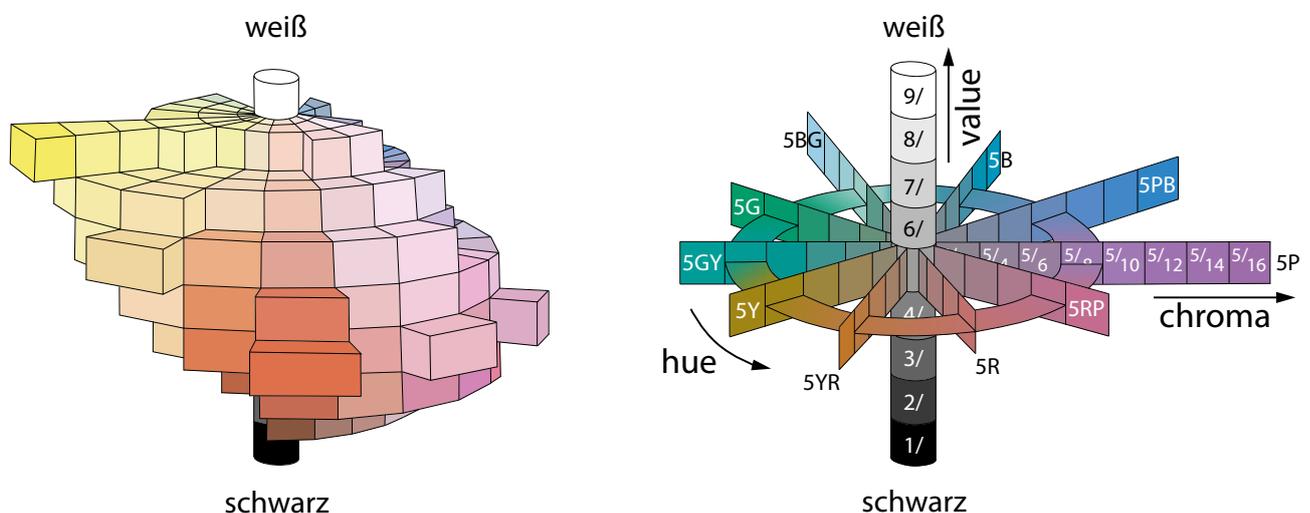


Abbildung 28 Farbsystem nach Albert Henry Munsell [Sil98]

Basis dieses Systems bildet ein 10-teiliger Farbkreis (Hue). Auf der vertikalen Achse werden die Werte für die Helligkeit (Value) aufgetragen. Die Entfernung auf der horizontalen Achse von der Mitte zum Rand ist ein Maß für die Sättigung des Buntones (Chroma). Jeder Farbe kann über die Munsell Notation (z. B. 5 R 4/10) ein Ort im Farbsystem zugeordnet werden. Damit wird die Farbsammlung unabhängig von den verfügbaren Farbmitteln, die das System begrenzen würden. Damit kann jede beliebige Farbe unabhängig davon, ob diese sich aus existierenden Farbmitteln mischen lässt oder nicht, in das System aufgenommen werden. Bei frühen Farbsystemen ohne diese Unabhängigkeit von den Farbmitteln bleiben meist einige Stellen frei, weil zum Zeitpunkt der Entstehung die Pigmente, die den gewünschten Farbeindruck erzeugen sollten, nicht verfügbar waren.

1943 wurde das ursprüngliche Munsell Book of Color vollständig im Normvalenzsystem von der Optical Society of America (O.S.A.) vermessen und in Tabellen und Diagrammen erfasst. Weiterhin wurde die Berechnung des Hellbezugswerts korrigiert [New43]. Mit diesen Tabellen wurde die Möglichkeit geschaffen, das Munsell-System mit dem heute insbesondere außerhalb Amerikas gebräuchlichen CIE Normvalenzsystem zu verknüpfen.

Das CIE-Normvalenzsystem

Das 1931 erstmals von der Commission Internationale de l'Éclairage (CIE) spezifizierte Normvalenzsystem beruht auf der Annahme, dass der Farbeindruck exakt aus dem Wissen über die Lichtquelle, dem Reflexionsgrad der Oberfläche und der spektralen Empfindlichkeit des Beobachters bzw. Farbsensors beschrieben werden kann [Wys00]. Nach dieser Annahme ergibt sich der Farbeindruck, den das Auge oder ein Sensor als Farbe interpretiert, aus der spektralen Strahlungsverteilung der Lichtquelle, multipliziert mit dem Reflexionsverhalten des Materials, multipliziert mit der Empfindlichkeit des Auges bzw. Sensors (siehe Abb. 29).

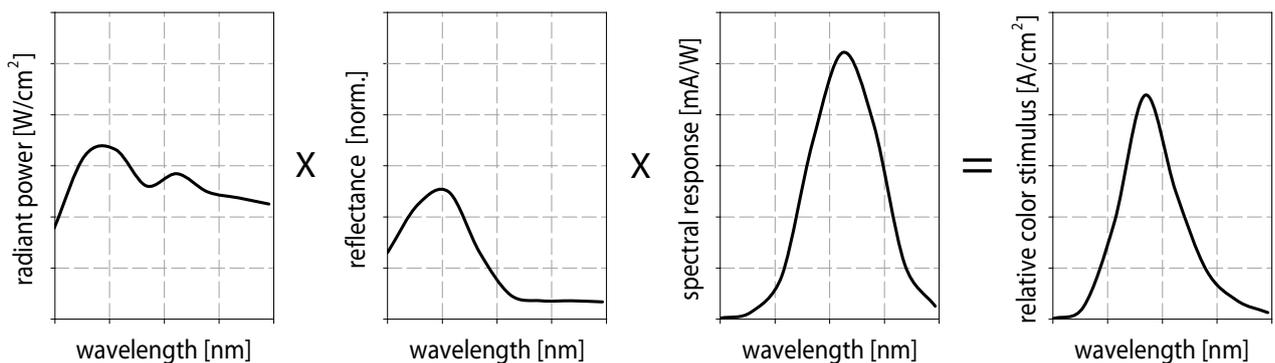


Abbildung 29 Definition des Farbeindruckes nach dem CIE-Normvalenzsystem [Bil93]

Das CIE Normvalenzsystem unterscheidet sich von den anderen Farbsystemen hinsichtlich der Normung der Lichtart und des Beobachters. Die CIE-Farbvalenzen sind ein Maß für die Farbe einer Probe bei gegebener Lichtart und Beobachter. Allgemein gilt, dass jede Lichtart eine andere Farbreizfunktion bildet. Beim Wechsel der Lichtart tritt also eine Farbverschiebung ein. Als Folge werden beim CIE-Normvalenzsystem einer Probe je nach verwendeter Beleuchtungsart verschiedene Farbvalenzen zugeordnet. Die CIE hat einige Normlichtarten definiert (siehe Abb. 30). Die 1931 ursprünglich empfohlenen Normlichtarten beruhen auf experimentellen Messungen. „A“ Glühlampenlicht mit einer Farbtemperatur von 2856 Kelvin, „B“ nachgebildetes Sonnenlicht zur Mittagszeit und „C“ nachgebildetes Tageslicht bei bedecktem Himmel. 1965 wurde „D65“ mit einer Farbtemperatur von 6500 Kelvin ergänzt.

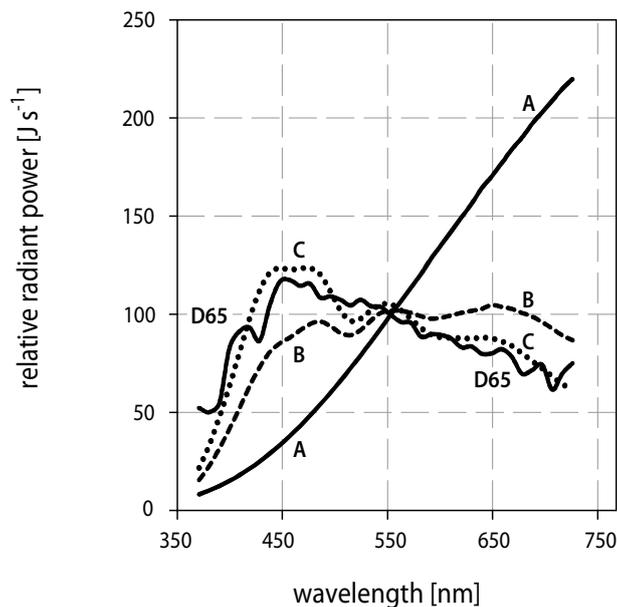


Abbildung 30 Spektrale Strahlungsverteilung für die Normlichtarten A, B, C und D65 [Wys00]

Der CIE-Normbeobachter

Neben den Normfarben hat die CIE auch einen Normbeobachter definiert, der dem mittleren Sehvermögen der farbnormsichtigen Bevölkerung entspricht. Die empirische Bestimmung erfolgte über das Nachmischen von willkürlich ausgewählten Primär- bzw. Bezugslichtquellen, die auf einen Schirm projiziert wurden, der in seiner Größe einem 2°-Gesichtsfeld entsprach. Neben die so beleuchtete Fläche wurde das Licht von drei Lampen mit den Wellenlängen 700,0 nm, 546,1 nm und 435,8 nm projiziert. Die Versuchspersonen veränderten die Intensitäten der Lampen solange, bis die Farbe beider Flächen als sinnesphysiologisch äquivalent beurteilt wurde (siehe Abb. 31).

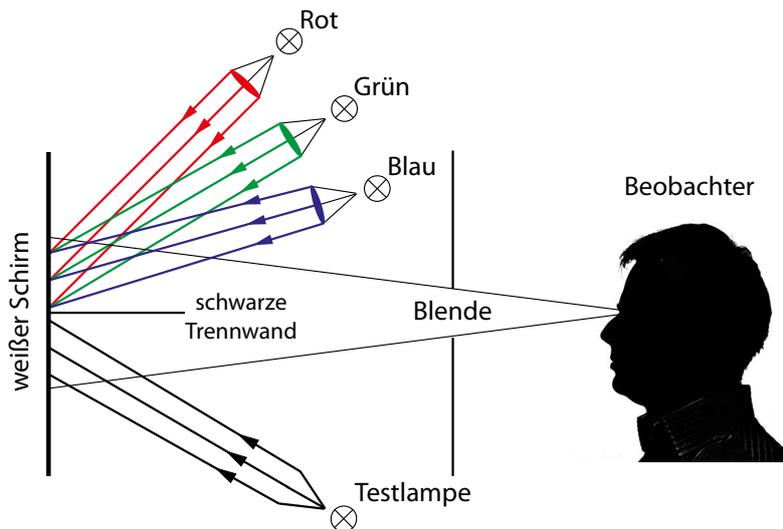


Abbildung 31 Vergleich einer zu prüfenden Farbe der Testlampe mit der additiven Mischung der drei Primärfarben [Bil93]

Jede auf diese Weise nachgemischte Farbe kann so durch drei Maßzahlen (RGB) beschrieben werden, die sich aus den Intensitätswerten der drei Lampen ergeben, welche ihrerseits physikalisch genau durch die Wellenlänge definiert sind. Bei jeder Wellenlänge im VIS-Bereich kann über die Spektralwertkurven auf die Hellempfindlichkeit des Auges geschlossen werden. Die Nachmischversuche wurden von W.D. Wrigth und J. Gould durchgeführt, die so ermittelten Maßzahlen für Rot, Grün und Blau wurden als Primärvalenzen XYZ von der CIE übernommen für den Normbeobachter. Dieser Versuch bildete somit die Grundlage für Bestimmung der Spektralwertkurven des Normalbeobachters (siehe Abb. 32).

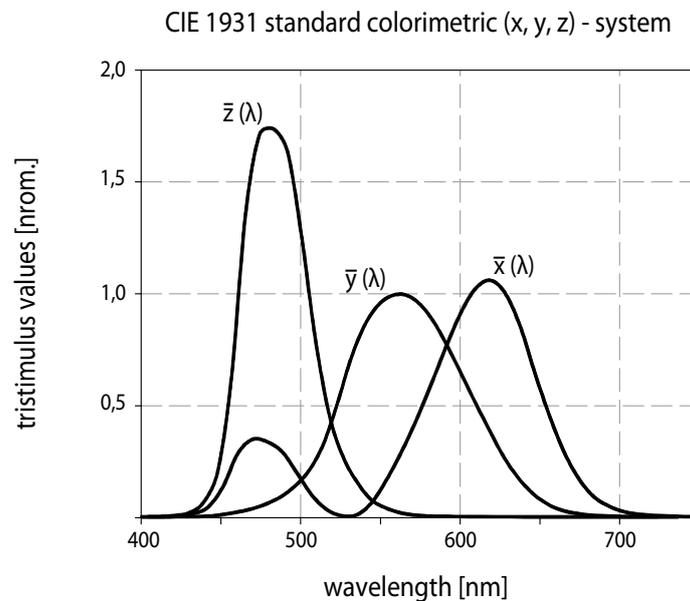


Abbildung 32 Die Normspektralwertkurven $\bar{x}(\lambda)$, $\bar{y}(\lambda)$ und $\bar{z}(\lambda)$ des farbmesstechnisch ermittelten 2° Normbeobachters [Wys00]

Die CIE-Normfarbtafel

Die CIE spezifizierte eine 2-dimensionale Farbtafel, um die Darstellung von Farbe im Farbsystem zu vereinfachen. Dazu wurde jeder Primärvalenz XYZ ein Farbgewicht xyz zugeordnet, für die Bestimmung der Farbgewichte wird jede Primärvalenz durch die Summe aller Primärvalenzen geteilt.

$$x = \frac{X}{X+Y+Z}; \quad y = \frac{Y}{X+Y+Z}; \quad z = \frac{Z}{X+Y+Z} \quad (3.3)$$

Aus der Beziehung $x + y + z = 1$ folgt, dass nur noch zwei der Farbgewichte unabhängig sind. Damit können die Werte für x und y auf eine zweidimensionale Farbtafel abgebildet werden. (siehe Abb. 33).

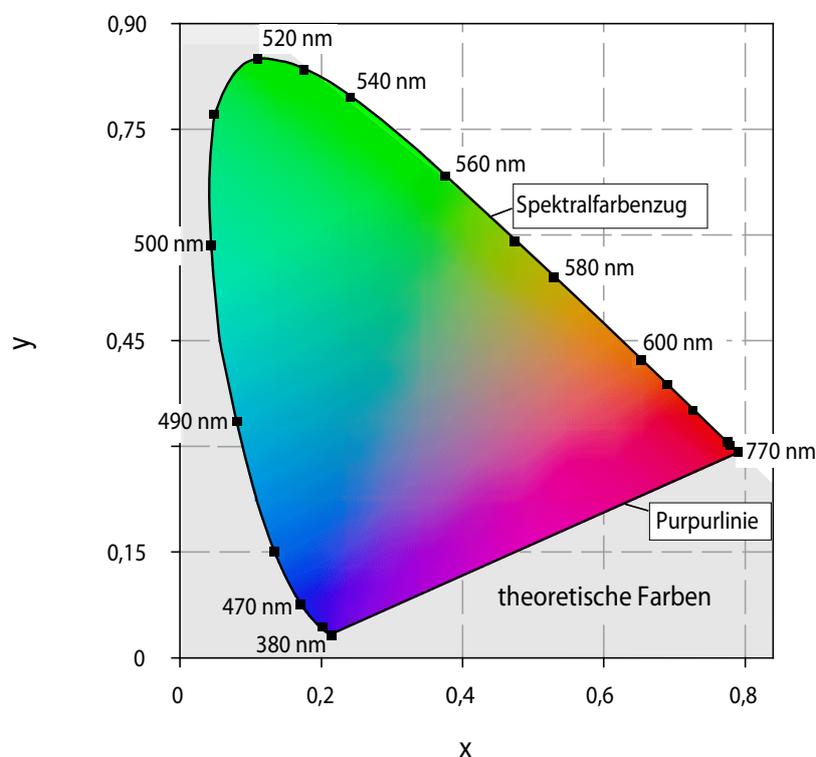


Abbildung 33 CIE Normfarbtafel nach DIN 5033

Für die grafische Darstellung der Farbtafel wählte man ein rechtwinkliges, gleichseitiges Dreieck. Auf der horizontalen Achse werden die Werte für das Farbgewicht x und auf der vertikalen Achse die für das Farbgewicht y aufgetragen. Die Farbtafel wird durch den Spektralfarbenzug begrenzt. In den Ecken des Dreiecks liegen die theoretischen bzw. nicht realisierbaren Farben. Der Spektralfarbenzug ergibt sich aus den Farbgewichten, die sich für monochromatische Farben mit einer Wellenlänge von 380 nm bis 780 nm ergeben. Geschlossen wird der Spektralfarbenzug durch die Purpurlinie, die sich ergibt, wenn spektrales Licht vom linken Endpunkt (380 nm) mit Licht von rechtem Endpunkt (780 nm) gemischt wird.

Die CIE-Normfarbtafel bildet nur eine Ebene im Farbsystem ab, die eine normalisierte Lichtempfindlichkeit repräsentiert. Die Normalisierung der Helligkeit ergibt sich aus der Festlegung der CIE. Demnach wird einer nicht fluoreszierenden, ideal-weißen Probe, die bei allen Wellenlängen 100 % des Lichtes reflektiert, der Wert $Y = 100$ zugeordnet. Der Helligkeitsgrad einer Farbe wird demnach bezogen auf reines Weiß angegeben.

Den Ort, dem eine gemessene Farbe in diesem Farbsystem zugeordnet wird, erhält man, wenn die spektrale Strahlungsverteilung E einer Normlichtquelle mit dem Reflexionsverhalten r eines Materials multipliziert mit den CIE-Normspektralwertkurven $\bar{x}(\lambda)$, $\bar{y}(\lambda)$ und $\bar{z}(\lambda)$ des Normbeobachters, wiederum multipliziert wird (siehe Abb. 34).

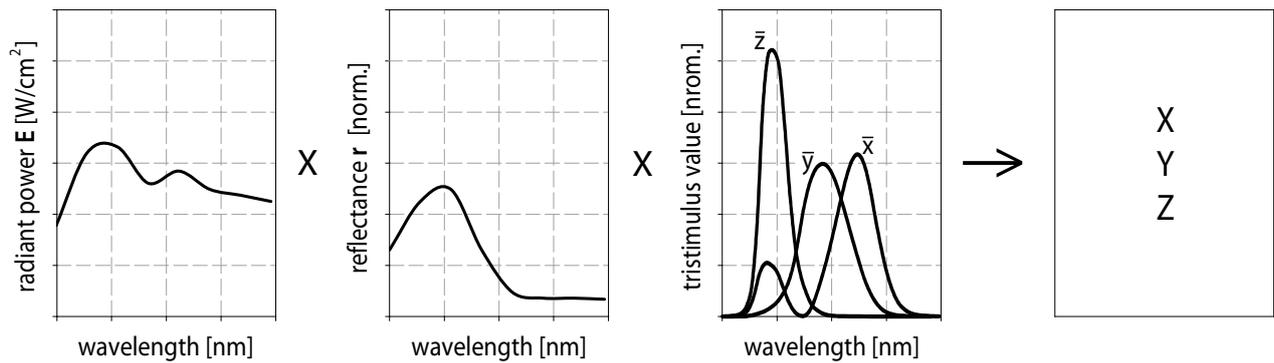


Abbildung 34 Definition der Normfarbwerte XYZ einer Farbe [Bil93]

Wobei für die Normfarbwerte X , Y und Z gilt:

$$X = kf \int_{380 \text{ nm}}^{780 \text{ nm}} E(\lambda) \cdot r(\lambda) \cdot \bar{x}(\lambda) \, d\lambda; \quad Y = kf \int_{380 \text{ nm}}^{780 \text{ nm}} E(\lambda) \cdot r(\lambda) \cdot \bar{y}(\lambda) \, d\lambda; \quad (3.4)$$

$$Z = kf \int_{380 \text{ nm}}^{780 \text{ nm}} E(\lambda) \cdot r(\lambda) \cdot \bar{z}(\lambda) \, d\lambda$$

Mit dem Normalisierungsfaktor kf für die Helligkeit $kf = \frac{100}{\int E(\lambda)\bar{y}(\lambda)d\lambda}$ (3.5)

Das CIE-Farbsystem ermöglicht es, auf mathematische Weise festzustellen, ob zwei Proben die gleiche Farbe haben. Sie stimmen dann exakt überein, wenn die Normfarbwerte XYZ gleich sind. Ein insbesondere für koloristische Messungen wichtiger Aspekt, bei dem unter Verwendung von Vergleichssubstanzen bzw. genormten Proben die Charakterisierung von Materialien anhand des Reflexionsverhaltens erfolgt.

Der Farbkörper nach Rösch

Spätere Weiterentwicklungen des CIE-Farbsystems führten durch nicht lineare Transformationen zu einer Verbesserung der visuellen Gleichabständigkeit des Farbraums. Eine der wichtigsten Verbesserungen ergibt sich aus dem Farbkörper nach S. Rösch, beruhend auf Vorüberlegungen von E. Schrödinger [Rös28, Sch20]. Der Mineraloge Siegfried Rösch hatte experimentell die Helligkeit von Optimalfarben für eine gegebene Farbart ermittelt. Zu den Optimalfarben zählen alle Farben, bei denen eine Wellenlänge zu 100 % oder gar nicht vertreten ist [Ric81]. Die für jede Farbart ermittelten Werte wurden als dritte Dimension in die CIE-Farbtabelle eingefügt. Der Farbkörper nach Rösch erhebt sich über dem Ort, den die Normlichtart D65 in der Farbtabelle einnimmt (siehe Abb. 35). Zur Spitze hin enthält der Farbkörper immer heller werdende Farben, wobei Rösch aus Beobachtungen heraus berücksichtigt, dass die selektive Beeinflussung des Lichts durch ein Material von der Leuchtdichte abhängt.

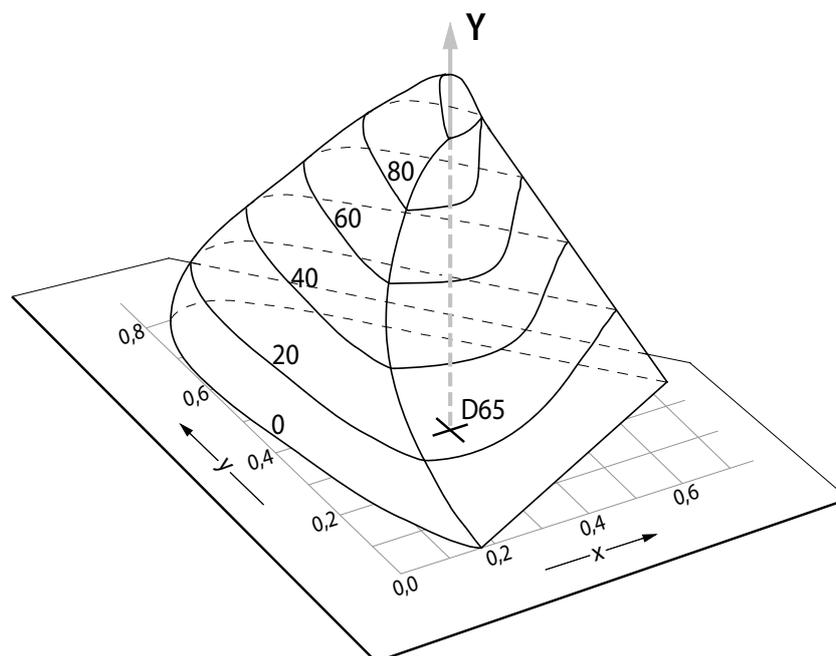


Abbildung 35 Farbkörper nach S. Rösch [Wys00]

Die bezüglich der Verjüngung des Farbkörpers in Abhängigkeit, von der Leuchtdichte getroffene Annahmen bzw. Beobachtungen wurden, später vom Psychophysiker MacAdam das Ende der Wahrnehmungsschwelle messtechnisch bestimmt [Mac44].

Das CIE-L*a*b* Farbsystem

Die aktuell für viele Anwendungen wichtigste Version des CIE-Farbsystems ist die des 1976 definierten L*a*b*- bzw. des L*u*v*-Farbraums. Basis des L*a*b*-Farbraums bildet die Gruppierung von sechs Grundfarben in drei physiologische Gegenfarbpaare (Blau-Gelb, Rot-Grün, Schwarz-Weiß). Der Mediziner Edwald Hering entwickelte die Theorie der Gegenfarben aufgrund seiner Untersuchungen von Opponenten-Zellen in der Netzhaut des menschlichen Auges [Her05]. Er beobachtete, dass bei

bestimmten Gegenfarbpaaren eine kleine Veränderung in der Wellenlänge ausreicht, um eine große Veränderung in der Aktivität der Opponenten-Zellen zu verursachen. Bei dem auf Gegenfarbpaaren basierenden $L^*a^*b^*$ -Modell bildet das Gegenfarbpaar Grün (-a) und Rot (+a) eine Achse und das Gegenfarbpaar Blau (-b) und Gelb (+b) definiert eine zweite orthogonale Achse. Dieses horizontal angeordnete Kreuz aus Gegenfarbpaaren steht senkrecht zur Hell-Dunkel-Achse, die von Schwarz (L=0) bis Weiß (L=100) reicht (siehe Abb. 36).

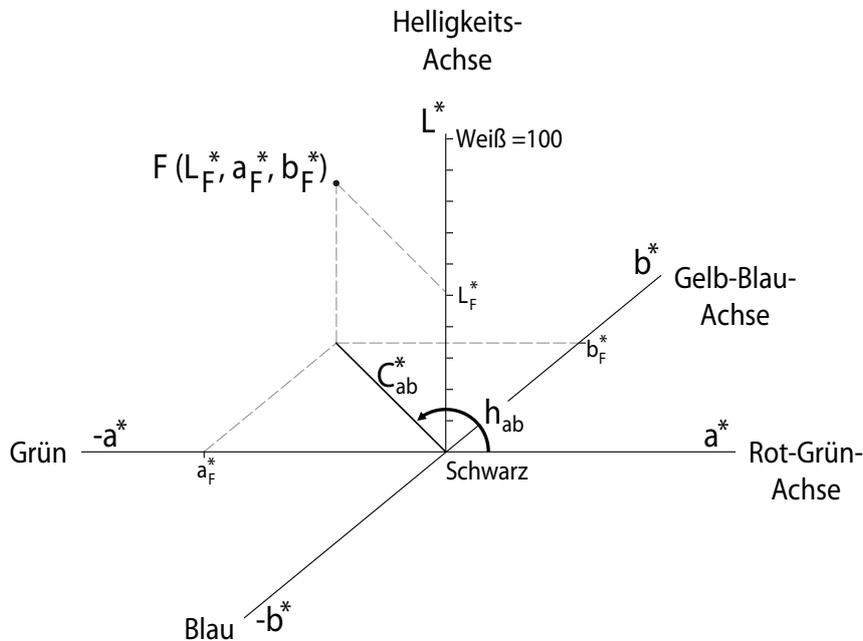


Abbildung 36 Koordinatenachsen im CIE $L^*a^*b^*$ Farbraum zur Bestimmung eines Farbortes F im Farbsystem, wobei C^*_{ab} die Bunttheit und h_{ab} den Bunttonwinkel in der Ebene angeben [Kle04]

Den Ort, dem eine gemessene Farbe in diesem Farbsystem zugeordnet wird, erhält man aus den gemessenen Normfarbwerten XYZ , es gilt:

$$L^* = 116 \cdot f\left(\frac{Y}{Y_n}\right) - 16; \quad a^* = 500 \left\{ f\left(\frac{X}{X_n}\right) - f\left(\frac{Y}{Y_n}\right) \right\}; \quad b^* = 200 \left\{ f\left(\frac{Y}{Y_n}\right) - f\left(\frac{Z}{Z_n}\right) \right\} \quad (3.6)$$

$$\text{mit } f(q) = \begin{cases} \sqrt[3]{q} & ; q > 0,008856 \\ 7,787 * q + \frac{16}{116} & ; q \leq 0,008856 \end{cases}$$

X_n, Y_n und Z_n hängen von der verwendeten Lichtart und dem Beobachter ab. Für die Normlichtart D65 gelten für den CIE 2°-Normbeobachter z. B. die Werte $X_n = 95,047, Y_n = 100,00$ und $Z_n = 108,883$.

Die dritte Wurzel für die Funktion $f(q)$ ist eine Annäherung an die durch das Weber-Fechner-Gesetz beschriebene logarithmische Änderung des physiologischen Farbreizes [Kle04]. Der Übergang zu einer linearen Funktion an der Stelle $q = 0,008856$ ergibt sich aus Überlegungen von H. Pauli zur Stetigkeit von $f(q)$ [Pau76].

3.2 Farbmessung

Nach der deutschen Norm zur Farbmessung (DIN 5033-1) ist Farbe ein durch das Auge vermittelter Sinneseindruck, wobei das Wort „Farbe“ entweder für den Sinneseindruck oder für ein Farbmittel steht. Farbe ist das Ergebnis der physikalischen Veränderung des Lichtes durch Farbmittel, welches vom Auge als Farbempfindung durch die unmittelbare Reizung der Netzhaut empfunden und vom Gehirn interpretiert wird (siehe Abb. 37).

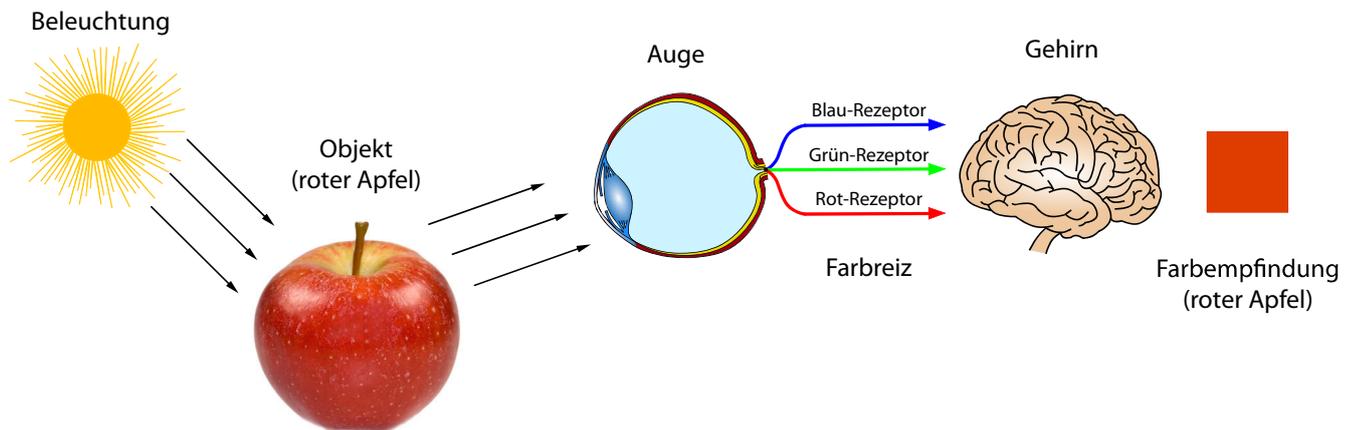


Abbildung 37 Die visuelle Farbempfindung [Kon98]

Grundsätzlich wird zwischen der Lichtquellenwahrnehmung und der Probenwahrnehmung, also der Wechselwirkung von Licht und Materie, unterschieden. Dabei wird auch bei der Probenwahrnehmung von nicht selbstleuchtenden Materialien die Anwesenheit von Licht vorausgesetzt, welches auf die Oberfläche fällt, um deren Farbe wahrnehmen zu können. Bekanntermaßen ist bei der Abwesenheit von Licht keine Farbe zu sehen. Die Farbe einer Probe hängt neben der Größe maßgeblich von der Streuung an der Oberfläche bzw. der Absorption des Materials ab. Ist keine Absorption vorhanden, aber für jede Wellenlänge die Streuung konstant, erscheint ein Material als Weiß, sonst wird dies als bunt empfunden.

Das grundlegende Problem ist, dass je größer die Streukraft eines Materials und damit verbunden der Anteil des zurückgesendeten Lichtes ist, sich die Eindringtiefe des Lichtes in das zu charakterisierende Material um so kleiner gestaltet. Dem entsprechend geringer ist dann der Einfluss von Licht absorbierenden bzw. koloristischen Eigenschaften einer Probe. Die Streukraft einer Probe hängt neben den koloristischen Eigenschaften eines Materials auch von der Teilchengröße ab. Nach Untersuchungen von L. Gall steigt die Streuung mit zunehmender Teilchengröße an, das Maximum wird erreicht, wenn die Teilchengröße der Wellenlänge des Anregungslichtes entspricht, danach nimmt die Streuung wieder ab [Gal71]. Diese Abhängigkeit wird aber an dem Punkt unerheblich, wenn die Voraussetzung gilt, dass eine Probe genügend dispers ist. Als dispers, also fein verteilt gilt bereits derjenige Stoff, dessen Partikelgröße $< 100 \mu\text{m}$ ist, Beispiele hierfür sind Mehl oder Puder. Ein anderes Problem stellen zu stark absorbierende Materialien dar. Von solchen Materialien ist zu sprechen, wenn der Reflexionsgrad einer Probe ein bestimmtes Maß unterschreitet, da in diesem Fall die nutzbare Lichtausbeute zu gering wird. Des Weiteren ist die Intensitätsverteilung des an einer Oberfläche

reflektierten Lichtes stark winkelabhängig, typischerweise ist die Rückstreuung diffus. Deshalb muss bei der Messung eine Blendung des Beobachters/Sensors durch eine Spiegelung an der Oberfläche der zu untersuchenden Probe grundsätzlich vermieden werden.

Axiome zur Farbmessung

Drei Faktoren beeinflussen die Messergebnisse maßgeblich. Erstens die spektrale Energieverteilung des Lichts der Anregungslichtquelle, zweitens die physikalischen Wechselwirkungen des Lichtes mit dem Material, d. h. die resultierende spektrale Absorption, Streukraft, Remission und Transmission und drittens die Farbwahrnehmungsfähigkeit des Beobachters bzw. des Sensors.

Die geeignete Auswahl der Spektralbänder eines Sensors ist damit entscheidend für die Qualität der Messergebnisse. Die Art der Lichtquelle wird meist durch das Anwendungsgebiet vorgeben. Weitere Faktoren, die die Messergebnisse beeinflussen, sind der Glanzgrad und die Oberflächenstruktur sowie die Farbe direkt benachbarter Objekte [Eva48]. Zu den Einschränkungen spektroskopischer Detektion zählt neben zu geringen Stoffmengen bzw. zu stark durchmischten Stoffen auch die Frage, welche Umwelteinflüsse das Material für eine eindeutige Charakterisierung unbrauchbar machen könnten?

Es sollten daher folgende Axiome zur Messung berücksichtigt werden:

1. Es liegt eine ausreichende Menge der zu untersuchenden Substanz vor.
2. Die Messoptik erfasst ausschließlich die Probe.
3. Die Messunterlage bzw. der Untergrund ist spektral total absorbierend oder die Probe weist eine ausreichende Materialstärke auf, die ein Durchscheinen des Untergrundes unmöglich macht.
4. Aus Punkt 3 ergibt sich demnach, dass das reflektierte Licht ausschließlich von der zu untersuchenden Probe stammen muss, unter der Voraussetzung, dass die Anregungslichtquelle vollständig vom Detektionspfad entkoppelt wurde.

Bzgl. Axiom Nr.1 stellt sich die Frage wie groß, die Menge der gemessenen Partikel des zu untersuchenden Materials sein muss, um eine Probe eindeutig charakterisieren zu können, bzw. um überhaupt ein auswertbares Messergebnis zu bekommen.

Es gelten Messergebnisse als auswertbar, bei denen das S/N-Verhältnis > 1 ist. Die Mindestmenge eines Materials ist zudem abhängig vom spektralen Transmissionsverhalten. Bei einem zu hohen Transmissionsgrad kann die Reflexion des eingestrahnten Lichtes vom Messgrund zur Überlagerung der Reflexion des zu untersuchenden Materials führen. Es muss vermieden werden, dass die Probe vom Messgrund aufgrund der Überlagerung in der Reflexion nicht mehr eindeutig unterschieden werden kann, weil das Signal zu stark überlagert wird.

Durch den Einsatz eines realen Testenvironments anstelle des fiktiven Messsystems soll in diesem Zusammenhang untersucht werden, ob es zu falsch positiven bzw. falsch negativen Resultaten kommen kann. Der gemessene Photostrom ist ein Summsignal, das sich aus beliebigen linearen Kombinationen zusammensetzen kann. Also wurde damit begonnen, fiktive Kombinationen zu berechnen, bei denen $E(\lambda)$ und $S(\lambda)$ konstant sind und $r(\lambda)$ variiert wird. Ausgangspunkt ist eine real existierende Probe, um \vec{P} einmalig messen zu können. Zu klären ist, ob die so bestimmten metameren Reflexionsverläufe in der Natur überhaupt vorkommen können, oder ob diese sich nicht schon rein optisch z.B. durch eine andere Farbe von den weißlichen Pulverproben des Testdatensatzes unterscheiden?

Ein Meßsystem zur Farbmessung muss zudem in der Lage sein zu bestimmen, aus welchen Lichtstrahlen sich das reflektierte Summsignal zusammensetzt. Dabei spielt es keine Rolle, mit welchen spektralen Bestandteilen die gemessene Farbe beschrieben wird, es kann sogar mehrere lineare Kombinationen geben, solange der zugewiesene Farbort im Farbsystem metamer zum Original ist. Denn es geht weniger darum, dass die Messung der Natur immer ähnlicher wird im Sinne einer exakten Farbproduktion, d. h. die exakte Nachbildung der visuellen Farbempfindung. Das Ziel ist es, Farbe möglichst exakt beurteilen zu können.

Durch welche gezielten Manipulationen lässt sich das Meßsystem beispielsweise bei der Detektion von Drogen manipulieren? Zu den Umwelteinflüssen, die die eindeutige Erkennung einschränken gehören Verfärbungen durch Sonnenlicht oder manipulativ durch starke UV-Lampen. Weiterhin gehört die Oxidation des Materials bei Kontakt mit Sauerstoff zu den erkenntniseinschränkenden Faktoren. Natürlich ergeben sich darüber hinaus auch eine noch größere Anzahl von Möglichkeiten der Manipulation. Eine Möglichkeit bietet der Austausch der obersten Schicht gegen ein harmloses Material, sodass zum Beispiel nur im Kern der Probe die Drogen sind. Man könnte das Material künstlich einfärben oder stark reflektierende Partikel beimischen, die die Reflexion des eigentlichen Materials überstrahlen. Bezogen auf das erwähnte Beispiel des Drogenschmuggels ist es grundsätzlich aber vollkommen unwichtig, ob die Drogen bewusst oder durch den langen Transportweg verändert worden sind, denn am Ende wird eine Substanz gemessen, die keiner anderen in der im Meßsystem hinterlegten Datenbank entspricht. Trivial ist, dass ab einem gewissen Grad der Durchmischung chemisch gesehen eine andere Substanz vorliegt, die sich auch chemisch als solche nachweisen lässt. Trivial ist auch, dass es ab einem gewissen Grad der Durchmischung einfach zu unrentabel ist, Drogen auf diese Weise zu schmuggeln, da die Menge des geschmuggelten Materials zu gering ist und zudem antiproportional die Kosten für die anschließende Extraktion steigen. Damit verbunden ist natürlich das Risiko einer ungewollten Kontamination, die die Qualität des geschmuggelten Materials negativ beeinflusst. Damit kann die Wahrscheinlichkeit, dass sehr stark durchmischte Proben in der Praxis auftauchen und damit detektiert werden müssen als äußerst gering eingeschätzt werden. Für den unwahrscheinlichen Fall, dass doch so eine Substanz bei Kontrollen auftaucht, bleibt immer noch die Möglichkeit, dass das Meßsystem die Probe nicht eindeutig erkennt und dann als eine unbekannte und damit potenziell gefährliche Substanz einstuft. Dies geschieht in Abhängigkeit des Wertes, den die Zugehörigkeitsfunktion zurückliefert. Geht man davon aus, dass die Datenbank alle von der Lebensmittelbehörde zugelassenen Genuss- und Lebensmittel kennt und in einem repräsentativen Umfang alle häufig aufgefundenen Drogen und Drogenmischungen kennt, so stellt eine nicht charakterisierbare Probe keinen Informationsverlust dar.

Farbmessung nach dem Gleichheitsverfahren

Bei der Farbmessung wird grundsätzlich zwischen dem Gleichheitsverfahren, dem Spektralverfahren und dem Dreibereichsmessverfahren unterschieden. Das Gleichheitsverfahren, auch bekannt als Abmusterung, ist eine subjektive, da visuelle Methode der Farbmessung und entspricht in wesentlichen Zügen den Nachmischversuchen zur Ermittlung des Normbeobachters [New57].

Farbmessung nach dem Dreibereichsverfahren

In technischen Anwendungen haben sich das Spektral- und das Dreibereichsmessverfahren durchgesetzt. Beim Dreibereichsverfahren bzw. der Tristimulus Methode werden 3 Farbwerte durch eine photometrische Messung bestimmt. Über einen vorgeschalteten Filter wird die spektrale Empfindlichkeit einer Photozelle den Normspektralwertkurven $\bar{x}(\lambda)$, $\bar{y}(\lambda)$ und $\bar{z}(\lambda)$ des farbmestechisch ermittelten CIE-Normbeobachters möglichst angenähert (siehe Abb. 38).

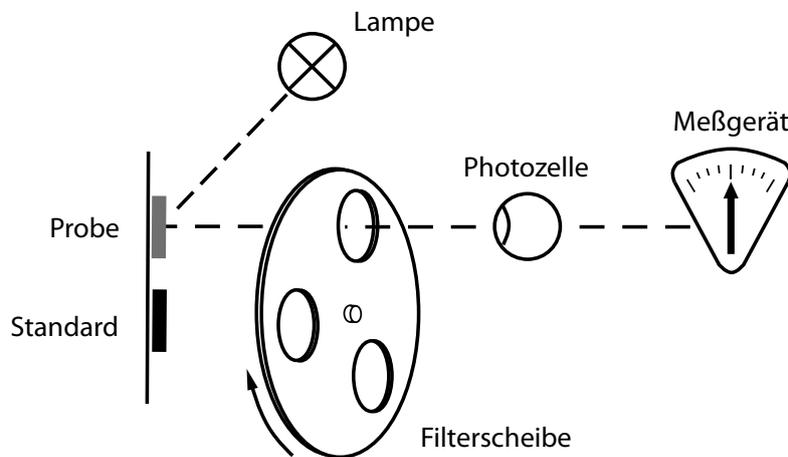


Abbildung 38 Farbmessung nach dem Dreibereichsverfahren [Sch75]

Entsprechend der DIN 5033 Teil 6 muss die Transmission der Filter der Luther-Bedingung entsprechen. Für die Transmissionsgrade $\tau_x(\lambda)$, $\tau_y(\lambda)$ und $\tau_z(\lambda)$ der Filter gilt demnach:

$$\tau_x(\lambda) = \frac{c_x \cdot \bar{x}(\lambda)}{S_{abs}(\lambda)} \quad \tau_y(\lambda) = \frac{c_y \cdot \bar{y}(\lambda)}{S_{abs}(\lambda)} \quad \tau_z(\lambda) = \frac{c_z \cdot \bar{z}(\lambda)}{S_{abs}(\lambda)} \quad (3.7)$$

Dabei entspricht $S_{abs}(\lambda)$ der spektralen Empfindlichkeit der Photozelle im ungefilterten Zustand. c_x , c_y und c_z sind empirisch bestimmte Gerätekonstanten.

Die Qualität der Messungen nach dieser Methode wird limitiert durch die Schwierigkeiten bei der technischen Realisierung geeigneter Kombinationen aus Photozelle und Filter [Jun92]. Dabei muss der Filter neben der Einhaltung der Luther-Bedingung möglichst exakt die Normspektralwertkurven nachbilden und die Abweichung der tatsächlich verwendeten Lichtquelle und der angenommenen Normlichtart korrigieren.

Farbmessung nach dem Spektralverfahren

Das Spektralverfahren zählt zur genauesten Methode zur Farbmessung. Die wichtigsten Bestandteile bei diesem Messverfahren sind eine homogene Weißlichtquelle mit einem kontinuierlichen Spektrum, ein Monochromator um die Intensität der Remission in Abhängigkeit von der Wellenlänge bestimmen zu können und eine Photozelle (siehe Abb. 39). Die Probe wird wiederholt monochromatisch beleuchtet, dabei wird der gesamte VIS-Bereich durchfahren, typische Schrittweite 5-10 nm. Aus den schrittweise gemessenen spektralphotometrischen Werten müssen noch die CIE-Normfarbwerte errechnet werden, die sog. valenzmetrische Auswertung.

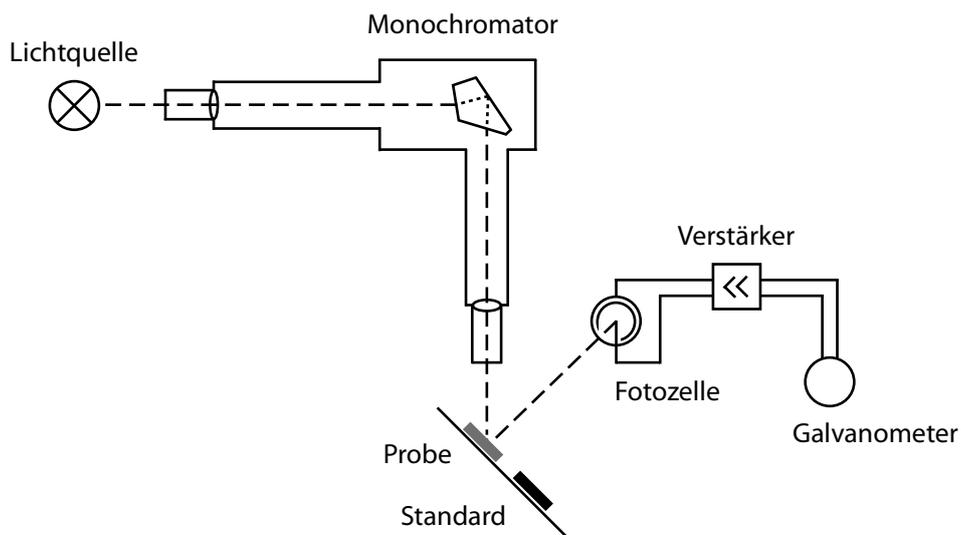


Abbildung 39 Farbmessung nach dem Spektralverfahren [Sch75]

Für die valenzmetrische Auswertung der physikalisch gemessenen spektralen Remissionswerte wird nun nach DIN 5033 Teil 4 das Integral über das Produkt aus der Farbreizfunktion $\Phi_\lambda = S_\lambda \cdot \beta(\lambda)$ und den jeweiligen Normspektralwertfunktionen $\bar{x}(\lambda)$, $\bar{y}(\lambda)$ und $\bar{z}(\lambda)$ der verwendeten Normlichtart gebildet, für die Normfarbwerte XYZ gilt demnach:

(3.8)

$$X = kf \int \Phi_\lambda * \bar{x}(\lambda) d\lambda \quad Y = kf \int \Phi_\lambda * \bar{y}(\lambda) d\lambda \quad Z = kf \int \Phi_\lambda * \bar{z}(\lambda) d\lambda$$

mit dem Normalisierungsfaktor k für die Helligkeit

$$kf = \frac{100}{\int S_\lambda \cdot \bar{y}(\lambda) d\lambda} \quad (3.9)$$

3.3 Farbabstandsmessung

Bei technischen Verfahren zur Farbabstandsmessung, also dem Dreibereichs- und dem Spektralverfahren, erfolgt zuerst die rein physikalische Messung der Intensität der Strahlung einer Lichtquelle oder die Rückstrahlung einer beleuchteten Probe, bevor im zweiten Schritt die Auswertung erfolgen kann. Es muss also eine Aussage darüber getroffen werden, ob die gemessene Probe und die Vergleichssubstanz bzw. genormte Proben voneinander abweichen und wenn ja, wie stark. Auf diese Weise ist zu entscheiden, ob die Abweichung innerhalb einer vorher definierten Toleranz liegt. Basis für die Farbabstandsmessung bildet die von Erwin Schrödinger spezifizierte Vektordarstellung von Farbe [Sch20]. Nach Schrödinger entspricht der Farbwert dem Absolutwert eines Vektors zu einem Farbort in einem Farbsystem, wobei für jedes Farbsystem der vektorielle Ursprungsort individuell festgelegt werden muss.

Die Richtung des Vektors bestimmt die Farbart und die Länge des Vektors die Sättigung. Basis für die Entwicklung der vektoriellen Darstellung bildet die trichromatische Theorie nach Young und Helmholtz beruhend auf den Graßmannschen-Gesetzen, wonach sich alle Farben aus drei Primärfarben mischen lassen [You01, Hel67].

Bei der Bestimmung des Farbabstandes muss die Struktur des zugrunde liegenden Farbsystems berücksichtigt werden. Insbesondere Korrekturen zur visuellen Gleichabständigkeit haben zu mehr als 20 unterschiedlichen Farbabstandsformeln geführt (vgl. [Cho00]). Das Ziel aller dieser Farbabstandsformeln ist ein numerisches Endresultat, mit dem die Art und Größe des Farbabstandes zwischen einer Probe P und einem Bezugswert B so beschrieben werden kann, dass der resultierende Zahlenwert bezogen auf die visuelle Wahrnehmung stets die gleiche Bedeutung erhält [Dav53].

Soll z. B. der Farbabstand im CIE-L*a*b* Farbsystem berechnet werden, ergibt sich der numerische Farbabstand ΔE_{ab}^* nach dem dreidimensionalen Satz des Pythagoras:

$$\Delta E_{ab}^* = \sqrt{(\Delta L^*)^2 + (\Delta a^*)^2 + (\Delta b^*)^2} \quad (3.10)$$

Der numerische Wert und das Vorzeichen der Farbdifferenz zwischen einer Probe P und einem Bezug B lassen sich kolorimetrisch interpretieren, es gilt:

$$\begin{aligned} \Delta L^* &= L_P^* - L_B^*, &> 0 \text{ bedeutet „heller“} && \text{und} && < 0 \text{ „dunkler“} \\ \Delta a^* &= a_P^* - a_B^*, &> 0 \text{ bedeutet „röter“} && \text{und} && < 0 \text{ „grüner“} \\ \Delta b^* &= b_P^* - b_B^*, &> 0 \text{ bedeutet „gelber“} && \text{und} && < 0 \text{ „blauer“} \end{aligned} \quad (3.11)$$

Aufgrund der vorgenommenen nicht linearen Korrekturen zur Verbesserung der physiologischen Gleichabständigkeit gilt die obige Beziehung für den Farbabstand ΔE_{ab}^* nur für Farbdifferenzen ≤ 5 .

3.4 Zusammenfassung

Die jüngsten Entwicklungen im Bereich der Farbsensoren und die kontinuierliche Steigerung der Rechenleistung von Mikroprozessoren hatten und haben einen enormen Einfluss auf die Methoden der kolorimetrischen Analyse. Die Remissionsmessungen zur Charakterisierung von Materialien beruhen auf den physikalischen Eigenschaften eines Materials, die zu einer subtraktiven Veränderung des eingestrahlten Lichtes führen, ähnlich einem spektralen Fingerabdruck. Ein Farbsystem ermöglicht es auf mathematische Weise festzustellen, ob zwei Proben gleich sind bzw. zu bestimmen welcher Bezugswert der gemessenen Probe am ähnlichsten ist. Die Entwicklung von vollständig mathematisch beschreibbaren Farbsystemen und die vektorielle Darstellung des Farbortes führten zu einer deutlichen Steigerung der externen Separation gegenüber klassischen Farbsammlungen. Die externe Separation ist dabei äquivalent zur Anzahl der unterscheidbaren Materialien bis zur Grenze der Metamerie, die abhängig vom Messverfahren ist.

4 Die analytische Auswahl der Spektralbänder

Neben den am IMT entwickelten multispektralen Photodioden existiert eine unübersehbare Fülle unterschiedlichster Sensoren für jede nur denkbare Anwendung, mit denen nahezu jede beliebige Kombination der spektralen Empfindlichkeit bzw. der Spektralbänder realisiert werden kann. Die mit Multispektral-Dioden erzielbaren Ergebnisse im Bezug auf die Anzahl der realisierbaren spektralen Bänder lassen sich nicht mehr mit den gängigen trichromatischen Methoden aus der Farbmeterik analysieren. Die analytische Farbmeterik bietet nur die Möglichkeit, trichromatische Sensorantworten in einem Farbraum darzustellen und damit auswertbar zu machen. Diese Limitierung auf drei Spektralbänder beruht auf der Definition des Begriffes von Farbe als Sinneseindruck, welcher auf der Netzhaut des menschlichen Auges hervorgerufen wird [Ric81]. Die aus der Farbmeterik bekannten Methoden zur Charakterisierung benötigen zudem immer einen Bezugspunkt, was bedeutet, dass das Optimum vorher bekannt sein muss. Dies ist in der Farbmeterik der sog. Normbeobachter nach DIN 5033-2.

Zur analytischen Auswahl der Spektralbänder wird ein Verfahren benötigt, mit dem multispektrale Sensoren untereinander und mit gängigen trichromatischen Sensoren verglichen und bewertet werden können, unabhängig von der Anzahl der verwendeten Spektralbänder. Für die Evaluierung der Verfahren soll am Beispiel einer gegebenen durchstimmbaren a-Si:H Photodiode die beste Kombination der spektralen Bänder bestimmt werden. Ziel ist die Steigerung der Messgenauigkeit für Anwendungen in der Oberflächeninspektion bzw. zur Charakterisierung von Materialien.

4.1 Die elektrische und optische Charakterisierung

Die Qualität des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Verfahren zur Performance-Steigerung multispektraler Systeme bzw. die allgemeine Beschaffenheit analytischer Verfahren für das Reengineering von optoelektronischen Bauteilen hängt maßgeblich vom exakten physikalischen Verständnis der verwendeten Bauteile ab.

Die elektrische und optische Charakterisierung der Bauteile liefert dabei wichtige Erkenntnisse, die die Grundlage für Entscheidungen bei der elektrischen und optischen Modellierung darstellen. Die wichtigsten Charakterisierungsgrößen sind der Photostrom sowie die daraus abgeleitete spektrale Empfindlichkeit S_{abs} und der Quantenwirkungsgrad η_Q . Die elektrische Charakterisierung erfolgt über die Messung der IU-Kennlinie. Aus der Differenz des Photo- und Dunkelstroms lässt sich die Dynamik bestimmen. Eine hohe Dynamik verbessert das Signal-Rauschverhalten. Die Steigung n der IU-Kennlinie ist ein Maß für die Defektdichte des Halbleitermaterials, es gilt:

$$n = \frac{q \cdot U_{thermisch}}{k \cdot T} * \frac{1}{\ln \left| \frac{\Delta y}{\Delta x} \right|} \quad (4.1)$$

Die optische Charakterisierung erfolgt durch die Messung der spektralen Empfindlichkeit. Dabei wird die Photodiode über einen weiten Wellenlängenbereich monochromatisch beleuchtet und der Photostrom j gemessen. Aus den Werten für die spektrale Empfindlichkeit S_{abs} kann der Quantenwirkungsgrad η_Q bestimmt werden.

$$\eta_Q = \frac{h \cdot c}{q} * \frac{1}{\lambda} * S_{abs}(\lambda) \quad (4.2)$$

Insbesondere bei den komplexen Multilayer-Strukturen einer pi*n Diode mit einer stufenweisen bis kontinuierlichen Regelung der Dotierstoffe während der Abscheidung (PECVD-Verfahren) bilden die Messungen zur spektralen Empfindlichkeit S_{abs} , der Photostromdichte j und dem Rauschverhalten wichtige Erkenntnisse für den nächsten Schritt des Reengineering. Das Bandgap-Engineering erfolgt über die Abscheidedauer t und den Gasfluss j . Die Zeit t der Epitaxie ergibt die Schichtdicke und die Steuerung des Gasflusses j in sscm von Silan (SiH₄) gemischt mit Diboran (B₂H₆), Phosphin (PH₃) oder Carbon (CH₄) beeinflussen den Konzentrationsgradienten, es gilt:

$$j \sim D \cdot \frac{dc}{dz} \quad (4.3)$$

Wobei D die materialspezifische Diffusionskonstante und dc/dz der Konzentrationsgradient senkrecht zur Oberfläche ist. Neben der elektrischen Modellierung, die das transiente Verhalten bestimmt, tritt die optische Modellierung, da eine Dünnschichtdiode ein komplexes optisches Schichtsystem mit Schichtdicken im Bereich der sichtbaren Strahlung bildet.

Die gängige Bestimmung der Hell-/Dunkelkennlinie (Dynamik), der spektralen Empfindlichkeit S_{abs} und des Quantenwirkungsgrades η_Q liefern keine geeigneten Aussagen, die auf die besondere Eignung des einen oder anderen Sensortyps für das gewählte Anwendungsszenario schließen lassen. Das Ziel ist die Entwicklung eigener Kriterien, mit denen Sensoren im Hinblick auf eine spätere automatisierte Auswahl geeigneter Spektralbänder eines gegebenen Sensors bewertet und verglichen können.

4.2 Vorüberlegungen

Die folgenden Berechnungen und Messungen wurden im VIS-Bereich durchgeführt, da das Basismaterial der Multispektral-Diode (amorphes Silizium) aufgrund des Bandabstandes (1,7 eV) kein Licht im NIR-Bereich und aufgrund des geringen Absorptionskoeffizienten kein Licht im UV-Bereich detektieren kann. Dies stellt aber keine Einschränkung für die entwickelten Kriterien zur analytischen Auswahl der spektralen Bänder eines Sensors mit möglichst hohem Informationsgehalt dar. Die Algorithmen wurden bewusst so allgemein gehalten, dass diese für multispektrale Meßsysteme

aller Art in allen Wellenlängenbereichen eingesetzt werden können, insofern die spektralen Daten der Lichtquelle und des Reflexionsverhaltens des Materials in ebendiesem Bereich vorliegen.

Für die Evaluierung des Verfahrens zur analytischen Auswahl der Spektralbänder wird ein Testdatensatz benötigt. Die grundlegende Idee zum Testdatensatz stammt aus den Untersuchungen von Bohnert, der Drogen anhand Ihrer farbmetrischen Werte im Lab-Farbraum charakterisiert hat [Boh99]. Den Ausgangspunkt bildet demnach eine Gruppe von weißlichen Pulverproben mit unterschiedlichem Gefährdungspotenzial (siehe Abb. 40). Insbesondere bei Drogen musste berücksichtigt werden, dass diese nur in den seltensten Fällen in reiner Form auftreten, daher wurden auch sog. Streckmittel in den Datensatz aufgenommen.

Die erste Gruppe bilden Streckmittel, die ebenfalls eine berauschende Wirkung haben und damit unter das Arzneimittel- bzw. das Betäubungsmittelgesetz fallen und deshalb z. B. bei Flugreisen nicht im Handgepäck mitgeführt werden dürfen bzw. bei der Gepäckkontrolle deklariert werden müssen (**outlawed extenders**).

Die zweite Gruppe bilden haushaltsnahe Materialien, die frei verfügbar sind und deren Mitnahme legal ist, die aber häufig als Streckmittel eingesetzt werden, und die nicht zu den normalen Genussmitteln wie Dextrose, Fructose oder ähnlichen gehören. Somit können diese Misstrauen bei einer Kontrolle erwecken (**common household extenders**).

Die dritte Gruppe bilden typische Haushalts- und Genussmittel, die nur selten als Streckmittel Verwendung finden und deren Mitnahme im Handgepäck erlaubt ist (**common household substances**).

common household substances

flour	baking soda	salt	refined sugar	dextrose (pure)	dextrose (vitamin C)	dextrose (calcium)	dextrose (magnesium)
-------	-------------	------	---------------	-----------------	----------------------	--------------------	----------------------

common household extenders

cellulose	glucose	lactose	fructose	vitamin C	saccharose	ASA (tablet)	paracetamol (tablet)
-----------	---------	---------	----------	-----------	------------	--------------	----------------------

outlawed extenders

ASA (pure)	paracetamol (pure)	phenacetin	procaine	lidocaine	mannitol
------------	--------------------	------------	----------	-----------	----------

strictly prohibited drugs

amphetamine*	ecstasy*	diatomine
--------------	----------	-----------

*measurements were carried out in cooperation with the police

The measurements were carried out with a spectrophotometer, Konica Minolta (CM-2500c).



Abbildung 40 Überblick über die untersuchten weißlichen Pulverproben des Testdatensatzes

Bei der Zusammenstellung des Testdatensatzes wurde darauf geachtet, dass diese nur schwer vom Auge unterschieden werden können. Dieser Umstand ist immer dann gegeben, wenn der Farbabstand ΔE_{ab}^* kleiner als 0,5 ist, d.h. zwischen diesen beiden Farben ist für einen menschlichen Beobachter kein bis fast kein Unterschied bemerkbar (siehe Tab. 1).

Der Wert des Farbabstandes ΔE_{ab}^* ist äquivalent zum euklidischen Abstand zweier Proben in einem Farbraum bzw. einer gemessenen Probe und deren Bezugswert. Aufgrund der nicht linearen Korrekturen eines Farbraums zur Erlangung einer sinnesphysiologischen Gleichabständigkeit gibt es zu jedem Farbraum eine eigene Farbabstandsformel, sodass die Zahlenwerte nur innerhalb eines Farbraums vergleichbar sind [Ber94]. Die quantitative Angabe des Farbabstandes ΔE_{ab}^* in Tabelle 1 bezieht sich auf den Farbabstand im L*a*b*-Farbraum.

ΔE_{ab}^*	Bewertung
< 0,5	kein bis fast kein Unterschied
0,5-1,0	Unterschied kann für das geübte Auge bemerkbar sein
1,0-2,0	merklicher Farbunterschied
2,0-4,0	wahrgenommener Farbunterschied
4,0-5,0	wesentlicher Farbunterschied, der selten toleriert wird
> 5,0	die Differenz wird als andere Farbe bewertet

Tabelle 1 Sinnesphysiologische Bewertung des Farbabstandes ΔE_{ab}^* [Wik12]

Für die CIELAB Farbabstandsformel gilt:

$$\Delta E_{ab}^* = \sqrt{(\Delta L^*)^2 + (\Delta a^*)^2 + (\Delta b^*)^2} \quad (4.4)$$

In diesem Kontext gilt für die Farbdifferenz zwischen einer Probe P und einem Bezug B gilt:

$$\Delta L^* = L_P^* - L_B^*, \quad \Delta a^* = a_P^* - a_B^*, \quad \Delta b^* = b_P^* - b_B^* \quad (4.5)$$

Den Ort, dem eine gemessene Farbe in diesem Farbraum zugeordnet wird, erhält man aus den gemessenen Normfarbwerten XYZ , es gilt:

$$L^* = 116 \cdot f\left(\frac{Y}{Y_n}\right) - 16; \quad a^* = 500 \left\{ f\left(\frac{X}{X_n}\right) - f\left(\frac{Y}{Y_n}\right) \right\}; \quad b^* = 200 \left\{ f\left(\frac{Y}{Y_n}\right) - f\left(\frac{Z}{Z_n}\right) \right\}$$

$$\text{mit } f(q) = \begin{cases} \sqrt[3]{q} & ; q > 0,008856 \\ 7,787 * q + \frac{16}{116}; & q \leq 0,008856 \end{cases} \quad (4.6)$$

X_n, Y_n und Z_n hängen von der verwendeten Lichtart und dem Beobachter ab. Für die Normlichtart

D65 gelten für den CIE 2°-Normbeobachter z. B. die Werte $X_n = 95,047$, $Y_n = 100,00$ und $Z_n = 108,883$. Aufgrund der vorgenommenen nicht linearen Korrekturen zur Verbesserung der physiologischen Gleichabständigkeit gilt die obige Beziehung für den Farbabstand ΔE_{ab}^* nur für Farbdifferenzen ≤ 5 .

Legt man für farbmétrische Untersuchungen nur Proben aus einer Farbgruppe zugrunde, ist per Definition der Farbabstand sehr klein. In ersten Versuchsreihen erfolgte die Charakterisierung von Materialien über die Maximum-Likelihood-Methode unter Verwendung von Vergleichssubstanzen bzw. von genormten Proben [Hel08]. Beschränkt man sich bei der Charakterisierung auf die deskriptive Farbmétrik, so ist festzustellen, dass die Zuordnung der Proben nicht immer eindeutig möglich ist (siehe Abb. 41). Vergleicht man zwei Proben mit dem Bezugswert $L^* = 38$, $a^* = 29$ und $b^* = -80$ so erhält man für beide Proben denselben Wert für den Farbabstand $\Delta E_{ab}^* = 5$.

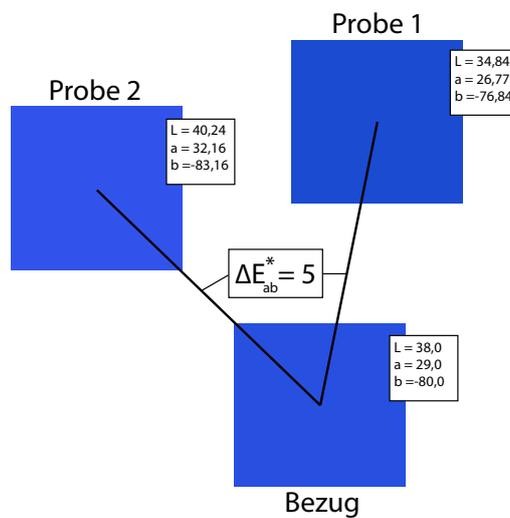


Abbildung 41 Beispiel zweier Proben, bei denen keine eindeutige Zuordnung möglich ist

In einem weiteren Versuch wurde ein Datensatz aus 14 Proben vermessen. Zur Anwendung kamen folgende Geräte: das Konica Minolta Spektrophotometer CM2500c, das Mazet Jencolor MTCS-ME1 Evaluation Board mit einem 6 Farb True Color Sensor vom Typ MTCSiCS in der Werkseinstellung und mit optimierten Einstellungen [Wan10]. Zu den Optimierungen zählen der Weißabgleich, der vor jeder Messreihe durchgeführt wird und die Bestimmung des Erwartungswertes x_i gemäß dem Verfahren, wie es bei der Maximum Likelihood Erkennung verwendet wird.

In willkürlicher Reihenfolge wurden alle Proben des Testdatensatzes einzeln vermessen und es wurde jeweils der Bezugswert mit dem kleinsten Farbabstand bestimmt (siehe Abb. 42), für $i = [1, \dots, 14]$ gilt:

$$\Delta E_{ab_1}^* = \sqrt{(L_{mess}^* - L_{P_i}^*)^2 + (a_{mess}^* - a_{P_i}^*)^2 + (b_{mess}^* - b_{P_i}^*)^2} \tag{4.7}$$

$$\Delta E_{ab_{min}}^* = \min[\Delta E_{ab_1}^*, \dots, \Delta E_{ab_{14}}^*]$$

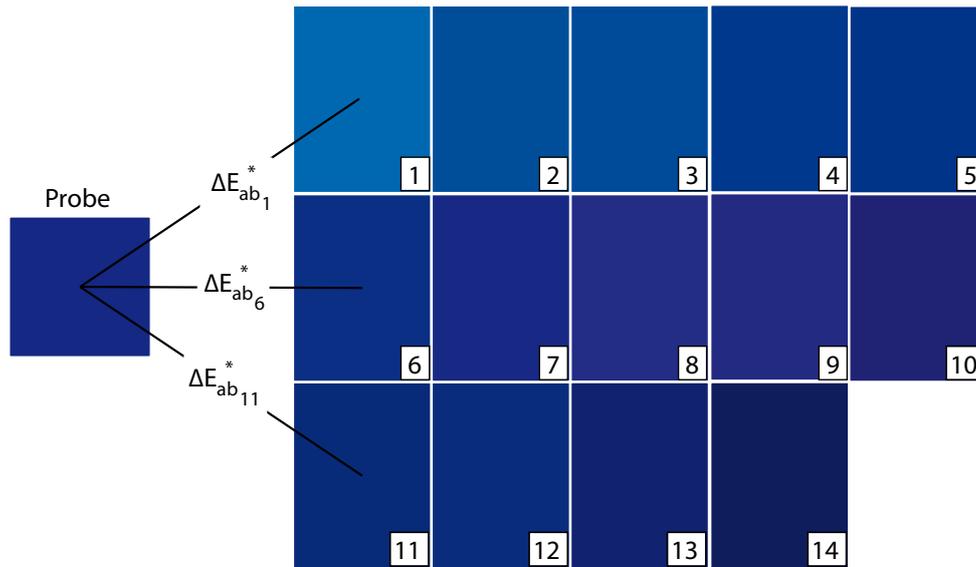


Abbildung 42 Testdatensatz

Der Farbabstand der Proben des Testdatensatzes wurde bewusst so gewählt, dass die Proben farbmtrisch betrachtet maximal ähnlich sind, d.h. $\Delta E_{ab}^* \leq 0,5$. In Tabelle 2 wurden für jede der gemessenen Proben die *min*-Werte von ΔE_{abmin}^* der so ermittelte Bezugswert eingetragen. Erfolgt die Charakterisierung der Probe korrekt, ist die Nummer der Proben mit dem *min*-Wert identisch.

Spektrophotometer									
P1	2	P2	8	P3	8	P4	9	P5	10
P6	10	P7	10	P8	10	P9	10	P10	10
P11	10	P12	10	P13	14	P14	14		
MTCS-ME1 (Werkseinstellung)									
P1	14	P2	14	P3	14	P4	14	P5	14
P6	14	P7	14	P8	14	P9	14	P10	14
P11	14	P12	14	P13	14	P14	14		
MTCS-ME1 (optimiert)									
P1	1	P2	2	P3	3	P4	4	P5	5
P6	6	P7	7	P8	8	P9	9	P10	10
P11	11	P12	12	P13	13	P14	14		

Tabelle 2 Zuordnung der Ergebnisse nach der Charakterisierung zu den Proben P1-P14, grün hinterlegen sind die Fälle, in denen die Probe korrekt zugeordnet wurde

Die Ergebnisse zeigen, dass eine eindeutige Charakterisierung einer Probe damit nicht realisiert werden kann. Äquivalent zu den Untersuchungen von Bohnert et al.[Boh99] bestätigt sich die Aussage, dass mit gängigen Farbsensoren eine photorealistische Reproduktion von Farbe zwar durchgeführt werden kann. Für den Einsatz in der optischen Materialanalyse, also für die Erkennung von spektralen Signaturen, ist dies aber unzureichend.

Farbsensoren sind optimiert für die Reproduktion von Farbe, d. h. die technische Nachbildung des menschlichen Auges (Zapfensehen). Die guten Ergebnisse gängiger Farbsensoren bei der Reproduktion von Farbe resultieren aus dem Sachverhalt, dass es irrelevant ist, aus welchen spektralen Bestandteilen (Primärvalenzen) die gemessene Farbe nachgemischt wird. Es kann sogar mehrere gültige Kombinationen geben, solange die reproduzierte Farbe metamer zum Original ist. Dies ist für Anwendungen in der Sicherheitstechnik aber nicht tolerierbar, da das spektrale Verhalten eines Stoffes wie ein Fingerabdruck zu bewerten ist. Farbsensoren sind in der Regel nicht für das Erkennen und Klassifizieren von Materialien, sondern für eine wahrnehmungsäquivalente Wiedergabe der Realität optimiert.

Ein Verfahren zur analytischen Auswahl der Spektralbänder muss in der Lage sein, bewerten zu können, ob eine optimale Kombination aus Sensor und Lichtquelle vorliegt. Eine Kombination der spektralen Bänder gilt als optimal, wenn erstens möglichst viele Materialien unterschieden werden können und zweitens die Charakterisierung zuverlässig erfolgt.

4.3 Das Maß für die externe Separation

Da nicht alle untersuchten Sensoren real existieren und Messungen zeitintensiv sind, wurde die Bestimmung der externen Separation von verschiedenen Sensor-Lichtquellen-Kombinationen zum Teil in einer virtuellen Testumgebung durchgeführt und nach erfolgreicher Evaluation erst später mit den realen Werten verglichen. Im ersten Schritt wurde der Photostrom für jedes spektrale Band einer Sensor-Lichtquellen-Kombination berechnet. Der von einer Photodiode bestimmte Wert für die Photostromdichte j , hängt von der spektralen Empfindlichkeit $S_{abs}(\lambda)$ der Photodiode, dem Reflexionsverhalten $r(\lambda)$ der beleuchteten Oberfläche und der spektralen Strahlungsleistungsdichte $E(\lambda)$ ab.

$$j = \int_{\lambda} E(\lambda) \cdot r(\lambda) \cdot S_{abs}(\lambda) d\lambda \quad \left[\frac{A}{cm^2} \right] \quad (4.8)$$

Das zu verfolgende Ziel ist die Steigerung der externen Separation. Die externe Separation wird definiert als diejenige Menge der unterscheidbaren Materialien m , welche spezifisch für jede Sensor-Lichtquellen-Kombination ist.

$$m = \{ \forall x_i; i \in \mathbb{N} | \exists C_{x_i} \subset CIELAB \} \quad (4.9)$$

wobei: $\#m = n \in \mathbb{N} \rightarrow \infty$

und $\forall x_i \in C_{x_i} \Rightarrow \Delta E_{ab}^* \rightarrow 0$

Für die Berechnung der externen Separation werden für einen Sensor X mit einer Lichtquelle Y die Photoströme für jede der spektralen Empfindlichkeitskurven bzw. Bänder $S_0 - S_n$ berechnet. Fasst man $P(S_0) - P(S_n)$ als n -dimensionalen Vektor \vec{P} auf so erhält man für jedes Material im Testdatensatz einem Ort im Raum, der eindeutig durch den Vektor \vec{P} beschrieben wird.

$$\vec{P} = \begin{pmatrix} P(S_0) \\ P(S_1) \\ \vdots \\ P(S_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} kf \int_{\lambda} E(\lambda) \cdot S_0(\lambda) \cdot r(\lambda) d\lambda \\ kf \int_{\lambda} E(\lambda) \cdot S_1(\lambda) \cdot r(\lambda) d\lambda \\ \vdots \\ kf \int_{\lambda} E(\lambda) \cdot S_n(\lambda) \cdot r(\lambda) d\lambda \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

mit dem Normalisierungsfaktor kf für die Luminanz:

$$kf = \frac{100}{\int E(\lambda) \cdot S_0(\lambda) \cdot r(\lambda) d\lambda} \quad (4.11)$$

Wird dieser Schritt für die unterschiedlichen Proben des Datensatzes wiederholt, so spannen die Vektoren einen n -dimensionalen Körper auf, dessen Volumen V ein Maß für die externe Separation ist (siehe Abb. 43).

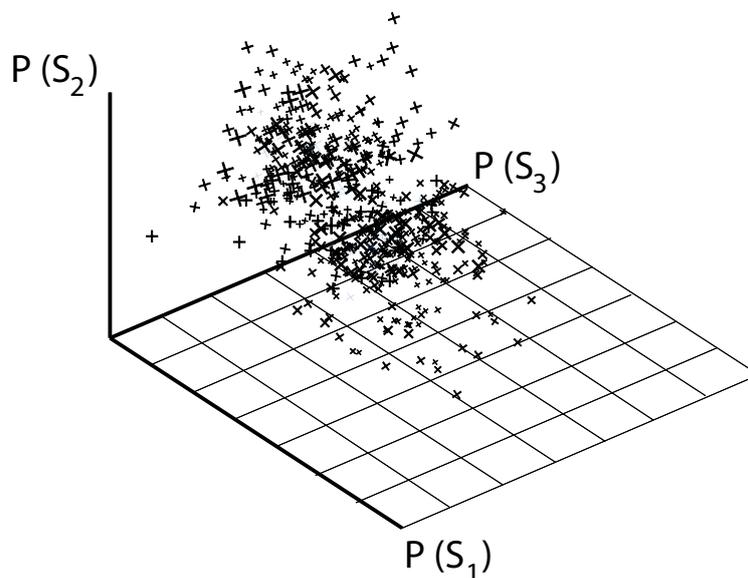


Abbildung 43 Für einen 3-„Farb“-Sensor ergeben sich somit 3 Werte, die in einem Vektor \vec{P} gespeichert werden, jede Probe des Testdatensatzes wird eindeutig durch einen Vektor beschrieben

Um aus den Vektoren für jede der Probe des Testdatensatzes das Maß für die externe Separation für eine Sensor-Lichtquellen-Kombination bestimmen zu können, werden die Vektoren nacheinander in die Spalten einer Matrix M eingetragen. Der Eigenwert der Matrix M entspricht dabei dem Volumen V des n -dimensionalen Körpers, welcher durch die Vektoren aller Proben des Testdatensatzes aufgespannt wird. Im Allgemeinen ist die Matrix M nicht quadratisch. Zur Berechnung des Eigenwertes wird die Matrix M mit der transponierten Matrix M^T multipliziert, für das Volumen V gilt demnach:

$$V = \sqrt{\det(M \cdot M^T)} \quad (4.12)$$

Um auch multispektrale Systeme mit einer unterschiedlichen Anzahl an Spektralbändern vergleichen zu können, wurde der Parameter ΔCL definiert als das dimensional normierte Volumen der Punktwolke (engl. cloud), die nach Vermessung des Probensatzes als n -dimensionales Parallelepiped aufgespannt wird.

Die Normierung der Dimension gewährleistet eine Vergleichbarkeit von multispektralen Systemen, die eine unterschiedliche Anzahl an spektralen Bändern verwenden. Der Korrekturfaktor f_n beschreibt die Änderung des Volumens V eines n -dimensionalen Körpers in Abhängigkeit von n , der Anzahl der verwendeten Spektralbänder (siehe Abb. 44).

Für die Funktion f_n gilt mit $n \in \mathbb{N} \geq 3$: $f_n = \frac{625}{4^{n-3}} \cdot x^2 \equiv V$ (4.13)

Damit kann das dimensional normierte Volumen der Punktwolke definiert werden als:

$$\Rightarrow \Delta CL = \sqrt{\frac{4^{n-3}}{5^4} \cdot V} \quad (4.14)$$

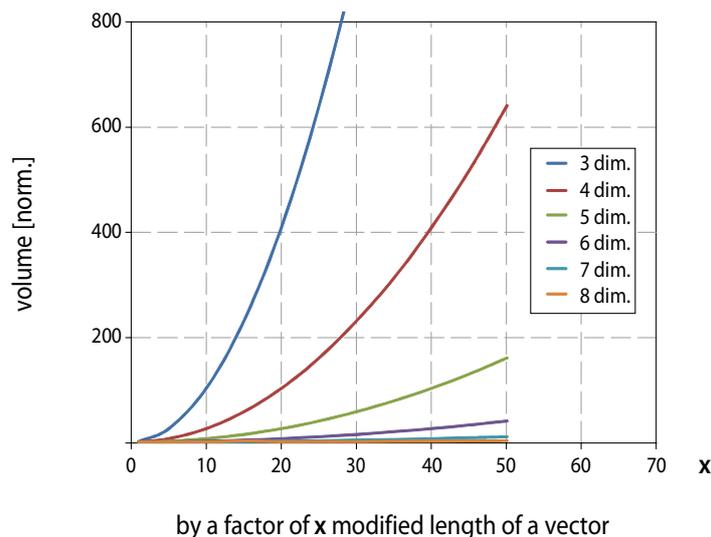


Abbildung 44 Die Änderung des Volumens eines n -dimensionalen Körpers in Abhängigkeit von der Anzahl der Spektralbänder

4.4 Die Auswahl der Spektralbänder mit ΔCL

Basis für die Untersuchung zur Auswahl geeigneter Spektralbänder zur Performance Steigerung bildete ein 8 Farbsensor (Typ 2ramp_P7) von A. Bablich [Bab12a]. Zur Bestimmung von ΔCL_{max} wurde die externe Separation für alle 216 Kombinationen mit 3-8 Bändern berechnet, um die Frage zu beantworten, ob wirklich alle 8 spektralen Bänder benötigt werden. Sollte dies nicht der Fall sein, gewinnt die Frage nach der besten Kombination an Relevanz. Gesucht wurde ebenfalls nach Gemeinsamkeiten und Unterschieden, die sich bei Vergleich der Kombinationen der spektralen Bänder und der Beleuchtungsart mit einem hohen und einem niedrigen Wert für ΔCL ergeben, (siehe Tab. 3).

Bänder	Bias Spannungen [V]	Beleuchtungsart	ΔCL
3	1, 3, 7	AM 1.5	2,5
4	1, 3, 5, 9	AM 1.5	5,23
5	1, 3, 5, 9, 12	AM 1.5	4,27
6	1, 3, 5, 7, 9, 10	AM 1.5	0,93
7	1, 3, 5, 7, 9, 10, 11	AM 1.5	0,22
8	1, 3, 5, 7, 9, 10, 11, 12	AM 1.5	0,34
4	1, 3, 5, 9	LED warm weiß (real)	2,99
4	1, 3, 5, 9	Hq-Dampf-Lampe (real)	3,07
4	1, 3, 5, 9	Glühlampe (real)	12,05
4	1, 3, 5, 9	Norm A	14,86
4	1, 3, 5, 9	Halogenlampe (real)	19,56

Tabelle 3 Überblick über die untersuchten Sensor-Lichtquellen Kombination und deren Wert für die externe Separation

Die Untersuchung ergab, dass bei diesem Sensor der maximale Wert für ΔCL bei der Verwendung von 4 Bändern erreicht wird. Es handelt sich bei diesen Bändern um diejenigen, die eine niedrige Überlappung und damit eine hohe lineare Unabhängigkeit aufweisen. Dieser Zusammenhang wurde bereits messtechnisch von J. Zimmer et al. für die bereits vorgestellte Art von multispektralen Sensoren ermittelt [Zim99].

Projiziert man diese optimale Kombination in die XY-Ebene des CIE-Farbraums, fällt weiterhin auf, dass der Schwerpunkt der vom Spektralfarbenzug eingeschlossenen Fläche mit der Lage der untersuchten weißlichen Pulverproben übereinstimmt.

4.5 Grenzen von ΔCL

Der Parameter ΔCL liefert nur die Information über das Volumen V der Punktwolke, gibt aber keinen Aufschluss über die Verteilung der Punkte bzw. Proben in der Wolke. Die Zuverlässigkeit bei der Unterscheidbarkeit zwischen den Pulverproben hängt dabei aufgrund des verwendeten Maximum Likelihood Verfahrens von der Verteilung der Proben im Raum bzw. in der Wolke ab (siehe Abb. 45). Der Parameter ΔCL liefert keine Informationen über die Zuverlässigkeit bei der Charakterisierung einer Probe.

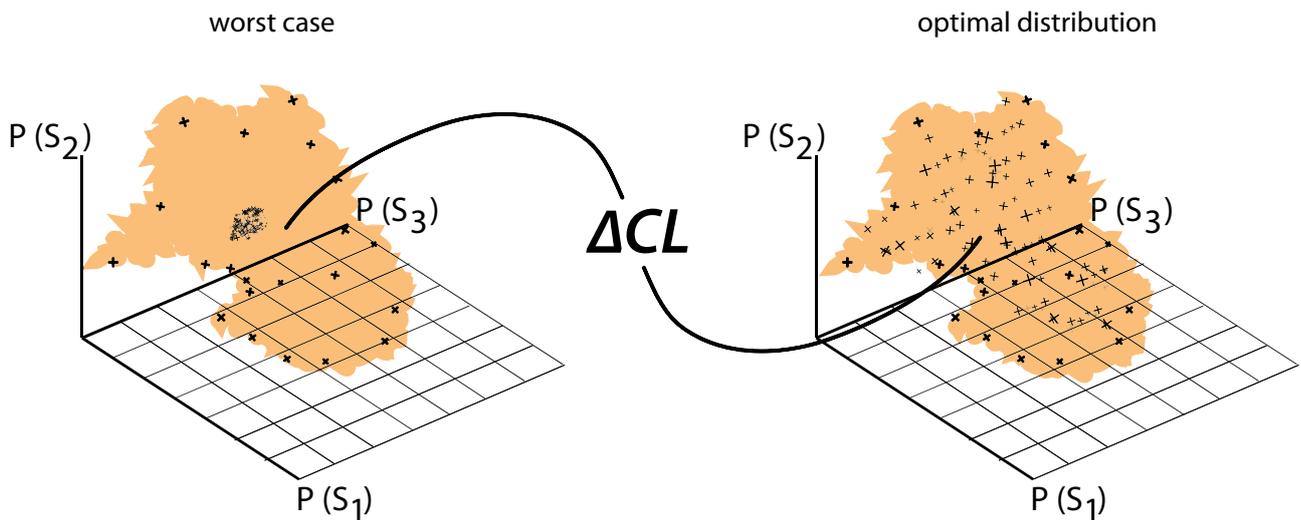


Abbildung 45 Best- und Worst-Case bei der Unterscheidbarkeit zwischen den Proben mit identischen Werten für die externe Separation ΔCL

Eine weitere Einschränkung stellt die Endlichkeit des Testdatensatzes dar. Es gibt nicht immer ein exaktes Gegenstück zur gemessenen Probe in der Datenbank, weil es unmöglich ist, alle Mischungen abzubilden. Wendet man nun für die Charakterisierung eine Maximum-Likelihood-Erkennung an und optimiert man die Messergebnisse unter Verwendung des Erwartungswertes, kann dies zu einer falsch positiven Erkennung führen. Das Maximum-Likelihood-Verfahren liefert immer ein Resultat unabhängig davon, ob die gemessene Probe ein Element des Datensatzes ist, oder ob eine exakte Zuordnung überhaupt möglich ist. Die Frage ist nun, wie groß die Messabweichung sein darf, um Proben noch zuverlässig erkennen zu können. Die Ursachen für Messabweichungen können vielfältig sein: Rauschen im Sensor, der Wellenlängendrift einer Lichtquelle, die Inhomogenitäten einer Probe oder durch Streulicht, um nur einige zu nennen.

Es muss also ein Parameter bestimmt werden, mit dem bewertet werden kann und durch den nachvollziehbar ist, mit welcher „Gewissheit“ das gemessene Material für eine rein qualitative Bewertung der Zuverlässigkeit einem Sample aus der Datenbank zugeordnet werden konnte. Die Idee zur Bestimmung eines solchen Parameters stammt aus dem Bereich der Fuzzy Mengen. Ein ähnliches Problem wurde von Lotfi A. Zadeh bei der Definition der Menge aller großen Menschen betrachtet [Zad65]. Verwendet man eine feste Grenze, z. B. 186 cm, dann würden alle Menschen die nur 185,9 cm groß sind zu den kleinen Menschen gezählt werden. Gelöst wird dieses Problem durch die Verwendung einer Zugehörigkeitsfunktion μ .

4.6 Die Zugehörigkeitsfunktion μ

Über die Einführung einer Zugehörigkeitsfunktion bei der Charakterisierung soll folgendes Problem vermeiden werden das bei der Maximum-Likelihood-Erkennung unter Berücksichtigung des Erwartungswertes auftritt. Dies soll am folgenden Beispiel verdeutlicht werden.

P ist eine gemessene Probe, die charakterisiert werden soll, S_a , S_b und S_c sind Samples aus einer Datenbank, deren Lage im sensorspezifischen „Farb“-Raum unter kontrollierten Bedingungen empirisch bestimmt wurde.

Im ersten Schritt wird der euklidische Abstand ΔEA zu allen Samples in der Datenbank bestimmt. Im trivialsten Fall ist P ein Element des Datensatzes und eine Zuordnung zum Sample mit dem kleinsten Wert ΔEA_{min} für den euklidischen Abstand ΔEA ist eindeutig möglich (siehe Abb. 46).

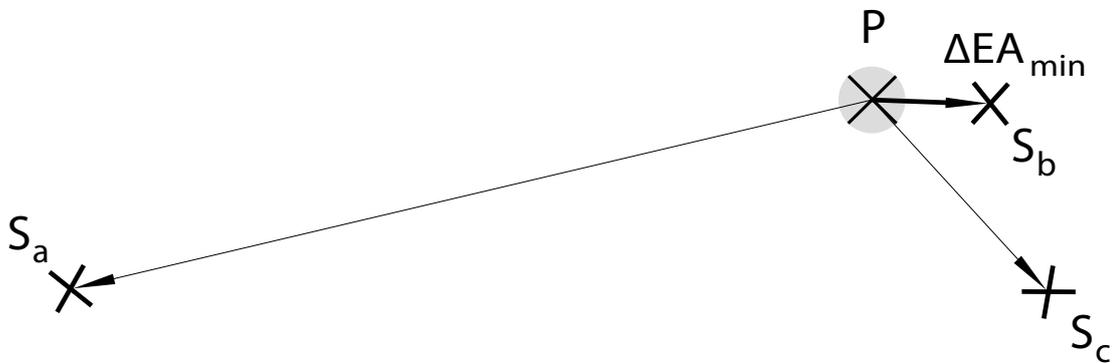


Abbildung 46 Einfachster Fall: die gemessene Probe hat eine Entsprechung im Datensatz

Im Allgemeinen kann es aber vorkommen, dass es nicht möglich ist, die Probe exakt zu charakterisieren, da die Abstände ΔEA_a und ΔEA_b fast gleich sind (siehe Abb. 47).

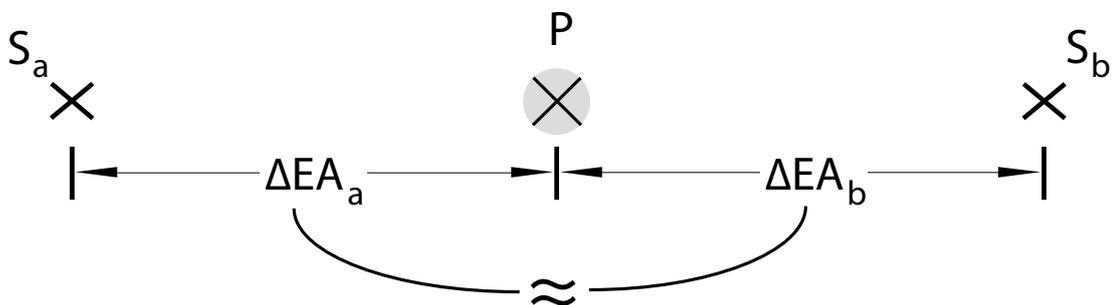


Abbildung 47 Beispiel für eine Messung, bei der eine eindeutige Zuordnung nicht möglich ist

Möglich ist auch, dass Proben vermessen werden, die sich nicht im Datensatz befinden. Dabei ergeben sich zwei Möglichkeiten. Die Probe P ist erstens kein Element des Datensatzes oder es liegt zweitens ein Messfehler vor (siehe Abb. 48).

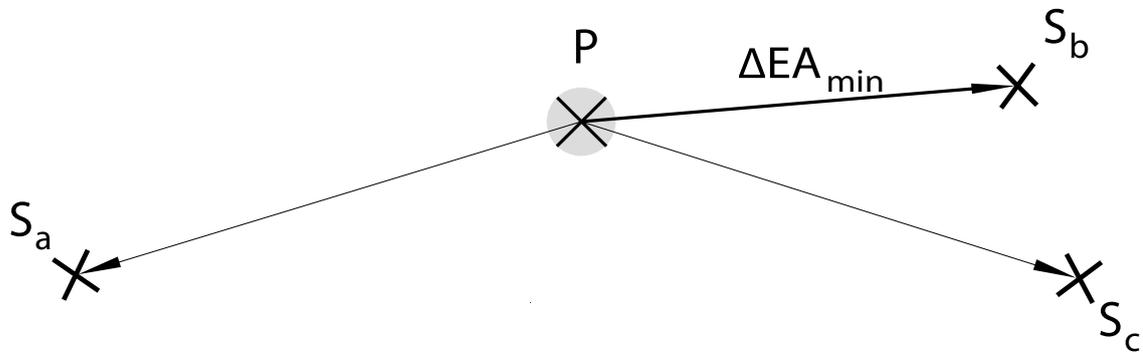


Abbildung 48 Beispiel für eine weitere Messung, bei der eine eindeutige Zuordnung nicht möglich ist

Wird der zuvor empirisch ermittelte Erwartungswert x_i gemäß des Verfahrens, wie es bei der Maximum-Likelihood-Erkennung verwendet wird, berücksichtigt (siehe Abb. 49), so wird ΔEA_a korrigiert zu:

$$\Delta EA_a EW = Y_{mess} - x_i + \Delta EA_a \quad (4.15)$$

Daraus folgt, dass die Probe „scheinbar“ exakt dem Sample S_a zugeordnet werden kann.

$$\Rightarrow \Delta EA_a EW \ll \Delta EA_b$$

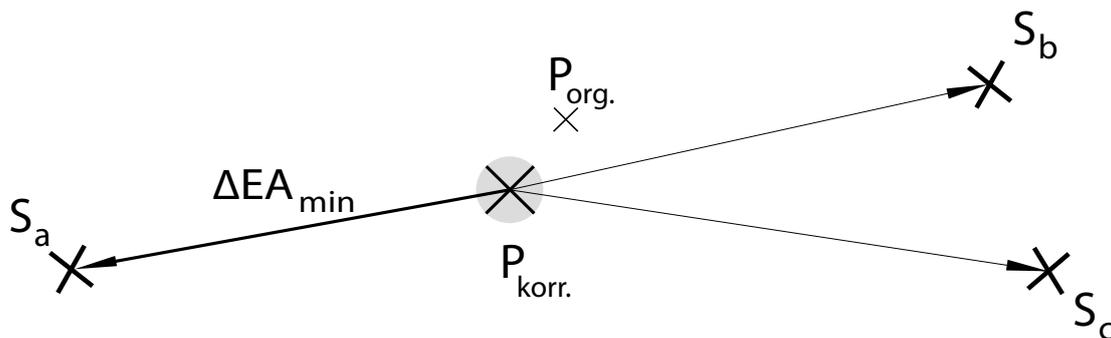


Abbildung 49 Beispiel für eine Messung unter Berücksichtigung des Erwartungswertes

Hilfreicher wäre eine Bestimmung, die darüber informiert mit welcher Genauigkeit es sich wirklich um den vermuteten Stoff handelt. Eine Zugehörigkeitsfunktion μ sollte dabei folgendes Resultat liefern:

$$\mu_a(P) = 0,51 \cdot S_a \quad (4.16)$$

$$\mu_b(P) = 0,49 \cdot S_b$$

Für eine solche Zugehörigkeitsfunktion müssen drei Werte bestimmt werden. Im ersten Schritt wird der euklidische Abstand ΔEA zu allen Samples in der Datenbank bestimmt. Dabei interessiert für die Bestimmung der Funktion das Sample S_{min} mit dem kleinsten Abstand ΔEA_{min} zur Probe P sowie dasjenige mit dem zweitkleinsten Abstand $S_{2.Kl}$, sowie die mittlere Streuung MP jeder Probe, die selbst unter kontrollierten Laborbedingungen nicht vermieden werden kann (siehe Anhang 7.1). Der Wert für MP bezieht sich demnach auf die mittlere Standardabweichung der Sensor-Lichtquellen-Kombination, mit der bereits der Datensatz behaftet ist. In diesem Bereich kann man nicht mehr entscheiden, ob es sich um unterschiedliche oder identische Proben handelt.

Mehrere Versuchsreihen haben gezeigt dass die Verwendung einer Geraden, bei der für $\mu(S_{2.Kl})$ der Wert 0,5 gewählt wurde, die plausibelsten Ergebnisse liefert (siehe Abb. 50). Damit folgt für die Zugehörigkeitsfunktion μ :

$$\mu(P) = \frac{1-0,5}{MP^{-1}-\Delta EA_{2.Kl}^{-1}} \cdot \Delta EA_{min}^{-1} + \left(0,5 - \frac{1-0,5}{MP^{-1}-\Delta EA_{2.Kl}^{-1}} \cdot \Delta EA_{2.Kl}^{-1}\right) \quad (4.17)$$

$\mu(P)$ wird definiert als das Maß für die Zuverlässigkeit der Erkennung. Der Parameter μ ist ein Maß für die Zuverlässigkeit, mit der die gemessene Probe P dem Sample S_{min} mit dem geringsten euklidischen Abstand ΔEA_{min} aus einer Datenbank zugeordnet werden konnte.

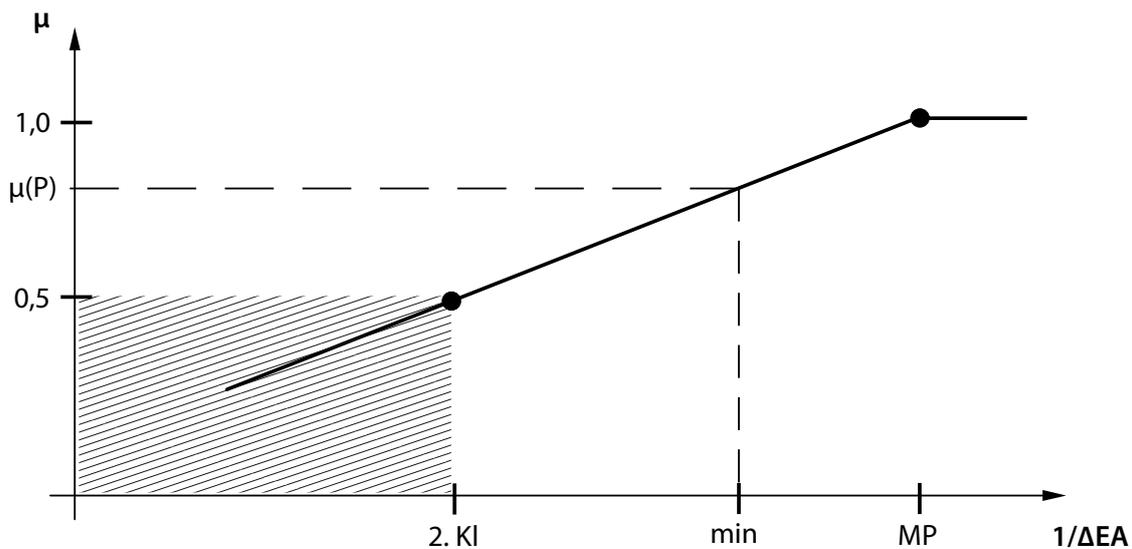


Abbildung 50 Grafische Bestimmung der Zugehörigkeitsfunktion μ

Eine Frage die sich aufdrängt, ist, warum der Wert für $S_{2.Kl}$ nicht unter 0,5 sinkt, denn mit wachsender Entfernung müsste dieser Wert ebenfalls weiter sinken. Auch wenn der Einwand berechtigt erscheint, ist er für die Auswertung mit welcher eine Probe P dem Sample S_{min} , also dem mit dem geringsten Anstand, zugeordnet werden konnte nur von untergeordneter Bedeutung. Wichtig ist nur der Wert, den die Zugehörigkeitsfunktion μ für S_{min} ausgibt. Sollte sich dieser Wert der Marke von 0,5 annähern, kann man davon ausgehen, dass die korrekte Zuordnung nur noch ein Produkt des Zufalls ist.

Zudem müssen noch ein paar Sonderfälle abgefangen werden, z. B. wenn

$$S_{min} = S_{2.Kl} = \dots = S_{n.Kl} \quad (4.18)$$

$$\Rightarrow \mu(P) = \frac{1}{n} \cdot S_{min}$$

In einem ersten Versuch wurde mit dem MMCS-Evaluationboard von der Firma JenColor, das mit einem 8 Farbsensor bestückt ist bei dem sich einzelne Farbkanäle in beliebiger Kombination abschalten lassen, die Resultate der Messungen mit den Ergebnissen aus der virtuellen Testumgebung verglichen und die Werte für $\mu(P)$ berechnet. Aus dem Versuch ergab sich ein Widerspruch, welcher in Abhängigkeit vom verwendeten Datensatz auftritt. Insbesondere dann, wenn Proben doppelt erfasst werden, sich zu ähnlich sind, oder die Messstabilität des Sensors zu gering ist, d. h. der Wert für MP zu hoch ist.

$$S_{min} \leq S_{2.Kl} \leq MP \quad (4.19)$$

$$\Rightarrow \mu(P) = 1 \cdot S_{min} \quad \text{Wdsp!}$$

Es muss also bei der Definition des Testdatensatzes darauf geachtet werden, dass keine Proben doppelt erfasst werden, bzw. sich zu ähnlich sind.

4.7 Erweiterung von $\mu(P)$

Des Weiteren sollte eine solche Zugehörigkeitsfunktion die Möglichkeit bieten, das unterschiedlich hohe Gefährdungspotenzial einzelner Stoffe zu berücksichtigen, um eine konservative Abstimmung des Meßsystems zu ermöglichen.

$$\mu(S_{2.Kl}|a = b) = 0,5 \cdot S_a \quad (4.20)$$

$$\mu(S_{2.Kl}|a > b) = 0,6 \cdot S_a$$

$$\mu(S_{2.Kl}|a < b) = 0,4 \cdot S_a$$

Die Berücksichtigung des Gefährdungspotenzials erfolgt über die Definition $\mu(P = S_{2.Kl})$ für den zweitkleinsten Abstand. Hat a ein höheres Gefährdungspotenzial als b folgt für $S_{2.Kl} = 0,6$. Im umgekehrten Fall sinkt der Wert für $S_{2.Kl} = 0,4$ (siehe Abb. 51).

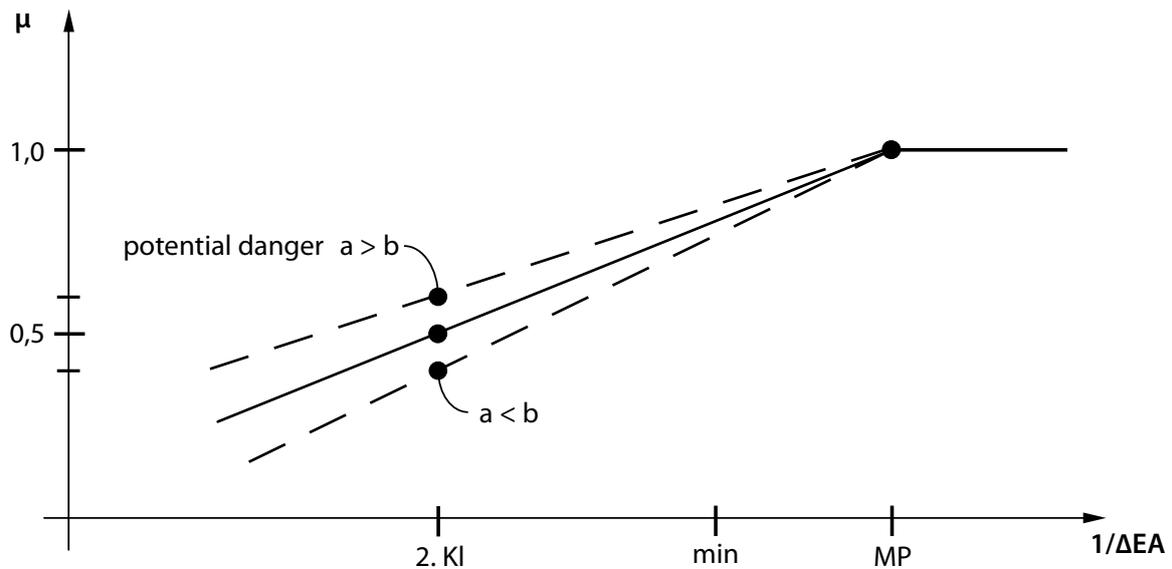


Abbildung 51 Zugehörigkeitsfunktion unter Berücksichtigung des Gefährdungspotenzials

4.8 Proof of Concept

Die an 39 unterschiedlichen Kombinationen aus Sensor und Lichtquelle durchgeführten Untersuchungen hatten zum Ziel die Aussagekraft der im Abschnitt 4.6 definierten Zugehörigkeitsfunktion zu überprüfen. Um die Robustheit des Meßsystems besser beurteilen zu können, wurden einzelne Teile mit einem künstlichen Rauschen versehen. In erster Näherung wurde zur Simulation des Rauschens Additive White Gaussian Noise (AWGN) verwendet. So wurde die spektrale Empfindlichkeit mit einem AWGN versehen, was einen verrauschten Sensor nachbilden soll. Danach wurde die spektrale Reflexion der Probe mit einem AWGN versehen, was eine verunreinigte Probe nachbilden soll und es wurde die Lichtquelle mit einem AWGN versehen, was Streulicht nachbilden soll. Bei der Simulation des Rauschens besteht die Ungenauigkeit darin, dass Rauschen sich insbesondere dann, wenn es sich um thermisches Rauschen oder auch $1/f$ Rauschen handelt nur schwer beschreiben lässt; Schrot-Rauschen lässt sich beispielsweise gar nicht quantifizieren [Wag98]. Das Rauschen ist damit ein prinzipielles Problem, das immer auftritt und sich in der Regel weder komplett eliminieren noch vorhersagen lässt.

Da neben der aufwendigen Vermessung der gefertigten Prototypen nur das MMCS-Evaluationboard für zeiteffiziente Tests zur Verfügung steht, mussten wie bei den anderen Betrachtungen zuvor viele Berechnungen in einer fiktiven Testumgebung durchgeführt werden, bei der die Komponenten getrennt voneinander vermessen wurden. Das künstliche Rauschen hat die Funktion eines Zufallsgenerators, der reale Messungen ersetzen soll. Wird zum Beispiel das Reflexionsverhalten einer Probe mit Rauschen beaufschlagt, werden damit verunreinigte Proben simuliert. Die so ermittelten Werte werden für den 2. Datensatz benötigt, mit dem die Zuverlässigkeit des Gerätes bestimmt werden soll.

Der 1. Testdatensatz enthält eine Sammlung von Proben, die das spätere Gerät zuverlässig erkennen soll bzw. auf die das Gerät geeicht wird. In diesem Datensatz darf jede Probe nur einmal vorkommen. Weiterhin sollten die Proben sich nicht zu ähnlich sein, die Unterscheidbarkeit muss innerhalb der Messtoleranz MP des Gerätes liegen. Mit dem 2. Datensatz wird die Zuverlässigkeit des Gerätes ermittelt. Dieser kann beliebig viele gleiche bzw. sehr ähnliche Proben enthalten, oder auch komplett neue bzw. unbekannte Proben beinhalten, die im Testdatensatz nicht enthalten sind.

Für den Proof of Concept wurde in MATLAB (R 2011b) ein Band-Selection-Algorithmus zur Auswahl der Spektralbänder von multispektralen Systemen mit dem sich die höchste Performance-Steigerung erzielen lässt, implementiert. Das Ziel ist die Bestimmung der optimalen Kombination aus Anzahl und Lage der Bänder, die sich unter einer Beleuchtungsart mit der geg. Photodiode realisieren lassen. Mit dem Proof of Concept soll evaluiert werden, ob es mit der gewählten Sensor-Lichtquellen-Kombination möglich ist, eine beliebige Probe korrekt zuzuordnen, sofern es sich dabei um eine Probe aus dem Datenbestand handelt. Darüber hinaus ist von Interesse mit welcher Zuverlässigkeit die Zuordnung erfolgt. Bei Proben, die nicht im Datenbestand enthalten sind, wird erwartet, dass die Zuverlässigkeitsfunktion gegen 50 % konvergiert.

Band-Selection-Algorithmus

- geg. Lichtquelle
- geg. diverse Proben (Datenbank, Testchart)
- geg. n -Kombinationen, Abtastkurven

- 1. Schritt:** Messung der spektralen Bestrahlungsstärke $E(\lambda)$ der Anregungslichtquelle
- 2. Schritt:** Messung des spektralen Reflexionsverhaltens $r(\lambda)$ der Proben des Datensatzes
- 3. Schritt:** Messung der spektralen Empfindlichkeit $S_{abs}(\lambda)$ bzw. die Bestimmung des Quantenwirkungsgrades η_Q für jedes spektrale Band des multispektralen Sensors
- 4. Schritt:** Subtraktion der spektralen Empfindlichkeitskurven, erfolgt nur bei Sensoren bei denen sich diese komplett überlagern, sonst weiter mit Schritt 5
- 5. Schritt:** Bestimmung der Lage der Probe im n -dimensionalen Raum
- 6. Schritt:** Um auch fiktive Sensoren miteinander vergleichen zu können und um reale Messungen einsparen zu können, werden in diesem Schritt nun reale Messungen, die mit einem leicht verrauschten Sensor durchgeführt wurden, nachgestellt bzw. simuliert

7. Schritt: Es folgt die Bestimmung des euklidischen Abstandes ΔEA von der aktuell vermessenen Probe also der, die charakterisiert werden soll, und allen Samples aus der empirisch ermittelten Datenbank aus Schritt 5 für exakt diese Kombination aus Sensor und Beleuchtung. Bestimmt werden müssen ΔEA_{min} und $\Delta EA_{2.Kl}$

8. Schritt: Nun können diese Werte in die Zugehörigkeitsfunktion $\mu(P)$ eingetragen werden um die Zuverlässigkeit zu ermitteln und um zu bestimmen, um welche Probe es sich handelt, zumindest dann, wenn diese sich im Datensatz befindet.

Brute-Force-Schleife:

Die Schritte 5-8 werden nun für jede Kombination von spektralen Bändern für eine Beleuchtungsart über den gesamten Testdatensatz der Samples durchgeführt. Dabei werden in mehreren Durchläufen die Sensoren mit unterschiedlichem Rauschen beaufschlagt und jeweils der Mittelwert der Zuverlässigkeit berechnet. Das Optimum ist eine Kombination, bei der jede Probe immer zu 100 % Prozent korrekt zugeordnet werden kann (siehe Tab. 4).

end

Bem. zu Schritt 4:

Werden zum Beispiel bei den durchstimmbaren Photodioden drei unterschiedliche Bias-Spannungen angelegt (5, 4, 3 V), ergeben sich drei überlagernde spektrale Bänder. Nun können die Differenzen gebildet werden, also 5-4, 5-3, 4-3, dabei werden alle möglichen Kombinationen gebildet. Vorrangig soll der spektrale Verlauf untersucht werden, aus diesem Grund erfolgt eine Normierung auf gleich große Flächeninhalte. Damit wird der Einfluss des Wirkungsgrads einer Diode und der Beleuchtungsstärke beim Vergleich zwischen verschiedenen Meßsystemen aufgehoben.

Bem. zu Schritt 5:

Zur Bestimmung des Ortes im n -dimensionalen Raum wird der Vektor \vec{P} bestimmt. Für alle Proben des Testdatensatzes werden die Messungen mehrfach unter optimalen Laborbedingungen durchgeführt, um die Lage der Proben im Raum empirisch zu bestimmen. Diese so ermittelten Positionen werden in der Datenbank gespeichert. Diese gelten aber nur für exakt einen Sensor und für eine Beleuchtungsart. Wird eine Komponente verändert, muss die Bestimmung der Datenbank erneut durchgeführt werden.

Sensor	all	best	runs	combinations	μ
2_ramp_7	9	3	100	371	98.31
2_ramp_7	9	4	100	462	84.5
2_ramp_7	9	5	100	228	72.66
2_ramp_9 Cr	10	3	100	812	95.28
2_ramp_9 Cr	10	4	100	1246	78.68
2_ramp_9 Cr	10	5	100	906	60
2_ramp_9 TCO	10	3	100	812	83.24
2_ramp_9 TCO	10	4	100	1246	62.97
2_ramp_9 TCO	10	5	100	906	37.39
2_ramp_10 TCO thin	9	3	100	371	88.55
2_ramp_10 TCO thin	9	4	100	462	67.53
2_ramp_10 TCO thin	9	5	100	228	48.83
2_ramp_10 TCO thick	16	3	100	18564	82.14
2_ramp_10 TCO thick	16	4	60	75493	68.40
2_ramp_10 TCO thick	16	5	10	184250	61.93
2_ramp_11	20	3	65	74613	77.05
2_ramp_11	20	4	-	490193	-
2_ramp_11	20	5	-	-	-
3_Term_7	10	3	100	812	98.53
3_Term_7	10	4	100	1246	85.16
3_Term_7	10	5	100	906	71.21
3_Term_5	9	3	100	371	87.96
3_Term_5	9	4	100	462	64.25
3_Term_5	9	5	100	228	49.47
2_ramp_5	10	3	100	812	99.59
2_ramp_5	10	4	100	1246	93.15
2_ramp_5	10	5	100	906	77.6
2_ramp_11 redz.	15	3	100	12159	76.62
2_ramp_11 redz.	15	4	100	43677	63.15
2_ramp_11 redz.	15	5	100	91963	-

Tabelle 4 Überblick über die untersuchten Sensor-Lichtquellen Kombination und deren Wert für die Zuverlässigkeit der Charakterisierung

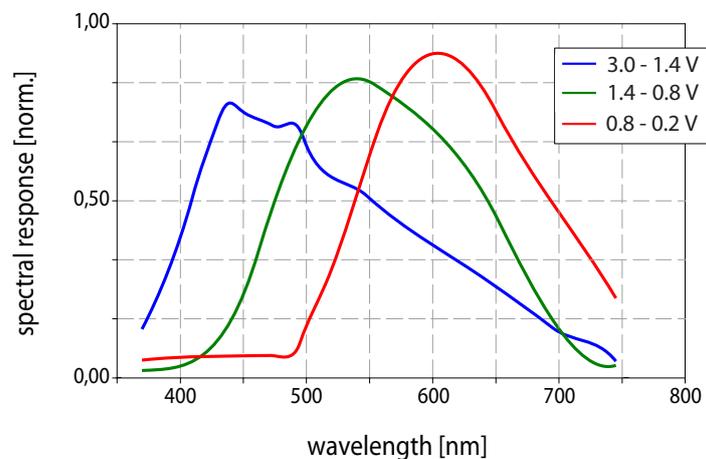


Abbildung 52 Die berechnete beste Kombination der Spektralbänder

Im letzten Schritt müssen nun noch die Erkenntnisse aus der Bewertung der externen Separation und der Zuverlässigkeit zusammengeführt werden, um die beste Kombination der spektralen Bänder zu bestimmen (siehe Tab. 5), die vollständige Tabelle befindet sich im Anhang.

Sensor	Typ	bands	$E(\lambda)$	ΔCL	$\mu(P)$
MMCS-Scan-EB1	best	3	AMx	2,78	0,88
MMCS-Scan-EB1	worst	3	Nichia	0,26	0,56
MMCS-Scan-EB1	best	3	Nichia	1,82	0,76
2 ramp_P7	best	3	AMx	2,5	0,87
2 ramp_P3	prob. opt.	3	AMx	1,05	0,94
Sony E20 CCD	org	3	AMx	1,33	0,99
Sony E20 CCD	org	3	Nichia	0,35	0,44
MMCS-Scan-EB1	best	4	AMx	5,81	0,91
3 ramp_P7	best	4	AMx	5,2	0,83
MMCS-Scan-EB1	best	5	AMx	9,47	0,89
MMCS-Scan-EB1	best	5	Norm A	21,47	0,05
4 ramp_P7	best	5	AMx	1,3	0,82
2 ramp_P11	prob. opt.	5	AMx	4	0,81
3 ramp_P11	prob. opt.	5	Nichia	0,35	0,19
5 ramp_P7	best	6	AMx	0,93	0,81
MMCS-Scan-EB1	org	7	AMx	3,22	0,85
6 ramp_P7	best	7	AMx	0,22	0,79
7 ramp_P7	all	8	AMx	0,33	0,79

Tabelle 5 Überblick über die untersuchten Sensor-Lichtquellen Kombination und deren Wert für die externe Separation ΔCL und die Zuverlässigkeit der Charakterisierung $\mu(P)$

4.9 Zusammenfassung

Multi- und hyperspektrale Systeme sind in der Regel sehr komplex, da für jede Messung immer mehrere Hundert Bänder aufgenommen werden müssen. Dieser Umstand verhinderte bislang die Verbreitung solcher Systeme. Durch die analytische Auswahl der Spektralbänder ist es möglich, mit einer minimalen Anzahl an Bändern vergleichbare Ergebnisse zu erzielen, wie bei den komplexeren hyperspektralen Verfahren.

Ausgehend von der allgemeinen Anforderung an die externe Separation eines Sensors wurde der Parameter ΔCL definiert. Für einen Sensor mit einer beliebigen Anzahl an spektralen Bändern bei einer gegebenen Stoffdatenbank unter einer Beleuchtungsart liefert die Funktion für ΔCL einen Wert zurück, der dimensionsunabhängig ein Maß für die externe Separation ist. Die externe Separation ist dabei äquivalent zur Anzahl der unterscheidbaren Materialien mit diesem Sensor. Da aber eine hohe externe Separation noch keine Aussage darüber liefert, mit welcher Zuverlässigkeit die Messung erfolgte, wurde in Anlehnung an die Zugehörigkeitsfunktion aus dem Bereich der Fuzzy Mengen der zweite Parameter $\mu(P)$ definiert. Über $\mu(P)$ kann bestimmt werden, mit welcher Wahrscheinlichkeit es sich bei der gemessenen Probe um ein Material aus der Stoffdatenbank handelt oder ob die Probe unbekannt ist, d. h. $\mu(P)$ ist ein Maß für die Zuverlässigkeit der Erkennung.

Mit der Implementierung eines analytischen Verfahrens zur Separation derjenigen spektralen Bänder, die eine hohe Informationsdichte aufweisen, konnte ein Verfahren realisiert werden, das ohne weiteres Expertenwissen vorauszusetzen als Output die beste Kombination an spektralen Bändern liefert.

5 Multivariate Analyse

Der im Kapitel 3 beschriebene Messaufbau für die Oberflächeninspektion besteht aus einer Vielzahl von Komponenten mit einer ebenso großen Menge an Parametern, die sich gegenseitig beeinflussen. Die Parameter bilden damit einen multivariaten Datensatz. Im optimalen Fall beinhaltet ein Datensatz nur vollständig linear unabhängige Werte, die insbesondere unabhängig von den Kriteriumsvariablen sein sollten. Die höchste Aussagekraft wird erreicht, wenn der Datensatz nur linear unabhängige Werte beinhaltet. In der Realität korrelieren die Kriteriumsvariablen jedoch immer zu einem gewissen Grad mit den Werten des Datensatzes, was zu einer Redundanz in der Aussagekraft führt. Zu den Kriteriumsvariablen zählen z.B. die Komplexität, die Reproduzierbarkeit oder die an die Messumgebung gestellten Anforderungen.

Zur Steigerung der Redundanzfreiheit werden über eine Hauptkomponentenanalyse (PCA) die Parameter nur noch auf einige wenige Faktoren abgebildet, die in einem hohen Maße unkorreliert sind. Durch Anwendung der multivariaten Analyse auf einen Datensatz können harte, messbare Größen auf weiche Faktoren sogenannte Randbedingungen abgebildet werden. Die verwendete Form der Variablenbindung gehört zur Gruppe der strukturentdeckenden Verfahren, damit können Zusammenhänge visualisiert werden [Bac08]. Eine Variablenbindung mittels einer multivariaten Analyse, genauer gesagt einer Faktorenanalyse, ist eine lineare Abbildung, die zu einer Reduktion von Komplexität und Redundanz führt.

Die Erkenntnisse aus der multivariaten Analyse sollen verwendet werden, um „aussichtslose“ Kombinationen von vornherein ausschließen zu können, immer verbunden mit dem Risiko, in einem lokalen Maximum „hängen zu bleiben“. Das multivariate Analyseverfahren reduziert also die Anzahl der möglichen Kombinationen und erhöht die Berechenbarkeit für Systeme mit einer hohen Anzahl an spektralen Bändern (d. h. ≥ 16).

Der im Kapitel 4 beschriebene Band-Selection Algorithmus kann aufgrund der angewendeten brute force Methodik nur bei multispektralen Systemen mit wenigen Bändern (<16) angewendet werden kann. Danach sinkt die Berechenbarkeit. Die Komplexität für ein multispektrales System, welches n Spektralbänder zur Verfügung stellt, für die die beste Kombination von k Bändern mit der höchsten Informationsdichte bestimmt werden soll, liegt bei:

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{(n-k)! \cdot k!} \quad (5.1)$$

Dabei gilt für zwei Bänder a, b die Bedingung, dass: $\{a, b\} = \{b, a\}$. Die Anzahl der möglichen Kombinationen entspricht damit einer Permutation ohne Wiederholung [Rad00].

5.1 Vorgehen

Die multivariate Analyse soll an einem Beispiel mit nur wenigen Parametern veranschaulicht werden. Ausgewählt wurden der spektrale Verlauf einer Lichtquelle, die Homogenität einer Probe, die spektrale Empfindlichkeit eines Sensors, der Einfluss von Streulicht, Wellenlängendrift der Lichtquelle und die wirtschaftlichen Kosten. Daraus ergibt sich ein umfangreicher multivariater Datensatz, dessen aktuelle Größe über 5000 Einträge umfasst. Ein Teil des Datensatzes befindet sich im Anhang. Ein Eintrag beinhaltet folgende Werte:

- x_1 unterschiedliche Lichtquellen
- x_2 Homogenität der Probe bzw. Einfluss der Verpackung (div. Folien)
- x_3 spektrale Empfindlichkeit (div. Sensoren)
- x_4 Messgeometrie (45/0 oder 8/d)
- x_5 Rauschen der Beleuchtung, d.h. Streulicht (+ 10% AM1,5)
- x_6 Rauschen im Sensor, MP Streuverhalten
- x_7 Wellenlängendrift der Lichtquelle
- x_8 Anzahl der Spektralbänder, Drei- bzw. n-Bereichsmessung
- x_9 Komplexität bzw. monetäre Kosten

Dabei werden für jede der K Sensor-Lichtquellen-Kombinationen die Werte für x_{k1} bis x_{k9} abgespeichert mit $x_{ki} \in \{0, \dots, 10\}$.

Der Wert für x_i ergibt sich aus dem euklidischen Abstand ΔEA . x_1 wird für unterschiedliche Lichtquellen bestimmt. Ein hoher Wert für x_1 bedeutet so gut wie keine Abweichung. Analog gilt für die anderen Parameter:

- $x_2 = \max$ höchste Homogenität der Probe
- $x_3 = \max$ geringste Abweichung
- x_4 Wert ist konstant für 45°/0° Geometrie
- $x_5 = \max$ Messung in der Dunkelkammer
- $x_6 = \max$ thermodynamisches Gleichgewicht
- $x_7 = \max$ kein Wellenlängendrift
- x_8 Anzahl der Spektralbänder
- $x_9 = \max$ geringste monetäre Kosten/Aufwand

Um aus der Vielzahl der Parameter Zusammenhänge in Bezug zu den Kriteriumsvariablen bestimmen zu können, wird eine Faktorenanalyse auf den Datensatz angewendet [Bac08]. Die Faktorenanalyse reduziert die Komplexität auf nur noch 2 Faktoren bzw. Kriteriumsvariablen (z.B. Farbwiedergabe und Wirtschaftlichkeit). Um zu prüfen, ob das gewählte Verfahren aus dem Bereich der hyperspektralen Bildgebung [Gra07] aussagekräftige Ergebnisse für unsere Problemstellung liefert, wurde im ersten Schritt mit Kombinationen gearbeitet, deren Kriteriumsvariablen sich auch ohne vorherige Analyse grob abschätzen lassen.

Für 19 unterschiedliche Kombinationen aus einer Lichtquelle (schwarzer Strahler, Norm A, D65 Led, Halogen und Leuchtstoffröhre), aus dem Sensor (siehe Abb. 53) und den zu vermessenden Proben (x-Rite Color Checker, diverse Pulverproben mit einem $\Delta EA < 0,5$) wurden Messungen durchgeführt und die Werte für die Parameter x_1 bis x_9 in der Mittelwertmatrix M abgespeichert.

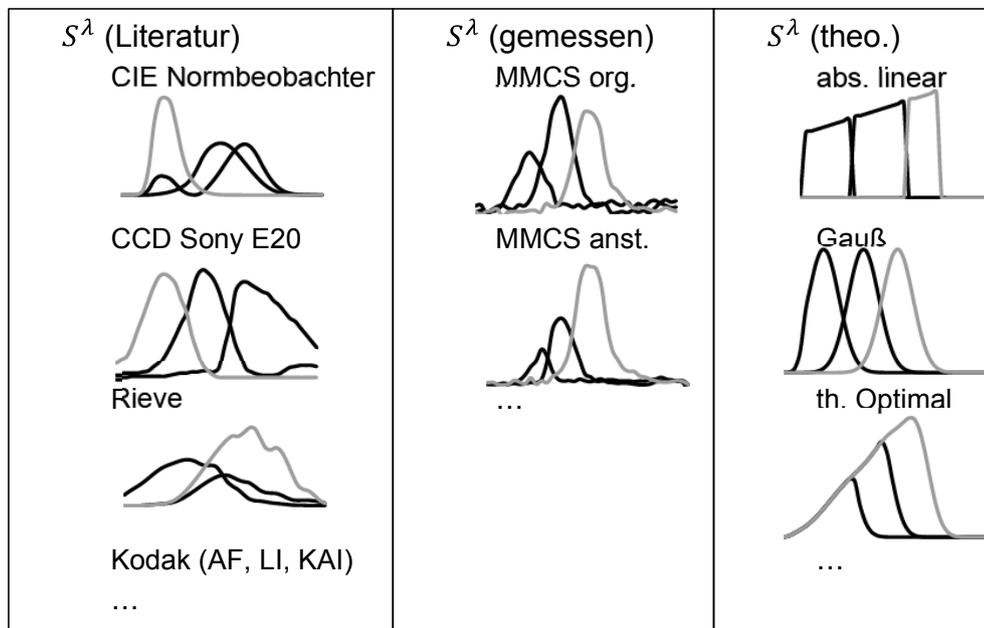


Abbildung 53 Beispiele für den Verlauf der spektralen Empfindlichkeit S^λ von diversen Sensoren mit jeweils drei spektralen Bändern

Die Strahlungsleistungsdichte der Lichtquellen, das Reflexionsverhalten einer Probe und die spektrale Empfindlichkeit eines Sensors wurden in Abhängigkeit der Wellenlänge separat gemessen. Zusätzlich wurden weitere spektrale Empfindlichkeiten simuliert. Um viele unterschiedliche Sensoren miteinander vergleichen zu können, braucht man trivialerweise viele unterschiedliche Sensor-Lichtquellen-Kombinationen. Dieser zeitintensive Prozess wurde durch die Wahl der fiktiven Messumgebung verkürzt. Darüber hinaus wird die Möglichkeit für einen späteren top down Entwurf geschaffen.

Aus den gemessenen diskreten Werten kann der Photostrom berechnet werden. Über die Werte für den Photostrom eines spektralen Bandes kann der Vektor \vec{P} bestimmt werden, der einen eindeutigen Ort im Modell des Farbraums repräsentiert. Variiert man nun beispielsweise die Lichtquelle, bekommt man weitere Positionen im Farbraum hinzu. Im ersten Schritt wird festgelegt, wie ein idealisierter Messaufbau aussehen könnte. Im Bereich der koloristischen Analyse gilt ein schwarzer Strahler nach Planck als ideale Lichtquelle, der CIE-Normbeobachter als idealer Sensor und das Normweiß vom Munsell ColorChecker als ideale Probe [Hun06]. Zu allen anderen Punkten wird nun der euklidische Abstand ΔEA berechnet, um so die Auswirkungen der unterschiedlichen Parameter bei einer Messung quantitativ bestimmen zu können.

Die Skalierung muss so gewählt bzw. angepasst werden, dass die Vergleichbarkeit der unterschiedlichen Strahlungsquellen gewährleistet bleibt. Dies erfolgt über die Normierung der Strahlungsleistungsdichte. Hierbei muss darauf geachtet werden, dass der spektrale Verlauf erhalten bleibt, da dieser bauteilspezifisch ist. Bei den bisherigen Berechnungen waren die Werte für die spektrale Bestrahlungsstärke und die spektrale Empfindlichkeit auf den Wert 1 normiert worden. Für die Bestimmung der Werte für die Mittelwertmatrix erfolgt die Normierung auf gleich große Flächeninhalte.

5.2 Strukturierung und Gruppierung der Parameter

Die erste Gruppe umfasst alle Parameter, die ΔEA maßgeblich beeinflussen. Dabei ist allerdings zu klären, welche Kombination aus Sensor und Beleuchtung als Bezugspunkt verwendet werden soll. Zu den Parametern der ersten Gruppe gehören die spektrale Bestrahlungsstärke diverser realer Lichtquellen, die spektrale Empfindlichkeit realer und fiktiver Sensoren und die Anzahl der spektralen Bänder. Die zweite Gruppe umfasst alle Parameter, die maßgeblich die Reproduzierbarkeit der Messung beeinträchtigen. Die letzte Gruppe umfasst alle Parameter, die maßgeblich die Kosten bzw. die Komplexität abbilden.

Parameter die ΔEA beeinflussen:

- spektrale Bestrahlungsstärke (div. Lichtquellen)
- spektrale Empfindlichkeit (div. Sensoren)
- Sampling Points (Dreibereichsmessung -> n-Bereichsmessung)

Parameter die die Zuverlässigkeit $\mu(P)$ beeinträchtigen:

- Homogenität der Probe
- Oberflächenstruktur (Matt -> Glanz)
- Einfluss von Verpackungen (div. Folien)
- Umgebungsbedingungen (z.B. Streulicht)
- Messgeometrie (Verkipfung, Luftspalt)
- Wellenlängendrift
- Rauschen im Sensor (thermisch, ...)
- Auflösung/Diskretisierung (AC/DC-Wandlung)

Parameter die die Kosten bzw. Komplexität abbilden:

- monetäre Kosten (div. Lichtquellen)
- monetäre Kosten (div. Sensoren)
- Anforderungen an die Messumgebung (Dunkelkammer, Temperaturstabilität, ...)
- Handhabung, Betrieb, Transportabilität, Energiebedarf, Lebensdauer, Störfestigkeit, ...

5.3 Multivariate Analyse

Im ersten Schritt wird die Korrelationsmatrix R aufgestellt, um eine hohe Redundanzfreiheit der Parameter zu gewährleisten. Ziel ist eine möglichst hohe Unabhängigkeit der Daten. Aus den Werten der Parameter $x_1 - x_9$ für K unterschiedliche Sensor-Lichtquellen-Kombinationen kann die Korrelationsmatrix R bestimmt werden. Für die Korrelation zwischen den Parametern x_1 und x_2 gilt:

$$r_{x_1, x_2} = \frac{\sum_{k=1}^K ((x_{k1} - \bar{x}_1) \cdot (x_{k2} - \bar{x}_2))}{\sqrt{\sum_{k=1}^K (x_{k1} - \bar{x}_1)^2 \cdot \sum_{k=1}^K (x_{k2} - \bar{x}_2)^2}} \quad (5.2)$$

Von allen Korrelationswerten r_{x_i, x_j} wird der Cosinus gebildet und in der Korrelationsmatrix R abgespeichert (siehe Tab. 6). Bei der Aufstellung der Korrelationsmatrix R scheiden einige Parameter aus. Grund des Ausscheidens ist die Division durch Null. Die Korrelationswerte r_{x_i, x_j} liegen im Intervall zwischen $[0,1]$, wobei der Wert 0 für zwei vollständig linear unabhängige Parameter x_i und x_j steht.

	Lichtquellen	Homogenität	Sensoren	Messgeometrie	Streulicht	Readout Noise	Wellenlängen Drift	Sampling Points	Komplexität
	Γ_{x1}	Γ_{x2}	Γ_{x3}	Γ_{x4}	Γ_{x5}	Γ_{x6}	Γ_{x7}	Γ_{x8}	Γ_{x9}
Γ_{x1}	1								
Γ_{x2}	-0,05	1							
Γ_{x3}	-0,24	-0,19	1						
Γ_{x4}	/	/	/	1					
Γ_{x5}	0,07	0,05	-0,03	/	1				
Γ_{x6}	/	/	/	/	/	1			
Γ_{x7}	-0,13	0,12	0,60	/	-0,04	/	1		
Γ_{x8}	/	/	/	/	/	/	/	1	
Γ_{x9}	-0,66	0,01	0,18	/	-0,21	/	0,08	/	1

Tabelle 6 Korrelationsmatrix R ; die Parameter x_1 bis x_9 sind bis zu einem gewissen Maße untereinander korreliert, Kombinationen mit einer hohen Korrelation scheiden aufgrund der Division durch Null aus

Faktorwerte Plot

Im zweiten Schritt werden die verbleibenden Parameter nur noch auf zwei Faktoren abgebildet (z.B. Farbtreue und Wirtschaftlichkeit) und grafisch in einem Korrelationskreisdiagramm dargestellt (siehe Abb. 54). Die Position von x_1 kann willkürlich festgelegt werden, in unserem Beispiel 45° . Die Korrelationswerte für die verbleibenden Parameter können aus der Korrelationsmatrix R entnommen werden. Zur Bestimmung der Position der Parameter x_2 bis x_9 wird der Arcus Cosinus gebildet. Der Winkel zwischen den Parametern im Korrelationskreisdiagramm ist ein Maß für die Korrelation. Ein Winkel von 90° bedeutet vollständige lineare Unabhängigkeit.

	r_{x1}	$\arccos(r_{x1})$
r_{x1}	1	0°
r_{x2}	-0,05	$92,86^\circ$
r_{x3}	-0,24	$103,89^\circ$
r_{x5}	0,07	$85,99^\circ$
r_{x7}	-0,13	$97,47^\circ$
r_{x9}	-0,66	$131,3^\circ$

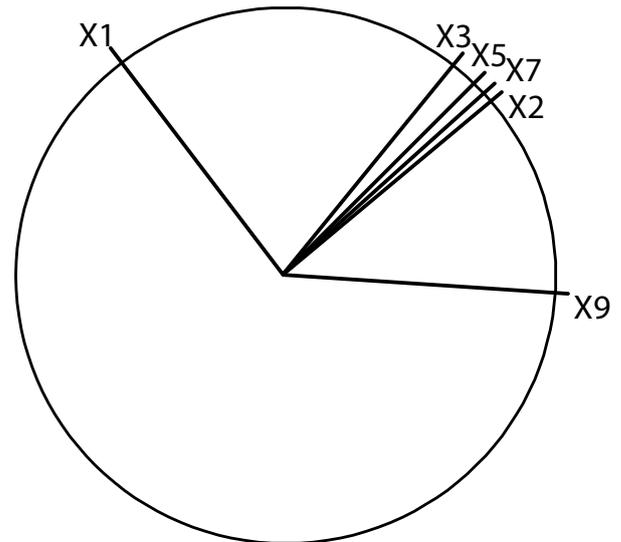


Abbildung 54 Korrelationskreisdiagramm, der Winkel zwischen den Parametern x_1 bis x_9 ist ein Maß für die Korrelation

Variablenbindung

Die durch eine Variablenbindung zu realisierende Hauptkomponentenanalyse ist eine lineare Transformation aller multivariaten Parameter der Mittelwertmatrix M . Dies bedeutet, dass die verbleibenden Parameter x_1 bis x_9 auf einige wenige Faktoren reduziert werden sollen. Die Variablenbindung führt zwangsläufig zu einer manuellen Gewichtung der Parameter über die Positionierung der Faktoren. Da x_9 in dem gewählten Beispiel als einziger Parameter die monetären Kosten bzw. den Aufwand berücksichtigt, wird der Faktor $F2$ (Wirtschaftlichkeit) mit x_9 annähernd gleichgesetzt (135°). Der Faktor $F1$ (Farbtreue) wird mittig (45°) zwischen x_1 und der Gruppe x_2, x_3, x_5 und x_7 platziert, um den Einfluss der Parameter gleichwertig zu berücksichtigen (siehe Abb. 55). Daraus folgt in diesem Beispiel zur Bestimmung der Faktormatrix A :

$$F_{1,x_j} = \cos \left(\cos^{-1} \left(r_{x_1,x_j} \right) - 45^\circ \right) \tag{5.3}$$

$$F_{2,x_j} = \cos \left(\cos^{-1} \left(r_{x_1,x_j} \right) - 135^\circ \right)$$

	F1	F2
x₁	0,707	-0,707
x₂	0,64	0,768
x₃	0,539	0,842
x₅	0,758	0,652
x₇	0,65	0,759
x₉	-0,167	0,986
$\sum F_x \geq 1$	true	true

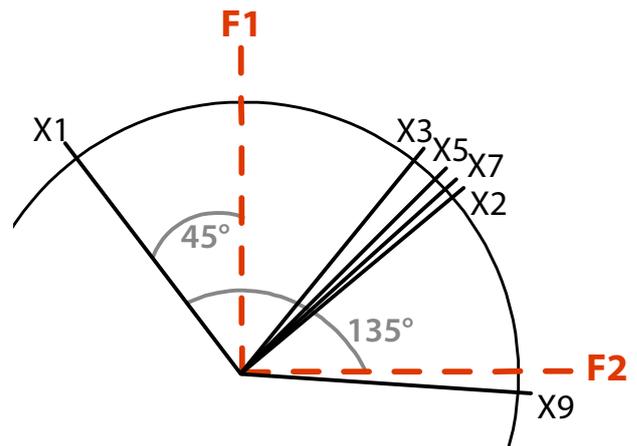


Abbildung 55 Korrelationskreisdiagramm mit eingezeichneten Faktorwerten, die Position wurde entsprechend den Kriteriumsvariablen gewählt

Bei der Variablenbindung werden nur diejenigen Faktoren extrahiert, die einen bedeutenden Teil der Varianz erklären und daher einen hohen Eigenwert $\sum F_x$ besitzen. Dies ist bei dem ersten Faktor immer der Fall, in der Regel auch bei der Addition weiterer Faktoren, wenngleich die Eigenwerte dann abnehmen. Ab einem gewissen Faktor verharrt die zusätzliche Varianz, die durch jeden ergänzten Faktor erklärt wird, auf einem niedrigen Niveau. Nach dem Kaiser-Guttman-Kriterium [Bac08] muss der Eigenwert $\sum F_x$ bei beiden Faktoren jeweils ≥ 1 sein, damit überprüft werden kann, ob die richtige Anzahl der Faktoren gewählt wurde. Denn neben der Positionierung der Faktoren spielt die gewählte Anzahl eine entscheidende Rolle.

Permutation bei der Variablenbindung

Bei der Faktormatrix A wurde bislang eine Variablenbindung auf lediglich zwei Faktoren angewendet. Dies ist auf die Dauer zu uninteressant und nicht aussagekräftig. Trivial ist, dass weitere Faktoren hinzugenommen und rotiert werden müssen, um neben den Kosten und der Reproduzierbarkeit auch andere Zusammenhänge untersuchen zu können.

5.4 Streudiagramme

Zur Standardisierung der Mittelwertmatrix M in die standardisierte Matrix Z wird auf alle Werte folgende Operation angewendet:

$$z_{kj} = \frac{x_{kj} - \bar{x}_j}{\sqrt{\frac{1}{k} \bar{x}_j}} \tag{5.4}$$

Danach kann aus der standardisierten Matrix Z und der Faktormatrix A die Matrix P berechnet werden:

$$P = Z \cdot A(A^T \cdot A)^{-1} \tag{5.5}$$

Die Werte der Faktormatrix P können in ein xy-Koordinatensystem eingetragen werden und ergeben ein 2D-Streudiagramm (siehe Abb. 56). Jede der Achsen repräsentiert dabei einen Faktorwert. Auf der x-Achse kann z. B. die Wirtschaftlichkeit und auf der y-Achse die Farbtreue aufgetragen werden. Ein negativer Faktorwert besagt, dass ein unterdurchschnittlicher Wert in Bezug auf die Gesamtheit aller Messungen vorliegt. Bezogen auf die y-Achse heißt dies, dass die Farbwiedergabe schlechter als der Durchschnitt ist. Analog dazu bedeutet ein positiver Faktorwert eine überdurchschnittlich gute Farbtreue. Daraus folgt, dass die optimale Kombination aus Lichtquelle und spektraler Empfindlichkeit bezogen auf einen explizit vermessenen Probensatz im 1. Quadranten liegt. In dieser und in den folgenden Abbildungen wird der Bereich der optimalen Sensor-Lichtquellen-Kombination im Sinne der Fragestellung durch eine grün schraffierte Fläche hervorgehoben. Wirtschaftlich betrachtet befinden sich im grünen Quadranten alle Sensor-Lichtquellen-Kombinationen, die realisierbar sind.

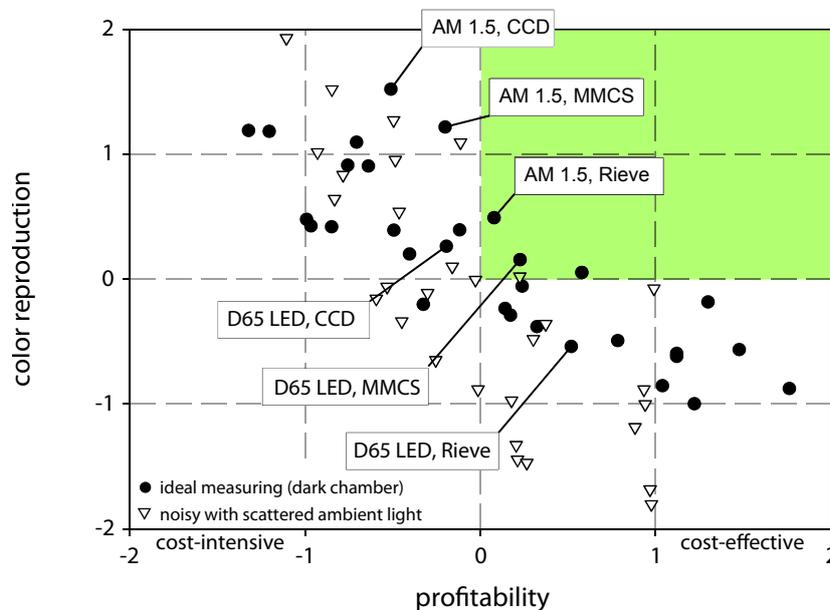


Abbildung 56 Streudiagramm zur Gegenüberstellung von Sensor-Lichtquellen-Kombinationen in Bezug auf die Farbwiedergabe und die monetären Kosten

Vorgehen

Mithilfe der multivariaten Analyse ist es möglich, den Einfluss verschiedener Parameter bezogen auf die Kriteriumsvariablen zu untersuchen. Die folgenden 2D-Streudiagramme stellen jeweils zwei Faktorwerte dar. Alle Berechnungen beruhen auf dem zuvor beschriebenen multivariaten Datensatz. In den folgenden Streudiagrammen stellt ein negativer Faktorwert ein unterdurchschnittliches Ergebnis in Bezug auf die Gesamtheit aller Werte dar. Ein positiver Faktorwert weist analog dazu auf ein überdurchschnittlich gutes Ergebnis hin.

In den im weiteren Verlauf abgebildeten Streudiagrammen wurden folgende Einflüsse untersucht:

- Einfluss von externem Rauschen (Streulicht), z. B. wenn das Messgerät nicht plan aufliegt oder wenn das Licht der Anregungslichtquelle sich mit dem Umgebungslicht vermischt
- Einfluss auf die externe Separation in Abhängigkeit der Anzahl der verwendeten Bänder und Beleuchtungsarten, die gleichmäßige Verteilung der spektralen Bänder und der Abstand zwischen den Bändern bzw. der Grad der Überlappung
- Gegenüberstellung von Sensoren mit einer hohen externen Separation und gängigen Farbsensoren mit einer hohen Farbtreue
- Gegenüberstellung von Sensoren mit einer hohen Messgenauigkeit im Verhältnis zu den Kosten sortiert nach der Lichtart und der Sensortechnologie
- Einfluss der abfallenden Flanke eines spektralen Bandes, Variation von Original, unendliche Steilheit, linear abfallend, gauß'sche Glockenfunktion und exponentiell

Erhalt der Skalierung

Bei der Anwendung der multivariaten Analysis auf den Datensatz wurde geprüft, ob die Skalierung der Parameter unverändert bleibt. Im Beispiel im Anhang (siehe 7.2) wurden für eine fiktive Kombination aus Beleuchtung, Sensor und Probe nacheinander alle Parameter von x_1 bis x_9 im Intervall $[0, 10]$ variiert. Anschließend wurde das Ergebnis als 2D-Streudiagramm dargestellt. Zusätzlich wurden die Faktoren von um 360° rotiert. Es konnten dabei jedoch keine Verzerrungen bei der Skalierung festgestellt werden.

Im ersten Beispiel (siehe Abb. 57) wurde der Einfluss verschiedener Lichtquellen in Abhängigkeit von Sensoren mit einer unterschiedlichen Anzahl an spektralen Bändern bezogen auf die externe Separation veranschaulicht. Auf der x-Achse wurden die Anzahl der verwendeten Spektralbänder aufgetragen und auf der y-Achse das Maß für die externe Separation ΔCL . Verglichen wurden Sensoren mit 3 bis 8 Spektralbändern.

Der grüne Quadrant markiert diejenigen Sensor-Lichtquellen-Kombinationen, die mit nur wenigen Bändern (3-4) eine hohe externe Separation erzielen. Auffällig ist, dass in diesem Bereich nur Kombinationen enthalten sind, bei denen die Lichtquelle über ein kontinuierliches breitbandiges Spektrum verfügt, im Gegensatz zu solchen Lichtquellen mit einem diskontinuierlichen Spektrum.

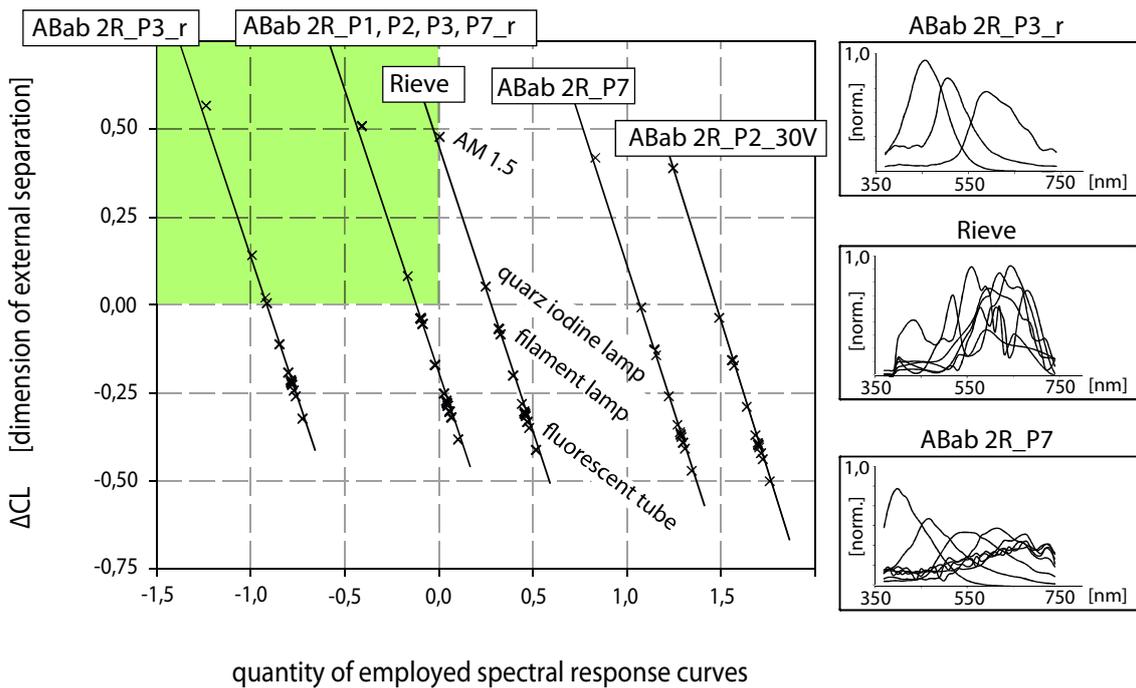


Abbildung 57 Streudiagramm zur Veranschaulichung des Einflusses der Lichtquelle und der Anzahl der Spektralbänder auf die externe Separation

Im zweiten Beispiel (siehe Abb. 58) wurde der Einfluss der gleichmäßigen Verteilung der Spektralbänder in Abhängigkeit von verschiedenen Sensor-Lichtquellen-Kombinationen bezogen auf die externe Separation veranschaulicht. Die Verteilung der Spektralbänder gibt Aufschluss darüber, in welchen Intervallschritten das Spektrum einer reflektierenden Probe abgetastet werden sollte. Auf der x-Achse wurde das Maß für die externe Separation ΔCL aufgetragen und auf der y-Achse der arithmetische Mittelwert über den Abstand zwischen den spektralen Bändern.

Der grüne Quadrant markiert die Sensor-Lichtquellen-Kombinationen, die mit eng beieinanderliegenden Bändern eine hohe externe Separation erzielen. Auffällig ist, dass aus koloristischer Sicht vermeintlich gute Sensor-Lichtquellen-Kombinationen, wie etwa der Kodak full frame CCD bei Sonnenlicht (AM 1.5) eine unterdurchschnittliche externe Separation aufweisen. Dies ist vermutlich der Optimierung des Sensors für Anwendungen in der photorealistischen Wiedergabe geschuldet.

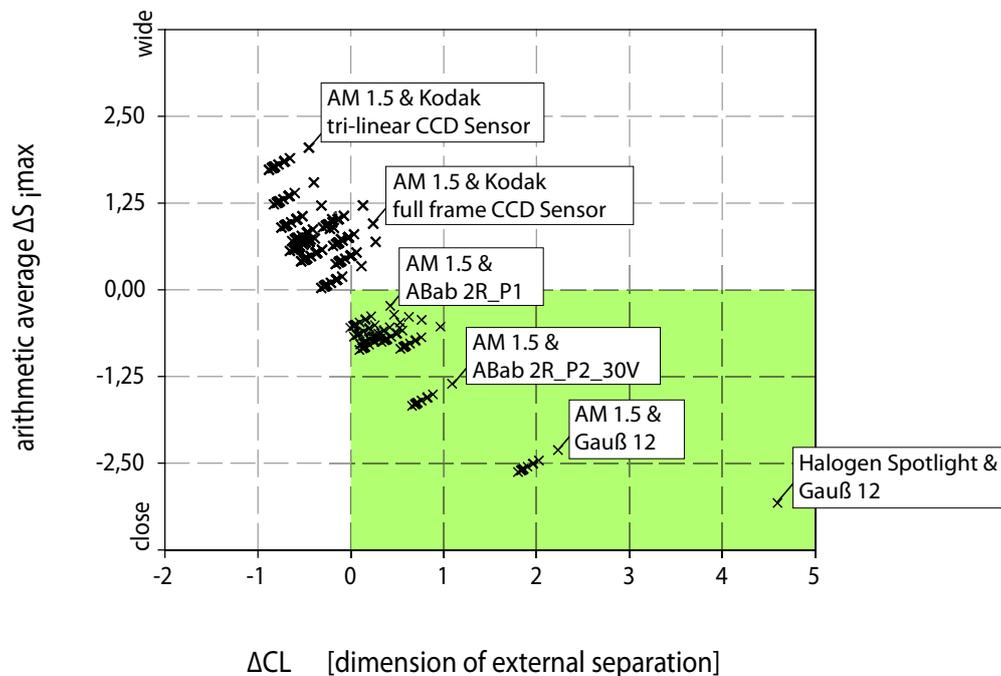


Abbildung 58 Streudiagramm zur Veranschaulichung des Einflusses der gleichmäßigen Verteilung der Spektralbänder auf die externe Separation

Im dritten Beispiel wurden Sensor-Lichtquellen-Kombinationen mit einer guten Farbwiedergabe denen mit einer hohen externen Separation gegenübergestellt. Auf der x-Achse wurde das Maß für die externe Separation ΔCL aufgetragen und auf der y-Achse der euklidische Abstand ΔEA bezogen auf den CIE-Normbeobachter. Es wurde bereits in der Einleitung erwähnt, dass es mit gängigen Farbsensoren kaum möglich ist, Materialien zu charakterisieren. Farbsensoren liefern demnach gute Ergebnisse für die koloristische Analyse. Zur eindeutigen optischen Beschreibung und damit für Anwendungen zur Unterscheidbarkeit zwischen Proben sind diese eher ungeeignet, aufgrund der zu geringen externen Separation (siehe Abb. 59). Der grüne Quadrant markiert die Sensor-Lichtquellen-Kombinationen, welche eine hohe externe Separation aufweisen.

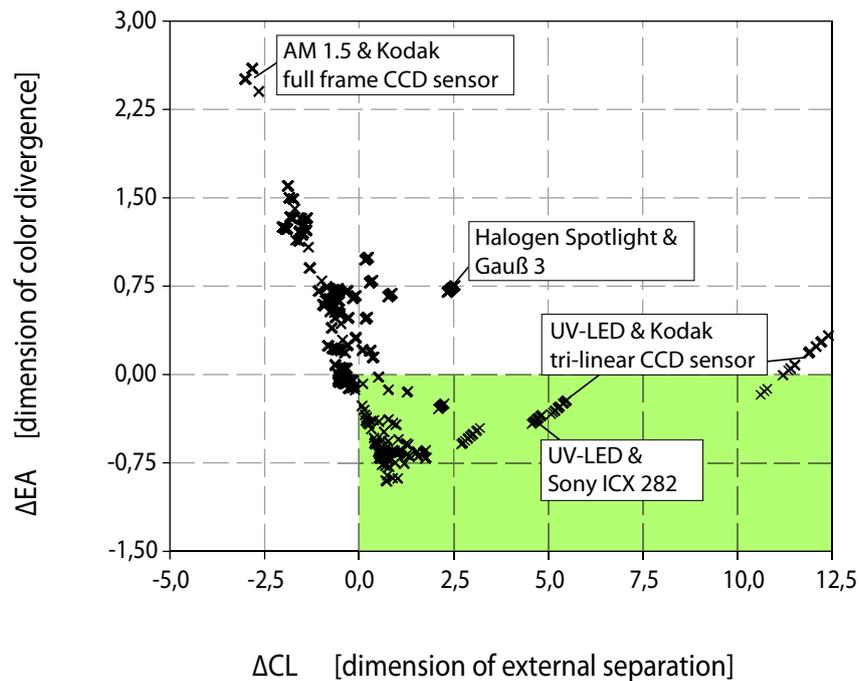


Abbildung 59 Streudiagramm zur Gegenüberstellung von Sensoren mit einer geringen Abweichung zum CIE-Normbeobachter ΔEA und Sensoren mit einer hohen externen Separation ΔCL

Nachdem in den vorhergehenden Beispielen die optimale Anzahl der Spektralbänder und Positionierung zueinander, sowie der Einfluss von Lichtquellen und des Rauschens untersucht wurde, soll im letzten Beispiel der Einfluss der abfallenden Flanke eines spektralen Bandes untersucht werden (siehe Abb. 60). Auf der x-Achse wurde die Wirtschaftlichkeit aufgetragen und auf der y-Achse die Farbtreue. Variiert wurde die abfallende Flanke ausgehend vom originalen Verlauf über unendlich stark abfallend, linear abfallend, exponentiell abfallend und entsprechend einer gauß'schen Glockenfunktion. Der grüne Quadrant markiert die Sensor-Lichtquellen-Kombinationen, die aus wirtschaftlicher Sicht die beste Farbwiedergabe und die höchste Störfestigkeit bieten.

Auffällig ist, dass Sensoren, deren spektrale Bänder eine hohe Kantensteilheit aufweisen, eine gute bis sehr gute Farbwiedergabe erzielen. Daher schneidet die Multispektral-Diode nach P. Rieve [Rie00] mit ihren sich überlagernden breitbandigen spektralen Bändern im Vergleich zum MMCS-Sensor schlechter ab. Beim MMCS-Sensor handelt es sich um einen Multifarbsensor, bei dem die scharfe Trennung zwischen den spektralen Bändern durch Filter realisiert wird (siehe 7.3). Mit der Kantensteilheit sinkt zudem der negative Einfluss des Rauschens auf die Farbwiedergabe.

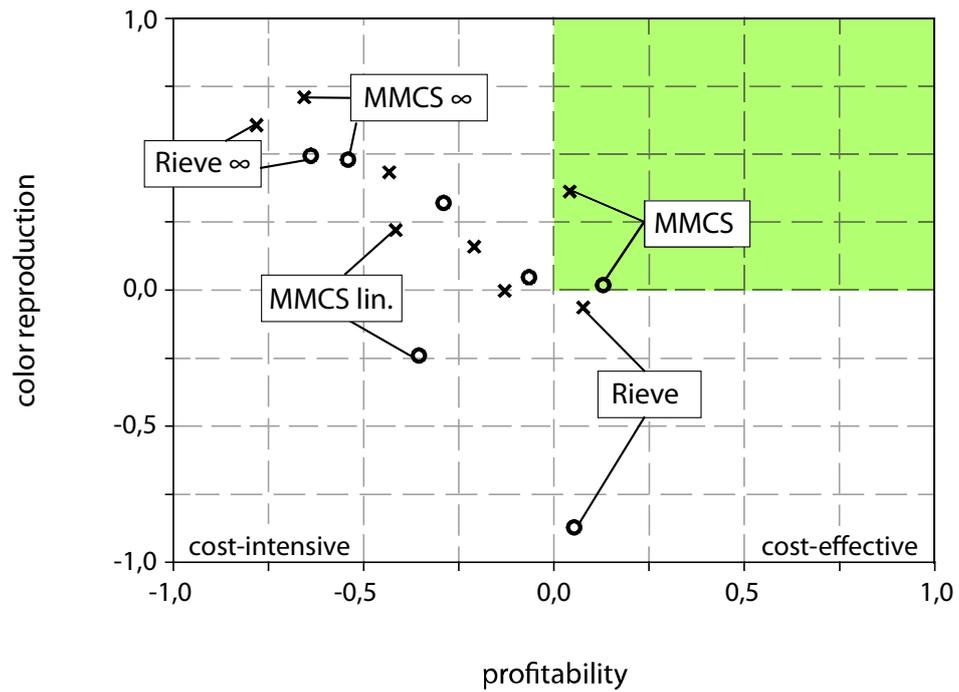


Abbildung 60 Streudiagramm zur Veranschaulichung des Einflusses der abfallenden Flanke eines spektralen Bandes und der monetären Kosten auf die Farbwiedergabe

5.5 Zusammenfassung

Die multivariate Analyse ist ein wichtiges Werkzeug für das Reengineering von multispektralen Systemen. Mit den gewonnenen Erkenntnissen ist es möglich, „aussichtslose“ Sensor-Lichtquellen-Kombinationen frühzeitig, also noch vor der Fertigung, zu erkennen, und diese dann von weiteren Untersuchungen auszuschließen. Damit kann die Anzahl der möglichen Kombinationen reduziert werden und es steigt die Berechenbarkeit von Systemen mit einer hohen Anzahl an spektralen Bändern.

Aus dem ersten Beispiel für ein Streudiagramm geht hervor, dass Sensor-Lichtquellen-Kombinationen mit nur wenigen spektralen Bändern eine hohe externe Separation erzielen. Natürlich immer unter der Voraussetzung, dass die Anregungslichtquelle über ein kontinuierliches breitbandiges Spektrum verfügt. Aus den Beispielen 2 und 4 geht zudem hervor, dass die spektralen Bänder sich nur bis zu einem gewissen Grad überlappen sollten und dass die Kantensteilheit möglichst hoch sein sollte. Insbesondere die letzten beiden Untersuchungen beinhalten wichtige Erkenntnisse für den jeweils nächsten Evaluationsschritt der Modellierung von multispektralen Photodioden als zeiteffiziente Ergänzung zur klassischen elektrischen Modellierung, welche sonst mit einer sorgfältigen numerischen Modellierung und umfangreichen Parameterstudien verbunden wäre.

6 Zusammenfassung

Die Entwicklungen der multi- und hyperspektralen Systeme im Bereich der zivilen Sicherheit haben neue Möglichkeiten bezüglich der mobilen Probenentnahme sowie hinsichtlich der schnellen Detektion zur Analyse vor Ort geschaffen. Insbesondere die jüngsten Entwicklungen im Bereich der optischen Detektoren bzw. Farbsensoren und die kontinuierliche Steigerung der Rechenleistung von Mikroprozessoren hatten und haben einen enormen Einfluss auf die Methoden der koloristischen Analyse.

Die Anforderung, die an ein solches System gestellt wird, ist, dass in einem möglichst einfachen Schnelltest ein Anfangsverdacht erhärtet werden kann, um eingehende gerichtsverwertbare Untersuchungen zu rechtfertigen. Angenommen, eine Kontrollperson kann nicht eindeutig bestimmen, ob unzulässige Gegenstände, Flüssigkeiten, Aerosole oder Gele (LAG) im Handgepäck mitgeführt werden. Mithilfe des Schnelltests kann der betroffene Gegenstand zurückgewiesen werden oder es erfolgt eine erneute Kontrolle, bis ein zufriedenstellendes Ergebnis erzielt wird. Dabei sollten Sicherheitskontrollen beispielsweise an Flughäfen nicht länger als unbedingt notwendig dauern. Die Ergebnisse sollten innerhalb weniger Sekunden vorliegen und Kombinationsnachweise sollten möglich sein, d. h. die Verwendbarkeit in zeitkritischen Anwendungen, die einen hohen Durchsatz erfordern, sollten zu realisieren sein. Das Messverfahren sollte nur geringe Ansprüche an die Umgebungsbedingungen stellen, um nahezu unabhängig von hoch spezialisierten Laborumgebungen zu sein.

Für das im Rahmen dieser Arbeit gewählte Anwendungsszenario der End-to-End Journey wurden die Leistungsanforderungen der European Civil Aviation Conference (ECAC) zugrunde gelegt. Die in der EU-Verordnung Nr. 185/2012 geregelte Umsetzung der ECAC-Leistungsanforderungen enthält Maßnahmen die gemeinsame Grundstandards in der Luftsicherheit ermöglichen. Demnach sind bei den oben genannten Kontrollen des Handgepäcks zur Sicherung von Luftfahrzeugen technische Maßnahmen aller Art zulässig: also von Röntgengeräten, über Sprengstoffdetektoren (EDS-Geräte) und Teststreifen bis hin zur Geschmacksprüfung oder die Prüfung auf der Haut als zusätzliches Mittel. Wichtig in diesem Zusammenhang sind Verknüpfung von Beobachtungen in der Praxis zur Hinführung eines zugrunde liegenden Systems als ein sinnvolles Hilfsmittel. Das Ziel ist die Entwicklung eines Systems zur Verbesserung und Ergänzung der aktuell verfügbaren technischen Maßnahmen. Oft werden die notwendigen Maßnahmen nicht immer in letzter Konsequenz umgesetzt, sodass multispektrale Systeme in dem gewählten Anwendungsszenario in der Sicherheitstechnik immer nur eine Ergänzung darstellen können. Ein System sollte dabei helfen, zu einem für den Kontrolleur zufriedenstellenden Ergebnis zu kommen, welches die Grundlage für die getroffene Entscheidung bei einer Kontrolle des Handgepäcks nachvollziehbar macht. Ein Problem stellt in diesem Zusammenhang das menschliche „Gottvertrauen“ in die Technik in Bezug auf die angenommene Unfehlbarkeit. Um den entgegen zu wirken, sollte stets im Bewusstsein behalten werden, dass eine Messung immer nur den Ausschlag für eine getroffene Entscheidung geben kann, aber niemals die eigentliche Entscheidung vorwegnehmen sollte.

Ziel der vorliegenden Dissertation ist es, analytisch dazulegen, inwiefern die Steigerung der Messgenauigkeit und Performance der zerstörungsfreien Charakterisierung von Materialien anhand des Reflexionsverhaltens als eine sinnvolle Ergänzung zu den in der EU-Verordnung Nr. 185/2012 genannten Methoden gelten kann.

Vergleicht man hierzu exemplarisch drei etablierte Schnelltestverfahren auf der Basis von chemischen, chemisch koloristischen und spektroskopischen Untersuchungen, zeigt sich, dass die ersten beiden mit Teststreifen durchgeführten Methoden nur mäßig performant sind. Ein Grund hierfür ist, dass jeweils ein Teil der Probe zerstört und in Lösung gebracht werden muss. Dieser Arbeitsschritt erfordert geschultes Personal. Zudem kann es, wenn der Farbumschlag nicht eindeutig ist, zu mehrdeutigen Testergebnissen kommen. Die spektroskopische Messung ermöglicht als derzeitige einzige Methode eine zerstörungsfreie Analyse, bei der die Ergebnisse nach wenigen Sekunden vorliegen, ohne dass mit der Probe hantiert werden muss. Basis für die Charakterisierung ist das von einem Material reflektierte bzw. absorbierte Licht, das dadurch eine eindeutige spektrale Signatur erhält. Die Messungen nach der spektralen Methode erfolgen mit einer Auflösung von 10 nm oder darunter. Bei den etablierten spektroskopischen Systemen führt die dem Sensor vorgeschaltete Optik zur spektralen Aufteilung des einfallenden Lichtes oft zu unhandlichen und teuren Geräten, die damit für den mobilen Einsatz nur bedingt geeignet sind. Dieser Umstand verhinderte bislang die Verbreitung solcher Meßsysteme. Zur Steigerung der Performance sollten diese Systeme folglich kompakt, schnell, benutzerfreundlich und kosteneffizient sein.

Gängige spektroskopische Systeme realisieren die spektrale Zerlegung meist über Sensoren mit defraktiver Optik oder Interferenzfiltern (Bragg Gratings) auf der Basis von Flüssigkristallfiltern (LCTF) oder akusto-optischen Filtern (AOTF). Aktuelle Forschungen für diese Art von Sensoren verfolgen die Steigerung der Messgenauigkeit durch immer feinere Spektralbänder, die Erweiterung des spektralen Messbereiches, die Verkürzung der Integrationszeit sowie die Miniaturisierung des gesamten Meßsystems. Die vollständige monolithische Integration eines hyperspektralen Filters auf einen CMOS-Bildsensor bildet derzeit die höchste Entwicklungsstufe. Bei diesen komplexen Systemen werden für jede Messung immer mehrere Hundert Bänder aufgenommen, da die Merkmalsextraktion erst nach der Messung erfolgt. Dieses Messprinzip ist zeitintensiv und generiert eine große Menge an redundanten Daten. Das Ziel ist die Realisierung einer spektralen Abtastung mit möglichst wenigen spektralen Bändern ohne wesentliche Informationsverluste. Werden nur noch einige wenige Bänder gemessen, lässt sich das Messverfahren deutlich vereinfachen.

Die argumentative Basis für die Vereinfachung multispektraler Systeme durch eine analytische Auswahl der Spektralbänder bildet eine theoretische Studie, die belegt, dass für die Charakterisierung einige wenige Abtastwerte in der Praxis ausreichen, um deren Remissionsspektrum hinreichend exakt zu beschreiben [Hil07]. Ein Verfahren zur analytischen Auswahl der Spektralbänder muss in der Lage sein, bewerten zu können, ob eine optimale Kombination aus Sensor und Lichtquelle vorliegt.

Derzeit existiert keine Norm zur analytischen Bestimmung einer qualitativ guten spektralen Zerlegung des Farbreizes. Neben den Axiomen zur Farbmessung (siehe Kap. 3.2) wurde im Rahmen dieser Arbeit deshalb definiert, wann eine Sensor-Lichtquellen-Kombination als optimal gilt. Eine Kombination gilt dann als optimal, wenn sowohl möglichst viele Materialien unterschieden werden können als auch die Charakterisierung zuverlässig erfolgt. Aktuell existieren zwei Ansätze zur Vereinfachung von multispektralen Systemen durch eine „geschickte“ Auswahl der spektralen Bänder.

Die erste Gruppe bilden strukturerkennende Verfahren zur nachträglichen Separation der Spektralbänder. Zu den wichtigsten Vertretern dieser Gruppe gehören rekursive Ansätze basierend auf der Analyse der Diskriminanz (GLDB-TD), der Hauptkomponenten Analyse (PCA) durch die Analyse der Varianz oder Kombinationen aus Data Mining und maschinellem Lernen (Weka3).

Die zweite Gruppe bilden dynamische Verfahren zur Vorauswahl der Spektralbänder für die jeweils nächste Messung beruhend auf den Erkenntnissen der vorangegangenen Messungen, wie zum Beispiel die Sequential Floating Forward Selection (SFFS), welche nach jedem Iterationsschritt prüft, ob die Zielfunktion gewachsen ist.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die beiden oben genannten Ansätze um einen Dritten erweitert, die Separation der Spektralbänder vor der Messung. Legt man eine repräsentative Zahl an experimentellen Messungen zugrunde, lassen sich grundsätzlich alle Verfahren aus dem Bereich der strukturerkennenden Verfahren und der Data Mining Algorithmen anwenden. Damit bleibt die Komplexität eines Meßsystems zwar unverändert. Je nach messtechnischer Realisierung der spektralen Zerlegung des einfallenden Lichtes kann die Messung jedoch beschleunigt werden. In jedem Fall kann aber die erhobene Datenmenge deutlich reduziert werden, da nur noch einige wenige Spektren vermessen werden müssen.

Der eigene prinzipielle Ansatz besteht nun darin, die spektrale Strahlungsleistungsdichte, das Reflexionsverhalten und die spektrale Empfindlichkeit getrennt voneinander zu vermessen. Aus diesen Daten kann der zu erwartende Photostrom, den ein Meßsystem liefern würde, berechnet werden. Damit konnte ein sehr zeiteffizientes Verfahren ohne aufwendigen Prototypenbau und umfangreiche Parameterstudien realisiert werden. Neben real gemessenen Werten ermöglicht es dieses Verfahren auch rein fiktive Sensoren noch vor der eigentlichen Fertigung zu evaluieren und die Entwicklungszyklen so effizient wie möglich zu gestalten.

Die Arbeit dokumentiert die verschiedenen Entwicklungsstufen, in denen Parameter definiert und ein Algorithmus zur automatischen Separation implementiert wurde. Den Ausgangspunkt bilden die am Institut entwickelten spannungsgesteuert durchstimmbaren multispektralen Photodioden mit einer dynamisch veränderbaren Informationsdichte pro Pixel. Die mit diesem Detektortyp erzielbaren Ergebnisse lassen sich in Bezug auf die Anzahl der realisierbaren spektralen Bänder nicht mehr mit den gängigen trichromatischen Methoden aus der Farbmeterik analysieren. Ausgehend von der allgemeinen Anforderung an die externe Separation eines Sensors wurde der Parameter ΔCL definiert. Für einen Sensor mit einer beliebigen Anzahl an spektralen Bändern bei einer gegebenen Stoffdatenbank unter einer Beleuchtungsart liefert die Funktion für ΔCL einen Wert, der dimen-

sionsunabhängig ein Maß für die externe Separation ist. Die externe Separation ist dabei äquivalent zur Anzahl der unterscheidbaren Materialien bis zur Grenze der Metamerie. Da aber eine hohe externe Separation noch keine Aussage darüber liefert, mit welcher Zuverlässigkeit die Messung erfolgte, wurde in Anlehnung an die Zugehörigkeitsfunktion aus dem Bereich der Fuzzy Mengen der zweite Parameter $\mu(P)$ definiert. Über $\mu(P)$ kann bestimmt werden, mit welcher Wahrscheinlichkeit es sich bei der gemessenen Probe um ein Material aus der Stoffdatenbank handelt oder ob eine Probe unbekannt ist, d. h. $\mu(P)$ ist ein Maß für die Zuverlässigkeit der Erkennung.

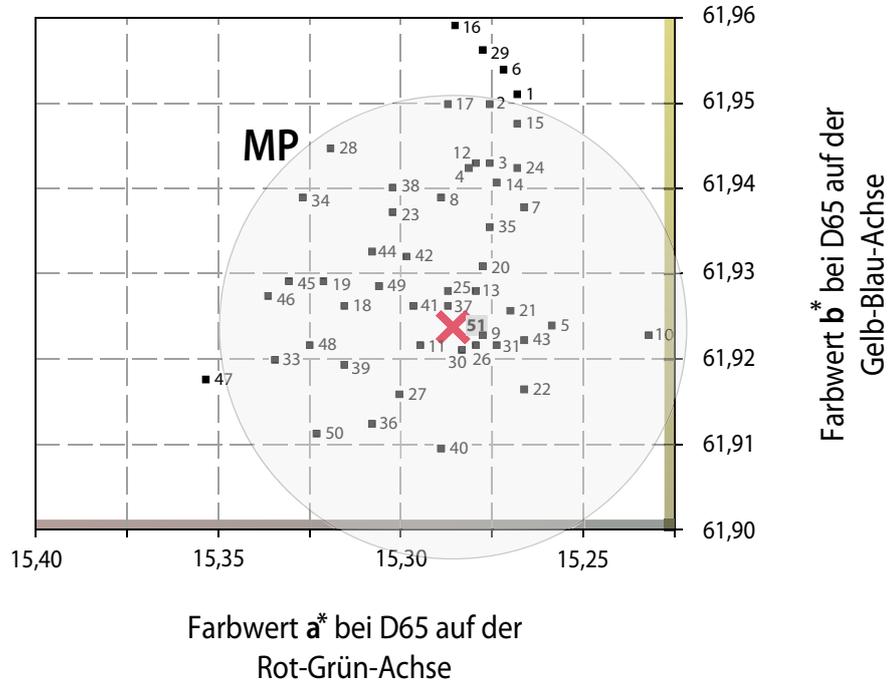
Die Entwicklung der Parameter und dem daraus resultierenden analytischen Verfahren wurde begleitet von experimentellen Messungen zur Unterscheidbarkeit von weißlichen Pulverproben. Ein besonderes Augenmerk wurde dabei auf den Aufbau einer Datenbank gelegt, die neben den spektralen Reflexionskurven der Pulverproben auch die spektrale Bestrahlungsstärke diverser realer und Norm-Lichtquellen sowie die spektrale Empfindlichkeit diverser Sensoren beinhaltet. Damit wurde die Möglichkeit eröffnet, neben real gemessenen Werten auch auf simulierte Werte zurückgreifen zu können, welche als Basis für eine breit angelegte multivariate Analyse des Reengineering der Dioden betrachtet werden sollen. Die multivariate Analyse ist ein wichtiges Werkzeug für das Reengineering von multispektralen Systemen. Mit den gewonnenen Erkenntnissen ist es möglich, „ausichtslose“ Sensor-Lichtquellen-Kombinationen frühzeitig, also noch vor der Fertigung zu erkennen, um diese von weiteren Untersuchungen auszuschließen. Damit kann die Anzahl der möglichen Kombinationen reduziert werden, um die Berechenbarkeit für Systeme mit einer hohen Anzahl an spektralen Bändern (d. h. ≥ 16) zu ermöglichen. Der im Rahmen dieser Arbeit implementierte Band-Selection Algorithmus kann aufgrund der angewendeten brute force Methodik nur bei multispektralen Systemen mit wenigen Bändern (< 16) angewendet werden, danach sinkt die Berechenbarkeit.

Mit der Implementierung eines analytischen Verfahrens zur Separation derjenigen spektralen Bänder, die eine hohe Informationsdichte aufweisen, konnte ein Verfahren realisiert werden, das ohne weiteres Expertenwissen vorauszusetzen die beste Kombination an spektralen Bändern als Output liefert. Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Berechnungen und Messungen beschränkten sich auf den VIS-Bereich, da die verwendeten Multispektral-Dioden aufgrund des Bandabstandes von amorphem Silizium kein Licht im NIR-Bereich und aufgrund des Absorptionskoeffizienten kein Licht im UV-Bereich detektieren können. Dies stellt aber keine Einschränkung für die in der vorliegenden Arbeit entwickelten Kriterien zur analytischen Auswahl der spektralen Bänder dar. Die Algorithmen wurden bewusst so allgemein gehalten, dass sie später auch für andere multispektrale Systeme in unterschiedlichen Wellenlängenbereichen eingesetzt werden können, insofern die spektralen Daten der Lichtquelle und des Reflexionsverhaltens eines Materials in eben diesem Bereich vorliegen.

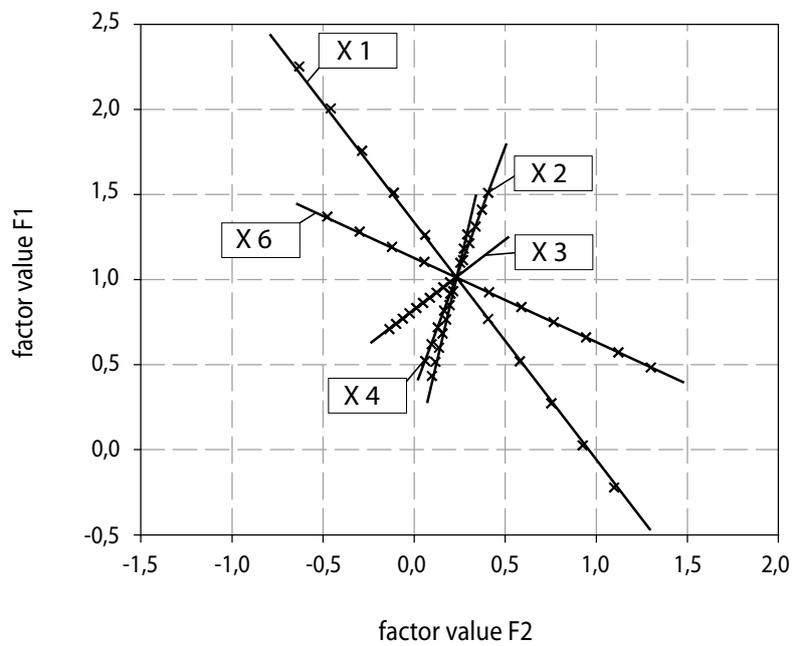
Besondere Bedeutung erhält die Entwicklung solcher vollständig in Planartechnik gefertigten und durch eine intelligente Auswahl der Bänder optimierten Multispektral-Dioden im Hinblick auf die hyperspektrale Bildgebung für die Fernerkundung, auf das Umweltmonitoring und auf die berührungslose und zerstörungsfreie Analyse von Materialien. Insbesondere die schnelle Detektion und Analyse von Gefahrenstoffen vor Ort steigert die Konkurrenzfähigkeit dieser Systeme gegenüber gängigen Schnelltestverfahren. Nicht zuletzt diese Eigenschaft belegt, dass die Reduzierung der spektralen Bänder durch eine intelligente Auswahl den Weg für eine neue Generation von hyperspektralen Systemen mit vielfältigen Anwendungsfeldern ebnet.

7 Anhang

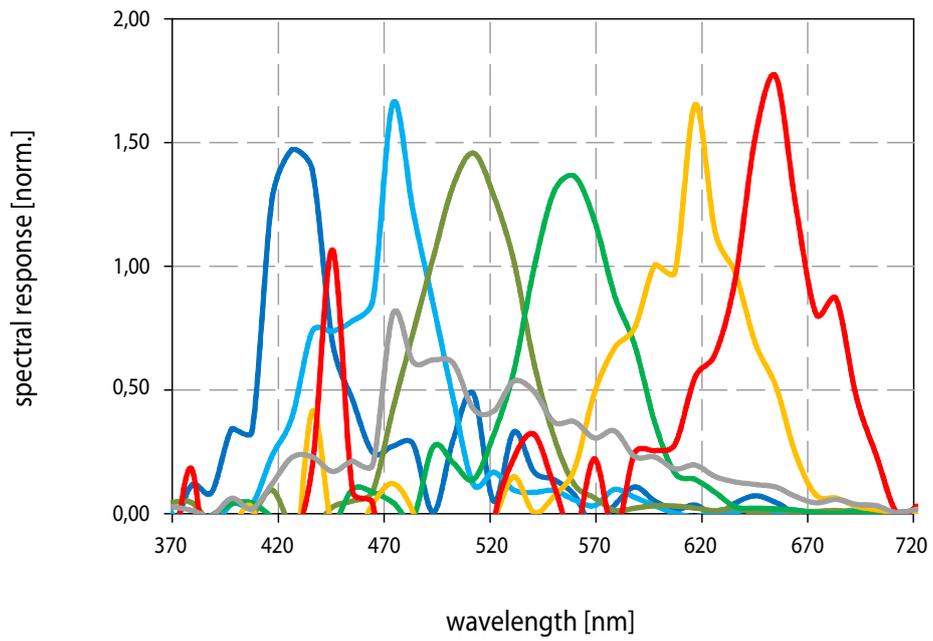
7.1 Drift-Messung



7.2 Skalierbarkeit



7.3 MMCS Multicolor-Sensor



7.4 Tabellen

Sensor	Typ	Farbkanäle	Lichtquelle	delta CL	Zuverlässigkeit	AWGN
MMCS-Scan-EB1	best	3	Amx	2,78	0,88	sensor
MMCS-Scan-EB1	worst	3	Nichia	0,26	0,56	sensor
MMCS-Scan-EB1	best	3	Nichia	1,82	0,76	sensor
2 ramp_P7	best	3	Amx	2,5	0,87	sensor
8 ramp_P7	fit 1 dCL	3	Amx	1	0,74	sensor
12 ramp_P7	fit 2 dCL	3	Amx	2	0,86	sensor
15 ramp_P7	fit 1 dCL	3	Amx	1	0,27	light
19 ramp_P7	fit 2 dCL	3	Amx	2	0,56	light
2 ramp_P3	verm. Opt.	3	Amx	1,05	0,94	sensor
sony E20	org	3	Amx	1,33	0,99	sensor
sony E21	org	3	Nichia	0,35	0,44	sensor
MMCS-Scan-EB1	best	4	Amx	5,81	0,91	sensor
3 ramp_P7	best	4	Amx	5,2	0,83	sensor
9 ramp_P7	fit 1 dCL	4	Amx	1	0,82	sensor
13 ramp_P7	fit 2 dCL	4	Amx	2	0,82	sensor
16 ramp_P7	fit 1 dCL	4	Amx	1	0,3	light
20 ramp_P7	fit 2 dCL	4	Amx	2	0,27	light
MMCS-Scan-EB1	best	5	Amx	9,47	0,89	sensor
MMCS-Scan-EB1	best	5	Norm A	21,47	0,05	sensor
4 ramp_P7	best	5	Amx	1,3	0,82	sensor
10 ramp_P7	fit 1 dCL	5	Amx	1	0,82	sensor
14 ramp_P7	fit 2 dCL	5	Amx	2	0,82	sensor
17 ramp_P7	fit 1 dCL	5	Amx	1	0,44	light
21 ramp_P7	fit 2 dCL	5	Amx	2	0,44	light
3 term_P7	verm. Opt.	5	Amx	1,4	1	sensor
4 term_P7	verm. Opt.	5	Amx	1,4	0,79	strong noise sample

5 term_P7	verm. Opt.	5	Amx	1,4	0,96	low noise sample
6 term_P7	verm. Opt.	5	Amx	1,4	0,05	light
7 term_P7	verm. Opt.	5	Amx	1,4	0,41	low noise light
2 ramp_P11	verm. Opt.	5	Amx	4	0,81	sensor
3 ramp_P11	verm. Opt.	5	Nichia	0,35	0,19	sensor
MMCS-Scan-EB1	best	6	Amx	7,42	0,87	sensor
5 ramp_P7	best	6	Amx	0,93	0,81	sensor
11 ramp_P7	fit 1 dCL	6	Amx	1	0,81	sensor
18 ramp_P7	fit 1 dCL	6	Amx	1	0,43	light
MMCS-Scan-EB1	org	7	Amx	3,22	0,85	sensor
6 ramp_P7	best	7	Amx	0,22	0,79	sensor
7 ramp_P7	all	8	Amx	0,33	0,79	sensor

	x1	x2	x3	x5	x6	x7	x8	x9
Planck, CIE, ColorChecker	9	10	10	10	10	10	3	0
Norm A, CIE, ColorChecker	2	10	10	10	10	8	3	9
D65 Led, CIE, ColorChecker	6	10	10	10	10	5	3	7
Halogen, CIE, ColorChecker	1	10	10	10	10	8	3	8
Leuchtstoff, CIE, ColorChecker	3	10	10	10	10	8	3	8
D65 Led, Sony CCD, ColorChecker	6	10	6	10	10	5	3	2
D65 Led, Rieve MSD, ColorChecker	6	10	4	10	10	5	3	6
D65 Led, MMCS org, ColorChecker	6	10	8	10	10	5	3	4
D65 Led, MMCS anst., ColorChecker	6	10	4	10	10	5	3	4
D65 Led, Gauß, ColorChecker	6	10	3	10	10	5	3	4
D65 Led, abs. linear, ColorChecker	6	10	0	10	10	5	3	7
Planck noise, CIE, ColorChecker	9	10	10	8	10	10	3	0
D65 Led noise, CIE, ColorChecker	6	10	10	7	10	5	3	7
Leuchtstoff noise, CIE, ColorChecker	3	10	10	0	10	8	3	8
D65 Led noise, MMCS org., ColorChecker	6	10	8	8	10	5	3	4
D65 Led noise, Sony CCD, ColorChecker	6	10	6	3	10	5	3	2
D65 Led noise, Rieve MSD, ColorChecker	6	10	4	4	10	5	3	6
D65 Led noise, MMCS org., Paracetamol	6	8	8	8	10	5	3	4
D65 Led noise, MMCS org., Dextro Mg	6	5	8	8	10	5	3	4

8 Symbolverzeichnis

8.1 Physikalische Größen

α	Absorptionskoeffizient	[cm ⁻¹]
A	Pixelfläche	[cm ²]
$\beta(\lambda)$	Remissionsfaktor	[abs.]
B	Bandbreite	[nm]
c	Lichtgeschwindigkeit	[cm/s]
c_x, c_y, c_z	Korrekturfaktoren für Geräte	[abs.]
C_{int}	Integrationskapazität	[F]
C_{ab}	Chromaticity	[abs.]
C_i	Rauschkoeffizient des 1/f-Rauschens	[abs.]
C_{in}	Eingangskapazität	[F]
C_P	Kapazität der pin-Diode	[F]
C_S	Speicherkapazität	[F]
δ_{int}	Dielektrischer Verlustwinkel der Eingangskapazität	[°]
ΔCL	Normalisierte Volumen einer Punktwolke (cloud), als Maß für die externe Separation	[abs.]
ΔE	Farbabstand zum Normalbeobachter	[abs.]
ΔEA	euklidischer Abstand	[abs.]
ΔE_{ab}^*	Farbabstand im CIE-L*a*b* Farbsystem	[abs.]
Δn^2	mittlere quadratische Streuung der Photozelle	[abs.]
ΔW	Bandlücke	[eV]
Δx	Intervalllänge	[cm]
D	Diffusionskonstante	[cm ² /s]
e	Elementarladung	[C]
E	Energie	[Ws]
\vec{E}	Feldstärke (elektrisch)	[V/cm]
$E(R)$	Farbempfindung	[abs.]
$E(\lambda)$	Strahlungsleistungsdichte	[W/cm ²]
$E^\lambda(\lambda)$	spektrale Strahlungsleistungsdichte	[W/cm ²]
η_Q	Quantenwirkungsgrad	[abs.]
f	Frequenz	[Hz]

f_n	Korrekturfaktor	[abs.]
f_{Res}	Resonanzfrequenz	[Hz]
Γ	Abschwächungsfaktor des Schrotrauschens	[abs.]
h	Planck'sches Wirkungsquantum	[Ws ²]
h_{ab}	Buntonwinkel	[°]
$\overline{i_{sh}^2}$	mittleres Rauschstromquadrat beim Schrotrauschen	[A]
$\overline{i_{th}^2}$	mittleres Rauschstromquadrat beim thermischen Rauschen	[A]
I	Strom (elektrisch)	[A]
I_b	Hintergrundstrom (background current)	[A]
I_d	Dunkelstrom (dark current)	[A]
I_F	Fotostrom	[A]
I_{Ph}	Photostrom	[A]
I_S	Sperrsättigungsstrom	[A]
I_0	Strahlungsintensität an der Oberfläche	[W/cm ²]
$I(x)$	Strahlungsintensität am Ort x	[W/cm ²]
j	Photostromdichte	[A/cm ²]
j	Gasfluß	[sccm]
k	Boltzmannfaktor	[Ws/K]
kf	Korrekturfaktor	[cm ² /mA]
K	Anzahl der Kombinationen bzw. Anzahl der Zeilen der Mittelwertmatrix M	[abs.]
λ	Wellenlänge	[nm]
l	Eindringtiefe	[cm]
L	Luminanz	[norm.]
L_d	Driftlänge	[cm]
m	Menge der unterscheidbaren Materialien	[abs.]
μ	Beweglichkeit	[cm ² /Vs]
$\mu(P)$	Zugehörigkeitsfunktion	[abs.]
ν	Frequenz	[Hz]
n	Defektdichte	[abs.]
n	Anzahl der verwendeten Spektralbänder	[abs.]
N_{Ph}	Photonenstromdichte	[cm ⁻² s ⁻¹]
ND_δ	Zahl der Dekaden beim dielektrischen Rauschen	[abs.]

$ND_{1/f}$	Zahl der Dekaden beim 1/f-Rauschen	[abs.]
$\Phi(\lambda)$	Farbreizfunktion	[abs.]
q	Ladung	[C]
r_d	Differenzieller Widerstand der pin-Diode	[Ω]
$r(\lambda)$	Reflexionsverhalten	[abs.]
$r^\lambda(\lambda)$	spektrales Reflexionsverhalten	[abs.]
R	Widerstand (elektrisch)	[Ω]
R_f	Rückkopplungswiderstand	[Ω]
R_P	Parallelwiderstand	[Ω]
R_S	Serienwiderstand	[Ω]
R, G, B	Farbmaßzahl für Rot, Grün und Blau	[abs.]
R	der physikalische Reiz	[abs.]
R_0	Schwellwert für eine Farbempfindung	[abs.]
S	Relative spektrale Empfindlichkeit	[abs.]
$S(\lambda)$	Strahlungsfunktion	[W/cm ²]
$S_n^\lambda(\lambda)$	spektrale Empfindlichkeit	[mA/W]
$S_{abs}(\lambda)$	spektrale Empfindlichkeit	[mA/W]
t	Abscheidedauer	[s]
t_{int}	Integrationszeit des Bildsensors	[s]
τ	Lebensdauer	[s]
τ	Relaxationsdauer	[s]
τ_L	Zeitkonstante vor Ausgang des Pixelverstärkers und der Ausleseleitung	[s]
τ_S	Zeitkonstante für das Rauschen des Serienwiderstandes	[s]
$\tau_x(\lambda), \tau_y(\lambda), \tau_z(\lambda)$	Transmissionsgrad	[abs.]
T	Temperatur	[K]
U	Spannung (elektrisch)	[V]
$\overline{U_t^2}$	Spektrale Rauschleistungsdichte der Spannung	[V ² /Hz]
U_F	Signalspannung	[V]
U_{th}	Temperatur Spannung	[V]
V_0	Gleichspannungs-Leerlaufverstärkung	[abs.]
x	Eindringtiefe	[cm]
x_i	Erwartungswert	[abs.]
x, y, z	Farbgewichte	[abs.]

$\bar{x}(\lambda), \bar{y}(\lambda), \bar{z}(\lambda)$	Normspektralwertkurven	[abs.]
X_n, Y_n, Z_n	Korrekturfaktoren für Lichtart und Beobachter	[abs.]
Y	Helligkeitsgrad einer Farbe	[abs.]

8.2 Abkürzungen/Bezeichnungen

a^*	Rot-Grün-Achse im CIE-Farbsystem
A	Normlicht (Glühlampe 2856K)
A	Faktormatrix
<i>AFORS – HET</i>	Automat for Simulation of Hetero Structures
<i>AlAs</i>	Aluminiumarsenid
<i>AM</i>	Luftmasse (airmass)
<i>AOTF</i>	Acousto Optical Tunable Filter
<i>AWGN</i>	additive white gaussian noise
b^*	Gelb-Blau-Achse im CIE-Farbsystem
B	Blue-Achse im Munsell Color System
B	Normlicht (Sonne Mittags)
B_2H_6	Diboran
<i>BG</i>	Blue/Green-Achse im Munsell Color System
C	Normlicht (Sonne bedeckter Himmel)
<i>CCD</i>	Charged Coupled Device
<i>CdTe</i>	Cadmiumtellurid
<i>CIE</i>	Commission Internationale de l'Éclairage
<i>CMOS</i>	Complementary Metal Oxide Semiconductor
<i>DR</i>	Dynamikbereich
<i>CVD</i>	Chemical Vapour Deposition
<i>DIN</i>	Deutsches Institut für Normung
<i>D65</i>	Normlicht (Planck'scher Strahler 6500K)
<i>ECAC</i>	European Civil Aviation Conference
<i>EDS</i>	Explosives Detection System
<i>FIB</i>	Focus Ion Beam
<i>FWHM</i>	Full width at half maximum
G	Green-Achse im Munsell Color System

<i>GaAs</i>	Galliumarsenid
<i>Ge</i>	Germanium
<i>GLDB – TD</i>	Top Down Generalized Local Discriminant Bases Algorithmus
<i>GY</i>	Green/Yellow-Achse im Munsell Color System
<i>Hq</i>	Quecksilber
<i>ID</i>	Identifikationsbezeichnung
<i>IHE</i>	Institut für Halbleiterelektronik der Universität Siegen
<i>IMEC</i>	Interuniversity Microelectronic Center
<i>IMT</i>	Institut für Mikrosystemtechnik der Universität Siegen
<i>InP</i>	Indiumphosphid
<i>ISCC – NBS</i>	Inter Society Color Council – National Bureau of Standards
<i>IR</i>	infrarotes Spektrum der elektromagnetischen Strahlung, oberhalb von 780-1000nm
<i>L*</i>	Hell-Dunkel-Achse im CIE-Farbsystem
<i>LAG</i>	Liquid, Aerosol and Gel
<i>LCTF</i>	Liquid Crystal Tunable Filter
<i>LED</i>	Light Emitting Diode
<i>M</i>	Mittelwertmatrix
<i>MP</i>	Metamerie Punkt
<i>MMCS</i>	MAZet Multiple Color Sensor
<i>NIR</i>	nahes Infrarot, beschreibt das Spektrum der elektromagnetischen Strahlung oberhalb von 780nm
<i>P</i>	Purple-Achse im Munsell Color System
<i>P</i>	Streudiagramm
<i>P, B</i>	Materialprobe und Bezugswert
\vec{P}	Farbort
<i>PB</i>	Purple/Blue-Achse im Munsell Color System
<i>PCA</i>	Principal Component Analysis
<i>PECVD</i>	Plasma Enhanced Chemical Vapour Deposition
<i>PH₃</i>	Phosphin
<i>R</i>	Korrelationsmatrix
<i>R</i>	Red-Achse im Munsell Color System
<i>RAL</i>	Reichsausschuß für Lieferbedingungen

<i>RP</i>	Red/Purple-Achse im Munsell Color System
<i>RWTH</i>	Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule
S_a, S_b, S_c	Samples, bekannte Proben eines Datensatzes
$S_0 - S_n$	Spektralbänder
<i>Si</i>	Silizium
SiH_4	Silan
<i>SFFS</i>	Sequential Floating Forward Selection
<i>SNR</i>	Signalrauschverhältnis
u^*	Rot-Grün-Achse im CIE-Farbsystem
<i>UCL</i>	Universal Color Language
<i>UV</i>	ultraviolettes Spektrum der elektromagnetischen Strahlung, unterhalb von 380nm
v^*	Gelb-Blau-Achse im CIE-Farbsystem
<i>VIS</i>	sichtbares (visible) Spektrum der elektromagnetischen Strahlung von 380-780nm
<i>Weka</i>	Waikato Environment for Knowledge Based Analysis
X, Y, Z	Primärvalenzen
<i>Y</i>	Yellow-Achse im Munsell Color System
<i>YR</i>	Yellow/Red-Achse im Munsell Color System
<i>Z</i>	standardisierte Mittelwertmatrix M

9 Literatur

- [Arr67] F. T. Arrechi, V. Degiorgio, B. Quersola: Phys. Rev. Letters, Vol. 19, pp.1168 (1967)
- [Bab12a] A. Bablich, K. Watty, C. Merfort, M. Böhm: MRS Proceedings Library, Vol. 1426, DOI:10.1557/olp. 2012. 1096 (2012)
- [Bab12b] A. Bablich, K. Watty, C. Merfort, M. Böhm: Proc. SPIE, Vol. 8376, DOI:10.117/12.918566 (2012)
- [Bac08] K. Backhaus, B. Erichson, W. Plinke, R. Weiber: Multivariate Analysemethoden, Eine anwendungsorientierte Einführung. Springer Verlag, Berlin Heidelberg, 2008.
- [Bee52] A. Beer: Annalen der Physik und Chemie, Vol. 86, pp.78-88 (1852)
- [Ber69] B. Berlin, P. Kay: Basic Color Terms, their universality and evolution. University of California Press, Berkley, 1969.
- [Ber94] A. Bergen-Schunn: Praktische Farbmessung, Ein Buch für Anfänger eine Gedächtnisstütze für Könner. 2. Auflage, Muster-Schmidt Verlag, Göttingen Zürich, 1994.
- [Bil93] F. W. Billmeyer, M. Setzmann: Grundlagen der Farbtechnologie. Muster-Schmidt Verlag, Göttingen Zürich, 1993.
- [Ble02] F. Blecher: Rauschen von a-Si:H-pin-Dioden für TFA-Bildsensorarrays, Dissertation, Universität Siegen, 2002.
- [Boh99] M. Bohnert: Rechtsmedizin, Vol. 9, pp. 218-221 (1999)
- [Böh10] M. Böhm: Grundlagen optoelektronischer Halbleiterbauelemente. Skript, Universität Siegen, 2010.
- [Böh96] M. Böhm, P. Rieve: Variospektral-Vielfarbendiode. Patentanmeldung DE19637126C2, 1996.
- [Cho00] A. K. R. Chouhary: Modern Concepts of Color and Appearance. Science Publishers, Enfield, 2000.
- [Dav53] H. R. Davidson, E. Friede: The Size of Acceptable Color Differences. Journal of the optical society of America, Vol. 43, pp. 581-589 (1953)
- [Die89] K. Dietrich: Light sensitive superlattice detector arrangement with spectral sensitivity. US Patent Document 4,847,489, 1989.
- [Eva48] R. M. Evans: An Introduction to Color. John Wiley & Sons, New York, 1948.
- [Gad12] S. M. Gadaleta, J. Kerekes, K. M. Tarplee: Proc. of SPIE, Vol. 8390, DOI:10.1117/12.916978 (2012)
- [Gal71] L. Gall: The Color Science of Pigments. Badische Anilin- & Soda-Fabrik AG, Ludwigshafen, 1971.
- [Gib80] R. A. Gibson, P. G. Le Comber, W. E. Spear: Applied Physics Vol.21, pp.307-311 (1980)
- [Gie08] E.M. Giemulla, B.R. Rothe: Recht in der Luftsicherheit. Springer Verlag, Berlin Heidelberg, 2008.
- [Goe10] J. W. Goethe: Zur Farbenlehre. Cotta'sche Verlagsbuchhandlung, Tübingen, 1810.

- [Gra07] H. F. Grahn, P. Geladi: Techniques and Applications of Hyperspectral Image Analysis. John Wiley & Sons Ltd., New York, 2007.
- [Gra53] H. Graßmann: Zur Theorie der Farbmischung. Poggendorfs Annalen der Physik, Vol. 89 (1853)
- [Gre12] M. A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa, W. Warta, E. D. Dunlop: Prog. Photovoltaik Res. Appl. Vol. 20, pp.12-20 (2012)
- [Hab12] R. Habel, M. Kudenov, M. Winner: Practical Spectral Photography. Eurographics, Vol. 31, (2012)
- [Hel08] L. Held: Methoden der statistischen Interferenz, Likelihood und Bayes. Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 2008.
- [Hel67] H. Helmholtz: Handbuch der Physiologischen Optik. Leopold Voss Verlag, Leipzig, 1867.
- [Her05] E. Hering: Grundzüge zur Lehre vom Lichtsinn. Hdb. der Augenheilkunde, Gräfe-Sämisch, Leipzig, 1905.
- [Hil07] B. Hill: Struktur und Farbe, 15 Jahre multispektral Bildtechnik in Aachen, German Society of Color Science and Application (DfwG e.V.), dfwg Report 3, pp. 27-37 (2007)
- [Hun06] R. W. G. Hundt: The Reproduction of Color. John Wiley & Sons, West Sussex, 2006.
- [Jun92] N. Jung, C. Tralle: An alternative method of optoelectronic color analysis for slides. Signal Processing Image Communication, Vol. 6, pp. 47-57 (1992)
- [Kel76] K. L. Kelly, D. B. Judd: Color, Universal Language and Dictionary of Names. NBS Special Publication, U. S. Government Printing Office, Washington D. C., 1976.
- [Kle04] G. A. Klein: Farbenphysik für industrielle Anwendungen. Springer Verlag, Berlin Heidelberg, 2004.
- [Kon98] Konica Minolta Sensing Inc.: Precise Color Communication, Color Control from Perception to Instrumentation. Japan, 1998.
- [Kub31] P. Kubelka, F. Munk: Ein Beitrag zur Optik der Farbanstriche. Zeitschrift für Technische Physik, Vol. 12, pp. 593-601 (1931)
- [Lam12] A. Lambrechts, B. Geelen: Laser+Photonik, Vol. 1, pp.46-47 (2012)
- [Lan70] B. Lange: Kolorimetrische Analyse. Verlag Chemie, Weinheim, 1970.
- [Lem07] B. Lemke: Luft- und Zivilschutz in Deutschland im 20. Jahrhundert. Militärgeschichtliches Forschungsamt, Potsdam, 2007.
- [Mac44] D. L. MacAdam: On the Geometry of Color Space. Journal of the Franklin Institute, Vol. 238, pp. 195-210 (1944)
- [Mae30] A. Maerz, M. R. Paul: A Dictionary of Color. Mc Graw-Hill Book Company Inc., New York, 1930.
- [Mer11] K. Mertens: Photovoltaik, Lehrbuch Grundlagen, Technologie und Praxis. Carl Hanser Verlag, München, 2011.
- [Mun07] A. H. Munsell: A Color Notation, a measured color system based on the three quantities. Geo. H. Ellis. Co., Boston, 1907.

- [New43] S. M. Newhall, D. Nickerson, D. B. Judd: Final report of the O. S. A. subcommittee on the spacing of the Munsell colors. *Journal of the optical society of America*, Vol. 33, pp. 385-418 (1943)
- [New57] S. M. Newhall, R. W. Burnham, J. R. Clark: Comparison of Successive with Simultaneous Color Matching. *Journal of the optical society of America*, Vol. 57, pp. 43-56 (1957)
- [Nyq28] W. Nyquist: *Phys. Rev.*, Vol. 32, pp.110-113 (1928)
- [Off12] D. Offenburg: *Hyperspektrale Bildgebung*. Mittler Verlag, Europäische Sicherheit & Technik, Vol. 61, Nr.5, pp.65 (2012)
- [Ost17] W. Ostwald: *Die Farbfibel*. Unsema Verlag, Leipzig, 1917.
- [Pau76] H. Pauli: Proposed extension of the CIE recommendation on, Uniform color spaces, color difference equations, and metric color terms. *Journal of the Optical Society of America*, Vol. 66, pp. 866 (1976)
- [Pau99] H. Paul: *Photonen, Eine Einführung in die Quantenoptik*. 2. Auflage, B. G. Teubner, Stuttgart Leipzig, 1999.
- [Rad00] L. Rade, B. Westergren: *Mathematische Formeln, Taschenbuch für Ingenieure, Naturwissenschaftler, Informatik, Wirtschaftswissenschaftler*. Springer Verlag, Berlin Heidelberg, 2000.
- [Ric81] M. Richter: *Einführung in die Farbmatrik*. 2. Auflage, Walter de Gruyter Verlag, Berlin New York, 1981.
- [Rie00] P. Rieve: *Spektralselektive optoelektronische Sensoren auf Basis amorphen Siliziums*. Dissertation, Universität Siegen, 2000.
- [Rös28] S. Rösch: Die Kennzeichnung der Farben. *Physikalische Zeitschrift*, Vol. 29, pp. 83-91 (1928)
- [Rou02] B. Rouge, J.M. Morcel: *Image Acquisition by Push-Broom Scanning*. US Patent Document 6,493,021 B1, 2002.
- [Run10] P. O. Runge: *Farben-Kugel, Construction des Verhältnisses aller Mischungen der Farben und ihrer vollständigen Affinität*. Friedrich Perthes Verlag, Hamburg, 1810.
- [Sch08] Y. Schwarzer: *Die Farbenlehre Goethes, In einer Textauswahl für Künstler und andere Freunde der Phänomens Farbe*. Ars Momentum Kunstverlag, Witten, 2008.
- [Sch12] O. Schwaneberg, H. Steiner, P. H. Bolivar, N. Jung: *Applied Optics*, Vol. 51, No. 12 (2012)
- [Sch18] W. Schottky: *Annalen der Physik*, Vol. 57, pp.541-567 (1918)
- [Sch20] E. Schrödinger: Grundlinien einer Theorie der Farbmatrik im Tagessehen. *Annalen der Physik*, Vol. 63, p. 397 ff (1920)
- [Sch75] W. Schultze: *Farbenlehre und Farbmessung, Eine kurze Einführung*. Springer Verlag, Berlin Heidelberg, 1975.
- [Sch96] J. Schulte: *Intelligente Bildsensoren in TFA-Technologie am Beispiel einer Äquidensitenextraktors*, Dissertation, Universität Siegen, 1996.
- [Sch99] F. Schmidt, H. Bretel, J.Y. Hardeberg: *Multispektral Imaging Development at ENST*. Signal and Image Processing Department, France, 1999.

- [Shi03] Shifang Li: Cascaded Filter Employing an AOTF and Narrowband Birefringent Filters. US Patent Document 6,624,889 B1, 2003.
- [Sie06] Siemens AG: Vorrichtung zur Darstellung von optischen Informationen mittels eines virtuellen Bildes. Patentanmeldung DE102004050574A1, 2006.
- [Sil98] N. Silvestrini, E. P. Fischer: Farbsysteme in Kunst und Wissenschaft. Du Mont Buchverlag, Köln, 1998.
- [Sku04] M. Skurichina, P. Paclík, R. Duin, P. de Veld, H. Sterenberg, M. Witjes, J. Roochenberg: SSPR&SPR, LNCS 3138, pp. 1096-1104 (2004)
- [Spe75] W. E. Spear, P. G. Le Comber: Solid State Communications, Vol. 17, pp.1195-1196 (1975)
- [Sta77] D. L. Staebler, C. R. Wronski: Applied Physics Letters, Vol. 31, No. 4, pp.292-294 (1977)
- [Wag96] M. Wagner: Optimierung von a-Si:H Dünnschichtsolarzellen auf Glas und Metallsubstraten, Dissertation, Universität Siegen, 1996.
- [Wag98] H. G. Wagemann, A. Schmidt: Grundlagen der optoelektronischen Halbleiterbauelemente. B. G. Teubner Verlag, Stuttgart, 1998.
- [Wan10] J. Wang: Implementierung von Algorithmen für die Farbproduktion nach den Kriterien maximaler externer Separation und interner Homogenität mit dem MTCS-ME1 Evaluation Board. Masterarbeit, Universität Siegen, 2010.
- [Wik12] Hrsg: Wikimedia Foundation: Delta E. (online verfügbar unter de.wikipedia.org/wiki/Delta_E, letzter Zugriff 20.11.2012)
- [Wys00] G. Wyszecki, W. S. Stiles: Color Science, Concepts and Methods, Quantitative Data and Formulae. John Wiley & Sons Inc., New York, 2000.
- [You01] T. Young: On the Mechanism of the Eye. Philosophical Transactions of the Royal Society of London, Vol. 91, pp. 23-88 (1801)
- [Zad65] L. A. Zadeh: Information and Control, Vol. 8, pp. 338-353 (1965)
- [Zim99] J. Zimmer, D. Knipp, H. Stiebig, H. Wagner: IEEE Transactions on Electron Devices, Vol. 46, No. 5, pp. 884-891 (1999)
- [Zoc11] P. Zoche, S. Kaufmann: Zivile Sicherheit, Gesellschaftliche Dimensionen gegenwärtiger Sicherheitspolitiken. transkript Verlag, Bielefeld, 2011.

10 Publikationen im Rahmen dieser Arbeit

1a) Begutachtete Publikationen / Wissenschaftliche Zeitschriften

- [Bab11] A. Bablich, K. Watty, **C. Merfort**, K. Seibel, M. Böhm, "A Novel High-Dynamic a-Si:H Multicolor pin-Detector with ZnO:Al Front and Back Contacts", in the *MRS Conference Proceedings Library*, Volume 1305, DOI:10.1557/olp.2011.305, 2011.
- [Bab12a] A. Bablich, K. Watty, **C. Merfort**, M. Böhm, "Color Separation Enhancement of pixn Diodes by Optimizing Absorption Regions of a-SiGe:H/a-SiC:H Alloys and Using a Low Reflective Al-doped ZnO Cathode", in the *MRS Conference Proceedings Library*, Volume 1426, DOI:10.1557/opl.2012.1096, 2012.
- [Bab12b] A. Bablich, K. Watty, **C. Merfort**, M. Böhm, "FIB-Assisted a-SiGe:H/a-SiC:H Alloy Analysis for Ultra-Low Biased Multispectral pixn Sensors with Enhanced Color Separation Features and Low-Reflective ZnO:Al Back-Contacts", in the *Proc. SPIE*, Volume 8376, 8376N, DOI:10.1117/12.918566, 2012.
- [Bab12c] **A. Bablich, M. Böhm**, "NUV-/VIS Sensitive Multicolor Thin Film Detector Based on a-SiC:H/a-Si:H/ μ c-SiGeC:H Alloys with an in-situ Structured Transparent Conductive Oxide Front Contact Without Etching", in *Thin Solid Films*, Volume 520, Issue 24, pp. 7189-7194 (2012)
- [Mer10a] **C. Merfort, K. Seibel, K. Watty, M. Böhm**, "Monolithically integrated μ -capillary electrophoresis with organic light sources and tunable a-Si:H multispectral photodiodes for fluorescence detection", in *Microelectron. Eng*, Volume 87, Nr. 5-8, pp. 712-714, ISSN 0167-9317 (2010)
- [Mer11a] **C. Merfort**, K. Seibel, A. Bablich, K. Watty, M. Böhm, "Continuous Tunable Optical Detectors with a-Si:H Bias Sensitive Photodiodes", in the *MRS Conference Proceeding Library*, Volume 1305, DOI:10.1557/opl.2011.299, 2011.
- [Mer11b] **C. Merfort**, A. Bablich, O. Schwaneberg, K. Watty, M. Böhm, "The Top Down Design Flow of a-Si:H Photodiodes with Multivariate Methods of Analysis", in the *Proc. SPIE*, Volume 8186, 81860N, DOI:10.1117/12.897374, 2011.
- [Mer12a] **C. Merfort**, A. Bablich, O. Schwaneberg, K. Watty, M. Böhm, "Multivariate Analysis of Multispectral Photodiodes for Proper Band Selection", in the *MRS Conference Proceedings Library*, Volume 1437, DOI:10.1557/opl.2012.911, 2012.
- [Mer12b] **C. Merfort**, A. Bablich, O. Schwaneberg, K. Watty, M. Böhm, "Application Specific Band Selection with Multivariate Methods of Analysis for a-Si:H Multispectral Photodiodes", in the *Proc. SPIE*, Volume 8390, 839024, DOI:10.1117/12.918456, 2012.
- [Wat10a] **K. Watty, C. Merfort, K. Seibel, L. Schöler, M. Böhm**, "A fully integrated optical detector with a-Si:H based color photodiodes", in *physical status solidi (a)*, Vol 207, pp. 700-703, ISSN 1862-6319 (2010)
- [Wat11] K. Watty, A. Bablich, K. Seibel, **C. Merfort**, M. Böhm, "Amorphous Photodiode with an Intermediate Contact for Improved Color Separation", in the *MRS Conference Proceedings Library*, Volume 1305, DOI:10.1557/opl.2011.613, 2011.

- [Wat12a] K. Watty, A. Bablich, K. Seibel, **C. Merfort**, M. Böhm, "Development of Three-Terminal Photodiodes Based on a-Si:H with an Additional Buried TCO Electrode", in the *MRS Conference Proceedings Library*, Volume 1426, DOI:10.1557/opl.2012.1016, 2012.
- [Wat12b] K. Watty, A. Bablich, K. Seibel, **C. Merfort**, M. Böhm, "Novel Approach to Improve Reliable Color Recognition in a-Si:H Photodiodes", in the *Proc. SPIE*, Volume 8376, 8376Q, DOI:10.1117/12.918318, 2012.

Ib) Fachkongresse

- [Bab10] A. Bablich, K. Watty, **C. Merfort**, K. Seibel, M. Böhm, "A Novel High-Dynamic a-Si:H Multicolor pin-Detector with ZnO:Al Front and Back Contacts", presented (oral presentation) at the Materials Research Society (MRS) Fall Meeting, Boston, USA, November 28-03, 2010.
- [Bab12d] A. Bablich, K. Watty, **C. Merfort**, M. Böhm, "Color Separation Enhancement of pixn Diodes by Optimizing Absorption Regions of a-SiGe:H/a-SiC:H Alloys and Using a Low Reflective Al-doped ZnO Cathode", presented (poster session) at the Materials Research Society (MRS) Spring Meeting, San Francisco, USA, April 09-13, 2012.
- [Bab12e] A. Bablich, K. Watty, **C. Merfort**, M. Böhm, "FIB-Assisted a-SiGe:H/a-SiC:H Alloy Analysis for Ultra-Low Biased Multispectral pixn Sensors with Enhanced Color Separation Features and Low-Reflective ZnO:Al Back-Contacts", presented (oral presentation) at the SPIE Conference Defence, Security and Sensing (DSS), Baltimore, USA, April 23-27, 2012.
- [Mer10b] **C. Merfort**, "Tunable a-Si:H Multispectral Photodiodes", presented (oral presentation) at the Annual Spring Meeting by GRK 1564, IPP and MOSES, Siegen, Germany, April 13-15, 2010.
- [Mer10c] **C. Merfort**, "The Proper Spectral Adjustment of a-Si:H Photodiodes, to Identify the Potential Danger of Whitish Powder Samples", presented (oral presentation) at the Annual Fall Presentations by GRK 1564, IPP and MOSES, Siegen, Germany, October 05-06, 2010.
- [Mer10d] **C. Merfort**, K. Seibel, A. Bablich, K. Watty, M. Böhm, "Continuous Tunable Optical Detectors with a-Si:H Bias Sensitive Photodiodes", presented (poster session) at the Materials Research Society (MRS) Fall Meeting, Boston, USA, November 28-03, 2010.
- [Mer11c] **C. Merfort**, "Top Down Design Flow of a-Si:H Photodiodes with Multivariate Methods of Analysis", presented (oral presentation) at the Annual Spring Meeting by GRK 1564, IPP and MOSES, Siegen, Germany, March 29-31, 2011.
- [Mer11d] **C. Merfort**, A. Bablich, O. Schwaneberg, K. Watty, M. Böhm, "The Top Down Design Flow of a-Si:H Photodiodes with Multivariate Methods of Analysis", presented (oral presentation) at the SPIE Conference Security + Defence (ESD), Prague, Czech Republic, September 19-22, 2011.
- [Mer11e] **C. Merfort**, K. Seibel, A. Bablich, K. Watty, M. Böhm, "Proper Spectral Response Adjustment of a-Si:H Multispectral Photodiodes with Multivariate Methods of Analysis", presented (poster session) at the 37th international Conference on Micro & Nano Engineering (MNE), Berlin, Germany, September 19-23, 2011.

- [Mer11f] **C. Merfort**, “The Proper Color Space Adjustment of a-Si:H Photodiodes with Multivariate Methods of Analysis, for a Fast and Reliable Detection of Potentially Dangerous Substances”, presented (oral presentation) at the Annual Fall Presentations by GRK 1564, IPP and MOSES, Siegen, Germany, October 04-06, 2011.
- [Mer12c] **C. Merfort**, A. Bablich, M. Böhm, “Intelligente Photodioden zur zerstörungsfreien Bestimmung des Gefährdungsgrades von Stoffen“, presented (oral presentation) at the first Workshop of Civil Security, Siegen, Germany, February 16, 2012.
- [Mer12d] **C. Merfort**, “Methods for a Proper Band Selection to Increase the Performance of a-Si:H Multi-spectral Photodiodes”, presented (oral presentation) at the Annual Spring Meeting by GRK 1564, IPP and MOSES, Siegen, Germany, March 27-29, 2012.
- [Mer12e] **C. Merfort**, A. Bablich, O. Schwaneberg, K. Watty, M. Böhm, “Multivariate Analysis of Multi-spectral Photodiodes for Proper Band Selection”, presented (oral presentation) at the Materials Research Society (MRS) Spring Meeting, San Francisco, USA, April 09-13, 2012.
- [Mer12f] **C. Merfort**, A. Bablich, O. Schwaneberg, K. Watty, M. Böhm, “Application Specific Band Selection with Multivariate Methods of Analysis for a-Si:H Multispectral Photodiodes“, presented (oral presentation) at the SPIE Conference Defense, Security and Sensing (DSS), Baltimore, USA, April 23-27, 2012.
- [Mer12g] **C. Merfort**, “Performance Enhancement of Multispectral Systems for Panchromatic Material Detection”, presented (oral presentation) at the Annual Fall Presentations by GRK 1564, IPP and MOSES, Siegen, Germany, October 16-19, 2012.
- [Wat10b] K. Watty, A. Bablich, K. Seibel, **C. Merfort**, M. Böhm, “Amorphous Photodiode with an Intermediate Contact for Improved Color Separation”, presented (poster session) at the Materials Research Society (MRS) Fall Meeting, Boston, USA, November 28-03, 2010.
- [Wat12c] K. Watty, A. Bablich, K. Seibel, **C. Merfort**, M. Böhm, “Development of Three-Terminal Photodiodes Based on a-Si:H with an Additional Buried TCO Electrode”, presented (oral presentation) at the Materials Research Society (MRS) Spring Meeting, San Francisco, USA, April 09-13, 2012.
- [Wat12d] K. Watty, A. Bablich, K. Seibel, **C. Merfort**, M. Böhm, “Novel Approach to Improve Reliable Color Recognition in a-Si:H Photodiodes”, presented (oral presentation) at the SPIE Conference Defence, Security and Sensing (DSS), Baltimore, USA, April 23-27, 2012.

Lebenslauf

Danksagung

Ich danke an erster Stelle Herrn Prof. Dr.-Ing. Markus Böhm für die Anregung des Themas und die Bereitstellung der Mittel. Besonders danke ich ihm für die stete Ermunterung zu Publikationen, die guten Ratschläge und die Möglichkeit der freien Entfaltung, auch in angrenzende Fachdisziplinen. Nur so war es möglich die thematische Grenze der angewandten Forschung im Bereich der zivilen Sicherheit und der Zivilverteidigung fließend zu gestalten.

Weiterhin gilt mein besonderer Dank Prof. Dr.-Ing. Norbert Jung von der Hochschule Bonn-Rhein-Sieg, der mich seit 2009 als 2. Betreuer im Rahmen der DFG Research Training Group „Imaging New Modalities, Multimodal Image Acquisition and Analysis for Civil Security Applications“ (GRK-1564), mit Rat und Tat unterstützt und durch die ein oder andere bisweilen kritischen Anmerkung zur Verbesserung der vorliegenden Arbeit beigetragen hat.

Herrn Dipl.-Ing. Andreas Bablich danke ich für seinen überdurchschnittlichen Einsatz bei der Bereitstellung der Proben und Messreihen, die die vorliegende Arbeit angereichert und die Brücke zwischen Theorie und Praxis geschlagen haben.

Allen hier nicht genannten Bachelor-, Master- und Diplomstudenten danke ich für die vielen Hilfestellungen und Anregungen.

Zuletzt danke ich meinen Eltern für die Geduld und Nachsicht, die sie während unzähliger, bisweilen sehr langer Nachmittage im Büro und versäumter Urlaubstage aufgebracht haben.

Siegen, im Dezember 2012